



HAL
open science

Vers un matériau virtuel pour l'optimisation qualitative d'une nouvelle famille de CMCs

Bastien Tranquart

► **To cite this version:**

Bastien Tranquart. Vers un matériau virtuel pour l'optimisation qualitative d'une nouvelle famille de CMCs. Autre. École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan, 2012. Français. NNT : 2012DENS0014 . tel-00752336

HAL Id: tel-00752336

<https://theses.hal.science/tel-00752336>

Submitted on 15 Nov 2012

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

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

**THÈSE DE DOCTORAT
DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN**

Présentée par

Bastien Tranquart

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN

Domaine

MÉCANIQUE - GÉNIE MÉCANIQUE - GÉNIE CIVIL

Sujet de la thèse

**Vers un matériau virtuel pour l'optimisation qualitative
d'une nouvelle famille de CMCs**

Thèse soutenue le 13 mars 2012 à l'ENS de Cachan devant le Jury composé de :

Xavier Aubard	Safran Snecma Propulsion Solide	Examineur
Emmanuel Baranger	ENS de Cachan	Co-encadrant
Francisco Chinesta	Ecole Centrale de Nantes	Rapporteur
David Dureisseix	INSA de Lyon	Rapporteur
Pierre Ladevèze	ENS de Cachan	Directeur de thèse
Jacques Lamon	INSA de Lyon	Président
Eric Philippe	Safran Snecma Propulsion Solide	Invité

LMT-Cachan

ENS Cachan / CNRS / UPMC / PRES UniverSud Paris
61 avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan cedex, France

Au moment d'écrire ces lignes, je commence une carrière quelque peu différente de celle de la recherche académique. J'ai cependant encore des difficultés à ne plus me considérer encore comme thésard au LMT, tant les années que j'y ai passées m'ont marqué. Je ne saurais, en une seule petite page, remercier comme il se doit, tous ceux que j'ai côtoyés avec plaisir durant ces trois et quelques années.

Avant tout, je tiens à témoigner ma reconnaissance à Pierre Ladevèze pour m'avoir proposé cette thèse et m'avoir dirigé durant mes travaux. Je dois dire à quel point j'ai été impressionné par ses approches scientifiques et ses idées novatrices, pour dire le moins. À tel point qu'on ne les comprend que bien après, quand, la « tête dans le guidon », on bloque sur des questions auxquelles on n'avait pas pensé avant.

Un grand merci ensuite à Emmanuel Baranger, pour m'avoir d'une part « recruté » alors que j'effectuais mon stage à Stuttgart, et d'autre part pour m'avoir encadré. Toujours présent et disponible, il a su m'apporter un soutien indéfectible, en particulier lors des moments « désespérés », où rien ne semble aller dans le bon sens. Nous avons partagé bien plus que notre collaboration au LMT, que ce soit autour d'un repas (pour lesquels je remercie aussi Manue) ou d'un ring, toujours avec un grand plaisir ; Encore mille mercis !

À présent, je tiens à remercier mon Jury de thèse. Tout d'abord, je remercie sincèrement Messieurs F. Chinesta et D. Dureisseix d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ces travaux, et qui ont su donner un grand nombre de remarques des plus constructives sur ceux-ci. Merci aussi à J. Lamon d'avoir présidé ce Jury, et à X. Aubard et E. Philippe pour leurs connaissances des plus pointues sur le matériau et les problématiques industrielles.

L'aventure au LMT a commencé tôt dans la scolarité à l'ENS, je me souviens encore de mes premiers pas dans le hall d'essai, avec des essais en TER sur des bâtonnés et ponts en bois avec Boubou. Je remercie donc tous les thésards et amis au titre desquels Bibou, Loulou, Nicolas, Flavoun, Renaud, Alain, et Camillou, et les collègues PAG, Frisou, PAB, Eric, Ludo, Panpan, Fédérica, Arnaud, Pierre, Boubou, Xavier, Lydia... et bien entendu tous ceux que j'oublie... et sans qui la vie au laboratoire se serait pas aussi riche et agréable.

Il y a aussi les amis et pottos des années ENS, qui, elles aussi, ont été un moment fort, produit d'une grande qualité des enseignements et de franches rigolades et de sincères amitiés. À Zac, Anne, Mariouch, Manue, OP, Yonyon, Mickeal, Zerty, Théa, Floflo, Andréa pour ne citer qu'eux... Un merci spécial à Danielle qui nous a maternés durant ces années.

Enfin, à mes parents, mes frères Nicolas et Matthieu, d'avoir toujours été présent et m'avoir guidé, encouragé et bien plus encore...

Table des matières

Table des matières	i
Table des figures	v
Liste des tableaux	xi
Introduction	1
1 Les composites à matrice céramique	7
1 Constitution générale et applications	8
1.1 Constitution et comportement	8
1.2 Applications de type moteur à réaction et turbines à gaz	10
1.3 Applications de type nucléaire	11
2 Procédés de fabrication et leur influence sur la microstructure	12
2.1 Infiltration chimique par voie gazeuse [CVI]	12
2.2 Imprégnation chimique par voie liquide [PIP/LSI]	13
2.3 Procédé hybride PIP-CVI	15
3 Mécanismes de dégradation/cicatrisation	16
3.1 Fissuration et déviation de fissures	16
3.2 Oxydation des CMCs	19
3.3 Cicatrisation	22
4 Bilan	24
2 Les méthodes et stratégies multiéchelles	27
1 Décomposition de domaine et sous-structuration	31
1.1 Cadre général	31
1.2 Les différentes approches	32
1.3 Bilan	35
2 Homogénéisation	35
2.1 Principes généraux	35
2.2 Homogénéisation des milieux périodiques	36
2.3 Non linéarités et éléments finis multiniveaux	38
2.4 Bilan	40
3 Enrichissement et Superposition de modèles	41

3.1	Enrichissement hiérarchique et multigrilles	41
3.2	Approche multiéchelle variationnelle	44
3.3	Superposition de modèles	45
3.4	Bilan	48
4	Enrichissement cinématique	48
4.1	Méthodes de partition de l'unité	49
4.2	XFEM/GFEM	50
4.3	Méthode des discontinuités fortes (SDA)	56
4.4	Bilan	57
5	Conclusion et rappel des objectifs	57
3	Le matériau Virtuel	59
1	Démarche proposée	60
1.1	Les hypothèses fondatrices	60
1.2	Les étapes de la démarche et l'organisation des outils	60
2	Reconstruction de la microstructure	62
2.1	Traitement des micrographies	62
2.2	Reconstruction du fil en 2D	69
3	Extraction des motifs	75
3.1	Aspects techniques de la représentation	75
3.2	Génération des maillages supports	76
4	Bilan	77
4	Une GFEM multiéchelle	79
1	Introduction et rappel	81
1.1	Organisation des outils et rappel du problème	81
1.2	La méthode des éléments finis généralisée « classique »	83
2	GFEM et séparation d'échelles	87
2.1	Effet local des hétérogénéités	88
2.2	Formulation de la GFEM multiéchelle	92
2.3	Résumé	94
3	Définition et formulation des problèmes sur les motifs	95
3.1	Le problème de l'inclusion	95
3.2	Extension aux motifs quelconques	97
4	Implantation numérique	99
4.1	Rappel des opérations mises en jeu	100
4.2	Architecture de la plateforme	100
4.3	Intégration de la méthode dans la plateforme	104
5	Bilan	107
5	Application à la modélisation du fil de CMCs	109
1	Modélisation du fil de CMC	111
2	Construction du Handbook : Choix des motifs	111

2.1	Premier critère de choix de groupes de fibres	112
2.2	Réduction du Handbook et approximation de la microstructure . . .	116
3	Simulation de sections 2D sous chargement transverse	118
3.1	Cas simple d'un composite avec une matrice homogène	119
3.2	Cas d'un composite avec une matrice multiséquencée de type CVI	122
3.3	Cas d'un composite avec une matrice multiséquencée avec no- dules de Voie Liquide type CVI/CVL	125
3.4	Evaluation du coût numérique	125
4	Extension au tronçon 3D du fil	128
4.1	Microstructure du tronçon 3D d'un fil de CMC et génération . . .	128
4.2	La GFEM multiéchelle en 3D	131
4.3	Modélisation du tronçon 3D du fil	133
5	Bilan	133
6	Extension à la prédiction de la fissuration	137
1	La fissuration des CMCs	138
2	Prédiction et représentation de la fissuration	139
2.1	La « Finite Fracture Mechanics » et modèle hybride	139
2.2	Définition d'une surface potentielle de rupture par les motifs . . .	140
3	Travail préliminaire : fissuration des motifs pré-existants	142
3.1	Définition des motifs fissurés et calcul de l'enrichissement associé	142
3.2	Validation sur un cas simple de décohésion	143
3.3	Critère de fissuration	144
3.4	Exemple simple de démonstration	145
4	Bilan	146
	Conclusion	149
	Bibliographie	153

Table des figures

1	Positionnement du modèle macro et de DDV au sein du matériau virtuel et de ses différentes échelles.	3
1.1	Diagramme d'Ashby de la résistance en fonction de la température [Ashby et Jones, 1993].	8
1.2	Diagramme d'Ashby du module d'Young spécifique en fonction de la résistance spécifique [Ashby et Jones, 1993].	9
1.3	Morphologie des composites à matrice céramique et les différentes échelles ⁽¹⁾ : [Penas, 2002] ; ⁽²⁾ : [Ros, 2011] ; ⁽³⁾ : [Lamouroux <i>et al.</i> , 1999]). . .	10
1.4	Exemples d'application des CMCs dans les moteurs de SNECMA, pour le mélangeur et l'arrière corps (sources SAFRAN Snecma Propulsion Solide). 11	
1.5	Exemple de réalisation de matrice multi-séquencée par CVI [Lamouroux <i>et al.</i> , 1999]	12
1.6	Forme des macro-pores dans un CMC élaboré par CVI [Quemard <i>et al.</i> , 2007b]	13
1.7	Forme des pores dans un CMC obtenu par PIP [Kotani <i>et al.</i> , 2002]	15
1.8	Microstructure d'un fil de CMC issue d'un procédé hybride PIP-CVI (source : SNECMA Propulsion Solide).	16
1.9	Schéma du réseau de fissuration.	17
1.10	Déviations de la fissure au droit de la fibre, le long de l'interphase de PyC. [Boitier <i>et al.</i> , 2002]	18
1.11	Faciès de rupture d'un toron [Lamouroux <i>et al.</i> , 1999]. On notera la déviation de la fissure aux différentes couches de la matrice.	18
1.12	Micrographie d'une fibre Nicalon après oxydation à l'air à 1400 °C pendant 10h ; a) surface de rupture et b) pores créés à la surface de la fibre ainsi que l'initiation de la rupture (flèche) [Takeda <i>et al.</i> , 1998]	20
1.13	Récapitulatif des réactions chimiques pour les fibres Nicalon et Hi-Nicalon 20	
1.14	SEM d'une matrice multi-séquencée déposée sur une seule fibre de carbone [Lamouroux <i>et al.</i> , 1999].	23
1.15	Schéma d'ouverture des fissures avec et sans chargement pour une matrice multi-séquencée et mono-couche [Lamouroux <i>et al.</i> , 1999].	24
1.16	Détail du plan Echelle - Constituants.	25
1.17	Détail du plan Echelle - Distribution.	26

1.18	Carte des phénomènes rencontrés en atmosphère sèche. (Les gradients de couleur indiquent la dépendance de la cinétique vis-à-vis de la température.)	26
2.1	Schématisme du problème de référence.	30
2.2	Schématisme du problème de décomposition en deux sous-domaines.	31
2.3	Algorithme de type LaTin.	34
2.4	Rapport des échelles en homogénéisation périodique.	36
2.5	Schéma d'une itération de la FE ² en un point de Gauss.	39
2.6	Schéma de principe de l'approche micro-macro.	40
2.7	Schéma de principe de la « Hierarchical Dirichlet Projection Method ».	42
2.8	Hiérarchie des grilles et cycles classiques des méthodes multigrilles.	43
2.9	Couplage de modèle de type Arlequin. Les paramètres α_1 et α_2 répartissent l'énergie entre les deux modèles Ω_G et Ω_L . La zone Ω_C est la zone de couplage, où les deux modèles coexistent.	46
2.10	Patch et fonction chapeau linéaire de la PUM.	51
2.11	Enrichissement lié à une fissure sur un maillage non-structuré.	52
2.12	Extraction des problèmes handbook et conditions limites utilisées, dans les travaux de Strouboulis.	55
3.1	Organisation des différents outils mis en place dans la stratégie de matériau virtuel et les flux les reliant.	61
3.2	Correction de l'exposition et des niveaux de gris.	63
3.3	L'ouverture correspond à une érosion suivie d'une dilatation. Cela permet de filtrer les objets plus petits que le diamètre du l'élément structurant.	63
3.4	Seuillage des fibres et suppression des artefacts de seuillage par ouverture.	64
3.5	Seuillage des fibres, des nodules de voie liquide et des pores sur les zones A, B et C définies sur figure 3.2 .	64
3.6	Séparation des fibres par watershed.	65
3.7	Séparation des fibres par watershed.	65
3.8	Estimation de la carte d'intensité de la distribution de fibre, calculée avec une fenêtre d'une taille de 10 diamètres de fibres. On notera que les effets de bords ne sont pas pris en compte dans l'estimation (intensité anormalement faible sur le bord à gauche et à droite).	66
3.9	Estimation pratique du covariogramme d'une image binaire.	67
3.10	Covariogrammes de la distribution de fibres, vertical et horizontal.	68
3.11	Estimation des distributions de distance d'une fibre à sa première et seconde plus proche voisine, fonction de la distance adimensionnée par le diamètre moyen d'une fibre.	68
3.12	Distribution des diamètres de fibres (en pixels).	69
3.13	Distribution du nombre de nodules de voie liquide attachés à des fibres en fonction du nombre de fibres attachées (à gauche) et distribution de la surface des nodules de voie liquide.	70
3.14	Distribution de la surface des pores.	70

3.15	Simulation de la densité de probabilité expérimentale, à l'aide de la méthode de rejet.	71
3.16	Chaque nodule (en bleu) semble être l'empreinte des fibres alentour (en rouge), mais transformée.	72
3.17	Etapes de la génération d'un nodule de matrice voie liquide.	72
3.18	Exemple de réalisation ; la matrice voie gazeuse n'est constituée que d'une seule couche.	74
3.19	Comparaison entre les distributions cumulées des distances entre une fibre et sa première et seconde plus proche voisine.	74
3.20	Exemple de nodules de matrice voie liquide obtenus.	75
3.21	Exemples de géométrie obtenus à partir de la librairie Matlab.	76
3.22	Exemples de géométrie obtenue à partir de la librairie Matlab.	76
3.23	Exemples de maillages obtenus à partir du fichier généré par la librairie Matlab.	77
4.1	Organisation des différents outils mis en place dans la stratégie de matériau virtuel et les flux les reliant.	81
4.2	Schématisation du problème de référence.	82
4.3	Représentation d'une fonction chapeau, d'une fonction d'enrichissement et du produit.	84
4.4	Etapes principales de la méthode GFEM avec Handbook numérique.	84
4.5	Exemple de maillage support de fonctions d'enrichissement, par rapport au maillage régulier de la GFEM.	87
4.6	Problème d'une inclusion de rayon a en milieu homogène soumis à un déplacement imposé en $r = b$, et les tracés des déplacements totaux, homogènes et de perturbations associés.	88
4.7	Schématisation du domaine d'enrichissement par rapport au support d'une fonction de forme EF, dans le cas d'une séparation d'échelle entre maillage grossier et hétérogénéités ($\omega_j^{(i)} \ll \Omega_i$).	90
4.8	Schématisation des maillages des motifs et du placement des degrés de liberté dans le cas de la GFEM à enrichissement multiéchelle.	96
4.9	Décomposition du problème d'une inclusion en milieu homogène infini en un problème homogène et un problème de perturbation.	98
4.10	Schéma du problème résolu pour un motif de type pore.	99
4.11	Organisation des outils (Metil et LMTpp) et logiciels au sein de la plateforme logicielle du laboratoire.	101
4.12	Schématisation et paramétrage de l'intégration d'un champ entre deux éléments triangulaires.	102
4.13	Schématisation simplifiée de l'architecture du code LMTpp et de la paramétrisation des grandes classes.	105
4.14	Schématisation simplifiée de l'architecture du code, avec la mise en place d'une classe dédiée faisant interface entre la formulation globale GFEM et le Handbook contenant tous les enrichissements.	107

5.1	Schématisation du problème utilisé pour l'étude de sensibilité vis-à-vis de l'espacement inter-fibres pour la détermination de la distance d'interaction.	113
5.2	Maillage du motif à une fibre utilisé dans le Handbook et normes des champs d'enrichissement associés ($\ \psi_i\ $) aux trois cas de chargements (Cas 1 : traction horizontale ; Cas 2 : traction verticale ; Cas 3 : cisaillement).	113
5.3	Tracé de l'erreur relative maximum commise sur la contrainte en fonction de l'espacement entre les fibres.	114
5.4	Tracé de la contrainte σ_{xx} le long de la ligne sonde pour la solution de référence, la solution GFEM, ainsi que l'erreur relative, pour un espacement de $d = 0.526D_f$.	114
5.5	Tracé de la contrainte σ_{xx} le long de la ligne sonde pour la solution de référence, la solution GFEM, ainsi que l'erreur relative, pour un espacement de $d = 0.21D_f$.	115
5.6	Exemple de regroupement des fibres par paquets de 3, 2 et 1 fibres.	115
5.7	Schématisation d'un groupe de trois « écrasé », pouvant être représenté par deux motifs de deux et une fibres.	117
5.8	Effet de la réduction du Handbook sur l'estimation de distribution cumulative de la distance inter-fibre.	118
5.9	Effet d'interpénétration lors de la réduction du nombre de motifs du Handbook (indiqué par les flèches).	118
5.10	Schématisation du problème à matrice homogène et continue, en traction horizontale.	119
5.11	Contrainte σ_{xx} de la solution de référence.	120
5.12	Carte de contribution à l'erreur globale par élément (normée par rapport à la taille des éléments), en échelle logarithmique.	120
5.13	Contrainte σ_{xx} de la solution GFEM.	121
5.14	Erreur relative locale entre la contrainte σ_{xx} de la solution GFEM et de référence (échelle logarithmique).	122
5.15	Motifs de 3 et 2 fibres constituant le Handbook.	122
5.16	Contrainte σ_{xx} de la solution GFEM avec un Handbook contenant plus de motifs.	123
5.17	Problème de traction sur une microstructure mettant en jeu 360 fibres, 3 couches de matrices et une dizaine de pores.	123
5.18	Motifs constituant le Handbook utilisé dans le cas d'une matrice multiséquentée et poreuse.	124
5.19	Contrainte σ_{xx} de la solution GFEM sur un problème de CMC à matrice multiséquentée.	124
5.20	Microstructure de CMC à matrice multiséquentée et mettant en jeu pores et nodules de matrice voie liquide.	125
5.21	Exemple de maillage de deux motifs de nodules collés à une fibre.	126
5.22	Contrainte σ_{xx} de la solution GFEM sur un problème de CMC hybride.	126
5.23	Coupe longitudinale d'un minicomposite (fil unique) de CMCs avec matrice hybride voie gazeuse et voie liquide [Etchart-Salas, 2011].	129

5.24	Coupe issue d'une tomographie d'un fil d'un CMC à matrice multiséquencée, sans nodule de matrice voie liquide [Ros, 2011].	129
5.25	Blocs de matrice voie liquide.	130
5.26	Changement des motifs de fibres le long du fil (cercle rouge), lorsque les fibres ne sont pas parallèles.	131
5.27	Exemple de calcul d'inclusions sphériques (40) dans un volume de matrice continue, sous traction pure.	132
5.28	Couplage en volume entre un motif « long » et les différents éléments traversés.	132
5.29	Géométrie du tronçon et conditions limites utilisées.	134
5.30	Reconstruction du champ de contrainte σ_{zz}	134
5.31	Reconstruction du champ de contrainte σ_{xx}	135
6.1	Les deux types de fissuration (suivant le plan dans lequel elle se développe) pour un composite à matrice céramique et fibre de carbone [Quemard, 2005].	138
6.2	Fissuration longitudinale sur minicomposites hybrides (matrice voie liquide et gazeuse) [Etchart-Salas, 2011].	139
6.3	Schématisation de la fissuration transverse. Comme observé sur les micrographies, la fissure se ré-oriente de proche en proche entre les fibres.	140
6.4	Exemple d'application des interfaces potentielles de rupture à la fissuration transverse d'un composite organique (CMO) [Violeau, 2007].	140
6.5	Schématisation d'une famille de motif, c'est-à-dire d'un scénario de fissuration, à partir du motif sain jusqu'à un état fissuré.	141
6.6	Schématisation des cas où la fissure s'initie dans des motifs existant initialement (à gauche) et où une fissure apparaît <i>ex nihilo</i> entre deux motifs (à droite).	142
6.7	Exemples d'enrichissements liés à des motifs fissurés (ligne de rupture en vert) : a) décohésion fibre-matrice et b) fissuration de la matrice entre deux fibres.	143
6.8	Géométrie du problème de décohésion d'une inclusion dans une matrice homogène soumis à de la traction.	144
6.9	Comparaison de la contrainte σ_{xx} associée à la solution GFEM et à la solution de référence, suivant la ligne sonde.	144
6.10	Géométrie et chargement de l'exemple de démonstration de la fissuration.	146
6.11	Champs de contrainte (σ_{xx}) en deux pas de chargement : lors de la première décohésion et lors de la première rupture de la matrice. On notera que les deux fibres dont les interphases ne sont pas rompus sont à peine discernable sur le pas de temps 7, à cause des gradients provoqués par les deux autres fibres.	147

Liste des tableaux

3.1	Classes et méthodes de la librairie de géométrie utilisée.	75
5.1	Nombre de paquets de 3, 2 et 1 fibres identifiés dans la distribution . . .	115
5.2	Nombres de degrés de libertés (ddl) et temps de calcul pour l'exemple de la section 3.1. Les calculs sont effectués sur un seul CPU. (* estimations, # hormis temps de main d'oeuvre).	127
6.1	Propriétés matériau utilisées dans cet exemple de fissuration.	145
6.2	Propriétés des lois normales caractérisant la variabilité des propriétés de rupture des matériaux.	146

Introduction

LA démarche de conception dans l'industrie, en particulier aéronautique, est en pleine révolution. Avec l'émergence des matériaux « sur mesure », il ne s'agit plus seulement de concevoir une pièce répondant à un besoin spécifique mais aussi le matériau associé. Le matériau n'est plus choisi « sur l'étagère », mais véritablement conçu en même temps que la pièce. On passe pour ainsi dire du « prêt-à-porter » au « sur mesure », ce qui permet des gains en performance et en poids remarquables.

Les matériaux composites, renforcés par des fibres, sont un exemple des plus médiatiques. Cette association de matériaux différents permet d'obtenir un nouveau matériau possédant des propriétés que chaque constituant pris seul n'a pas. Ainsi, par le biais d'une savante recette, il est théoriquement possible d'atteindre « le Matériau » idéal pour une application/pièce donnée. Leur comportement est directement piloté par le choix des fibres, de la matrice, de l'interface fibre-matrice, et de l'orientation des fibres par rapport à la charge. Leur souplesse d'utilisation et leur capacité d'adaptation font de ce type de matériau un choix attractif. Leur optimisation vis-à-vis de l'application est cependant un véritable challenge scientifique et technique à cause de la complexité de cette tâche.

L'optimisation du matériau vis-à-vis des critères de tenue mécanique est faite presque uniquement à l'aide d'essais. Cette façon de procéder est longue et coûteuse. Comme rester compétitif est synonyme d'innovation rapide, et donc de cycles de développement courts, le challenge est de pouvoir procéder à une optimisation numérique à l'aide d'un véritable « matériau virtuel » où tous les constituants du matériau, leur arrangement et leurs interactions sont pris en compte et sont susceptibles d'évoluer.

Parmi les nombreuses combinaisons fibres/matrices possibles en vue d'obtenir un composite, nous étudierons ici des composites à matrice céramique (CMCs). Ceux-ci se constituent d'une matrice en carbure de silicium (SiC) renforcée par un tissu guipex de fibres SiC. Ces composites ont des propriétés thermomécaniques spécifiques remarquables qui en font des matériaux très prometteurs pour les applications à haute température (400 à 1000 °C). SAFRAN Snecma Propulsion Solide (SPS) s'est fait une spécialité de l'élaboration et le développement de ces matériaux « sur mesure » pour la propulsion aéronautique. Les CMCs sont cependant des matériaux coûteux, d'une part à cause du prix des fibres en carbure de silicium (SiC) et d'autre part d'un procédé de fabrication par voie gazeuse (CVI) particulier. Ce dernier est en effet long et l'outillage de maintien de la préforme fibreuse est perdu pour chaque pièce réalisée. Les premières générations de CMCs sont, de plus, sensibles à l'oxydation des fibres et interphases, ce qui

limitait jusqu'ici la durée de vie des pièces. Les CMCs ont donc longtemps été cantonnés à des applications « niches » de type militaire ou spatiale.

Les travaux de SPS ces 15 dernières années ont permis le développement des CMCs autocicatrisants, qui atteignent des durées de vie particulièrement élevées (de l'ordre de la dizaine de milliers d'heures). La cicatrisation permet en effet de limiter la diffusion de l'oxygène au coeur du matériau, et donc son oxydation. De plus, un procédé de fabrication hybride voie gazeuse - voie liquide (CVI-CVL) moins couteux a été mis en place, pour lequel l'outillage n'est plus perdu. En outre, l'étape voie liquide, semblable au procédé RTM des composites à matrice organique (CMOs), peut être sous-traitée à des PME. Ces innovations rendent possible l'utilisation de ces matériaux à la propulsion aéronautique civile. Les travaux de recherche présentés ici se situent, et sont financés, dans le cadre du programme de recherche et développement ARCOCE – Arrière Corps en Composite Céramique – piloté par SPS. ARCOCE a pour but le développement et la construction d'un démonstrateur d'arrière-corps en CMC pour les futurs moteurs d'avions civils ainsi que la maturation du matériau et des procédés de fabrication, d'assemblage et d'intégration. Ces CMCs autocicatrisants sont particulièrement complexes à comprendre et à modéliser à cause de leur microstructure compliquée et de la nature différente des phénomènes s'y développant (mécanique, physique, chimique). Ils sont multiéchelles et multiphysiques. C'est pourquoi une large communauté scientifique collabore au sein d'ARCOCE afin de cerner au mieux les phénomènes et les échelles en jeu, de la chimie de la fibre à l'influence du tissage sur le matériau. On notera que le démonstrateur est actuellement au banc d'essai et sera soumis à des essais en vols au courant 2012.

Le rôle du LMT Cachan et des présents travaux est essentiellement d'intégrer les connaissances au sein du cadre structurant qu'est le « matériau virtuel », dans lequel le matériau est vu comme une structure à part entière. Cette nouvelle génération d'outils a été formalisée dans le cas des CMCs dans les travaux [Cluzel, 2009, Genet, 2010], ou encore dans [Couégnat, 2007, Pineau et Lamon, 2009, Pineau *et al.*, 2010], bien que pour ces derniers, l'approche repose sur des outils différents. Ils sont cependant d'ores-et-déjà opérationnels pour les CMOs [Ladevèze *et al.*, 2006, Lubineau *et al.*, 2009]. Il se concentre sur une description aussi complète que possible du matériau et n'est plus seulement un modèle de comportement. Les phénomènes mécaniques et chimiques sont pris en compte à l'échelle où ils se développent. Les paramètres du matériau virtuel sont caractéristiques des constituants du matériau, de leur arrangement et de leurs interactions. Il permet ainsi d'être valide pour une large gamme de matériaux et pour de grandes durées de vie. En fait, il reste valide tant que les phénomènes ou leurs interactions ne changent pas. L'ordre de leur apparition peut toutefois changer. Il est donc possible d'optimiser des familles entières de matériaux.

La construction de ce « matériau virtuel » s'est faite progressivement, à mesure que les attentes vis-à-vis du modèle ont évolué. Afin de les situer les uns par rapport aux autres, il est intéressant de dresser un diagramme « Echelle-Constituants-Distribution ». Il est aisé de voir à quelles échelles se situent les travaux, quels constituants y sont pris en compte ainsi que la distribution spatiale de ceux-ci. Cela permet d'autant mieux d'apprécier les

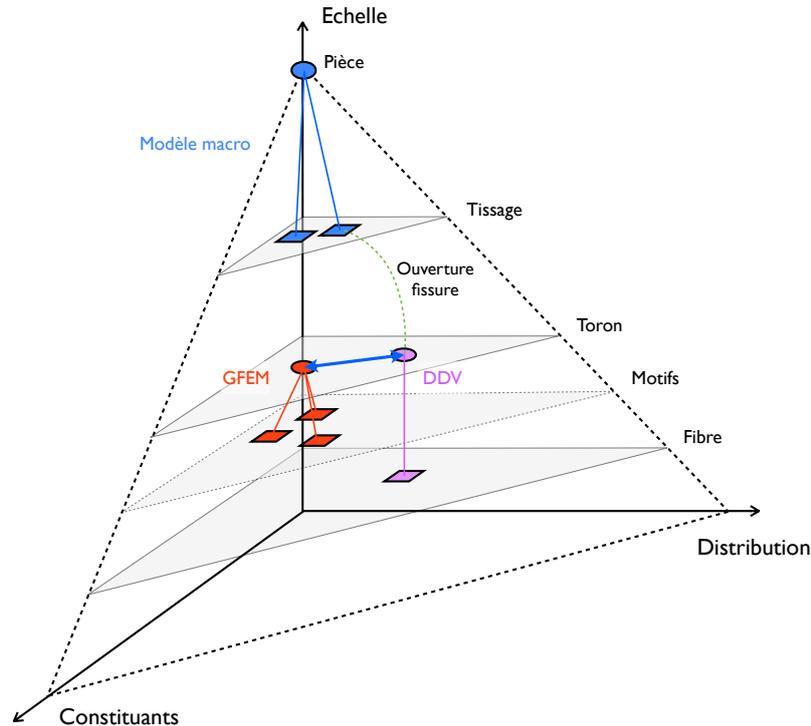


FIGURE 1: Positionnement du modèle macro et de DDV au sein du matériau virtuel et de ses différentes échelles.

limites des modélisations. Plus de détails concernant les axes pourront être trouvés lors du bilan sur les CMCs, Ch. 1 Sec. 4. Les premiers travaux au LMT Cachan ont porté sur la modélisation du comportement mécanique, les applications étant alors le calcul de la tenue mécanique seule, sans durée de vie. L'échelle appropriée était donc macroscopique, à l'échelle de la pièce, Fig. 1. Le cadre utilisé était celui de la mécanique de l'endommagement [Rabotnov, 1968, Kachanov, 1986, Lemaitre, 1992, Lemaitre et Chaboche, 1994], et plus précisément celui de la théorie de l'endommagement anisotrope [Ladevèze, 1983]. La fissuration et l'endommagement y sont décrits d'un point de vue continu. La particularité de cette théorie est que l'endommagement peut être dirigé par le chargement local [Ladevèze, 2002] et être séparé suivant ses différentes origines. En outre, il est inactif en compression, les fissures se refermant alors. Ces théories d'endommagement anisotrope ont été appliquées à de nombreux cas, par exemple les composites carbone/carbone (C/C) 4D [Aubard *et al.*, 1998, Aubard *et al.*, 2000], les CMCs tissés stratifiés [Gasser *et al.*, 1998] et le béton [Desmorat *et al.*, 2007]. Des approches similaires ont aussi été proposées dans la littérature, par exemple à l'ONERA [Maire et Lesne, 1997, Maire et Chaboche, 1997, Maire et Chaboche, 1997] ou au LCTS-Bordeaux [Camus, 2000]. Lorsque la problématique de la durée de vie s'est développée, ces modèles ont dû être revus pour prendre en compte les phénomènes chimiques qui la pilotent. Pour ce faire, un pont a été créé entre le modèle mécanique macroscopique et des modèles microscopiques.

piques d'oxydation et de cicatrisation [Letombe, 2005, Cluzel *et al.*, 2009]. Ces derniers se situent respectivement à l'échelle de la fibre et du toron, **figure 1** et se basent sur une distribution homogène des groupes de fibres. Ce modèle préfigure le matériau virtuel, en regroupant des modèles de physiques et d'échelles différentes. L'expérience montre que la représentation du modèle de cicatrisation est robuste pour différents matériaux, mais la partie mécanique macroscopique ne l'est pas. En particulier, la représentation de la fissuration, chemin de diffusion de l'oxygène, n'est pas assez fine pour rester valable pour d'autres matériaux. Ainsi le modèle nécessite d'être ré-identifié en partie pour chaque nouvelle nuance du matériau.

Dans ce cadre, et afin de pouvoir prédire efficacement la durée du vie des CMCs, le but de la présente thèse est de développer un modèle à l'échelle du fil, capable de simuler le processus de fissuration du fil de manière fine ainsi que les redistributions de contrainte s'y effectuant. La connaissance du réseau de fissure et de son ouverture peut alors être couplée à un modèle d'oxydation/cicatrisation, en s'appuyant sur la même finesse de description de la microstructure, **figure 1**. Comme le couplage se fait à la même échelle, cette approche est plus robuste que l'utilisation d'un indicateur d'ouverture de fissure utilisé précédemment dans le modèle macroscopique qui passait de l'échelle du tissu à celle du fil. Le modèle d'oxydation et de cicatrisation ainsi que le couplage avec le modèle du fil ne font cependant pas partie des présents travaux. Il sera à terme possible d'optimiser des familles entières de CMCs en terme de durée de vie (DDV), en tenant compte des microconstituants et de la microstructure.

L'approche proposée repose sur une nouvelle version multiéchelle de la « Generalized Finite Element Method » (GFEM) capable de modéliser et simuler la microstructure complexe du fil de CMC. Cette méthode utilise le concept de « motif », sorte de situation mécanique ou topologique considérée comme révélatrice de la mécanique interne du fil. Ces motifs – groupes de fibres, fissures – permettent à la fois l'enrichissement de la cinématique locale et la description de la topologie locale des différentes phases de la microstructure.

La première étape de cette approche se base sur l'étude de micrographies capables de décrire la microstructure. À partir de celles-ci, des motifs sont extraits. En assemblant ces derniers, ceux-ci doivent être capables de reproduire la microstructure et son comportement. Le motif le plus simple est dans notre cas une fibre seule dans une matrice continue.

L'étape suivante repose essentiellement sur la GFEM, dont le principe est d'enrichir l'espace d'approximation local grâce à des fonctions d'un « Handbook », calculées *a priori* à partir des motifs précédemment identifiés. La méthode est cependant reformulée pour tirer parti de l'aspect multiéchelle du fil, les inclusions étant de petite taille par rapport au fil. Ceci permet d'alléger fortement le développement du programme et le coût numérique des simulations. Le point clef est à présent le principe de Saint Venant, en vertu duquel les perturbations induites par les motifs restent localisées autour d'eux. Les difficultés d'intégration, souvent présentes dans les méthodes de type éléments finis étendus, sont ainsi déportées au niveau des fonctions du Handbook et leur maillage.

La méthode est d'abord appliquée à la simulation de sections de fil de CMC, en deux dimensions pour lesquels le choix des motifs est détaillé. La qualité de la solution ainsi que le coût numérique effectif de la méthode sont ensuite discutés. Une proposition d'optimisation est développée, afin de tirer parti de l'apparition de motifs identiques à plusieurs endroits du fil. La GFEM multiéchelle est ensuite étendue au traitement de la fissuration en quasi-statique, d'abord en 2D, en adoptant une approche par « motifs » de celle-ci, couplée à un modèle de type « Finite Fracture Mechanics ».

Ce mémoire s'organise autour de six chapitres :

- Le **premier chapitre** dresse une présentation du matériau, de ses spécificités et de ses mécanismes. Une attention particulière est portée sur les mécanismes de dégradation et d'oxydation et sur l'échelle à laquelle ils agissent.
- Le **second chapitre** met l'accent sur les différentes méthodes et modèles existants dans la littérature pour la simulation de microstructures complexes. Les possibilités et limitations de chaque type sont explicitées. En particulier, les méthodes de types éléments finis étendus sont développées.
- Le **troisième chapitre** se focalise sur la construction du matériau virtuel, les concepts et les hypothèses fondatrices mis en place. En particulier, la procédure de reconstruction de la microstructure est présentée, le choix et l'extraction des motifs sont décrits.
- Le **quatrième chapitre** présente une nouvelle version multiéchelle de la GFEM, point central des travaux effectués dans le cadre de la thèse. L'aspect multiéchelle et son impact sur la GFEM sont en particulier détaillés .
- Le **cinquième chapitre** détaille l'application de la stratégie à la modélisation du fil de CMC, pour laquelle le choix des motifs est affiné à l'aide d'un critère basé sur une distance d'interaction. Le passage de la méthode au traitement du fil en 3D est discuté, et un certain nombre de points délicats abordés.
- Enfin, le **sixième chapitre** se focalise sur l'extension de la stratégie à la prédiction de la fissuration du fil en 2D, dans le cadre de la mécanique de la rupture finie. Un travail préliminaire sur la description par motifs de celle-ci est présenté ainsi qu'un premier critère de fissuration. Ce chapitre a pour but de fournir les premiers éléments de réponse et d'explicitier certains points durs.

Chapitre 1

Les composites à matrice céramique

L'objectif de ce chapitre consiste à identifier les spécificités des CMCs, de chacun des procédés de fabrication et leur influence sur la microstructure du matériau. De plus, un bestiaire des phénomènes de fissuration et d'oxydation/cicatrisation est réalisé à partir de la littérature, car ils sont particulièrement importants en terme de durée de vie du matériau.

Sommaire

1	Constitution générale et applications	8
1.1	Constitution et comportement	8
1.2	Applications de type moteur à réaction et turbines à gaz	10
1.3	Applications de type nucléaire	11
2	Procédés de fabrication et leur influence sur la microstructure	12
2.1	Infiltration chimique par voie gazeuse [CVI]	12
2.2	Imprégnation chimique par voie liquide [PIP/LSI]	13
2.3	Procédé hybride PIP-CVI	15
3	Mécanismes de dégradation/cicatrisation	16
3.1	Fissuration et déviation de fissures	16
3.2	Oxydation des CMCs	19
3.3	Cicatrisation	22
4	Bilan	24

1 Constitution générale et applications

1.1 Constitution et comportement

Les matériaux composites à matrice céramique (CMC) sont des matériaux thermostructuraux, c'est-à-dire qu'ils présentent des caractéristiques mécaniques performantes dans les environnements thermiques élevés, cf. **figure 1.1**. De plus, ils conservent ces bonnes performances sous charges en milieu oxydant et radioactif. Leur intérêt est d'allier ces propriétés avec une masse volumique faible, **figure 1.2**, ce qui en fait une alternative sérieuse à l'utilisation d'alliages métalliques pour diverses applications : pièces de moteurs à réaction civils ou militaires, pièces de turbines à gaz pour la production énergétique, voire bouclier thermique pour les réacteurs à fusion.

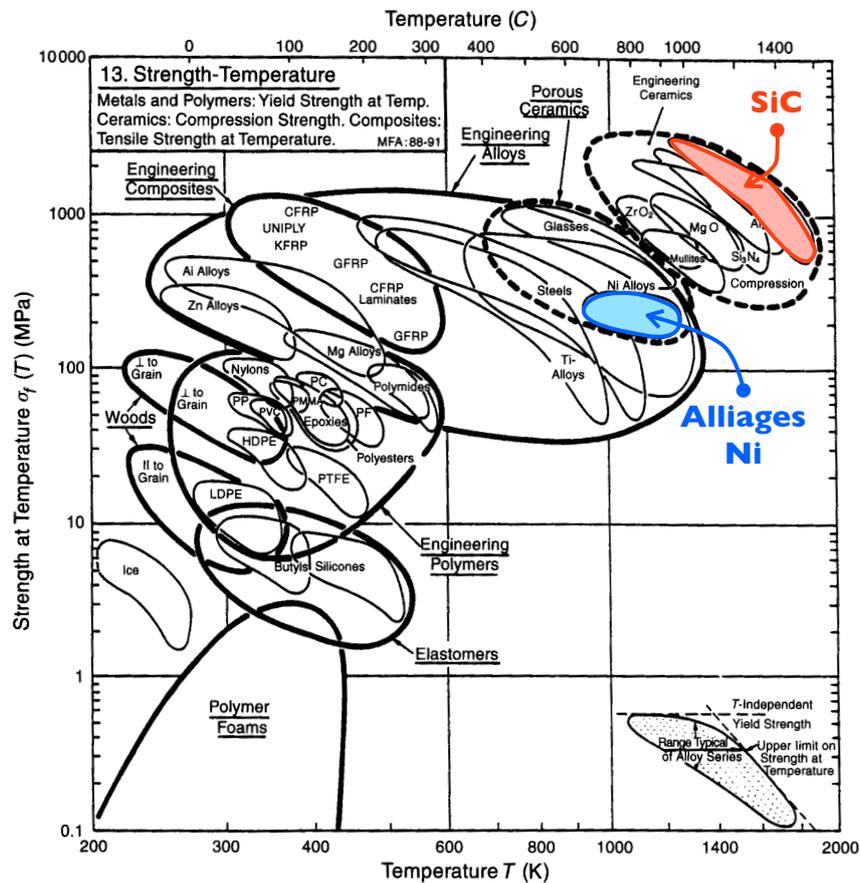


FIGURE 1.1: Diagramme d'Ashby de la résistance en fonction de la température [Ashby et Jones, 1993].

Les composites à matrice céramique sont l'association de trois constituants élémentaires :

- Les fibres, en carbone (C) ou en carbure de silicium (SiC) et d'un diamètre de l'ordre de 0.01mm ,

Vers un matériau virtuel pour l'optimisation qualitative d'une nouvelle famille de CMCs

- La matrice, en carbure de silicium ou d'autres céramiques pour l'autocicatrisation, comme nous le verrons plus loin,
- L'interphase entre fibres et matrice, en pyrocarbone (PyC) ou en nitrure de Bore (hex-BN).

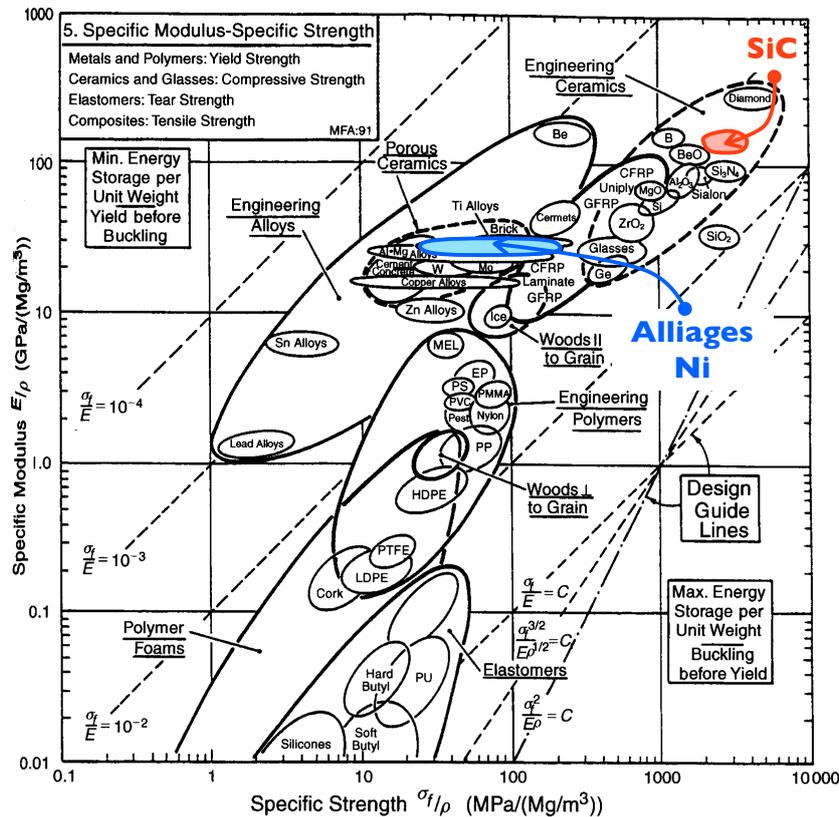


FIGURE 1.2: Diagramme d'Ashby du module d'Young spécifique en fonction de la résistance spécifique [Ashby et Jones, 1993].

Ils se présentent généralement sous la forme de composites tissés, stratifiés en 2D ou tissés en 3D. Chaque fil composant le tissu regroupe environ 1000 fibres et a une section de dimension $1\text{mm} \times 0.1\text{mm}$ environ. On notera de plus que les CMCs ne sont jamais totalement densifiés, et le matériau est poreux, cf. **figure 1.3**.

Contrairement aux composites à matrice organique (CMOs), où des fibres fragiles sont associées à une matrice au comportement élastoplastique endommageable plus souple (rapport des rigidités respectives $E_{\text{fibre}}/E_{\text{matrice}} \approx 10$), les CMCs associent des fibres et une matrice ayant le même comportement intrinsèque fragile et de rigidité comparable. Cependant, le composite résultant n'a pas pour autant un comportement totalement fragile. Ceci est dû à l'ajout du troisième constituant, l'interphase, située à l'interface entre la fibre et la matrice. Elle a un rôle de « fusible » mécanique et apporte ainsi de la ductilité au matériau. Ce phénomène sera détaillé plus avant. Les CMCs ont donc en général un comportement macroscopique élastique endommageable où la perte de raideur est liée à

la microfissuration de la matrice. Cet effet est à la fois positif, en permettant d'éviter la ruine brutale, mais aussi négatif du point de vue de l'oxydation, fournissant un chemin à la diffusion de l'oxygène au coeur du matériau.

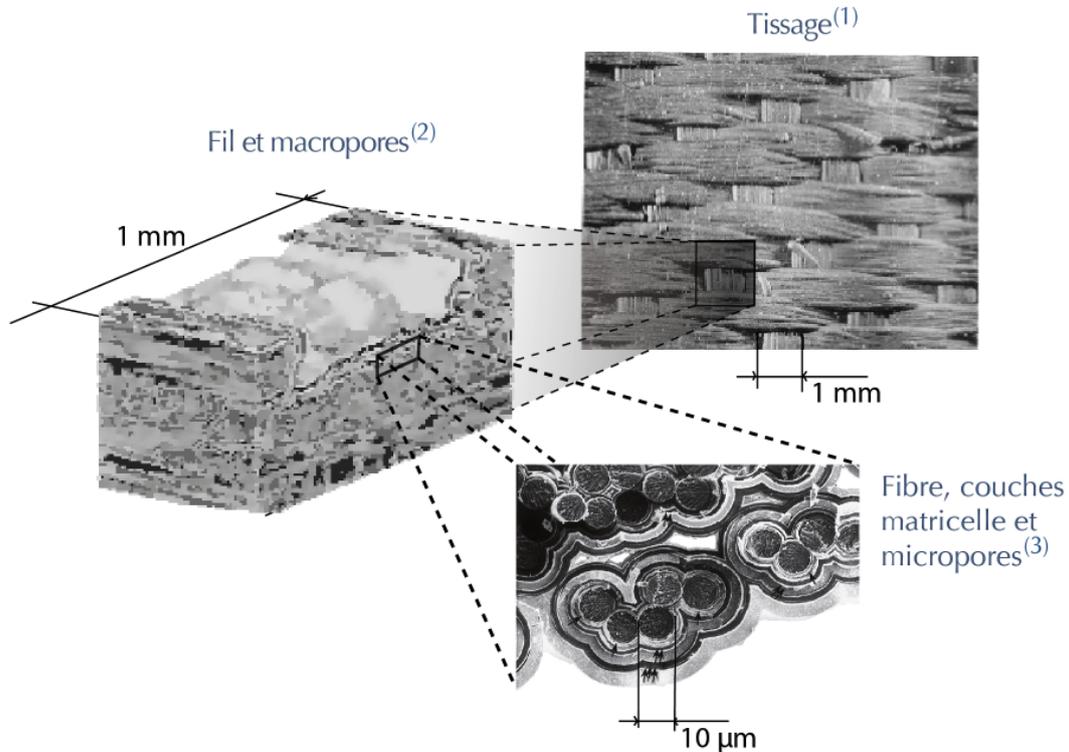


FIGURE 1.3: Morphologie des composites à matrice céramique et les différentes échelles
(⁽¹⁾ : [Penas, 2002] ; ⁽²⁾ : [Ros, 2011] ; ⁽³⁾ : [Lamouroux *et al.*, 1999]).

1.2 Applications de type moteur à réaction et turbines à gaz

Les matériaux classiquement utilisés, comme le cobalt ou les superalliages à base de nickel, ont atteint leur limite du point de vue des températures de fonctionnement, actuellement très proches de leur point de fusion. C'est pourquoi ils sont refroidis en fonctionnement afin de contrôler leur température (≤ 1100 °C) en cours d'utilisation. Qui plus est, le poids des pièces, combiné aux grandes vitesses de rotation, rend le design du système complexe. Le remplacement de ces superalliages par des CMCs, plus légers et résistants, semble une piste prometteuse. Cela permet à la fois de simplifier le design des systèmes, d'alléger le moteur et possiblement d'augmenter les températures de fonctionnement afin d'augmenter le rendement du moteur. Les CMCs ont déjà été utilisés avec succès sur certaines applications dans l'aéronautique militaire, comme par exemple les volets de sortie du M88-2 de Snecma pour le Rafale, ou encore les volets de divergeant du F110 de General Electric équipant le F16. Dans ce dernier système, la température de

fonctionnement des pièces CMCs est de l'ordre de 800-850 °C, et n'ont pas montrées de perte de propriétés mécaniques à 100h de fonctionnement.

Les progrès effectués dans la compréhension et l'industrialisation de ces matériaux permettent à présent leur application dans l'aéronautique civile. Snecma Propulsion Solide a en particulier développé des démonstrateurs pour le mélangeur et l'arrière corps, voir **figure 1.4**. Ces pièces sont notablement plus complexes que les pièces militaires précédemment développées, et y ajoutent des problématiques d'assemblage, de tolérance aux dommages, et de durée de vie des CMCs. On remarquera que ces pièces demeurent peu chargées mécaniquement. L'étape suivante, à l'étude à Snecma Propulsion Solide, est l'utilisation des CMCs pour les aubes en partie chaude, pour lesquelles le chargement thermomécanique est plus important.

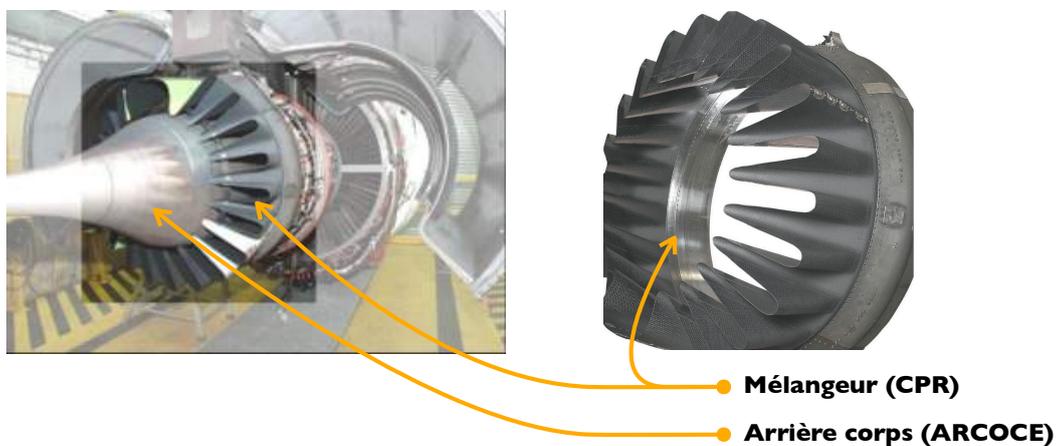


FIGURE 1.4: Exemples d'application des CMCs dans les moteurs de SNECMA, pour le mélangeur et l'arrière corps (sources SAFRAN Snecma Propulsion Solide).

D'autres applications dans des chambres de combustion de turbine à gaz ont été développées aux États-Unis et au Japon. Les températures sont similaires bien que plus sévères, de l'ordre de 1000-1250 °C et les environnements riches en vapeur d'eau (ce qui influe sur les cinétiques chimiques d'oxydation). L'utilisation de revêtements protecteurs a permis d'atteindre la dizaine de milliers d'heures de fonctionnement.

1.3 Applications de type nucléaire

Grâce à la faible réactivité des céramiques aux radiations, ce type de matériau semble indiqué pour des applications de type nucléaire, comme conteneur pour les barres de combustible dans les centrales nucléaires actuelles, ou bien comme matériaux constituant les murs des chambres toroïdales des futurs réacteurs à fusion. Les CMCs subissent cependant des réactions à cause des radiations, bien différentes de celles liées à l'oxydation, qui sont encore à l'étude. De plus, la perméabilité et la conductivité thermique, liées directement au réseau poreux du matériau, sont des problématiques sérieuses pour ce type d'applications.

2 Procédés de fabrication et leur influence sur la microstructure

Les différents procédés de fabrication des composites à matrice céramique sont à présent abordés. En effet, il existe de nombreux procédés ayant chacun leurs spécificités, tant du point de vue de la microstructure (en termes de volume de la porosité résiduelle, de forme) que des propriétés chimiques et mécaniques des différentes phases en présence. L'enjeu industriel est d'utiliser ces différents procédés afin de bénéficier à la fois des avantages de chacun tout en limitant le coût final des pièces réalisées.

Deux grandes familles existent : l'infiltration chimique par voie gazeuse ou liquide. D'autres procédés existent, comme les procédés hybrides et le frittage (ce dernier n'étant pas détaillé ici). Le lecteur pourra se référer à [Miracle et Donaldson, 2001] pour plus de détails sur les procédés de fabrication liés aux CMCs de type SiC-SiC ou autres.

2.1 Infiltration chimique par voie gazeuse [CVI]

Dans le cas de l'infiltration chimique par voie gazeuse [CVI], les différents constituants (matrice, interphase et revêtement extérieur) sont déposés par voie gazeuse à partir de précurseurs chimiques gazeux à température modérée (typiquement 900-1000 °C) et à pression faible. On part d'une préforme fibreuse maintenue par une ossature extérieure en carbone. Ensuite vient la phase de densification où l'interphase et la matrice sont déposées dans un four à atmosphère contrôlée. Le processus continue le temps nécessaire pour atteindre la densité voulue (c'est-à-dire l'épaisseur de couche matricielle).

Les avantages de cette technique sont de pouvoir créer un dépôt d'une très grande pureté, d'épaisseur quasi-constante et contrôlée, et ce, en particulier grâce à la technique I-CVI (I pour isotherme). Ceci permet de créer des matrices multi-séquencées comme présentées dans [Viricelle *et al.*, 2001] et [Naslain *et al.*, 2001], par exemple pour la création de CMCs autocicatrisant, **figure 1.5**.



FIGURE 1.5: Exemple de réalisation de matrice multi-séquencée par CVI [Lamouroux *et al.*, 1999]

Le problème technique majeur de ce mode de fabrication est de maintenir les pores ouverts pendant l'opération pour permettre aux gaz de pénétrer le matériau. Plusieurs techniques existent :

- appliquer un gradient de température à la surface de la pièce (ce qui limite le dépôt en surface),
- usiner la pièce régulièrement afin de rouvrir le réseau poreux.

Enfin, la technique CVI présente certains inconvénients industriels importants : elle est lente (taux de dépôt faible afin d'éviter de boucher les pores), la porosité résiduelle est assez élevée (de l'ordre de 10-15%) et généralement ouverte, cf. **figure 1.6**. En outre, l'outillage de maintien de la préforme fibreuse est perdu, la céramique s'étant déposée dessus. Enfin, la conductivité thermique est faible, de même que l'herméticité vis-à-vis des gaz et liquides, ce qui peut être un sérieux problème pour les applications de type réacteur nucléaire.

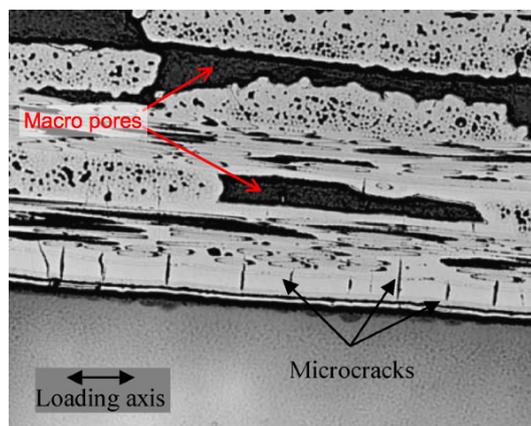


FIGURE 1.6: Forme des macro-pores dans un CMC élaboré par CVI [Quemard *et al.*, 2007b]

2.2 Imprégnation chimique par voie liquide [PIP/LSI]

L'infiltration peut aussi être effectuée par imprégnation d'un liquide, d'une manière similaire aux procédés utilisés pour les composites à matrice organique (type RTM). Il est ainsi possible de sous-traiter l'étape d'imprégnation à des PME maîtrisant ce procédé pour les CMOs. Dans la densification par voie liquide, on distingue deux méthodes principales suivant le liquide utilisé :

- Les polymères Si-C : polycarbosilanes (PCS) ou polyvinylsilanes,
- Du silicium liquide, pur ou en alliage.

La première famille est communément nommée PIP pour « Polymer Impregnation - Pyrolysis » et la seconde LSI pour « Liquid Silicon Impregnation ».

2.2.1 PIP

On part d'une préforme fibreuse (2.5D ou 3D). Elle est imprégnée par un précurseur liquide (polycarbosilane ou polyvinylsilane), qui doit avoir les propriétés adéquates suivantes :

- bien mouiller les fibres ;
- avoir une faible viscosité (afin de bien pénétrer le réseau poreux) ;
- avoir un bon rendement céramique.

Il est activé (thermiquement ou par irradiation) pour le rendre infusible lors de la pyrolyse. L'ensemble est alors pyrolysé, permettant à la fois le curage de la pièce des espèces superflues (telle que le solvant) et la réorganisation de la matière. Finalement, le procédé a deux étapes : (1) l'imprégnation et (2) la pyrolyse qui sont répétées le nombre de fois nécessaires afin de parvenir à la densification voulue. On définit sur ces réactions un rendement céramique qui est le rapport du poids de matériau final (après pyrolyse) sur le poids de précurseur original. Ce rendement représente la capacité d'un polymère à créer de la matrice. Concrètement, plus ce rapport est faible, plus il va rester, après pyrolyse, des pores, d'où la nécessité d'effectuer plusieurs infiltrations successives.

Globalement, ce processus permet d'atteindre une densification importante, bien qu'il reste un résidu poreux faible mais largement ouvert (dû à l'échappement des gaz lors de la pyrolyse), cf. **figure 1.7**. Une solution, qui permet à la fois de réduire le nombre de cycles (et donc le coût) et le résidu poreux consiste à inclure dans le précurseur une charge : une poudre de très faible granulométrie qui va participer à combler les pores. Cette charge peut-être active [Zhu *et al.*, 2008] où de la poudre d'aluminium est utilisée, ou inerte [Kotani *et al.*, 2003] utilisant des particules de SiC. Ces procédés, bien que montrant des résultats pertinents, rendent le précurseur plus visqueux, ce qui tend à rendre l'imprégnation plus difficile.

On notera que la matrice SiC formée est différente dans sa structure de celle des fibres ou même de celle obtenue par CVI. Ces différentes phases SiC n'ont donc pas les mêmes propriétés mécaniques et physico-chimiques.

2.2.2 LSI/RMI

Ce procédé consiste dans un premier temps à consolider la préforme fibreuse par CVI ou PIP. La densification s'effectue ensuite par du silicium liquide à environ 1400 °C qui remplit le réseau poreux par capillarité. Ce liquide mouille instantanément la préforme et réagit suivant une réaction exothermique et présentant un fort taux d'expansion volumique.

Dans ce type de procédés, le silicone liquide utilisé est corrosif vis-à-vis des interfaces en PyC, Hex-BN et aussi des fibres en carbone d'où l'utilisation d'interface séquencée de type $(X - SiC)_n$ avec $X = PyC$ ou $Hex - BN$. De plus, l'infiltration requiert des températures élevées (1400-1600 °C), ce qui limite ce procédé à certains types de fibres (typiquement les dernières générations de fibres SiC : Hi-Nicalon type S, Sylaramic). De même que pour la CVI, les pores doivent rester ouverts durant le processus ce

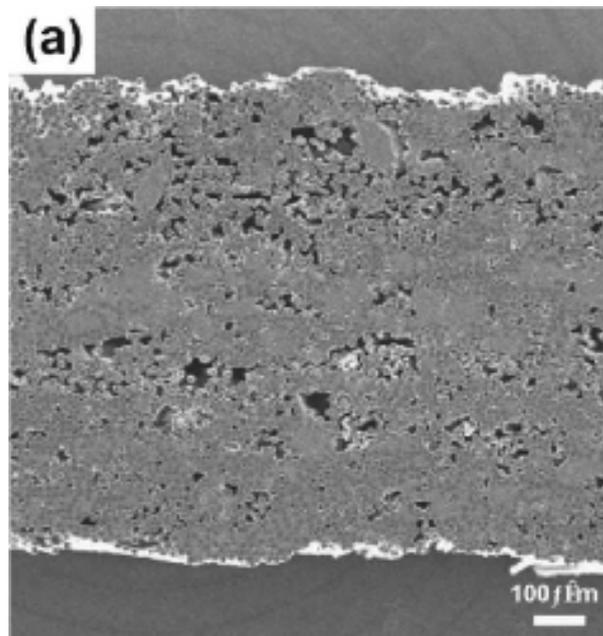


FIGURE 1.7: Forme des pores dans un CMC obtenu par PIP [Kotani *et al.*, 2002]

qui entraîne des précautions particulières quant-au flux de silicone et à la forme du réseau fibreux.

La microstructure présente souvent du silicone libre, ce qui limite le caractère réfractaire de la céramique et limite la résistance au fluage. Cependant, les avantages sont nombreux : processus très rapide, faible porosité résiduelle et grande conductivité thermique, très avantageux pour les applications de type nucléaire.

2.3 Procédé hybride PIP-CVI

Le procédé utilisé par SPS dans le programme ARCOCE est hybride PIP-CVI. Il consiste à venir consolider une première fois la préforme fibreuse par PIP, en utilisant un précurseur liquide à rendement plutôt faible. Une fois pyrolysée, la préforme n'est que très partiellement densifiée, mais peut tenir seule, sans aide d'outillages de maintien extérieur. La préforme est ensuite densifiée par CVI pour créer la matrice séquencée. Le gros avantage de ce procédé hybride est que l'outillage de maintien de la préforme n'est plus perdu à chaque pièce fabriquée, ce qui diminue fortement le prix de production d'une pièce. Dans ce procédé, l'accent est mis sur la qualité de la matrice multiséquencée pour que la cicatrisation s'effectue de façon optimale, au contraire du procédé hybride développé dans [Ortona *et al.*, 2000, Nannetti *et al.*, 2002] pour lequel la priorité est donnée à la densification maximum de la préforme fibreuse, dans le cas d'applications de type nucléaire. Les étapes sont alors inversées, commençant par une première densification type CVI puis par plusieurs cycles de PIP afin de combler au maximum le réseau poreux.

On notera que la microstructure est alors complexifiée par l'ajout d'une phase supplémentaire, des sortes de nodules de matrice Voie Liquide, qui ont des propriétés matériaux différentes des couches et fibres alentours, voir **figure 1.8**.

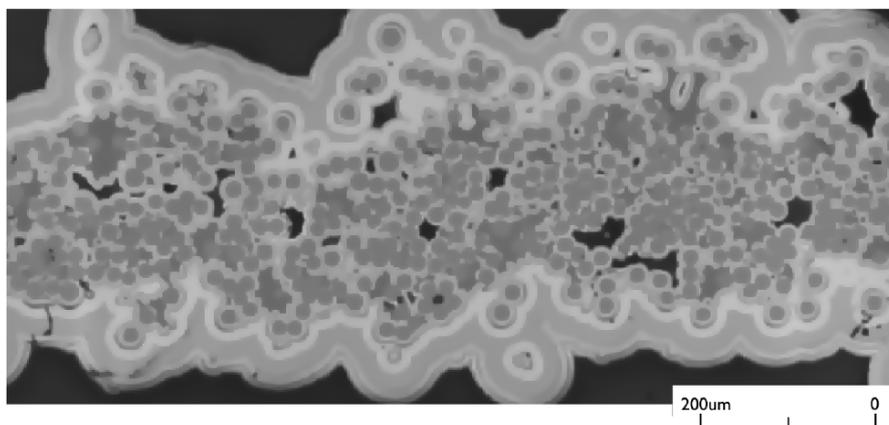


FIGURE 1.8: Microstructure d'un fil de CMC issue d'un procédé hybride PIP-CVI (source : SNECMA Propulsion Solide).

3 Mécanismes de dégradation/cicatrisation

Les mécanismes de dégradation des composites céramiques sont particulièrement complexes. En effet, en plus du réseau de fissures se créant dans la matrice fragile sous chargement mécanique ou thermomécanique, l'oxydation des constituants (interphases et fibres — en particulier lorsqu'elles sont en carbone) du composite est particulièrement importante. Elle impacte en effet directement sur la durée de vie des pièces. Ceci est dû à l'environnement dans lequel le matériau est utilisé : température élevée (de 300-1400 °C) et aux espèces chimiques présentes comme la vapeur d'eau, l'oxygène, les dégivants ... Enfin, les aspects de fissuration et d'oxydation sont très fortement liés et influent tous les deux sur la tenue mécanique du matériau dans le temps.

3.1 Fissuration et déviation de fissures

Lorsque le matériau est chargé mécaniquement, différents réseaux de fissures se développent. Ces motifs de fissuration sont complexes, mais importants, car ils forment un chemin d'accès privilégié aux espèces oxydantes vers le coeur du matériau. Un scénario a été établi dans [Ladevèze *et al.*, 1994, Ladevèze, 1995, Guillaumat et Lamon, 1996, Lamon, 2001, Fantozzi *et al.*, 2001, Letombe, 2005], schématisé **figure 1.9**. Dans un premier temps, les fissures se développent dans la matrice inter-torons et s'amorcent au niveau des macropores où il y a concentration de contraintes. Ce réseau poreux est, de par le mode de fabrication, largement ouvert sur l'extérieur. Les fissures sont dirigées

en fonction de la charge et du tissage du renfort fibreux. Une fois la matrice inter-fibres microfissurée, les torons reprennent la charge et ainsi le réseau de microfissuration se réoriente suivant les directions du tissu. C'est alors que se développe un réseau au sein des fils, orthogonal au sens des fibres pour les fils longitudinaux et parallèle aux fibres dans les torons transverses, appelé fissuration intra-torons.

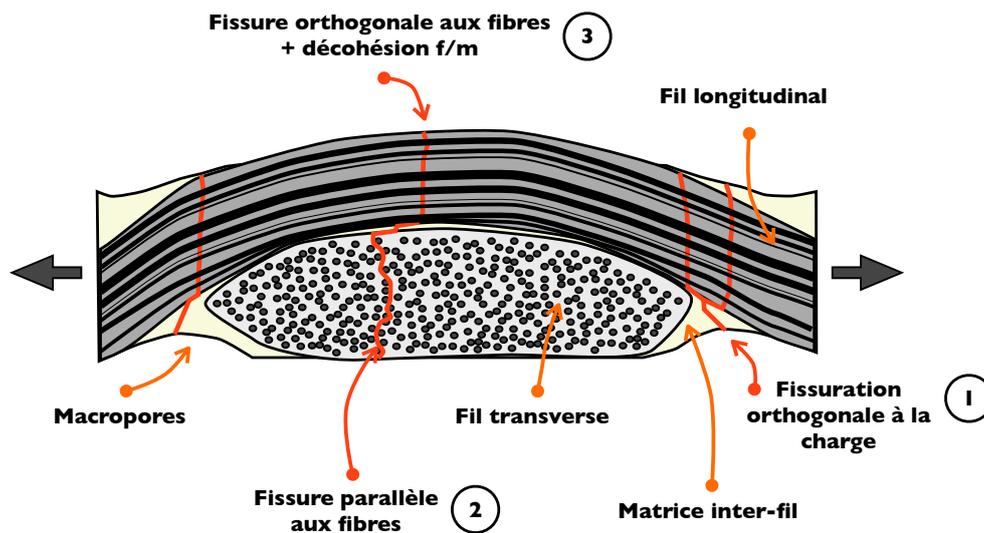


FIGURE 1.9: Schéma du réseau de fissuration.

Puis par déviation aux interphases, ce réseau se réoriente le long des fibres, cf. **figure 1.10**. Ceci est dû à l'interphase entre la fibre et la matrice. Elle est constituée d'un matériau (PyC, hex-BN) au comportement fortement anisotrope dû à sa structure cristalline feuilletée. Cette faible résistance au cisaillement permet, lorsqu'une fissure au sein de la matrice arrive au niveau d'une fibre, de la dévier le long de l'interphase, voire de la stopper. Ceci à l'avantage de retarder la rupture des fibres et donc la rupture fragile du matériau [Naslain, 2004]. C'est le mécanisme clef des CMCs, et qui permet d'obtenir un comportement « ductile » à partir de constituants fragiles et assez bien compris [Aveston *et al.*, 1971, Lamon *et al.*, 1995, Lacroix *et al.*, 2002, Martin *et al.*, 2002]. Il a cependant nécessité de nombreuses études supplémentaires en vue de son application dans le cadre industriel [Naslain, 1998, Rebillat *et al.*, 2000, Carrère *et al.*, 2000]. De plus, les microfissures peuvent s'ouvrir ou se fermer suivant le chargement, d'où une réponse du matériau très différente en traction et en compression [Ladevèze, 1995]. La chute du module d'Young provient des deux premières familles de fissures qui déchargent progressivement la matrice, en rechargeant les torons longitudinaux.

Une revue détaillée dans [Lamon, 2001] montre l'importance de la microfissuration sur le comportement du matériau qui dépend du rapport des propriétés mécaniques des fibres et de la matrice et qui influe directement sur la répartition de la charge entre fibres et matrice. La formation des fissures dans la matrice, de même que la rupture individuelle

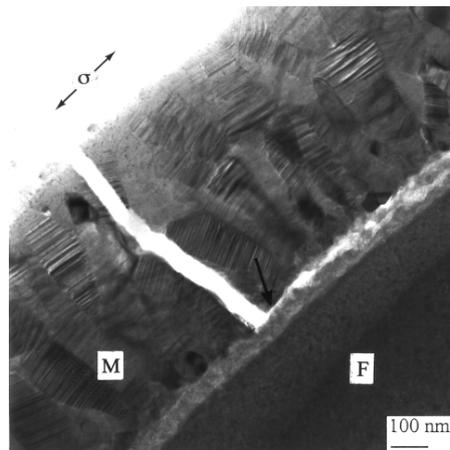


FIGURE 1.10: Déviation de la fissure au droit de la fibre, le long de l'interphase de PyC. [Boitier *et al.*, 2002]

des fibres, est un phénomène aléatoire qui résulte de la présence d'une répartition aléatoire de défauts au sein du matériau et qui agissent comme amorces en créant des concentrations de contrainte. Il a été montré que la fissuration dépend beaucoup de la microstructure du matériau [Guillaumat et Lamon, 1999] et ce en particulier pour les composites obtenus par CVI qui ont une structure très hétérogène : torons, macropores ainsi que micropores au sein des torons. Ceci crée des faciès de rupture de toron particulièrement complexes, cf. **figure 1.11**.

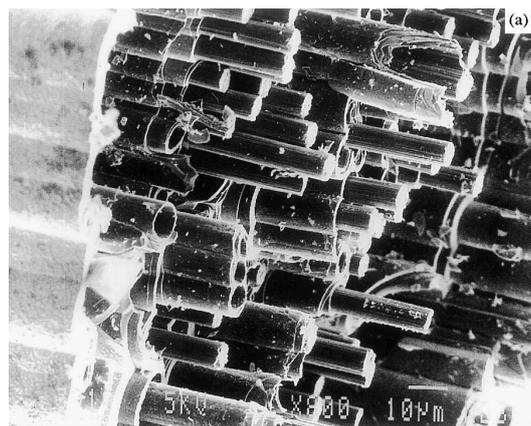


FIGURE 1.11: Faciès de rupture d'un toron [Lamouroux *et al.*, 1999]. On notera la déviation de la fissure aux différentes couches de la matrice.

3.2 Oxydation des CMCs

L'oxydation est le point faible des CMCs. Elle est complexe du fait de l'existence une multitude de composés chimiques (matrice multicouche, PyC, fibres C ou SiC) et d'environnements complexes (tant au niveau des chargements thermomécaniques que des espèces chimiques oxydantes présentes). De plus, les produits obtenus par oxydation peuvent modifier la cinétique d'oxydation et combler les fissures. Ce dernier phénomène est appelé cicatrisation.

3.2.1 Dégradation et oxydation des fibres SiC

Il existe plusieurs générations de fibres en carbure de silicium ainsi que plusieurs fabricants ce qui implique un grand nombre de fibres ayant leur propre composition chimique. Les phénomènes d'oxydation et de dégradation sont dépendants de cette composition et donc différents d'une fibre à l'autre. En effet, la présence de carbone libre, de SiC en phase amorphe ou en cristaux SiC- β et d'oxygène (et des espèces minoritaires), va plus ou moins favoriser l'oxydation [Bunsell et Berger, 2000, Mazerat *et al.*, 2010]. Nous allons donc ici nous focaliser sur les fibres Hi-Nicalon et Nicalon qui sont utilisées par SPS pour ses CMCs.

Oxydation Les différentes phases constituant les fibres sont oxydées. Les principales réactions sont [Takeda *et al.*, 1998] :

- L'auto-oxydation de $Si-C-O$ génère des nouveaux défauts au sein de la fibre. Ceci réduit la stabilité thermique des fibres, en particulier Nicalon. En effet, après exposition à des températures supérieures à 1400 °C, la contrainte à rupture des fibres décroît fortement, et ce, y compris sous atmosphère inerte (*i.e.* sans oxygène).
- L'oxydation du SiC en SiO_2 génère aussi de nouveaux défauts autour de la fibre et réduit plus rapidement la stabilité chimique des fibres que la réaction précédente (chute de contrainte à rupture identique que précédemment mais pour des températures de seulement 1000-1200 °C, sous atmosphère oxydante), cf. **figure 1.12**.
- L'oxydation du carbone libre.

La cinétique de ces réactions dépend de la température, de la pression partielle d'oxygène [Takeda *et al.*, 1998] et de vapeur d'eau [Opila et Hann Jr, 1997, More *et al.*, 2000]. Toutefois, la contrainte à rupture reste stable jusqu'à 1000 °C. On peut résumer, suivant l'ordre d'apparition en température, ces processus chimiques comme montrés sur la **figure 1.13**.

Dégradation physico-chimique Paradoxalement, des ruptures de fibres apparaissent pour des températures inférieures à 1000 °C [Gauthier et Lamon, 2009]. Ces ruptures sont dites différées, car elles interviennent longtemps après l'application du chargement extérieur. Ces ruptures résultent d'un processus différent de la rupture des fibres en C, qui rompent par consommation de matière. Les fibres SiC se rompent à cause d'un phénomène

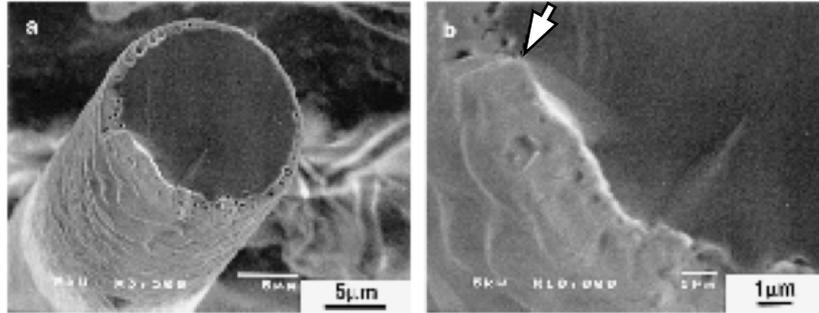


FIGURE 1.12: Micrographie d'une fibre Nicalon après oxydation à l'air à 1400 °C pendant 10h ; a) surface de rupture et b) pores créés à la surface de la fibre ainsi que l'initiation de la rupture (flèche) [Takeda *et al.*, 1998]

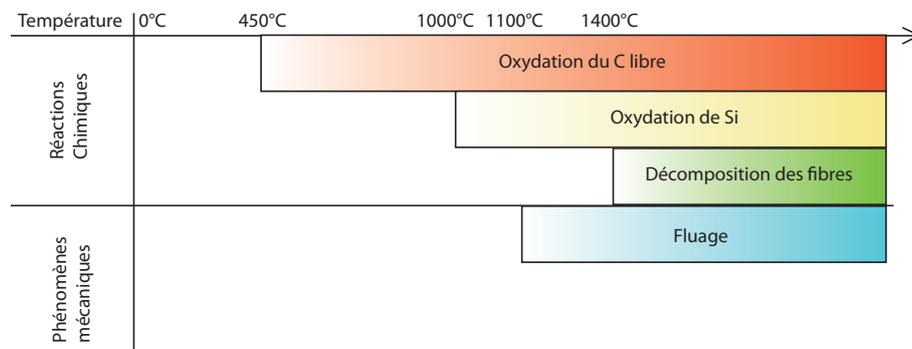


FIGURE 1.13: Récapitulatif des réactions chimiques pour les fibres Nicalon et Hi-Nicalon

dit de « propagation sous-critique de défaut de surface », sous l'effet de l'oxydation [Laforêt et Lamon, 2008, Gauthier et Lamon, 2009]. La propagation sous-critique correspond à l'avancée du front de fissure (défaut) par oxydation du front, favorisée par la contrainte qui « ouvre » la pointe de fissure [Lawn, 1974, Wiederhorn, 1975]. Cette propagation a lieu pour une concentration des contraintes inférieure à la concentration critique de propagation du matériau sain [Wachtman, 1996]. Par ailleurs, l'oxydation de la surface de la fissure peut former une couche d'oxyde protectrice $SiO_{2(s)}$ qui va limiter l'accès de l'oxygène en front de défaut : c'est la passivation. Cette passivation n'est pas obligatoirement présente, et dépend de la pression partielle d'oxygène [Takeda *et al.*, 1998] et de vapeur d'eau [Opila et Hann Jr, 1997, More *et al.*, 2000].

Il y a compétition entre les phénomènes d'oxydation en pointe de fissure et de passivation des surfaces et, selon les températures et atmosphères, deux régimes peuvent être définis :

- Le régime dit contrôlé par la réaction (reaction controlled), pour lequel l'oxygène est en excès en pointe de défaut, et l'oxydation a lieu librement et pilote l'avancée du défaut.

- Le régime dit contrôlé par la diffusion (diffusion controlled), pour lequel la passivation a lieu. L'oxygène doit alors diffuser à travers la couche d'oxyde pour atteindre le front de défaut, étant aussi consommé au passage par les lèvres de la fissure.

Ces réactions sont importantes, car elles pilotent la dégradation des propriétés mécaniques des fibres, soit en diminuant les propriétés mécaniques locales du matériau, soit en formant des pores (échappement des espèces gazeuses) qui vont faire office d'initiation de fissure. Ces phénomènes sont mis en évidence par des essais de "fatigue statique", par exemple sur minicomposites. Ils correspondent à la rupture différée sous chargement statique, à déformation quasi-constante (au contraire du fluage) et pour lesquels aucune évolution de l'endommagement n'est observée. Ce phénomène a été et est toujours très étudié au niveau des fibres [Gauthier et Lamon, 2009, Gauthier *et al.*, 2009, Ladevèze et Genet, 2010] mais aussi au niveau de minicomposites [Wachtman, 1996, Evans *et al.*, 1996].

3.2.2 Phénomène de « fragilisation »

Outre l'influence directe de l'oxydation sur les propriétés mécaniques locales du matériau (fissuration sous-critique par exemple) et la disparition de l'interphase, il existe des effets plus pernicious comme celui de fragilisation (« embrittlement »). Largement étudié, ce phénomène correspond à la diminution de la résistance du composite en environnement oxydant et/ou corrosif [Evans *et al.*, 1996]. Il est très présent dans les CMCs utilisant des interphases du type BN ou carbone dopé au bore [Lin et Becher, 1997], et ce pour des températures intermédiaires (450 °C - 900 °C). Il y a en effet oxydation de l'interphase, par exemple BN, qui va former un verre de type B₂O₃. Celui-ci va alors réagir avec le SiC des fibres et de la matrice, et par un processus complexe, laisser un dépôt solide de SiO₂ [Ogbuji, 1998] [Ogbuji, 2003].

Ce dépôt va « ponter » (en quelque sorte cimenter) les fibres entre elles et avec la matrice et ainsi rendre le matériau beaucoup plus fragile. Effectivement, lorsqu'une fibre va casser, la fissure se propagera aux fibres pontées adjacentes directement, sans être déviée par une quelconque interphase. La réduction des quantités à rupture peut-être importante, jusqu'à 60 % de déformation et 90 % de contraintes [Ogbuji, 1998] à 800 °C.

On notera que ce type de phénomène n'est pas absent des composites avec interphase en PyC et autocicatrisant, où le verre borosilicaté issu de l'oxydation de Si-B-C a tendance d'une part à dissoudre les fibres et à les « cimenter »/ponter entre elles comme le montre les tests effectués à 1200 °C dans [Quemard *et al.*, 2007a].

3.2.3 Oxydation de la matrice SiC

La matrice de carbure de silicium, tout comme les fibres SiC, subit une oxydation dont les équations de réaction sont très proches de celle des fibres. En présence de vapeur d'eau, les travaux d'Opila [Opila et Hann Jr, 1997] montrent une augmentation de la cinétique de l'oxydation du SiC d'un facteur de 5 à 20. De plus en présence de vapeur d'eau, le SiO₂ peut se volatiliser significativement à partir de 1100-1200 °C. La cinétique

est dépendante de la température, de la pression partielle de vapeur d'eau ainsi que de la vitesse des gaz corrosifs. Cette volatilisation du SiO_2 , couplée à l'oxydation de Si qui le crée, peut mener à la récession du SiC.

3.3 Cicatrisation

Comme l'étude du comportement chimique des fibres et de la matrice le montre, l'oxydation est un phénomène d'une grande importance sur le comportement des CMCs et sur leur durée de vie. Une protection efficace contre la diffusion au coeur du matériau de l'oxygène et des autres espèces chimiques corrosives (vapeur d'eau par exemple) est nécessaire afin de prolonger la durée de vie en environnement complexe.

Les solutions les plus élaborées reposent sur le constat que les oxydes occupent généralement un volume plus important que l'espèce dont ils sont issus et qu'ils présentent un coefficient de diffusion vis-à-vis de l'oxygène faible. Cette expansion permet de créer un bouchon qui comble la fissure. Ceci est complété par le fait que ces oxydes sont souvent sous forme de verre où leur viscosité (dépendante de la température bien entendu) permet un écoulement dans la fissure et donc la progression du bouchon dans la fissure. C'est ce que l'on nomme couramment la cicatrisation.

Une des premières solutions à avoir été développée est l'ajout d'un revêtement à la surface du composite. Ce type de protection consiste en un dépôt de SiC, voire d'un dépôt multicouche ($\text{SiC} - \text{C/B}$ par exemple), effectué par CVD. Il a été étudié pour la protection du graphite ou de composite C/C afin d'améliorer leur résistance à l'oxydation à haute température [Fergus et Worrel, 1995] [Aoki *et al.*, 2001] mais a aussi été appliqué aux CMCs [Cheng *et al.*, 2001].

3.3.1 Concept des matrices multi-séquencées

Une autre solution est d'intégrer directement au sein de la matrice des composés chimiques qui vont réagir avec l'oxygène et ainsi :

- consommer une partie de l' O_2 par réaction d'oxydation avant que celui-ci arrive aux fibres,
- « boucher » les fissures par expansion volumique et grâce à la viscosité du verre formé par l'oxyde.

Il a déjà été évoqué que les cinétiques chimiques et la viscosité des verres utilisés pour la cicatrisation dépendent de la température ainsi que de la présence d'autres espèces chimiques comme la vapeur d'eau ou le bore. Comme résumé dans [Guo *et al.*, 1999], la conception d'un système d'autocicatrisation doit prendre en compte l'intervalle thermique d'utilisation de chacun des « cicatrisants » afin de couvrir au mieux la plage thermique d'utilisation du matériau final.

Si plusieurs méthodes existent afin d'intégrer des cicatrisants au sein de la matrice, par exemple combler les macropores par infiltration de B_2O_3 et SiO_2 [Cheng *et al.*, 2001] ou en utilisant une charge de type SiB_4 [Tong *et al.*, 2007], celle qui nous intéresse particulièrement et qui est utilisée par SNECMA Propulsion Solide, est nommée matrice mul-

tiséquencée. Elle consiste en un empilement de couches de SiC , B_4C (cicatrisant basse température) et $Si - B - C$ (cicatrisant à moyenne température), **figure 1.14**.

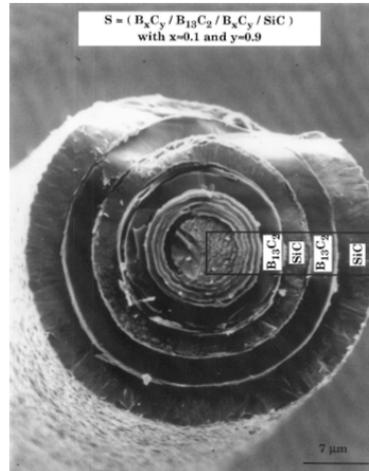


FIGURE 1.14: SEM d'une matrice multi-séquencée déposée sur une seule fibre de carbone [Lamouroux *et al.*, 1999].

De telles matrices présentent nombre d'intérêts à la fois mécaniques et de résistances à l'oxydation. Mécanique tout d'abord, car le fait d'avoir un grand nombre d'interfaces dans le matériau favorise la déviation des fissures et augmente ainsi les zones de frottement. Cela a pour conséquence de dissiper plus d'énergie par friction et de mieux contrôler la propagation des fissures.

De plus, du point de vue de la diffusion de l'oxygène, ce type de matériau augmente considérablement la longueur et la tortuosité du chemin de diffusion et la surface de matrice en contact avec l'oxygène. Cela contribue à diminuer la concentration d'oxygène accédant aux fibres et aux interphases fibre-matrice. De plus, les zones d'action des verres de cicatrisation ne sont plus les mêmes, comme le montre la **figure 1.15**, où les zones à cicatriser sont bien moins ouvertes dans le cas de la matrice multicouche. Enfin, l'ajout de couches fusible PyC au séquençage permet une meilleure répartition des efforts au sein du matériau.

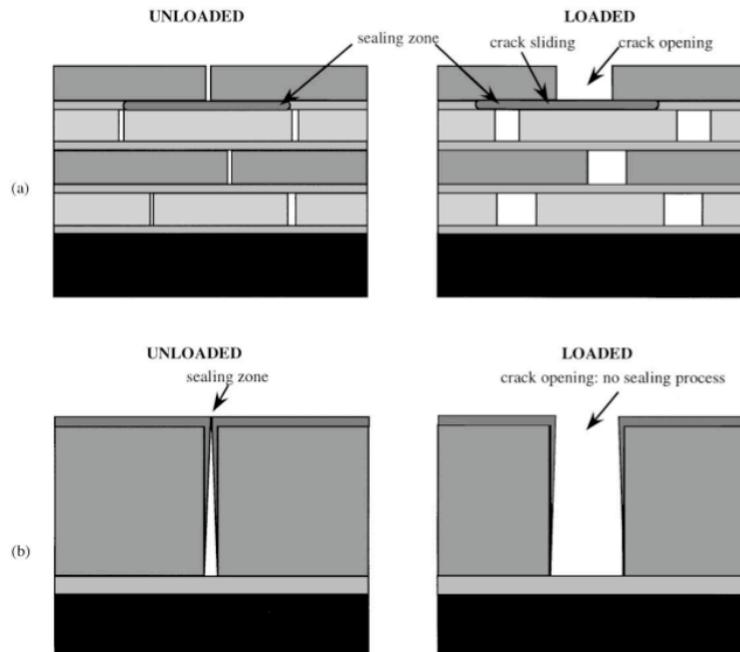


FIGURE 1.15: Schéma d'ouverture des fissures avec et sans chargement pour une matrice multi-séquencée et mono-couche [Lamouroux *et al.*, 1999].

4 Bilan

Cette revue sur les CMCs a dressé le portrait concis, mais aussi exhaustif que possible, des composites à matrice céramique de type SiC/SiC , de leurs applications à leurs mécanismes de dégradation/cicatrisation. Ces matériaux sont complexes, tant du point de vue de la microstructure que du comportement physico-chimique. Cet inventaire permet d'autre part, de préciser les axes du diagramme « Echelle-Constituants-Distribution », introduit au début de cette thèse afin de situer les travaux antérieurs. Le plan « Echelle-Constituants » peut ainsi être défini au regard des constituants perçus à une échelle d'observation/modélisation donnée, **figure 1.16**. Cela permet d'illustrer le fait que le modèle macro de première génération [Ladevèze, 1983, Gasser *et al.*, 1998] se situe à l'échelle de la pièce et décrit des dégradations à l'échelle de la cellule de tissu. La version ultérieure [Ladevèze *et al.*, 2001a, Ladevèze, 2002] s'affine en décrivant les dégradations au niveau des torons ainsi qu'en séparant les différents types/sources d'endommagement. En particulier, la partie physico-chimique du modèle de DDV dans [Letombe *et al.*, 2003, Cluzel *et al.*, 2009] s'appuie sur un modèle unidimensionnel à l'échelle du groupe de fibre. De même, le plan « Echelle-distribution » **figure 1.17** peut être précisé, sur lequel on retrouve différentes textures de tissage et les distributions spatiales de fibres utilisées pour différents matériaux et modélisations. En particulier le modèle macro est identifié en fonction du tissage, guipex dans le cas d'ARCOCE.

Enfin les mécanismes de dégradation/cicatrisation sont rassemblés sur la **figure 1.18**.

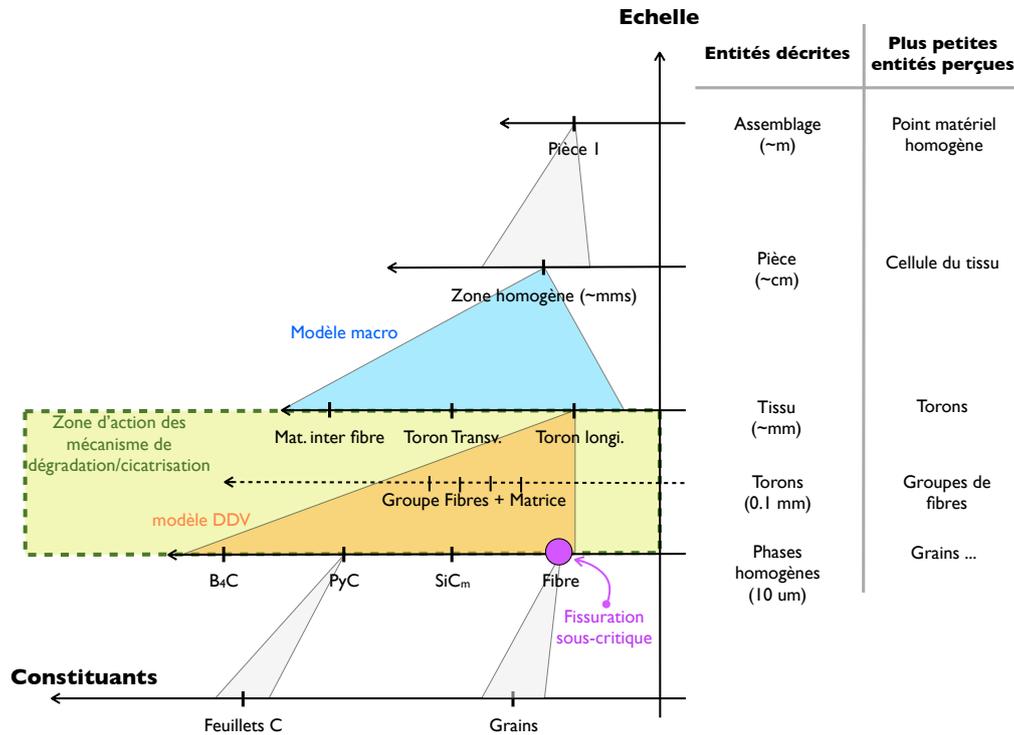


FIGURE 1.16: Détail du plan Echelle - Constituants.

Les dépendances à la température sont illustrées par les gradients de couleur. Dans le cas du programme ARCOCE, la température sensible de fonctionnement se situe à 450-500 °C, pour laquelle les phénomènes de cicatrisation sont absents (ou du moins, avec une cinétique très faible).

Le point clef est que les phénomènes importants du point de vue de la durée de vie – réseau de fissuration et déviation de fissure, oxydation et cicatrisation – apparaissent au niveau du fil, zone grisée sur la **figure 1.16**. C'est pourquoi la mise en place d'un modèle à cette échelle semble pertinent. De plus, le bestiaire des mécanismes a mis en avant l'interdépendance des phénomènes de fissuration et d'oxydation/cicatrisation à l'échelle du fil. La prédiction efficace de la durée de vie passe donc par une prédiction efficace de la fissuration du toron.

Les challenges scientifiques sont importants, de par la complexité de la microstructure à simuler et sa dépendance au procédé de fabrication. Le trajet de fissuration est de même compliqué, avec des déviations multiples aux différentes interphases de PyC. Il sera donc nécessaire dans le modèle du toron de pouvoir décrire finement la microstructure, afin de bien appréhender la distribution des contraintes et les trajets de fissuration possibles.

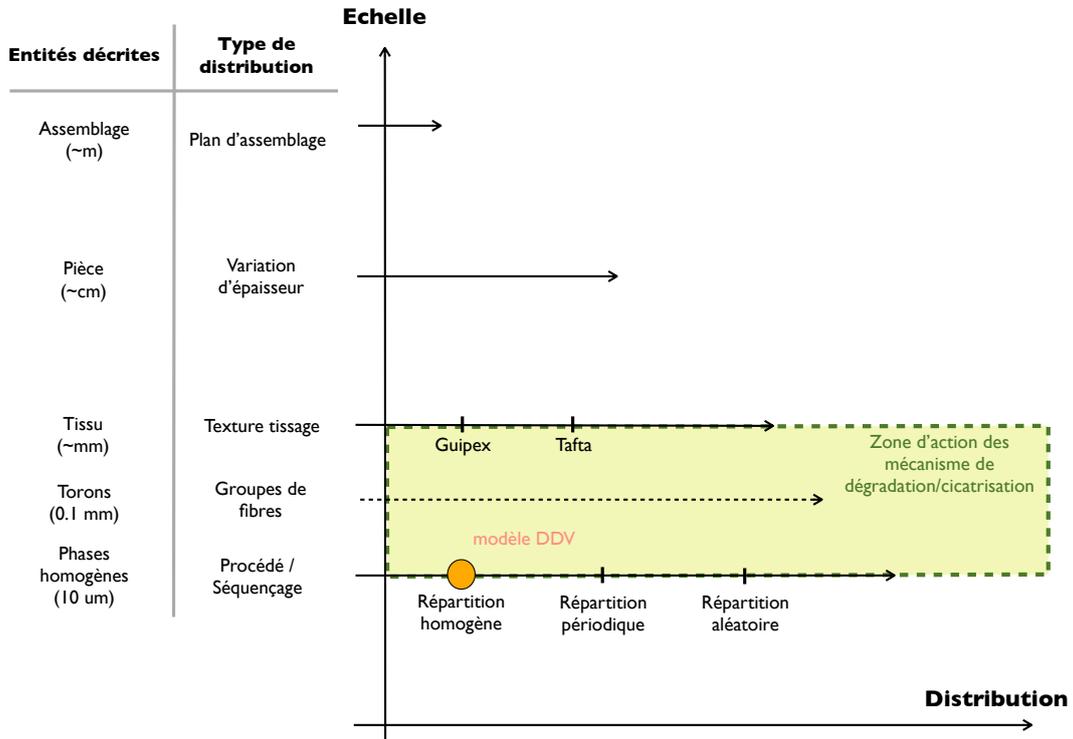


FIGURE 1.17: Détail du plan Echelle - Distribution.

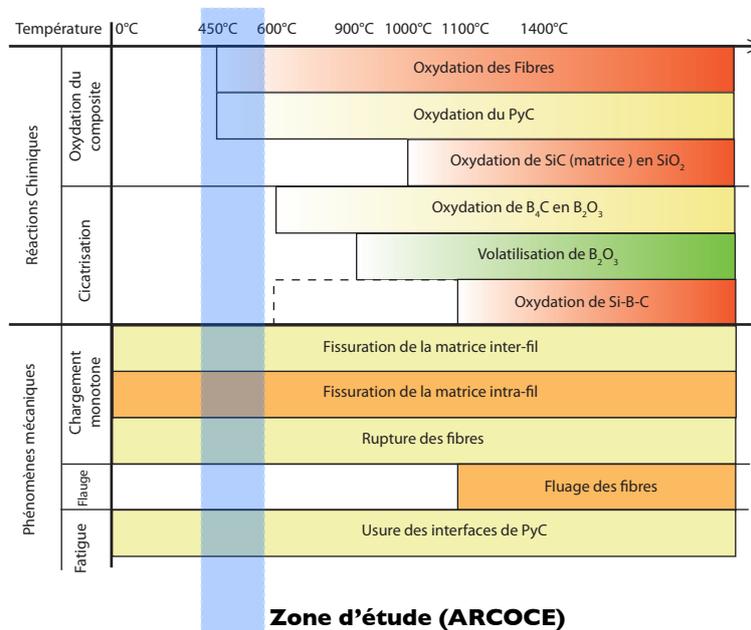


FIGURE 1.18: Carte des phénomènes rencontrés en atmosphère sèche. (Les gradients de couleur indiquent la dépendance de la cinétique vis-à-vis de la température.)

Chapitre 2

Les méthodes et stratégies multiéchelles

DANS ce chapitre, une étude bibliographique concernant les stratégies de calcul multiéchelles couramment utilisées pour la modélisation d'une structure complexe est présentée. Les points forts et les limitations de chacune des approches sont exposés compte tenu du cadre et des objectifs de notre étude.

Sommaire

1	Décomposition de domaine et sous-structuration	31
1.1	Cadre général	31
1.2	Les différentes approches	32
1.3	Bilan	35
2	Homogénéisation	35
2.1	Principes généraux	35
2.2	Homogénéisation des milieux périodiques	36
2.3	Non linéarités et éléments finis multiniveaux	38
2.4	Bilan	40
3	Enrichissement et Superposition de modèles	41
3.1	Enrichissement hiérarchique et multigrilles	41
3.2	Approche multiéchelle variationnelle	44
3.3	Superposition de modèles	45
3.4	Bilan	48
4	Enrichissement cinématique	48
4.1	Méthodes de partition de l'unité	49

4.2	XFEM/GFEM	50
4.3	Méthode des discontinuités fortes (SDA)	56
4.4	Bilan	57
5	Conclusion et rappel des objectifs	57

L'objectif de ces travaux est de modéliser le fil, et de prédire sa fissuration. Le fil possède une microstructure complexe regroupant typiquement quelques centaines de fibres, plusieurs couches matricielles différentes, des pores et des nodules de voie liquide. Pour pouvoir mettre en place un modèle du fil et de sa fissuration, il est nécessaire d'utiliser une méthode adaptée, capable de gérer à la fois la finesse de description nécessaire et de limiter le coût numérique de la résolution d'un tel modèle. La littérature propose de nombreuses méthodes pour cela, de la stratégie de résolution aux modèles multiéchelles. L'aspect multiéchelle peut intervenir à plusieurs niveaux et c'est pourquoi il peut être utile de les reclasser en fonction des hypothèses sur lesquelles elles se basent. Le classement proposé est le suivant :

- **Aucune hypothèse a priori** : Ces méthodes ne se basent sur aucune hypothèse multiéchelle particulière. Ceci peut être dû au fait qu'il n'est pas possible de considérer que les phénomènes et/ou détails structuraux ont des effets localisés. Une description fine est alors utilisée sur tout le domaine d'étude. Le problème qui en résulte étant alors souvent grand, l'accent est mis sur une stratégie de résolution efficace, par exemple en décomposant le problème global en plusieurs petits problèmes résolus séparément. L'aspect multiéchelle apparaît dans la résolution. Les méthodes de décomposition de domaines avec ou sans recouvrement rentrent dans ce cadre.
- **Séparation d'échelle structure-microstructure** : Dans ce cas, il est considéré que la longueur caractéristique de la microstructure est très petite par rapport à celle de la structure. Il est ainsi possible d'obtenir un comportement moyen pour la structure, qui tire parti de l'information que l'on a de la microstructure. C'est dans ce cadre que s'inscrivent les méthodes basées sur la théorie de l'homogénéisation. On notera que certaines méthodes de cette catégorie se rapprochent beaucoup des stratégies de résolution numériques multiéchelles de la catégorie précédente.
- **Décomposition multiéchelle du champ inconnu** : Ces méthodes se basent généralement sur la décomposition du champ inconnu en une partie macroscopique, à grande longueur de variation, et une partie microscopique, représentant les phénomènes locaux. L'idée est alors de venir enrichir la partie macroscopique avec un modèle à l'échelle inférieure. Les moyens d'y parvenir sont nombreux, de la méthode de partition de l'unité au couplage/superposition de modèles, en passant par la décomposition explicite des problèmes sous leur forme variationnelle.

Évidemment, ce classement n'est pas strict, et il existe des méthodes à cheval entre plusieurs catégories, ou pouvant être interprétées de plusieurs façons. En plus des limitations et difficultés propres à chacune de ces méthodes, deux points clefs nous intéresseront au cours de cette revue :

- la description de la microstructure, de sa finesse et de la facilité avec laquelle celle-ci peut varier en fonction de la morphologie ;
- le coût numérique de la simulation.

Dans un premier temps, fixons le problème que l'on souhaite traiter ainsi que les notations utilisées tout au long de la revue. On s'intéresse à l'étude d'un domaine Ω soumis à des efforts imposés F_d sur $\partial\Omega_F$, à des déplacements imposés u_d sur $\partial\Omega_u$, **figure 4.2**. Ce domaine possède une microstructure, composée d'hétérogénéités notées P_i . Le domaine

est, aussi, soumis à un effort volumique f_d dans Ω , pouvant par exemple correspondre à un chargement thermique. De plus, on s'intéresse à la réponse statique, ou quasi-statique du domaine. Le comportement des différentes phases et hétérogénéités sera considéré élastique linéaire fragile et le tenseur de Hooke, dépendant du point courant $x \in \Omega$, sera noté $\mathbf{K}(x)$.

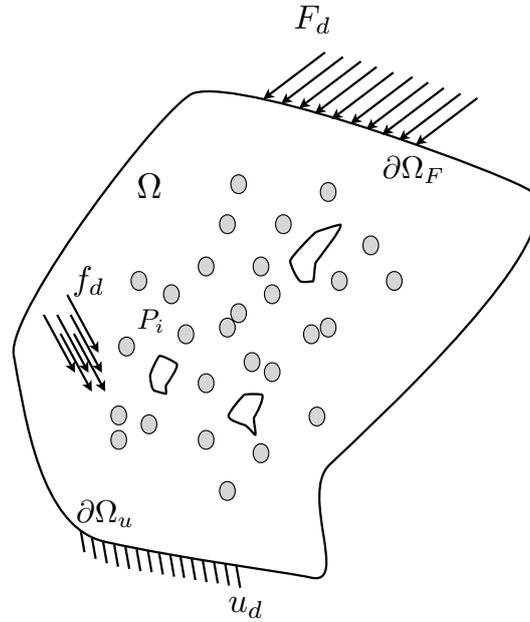


FIGURE 2.1: Schématisation du problème de référence.

On note le champ de déplacement u , le champ de contrainte σ et le champ de déformation ε . Le problème de référence s'écrit alors :

Problème 2.1: Trouver $(u, \sigma) \in \mathcal{U} \times \mathcal{S}$ vérifiant :

– l'admissibilité cinématique :

$$u = u_d \text{ sur } \partial\Omega_u$$

– l'admissibilité statique :

$$\operatorname{div}(\sigma) = f_d \text{ dans } \Omega$$

$$\sigma n = F_d \text{ sur } \partial\Omega_F$$

– la loi de comportement :

$$\sigma = \mathbf{K}\varepsilon \text{ dans } \Omega \text{ avec } \varepsilon = \varepsilon(u) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T)$$

où \mathcal{U} et \mathcal{S} sont les espaces à énergie finie classiquement utilisés en mécanique des milieux continus pour les déplacements et les contraintes respectivement.

1 Décomposition de domaine et sous-structuration

De façon assez générale, les méthodes de décomposition de domaine consistent en la résolution d'un problème aux conditions limites sur un domaine découpé. Ces méthodes sont largement utilisées dans les calculs de larges structures pour lesquelles une description fine est nécessaire partout et donc menant à un problème avec un grand nombre d'inconnues. Elles permettent de partager la résolution en plusieurs problèmes couplés, mais définis sur des domaines plus petits. Avec l'aide des ordinateurs et/ou clusters actuels, il est ainsi possible d'en faire la résolution en parallèle. On notera qu'il existe des méthodes de décomposition de domaine avec et sans recouvrement. Nous nous concentrerons uniquement sur les méthodes sans recouvrement, pour lesquels une revue quasi exhaustive peut être trouvée dans [Gosselet et Rey, 2006].

1.1 Cadre général

Afin de présenter la formulation des méthodes de décomposition sans recouvrement, décomposons notre problème de référence en deux sous domaines $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$. On définit à l'interface Γ entre les deux sous domaines ce qu'on nomme les efforts de cohésion $\lambda^{(1)}$, $\lambda^{(2)}$, et leurs quantités duales, les déplacements $u_\Gamma^{(1)}$ et $u_\Gamma^{(2)}$. Ils assurent la cohésion des deux domaines, Fig. 2.2.

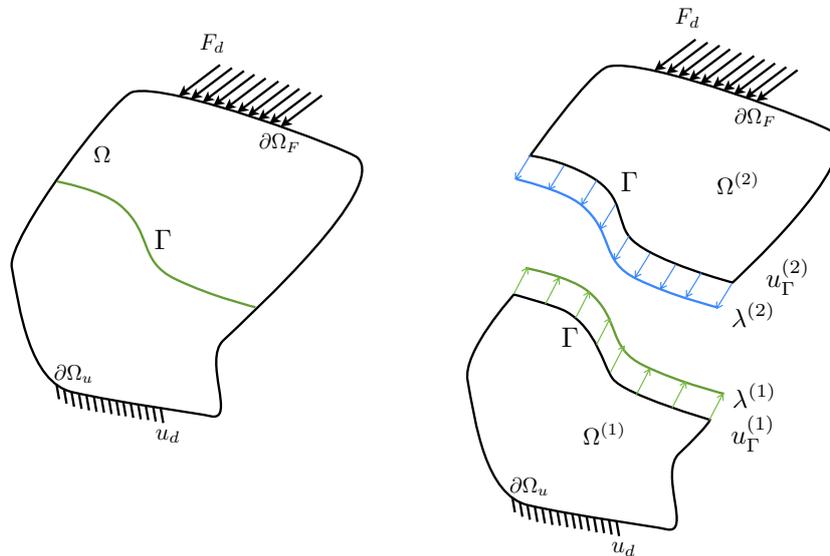


FIGURE 2.2: Schématisation du problème de décomposition en deux sous-domaines.

L'énergie potentielle totale E_{tot} peut alors s'écrire comme la somme de l'énergie po-

tentielle de chacun des sous-domaines E_1 et E_2 , définies par :

$$E_1 = \int_{\Omega^{(1)}} \boldsymbol{\sigma}_1 : \boldsymbol{\varepsilon}_1 d\Omega - \int_{\Gamma} \lambda^{(1)} u_{\Gamma}^{(1)} dS \quad (2.1)$$

$$E_2 = \int_{\Omega^{(2)}} \boldsymbol{\sigma}_2 : \boldsymbol{\varepsilon}_2 d\Omega - \int_{\Gamma} \lambda^{(2)} u_{\Gamma}^{(2)} dS - \int_{\Omega_F} F_d u_{\Gamma}^{(2)} dS \quad (2.2)$$

Pour assurer la continuité et l'équilibre des sous-domaines, les quantités d'interface doivent vérifier :

$$\lambda^{(1)} + \lambda^{(2)} = 0 \quad (2.3)$$

$$u_{\Gamma}^{(1)} = u_{\Gamma}^{(2)} \quad (2.4)$$

Nous allons supposer par la suite que le champ de déplacement inconnu est discrétisé grâce à la méthode des éléments finis (MEF) [Zienkiewicz et Taylor, 2000] sur chacune des sous-structures. On peut montrer que la formulation faible du problème défini sur $\Omega^{(i)}$ mène aux équations matricielles suivantes (avec (i) indiquant la sous-structure i et Γ les quantités à l'interface Γ) :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ii}^{(i)} & \mathbf{K}_{i\Gamma}^{(i)} \\ \mathbf{K}_{\Gamma i}^{(i)} & \mathbf{K}_{\Gamma\Gamma}^{(i)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_i^{(i)} \\ \mathbf{u}_{\Gamma}^{(i)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_i^{(i)} \\ \mathbf{f}_{\Gamma}^{(i)} + \lambda_{\Gamma}^{(i)} \end{bmatrix}, \quad i \in (1, 2) \quad (2.5)$$

$$\mathbf{u}_{\Gamma}^{(1)} = \mathbf{u}_{\Gamma}^{(2)} \quad (2.6)$$

$$\lambda_{\Gamma}^{(1)} + \lambda_{\Gamma}^{(2)} = 0 \quad (2.7)$$

où \mathbf{K} désigne la matrice de rigidité, \mathbf{u} , les déplacements nodaux et \mathbf{f} les efforts nodaux. À partir de là, les problèmes par sous-structure sont résolus de façon adaptée (solveurs de Krylov par exemple) puis les conditions de continuité et d'équilibre sont appliquées sur les interfaces. Les deux conditions ne peuvent cependant pas être strictement imposées en même temps à l'interface, les problèmes définis sur les sous domaines ne seraient alors plus mécaniquement bien posés. Ceci conduit à en imposer une et à vérifier l'autre au cours de la résolution. Deux types de méthodes apparaissent alors : les méthodes dites primales, pour lesquelles la condition en déplacement (2.4) est imposée et les méthodes dites duales où l'équilibre des efforts d'interface (2.3) est imposé. Il existe aussi des méthodes dites mixtes, qui permettent d'imposer une combinaison des deux conditions en efforts et déplacements simultanément. Les méthodes primales et duales sont cependant très semblables, l'algorithme global étant quasi identique. La différenciation se fait principalement, outre la formulation en déplacement ou en effort, sur le choix du préconditionneur et le point d'entrée dans l'algorithme de résolution.

1.2 Les différentes approches

1.2.1 Méthode primale

Les méthodes primales consistent à se donner un déplacement d'interface continu (c'est à dire vérifiant (2.4)). On cherche alors l'équilibre des efforts (2.3). Les problèmes

par sous-structure, condensés aux interfaces, s'écrivent à l'aide du complément du Schur (primal) des sous-structures \mathbf{S} et d'un second membre condensé aux interfaces \mathbf{b} (ici, écrit pour deux sous-structures) :

$$\left[\mathbf{S}_\Gamma^{(1)} + \mathbf{S}_\Gamma^{(2)} \right] \mathbf{u}_\Gamma = \mathbf{b}_\Gamma^{(1)} + \mathbf{b}_\Gamma^{(2)} \quad (2.8)$$

Plusieurs techniques peuvent alors être envisagées pour la résolution de ces problèmes par sous-structure. Une approche directe est possible. Il faut alors calculer explicitement le complément de Schur de chaque sous-structure, les assembler et inverser la matrice globale, qui est souvent à large bande. Ce n'est donc pas une approche stratégique. Cela s'avère trop coûteux pour de grands problèmes. Le but est de mettre en jeu des contributions locales, par sous-structure ou par interface. Une résolution itérative est alors généralement utilisée, à l'aide des solveurs de Krylov (par exemple : gradient conjugué ou GMRES). Dans ces méthodes, le calcul explicite de l'inverse du complément de Schur global n'est plus nécessaire, ni même son assemblage. L'inverse du complément de Schur global est approché par les compléments de Schur inverses (donc duaux) de chaque sous-structure. Cette approximation sert de préconditionneur dans la méthode.

Ceci mène à la résolution de problèmes aux conditions limites de type Neumann sur chacune des sous-structures, qui ne sont pas nécessairement bien posés. Dans l'approche BDD, *Balancing Domain Decomposition* [Mandel, 1993], une phase macroscopique d'équilibrage des résidus est ajoutée, permettant de pré-équilibrer en résultantes et en moments, les efforts d'interfaces sur chaque sous-domaine. Dit autrement, ceci correspond à projeter le résidu sur les modes rigides des sous-structures. Cela est fait par l'ajout dans la procédure d'un problème auxiliaire macroscopique et qui fait de cette méthode une méthode multi-échelle.

1.2.2 Méthode duale

Les méthodes duales, comme la méthode FETI [Farhat et Roux, 1991], reposent sur la vérification *a priori* de l'équilibre du champ d'effort aux interfaces. Contrairement aux méthodes primales, pour lesquelles on ajoute la condition d'équilibre par sous-structure dans la résolution, cette condition est présente d'office dans les méthodes duales, garante de l'existence de la solution. Une méthode itérative est alors utilisée, de type gradient conjugué projeté. La phase de projection correspond à la contrainte d'équilibre des sous-domaines, ce qui peut être considéré comme un problème macroscopique garantissant la continuité en moyenne des modes rigides des sous domaines aux interfaces. De même que pour les méthodes primales, l'utilisation d'un préconditionneur est nécessaire, mais il dépend souvent du problème traité, ce qui freine la généralisation de ces méthodes.

Plusieurs évolutions ont été proposées, par exemple la méthode FETI2 [Farhat *et al.*, 2000], où le problème macroscopique est formulé de manière à imposer des conditions supplémentaires sur le déplacement à l'interface, typiquement la continuité en moyenne. Ces travaux ont donné naissance à la méthode hybride FETI-DP (*Dual-primal FETI*), [Farhat *et al.*, 2001].

1.2.3 Méthode mixte

Il existe plusieurs approches mixtes, basées sur des formalismes différents. De façon générale, une relation combinant efforts et déplacement est imposée aux interfaces, par l'introduction d'inconnues supplémentaires. Suivant le type de relation imposée, ces méthodes peuvent être de type Lagrangien augmenté [Fortin et Glowinski, 1983], l'approche « FETI-DP », ou de type Lagrangien augmenté « 2 fois », comme les méthodes type LaTIn. Nous nous focaliserons sur ces dernières. L'approche micro-macro [Ladevèze et Dureisseix, 2000, Ladevèze *et al.*, 2001b, Ladevèze et Nouy, 2003], basée sur un algorithme de résolution LaTIn, est construite autour de trois points clefs :

- Le partitionnement du domaine en sous-domaines et interfaces. Ces interfaces assurent la transmission des efforts et déplacements d'une sous-structure à l'autre. C'est d'ailleurs ceci qui fait de cette approche une approche mixte.
- La séparation d'échelle aux interfaces. Les quantités d'interfaces se décomposent en somme d'une partie micro et macro, dont les travaux sont découplés. Pratiquement, un projecteur défini sur l'interface permet leur calcul à partir de la quantité totale.
- Une vérification partielle des conditions de transmissions ((2.4) et (2.3)). Ces conditions sont imposées *a priori* sur la partie macroscopique des quantités d'interfaces.

La résolution se fait à l'aide d'un algorithme LaTIn. Celui-ci partage les équations en deux groupes, le premier regroupant les conditions d'admissibilité (noté \mathbf{A}_d) et l'autre regroupant les relations de comportement (des sous-structures et des interfaces) (noté Γ). Les équations locales de Γ sont possiblement non-linéaires. De là, la stratégie consiste à chercher une solution qui vérifie alternativement les équations et Γ et \mathbf{A}_d , à l'aide des directions de recherche \mathbf{E}^+ , \mathbf{E}^- , cf. **figure 2.3**. La décomposition des quantités d'interfaces en parties macro et micro permet de construire des opérateurs homogénéisés par sous-domaine. Ainsi le problème sur les quantités globales tient compte, au niveau cinématique, des hétérogénéités éventuellement présentes dans les sous-structures. On notera qu'une avancée propre à la méthode LaTIn, la PGD (pour « Proper Generalized Decomposition ») [Ladevèze, 1999, Ladevèze *et al.*, 2010, Chinesta *et al.*, 2010], introduit une homogénéisation à la fois des quantités spatiales et temporelles, permettant la résolution des problèmes d'évolution sur de larges domaines temporels.

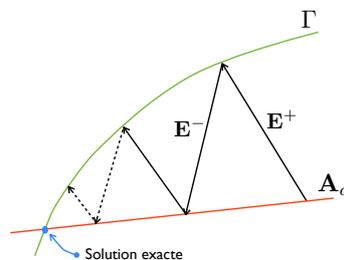


FIGURE 2.3: Algorithme de type LaTIn.

1.3 Bilan

Ces stratégies de calcul par décomposition de domaine permettent de traiter de larges problèmes de manière efficace, en particulier pour les méthodes dites mixtes, comme la FETI-DP et l'approche LaTIn micro-macro. En effet, la vérification partielle et mixte des conditions de transmission permet de traiter des cas avec de forts gradients de sollicitation comme des structures hétérogènes. La définition d'un problème macroscopique, permettant le pré-équilibre des sous-structures, en fait des stratégies véritablement multiéchelle et parallélisables de façon optimale.

Dans notre cas, ces méthodes ne fournissent pas de solution quant à l'obtention du maillage de la microstructure. Le traitement de la fissuration est, de plus, délicat, par exemple pour traiter la continuité de la fissuration entre les sous-structures [Guidault *et al.*, 2008]. À cela s'ajoute la problématique du choix et du positionnement des interfaces au sein de la microstructure.

2 Homogénéisation

2.1 Principes généraux

Nous allons aborder à présent les méthodes basées sur la théorie de l'homogénéisation. Ces méthodes sont très répandues, car elles représentent un cadre général pour la transition d'échelle. Les premiers travaux se sont concentrés sur la mise en place d'une homogénéisation spatiale, basée sur des études analytiques (ou semi-analytiques) à l'échelle microscopique. Elles mènent ainsi à l'obtention d'un comportement macroscopique, qui peut être utilisé dans une résolution par éléments finis par exemple. Ce comportement effectif se base sur ce qu'on nomme des quantités moyennes effectives [Eshelby, 1957, Hashin, 1962, Hill, 1965, Mori et Tanaka, 1973]. Les détails de la microstructure ne sont alors plus connus, et donc il n'est plus possible de remonter aux champs locaux. Les développements analytiques ont de plus des limites quant à la complexité de la microstructure traitée. C'est pourquoi les méthodes de type « Unit Cell Method » se sont développées [Christman *et al.*, 1989, Van der Sluis *et al.*, 1999b, Van der Sluis *et al.*, 1999a]. Le comportement macroscopique est alors issu d'essais numériques sur un volume élémentaire représentatif (VER). Il est ainsi possible d'obtenir des informations sur les quantités locales. Une présentation générale de ces méthodes dans un cadre variationnel est notamment proposée dans [Terada et Kikuchi, 2001].

Ces modèles requièrent la définition, pas toujours aisée, du VER *a priori*. En effet, le VER doit, d'une part, être suffisamment grand pour être statistiquement représentatif (pour les microstructures aléatoires, [Kanit *et al.*, 2003]) et d'autre part suffisamment petit pour pouvoir négliger les variations autour de la solution moyenne, *i.e.* que la structure puisse être considérée comme macroscopiquement homogène. La définition du volume élémentaire statistiquement représentatif est une procédure numériquement lourde à

mettre en place. La deuxième condition concerne les problèmes avec des gradients importants, par exemple près des bords libres de la structure et des fissures. Enfin, ces approches sont adaptées aux problèmes élastiques, la présence de non-linéarités au niveau microscopique (plasticité, décohésions fibre-matrice) demandant une mise à jour du VER et de la procédure d'essais numériques.

2.2 Homogénéisation des milieux périodiques

La théorie de l'homogénéisation des milieux périodiques [Sanchez-Palencia, 1974, Sánchez-Palencia, 1980, Sanchez-Palencia et Zaoui, 1987] est la méthode d'homogénéisation qui est théoriquement la plus claire. Elle est très utilisée dans la modélisation des composites, pour lesquels on peut définir une maille élémentaire qui permette de représenter par répétition la microstructure. Cette théorie se base sur une approche asymptotique qui permet la définition de deux problèmes, l'un macroscopique et l'autre microscopique, sur la maille. Le champ total est alors la somme du champ macroscopique, quasi-constant par maille et du champ microscopique périodique sur la maille. Il est ainsi possible de remonter aux quantités locales. Cette approche est véritablement multiéchelle, dans le sens où deux problèmes à des échelles différentes sont résolus simultanément. On notera que près des bords, l'approche présente quelques limitations, car les gradients importants ne permettent normalement pas de considérer le champ macro constant par maille. De plus, on perd la périodicité du VER près des bords. Enfin, cette théorie est d'autant plus pertinente que le rapport d'échelle entre la taille de maille l et l'échelle macro L est grand, Fig. 2.4, ce qui n'est pas toujours le cas.

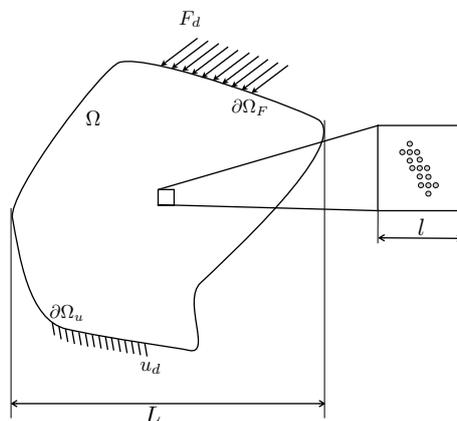


FIGURE 2.4: Rapport des échelles en homogénéisation périodique.

Dans ce cadre, deux variables sont introduites, correspondant à deux échelles. La première correspond à la position macroscopique à l'échelle de la structure, notée X . La seconde est la position à l'intérieur de la maille et notée y . On définit le rapport d'échelle $\theta = l/L$ ainsi que la nouvelle variable Y telle que $Y = y/\theta$, qui est en quelque sorte un « zoom ». Les deux variables X et Y sont donc d'amplitude comparable. La solution du

problème en tout point matériel M est donc recherchée sous la forme $u(M) = u(X, y)$. Compte tenu de la périodicité de la microstructure, le tenseur de Hooke s'exprime seulement à l'aide de la position micro, *i.e.* $H(M) = H(y)$. Le point clef de la théorie de l'homogénéisation asymptotique est d'effectuer un développement asymptotique du champ solution :

$$u(X, y) = u_0(X, y) + \theta u_1(X, y) + \theta^2 u_2(X, y) + \dots \quad (2.9)$$

La pertinence de ce développement dépend essentiellement de θ , qui doit être suffisamment petit. De là, les équations d'équilibre sont développées et les différentes puissances de θ séparées. Les méthodes du premier ordre tronquent le développement aux termes en θ^1 , et définissent deux champs, l'un macroscopique u_0 et l'autre microscopique u_1 . Ceci définit alors une suite de problèmes aux différents ordre de θ :

Problème à l'ordre 0 : $\operatorname{div}_Y(\mathbf{K}\varepsilon_Y(u_0)) = 0$. Ce problème permet de montrer que u_0 est indépendant de la position microscopique : $u_0(M) = u_0(X)$. On notera $\varepsilon_0 = \varepsilon_X(u_0)$.

Problème à l'ordre 1 : $\operatorname{div}_Y(\mathbf{K}\varepsilon_Y(u_1)) = -\operatorname{div}_Y(\mathbf{K}\varepsilon_0)$. Ce problème est défini sur le VER à X fixé et à déformation ε_0 imposée et uniforme. Ce problème revient à chercher une solution périodique pour chacune des déformations macro. De là, l'opérateur de localisation est construit (d'ordre 4), qui relie la déformation locale à la déformation macroscopique :

$$\varepsilon_Y(u_1) = \mathbf{H}\varepsilon_0 \quad (2.10)$$

Problème à l'ordre 2 : Ce problème n'est généralement pas résolu pour les méthodes du premier ordre. La condition d'existence est cependant utilisée pour la définition du problème macroscopique qui porte sur les quantités moyennées sur le VER, noté ω .

$$\int_{\omega} \operatorname{div}_X(\boldsymbol{\sigma}_0) + f_d d\omega = 0 \quad (2.11)$$

Posons $\int_{\omega} \cdot d\omega = \langle \cdot \rangle_{\omega}$, on a alors le problème suivant :

$$\operatorname{div}_X(\boldsymbol{\sigma}_0) + \langle f_d \rangle_{\omega} = 0 \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_0 = \langle \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle_{\omega} &= \langle \mathbf{K} + \mathbf{KH} \rangle_{\omega} \langle \varepsilon_0 \rangle_{\omega} \\ &= \langle \mathbf{K} + \mathbf{KH} \rangle_{\omega} \varepsilon_0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

On peut alors définir le comportement homogénéisé macroscopique comme $\mathbf{K}^M = \langle \mathbf{K} + \mathbf{KH} \rangle_{\omega}$ qui correspond en quelque sorte à une moyenne corrigée des propriétés matériau locales sur le VER.

Cette approche est une véritable approche multiéchelle, qui met en jeu un problème macroscopique et un opérateur de localisation, permettant de remonter au champ local. Les hypothèses fondatrices (périodicité du VER, élasticité et séparation d'échelles) sont cependant importantes et limitantes. En particulier, près des bords de la structure, les forts gradients mettent à mal celles-ci, et il faut alors mettre en place des stratégies adaptées [Dumontet, 1986, Lecuyer *et al.*, 1987]. De même, l'étude de microstructures aléatoires, pour lesquelles une maille périodique n'est pas possible à définir, a nécessité la mise en place d'un « volume élémentaire statistiquement représentatif » [Kanit *et al.*, 2003].

2.3 Non linéarités et éléments finis multiniveaux

La théorie classique de l'homogénéisation est cependant limitée aux calculs de structures élastiques. Lorsque des non-linéarités sont mises en jeu au niveau microstructural, comme de la plasticité locale ou des décohésions entre fibres et matrice, il devient en effet délicat de définir une relation de comportement *a priori*, voir par exemple [Devries *et al.*, 1989]. Celle-ci évolue, en effet, en fonction de l'histoire de chargement du VER. Il faut donc « mettre à jour » cette relation, ou du moins le VER et l'homogénéisation qui en découle. L'idée peut alors être d'effectuer, parallèlement au calcul macroscopique, des calculs sur les cellules élémentaires, qui permettent de fournir le comportement macroscopique. Ces calculs micro ont pour chargement la déformation macro et rendent la contrainte macro. Les deux échelles peuvent être simulées à l'aide des éléments finis, ce qui donne naissance à la méthode des éléments finis à deux niveaux, la FE² [Feyel, 1999, Feyel et Chaboche, 2000].

2.3.1 FE²

Les travaux fondateurs sont dus à [Renard, 1990], dans le cas de la dégradation des matériaux composites. La FE² présentée dans [Feyel, 1999, Feyel et Chaboche, 2000] est une généralisation de cette approche.

L'idée fondatrice de la FE² est d'obtenir, en chaque point d'intégration, le comportement en fonction de l'analyse d'une cellule, homologue du VER précédemment défini. La particularité est cependant que le comportement homogène n'est pas calculé explicitement. L'idée est plutôt de chercher la contrainte macro correspondante à la déformation macro, fonction de l'état thermomécanique de la cellule, au sein d'un algorithme de résolution incrémental, de type Newton-Raphson. En chaque point d'intégration, la solution est recherchée sous la forme de la somme d'un champ global (noté G) et d'un champ local (noté L) et défini sur la cellule. On a alors :

$$\begin{aligned} u(x) &= u^G(x) + u^L(x) \\ &= \varepsilon^G x + u^L(x) \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\sigma(x) = \sigma^G + \sigma^L(x) \quad (2.15)$$

avec $\sigma^G = \langle \sigma(x) \rangle_{\omega}$. Chaque itération de la résolution comprend les étapes suivantes, cf. **figure 2.5** :

Etape Globale : Résolution du problème global linéarisé : $\mathbf{K}^G \Delta u^G = r^G$.

Etape Locale : L'incrément de déformation globale $\Delta \varepsilon^G$ est déduit de celui du déplacement global pour chaque point d'intégration. S'ensuivent trois sous-étapes :

Localisation : A l'aide de l'hypothèse de périodicité et de la relation Eq. (2.14), les conditions limites à appliquer sur la cellule ω sont déduites.

Equilibre local : Le problème non-linéaire sur la cellule est résolu à l'aide d'une méthode de type Newton. Le comportement tangent est estimé à l'aide d'une méthode de perturbation.

Homogénéisation : La contrainte globale est enfin calculée grâce à la relation : $\sigma_G = \langle \sigma_L(x) \rangle_\omega$. Le comportement tangent homogénéisé est construit à l'aide des estimations précédentes.

Les matrices élémentaires sont alors construites par intégration numérique de la contrainte globale et du comportement tangent.

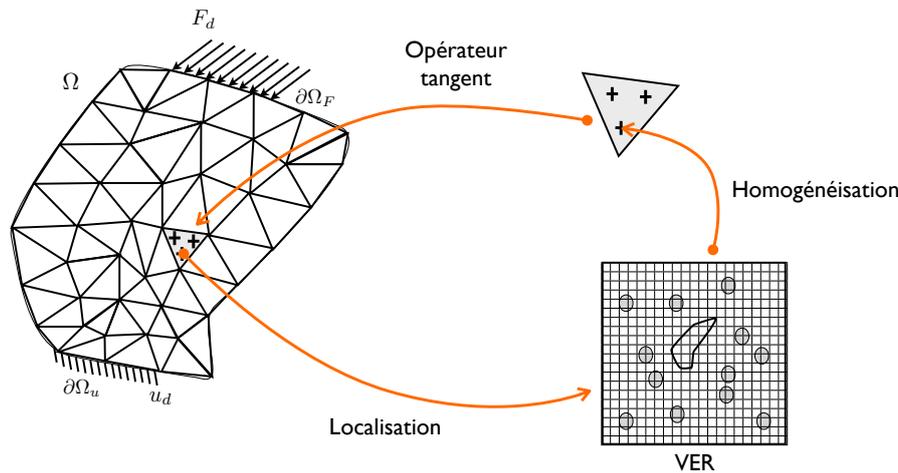


FIGURE 2.5: Schéma d'une itération de la FE^2 en un point de Gauss.

Dans cet algorithme, le recours à une relation de comportement explicite n'est plus nécessaire. C'est un avantage certain pour les problèmes non linéaires. Cependant, le fait de devoir effectuer des calculs sur des cellules micro pour chaque point de Gauss rend la méthode numériquement coûteuse. On notera cependant que chaque calcul micro est indépendant, ce qui rend l'étape locale fortement parallélisable. La FE^2 est donc une approche pragmatique et offre la possibilité de traiter des problèmes complexes non linéaires. Elle souffre cependant des mêmes limitations que la théorie de l'homogénéisation classique, vis-à-vis de la séparation d'échelle et périodicité de la microstructure. De plus, sa mise en oeuvre est demandeuse en ressource, principalement en mémoire, car il est nécessaire de stocker l'ensemble des VERs microscopique.

2.3.2 Cas où la séparation d'échelle n'est pas suffisante

La séparation d'échelle entre microstructure et structure n'est pas toujours suffisante pour pouvoir appliquer des méthodes d'homogénéisation classique et la FE^2 classique. Pour ces cas, la FE^2 peut être étendue aux milieux continus généralisés [Kouznetsova *et al.*, 2002, Feyel, 2003], ce qui permet d'enrichir la cinématique au niveau global à l'aide du champ de rotation. Les forts gradients macroscopiques sont alors mieux représentés. On notera que, lors de l'utilisation de ces cinématiques élaborées, l'application des conditions limites devient problématique par manque de sens physique des termes de degrés élevé (typiquement les conditions sur les gradients aux frontières).

D'autres méthodes existent, se basant sur l'homogénéisation au niveau des quantités éléments finis et pour lesquelles la rigidité et le second membre sont directement déduits de leurs homologues locaux. Il n'y a donc plus de comportement moyen à définir. C'est le cas dans l'*analyse micro/macro* [Ibrahimbegovic et Markovic, 2003], qui est utilisée pour l'étude des structures en béton armé, cf. **figure 2.6**. Dans cette méthode, chaque élément macro définit une cellule micro. Cette approche est à mi-chemin entre la FE^2 et les méthodes de décomposition de domaine primales avec relocalisation non-linéaire, comme dans [Cresta *et al.*, 2007]. On notera que cette méthode peut aussi être enrichie par exemple à l'aide d'une cinématique du second ordre [Kouznetsova *et al.*, 2004], ou bien en changeant le raccord en déplacement par un raccord en effort macro [Markovic et Ibrahimbegovic, 2004]. Ces variantes ne sont pas sans rappeler l'approche LaTin micro/macro précédemment évoquée, pour laquelle des opérateurs homogènes de quantités micro sont calculés à la volée.

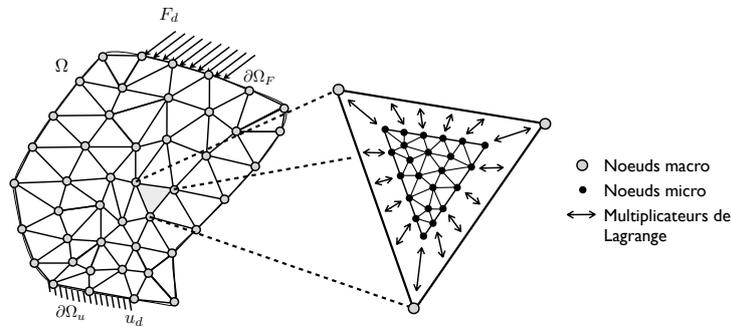


FIGURE 2.6: Schéma de principe de l'approche micro-macro.

2.4 Bilan

Les méthodes basées sur l'homogénéisation sont de véritables méthodes multiéchelles, permettant de résoudre un problème sur deux échelles différentes. De plus, les méthodes basées sur l'homogénéisation périodique et leurs extensions fournissent des informations sur les champs locaux au sein de la microstructure. Leurs fondements théoriques sont bien posés, ce qui en font des méthodes attractives pour la modélisation de matériaux à microstructure complexe comme les composites. Cependant, elles ne sont pas très adaptées à la modélisation du fil, but des présents travaux. En effet, ces méthodes présentent des difficultés près des bords libres et des fissures (gradient important), cas présent dans la simulation du fil. La définition d'un VER périodique est de plus plutôt délicate pour le fil, l'arrangement des fibres étant fortement aléatoire. Enfin, ces méthodes ne fournissent pas à proprement parler de solution quant à l'obtention de la description de la microstructure, réduite au seul VER dans la théorie classique (ou la FE^2) ou alors maillée complètement pour l'approche micro-macro.

3 Enrichissement et Superposition de modèles

Parallèlement aux méthodes basées sur l'homogénéisation, il existe de nombreuses méthodes multiéchelles qui se basent sur une approche différente. L'idée n'est en effet plus d'utiliser un VER ou une cellule dans le but de construire un problème macroscopique pertinent, mais véritablement d'enrichir un problème grossier sur une partie (ou la totalité) du domaine d'étude. Cet enrichissement est généralement effectué sur champ de déplacement, mais peut aussi, dans certains cas, être effectué directement sur la formulation énergétique du modèle. Le grand nombre de ces méthodes rend difficile un recensement exhaustif de celles-ci. Seules les stratégies suivantes seront abordées, car considérées comme les plus marquantes :

Enrichissement hiérarchique et multigrilles. Ces méthodes utilisent deux (ou plus) niveaux de modélisation. Si les méthodes d'enrichissement hiérarchique, comme HD-PM, sont quelque peu différentes des méthodes multigrilles sur les aspects techniques, l'idée de hiérarchie y est très prononcée.

Approche multiéchelle variationnelle. Ces méthodes proposent un cadre variationnel dans lequel les échelles grossières et fines sont explicitement séparées et la plus fine approchée, analytiquement ou numériquement.

Superposition de modèles. Ces méthodes permettent de superposer plusieurs modèles, généralement dans le but d'étudier l'influence d'un détail structural sur la solution globale sur le domaine. Elles peuvent être basées sur une partition du champ inconnu ou bien de l'énergie potentielle dans le domaine. Le couplage peut être surfacique ou volumique.

3.1 Enrichissement hiérarchique et multigrilles

3.1.1 La « Hierarchical Dirichlet Projection Method » (HDPM)

La *Hierarchical Dirichlet Projection Method*, ou HDPM, a été proposée pour le calcul de la réponse élastique d'une structure fortement hétérogène [Zohdi *et al.*, 1996, Oden et Zohdi, 1997, Oden *et al.*, 1999]. L'idée de la HDPM est assez proche de celle de l'approche micro/macro présentée en Section 2.3.2. En effet, elle consiste en la résolution d'un problème grossier homogénéisé dont chaque élément macro est associé à une cellule plus fine représentant explicitement la microstructure, voir **figure 2.7**. La comparaison s'arrête cependant ici, car les cellules fines vont à présent être utilisées pour le calcul d'une correction locale du champ inconnu. De plus, une autre différence d'importance est que la HDPM est adaptative, dans le sens où le recours à l'analyse de la cellule micro d'un élément macro est décidé au cours du calcul afin de réduire l'erreur locale sur la solution. A ce titre, elle repose sur un estimateur d'erreur *a posteriori* pour le choix des zones à corriger. Le couplage entre l'élément macro et sa cellule fine se fait à l'aide de conditions limites de type Dirichlet, d'où la méthode tire son nom. On peut résumer la procédure en quatre étapes :

1. **Résolution du problème macroscopique homogénéisé.** La solution de ce problème fournit le champ macroscopique $u^G(x)$.
2. **Détermination des zones (cellules) nécessitant une correction.** Ce choix est fait à l'aide d'un estimateur d'erreur *a posteriori* basé sur la non-vérification de la relation de comportement. C'est en quelque sorte un indicateur de l'erreur introduite par l'homogénéisation de la cellule.
3. **Correction.** Pour chaque cellule sélectionnée ω_i , une correction est calculée, sous la forme d'un champ correcteur micro sur la cellule sous conditions limites de Dirichlet : $u_i^L = u^G$ sur le bord Γ_i de la cellule ω_i .
4. **Reconstruction de la solution et vérification.** Le champ total est reconstruit à l'aide du champ global u^G et des corrections locales $c_i^L = u_i^L - u^G$ par addition : $u = u^G + \sum_i(c_i^L)$. L'erreur est à nouveau estimée, afin de contrôler la qualité de la solution.

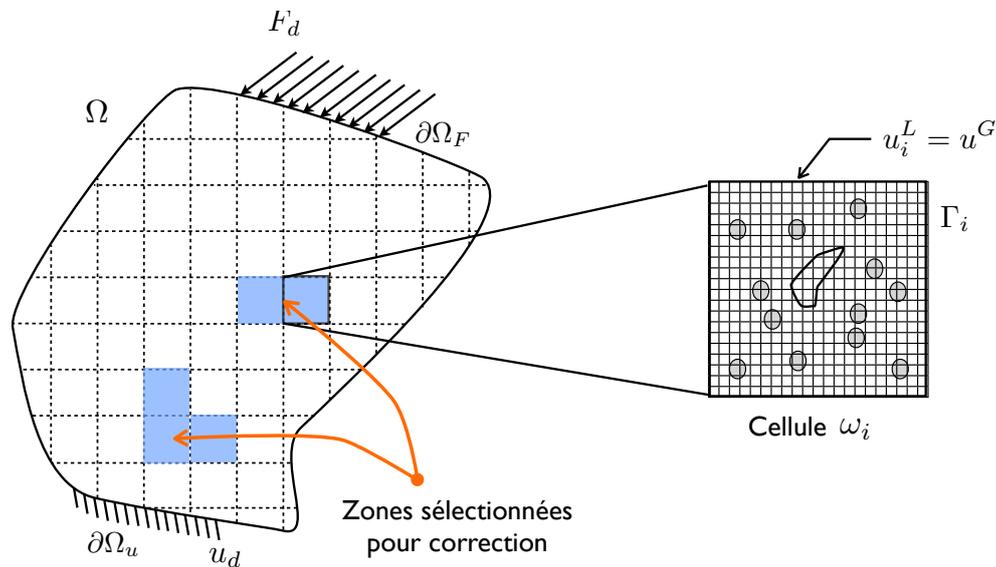


FIGURE 2.7: Schéma de principe de la « Hierarchical Dirichlet Projection Method ».

Les estimateurs d'erreur utilisés sont choisis de façon à majorer l'erreur réelle et, de plus, il peut être montré que l'erreur après correction est plus faible qu'avant. Dans le cas où l'erreur après correction reste trop importante, deux solutions peuvent être employées : i) ajuster les coefficients homogénéisés des cellules macro à l'aide d'une minimisation d'erreur, soit ii) de raffiner le maillage macro. Si les deux solutions fonctionnent correctement et permettent de réduire l'erreur jusqu'à un niveau donné, elles sont cependant numériquement coûteuses.

Afin d'y remédier, un remplacement de la condition de Dirichlet par un raccord en effort sur la frontière des cellules a été proposé [Zohdi et Wriggers, 1999], de même qu'une correction globale atténuant les sauts d'effort entre cellules [Zohdi *et al.*, 2001].

Ces procédures s'avèrent moins coûteuses pour la réduction de l'erreur que l'ajustement des coefficients et le raffinement du maillage.

La HDPM est donc une méthode *adaptive* robuste qui permet de traiter la micro-structure à échelle fine au niveau des zones où cela est nécessaire. La contrainte reste cependant le coût numérique d'une telle procédure. On notera cependant qu'elle n'est bien adaptée qu'aux problèmes linéaires élastiques. Le passage à des problématiques non-linéaires demanderait, entre autre, la mise en place de nouveaux estimateurs d'erreur adaptés [Bass et Oden, 1987, Johnson et Hansbo, 1992, Boroomand et Zienkiewicz, 1998], ou encore basés sur l'erreur en dissipation [Ladevèze et Pelle, 2004].

3.1.2 Les méthodes multigrilles et Eléments Finis Hiérarchiques

Les solveurs itératifs classiquement utilisés dans la résolution de larges problèmes éléments finis permettent de rapidement diminuer l'erreur liée aux petites longueurs de variations (hautes fréquences, hautes valeurs propres), mais lentement pour les grandes longueurs de variations (petites valeurs propres). C'est sur ce constat que se basent les méthodes multigrilles [Fedorenko, 1964]. Le principe est donc d'effectuer des itérations du solveur choisi (gradient conjugué, Jacobi ...) sur différentes grilles plus ou moins fines, hiérarchisées (emboîtées), cf. **figure 2.8**. Ceci permet alors d'augmenter la convergence de la résolution. Il va donc s'agir d'effectuer quelques itérations à un niveau donné (lissage), puis de transférer celui-ci à la grille supérieure, ou bien de le « prolonger » à la grille inférieure, où un lissage sera à nouveau effectué. L'ordre des opérations lissage-transfert-prolongement caractérise ce qu'on appelle le cycle. Les plus courants sont les cycles en « V » et en « W », cf. **figure 2.8**.

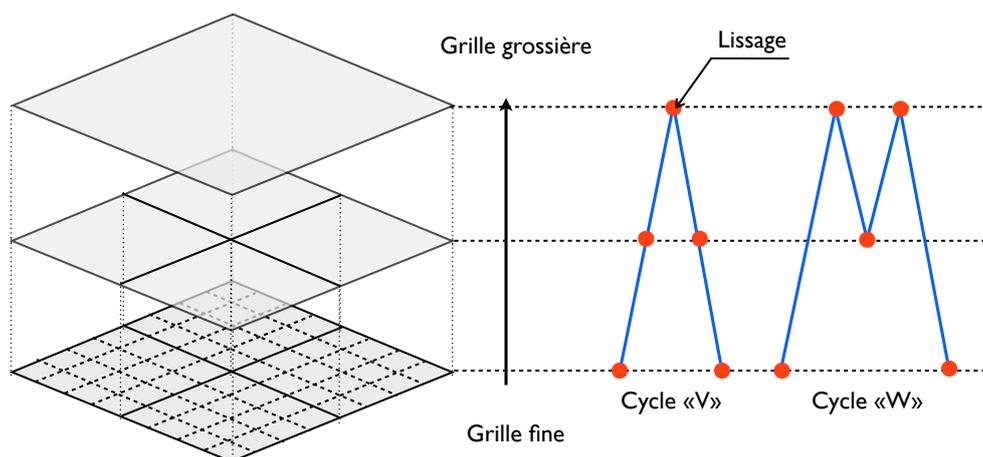


FIGURE 2.8: Hiérarchie des grilles et cycles classiques des méthodes multigrilles.

Prenons par exemple le cas d'un cycle en « V » sur deux grilles. Les étapes de la méthode sont :

1. **Lissage.** Quelques itérations du solveur sont effectuées sur la grille la plus fine, afin de réduire l'erreur liée aux petites variations.
2. **Transfert.** Le résidu ainsi obtenu est alors « restreint » sur la grille grossière à l'aide d'un opérateur adapté. Quelques itérations (lissage) sont alors effectuées sur cette grille, afin de réduire l'erreur liée aux grandes variations.
3. **Prolongement.** Le champ ainsi obtenu est ensuite « prolongé » sur la grille fine. Quelques itérations de solveur sont enfin faites, pour lisser les perturbations induites lors du transfert entre les deux grilles.

On notera que les méthodes des éléments finis hiérarchiques et les méthodes multi-grilles ont des liens très étroits, seules les définitions des opérateurs de prolongement et de restriction diffèrent. Compte tenu de leur très bonne convergence (en $O(n)$), ces méthodes sont considérées comme *optimales*. Toutefois, une importante difficulté est la création des maillages hiérarchiques, bien souvent complexes pour des géométries complexes.

Enfin, ces méthodes peuvent être étendues pour traiter des non-linéarités. Cela peut être fait en modifiant les opérateurs de prolongement et de restriction. Ils peuvent alors faire intervenir des procédures d'homogénéisation asymptotique [Fish et Shek, 2000] ou encore être considérés comme non-linéaires [Fish *et al.*, 1995], chaque opération de lissage/prolongement résultant d'une procédure itérative. Cette dernière se montre particulièrement efficace pour prendre en compte des non-linéarités agissant à plusieurs échelles, mais s'avère très demandeuse en mémoire.

3.2 Approche multiéchelle variationnelle

L'approche multiéchelle variationnelle (VMM) a été initialement proposée par Hughes [Hughes, 1995]. Dans ces travaux, il est supposé que les phénomènes à petite échelle ne sont pas nécessairement abordables numériquement, par éléments finis par exemple. Pour prendre en compte ces phénomènes locaux, le but est de rechercher une correction à apporter au champ global (par exemple éléments finis). Le champ total est obtenu par superposition du champ global et de la correction. Cette correction est cherchée analytiquement et dépend du résidu vis-à-vis du champ global. Elle peut faire intervenir les fonctions de Green à l'échelle fine. Cette formulation mène à un problème global quasi exact, pour lequel la partie micro est « condensée » sur le champ macro.

On notera que les espaces engendrés par les fonctions de forme des éléments grossiers et des fonctions de Green sont orthogonaux. Le choix de l'espace de correction est primordial et peut être judicieusement constitué des fonctions de Green à l'échelle fine. Cependant, le calcul de celles-ci n'est pas immédiat, en particulier dans le cas des éléments finis (car l'espace d'approximation n'est pas suffisamment régulier). Dans [Garikipati et Hughes, 2000], l'approche est toutefois utilisée avec succès pour prendre en compte une loi de type effort-déplacement issue de la micromécanique au sein d'un modèle grossier par ailleurs.

Une solution consiste à approcher numériquement ces fonctions de Green. Dans [Hughes *et al.*, 1998], les fonctions « bulles » sont introduites. Ces fonctions, qui valent zéro

sur le bord de l'élément grossier, permettent de créer un enrichissement local à chaque élément macro. Il reste cependant assez pauvre. Une autre solution consiste à approcher le champ micro à l'aide de grilles fines « emboîtées » dans le maillage macro [Hou et Wu, 1997]. Sur cette frontière, la nullité du champ micro est imposée par des conditions de Dirichlet. Dans [Ramm *et al.*, 2011], l'approche est sensiblement équivalente, avec cette fois l'utilisation de la XFEM et des techniques de level-set (sur lesquelles nous reviendrons dans la suite de ce chapitre) pour décrire l'échelle fine. On notera toutefois que dans ces deux derniers cas, on se rapproche fortement des méthodes de décomposition de domaine.

3.3 Superposition de modèles

Les méthodes à présent abordées ont une philosophie sensiblement différente des précédentes. En effet, leur but est de pouvoir coupler des modèles de finesse différente (voir des modèles complètement différents) dans le cas d'analyse de détails structuraux. On s'intéressera dans ce cadre à deux grandes classes de méthodes basées sur :

La partition du champ inconnu. Ceci correspond à la partition du champ de déplacement (dit autrement, la superposition) entre les deux modèles. On focalisera sur la S-Method ici.

La partition de l'énergie entre les deux modèles. Dans ce cadre, ce n'est plus uniquement le champ inconnu mais l'énergie liée à chacun des deux modèles qui est partagée. Pour illustrer ce type de méthodes, nous nous focaliserons sur la méthode Arlequin.

3.3.1 La S-Method

Introduite dans [Fish, 1992], la S-méthode consiste en la superposition de deux modèles éléments finis, dont l'un est plus fin que l'autre, afin de mieux approcher les champs près d'une fissure ou d'une hétérogénéité. On notera que les deux maillages ne sont pas nécessairement conformes et la frontière du maillage fin ne correspond pas aux arêtes des éléments du grossier. La S-method n'est donc pas seulement une technique de type éléments finis hiérarchique ou de superélément avec condensation. Pour assurer la continuité du champ de déplacement entre les deux modèles, des conditions de Dirichlet homogènes sont imposées sur le modèle fin :

$$u^L = 0 \text{ sur } \Gamma_f \quad (2.16)$$

On a alors la solution globale telle que :

$$u = \begin{cases} u^G & \text{dans } \Omega_G \setminus \Omega_L \\ u^G + u^L & \text{dans } \Omega_L \end{cases} \quad (2.17)$$

La superposition des solutions permet de construire un problème global matriciel, qui couple explicitement les deux champs discrets :

$$\begin{bmatrix} K^G & K^{G-L} \\ {}^T K^{G-L} & K^L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^G \\ u^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

où apparaissent les matrices de raideurs du modèle grossier K^G et du modèle fin/local K^L . Le couplage s'exprime par la matrice K^{G-L} .

Ce cadre est par exemple utilisé dans une modélisation à trois échelles des milieux hétérogènes [Takano et Okuno, 2004], combiné à de l'homogénéisation asymptotique. La S-method est une approche pragmatique qui couple efficacement les deux échelles. Cependant, il peut y avoir des problèmes de redondance entre les deux champs et la transmission d'un maillage à l'autre peut présenter des difficultés, en particulier en dynamique.

3.3.2 La méthode Arlequin

La méthode Arlequin [Ben Dia, 1998] est une méthode de couplage reposant sur la partition de l'énergie entre les modèles. Elle permet ainsi un couplage « faible » dans les deux modèles sur une zone tampon volumique, contrairement à la S-method. Considérons deux domaines, l'un grossier Ω_G et l'un fin Ω_L . Ces deux domaines se recouvrent sur une zone de couplage Ω_C , *i.e.* $\Omega_L \cap \Omega_G = \Omega_C$. Ces deux domaines sont modélisés par des méthodes semblables ou différentes (par exemple continu (éléments finis) - discret (moléculaires)). Le domaine grossier est soumis à des efforts surfaciques F_d , ainsi qu'à des conditions limites en déplacement. On supposera par ailleurs que les efforts volumiques f ne s'appliquent que dans Ω_G , voir **figure 2.9**.

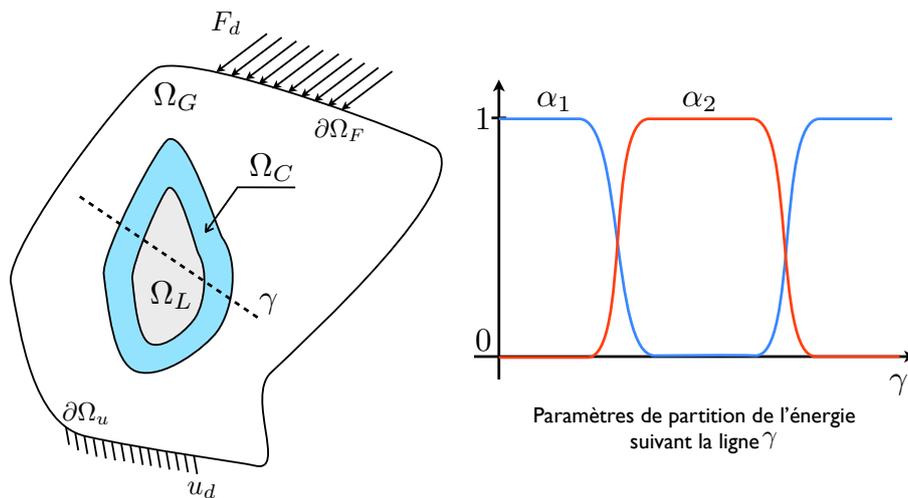


FIGURE 2.9: Couplage de modèle de type Arlequin. Les paramètres α_1 et α_2 répartissent l'énergie entre les deux modèles Ω_G et Ω_L . La zone Ω_C est la zone de couplage, où les deux modèles coexistent.

La méthode Arlequin propose de résoudre ce problème couplé grâce au problème suivant :

Problème 2.2: Trouver $(u^G, u^L, \lambda) \in \mathcal{V}_1 \times \mathcal{V}_2 \times \mathcal{V}_c$ tels que :

$$\begin{cases} a_G(u^G, v) + C(\lambda, v) = l_G(v), \quad \forall v \in \mathcal{V}_1 \\ a_L(u^L, v) - C(\lambda, v) = 0, \quad \forall v \in \mathcal{V}_2 \\ C(\mu, u^G - u^L) = 0, \quad \forall \mu \in \mathcal{V}_c \end{cases} \quad (2.19)$$

où a_G et a_L sont des fonctions bilinéaires telles que : $a_G : \mathcal{V}_1 \times \mathcal{V}_1 \rightarrow \mathfrak{R}$ et $a_L : \mathcal{V}_2 \times \mathcal{V}_2 \rightarrow \mathfrak{R}$ et l_G une fonction linéaire telle que $l_G : \mathcal{V}_1 \rightarrow \mathfrak{R}$. Elles sont définies de la façon suivantes :

$$a_G(u, v) = \int_{\Omega_G} \alpha_1 \sigma(u) : \varepsilon(v) \partial\Omega \quad (2.20)$$

$$a_L(u, v) = \int_{\Omega_L} \alpha_2 \sigma(u) : \varepsilon(v) \partial\Omega \quad (2.21)$$

$$l_G(v) = \int_{\Omega_G} f v \partial\Omega + \int_{\partial\Omega_F} F_d v \partial S \quad (2.22)$$

La fonctionnelle de couplage C peut être choisie comme le produit naturel de l'espace $\mathcal{H}^1(\Omega_G)$ et être définie par (avec κ_1 et κ_2 des constantes) :

$$C(u, v) = \int_{\Omega_C} \kappa_0 u v + \kappa_1 \varepsilon(u) : \varepsilon(v) \partial\Omega \quad (2.23)$$

Les coefficients α_1 et α_2 sont des poids qui vont répartir l'énergie entre les deux modèles sur la zone de couplage Ω_C . Ils sont contraints comme suit :

$$\begin{cases} \alpha_1, \alpha_2 \geq 0 \text{ dans } \Omega_i \\ \alpha_1 + \alpha_2 = 1 \text{ dans } \Omega_G \cup \Omega_L \\ \alpha_1 = 1 \text{ dans } \Omega_G \setminus \Omega_L \\ \alpha_1, \alpha_2 \text{ constantes dans } \Omega_L \end{cases} \quad (2.24)$$

Tous les choix de répartition sont alors envisageables sur la zone de couplage, avec une répartition linéaire, quadratique... Le principal intérêt de la méthode Arlequin est de pouvoir coupler de manière efficace des modèles de finesses différentes ou de natures différentes. On notera que la différence de cinématique entre les deux modèles peut engendrer des effets parasites sous forme de « ghost forces » [Chamoïn *et al.*, 2010]. Cette méthode reste cependant limitée à l'étude de détails structuraux au sein d'un modèle plus grossier. En effet, elle n'est que peu adaptée au cas où de nombreux patches fins existeraient sur toute l'étendue du domaine, comme pour une microstructure de type composite (la définition des fonctions de poids serait alors fastidieuse).

3.4 Bilan

Cette classe regroupe une multitude de techniques permettant l'enrichissement d'un champ grossier à l'aide de modèles fins à travers une partition du champ total inconnu (ou de l'énergie des modèles). Reprenons chacune des grandes familles évoquées :

Méthodes d'enrichissement hiérarchique et multigrilles. La méthode HDPM est une méthode adaptative, où les zones nécessitant un enrichissement sont choisies à l'aide d'un estimateur d'erreur. Cette approche proposée par Zohdi et Oden adapte en quelque sorte l'échelle de modélisation, ce qui rend la méthode robuste. Néanmoins, la définition de l'opérateur macroscopique repose sur la théorie de l'homogénéisation, ce qui entraîne les mêmes limitations en termes de séparation d'échelles. Enfin, la prise en compte des non-linéarités est délicate. Quant aux méthodes multigrilles, plus axées sur le calcul hautes performances, elles permettent d'accélérer la convergence des méthodes itératives classiques. Elles se basent sur une hiérarchie de grilles de finesses différentes. Elles restent cependant des méthodes très numériques dans lesquelles la physique du problème traité est difficilement prise en compte.

Méthode variationnelle multiéchelle. Cette méthode fournit un cadre théorique solide pour prendre en compte des effets microscopiques au sein d'une approximation éléments finis relativement grossière. Les fonctions d'enrichissement pour la mécanique étant difficilement déterminables analytiquement, des méthodes ont été proposées pour l'évaluation numérique d'un enrichissement pertinent. Cependant, celui-ci est localisé au niveau des éléments (ou groupe d'éléments), et la condition de continuité au bord des éléments (*i.e* champ micro nul sur le bord de l'élément), peut s'avérer contraignante.

Méthodes de superposition de modèles. Ces méthodes pragmatiques proposent un cadre solide pour coupler des modèles différents et possiblement de finesses différentes. Elles sont conçues par exemple pour coupler un enrichissement lié à la prise en compte d'un détail structural (fissure, liaison boulonnée) à une structure de large dimension, les modèles respectifs étant par ailleurs fixés. Ce cadre n'est pas adapté à notre problème de microstructure, pour lequel le nombre de patches important rendrait ces méthodes difficiles à mettre en oeuvre.

4 Enrichissement cinématique

Les méthodes d'enrichissement cinématique reposent sur des bases différentes des méthodes précédemment évoquées. Elles consistent en général en une extension de la méthode des éléments finis où la représentation des hétérogénéités et des singularités de champ sont largement simplifiées. Elles permettent la représentation de microstructures complexes ou de frontières mobiles de façon adaptée, limitant par là même le nombre

de degrés de liberté des modèles et supprimant (en principe) le recours au remaillage. C'est pourquoi elles rencontrent un certain succès, entre autres dans la modélisation des microstructures et de la fissuration.

Plus spécifiquement, ces méthodes partent du constat que les fonctions de forme éléments finis (polynomiales) ne permettent pas de bien approcher certains champs, par exemple autour des singularités (pointe de fissure, coin). En effet, les fonctions de forme classiques sont trop régulières par rapport aux champs singuliers recherchés. Il est donc nécessaire dans ces cas, soit de raffiner le maillage (h-method), soit d'augmenter le degré des fonctions de forme (p-method), ou bien les deux (hp-method). Cependant, cela mène à des maillages lourds à générer (car conformes) et à des systèmes matriciels à grand nombre de degrés de liberté.

L'idée est donc d'enrichir la cinématique, *i.e.* l'espace des fonctions de forme polynomiales, à l'aide d'autres fonctions, plus représentatives. La plupart des méthodes prenant ce parti sont basées sur la méthode de partition de l'unité (PUM) [Melenk et Babuška, 1996], dont nous allons dans un premier temps rappeler les fondamentaux.

4.1 Méthodes de partition de l'unité

On considère le domaine d'étude comme un ouvert $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Soit $\{\Omega_i\}_{i \in \Xi}$ un ensemble d'ouverts ($\Xi \in \mathbb{N}$, le nombre d'ouverts) recouvrant Ω et dont un nombre fini se chevauchent en tout point x du domaine, *i.e.* :

$$\exists M \in \mathbb{N} \text{ tel que } \forall x \in \Omega, \text{Card}(i|x \in \Omega_i) \leq M$$

On définit pour chaque ouvert Ω_i un ensemble de fonctions $\{\psi_j^{(i)}(x)\}_{j \in \Pi}$. Ces fonctions sont réputées pertinentes pour approcher la solution. Elles peuvent être issues d'une connaissance analytique connue par ailleurs ; comme les solutions asymptotiques en pointes de fissure. De même, on associe à chaque ouvert des fonctions $\{\phi_i(x)\}$, qui vérifient une partition de l'unité associée au recouvrement $\{\Omega_i\}$, c'est à dire :

$$\begin{aligned} \text{supp } \phi_i &\subset \text{closure}(\Omega_i) \quad \forall i \in \Xi \\ \sum_{i \in \Xi} \phi_i(x) &= 1 \quad \forall x \in \Omega \\ \|\phi_i(x)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^n)} &\leq C_\infty \\ \|\nabla \phi_i(x)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^n)} &\leq \frac{G_s}{\text{diam}(\Omega_i)} \end{aligned}$$

La première condition impose que le support des fonctions $\phi_i(x)$ soit contenu dans Ω_i , la deuxième, que la somme des fonctions $\phi_i(x)$ vaut 1 en tout point x du domaine. Les deux dernières imposent une régularité (considération de type énergie finie). Ces fonctions ϕ_i valent zéros sur le bord de leur ouvert Ω_i associé et nous les nommerons fonctions « chapeau ». Pour faire un parallèle avec la méthode des éléments finis standard, l'ouvert Ω_i , aussi appelé patch, peut être défini comme l'ensemble des éléments partageant ce

noeud, voir **figure 2.10**. En utilisant l'interpolation ainsi définie sur le domaine Ω , le champ approché recherché $u_h(x)$ s'écrit :

$$u_h(x) = \sum_{i \in \Xi} \sum_{j \in \Pi} \phi_i(x) \psi_j^{(i)}(x), \quad \forall x \in \Omega$$

Si sur chacun des patches, $u(x)$ peut être approché par $v_i(x) = \sum_{j \in \Pi} \psi_j^{(i)}(x)$ tel que :

$$\begin{aligned} \|u(x) - v_i(x)\|_{L^\infty(\Omega_i)} &\leq \varepsilon_1(i) \\ \|\nabla(u(x) - v_i(x))\|_{L^\infty(\Omega_i)} &\leq \varepsilon_2(i) \end{aligned}$$

c'est à dire, si l'écart entre les fonctions d'approximation et le champ réel est fini et majoré (et respectivement leur gradient), alors on montre que [Melenk et Babuška, 1996] :

$$\begin{aligned} \|u(x) - u_h(x)\|_{L^\infty(\Omega)} &\leq C_1 \sqrt{\sum_i \varepsilon_1(i)^2} \\ \|\nabla(u(x) - u_h(x))\|_{L^\infty(\Omega)} &\leq C_2 \sqrt{\sum_i \varepsilon_1(i)^2 + \varepsilon_2(i)^2} \end{aligned}$$

où les constantes C_1, C_2 dépendent uniquement de partition $\{\Omega_i\}$ et des fonctions chapeau $\{\phi_i(x)\}$. Ce résultat fondamental assure que la PUM permet de fournir une bonne approximation du champ exact u pour peu qu'une bonne approximation soit disponible sur chaque patch (les fonctions $\psi_j^{(i)}$). La partition de l'unité formée par les fonctions chapeau assure, quant-à elle, la continuité des champs inter-éléments. La méthode des éléments finis est un cas particulier pour lequel on a $\{\Psi_j^{(i)}\}_{j \in \Pi} = \{a_j\}$ (c'est-à-dire que l'on ne présuppose pas de fonction d'approximation particulière et les a_j sont les inconnues) et chaque fonction chapeau est associée à un noeud.

La PUM fournit donc un moyen original de construction d'espaces d'approximation locaux adaptés à la cinématique que l'on souhaite modéliser. En outre, elle constitue un moyen de « collage » d'approximations locales général. C'est d'ailleurs dans ce cadre que des modèles multiéchelles basés sur ce qu'on appelle la MEPU (« Multiscale enrichment based on Partition of Unity ») se sont développés. Ceux-ci correspondent à une synthèse des théories d'homogénéisation classiques et de la PUM, et sont dédiés aux problèmes où plusieurs échelles plus ou moins bien séparées existent [Fish et Yuan, 2005].

4.2 XFEM/GFEM

Il a été montré que l'on pouvait chercher une approximation de u sur le domaine Ω à l'aide de la PUM, sous la forme :

$$u_h(x) = \sum_{i \in \Xi} \phi_i(x) \sum_{j \in \Pi} a_j^{(i)} \psi_j^{(i)}(x), \quad \forall x \in \Omega \quad (2.25)$$

où les $a_j^{(i)}$ sont des coefficients constants et inconnus : les degrés de liberté du système. Un choix classique est d'utiliser comme fonctions de la PU, les fonctions éléments finis standards. On se retrouve ainsi dans le cas de la **figure 2.10**. Ce choix mène à ce qui est appelé

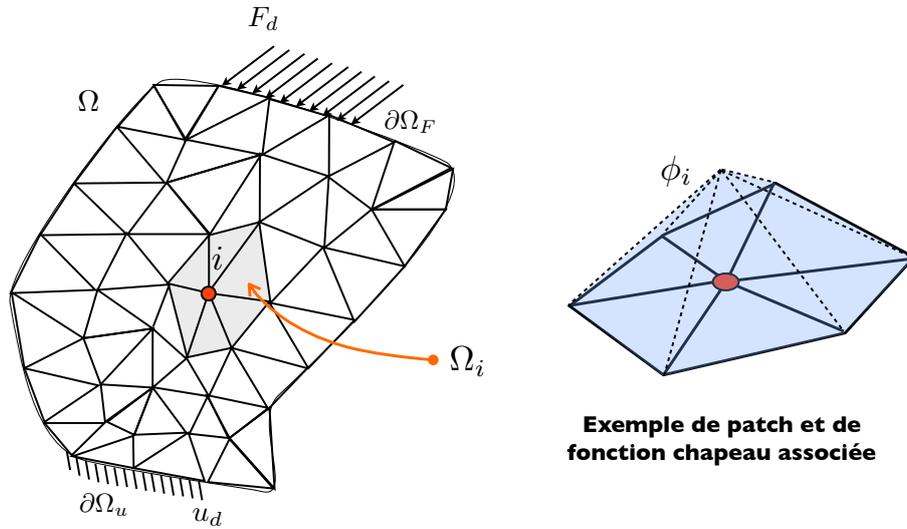


FIGURE 2.10: Patch et fonction chapeau linéaire de la PUM.

la PUFEM (Partition of Unity Finite Element Method) dans [Melenk et Babuška, 1996]. Dérivées de la PUFEM, la XFEM (pour eXtended Finite Element Method) [Belytschko et Black, 1999, Moes *et al.*, 1999, Dolbow *et al.*, 2000] et la GFEM (pour Generalized Finite Element Method) [Strouboulis *et al.*, 2000b, Strouboulis *et al.*, 2000a] sont essentiellement identiques. Il s'agit d'ajouter, pour certains patches d'éléments (les Ω_i , **figure 2.10**), des fonctions d'approximation pertinentes, comme des fonctions d'ordre supérieur ou bien des fonctions représentant les sauts, gradients. Il peut être commode de séparer dans Eq. (2.25) la partie strictement éléments finis de la partie enrichissement :

$$u_h(x) = \sum_i^{n_{EF}} \tilde{\phi}_i(x) \tilde{a}_i + \sum_i^{n_{PU}} \phi_i(x) \sum_j^{n_{enr}^i} a_j^{(i)} \psi_j^{(i)}(x), \quad \forall x \in \Omega \quad (2.26)$$

où n_{EF} est le nombre de noeuds, n_{PU} le nombre de noeuds enrichis et n_{enr}^i le nombre de fonctions d'enrichissement associées au noeud enrichi i . On notera que les fonctions de forme de la partie EF stricte $\tilde{\phi}_i$ et celle de la PU ϕ_i ne sont pas nécessairement les mêmes, les premières étant souvent d'un ordre plus élevé. Le nombre total d'inconnues n_{ddl} est donc :

$$n_{ddl} = n_{EF} + \sum_i^{n_{PU}} n_{enr}^i$$

Les bases de la X-FEM et de la GFEM sont identiques. Les différences résident dans le champ d'application des méthodes, qui ont fait émerger des techniques propres à chacune d'elle.

4.2.1 XFEM

La XFEM se concentre principalement sur la modélisation de la fissuration et des interfaces bi-matériaux (pour les structures hétérogènes complexes). Elle tire ainsi parti de la flexibilité de la PUFEM pour s'affranchir (jusqu'à une certaine mesure) de la génération de maillage conforme des frontières et interfaces intérieures au domaine d'étude. En effet, il est possible par un choix approprié de fonctions d'enrichissement, d'insérer ces frontières et interfaces directement dans l'élément sans avoir à les discrétiser explicitement et qui permettent des sauts de déplacement [Moes *et al.*, 1999] et/ou de déformation [Sukumar *et al.*, 2001] au sein d'un élément. Les fonctions d'enrichissement correspondantes sont le plus souvent connues analytiquement. Prenons comme exemple le cas de la modélisation d'une fissure. Une fonction d'enrichissement comme le Heaviside H permet de prendre en compte un saut dans le champ de déplacement. Le champ en pointe de fissure peut être quant-à lui modélisé à l'aide d'une base de fonctions $\{F_j\}_{j=1..4}$ issue d'une étude asymptotique de cette zone. La forme de l'approximation est alors :

$$u_{xfem}(x) = \sum_i^{n_{EF}} \tilde{\phi}_i(x) \tilde{a}_i + \sum_i^{n_d} \phi_i(x) H(x) a_i + \sum_i^{n_p} \phi_i(x) \sum_{j=1}^4 b_j^{(i)} F_j^{(i)}(x) \quad (2.27)$$

où

- \tilde{a}_i sont les inconnues classiques des éléments finis ;
- n_d les noeuds enrichis pour prendre en compte le saut de déplacement entre les deux lèvres de la fissure ;
- n_p les noeuds enrichis pour prendre en compte le champ en pointe de fissure, voir **figure 2.11**.

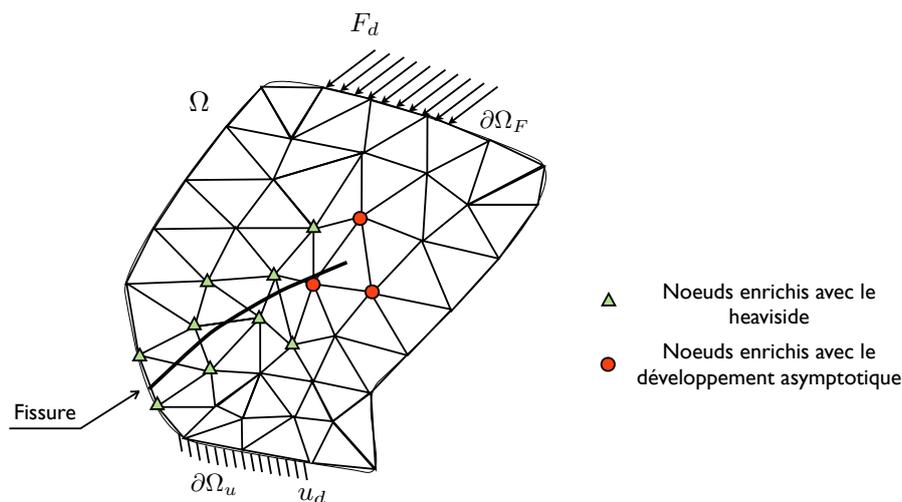


FIGURE 2.11: Enrichissement lié à une fissure sur un maillage non-structuré.

Dans le cas de structures hétérogènes, les interfaces bi-matériaux peuvent être traitées à l'aide d'une fonction comme la valeur absolue (ou dérivée de celle-ci), et qui entraîne un saut de déformation.

Un point clef des méthodes de type XFEM est la description de la surface implicite, car elle ne s'appuie plus sur le maillage. Une méthode robuste est le *level-set*, ou fonction de niveau, qui va permettre de décrire la surface et son évolution [Sukumar *et al.*, 2001]. C'est une fonction de distance algébrique, interpolée sur le maillage éléments finis, qui donne la distance d'un noeud vis-à-vis de la discontinuité. À partir de celle-ci, les zones d'enrichissement peuvent être aisément décrites. Le fait que la distance puisse être positive ou négative permet de définir une normale et donc les orientations des vecteurs normaux et tangents sur la fissure. A noter que la discontinuité représentée par *level-set* hérite des capacités de description des fonctions de forme sur lesquelles elle est interpolée. C'est pourquoi le maillage doit être suffisamment fin à son voisinage pour que la surface soit bien décrite.

La grande flexibilité de la XFEM, en particulier vis-à-vis du maillage, en a fait une méthode de choix pour la modélisation de la fissuration et des structures et microstructures hétérogènes. La communauté est particulièrement active et les applications sont nombreuses. Parmi celles-ci, on peut noter des applications d'optimisation topologique. Dans le cadre des composites, elle s'est en particulier insérée dans un cadre d'homogénéisation en permettant la simulation du VER de façon simplifiée [Moës *et al.*, 2003], ou dans le cadre d'une méthode de décomposition de domaine LaTIn [Guidault *et al.*, 2008]. La flexibilité de la XFEM est aussi utilisée dans une approche multiéchelle de type « Unit Cell Method » afin de représenter la fissuration au niveau du maillage macroscopique [Belytschko et Song, 2010]. Enfin, quand l'enrichissement n'est plus connu analytiquement, une technique de patch micro peut-être utilisée, par exemple pour traiter l'interaction entre la pointe d'une fissure macro et des fissures micro [Loehnert et Belytschko, 2007].

On notera que la XFEM est aujourd'hui passée dans les codes commerciaux comme la dernière version d'Abaqus. Ceci s'explique en grande partie parce que l'enrichissement de la XFEM se fait par élément (même s'il y a plusieurs type d'éléments : pointe de fissure, élément de transition...). Ainsi, le cadre XFEM s'intègre assez simplement dans un code éléments finis classique soumis au traitement par élément.

4.2.2 La GFEM

La GFEM est un cadre très proche de la XFEM. Elle vise à l'ajout de fonctions d'enrichissement propres à améliorer la convergence en énergie de la méthode [Strouboulis *et al.*, 2000a, Strouboulis *et al.*, 2000b, Duarte *et al.*, 2000], à l'aide de solutions analytiques des champs près des coins et arêtes. En outre, une des grandes innovations a été l'utilisation de fonctions d'enrichissement « numériques », issues de la résolution numérique de problèmes microscopiques. Il est ainsi possible de traiter des cas de microstructures très complexes, mettant en jeu plusieurs centaines de trous [Strouboulis *et al.*, 2003]. Ces travaux sont basés sur la résolution d'une équation de Laplace, dans un milieu

2D, mais ont été étendus à la résolution d'équations de type Helmholtz [Strouboulis *et al.*, 2006, Strouboulis *et al.*, 2008].

Le point clef de la philosophie de travaux de Strouboulis sur la GFEM est la définition des problèmes qui vont servir à calculer les fonctions d'enrichissement. Ces problèmes sont appelés problèmes « handbook », dans le sens où les solutions de ces problèmes élémentaires sont calculées à l'avance, puis utilisées dans le calcul global. Et c'est là une différence fondamentale avec les travaux de Duarte [Duarte *et al.*, 2001, Duarte et Kim, 2008], dans lesquels l'enrichissement est explicitement couplé au calcul macroscopique et pour lequel les conditions limites sont extraites du calcul global. Le calcul se fait alors en une « descente » et une « remontée » du macro au micro, d'une façon similaire à une approche multigrille. La GFEM sert alors à introduire élégamment la solution micro dans le calcul global. Cela donne une approche nommée « Global-Local ». On notera une application du concept de handbook à une méthode de calcul type Global-Local non intrusive dans [Babuška et Andersson, 2005].

Les deux choix diffèrent en premier lieu parce que les applications ne sont pas les mêmes : pour Duarte, il n'y a que quelques domaines qui requièrent un enrichissement alors que pour Strouboulis, l'enrichissement est nécessaire quasiment dans tout le domaine. L'effort numérique n'est donc pas le même et, dans le cas de Strouboulis, pré-calculer les fonctions est presque une obligation. Une autre raison majeure est que le choix des problèmes du handbook et de leurs conditions limites impacte directement sur la qualité de la solution globale obtenue [Strouboulis *et al.*, 2008]. Revenons en détail sur ces problèmes handbook. L'interpolation de la GFEM reprend la formule générale de la PUM :

$$u_h(x) = \sum_i^{n_{EF}} \tilde{\Phi}_i(x) \tilde{a}_i + \sum_i^{n_{PU}} \Phi_i(x) \sum_j^{n_{enr}^i} a_j^{(i)} \Psi_j^{(i)}(x), \quad \forall x \in \Omega \quad (2.28)$$

Dans les travaux de Strouboulis, les problèmes du handbook sont choisis en fonction de la grille grossière, de manière à reprendre dans chaque patch les entités topologiques qui y existent, cf. **figure 2.12**. Une fois la géométrie des problèmes handbook sur chacune des fenêtres connues, Strouboulis propose d'utiliser une base canonique de conditions limites à y appliquer. Cette approche est plus proche de la PUM, dans le sens où l'enrichissement est lié au patch (et à la fonction chapeau associée). C'est une différence d'importance par rapport à l'enrichissement par élément de la XFEM, car à présent chaque élément a, en quelque sorte, des fonctions de forme différentes. Une conséquence directe est que la GFEM est difficile à mettre en place dans un code à architecture de type éléments finis. Enfin, cette base est arbitraire, mais elle se doit de pouvoir représenter au mieux le chargement que subi réellement le handbook. L'approche de Duarte est plus pragmatique, car les conditions limites sont issues d'un pré-calcul global et l'interaction locale - globale est mieux prise en compte.

La GFEM a par ailleurs été utilisée pour la simulation de polycristaux pour lesquels un enrichissement spécifique a été défini pour tenir compte des jonctions triples entre cristaux [Aragón *et al.*, 2010]. Enfin, dans le cas de composites ayant un fort ratio entre

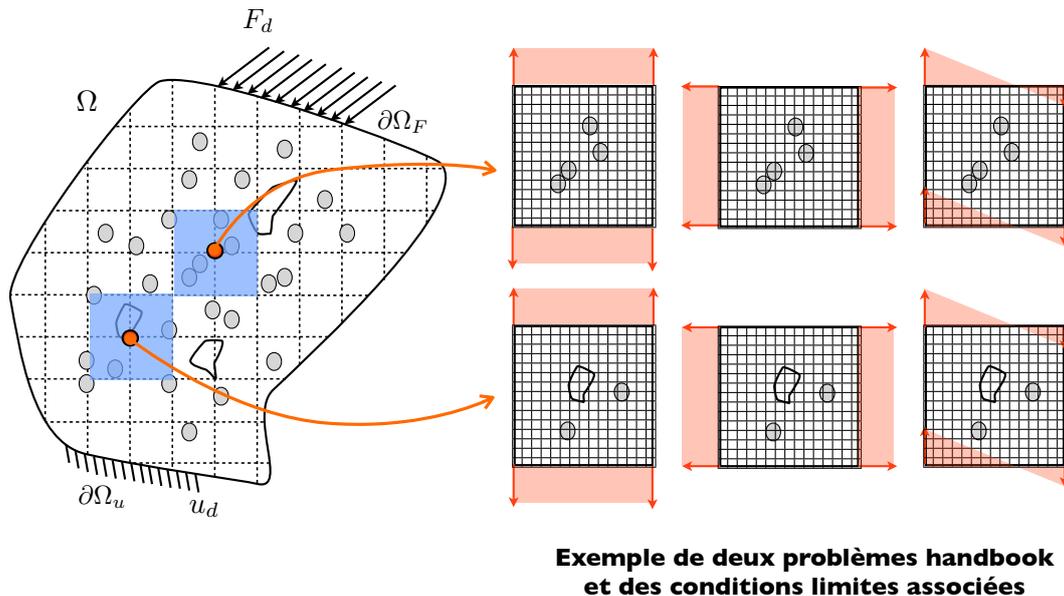


FIGURE 2.12: Extraction des problèmes handbook et conditions limites utilisées, dans les travaux de Strouboulis.

le module des particules et de la matrice, une formulation en grande déformation a été proposée dans [Srinivasan *et al.*, 2008].

4.2.3 Difficultés liées à ces méthodes et à leurs implantations

La première difficulté liée aux méthodes d'enrichissement est le calcul des intégrales intervenant dans les matrices de rigidité et du second membre. En effet, l'ajout de fonctions de forme particulières, et, dans certains cas, non connues à l'avance (GFEM), fait que la quadrature par point de Gauss n'est pas adaptée. De plus, l'enrichissement peut être différent d'un élément à l'autre, en particulier pour la GFEM où l'enrichissement par patch fait que chaque élément est différent. Des solutions ont été développées pour renforcer la robustesse de la XFEM, à l'aide d'un positionnement pertinent des points d'intégration en pointe de fissure [Sukumar *et al.*, 2001, Béchet *et al.*, 2005], par exemple par sous découpage des éléments. L'enrichissement plus général de la GFEM a favorisé l'utilisation d'une intégration à l'aide de routines itératives adaptatives, se raffinant dans les zones de fort gradient [Strouboulis *et al.*, 2001]. Ces dernières ont cependant un coût assez important.

La seconde difficulté est liée au conditionnement de la matrice de rigidité. Il faut, comme dans le cas des éléments finis, s'assurer que les fonctions de formes soient linéairement indépendantes. Si, d'un point de vue continu, cela ne pose pas de problème, avec l'intégration numérique, il peut arriver que cette indépendance soit « trop faible », menant au mauvais conditionnement de la matrice (par exemple lorsque la fissure passe tout près d'un noeud d'un élément).

Les méthodes XFEM et GFEM sont particulièrement adaptées pour la simulation des structures complexes pour lesquelles générer un maillage peut s'avérer difficile. Ainsi, la gestion des frontières se fait de façon implicite, ce qui entraîne le besoin d'avoir une représentation adaptée, le maillage n'étant plus le support explicite de la géométrie. Cela se fait grâce aux level-set dans la XFEM. Pour la GFEM, une représentation de type CAO est requise, à partir de laquelle la géométrie des problèmes handbook peut être extraite et maillée par ailleurs. En outre, cette représentation doit permettre, en chaque point d'intégration, la détermination des propriétés matériaux, puisqu'un élément macro peut contenir plusieurs phases différentes et que les patches handbook peuvent se chevaucher. Cette description n'est pas aisément acquise, et nécessite des développements particuliers.

4.3 Méthode des discontinuités fortes (SDA)

La méthode SDA (Strong Discontinuities Approach) est très semblable à la XFEM. Elle permet l'introduction dans un élément, d'un saut dans le champ de déplacement. La grande différence réside dans le choix de l'enrichissement cinématique utilisé. Le champ u est décomposé de la façon suivante :

$$u(x) = \bar{u}(x) + \hat{u}(x)$$

avec :

$$\hat{u}(x) = (H_{\Gamma}(x) - \phi(x))[[u]]$$

La fonction ϕ est une fonction régulière qui permet d'appliquer les conditions limites seulement sur le terme \bar{u} et non sur le champ global comme pour les méthodes de la PUM. Cette fonction est choisie de telle façon à localiser le support de \hat{u} aux éléments traversés par la discontinuité (qui s'exprime souvent en une combinaison linéaire de H_{Γ} et des fonctions de forme). On peut montrer que les degrés de liberté ainsi ajoutés sont élémentaires, semblables à des variables internes à chaque élément. On pourra trouver plus de détails ainsi qu'une comparaison entre XFEM et SDA dans [Oliver *et al.*, 2006].

4.4 Bilan

Les méthodes d'enrichissement cinématique, en particulier basées sur la PUM, sont d'une grande flexibilité vis-à-vis de la simulation de structures complexes incluant des surfaces internes (fissures et interfaces). En outre, la nécessité de générer un maillage conforme de la structure, tâche complexe, est pour ainsi dire évitée. On notera toutefois que dans le cas de la XFEM, le maillage en pointe de fissure doit être suffisamment fin, et ce pour l'intégration et une bonne représentation de la géométrie de la fissure. La difficulté est cependant reportée sur les techniques de description (level-set, CAO) des surfaces implicites et sur l'intégration des nouvelles fonctions de forme (positionnement des points de Gauss *ad hoc* ou intégration adaptative).

Les problèmes handbook numériques ont montré une efficacité remarquable pour le traitement de structure comportant un très grand nombre de détails structuraux. Le choix des conditions limites utilisées est cependant une question encore ouverte. Enfin, l'extension aux non-linéarités de type fissuration et décohésion aux interfaces est non triviale. En effet, il faut mettre en place une stratégie de mise à jour des problèmes handbook dont la géométrie change, et/ou ajouter à la volée des patches le cas échéant.

5 Conclusion et rappel des objectifs

Les objectifs à long terme des présents travaux sont de fournir une méthode adaptée à l'optimisation d'une famille de matériaux. Dans le cas des CMCs, cela se traduit par la modélisation du fil, qui semble une échelle adaptée pour obtenir un indicateur fort de la durée de vie du composite sous chargement chimico-thermomécanique, voir Ch. 1 Sec. 4. Pour ce faire, la microstructure hétérogène du fil doit être prise en compte et la fissuration qui s'y développe modélisée, car elles pilotent directement l'oxydation au coeur du matériau. La partie physico-chimique, liée à l'oxydation des différentes phases ne font cependant pas partie de la présente thèse.

Compte tenu de la complexité de la structure du fil et du réseau de fissuration, la démarche de matériau virtuel que l'on se propose de développer doit répondre aussi efficacement que possible aux points suivants :

- une représentation aussi légère que possible de la structure. En effet, le maillage frontal de celle-ci semble peu judicieux, car il demande beaucoup de temps et d'intervention humaine. De plus, compte tenu des objectifs d'optimisation (et donc d'automatisation), cette étape est à répéter plusieurs fois ;
- la prise en compte de la microstructure à petite échelle, la redistribution des contraintes étant requise pour prédire efficacement la rupture ;
- la prédiction du réseau de fissuration à l'échelle de la microstructure.

A cela s'ajoutera la génération de microstructures réalistes, qui reflète les réalisations réelles issues du procédé hybride utilisé par Snecma Propulsion Solide pour ses CMCs.

Cet outil doit permettre de générer des microstructures pour lesquelles les paramètres de fabrication (nombre de fibres, dispersion, épaisseurs des couches matricielles) peuvent varier.

Le recours à une méthode multiéchelle semble indiqué afin de prendre en compte les phénomènes microscopiques, sans avoir à traiter le problème avec une représentation fine sur tout le domaine. Revoyons brièvement les choix principaux évoqués dans ce chapitre.

Les méthodes de décomposition de domaine s'appuient sur une discrétisation fine sur tout le domaine et à ce titre ne répondent pas directement au cahier des charges. De plus, la fissuration doit être traitée par une méthode additionnelle. Par ailleurs, les méthodes basées sur l'homogénéisation reposent essentiellement sur une séparation suffisante des échelles et la périodicité du VER. Dans notre cas, il semble difficile de définir un VER périodique en particulier compte tenu de la faible épaisseur du fil. De plus, la nécessité de prédiction de la fissuration mènerait à l'utilisation d'une méthode de type FE², pour laquelle la description d'un réseau de fissures à échelle macroscopique (ici, le fil) n'est pas aisée.

Les dernières méthodes évoquées, basées sur un enrichissement de la cinématique des éléments macroscopique, semblent quant à elles toutes indiquées pour la simulation de microstructures complexes en évitant les questions de génération de maillages conformes (du moins en partie). Ces méthodes ne sont pas véritablement multiéchelles (au sens d'une résolution couplée entre deux échelles est faite), mais permettent une représentation implicite des détails structuraux. De plus, ces méthodes ont démontré leur applicabilité à la simulation de la fissuration (principalement la XFEM). En outre, le concept de problèmes handbook et de motifs associés permet la simulation de structure mettant en jeu un grand nombre d'hétérogénéités pour un coût numérique assez réduit, ce qui semble particulièrement adapté à notre problématique.

Les travaux se sont donc orientés vers une méthode de type GFEM associée au concept de problèmes handbook, qui semble bien adaptée à la modélisation de microstructures avec un grand nombre d'hétérogénéités. Ces derniers sont en effet un moyen élégant de prendre en compte des phénomènes microscopiques, issus d'analyses numériques (par EF). La méthode sera cependant adaptée à la modélisation du fil et des spécificités de sa microstructure, *i.e* petites tailles des hétérogénéités. La suite de ce document se focalisera dans un premier temps sur la reconstruction de fil, sa description et l'extraction des problèmes handbook. Dans un second temps, la méthode de type GFEM sera mise en place dans laquelle un enrichissement microscopique est utilisé. L'architecture de code de calcul y sera abordée. Puis la démarche sera appliquée dans le cadre de la simulation du fil de CMCs, en 2D puis étendu à la 3D dans un cas simple. Enfin, la dernière partie de ce document se concentrera sur l'extension de la méthode à la prédiction de la fissuration se développant dans le fil.

Chapitre 3

Le matériau Virtuel

DANS ce chapitre nous allons détailler la démarche de modélisation proposée et en particulier les grandes étapes et outils associés. Une procédure de génération de morphologie de fil pragmatique sera proposée ainsi que les outils d'extraction et de discrétisation des motifs. Le choix de ces derniers sera détaillé dans le contexte de la modélisation du fil de CMC dans le Chapitre 5.

Sommaire

1	Démarche proposée	60
1.1	Les hypothèses fondatrices	60
1.2	Les étapes de la démarche et l'organisation des outils	60
2	Reconstruction de la microstructure	62
2.1	Traitement des micrographies	62
2.2	Reconstruction du fil en 2D	69
3	Extraction des motifs	75
3.1	Aspects techniques de la représentation	75
3.2	Génération des maillages supports	76
4	Bilan	77

1 Démarche proposée

1.1 Les hypothèses fondatrices

On souhaite mettre en place un matériau virtuel, qui soit capable d'optimiser une famille de matériaux. Cette démarche est ici développée dans le cas des CMCs, pour lesquels un critère clef est la durée de vie sous chargement thermomécanique et chimique. On se propose de commencer par la prédiction du comportement élastique et de la fissuration. L'étude bibliographique présentée dans le premier chapitre a permis de déterminer que l'échelle de modélisation la plus pertinente semble être celle du fil, car la plupart des mécanismes mécaniques et physico-chimiques y apparaissent. C'est pourquoi, la suite des travaux se basera sur l'hypothèse que **la durée de vie du matériau est pilotée par celle du fil**. Cette démarche permettra de prédire l'influence de la microstructure sur le comportement et la durée de vie et surtout leurs tendances, capitales en terme d'optimisation. La durée de vie du fil et sa tendance sont en effet des indicateurs forts qui devraient fournir une aide aux élaborateurs des matériaux.

Il faut donc une modélisation du fil, apte à représenter la microstructure et les phénomènes microscopiques qui s'y développent (mécaniques dans un premier temps). **L'idée est de reconstruire ce fil et son comportement à l'aide de motifs**. Ces motifs sont en quelque sorte des briques élémentaires regroupant des entités topologiques (groupes de fibres, pores ...) et qui vont permettre d'une part la reconstruction de la microstructure du fil d'un point de vue topologique (organisation des différentes phases du matériau) et d'autre part, la détermination des champs de perturbation induits à petites échelles (concentration de contraintes entre fibre et matrice, autour des pores). Cette manière de procéder a des similarités avec les travaux de Strouboulis sur la GFEM avec un handbook numérique et sur lesquels nous reviendrons dans le chapitre suivant. En effet, chaque motif va donner lieu à la mise en place d'un problème du handbook afin de calculer, numériquement, le champ induit par la présence du motif au sein du fil. Le modèle mis en place a donc deux échelles, l'une macroscopique qui va décrire la géométrie globale du fil, son comportement homogène et les champs à grandes longueurs de variation, l'autre microscopique et constituée des motifs et des problèmes du handbook associé.

1.2 Les étapes de la démarche et l'organisation des outils

Les hypothèses fondatrices étant posées, nous allons nous concentrer sur l'organisation des différents outils dans la démarche de matériau virtuel. Compte tenu des objectifs d'optimisation, deux outils sont nécessaires :

1. un outil de simulation de la morphologie (CMCmorph) ;
2. un modèle numérique pour mener la simulation (MGFEM).

Le premier outil doit permettre la génération de la microstructure du fil, cadre grisé **figure 3.1**. Il doit de plus mettre en oeuvre une description de type CAO, grâce à laquelle les motifs pourront être librement extraits et maillés. Idéalement il s'agit d'un outil de simulation de procédé. Cet outil n'est cependant pas disponible pour le moment et est

à l'étude pour les CMCs, voir [Reuge et Vignoles, 2005, Vignoles *et al.*, 2011]. C'est pourquoi un outil alternatif a été développé, CMCmorph, se basant sur des considérations purement descriptives et statistiques et qui s'appuie sur l'étude de micrographies du fil. Il est implanté dans Matlab et profite ainsi de certaines bibliothèques et fonctions présentes dans le logiciel. L'extraction des motifs est de plus gérée à ce niveau, par le biais d'une bibliothèque particulière qui sera détaillée par la suite.

Ces motifs, leurs maillages et leurs propriétés sont ensuite dirigés vers le modèle numérique à proprement parler, MGFEM, qui exploite la plateforme logicielle du laboratoire LMTpp pour la structure du programme et les outils de résolution [Tranquart, 2012]. On notera que la génération des maillages est volontairement laissée à un logiciel tiers, Gmsh. Ceci s'explique par le fait qu'aucun mailleur de cette qualité n'est présent dans Matlab ou dans la plateforme. Nous reviendrons plus en détails sur ce programme dans le chapitre 4.

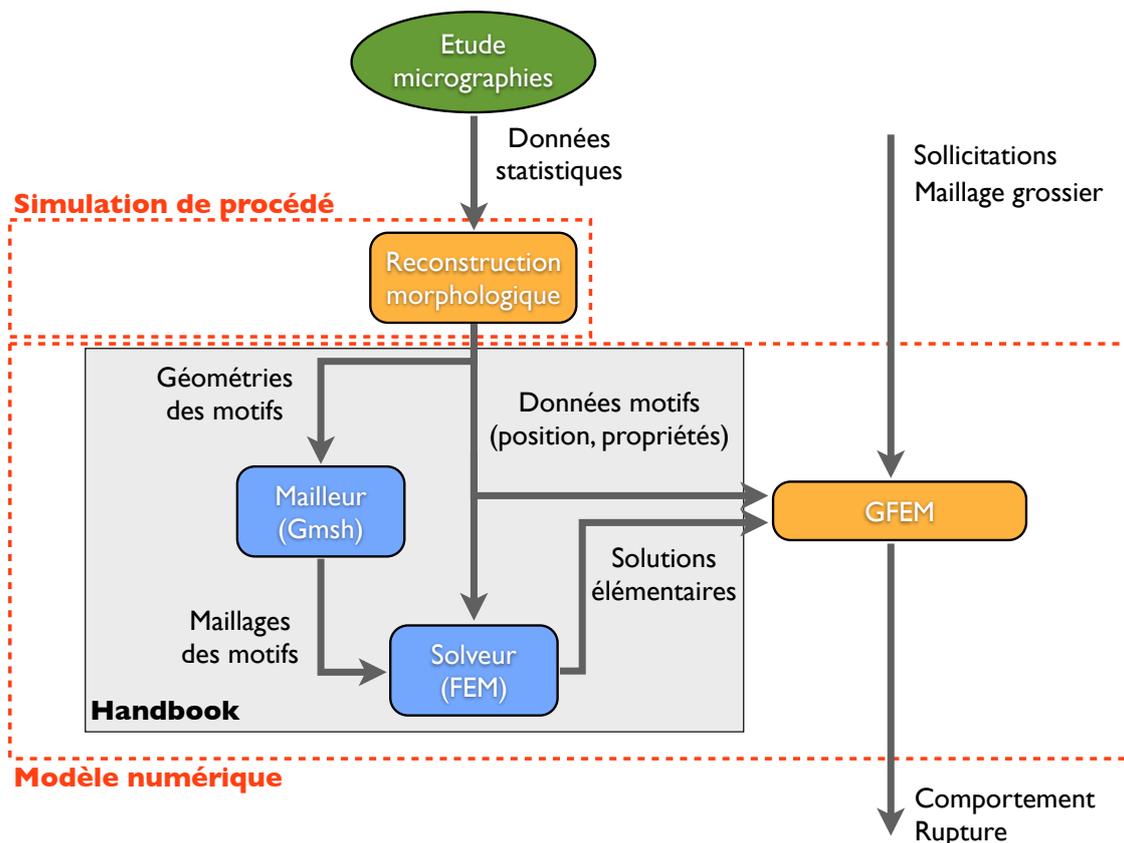


FIGURE 3.1: Organisation des différents outils mis en place dans la stratégie de matériau virtuel et les flux les reliant.

2 Reconstruction de la microstructure

L'outil de reconstruction de microstructures est à présent abordé, en se basant sur un exemple particulier de micrographie. Il faut bien entendu étendre cette étude à plusieurs réalisations pour une meilleure représentativité. Dans un premier temps, une étude assez générale de la micrographie est effectuée dont une partie des caractéristiques vont ensuite être utilisées afin de paramétrer le modèle de reconstruction, basé sur des processus aléatoires. Puis la procédure de reconstruction, basée sur cette étude, est développée et chacune des étapes est explicitée.

2.1 Traitement des micrographies

Le traitement des micrographies n'est pas automatique, celles-ci ayant souvent des propriétés d'exposition (luminosité, spectre) différentes et variant au sein de chacune d'elles. C'est donc un traitement au cas par cas, demandant beaucoup d'intervention humaine.

Dans un premier temps, la partie de traitement d'images est présentée, dans laquelle les différentes phases sont extraites. Puis, ces résultats sont analysés statistiquement, en vue de la mise en place de la procédure de reconstruction.

2.1.1 Analyse par traitement d'image

Afin d'étudier les différentes phases du matériau, chacune d'elles doit être extraite de l'image. La procédure utilisée ici repose sur trois étapes :

1. la correction des images (exposition, niveau de gris ...),
2. le seuillage des phases étudiées,
3. la séparation des entités au sein d'une phase.

La première étape consiste à s'assurer que chaque phase a un niveau de gris qui lui est propre. Pour cela, il est souvent nécessaire de corriger la luminosité dans certains domaines de l'image, comme les bords qui sont souvent plus sombres que le centre. De plus, le spectre des niveaux de gris est retravaillé afin que l'image utilise toute l'étendue du spectre possible **figure 3.2**, ce qui permet de séparer au mieux les phases. C'est l'étape la plus « manuelle », car la luminosité change suivant les micrographies, et la correction se fait au cas par cas avec un logiciel de retouche d'image, en éclaircissant les zones sous-exposées (trop sombres).

Puis, chacune des phases est extraite par seuillage (threshold). Cette opération consiste à sélectionner sur l'image tous les pixels qui ont un niveau de gris compris dans une certaine plage et donc qui appartiennent à la même phase, d'où l'intérêt de bien avoir corrigée celle-ci initialement. On notera que certaines phases peuvent présenter des niveaux comparables, ce qui rend difficile leur séparation par cette technique et requiert alors une certaine connaissance du matériau et une intervention humaine. Nous nous sommes concentrés sur l'extraction des fibres, des blocs de matrice voie liquide et les pores. Le

reste de la matrice étant le plus souvent constitué d'un dépôt de plusieurs couches d'une épaisseur quasi-constante. Il y a bien entendu des sites où ce dépôt est plus fin, typiquement lorsqu'une zone se bouche et que le précurseur gazeux ne peut plus l'atteindre. On négligera ces zones par la suite. À noter qu'il est souvent nécessaire de filtrer les artefacts

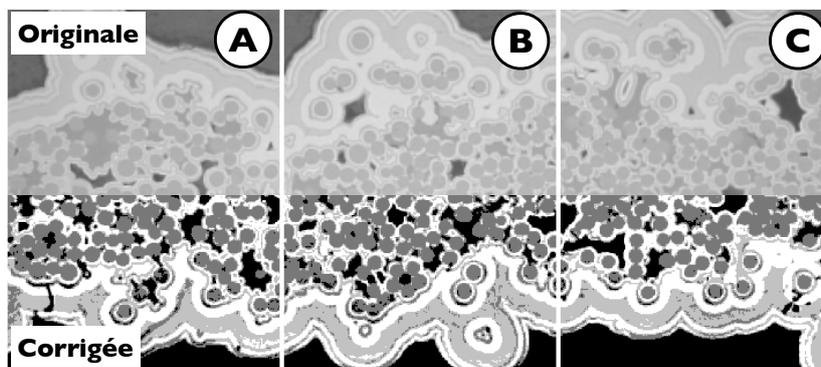


FIGURE 3.2: Correction de l'exposition et des niveaux de gris.

qui apparaissent au seuillage (petit ensemble de pixels ne faisant pas partie de la phase). Ceci est fait grâce à des opérations de morphologie mathématique de type ouverture. Cette opération consiste, sur une image binaire, en une érosion des pixels à 1 par un élément structurant de type disque de rayon donné, suivie d'une dilatation par le même élément structurant, voir **figure 3.3**. Ceci a pour résultat de supprimer tous les artefacts plus petits que le diamètre de l'élément structurant tout en ne modifiant que peu les grands ensembles de pixels, voir exemple **figure 3.4**. A noter que l'on peut éventuellement « perdre » les nodules et pores les plus petits.

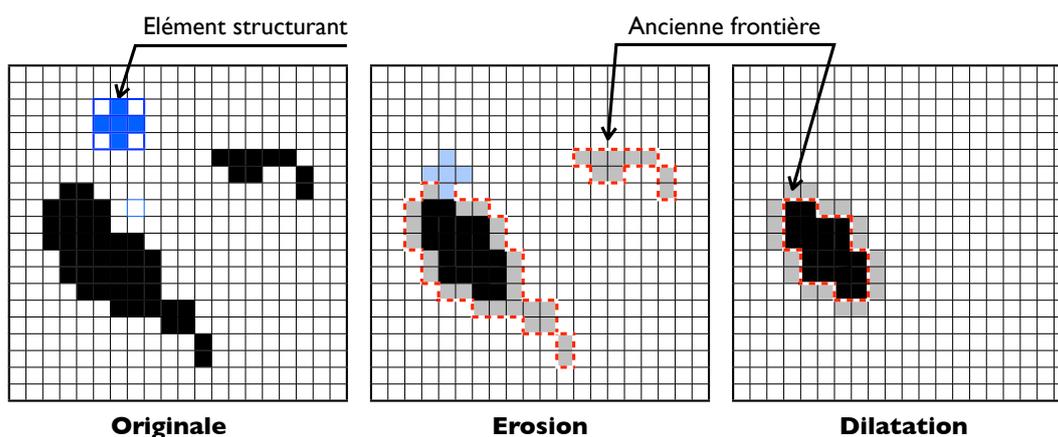


FIGURE 3.3: L'ouverture correspond à une érosion suivie d'une dilatation. Cela permet de filtrer les objets plus petits que le diamètre du l'élément structurant.

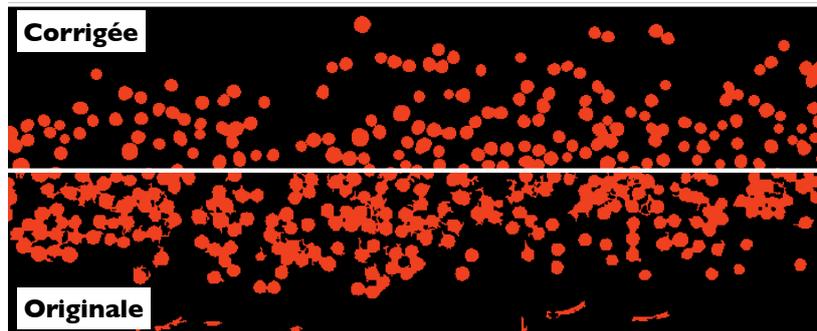


FIGURE 3.4: Seuillage des fibres et suppression des artefacts de seuillage par ouverture.

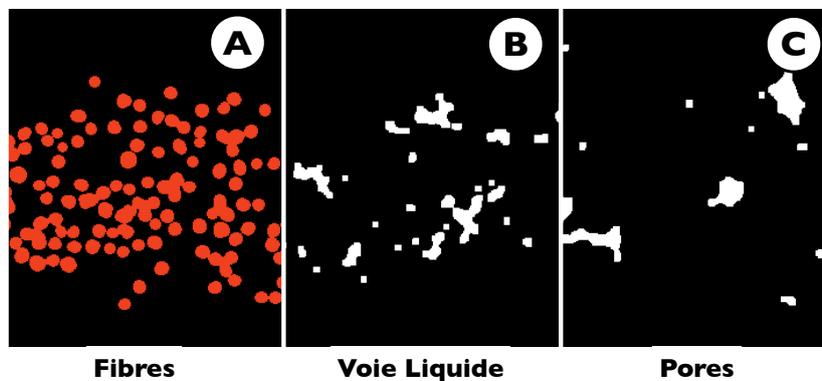


FIGURE 3.5: Seuillage des fibres, des nodules de voie liquide et des pores sur les zones A, B et C définies sur **figure 3.2**.

Une fois les phases désirées isolées **figure 3.5**, il est intéressant d'en séparer les entités, en particulier les fibres dont certaines se touchent et forment des paquets. Il faut pouvoir les séparer et les identifier afin d'étudier la dispersion des centres, la variation de diamètre... Ici, différentes méthodes peuvent être envisagées. Le repérage des fibres peut se faire à l'aide de la transformée de Hough, une technique permettant l'identification dans une image de forme particulière comme des lignes, cercles... Connaissant une paramétrisation de l'objet recherché, l'image est transformée dans l'espace de ces paramètres. L'identification de l'objet revient alors à rechercher des maxima locaux dans cette nouvelle image, donnant les paramètres de l'objet. Cette technique fonctionne bien pour la recherche d'objets simples tels que lignes et cercles et est peu sensible au bruit. Cependant, si la paramétrisation fait apparaître plus de deux paramètres (comme pour un cercle de position et de rayon inconnu), la technique est lourde à mettre en oeuvre. La technique employée ici revient à séparer les paquets de fibres à l'aide d'un outil simple appelé « watershed ». Le principe de cet outil est de travailler sur une image en niveaux de gris, pour laquelle la valeur d'un pixel définit son altitude. Ainsi, l'image correspond à un

ensemble de bassins et de collines, chaque bassin étant un objet. La ligne de démarcation entre deux bassins donne la frontière entre ceux-ci. Techniquement, l'image sur laquelle s'applique cette transformation est une image où la valeur de chaque pixel est définie par sa distance avec le plus proche pixel à zéro sur l'image binaire originale et qui définit alors des bassins pour les objets, voir **figure 3.6**. Le résultat de cette opération peut être superposé sur la micrographie d'origine pour permettre une comparaison qualitative. On notera que le découpage des différentes fibres peut s'avérer être d'une qualité moyenne lorsque plusieurs (typiquement 4 ou 5) sont collées, voir **figure 3.7**.

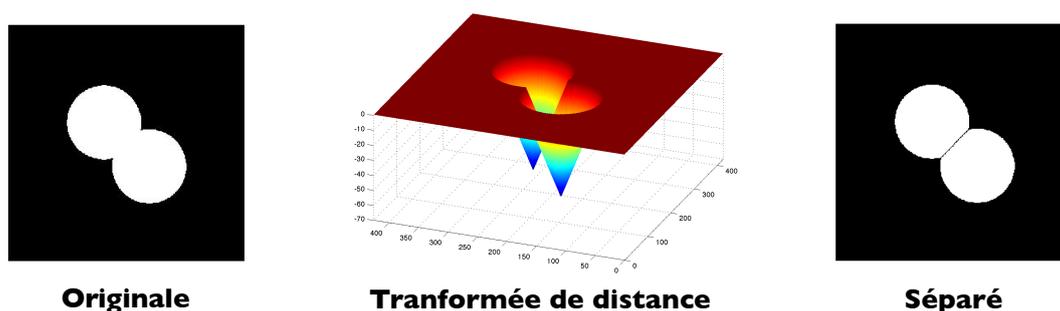


FIGURE 3.6: Séparation des fibres par watershed.

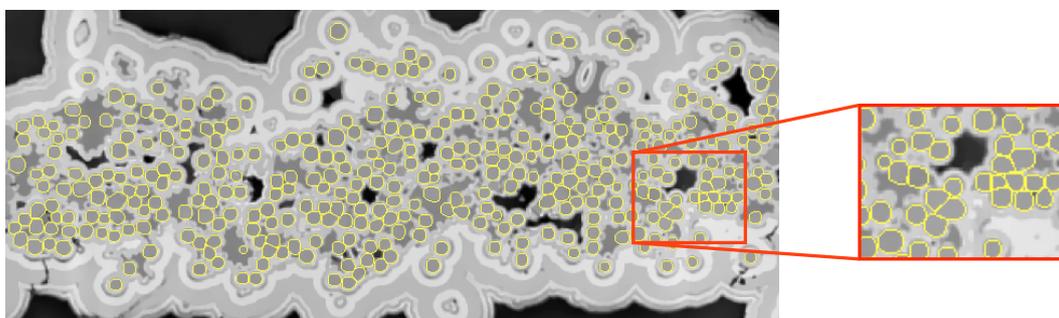


FIGURE 3.7: Séparation des fibres par watershed.

2.1.2 Analyse statistique

Nous allons à présent caractériser (du moins en partie) chacune des phases extraites précédemment. Divers outils sont utilisés dont en particulier un outil d'analyse particulière. Cet outil va permettre l'extraction de données quantitatives sur chaque entité d'une phase. Les entités sont identifiées dans l'image car chacune d'elles définit un contour fermé de pixels (leur frontière). Chaque contour est alors identifié un à un, jusqu'à ce que tous soient recensés. Les données utilisées par la suite sont :

- la position du centre de gravité (unité : pixels),
- la surface (unité : pixels²).

Afin de donner une idée des dimensions au lecteur, on conviendra que l'on a environ 12 pixels dans un diamètre de fibre (soit 1 pixel = 1 μ m environ).

Etude de la distribution de fibres. Dans un premier temps, la distribution spatiale des fibres est étudiée. A cette fin, trois mesures sont utilisées :

- une carte d'intensité,
- le covariogramme de l'image binaire des fibres,
- la distribution cumulée des distances d'une fibre à sa plus proche voisine (distance centre à centre).

La carte d'intensité est une image de la densité locale (ratio du nombre d'événements dans une fenêtre et de sa surface) des fibres dans le domaine. Cette mesure est souvent associée à l'étude de processus aléatoire de Poisson (tirage de points) et permet de caractériser la distribution au premier ordre (c'est à dire à grande échelle). Le calcul de cette carte se fait en comptant les événements (les fibres) dans une fenêtre mobile de dimension donnée. Cette longueur doit être choisie judicieusement, trop grande elle rendrait la carte inutile et, trop petite, elle rendrait la mesure sujette au bruit. Ici, une dimension équivalente à 10 rayons de fibres est utilisée pour dresser la carte, **figure 3.8**, ce qui permet une bonne résolution dans l'épaisseur du fil sans être trop sensible au bruit. On notera assez logiquement que les fibres sont sensiblement plus présentes dans la zone centrale du fil.

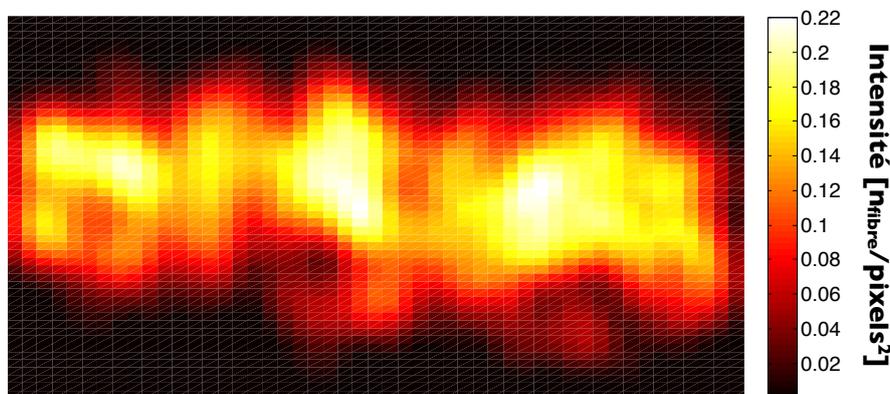


FIGURE 3.8: Estimation de la carte d'intensité de la distribution de fibre, calculée avec une fenêtre d'une taille de 10 diamètres de fibres. On notera que les effets de bords ne sont pas pris en compte dans l'estimation (intensité anormalement faible sur le bord à gauche et à droite).

Les deux mesures suivantes, associées à des quantités du second ordre, permettent de caractériser la distribution et son organisation à diverses échelles. Un outil est le covariogramme, estimé à partir de l'image binaire des fibres **figure 3.4**. Le covariogramme

fournit en effet une estimation de la covariance grâce aux images expérimentales [Jeulin, 2009]. A ce titre, il permet d'estimer la dépendance spatiale entre deux points au sein du processus aléatoire, *i.e.* la probabilité conjointe que $X \in A$ et que $X + h \in A$, avec h un vecteur et A l'ensemble des points appartenant aux fibres. C'est pourquoi cet outil permet de détecter une structure dans le processus, comme des clusters, ou une périodicité. Dans le cas d'un processus stationnaire, le variogramme $\gamma(h)$ est relié à la covariance $C(h)$ (lorsqu'elle existe) par :

$$\gamma(h) = C(0) - C(h) = P\{X \in A, X + h \in \bar{A}\}$$

avec $C(0) = P\{X \in A\}$. Pratiquement, le covariogramme est estimé à partir de deux images binaires, l'originale I et une image I_h translatée de h de celle-ci, voir **figure 3.9**. $\gamma(h)$ correspond alors au nombre de pixels à 1 dans $I \cap I_h$. L'étude des covariogrammes de l'exemple traité, pour un déplacement h horizontal et vertical, ne met pas en évidence une structure cachée **figure 3.10**. Il y a en effet absence des pics à intervalles réguliers caractéristiques d'une périodicité. On notera que les deux variogrammes présentent une rupture de pente en $\alpha \simeq 10$ pixels, correspondant environ au diamètre moyen de fibre. Ceci est caractéristique d'une distribution de disques non recouvrants, car il définit la longueur à partir de laquelle les deux évènements $X \in A$ et $X + h \in A$ deviennent indépendants.

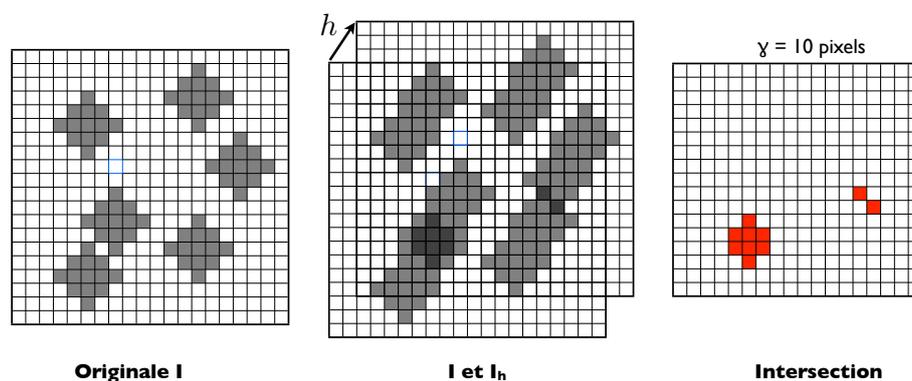


FIGURE 3.9: Estimation pratique du covariogramme d'une image binaire.

Enfin, la distribution cumulée des distances d'une fibre à sa plus proche voisine est estimée¹. Cette fonction reflète les distances caractéristiques de la distribution à petite échelle. On s'intéressera plus particulièrement aux distributions cumulées (estimées) des distances d'une fibre à sa première et seconde plus proche voisine, définies par :

$$G^{(j)}(w) = \frac{\#\{w_i^{(j)} \leq w\}}{n}$$

1. Il est à noter que cet outil est sensible aux effets de bords. En effet, une fibre située au bord aura moins de voisines qu'une fibre au centre. L'implantation de l'estimateur prend en compte une correction des effets de bords, définie dans [Martinez et Martinez, 2002].

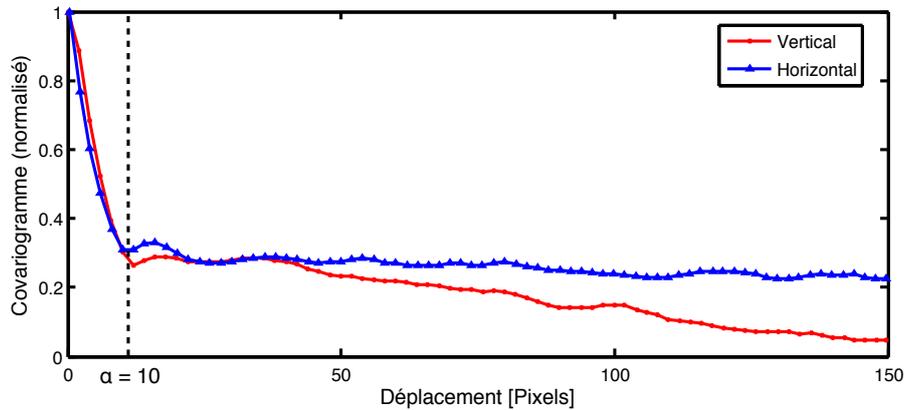


FIGURE 3.10: Covariogrammes de la distribution de fibres, vertical et horizontal.

où $\#$ est le nombre d'évènement, w une distance, $w_i^{(j)}$ la distance de la première ($j = 1$) ou de la seconde ($j = 2$) plus proche voisine et n le nombre de fibres. Le tracé de la fonction $G^{(1)}$ permet souvent d'indiquer l'existence de cluster dans une distribution de points [Martinez et Martinez, 2002]. Les estimations des fonctions $G^{(1)}$ et $G^{(2)}$ sont tracées **figure 3.11**. On notera de prime abord la compacité assez importante du fil, caractérisée par le grand nombre de petites distances (forte croissance des courbes pour les petits w). Ces informations seront particulièrement utiles afin de comparer la reconstruction de morphologie par rapport à la microstructure réelle.

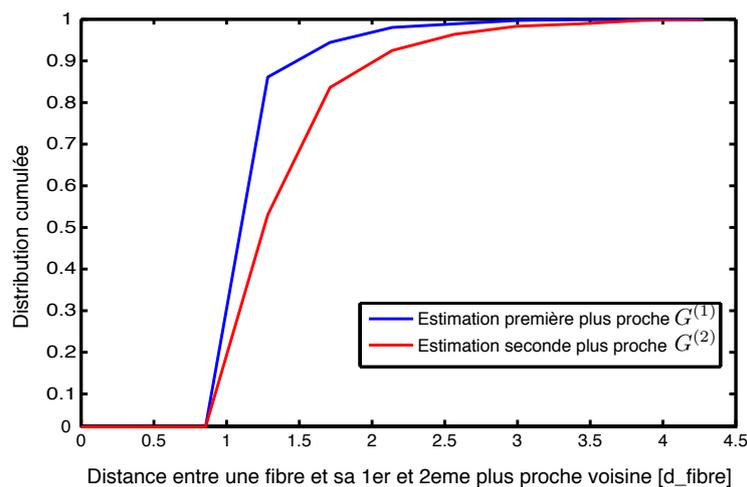


FIGURE 3.11: Estimation des distributions de distance d'une fibre à sa première et seconde plus proche voisine, fonction de la distance adimensionnée par le diamètre moyen d'une fibre.

Enfin, l'extraction des surfaces de chacune des fibres permet l'étude de la distribution des diamètres de fibres, présentée **figure 3.12**. On notera en outre que ces diamètres peuvent varier de manière importante, du simple au double.

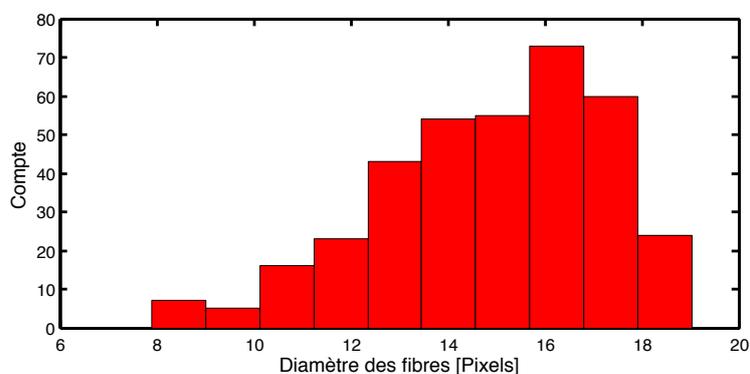


FIGURE 3.12: Distribution des diamètres de fibres (en pixels).

Etude des pores et des nodules de matrice voie liquide. L'étude des distributions de pores et de nodules de matrice voie liquide est plus concise. En effet, compte tenu de l'historique de fabrication, leur position et leur forme sont largement pilotées par la position des fibres, car au commencement il y a la préforme fibreuse. Dans le cas des nodules de matrice issus de la voie liquide, on remarque qu'ils sont généralement connectés à peu de fibres, entre 1 et 4, **figure 3.13** à gauche. La distribution de leurs surfaces montre qu'ils sont généralement de petites tailles, de l'ordre de 1 à 3 fois la section d'une fibre **figure 3.13** à droite. Enfin, la fraction surfacique de cette matrice dans la section étudiée est estimée à 5.3% .

Pour finir, les pores sont le plus souvent de petite taille, de l'ordre de 1 à 2 fois la section de fibre, **figure 3.14**. La fraction volumique liée à la porosité est estimée dans cette section à 2.8%². Il n'y a pas lieu ici d'étudier la connexion pores-fibres, car il n'y a que très rarement des fibres non recouvertes d'une couche de matrice.

2.2 Reconstruction du fil en 2D

2.2.1 Algorithme général

La reconstruction de la section du fil se veut principalement descriptive. Elle se base sur les hypothèses suivantes : d'une part les fibres pilotent la forme et la position des pores

2. Cette valeur est bien plus faible que les 10 - 15 % généralement constatés dans le matériau. Il faut préciser que le calcul ici est le ratio entre la surface totale des pores et la surface du fil. La macroporosité n'est donc pas prise en compte.

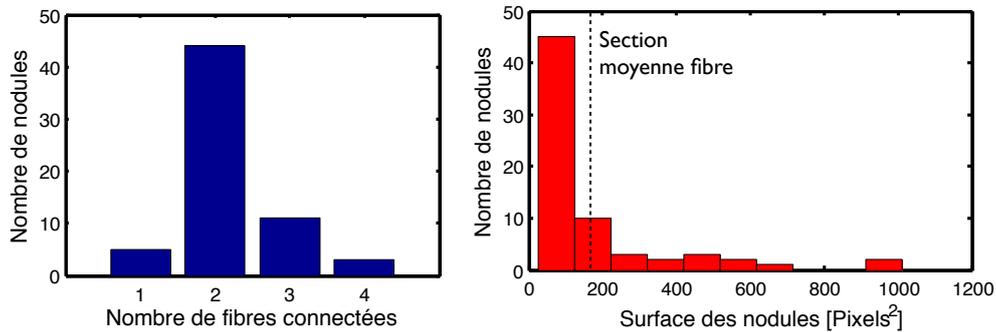


FIGURE 3.13: Distribution du nombre de nodules de voie liquide attachés à des fibres en fonction du nombre de fibres attachées (à gauche) et distribution de la surface des nodules de voie liquide.

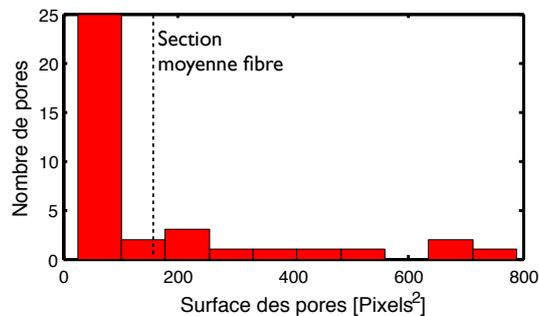


FIGURE 3.14: Distribution de la surface des pores.

et des nodules de voie liquide et d'autre part les couches de matrice voie gazeuse sont supposées parfaites, c'est-à-dire d'une épaisseur constante. La procédure de reconstruction suit l'historique de la fabrication et s'effectue en trois étapes :

1. tirage des centres de fibres dans la section du fil, suivant une loi de distribution imposée ;
2. création des nodules de matrice voie liquide dans la section du fil ;
3. création des dépôts de matrice voie gazeuse, qui va créer *de facto* les pores.

Ces trois étapes reposent toutes sur des processus de tirages aléatoires, issus et adaptés de la librairie Matlab « Computational Statistics Toolbox » [Martinez et Martinez, 2002]. Nous allons détailler chacune de ces étapes.

2.2.2 Tirage des fibres

Le tirage des centres des fibres s'effectue à l'aide d'un processus de Strauss hétérogène. C'est un processus qui permet de tirer des points dans un domaine (de type processus de

Poisson) au sein duquel il existe une distance de rejet δ , spécifiant que si le point tiré se trouve à une distance plus petite que δ d'un point existant, alors il est accepté avec une probabilité c^m où m est le nombre de points alentour à moins de δ . Le coefficient c est le paramètre d'inhibition. S'il est choisi égal à 1, cela signifie que le point est automatiquement rejeté s'il a un voisin plus proche que δ , ce qui est notre choix pour la suite.

Ce processus est dit hétérogène, car une loi de probabilité est imposée au tirage, en plus de la distance de rejet. Ainsi, la répartition spatiale des fibres tirées reflète la distribution observée sur les micrographies. Cette loi est issue de la carte d'intensité estimée lors de l'étude statistique précédente. Pour ce faire, la carte est normalisée et sert de loi de densité de probabilité au tirage des fibres. A cette fin, un algorithme de rejet est utilisé [Lantuéjoul, 2008] qui va permettre de simuler celle-ci (notée f) à partir d'une loi de densité de probabilité plus facile à simuler : une loi uniforme (notée U). Chaque nouveau centre est tiré à l'aide de l' **algorithme 1**, illustré **figure 3.15**.

Algorithme 1: Algorithme de tirage des centres suivant une densité de probabilité imposée.

pour $n_{\text{fibre}} < n_{\text{cible}}$ **faire**
 Génération d'un point \mathbf{X} aléatoirement suivant une loi uniforme dans le domaine ;
 Génération de $\alpha \in [0, 1]$;
si $\alpha \leq f(\mathbf{X})$ **alors**
 | Le point est admissible
sinon
 | Le point est rejeté

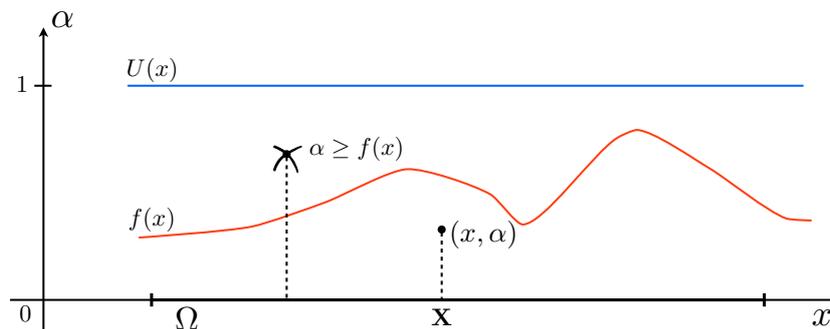


FIGURE 3.15: Simulation de la densité de probabilité expérimentale, à l'aide de la méthode de rejet.

2.2.3 Création des nodules de matrice voie liquide

La génération des nodules de matrice voie liquide est plus complexe. Ceux-ci résultent de la céramisation du précurseur liquide. Ce processus de solidification n'est pas aisé à modéliser, impliquant des réactions chimiques et des pertes de volume importantes. Cependant, on peut noter que la forme des nodules est pilotée par les fibres alentours, formant une sorte d'empreinte, mais à volume réduit, voir **figure 3.16**. Par ailleurs, on remarquera que ces nodules sont le plus souvent attachés à peu de fibre (entre 0 et 3, sur une section 2D).

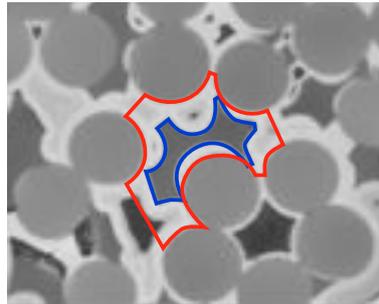


FIGURE 3.16: Chaque nodule (en bleu) semble être l'empreinte des fibres alentour (en rouge), mais transformée.

C'est sur ce constat que se base l'algorithme de génération. Dans un premier temps, un site est tiré dans le fil, et les centres des fibres alentours récupérés, **figure 3.17 a)**. Cela est fait à l'aide d'une triangulation de Delaunay, qui permet d'identifier les voisins naturels dans un nuage de point. À ce stade, un tirage permet de déterminer les fibres qui devront rester en contact avec le nodule.

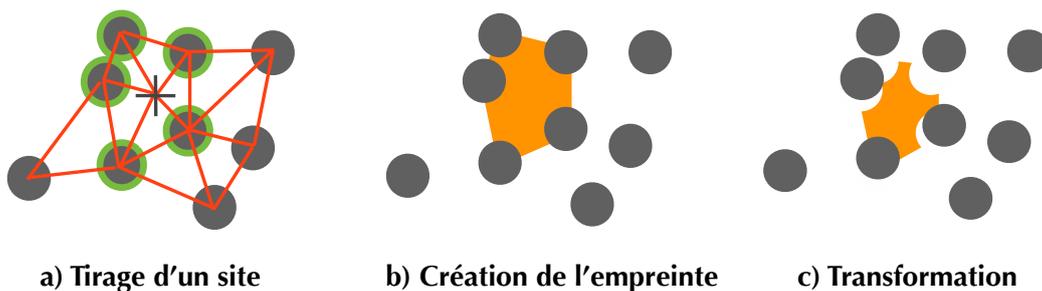


FIGURE 3.17: Etapes de la génération d'un nodule de matrice voie liquide.

Dans un second temps, l'empreinte des fibres alentour est prise. Elle est effectuée de manière géométrique, où le polygone formé par les centres des fibres voisines est intersecté avec des cercles qui représentent les sections de fibre, **figure 3.17 b)**. Enfin le polygone subit une perte de volume, sous la forme d'une homothétie de centre, le

centre de gravité et de rapport aléatoire (techniquement dans l'intervalle $[0.2, 0.8]$), où seuls les points n'étant pas liés aux fibres fixes sont autorisés à bouger, **figure 3.17 c**). La procédure continue jusqu'à ce que la fraction volumique ciblée soit atteinte. Toutes les opérations sur les polygones sont réalisées à l'aide d'une librairie orientée objet pour Matlab et développée à cet égard, sur laquelle nous reviendrons dans la Sec. 3.1.

2.2.4 Création de la matrice voie gazeuse et des pores

La génération de la matrice voie gazeuse n'est jamais faite de façon globale. Le séquençage des couches de différentes matrices est géré au moment de la création des motifs et de leur maillage. Sous les hypothèses choisies, elle correspond à une croissance homogène de la frontière des entités construites précédemment. On distingue donc deux cas :

- la création du séquençage ;
- la création des pores.

Dans le premier cas, il faut effectuer un décalage de la frontière des entités topologiques à une distance donnée. Pour les fibres, cette opération est simple, il s'agit simplement d'une homothétie de centre, le centre de la fibre. Il faut cependant gérer les intersections des contours, nous y reviendrons dans la section suivante. Le cas des nodules de matrice voie liquide est bien plus complexe, car la frontière à dilater n'est pas un convexe de forme simple. On utilise à cette fin un algorithme de dilatation développé par [Krispijn Scholte]. Il consiste à créer pour un ensemble de points du contour des points décalés d'une longueur donnée suivant la normale locale. Cet algorithme présente des difficultés dans les portions concaves du contour, pouvant mener à des aberrations. Ceci limite la robustesse de la procédure développée ici.

Dans le second cas, les opérations de morphologie mathématique sont utilisées, car elles se prêtent particulièrement bien à ce type d'exercice et sont de plus très rapides. Ainsi, il a été choisi de convertir les entités construites précédemment en image, sur laquelle est appliquée une dilatation de rayon correspondant à la mesure sur les micrographies, ou choisi en fonction de la microstructure à modéliser. Les pores sont construits *de facto*, et sont identifiés sur l'image à l'aide d'un outil de récupération de contour fermé dans une image binaire, et convertis à la volée en tant que polygone à l'aide de la librairie utilisée précédemment.

2.2.5 Exemples et comparaison

Un exemple de réalisation est présenté **figure 3.18**. Le fil reproduit consiste en 358 fibres et une matrice voie gazeuse monocouche (la génération de plusieurs couches ne posant par ailleurs aucune difficulté) et une fraction volumique de matrice voie liquide d'environ 4,5%. Il est intéressant de noter que la dispersion des fibres est assez proche de celle effectivement observée dans un fil réel, voir **figure 3.19**. Les nodules ont des formes assez vraisemblables, voir **figure 3.20**, bien que plus simples que dans le cas réel. En effet, compte tenu de l'algorithme de génération, il n'est pas possible d'obtenir des nodules de

grandes tailles et entourant des fibres, comme il peut être observé sur les micrographies. Bien entendu, un outil de simulation de procédé à proprement parler sera sans aucun doute en mesure de mieux prédire leur forme. Il peut de plus y avoir des nodules qui se chevauchent, même avec l'aide d'une distance de répulsion. Cette partie de création de nodule voie liquide doit être retravaillée afin d'améliorer sa robustesse.

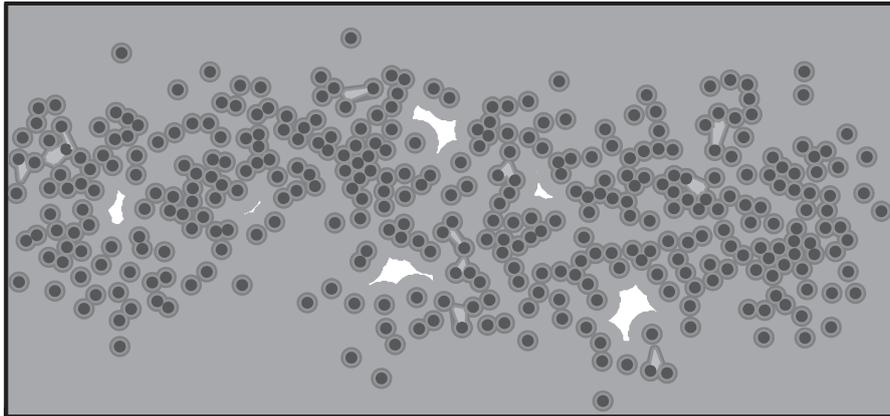


FIGURE 3.18: Exemple de réalisation ; la matrice voie gazeuse n'est constituée que d'une seule couche.

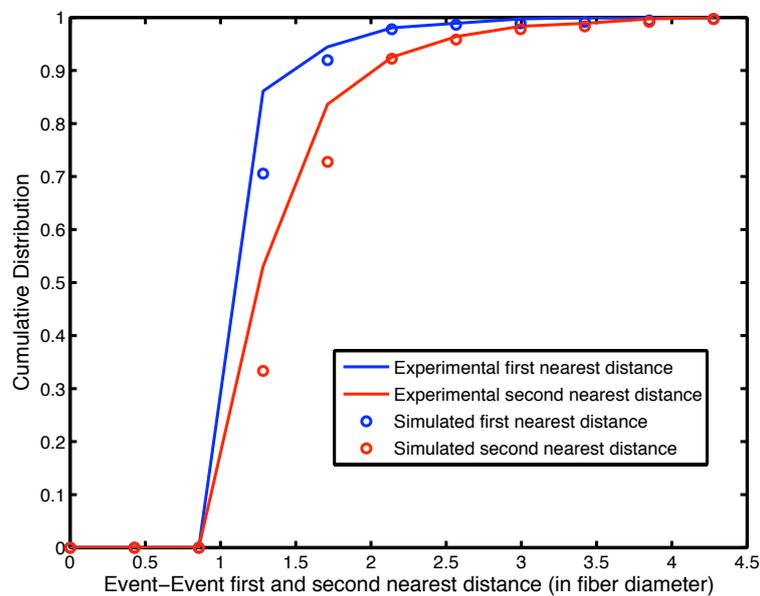


FIGURE 3.19: Comparaison entre les distributions cumulées des distances entre une fibre et sa première et seconde plus proche voisine.

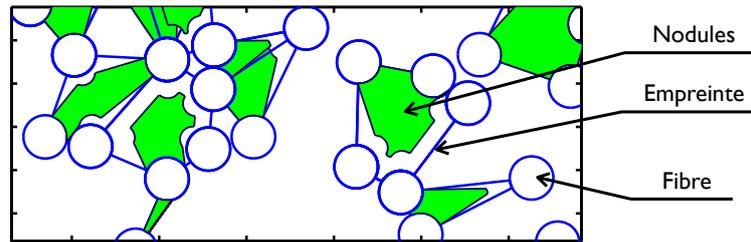


FIGURE 3.20: Exemple de nodules de matrice voie liquide obtenus.

3 Extraction des motifs

3.1 Aspects techniques de la représentation

Il a été évoqué, lors de la présentation de la GFEM, qu'une représentation de type CAO, où chaque entité puisse être identifiée, doit être disponible afin de faciliter l'extraction des motifs pour la construction du handbook numérique. Compte tenu de l'approche de reconstruction développée et de la nécessité d'identification des entités, une librairie de géométrie en 2D a été développée dans Matlab. Elle repose sur une vision orientée objet de la géométrie. Les objets et leurs principales opérations (géométriques et booléennes) sont résumés dans le **tableau 3.1**.

Classe	Attributs	Méthodes principales
Segment	2 points	cut, intersect, translation, rotation, homothetie
CircleArc	3 points	cut, intersect, translation, rotation, homothetie
Polyline	liste Segment et CircleArc	cut, add, minus, order, translation, rotation, homothetie, export_msh

TABLE 3.1: Classes et méthodes de la librairie de géométrie utilisée.

Chaque entité topologique (fibre, pore...) est représentée par des contours fermés orientés constitués de segments et d'arcs de cercle. Les opérations que l'on pourrait être amené à effectuer lors de la création de la morphologie sont gérées d'une façon semblable à un logiciel de CAO (à ceci près que l'on ne sauvegarde pas l'arbre de construction mais simplement les contours et surfaces). Les intersections des contours ainsi que les opérations booléennes définies entre eux sont effectuées automatiquement. Deux exemples sont présentés, dans le cas de la création d'un motif de trois fibres et trois couches matricielles, **figure 3.21** et dans le cas d'un nodule de matrice voie liquide, **figure 3.22**.

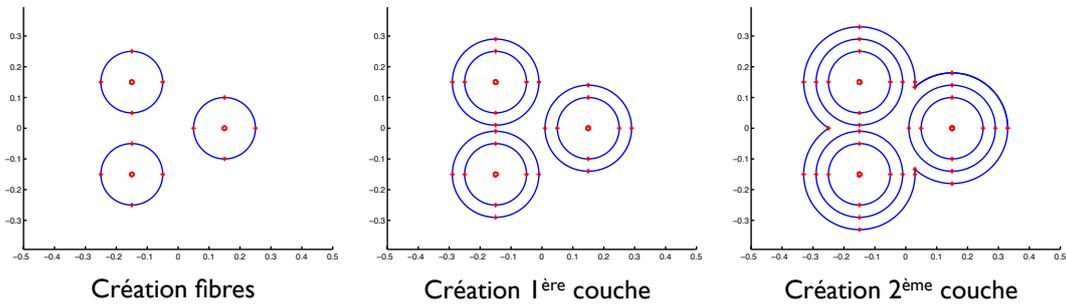


FIGURE 3.21: Exemples de géométrie obtenus à partir de la librairie Matlab.

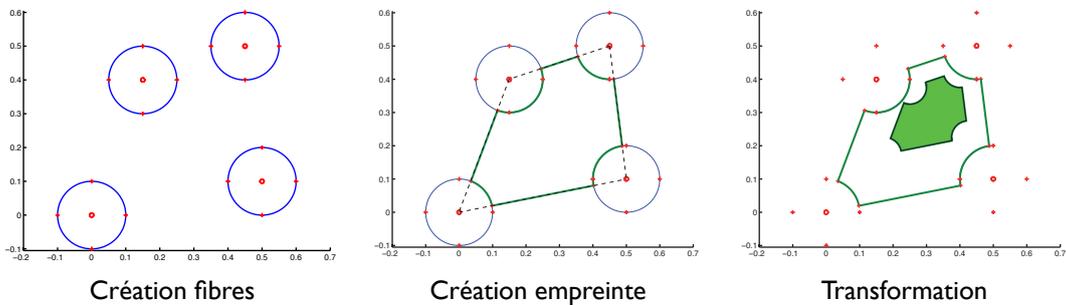


FIGURE 3.22: Exemples de géométrie obtenue à partir de la librairie Matlab.

3.2 Génération des maillages supports

Comme chaque entité est décrite par son contour, il est possible d'extraire de la représentation totale du fil certaines entités afin d'en créer un motif pour le Handbook. L'intérêt de la librairie réside dans le fait que cette description est parfaitement compatible avec la mise en données requise pour les logiciels de maillage, par exemple Gmsh, qui repose sur une description comparable. Ceci permet donc de générer automatiquement l'export de géométries vers le mailleur à l'aide d'un fichier *.geo. La **figure 3.23** présente deux exemples réalisés grâce à cette librairie. Les motifs retenus étant capitaux pour la qualité de la solution obtenue par la GFEM, un choix approprié doit être fait. Le critère de tri qui sera utilisé, sera détaillé dans le Chapitre 5 pour le cas des CMCs.

Le maillage est accompagné d'un fichier de paramétrage (XML), généré en même temps que les fichiers .geo. Ces fichiers regroupent les données des différentes phases (module d'Young, de Poisson) présentes dans le maillage, ainsi que le positionnement du motif dans le repère du fil.

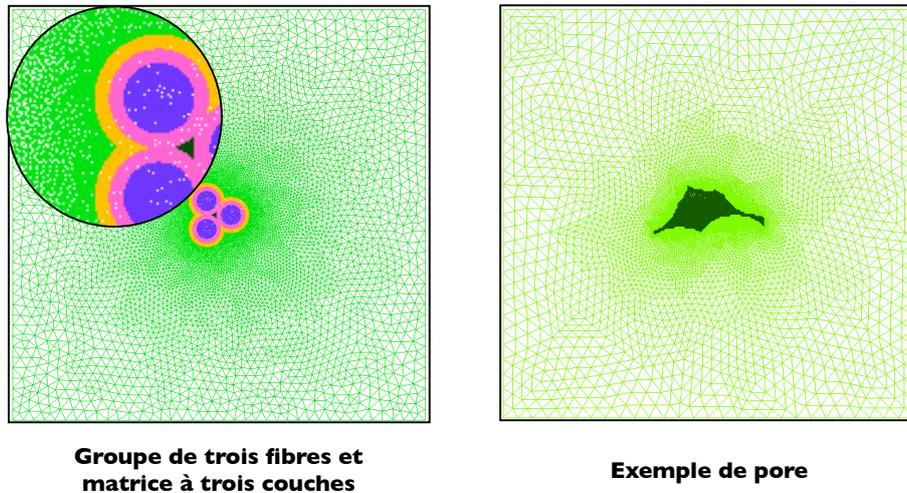


FIGURE 3.23: Exemples de maillages obtenus à partir du fichier généré par la librairie Matlab.

4 Bilan

Dans ce chapitre, la démarche de modélisation a été développée. L'accent a dans un premier temps été porté sur l'organisation des différents outils nécessaires à ces travaux et les flux de données qui les lient. Puis l'étude de micrographies, à l'aide d'outils de traitements d'images et statistiques, est détaillée. Cela a permis de caractériser le matériau et sa microstructure en termes de fractions volumiques des différentes phases et de quantités statistiques, comme l'espacement entre fibres.

Ces données matériaux sont ensuite utilisées comme entrées pour un outil de génération de la microstructure du fil. Cet outil n'est pas à proprement parler un outil de simulation de procédé, car les mécanismes physiques et chimiques n'y sont pas modélisés. En outre, ce type d'outil fait l'objet de recherche par ailleurs au sein du programme ARCOCE, mais n'était pas disponible au début de ces travaux. Notre outil permet néanmoins la génération de microstructures 2D réalistes du fil.

Enfin, cet outil utilise une représentation spécifique des entités topologiques, comparable à celle des modélisateurs CAO ou des maillages. Cette spécificité permet l'extraction et le maillage des motifs (groupes d'entités topologiques) de manière automatique, en ayant recours à un mailleur externe (ici, GMSH).

Cet outil de génération est à l'heure actuelle limité au cas de sections 2D du fil, bien que l'extension au tronçon 3D du fil soit envisagée dans le chapitre 5. De plus, certaines limitations dues au choix des algorithmes demeurent, en particulier lors de la création des couches de matrices dans le cas des nodules de matrice voie liquide, qui reposent sur des opérations topologiques relativement complexes à mettre en place.

Chapitre 4

Une GFEM multiéchelle

L'objectif de ce chapitre est d'introduire une méthode multiéchelle qui permette de reconstruire le fil et son comportement à partir d'un ensemble de motifs, de petite taille par rapport à la structure (le fil). Par application du principe de Saint Venant, ils induisent des perturbations localisées par rapport à la structure. Dans le cadre de la GFEM, des fonctions d'enrichissement locales sont donc introduites, issues d'une extension du problème de l'inclusion d'Eshelby au motif quelconque. Cette originalité permet de transférer le calcul des contributions à la matrice de rigidité globale, liées aux enrichissements, au niveau de chaque motif. Ces derniers prennent à présent en charge à la fois la description de la topologie et de la cinématique locale de la structure.

Sommaire

1	Introduction et rappel	81
1.1	Organisation des outils et rappel du problème	81
1.2	La méthode des éléments finis généralisée « classique »	83
2	GFEM et séparation d'échelles	87
2.1	Effet local des hétérogénéités	88
2.2	Formulation de la GFEM multiéchelle	92
2.3	Résumé	94
3	Définition et formulation des problèmes sur les motifs	95
3.1	Le problème de l'inclusion	95
3.2	Extension aux motifs quelconques	97

4	Implantation numérique	99
4.1	Rappel des opérations mises en jeu	100
4.2	Architecture de la plateforme	100
4.3	Intégration de la méthode dans la plateforme	104
5	Bilan	107

1 Introduction et rappel

1.1 Organisation des outils et rappel du problème

Dans ce chapitre, nous allons aborder le coeur du matériau virtuel, c'est-à-dire la méthode multiéchelle mise en place pour la modélisation et le calcul du fil, correspondant aux items « GFEM » et « Solveur FEM » sur le diagramme **figure 4.1**. Cette méthode sera présentée suivant le cadre de la GFEM, brièvement rappelée en ouverture, car les similitudes sont nombreuses. Dans un second temps, la définition des problèmes posés sur les motifs est détaillée dans le cadre de l'élasticité linéaire, sous l'hypothèse des petites déformations. Une fois la méthode formulée, l'accent est porté sur l'implantation de la stratégie au sein de la plateforme logicielle du laboratoire, grâce notamment aux outils LMTpp et Metil qui y sont développés. A noter que les motifs sont ici supposés connus et leur choix dans le cadre de la modélisation du fil de CMC sera détaillé dans le chapitre suivant.

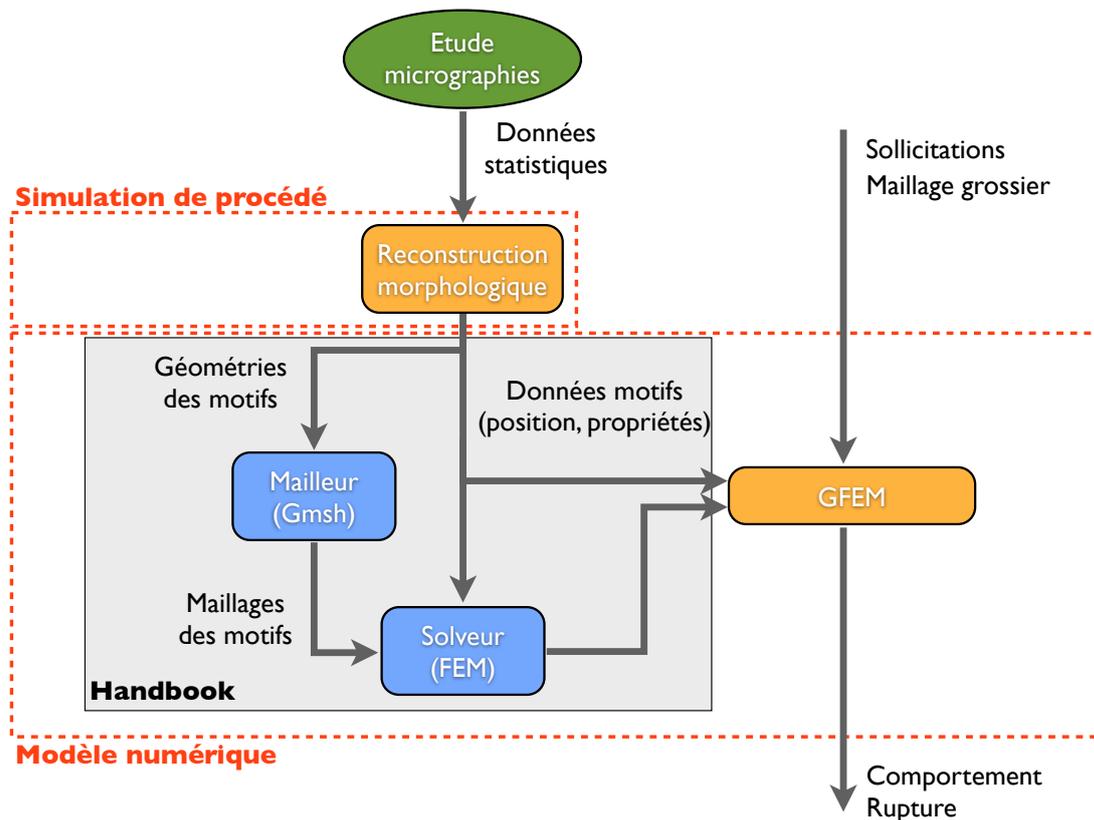


FIGURE 4.1: Organisation des différents outils mis en place dans la stratégie de matériau virtuel et les flux les reliant.

Rappelons à présent les notations et le problème à résoudre, qui correspondent à ce qui a été défini dans le Chapitre 2. On considère un domaine Ω soumis à des efforts imposés

F_d sur $\partial\Omega_F$ et à des déplacements imposés u_d sur $\partial\Omega_u$, **figure 4.2**. Ce domaine possède une microstructure, composée d'hétérogénéités notées P_i . Le domaine est de plus soumis à un effort volumique f_d dans Ω . On s'intéresse à la réponse statique, ou quasi-statique du domaine. Le comportement des différentes phases et hétérogénéités est supposé élastique linéaire fragile et le tenseur de Hooke, dépendant du point courant $x \in \Omega$, est noté $\mathbf{H}(x)$.

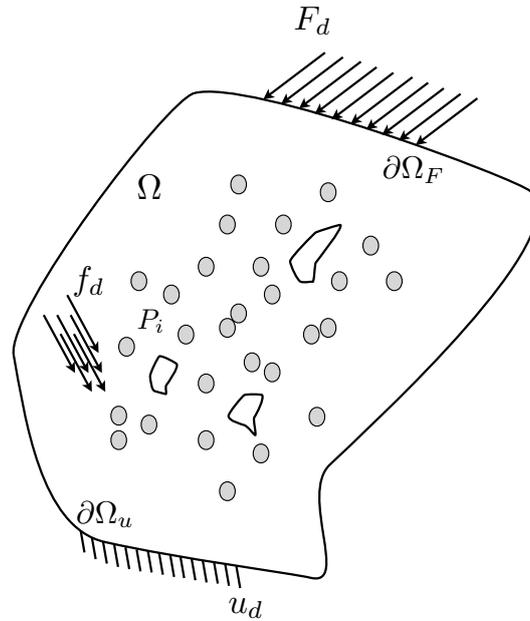


FIGURE 4.2: Schématisation du problème de référence.

On note le champ de déplacement u , le champ de contrainte σ et le champ de déformation ε . Le problème de référence s'écrit alors :

Problème 4.1: Trouver $(u, \sigma) \in \mathcal{U} \times \mathcal{S}$ vérifiant :

– l'admissibilité cinématique :

$$u = u_d \text{ sur } \partial\Omega_u$$

– l'admissibilité statique :

$$\operatorname{div}(\sigma) = f_d \text{ dans } \Omega$$

$$\sigma n = F_d \text{ sur } \partial\Omega_F$$

– la loi de comportement :

$$\sigma = \mathbf{H}(x)\varepsilon \text{ dans } \Omega \text{ avec } \varepsilon = \varepsilon(u) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T)$$

– critère de rupture (à définir ultérieurement)

où \mathcal{U} et \mathcal{S} sont les espaces à énergie finie classiquement utilisés en mécanique des milieux continus pour les déplacements et les contraintes respectivement.

1.2 La méthode des éléments finis généralisée « classique »

1.2.1 Principes généraux

La méthode mise en place dans ces travaux s'inspire fortement du cadre de la GFEM avec un enrichissement numérique, décrit dans les travaux de Strouboulis *et al.*. Il est intéressant d'en rappeler ici les détails afin, d'une part, de rappeler les notations adoptées et, d'autre part, de mieux identifier les points durs d'une telle méthode. La GFEM est une méthode de type Galerkin et basée sur la PUFEM [Melenk et Babuška, 1996], cf. Chapitre 2. C'est une méthode d'enrichissement cinématique de type nodale, fonctionnant par patch, plus que sur une vision éléments finis classique. L'interpolation prend la forme générale suivante :

$$u_h(x) = \underbrace{\sum_i^{n_{EF}} \tilde{\phi}_i(x) \tilde{a}_i}_{u_{EF}(x)} + \underbrace{\sum_i^{n_{PU}} \phi_i(x) \sum_j^{n_{enr}^i} a_j^{(i)} \psi_j^{(i)}(x)}_{u_{enr}(x)}, \quad \forall x \in \Omega \quad (4.1)$$

On discerne deux parties. La première, $u_{EF}(x)$, correspond à une interpolation classique de type éléments finis, où les $\tilde{\phi}_i(x)$ sont les fonctions de formes classiques de type polynomiales par morceaux. Cette partie est présente sur tout le maillage. La seconde partie, $u_{enr}(x)$, constitue un enrichissement construit à l'aide de la PUM. Elle permet d'ajouter à la base de fonctions de forme EF des fonctions $\phi_i \times \psi_j^{(i)}$ qui approchent mieux la cinématique. Les fonctions d'enrichissement $\psi_j^{(i)}$ sont connues analytiquement ou calculées par ailleurs, et définies sur des domaines indépendants du maillage courant, que l'on notera ω_j . Le produit des fonctions EF classiques ϕ_i avec les fonctions d'enrichissement permet de réduire le support de fonctions d'enrichissement ω_j au support des fonctions EF, noté Ω_i . Ainsi, on ajoute des degrés de liberté à certains noeuds du maillage, liés aux fonctions d'enrichissement, voir **figure 4.3**. De plus, on notera que $u_{enr}(x)$ s'annule sur le bord de son support (constitué de l'union des supports Ω_i).

On s'intéresse plus particulièrement à la GFEM des travaux de Strouboulis et de Duarte, où les fonctions d'enrichissement sont issues de problèmes numériques, résolus par une méthode éléments finis. Cette GFEM met en jeu trois étapes, illustrée **figure 4.4** :

1. L'extraction des motifs. Ces ensembles d'entités topologiques (fibres, pores...) servent au calcul numérique des fonctions d'enrichissement.
2. La résolution des problèmes posés sur ces motifs. On a ainsi un Handbook de solutions numériques, qui va servir à l'enrichissement du problème GFEM global.
3. La construction et la résolution du problème GFEM à l'aide de ce Handbook.

Compte tenu de la vision nodale de la méthode, il est difficile d'expliciter une matrice de raideur élémentaire, sachant que le nombre et la nature des degrés de liberté (et des fonctions de formes associées) changent d'un noeud à l'autre. Il est cependant intéressant d'expliciter la forme des intégrales à évaluer dans une telle méthode.

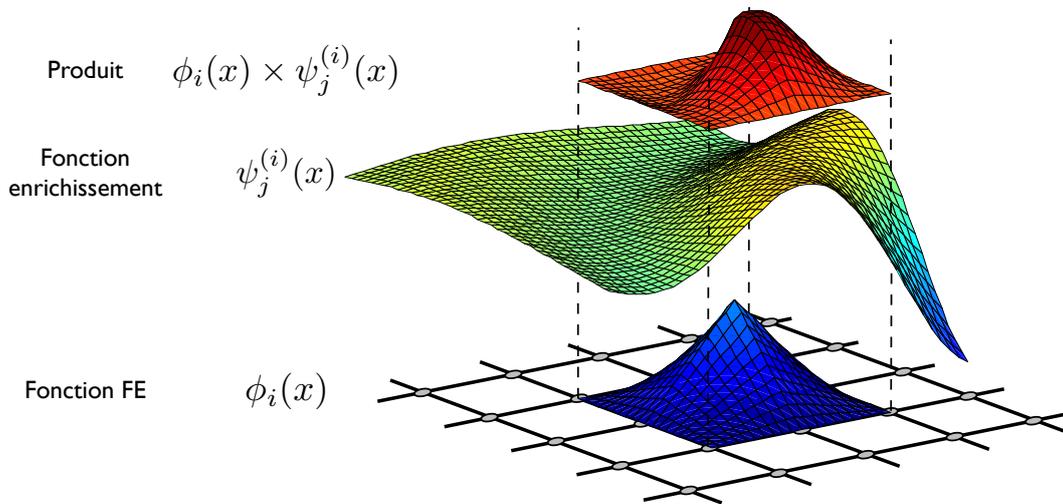


FIGURE 4.3: Représentation d'une fonction chapeau, d'une fonction d'enrichissement et du produit.

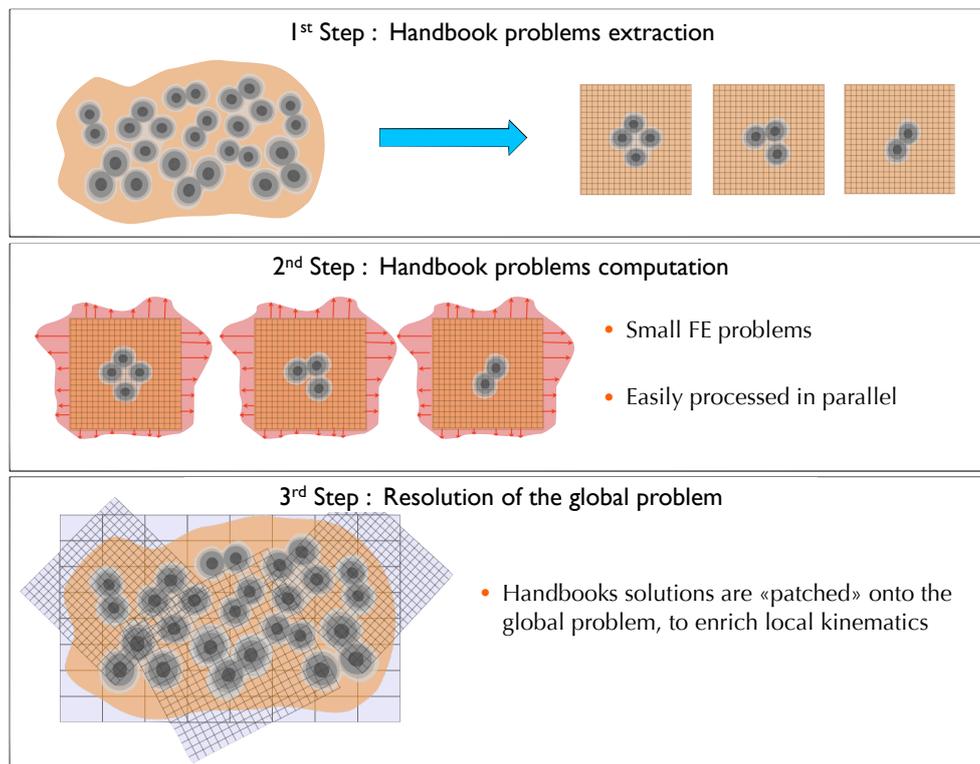


FIGURE 4.4: Etapes principales de la méthode GFEM avec Handbook numérique.

1.2.2 Construction du problème discret et intégration

Considérons la forme faible du **problème 4.1**, posée en déplacement :

$$\text{Trouver } u \in \mathcal{U} \text{ tel que } \int_{\Omega} \mathbf{H}(x) \varepsilon(u) \varepsilon(u^*) \partial\Omega = \int_{\partial\Omega_F} F_d u^* \partial S + \int_{\Omega} f_d u^* \partial\Omega, \forall u^* \in \mathcal{U}^0 \quad (4.2)$$

Suivant la formulation classique des méthodes de Galerkin, on considère que le champ test u_h^* se place dans le même espace que u_h , c'est-à-dire :

$$u_h^*(x) = \sum_i^{n_{EF}} \tilde{\phi}_i(x) \tilde{a}_i^* + \sum_i^{n_{PU}} \phi_i(x) \sum_j^{n_{enr}^i} a_j^{(i)*} \psi_j^{(i)}(x) \quad (4.3)$$

Le travail virtuel des efforts intérieurs \mathcal{T}_{int} se décompose en trois parties :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{int}(u_h, u^*) &= \int_{\Omega} \mathbf{H}(x) \varepsilon(u_h) \varepsilon(u^*) \partial\Omega \\ &= \mathcal{T}_{int}^{EF}(u_h, u^*) + \mathcal{T}_{int}^{EF/enr}(u_h, u^*) + \mathcal{T}_{int}^{enr}(u_h, u^*) \end{aligned} \quad (4.4)$$

On montre que la résolution du problème Eq. (4.2), avec l'interpolation en Eq. (4.1), revient à la résolution d'un système matriciel de la forme :

$$K\mathbf{u} = F \quad (4.5)$$

où K et F sont respectivement la matrice de rigidité et le vecteur des efforts généralisés ; \mathbf{u} est le vecteur des inconnues nodales. On suppose que les inconnues sont rangées de telle façon que les inconnues EF classiques occupent la première partie du vecteur des inconnues :

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{EF} \\ \mathbf{u}_{enr} \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

Les expressions de K et F sont obtenues par dérivation des travaux virtuels précédemment définis. En considérant $b_i \in \{a_i\} \cup \{\tilde{a}_i\}$ et $b_i^* \in \{a_i^*\} \cup \{\tilde{a}_i^*\}$, cela s'écrit :

$$K_{ij} = \frac{\partial}{\partial b_i} \frac{\partial}{\partial b_j^*} \mathcal{T}_{int} \quad (4.7)$$

$$F_i = \frac{\partial}{\partial b_i^*} \mathcal{T}_{ext} \quad (4.8)$$

Les trois termes \mathcal{T}_{int}^{EF} , \mathcal{T}_{int}^{enr} et $\mathcal{T}_{int}^{EF/enr}$ apparaissant dans l' Eq. (4.4) définissent les trois sous-matrices qui composent la matrice de rigidité globale d'un problème de GFEM (K), et qui concernent respectivement les degrés de liberté éléments finis (K^{EF}), les degrés de liberté additionnels (K^{enr}) et le couplage entre les deux ($K^{EF/enr}$). L'expression de la

matrice de rigidité est :

$$K = \begin{bmatrix} K^{EF} & K^{EF/enr} \\ T K^{EF/enr} & K^{enr} \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

où les formes typiques des termes de chacune des matrices sont :

$$K_{ij}^{EF} = \int_{\Omega_i \cap \Omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla \tilde{\phi}_j(x) \partial \Omega \quad \text{avec } i, j \in [0, n_{EF}] \quad (4.10)$$

$$K_{\alpha\beta}^{enr} = \int_{\Omega_i \cap \Omega_k} \mathbf{H}(x) \nabla (\phi_i(x) \psi_j^{(i)}(x)) \nabla (\phi_k(x) \psi_l^{(k)}(x)) \partial \Omega \quad (4.11)$$

$$\text{avec } \begin{cases} i, k \in [0, n_{EF}] \\ j \in [0, n_{enr}^{(i)}] \\ l \in [0, n_{enr}^{(k)}] \end{cases} \quad \text{et } \begin{cases} \alpha = \sum_{m=1}^{i-1} n_{enr}^{(m)} + j \\ \beta = \sum_{m=1}^{k-1} n_{enr}^{(m)} + l \end{cases}$$

$$K_{i\gamma}^{EF/enr} = \int_{\Omega_i \cap \Omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla (\phi_j(x) \psi_k^{(j)}(x)) \partial \Omega \quad (4.12)$$

$$\text{avec } \begin{cases} i, j \in [0, n_{EF}] \\ k \in [0, n_{enr}^{(j)}] \end{cases} \quad \text{et } \gamma = \sum_{m=1}^{j-1} n_{enr}^{(m)} + k$$

Il y a, à ce stade, deux particularités qui rendent les intégrales précédentes difficiles à évaluer :

1. Les termes K^{enr} et $K^{EF/enr}$ mettent en jeu le produit des gradients des fonctions de la partition de l'unité et de celle de l'enrichissement, *i.e.* $\nabla (\phi_i(x) \psi_j^{(i)}(x)) \nabla (\phi_k(x) \psi_l^{(k)}(x))$. Lorsque les fonctions d'enrichissement ont des formes complexes, typiquement quand elles sont issues de problèmes numériques, ces intégrales ne sont pas calculables numériquement à l'aide d'une simple quadrature de Gauss. En effet, il n'est pas possible de positionner les points de Gauss efficacement car les fonctions $\psi_j^{(i)}$ et $\psi_l^{(k)}(x)$ sont connues sur des maillages non conformes, cf. **figure 4.5**. Ce problème est bien plus complexe que pour la XFEM, où les fonctions complexes à intégrer (les fonctions d'enrichissement en pointe de fissure) sont connues et toujours les mêmes.
2. La détermination du tenseur de Hooke $\mathbf{H}(x)$ aux différents points d'intégration représente aussi une difficulté majeure. En effet, le maillage grossier n'étant pas conforme avec la géométrie du domaine (avantage de la GFEM par rapport à la FEM), il est difficile de pouvoir identifier le matériau présent au point courant. Dans les cas traités dans les travaux de Strouboulis, seule une phase est présente (soit un matériau élastique, soit du vide). Il suffit alors de savoir si le point est dans le domaine ou à l'extérieur. L'utilisation de la CAO permet de répondre à cette question,

bien qu'il soit coûteux d'avoir à tester chaque point. D'un autre côté, s'agissant d'un test binaire (matériau ou vide), le maillage support des fonctions d'enrichissement peut être utilisé sans ambiguïté. Dans le cas général, où plusieurs phases sont présentes et que plusieurs enrichissements différents sont présents, cette solution n'est plus envisageable.

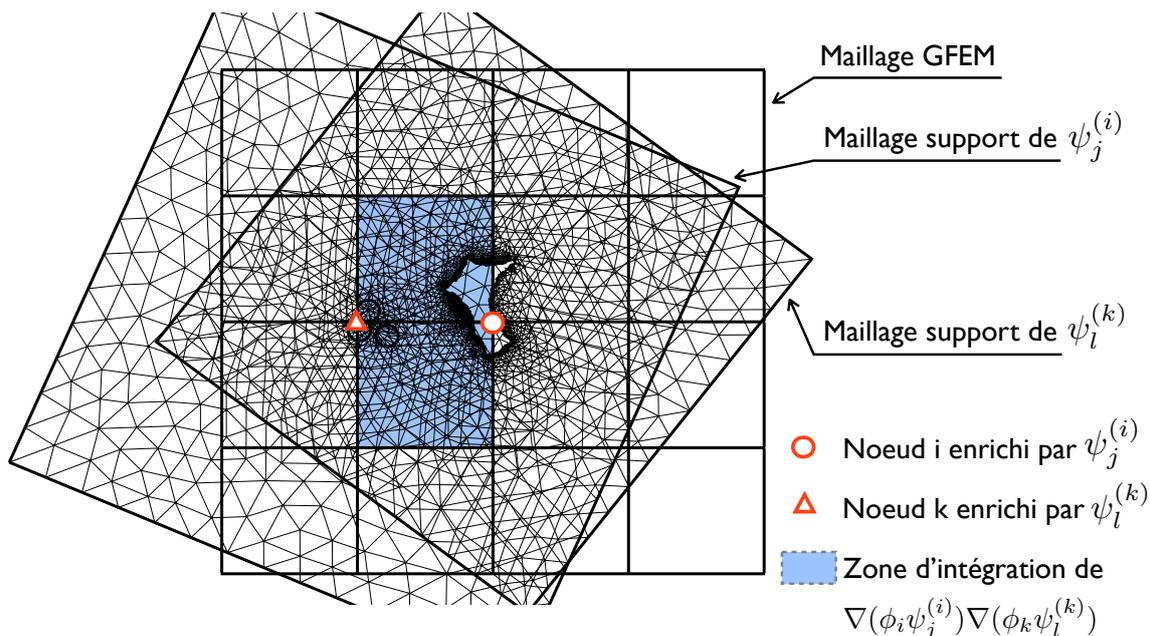


FIGURE 4.5: Exemple de maillage support de fonctions d'enrichissement, par rapport au maillage régulier de la GFEM.

2 GFEM et séparation d'échelles

Le maillage de la GFEM classique, bien que grossier et non conforme à la géométrie, reste cependant d'une taille légèrement supérieure aux hétérogénéités présentes dans la microstructure, cf. **figure 4.5**. Compte tenu de la géométrie des fils de CMCs, présentée dans le Chapitre 1, une approche dans laquelle une vraie séparation d'échelle existe entre microstructure et structure semble plus pertinente. En effet, le diamètre d'une fibre est d'environ $10\mu\text{m}$ et la largeur du fil de l'ordre du millimètre, pour une hauteur de 0.1mm . La taille des hétérogénéités est donc bien inférieure à celle du fil. De plus, comme nous allons le voir, les perturbations induites par une petite hétérogénéité sont localisées. C'est pourquoi un concept d'enrichissement local, basé sur des motifs microstructuraux, est développé.

2.1 Effet local des hétérogénéités

D'après le principe de Saint Venant, la perturbation induite par une hétérogénéité reste localisée autour de celle-ci, et s'évanouit rapidement plus on s'en éloigne. Prenons par exemple le problème d'une inclusion circulaire de rayon a dans un milieu homogène circulaire de rayon b et soumis en $r = b$ à un déplacement imposé, voir schéma **figure 4.6** à gauche. Les propriétés élastiques de l'inclusion et de la matrice sont données par leurs coefficients de Lamé, notés respectivement μ_1, λ_1 et μ_2, λ_2 . On peut montrer que la perturbation induite $\tilde{u}(r)$ par la présence de l'inclusion, par rapport à un milieu complètement homogène, prend la forme suivante (en coordonnées polaires) :

$$\tilde{u}(r) = \begin{cases} (1 - \frac{b^2}{a^2})(\alpha - 1)r, & 0 \leq r < a \\ (r - \frac{b^2}{r})(\alpha - 1), & a \leq r < b \end{cases}$$

avec :

$$\alpha = \frac{(\lambda_1 + \mu_1 + \mu_2)b^2}{(\lambda_2 + \mu_2)a^2 + (\lambda_1 + \mu_1)(b^2 - a^2) + \mu_2b^2}$$

La décroissance de la perturbation s'observe sur le graphique en **figure 4.6** à droite. La déformation liée à cette perturbation est décroissante en $1/r^2$. Ceci montre bien que loin de l'inclusion, les effets dus à sa présence sont faibles.

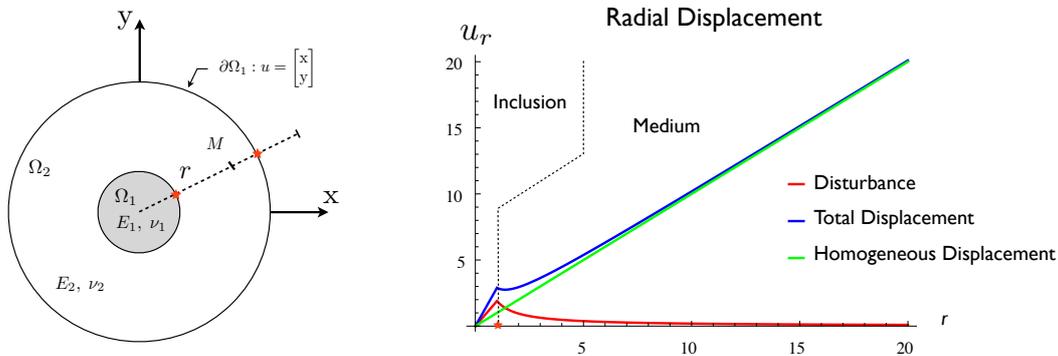


FIGURE 4.6: Problème d'une inclusion de rayon a en milieu homogène soumis à un déplacement imposé en $r = b$, et les tracés des déplacements totaux, homogènes et de perturbations associés.

De même, le problème académique de la plaque trouée illustre bien cette localisation. On montre en effet [Chevalier, 2004], sous l'hypothèse que le rayon du trou est petit par rapport aux dimensions de la plaque, que le champ de contraintes liées à la perturbation

prend la forme suivante (en coordonnées polaires, d'origine le centre du trou) :

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}(r, \theta) &= \frac{\sigma}{2} \left[\left(-\frac{4a^2}{r^2} + \frac{3a^4}{r^4} \right) \cos(2\theta) - \frac{a^2}{r^2} \right] \\ \sigma_{\theta\theta}(r, \theta) &= \frac{\sigma}{2} \left[-\frac{3a^4}{r^4} \cos(2\theta) + \frac{a^2}{r^2} \right] \\ \sigma_{r\theta}(r, \theta) &= -\frac{\sigma}{2} \left[\left(\frac{2a^2}{r^2} - \frac{3a^4}{r^4} \right) \sin(2\theta) \right]\end{aligned}$$

où a et σ sont le rayon du trou et la contrainte appliquée sur la plaque respectivement. On observe donc une décroissance comparable au cas de l'inclusion (en $1/r^2$).

L'idée fondatrice de la méthode mise en place est donc de tirer parti du caractère local des perturbations afin de créer un enrichissement local, c'est-à-dire d'enrichir localement la cinématique d'un modèle éléments finis à l'aide d'une fonction d'enrichissement à support de petites dimensions comparées aux supports des fonctions chapeaux. Cet enrichissement a pour but de représenter la cinématique locale, autour des hétérogénéités, alors que le maillage grossier prend en charge la cinématique globale du fil. Cette technique d'enrichissement microscopique peut être vue de différentes façons, par exemple comme une méthode de superposition entre un problème grossier et des patches microscopiques. Le choix est fait ici de présenter la méthode comme un cas particulier de la GFEM, sous certaines hypothèses que nous allons détailler par la suite.

2.1.1 Enrichissement local

On suppose pour le moment que l'on est capable de déterminer des fonctions d'enrichissement locales sous la forme de perturbations *locales*, induites par un ensemble de motifs. Nous reviendrons par la suite sur le calcul numérique de ces fonctions du Handbook et du problème définis sur les motifs qui permet leur calcul. Supposons donc que l'on a un ensemble de fonctions d'enrichissement local $\left\{ \psi_j^{(i)}(x) \right\}_{i \in n_{PU}, j \in n_{enr}^{(i)}}$, correspondant à un ensemble de motifs déterminés par ailleurs.

Compte tenu du caractère local des perturbations, on pose les deux propriétés fondamentales suivantes, liées aux enrichissements (illustrées **figure 4.7**) :

1. Leur support $\omega_j^{(i)}$ est *petit* face à celui des fonctions chapeau ϕ_i , c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}\Omega_i &= \text{supp}(\phi_i), \\ \omega_j^{(i)} &= \text{supp}(\psi_j^{(i)}), \\ \text{diam}(\omega_j^{(i)}) &\ll \text{diam}(\Omega_i)\end{aligned}\tag{4.13}$$

2. Elles s'évanouissent rapidement loin du motif et sont nulles sur le bord de leur support :

$$\psi_j^{(i)}(x) = 0, \quad \forall x \in \partial\omega_j^{(i)}\tag{4.14}$$

Etant données ces hypothèses sur la forme de l'enrichissement microscopique, plusieurs simplifications peuvent être apportées sur la GFEM. Notons que celles-ci ne sont pas exactes, réduisant *de facto* la qualité du champ approché u_h . Nous montrerons par la suite que ces approximations sont cependant suffisamment petites pour fournir une approximation qualitative acceptable du champ inconnu.

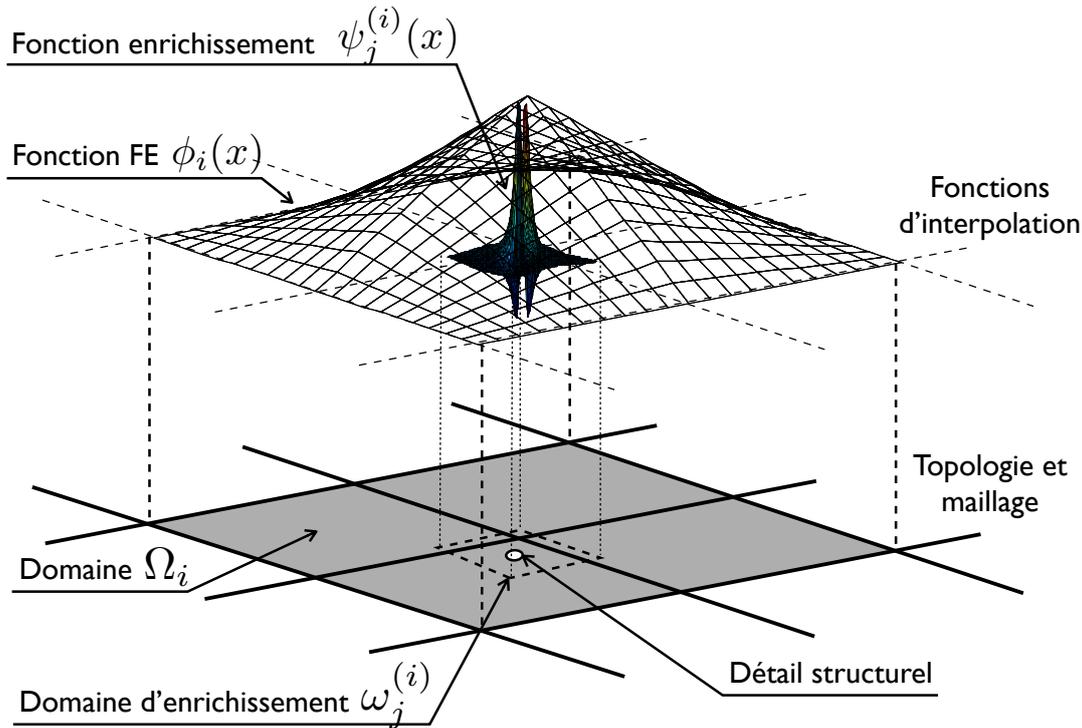


FIGURE 4.7: Schématisation du domaine d'enrichissement par rapport au support d'une fonction de forme EF, dans le cas d'une séparation d'échelle entre maillage grossier et hétérogénéités ($\omega_j^{(i)} \ll \Omega_i$).

2.1.2 Conséquences des approximations

Approximation liée à la séparation d'échelle : La séparation d'échelle, c'est-à-dire l'hypothèse Eq. (4.13), simplifie la forme de l'interpolation et les différentes intégrales à calculer. En effet, compte tenu du petit domaine ω_j (support des fonctions d'enrichissements) comparativement au domaine des fonctions de forme EF Ω_i , il peut être considéré que ces dernières varient peu par rapport aux fonctions d'enrichissement sur le patch ω_j . Il est donc acceptable de les considérer comme constantes sur le patch, c'est-à-dire de négliger les termes au delà de l'ordre 0 dans le développement de $\phi_i(x)$ au voisinage du

centre C_j du patch ω_j :

$$\begin{aligned}\phi_i(x) &= \phi_i(C_j) + (x - C_j)\nabla\phi_i(C_j) + O(x) \\ &\approx \phi_i(C_j)\end{aligned}\quad (4.15)$$

Cette approximation reste valable tant que la séparation d'échelle est suffisante. La forme de l'interpolation se simplifie alors largement :

$$u_h(x) = \underbrace{\sum_i^{n_{EF}} \tilde{\phi}_i(x) \tilde{a}_i}_{u_{EF}(x)} + \underbrace{\sum_j^{n_{enr}} a_j \tilde{\psi}_j(x)}_{u_{enr}(x)}, \quad \forall x \in \Omega \quad (4.16)$$

où $\tilde{\psi}_j = \psi_j(x) \sum_i^{n_{PU}} \phi_i(C_j)$. Cette constante ($\sum_i^{n_{PU}} \phi_i(C_j)$) n'a pas d'influence sur le système à résoudre car il ne s'agit que d'une modification d'amplitude de la fonction d'enrichissement $\psi_j(x)$. La partie enrichie du champ de déplacement, $u_{enr}(x)$, s'annule sur le bord de son support, comme c'est le cas dans la GFEM originale.

Non interaction des enrichissements : Compte tenu du caractère évanescents des fonctions d'enrichissement, deux enrichissements suffisamment éloignés n'interagissent pas ensemble, par construction. Ainsi les termes énergétiques mettant en jeu deux enrichissements distincts sont faibles. Il est donc possible, en première approximation, de les négliger. De plus, compte tenu de la nullité des fonctions d'enrichissement en dehors de leur support, les domaines d'intégration se réduisent aux seuls supports des fonctions d'enrichissement ω_j . Le terme A lié au travail virtuel des enrichissements, Eq. (4.4), se réduit alors à :

$$\begin{aligned}A &= \sum_{i,k=1}^{n_{patch}} \sum_{j=1}^{n_{enr}^{(i)}} \sum_{l=1}^{n_{enr}^{(k)}} \int_{\Omega_i \cap \Omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla(\Phi_i \Psi_j^{(i)}) \nabla(\Phi_k \Psi_l^{(k)}) \partial\Omega \\ &\approx \sum_{i=1}^{n_{patch}} \sum_{j=1}^{n_{enr}^{(i)}} \int_{\omega_j^{(i)}} \mathbf{H}(x) \nabla(\Phi_i \Psi_j^{(i)}) \nabla(\Phi_i \Psi_j^{(i)}) \partial\Omega\end{aligned}\quad (4.17)$$

Cette nouvelle écriture met bien en évidence l'intérêt majeur de cette approximation : il n'y a plus d'intégration à effectuer entre des fonctions d'enrichissement connues sur des maillages différents (les produits de la forme $\nabla(\Phi_i \Psi_j^{(i)}) \nabla(\Phi_k \Psi_l^{(k)})$ avec $j \neq l$). Cette approximation est d'importance. En effet, elle signifie que les motifs qui serviront au calcul des fonctions d'enrichissement doivent être choisis pertinemment, afin que l'interaction soit la plus faible possible et ainsi limiter la perte de qualité. Ainsi les entités présentant un fort risque d'interagir, typiquement les fibres collées, seront à regrouper au sein d'un unique motif.

Vers une description par motifs : On notera qu'en conséquence de la séparation d'échelle, le concept de motifs prend un sens plus fort. Il ne sert plus seulement à la définition des problèmes pour le calcul des fonctions du handbook. Le maillage de celui-ci permet en effet la description à la fois de l'enrichissement (les fonctions $\psi_j^{(i)}$) et de la topologie locale du matériau (par la description du $\mathbf{H}(x)$).

2.2 Formulation de la GFEM multiéchelle

Reprenons le problème global à résoudre à la lumière de l'hypothèse de séparation d'échelle (et donc d'un enrichissement local) et de ses conséquences. On cherche à résoudre le problème sous forme faible suivant :

$$\text{Trouver } u \in \mathcal{U} \text{ tel que } \int_{\Omega} \mathbf{H}(x) \varepsilon(u) \varepsilon(u^*) \partial\Omega = \int_{\partial\Omega_F} F_d u^* \partial S + \int_{\Omega} f_d u^* \partial\Omega, \forall u^* \in \mathcal{U}^0 \quad (4.18)$$

en cherchant une approximation de $u(x)$ sous la forme :

$$u_h(x) = \underbrace{\sum_i^{n_{EF}} \tilde{\phi}_i(x) \tilde{a}_i}_{u_{EF}(x)} + \underbrace{\sum_j^{n_{enr}} a_j \psi_j(x)}_{u_{enr}(x)}, \forall x \in \Omega \quad (4.19)$$

où les fonctions ψ_j sont « locales » au sens défini précédemment, cf. **figure 4.7**. Suivant la formulation classique des méthodes de Galerkin, on a :

$$u_h^*(x) = \sum_i^{n_{EF}} \tilde{\phi}_i(x) \tilde{a}_i^* + \sum_j^{n_{enr}} a_j^* \psi_j(x), \forall x \in \Omega \quad (4.20)$$

Le travail virtuel des efforts intérieurs \mathcal{T}_{int} s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{int}(u_h, u^*) &= \int_{\Omega} \mathbf{H}(x) \varepsilon(u_h) \varepsilon(u^*) \partial\Omega \\ &= \mathcal{T}_{int}^{EF}(u_h, u^*) + \mathcal{T}_{int}^{EF/enr}(u_h, u^*) + \mathcal{T}_{int}^{enr}(u_h, u^*) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Reprenons chacun des termes séparément et détaillons les calculs qui y sont liés :

Terme lié aux degrés de liberté éléments finis $\mathcal{T}_{int}^{EF}(u_h, u^*)$: Ce terme concerne les degrés de liberté de type éléments finis \tilde{a}_i , c'est-à-dire ceux liés aux fonctions de formes classiques EF $\tilde{\phi}_i$. Il a pour expression :

$$\mathcal{T}_{int}^{EF}(u_h, u^*) = \sum_{i,j} \tilde{a}_i \tilde{a}_j^* \int_{\Omega_i \cap \Omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla(\tilde{\phi}_i) \nabla(\tilde{\phi}_j) \partial\Omega \quad (4.22)$$

Son évaluation ne pose pas de problème particulier hormis la détermination des propriétés matériau en un point de l'espace $\mathbf{H}(x)$. Cependant, ce terme peut se

décomposer de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{int}^{EF}(u_h, u^*) &= \sum_{i,j} \tilde{a}_i \tilde{a}_j^* \int_{\Omega_i \cap \Omega_j} \bar{\mathbf{H}} \nabla(\tilde{\phi}_i) \nabla(\tilde{\phi}_j) \partial\Omega \\ &\quad + \sum_{i,j} \tilde{a}_i \tilde{a}_j^* \int_{\Omega_i \cap \Omega_j} \Delta \mathbf{H}(x) \nabla(\tilde{\phi}_i) \nabla(\tilde{\phi}_j) \partial\Omega \end{aligned} \quad (4.23)$$

où $\bar{\mathbf{H}}$ est le tenseur de Hooke d'un matériau homogène, constant dans le domaine d'intégration. Il représente en quelque sorte le matériau dans lequel « baigne » les motifs. Cette première partie est donc aisément calculée. $\Delta \mathbf{H}(x)$ décrit la variation des propriétés matériau entre le milieu homogène et les motifs. A ce titre, il est complètement décrit par les maillages liés aux motifs. Comme il sera précisé par la suite, $\bar{\mathbf{H}}$ n'est pas choisi égal aux caractéristiques homogénéisées mais à celles de la matrice. $\Delta \mathbf{H}(x)$ n'est donc pas à moyenne nulle, mais correspond à la différence entre les propriétés des hétérogénéités et de la matrice.

Terme lié aux degrés de liberté enrichis $\mathcal{T}_{int}^{enr}(u_h, u^*)$: Ce terme correspond au travail virtuel des degrés de liberté enrichis a_j , liés aux fonctions d'enrichissement locales ψ_j . Il a pour expression :

$$\mathcal{T}_{int}^{enr}(u_h, u^*) = \sum_{i,j} a_i a_j^* \int_{\Omega_i \cap \Omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla(\psi_i) \nabla(\psi_j) \partial\Omega \quad (4.24)$$

Compte tenu de l'approximation de non-interaction entre enrichissements différents, et du domaine ω_j sur lequel les fonctions d'enrichissement sont définies, on a :

$$\mathcal{T}_{int}^{enr}(u_h, u^*) = \sum_i a_i a_i^* \int_{\omega_i} \mathbf{H}(x) \nabla(\psi_i) \nabla(\psi_i) \partial\Omega \quad (4.25)$$

Ce terme se calcule aisément aussi, tous les champs étant connus sur le maillage des motifs. Une quadrature de Gauss, sur le maillage des motifs, permet de l'évaluer rapidement.

Terme de couplage entre degrés de liberté enrichis et EF $\mathcal{T}_{int}^{EF/enr}(u_h, u^*)$: Ce terme décrit le couplage entre les degrés de liberté EF et ceux enrichis et a la forme suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{int}^{EF/enr}(u_h, u^*) &= \sum_{i,j} \tilde{a}_i \tilde{a}_j^* \int_{\omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla(\tilde{\phi}_i) \nabla(\psi_j) \partial\Omega \\ &\quad + \sum_{i,j} a_i \tilde{a}_j^* \int_{\omega_i} \mathbf{H}(x) \nabla(\psi_i) \nabla(\tilde{\phi}_j) \partial\Omega \end{aligned} \quad (4.26)$$

L'évaluation des intégrales dans ce cas se fait aussi sur les maillages liés aux motifs, et requiert seulement de pouvoir évaluer les gradients des fonctions de forme EF en un point $\nabla(\tilde{\phi}_i)(x)$. Dans le cas où les fonctions de forme sont linéaires, on a simplement $\nabla(\tilde{\phi}_i)(x) = 1$. Dans le cas général, compte tenu de la séparation d'échelle entre motifs et maillage EF, on pourra faire l'approximation que le gradient est constant, *i.e.* $\nabla(\tilde{\phi}_i)(x) \approx \nabla(\tilde{\phi}_i)(C_j)$, où C_j est le centre du motif.

Enfin, on considèrera dans la suite des travaux, que les efforts extérieurs s'appliquent uniquement sur la partie grossière du champ, *i.e.* $u_{EF}(x)$. Le travail des efforts extérieurs $\mathcal{T}_{ext}(u_h, u^*)$ s'écrit alors, sous cette hypothèse :

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{ext}(u_h, u^*) &= \int_{\partial\Omega_F} F_d u^* \partial S + \int_{\Omega} f_d u^* \partial\Omega \\ &= \sum_i \tilde{a}_i^* \int_{\partial\Omega_i} F_d \tilde{\phi}_i \partial S + \sum_i \tilde{a}_i^* \int_{\Omega_i} f_d \tilde{\phi}_i \partial\Omega\end{aligned}\quad (4.27)$$

Cette partie est donc identique à son homologue de la méthode des éléments finis, ne posant aucun problème particulier d'intégration.

2.3 Résumé

Résumons les développements précédents. On considère l'interpolation suivante :

$$u_h(x) = \underbrace{\sum_i^{n_{EF}} \tilde{\phi}_i(x) \tilde{a}_i}_{u_{EF}(x)} + \underbrace{\sum_j^{n_{enr}} a_j \Psi_j(x)}_{u_{enr}(x)}, \quad \forall x \in \Omega \quad (4.28)$$

On peut d'ores et déjà noter qu'à la grande différence de la GFEM standard, la méthode développée ici n'est plus une méthode d'enrichissement nodale. Effectivement, les nouveaux degrés de liberté, associés aux enrichissements, ne sont plus « attachés » à un noeud. On introduit donc des noeuds fictifs (n'appartenant pas au maillage global) au centre des motifs, voir **figure 4.8**. On pourrait aussi considérer ces inconnues comme élémentaires.

De façon similaire au paragraphe 1.2.2, on montre que la résolution du problème Eq. (4.18), avec cette interpolation, revient à la résolution d'un système matriciel de la forme :

$$K\mathbf{u} = F \quad (4.29)$$

où K et F sont respectivement la matrice de rigidité et le vecteur des efforts généralisés. \mathbf{u} est le vecteur des inconnues nodales. En conservant la même convention de rangement des inconnues, *i.e.* :

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{EF} \\ \mathbf{u}_{enr} \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

On montre que la matrice de rigidité prend la forme suivante :

$$K = \left[\begin{array}{cc|cc} K^{EF} + \Delta K^{EF} & & K^{EF/enr} & \\ \hline & & \ddots & 0 \\ T K^{EF/enr} & & & K^{enr} \\ & & 0 & \ddots \end{array} \right] \quad (4.31)$$

On notera la forme diagonale par bloc de la matrice K^{enr} . Les expressions de chaque terme de cette matrice sont les suivantes :

$$K_{ij}^{EF} = \int_{\Omega_i \cap \Omega_j} \bar{\mathbf{H}} \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla \tilde{\phi}_j(x) \partial \Omega \text{ avec } i, j \in [0, n_{EF}] \quad (4.32)$$

$$\Delta K_{ij}^{EF} = \sum_{k=1}^{n_{enr}} \int_{\omega_k} \Delta \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla \tilde{\phi}_j(x) \partial \Omega \text{ avec } i, j \in [0, n_{EF}] \quad (4.33)$$

$$K_{ii}^{enr} = \int_{\omega_i} \mathbf{H}(x) \nabla(\tilde{\psi}_i(x)) \nabla(\tilde{\psi}_i(x)) \partial \Omega \text{ avec } i \in [0, n_{enr}] \quad (4.34)$$

$$K_{ij}^{EF/enr} = \int_{\omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla(\tilde{\psi}_j(x)) \partial \Omega \text{ avec } \begin{cases} i \in [0, n_{EF}] \\ j \in [0, n_{enr}] \end{cases} \quad (4.35)$$

Enfin l'expression du vecteur des efforts généralisés est :

$$F_i = \int_{\partial \Omega_i} F_d \tilde{\phi}_i \partial S + \int_{\Omega_i} f_d \tilde{\phi}_i \partial \Omega \quad (4.36)$$

Remarque 4.1:

Il est à noter que dans cette version multiéchelle de la GFEM, les motifs ont deux fonctions :

1. *le calcul des fonctions d'enrichissement, par une méthode éléments finis ;*
2. *la description de la topologie locale du matériau, c'est-à-dire l'arrangement des phases à petite échelle.*

Cette vision par motifs semble pertinente compte tenu de la complexité de la micro-structure considérée et elle simplifie largement sa description.

3 Définition et formulation des problèmes sur les motifs

La méthode étant formulée, les problèmes posés sur les motifs sont à présent abordés, afin de fournir des fonctions d'enrichissement pertinentes et respectant les hypothèses posées en 2.2. Pour ce faire, une démarche similaire au calcul de la perturbation d'une inclusion en milieu infini est utilisée, puis est étendue aux motifs quelconques.

3.1 Le problème de l'inclusion

Il a été supposé précédemment que les fonctions d'enrichissement peuvent être vues comme un problème de résidu vis-à-vis du champ macroscopique EF. L'approche utilisée ici est similaire à celle d'Eshelby pour déterminer la perturbation induite par une inclusion ellipsoïdale noyée dans un milieu homogène supposé infini. On considère un motif P , noyé dans un domaine homogène Ω , de grande dimension. On considère de plus que la frontière $\partial \Omega$ du domaine est soumis à un déplacement imposé de la forme $U_d = \bar{\epsilon}_0 x$. Le problème global s'écrit :

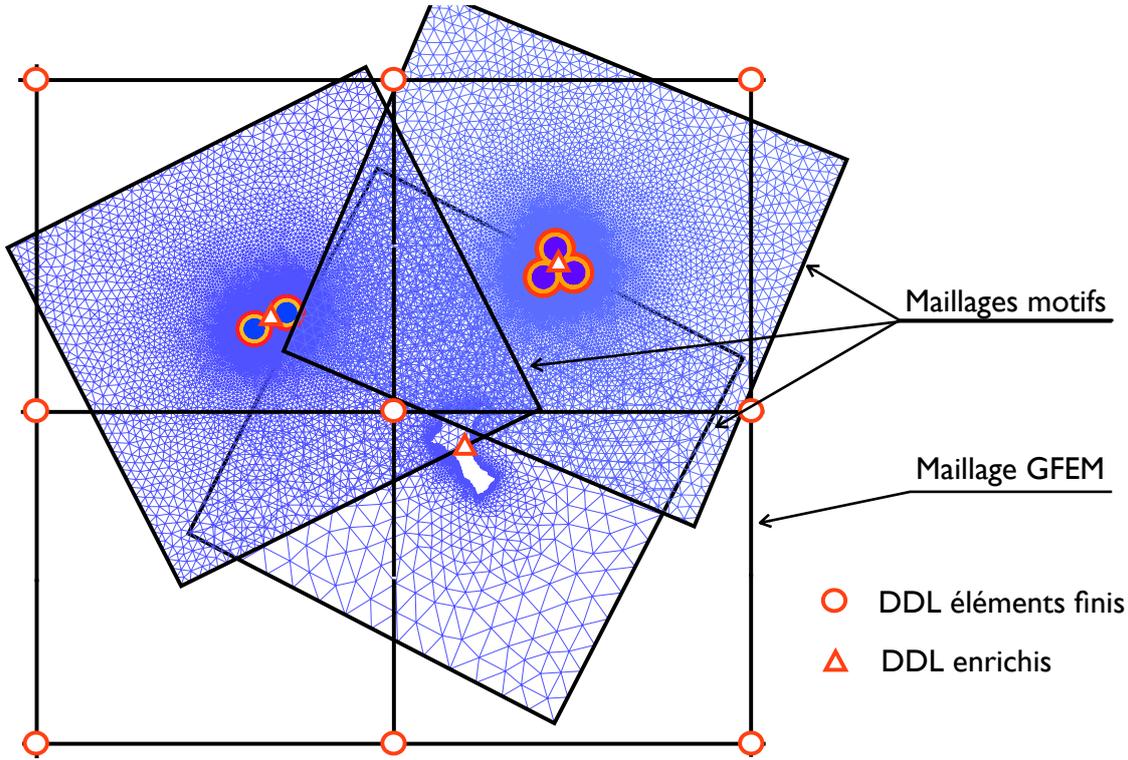


FIGURE 4.8: Schématisation des maillages des motifs et du placement des degrés de liberté dans le cas de la GFEM à enrichissement multiéchelle.

Problème 4.2: Trouver $(u, \sigma) \in \mathcal{U} \times \mathcal{S}$ vérifiant :

– l’admissibilité cinématique :

$$u = U_d = \bar{\varepsilon}_0 x \text{ sur } \partial\Omega_u$$

– l’admissibilité statique :

$$\text{div}(\sigma) = 0 \text{ dans } \Omega$$

– la loi de comportement :

$$\sigma = \mathbf{H}(x)\varepsilon \text{ dans } \Omega \text{ avec } \varepsilon = \varepsilon(u) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T)$$

où \mathcal{U} et \mathcal{S} sont les espaces à énergie finie classiquement utilisés en mécanique des milieux continus pour les déplacements et les contraintes respectivement.

$\bar{\varepsilon}_0$ est un tenseur de déformation supposé constant. Le tenseur de Hooke est décrit de la façon suivante :

$$\mathbf{H}(x) = \begin{cases} \mathbf{H}_p & x \in P \\ \mathbf{H}_m & x \in \Omega/P \end{cases} \quad (4.37)$$

On suppose que la déformation totale ε peut être décomposée en une partie macroscopique et homogène $\bar{\varepsilon}$ et une partie liée à la perturbation (due à l'inclusion) $\tilde{\varepsilon}$, telles que $\varepsilon = \bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}$. Par application du principe de Saint Venant, la déformation macroscopique est dominante loin de l'inclusion. On a donc $\varepsilon = \bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}_0$ près de la frontière $\partial\Omega$. En conséquence, le déplacement total peut être vu comme la superposition du déplacement lointain et d'un déplacement de perturbation :

$$u = \bar{u} + \tilde{u} \quad (4.38)$$

La partie homogène \bar{u} est solution de :

$$\text{Trouver } (\bar{u}, \bar{\sigma}) \in \mathcal{U} \times \mathcal{S} \text{ tel que } \begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{H}_m \varepsilon(\bar{u})) = 0 & \text{dans } \Omega \\ \bar{u} = \bar{\varepsilon}_0 x & \text{sur } \partial\Omega \\ \bar{\sigma} = \mathbf{H}_m \bar{\varepsilon}(\bar{u}) \end{cases} \quad (4.39)$$

pour lequel le champ de déplacement $\bar{u} = \bar{\varepsilon}_0 x$ est une solution triviale. En introduisant l'Eq. (4.39) dans le problème global **problème 4.2**, on montre que ce dernier se réduit à :

$$\text{Trouver } (\tilde{u}, \tilde{\sigma}) \in \mathcal{U} \times \mathcal{S} \text{ tel que } \begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{H}(x) \varepsilon(\tilde{u})) + \operatorname{div}(\Delta \mathbf{H}(x) \varepsilon(\bar{u})) = 0 & \text{dans } \Omega \\ \tilde{u} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \\ \tilde{\sigma} = \mathbf{H}(x) \tilde{\varepsilon}(\tilde{u}) \end{cases} \quad (4.40)$$

où $\Delta \mathbf{H}(x)$ est défini par la différence des tenseurs de Hooke de point courant x et celui de la matrice \mathbf{H}_m :

$$\Delta \mathbf{H}(x) = \begin{cases} \mathbf{H}_p - \mathbf{H}_m & \text{pour } x \in P \\ 0 & \text{pour } x \in \Omega/P \end{cases} \quad (4.41)$$

L'Eq. (4.40) définit ainsi le problème de perturbation à résoudre sur Ω . A noter que la condition en déplacement $\tilde{u} = 0$ est valide seulement pour un domaine infini, *i.e.* quand l'inclusion est suffisamment petite par rapport au domaine Ω .

Ceci définit le problème qui permet le calcul des fonctions d'enrichissement dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale, que l'on peut écrire sous forme faible :

Problème 4.3: Trouver $\psi \in \mathcal{U}$ telle que, $\forall u^* \in \mathcal{U}$:

$$\int_{\Omega} \mathbf{H}(x) \varepsilon(\psi) \varepsilon(u^*) \partial\Omega + \int_P \hat{\sigma} \varepsilon(u^*) \partial\Omega = 0 \quad (4.42)$$

dans lequel le chargement en contrainte provient de la disparité des propriétés matériau entre inclusion et matrice et de la déformation homogène : $\hat{\sigma} = \Delta \mathbf{H}(x) \varepsilon(\bar{u})$.

3.2 Extension aux motifs quelconques

La solution au **problème 4.3** est connue analytiquement seulement pour une inclusion ellipsoïdale en milieu infini, grâce aux travaux de Eshelby. Dans le cas général d'un motif quelconque, par exemple un groupe de fibres entouré de couches de matrice différentes, il faut rechercher une approximation numérique du champ de perturbation. D'une manière similaire au Handbook numérique des travaux de Strouboulis, une approximation éléments finis est recherchée.

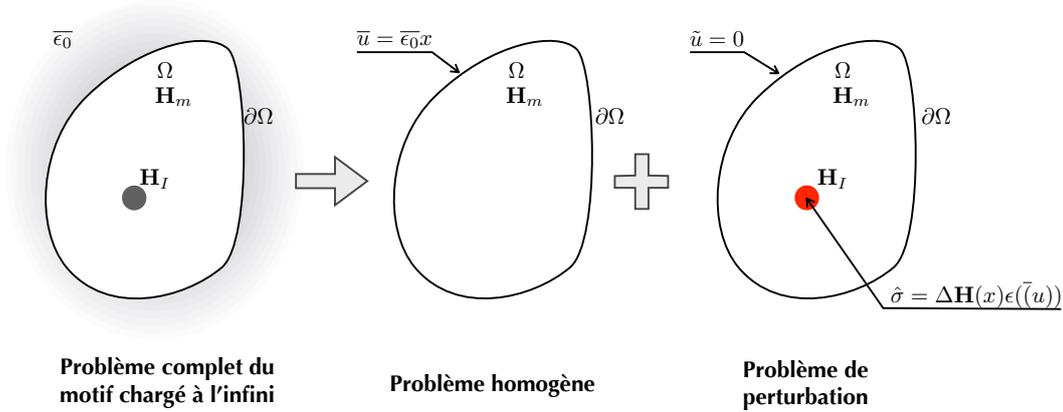


FIGURE 4.9: Décomposition du problème d'une inclusion en milieu homogène infini en un problème homogène et un problème de perturbation.

3.2.1 Motifs de type groupe de fibres

Le chargement $\hat{\sigma} = \Delta \mathbf{H}(x) \varepsilon(\bar{u})$ n'est pas connu à l'instant du calcul des fonctions du handbook, celui-ci étant antérieur au calcul global. Le problème étant élastique, il suffit de prendre une base de chargement, pouvant reproduire la plus grande partie des chargements possiblement applicables au motif, et qui correspond à la cinématique du champ macroscopique. On choisit ici de prendre une base de chargement en déformation homogène et constante de $\hat{\varepsilon}$. Dans le cas simple où il n'y a qu'une phase matériau dans le motif (groupes d'inclusion seules), la base choisie en 2D est :

$$\hat{\varepsilon} = \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right\} \quad (4.43)$$

Dans le cas plus général, où plusieurs phases sont présentes, le chargement varie proportionnellement aux propriétés chaque phase. On applique au final une précontrainte de la forme :

$$\hat{\sigma} = \Delta \mathbf{H}(x) \hat{\varepsilon} \quad (4.44)$$

où $\hat{\varepsilon}$ correspond à la base précédemment définie. On notera que pour des raisons pratique, le maillage du vide est conservé, car il permet l'évaluation de la correction à apporter à la partie éléments finis de la matrice de rigidité (ΔK^{EF} , cf. 2.3).

Enfin, il est difficile de procéder à une simulation EF dans un volume infini. Le motif est donc considéré au sein d'un domaine carré de grande dimension, de côté de l'ordre d'une dizaine de fois la dimension du motif, puis maillé. C'est ce maillage qui sert ensuite dans la GFEM, comme support de la fonction d'enrichissement et comme description de la topologie locale du matériau.

3.2.2 Motifs de type pore

Les motifs présentant des vides, comme ceux qui seront utilisés pour les pores, requièrent un traitement particulier. En effet, dans la cavité, le champ de contrainte vaut zéro, mais le champ de déformation y est indéterminé. Par ailleurs, on a besoin, lors de l'assemblage de la matrice de rigidité globale, d'un maillage du vide afin de pouvoir intégrer les termes de correction de la partie éléments finis de la matrice globale (ΔK^{EF} , cf. section 2.2) et ainsi définir localement l'absence de matière. En suivant le cadre précédemment établi, on applique alors un effort surfacique sur la frontière du pore, tel que :

$$F_d = \hat{\sigma}n \quad (4.45)$$

où n est la normale rentrante à la surface Γ du pore. La partie du maillage, utilisé lors de la résolution, qui représente le vide est donc conservée, les propriétés matériau étant définies à zéro et les degrés de liberté imposés à zéro.

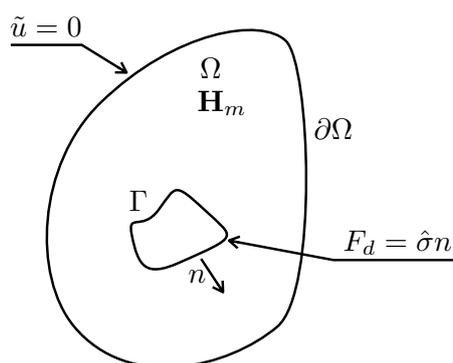


FIGURE 4.10: Schéma du problème résolu pour un motif de type pore.

4 Implantation numérique

Nous allons à présent aborder l'implantation de la méthode au sein de la plateforme logicielle disponible au laboratoire et composée, entre autres, du code LMTpp et du logiciel Metil, sur lesquels nous reviendrons. Bien entendu, d'autres choix auraient pu être faits, comme Cast3m ou Matlab. Cependant, le rapport flexibilité / performances semble être en faveur de la plateforme du laboratoire. Après un rappel bref des opérations à effectuer dans la méthode, nous nous concentrerons sur l'architecture du code et détaillerons les choix d'implantation vis-à-vis des possibilités et limites de chaque outil.

4.1 Rappel des opérations mises en jeu

Afin de mieux cerner les choix faits lors de l'implantation dans la plateforme logicielle du laboratoire, il est intéressant de rappeler les diverses opérations devant être menées lors d'un calcul GFEM :

1. **Identification des motifs.** Cette opération d'identification des motifs a déjà été abordée dans le chapitre 3 et est effectuée sous Matlab, lors de la génération de la microstructure du fil.
2. **Maillages des motifs.** De même que précédemment, cette opération a été abordée dans le chapitre 3 et est gérée par le mailleur Gmsh.
3. **Calcul des fonctions d'enrichissement.** Cette opération consiste à résoudre par éléments finis le problème de résidu défini dans la section 3. Ce calcul est paramétré par un ensemble de valeurs et de groupes d'éléments (conditions limites, chargements, propriétés matériau) réunis sous forme de fichier XML et issus de l'outil Matlab.
4. **Gestion (ajout, positionnement) des motifs et enrichissement associés.** Il s'agit ici de déterminer les zones où se place chaque motif et de gérer la collection de fonctions d'enrichissement (et maillages associés).
5. **Calcul et intégration des matrices de rigidité et second membre.** Cette opération est le coeur de la méthode mise en place. Elle consiste en la détermination (calcul et assemblage) de la matrice de rigidité globale mettant en jeu à la fois les degrés de liberté macroscopiques et enrichis. Le point dur est ici le fait que les fonctions d'enrichissement ne sont connues que sur des maillages annexes.
6. **Résolution.** Une fois les matrices et vecteurs connus, un solveur est utilisé pour résoudre le problème sous forme matricielle.
7. **Reconstruction et tracé des champs.**

Nous verrons que suivant l'opération, il est plus facile et/ou performant de l'implanter dans un outil ou l'autre de la plateforme logicielle.

4.2 Architecture de la plateforme

4.2.1 Architecture générale de la plateforme

La plateforme logicielle du LMT est composée de plusieurs outils, qui s'organisent autour du code de calcul éléments finis LMTpp. Le schéma en **figure 4.11** rappelle cette organisation et les échanges entre outils. Il peut être observé que le code LMTpp est en forte interaction avec les outils de génération de code, ce qui est une particularité notable de la plateforme. Cette organisation autorise une grande liberté quant-aux couples formulations / éléments utilisables. Les tâches liées à la génération des maillages et du post-traitement/visualisation des résultats sont quant à elles effectuées par des logiciels externes, par exemple le mailleur GMSH ou le visualiseur Paraview.

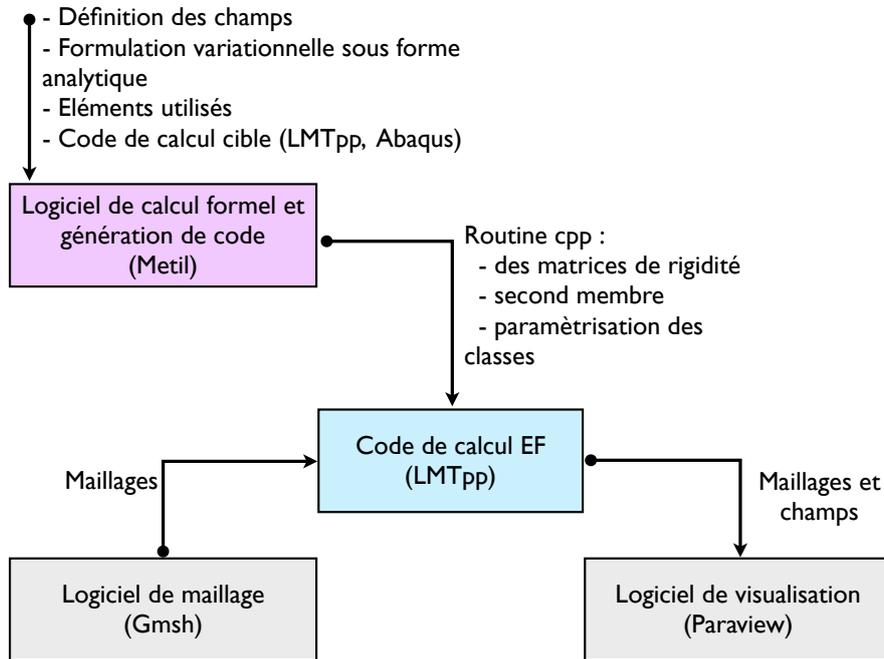


FIGURE 4.11: Organisation des outils (Metil et LMTpp) et logiciels au sein de la plateforme logicielle du laboratoire.

4.2.2 Le logiciel de calcul formel et de génération de code Metil

Metil a pour but d'éviter à l'utilisateur d'effectuer lui-même la programmation, dans LMTpp ou un autre code, de comportement non standard, en mettant à sa disposition un langage formel pour exprimer le problème (par exemple l'énergie à minimiser sur un maillage contenant un type d'élément donné), tandis qu'en arrière plan, le logiciel génère les routines appropriées, par exemple pour le calcul et l'évaluation de la matrice de rigidité, en fonction des éléments utilisés (et de leur formulation).

Ce logiciel se base sur un outil de calcul formel qui utilise une représentation des expressions analytiques en arbre d'opérateurs et d'opérandes. Il permet, à ce titre, d'effectuer un certain nombre d'opérations mathématiques (dérivations, intégrations) analytiquement (jusqu'à un certain point). Son grand intérêt réside dans la représentation par arbre, qui permet d'effectuer des simplifications et ainsi limiter le nombre d'opérations requises pour l'évaluation d'une expression, voire d'en pré-calculer une certaine partie analytiquement. Sur cette base de calcul formel, un cadre éléments finis générique est programmé, pour lequel la représentation des champs par une interpolation sur un maillage quelconque est définie. Il est donc possible à ce stade de définir la formulation du problème pour un élément quelconque donné, c'est à dire la forme variationnelle du problème que l'on souhaite résoudre. Divers traitements et fonctions permettent ensuite le calcul des entités élémentaires (matrices de rigidité, seconds membres), analytiquement ou par points de Gauss, puis de générer les fichiers et routines associés, en fonction du

code cible. On notera que l'on peut aussi générer d'autres fonctions pour LMTpp, comme un post-traitement particulier, bien qu'il faille alors programmer soi-même une partie de la génération.

Les gains en flexibilité d'un tel outil sont donc importants. Il permet d'une part la génération automatique de formulations complexes pour une large gamme d'éléments différents. D'autre part, les codes générés sont, le plus souvent, optimisés en terme de nombres d'opérations et de gestion de la mémoire.

Il souffre cependant de certaines limitations pour le moment. En effet, la génération est limitée au seul cadre éléments finis (donc méthodes nodales exclues). De plus, compte tenu des capacités actuelles, la complexité des expressions gérées restent limitée. En particulier l'intégration de fonctions singulières ou discontinues, ou définies sur un maillage annexe, peut mener à des expressions générées d'une taille très importante. La compilation de ce code généré peut donc dans certains cas être très longue et très demandeuse en mémoire vive (voire impossible sur certains ordinateurs de bureau).

Exemple de taille de code généré : Considérons un exemple simple pour illustrer cette limitation. On souhaite calculer dans un élément triangulaire quelconque e_1 l'aire commune avec un autre élément e_2 quelconque annexe, dont les coordonnées des noeuds sont illustrées **figure 4.12**. Explicitons les étapes du calcul, qui rappelons-le, est analytique de

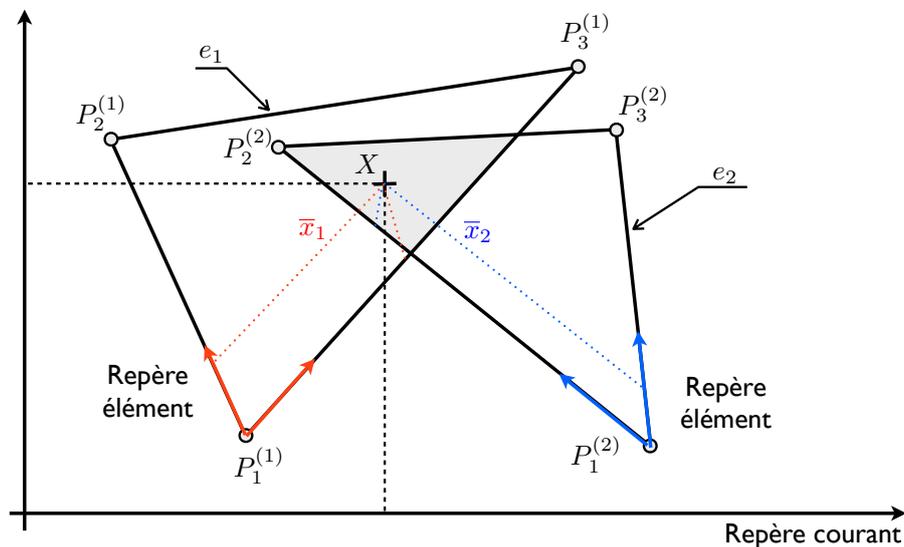


FIGURE 4.12: Schématisation et paramétrage de l'intégration d'un champ entre deux éléments triangulaires.

bout en bout :

1. Dans un premier temps, il faut connaître la position X dans le repère courant, associé à un point \bar{x} dans l'élément e_1 :

$$X = \sum_{i=1}^3 \phi_i(\bar{x}) P_i^{(1)} \quad (4.46)$$

où les $P_i^{(1)}$ sont les positions des noeuds de l'élément e_1 et les ϕ_i les fonctions de forme. On note cette application T_1 .

2. Dans un second temps, il faut passer X dans le repère de l'élément e_2 . En notant de même que précédemment l'application de mapping entre repère de l'élément et repère courant T_2 , on a :

$$\bar{x}_2 = T_2^{-1}(X) = T_2^{-1}(T_1(\bar{x})) \quad (4.47)$$

3. Il faut alors déterminer si le point \bar{x}_2 appartient à l'élément e_2 . Pour cela on utilise une fonction G retournant 1 si le point est dedans et 0 autrement. Cette fonction s'exprime à l'aide d'un produit de trois Heaviside dans le repère de l'élément. On a alors en tout point la fonction indicatrice :

$$G(\bar{x}_2) = G(T_2^{-1}(T_1(\bar{x}))) \quad (4.48)$$

4. Enfin, on intègre cette fonction sur l'élément e_1 . En notant $\mathcal{A}_{e_1 \cap e_2}$ l'aire commune entre deux triangles quelconque, on a :

$$\mathcal{A}_{e_1 \cap e_2} = \int_{e_1} G(T_2^{-1}(T_1(\bar{x}))) d\Omega \quad (4.49)$$

Le code généré à partir du calcul analytique de l'Eq. (4.49) (qui donc est général, pour tous les couples de triangles) comporte 987 133 instructions. Il demandera quelques Go de mémoire vive lors de la compilation. Cet exemple, bien que pathologique, est assez proche des opérations que l'on souhaite effectuer lors de la construction de la matrice de rigidité dans la GFEM, par exemple lors de l'évaluation des termes de la forme :

$$K_{ij}^{EF/enr} = \int_{\omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla (\tilde{\psi}_j(x)) \partial\Omega$$

où les $\tilde{\phi}_i(x)$ et $\tilde{\psi}_j(x)$ sont connus sur deux maillages différents. Il est révélateur de la limite de l'approche par génération de code en général : la généricité d'une telle approche analytique rend les expressions d'une complexité croissante et exponentielle. Ce qui a pour résultat un code généré de très grande taille alors qu'une approche numérique aurait demandé quelques boucles d'évaluations et tests et serait compilable.

4.2.3 Le logiciel de calcul éléments finis LMTpp

LMTpp est un code de calcul numérique programmé suivant le paradigme de la programmation orientée objet, en C++. Il fait usage d'une programmation générique permise par le langage C++, et permet de traiter des problèmes par des méthodes éléments finis standards (entre autres). LMTpp fait face à deux enjeux : i) être flexible quant aux opérations qu'il peut être amené à faire (par exemple sur les types des arguments) et ii) être performant. Pour y faire face, LMTpp se base sur la métaprogrammation par template. Cette façon de programmer a pour but de paramétrer au maximum les classes et fonctions de sorte que la spécialisation des méthodes et même une pré-évaluation de certaines expressions puissent être faites *dès* la compilation du code source [Veldhuizen, 1995]. De plus, il supporte en partie le multithreading, en particulier lors de l'assemblage et de la résolution des systèmes matriciels, pour certains types de solveurs internes (LDL, Cholesky...) et externes (interfacés avec les bibliothèques SuiteSparse, Intel-MKL, MUMPS). Enfin de nombreux types d'éléments différents sont disponibles, bien que nous nous concentrerons sur les éléments de type triangle (à 3 noeuds) et quadrangle (à 4 noeuds) par la suite.

Une particularité de LMTpp, comme nous l'avons déjà évoqué, est l'absence d'une bibliothèque de comportement, que l'on retrouve dans les logiciels éléments finis classiques. En effet, la formulation du problème, c'est-à-dire l'expression de l'énergie potentielle élémentaire, est décrite par ailleurs et fait l'objet d'un pré-traitement dont le but est de fournir un ensemble de fichiers. Ceux-ci vont paramétrer les différentes classes de LMTpp (définition des champs et interpolations) ainsi que fournir l'expression des matrices de rigidité et des seconds membres (`MeshCarac` pour le maillage et les éléments et `FormCarac` et `add_lem_matrix` pour la formulation et l'expression de la matrice de rigidité). Cette architecture particulière est schématisée **figure 4.13**. Ces fichiers sont générés en interne, à l'aide d'un outil en python, ou bien à l'aide du logiciel Metil dont nous venons de parler.

Cette façon de procéder offre une flexibilité certaine quant à l'utilisation de lois de comportement et formulations non standard. Cependant, l'utilisation de la méta-programmation rend la lecture du code et la programmation nettement plus ardue, par exemple par l'absence de types explicitement définis dans le code des méthodes. L'accès à la programmation dans LMTpp et au debuggage est donc difficile. Enfin, il convient de préciser que la structure de données reste proche de celle des éléments finis, où un traitement élémentaire peut être fait (le traitement de chaque élément est le même), ce qui est un facteur limitant vis-à-vis des méthodes nodales (GFEM classique, XFEM) où les fonctions de forme et le nombre d'inconnues varient d'un noeud à l'autre.

4.3 Intégration de la méthode dans la plateforme

Comme nous venons de le voir, la plateforme regroupe deux outils, basés sur des représentations différentes, et ayant des possibilités et limites qui leur sont propres. Le code, nommé MGFEM (pour Multiscale Generalized Finite Element Method), développé

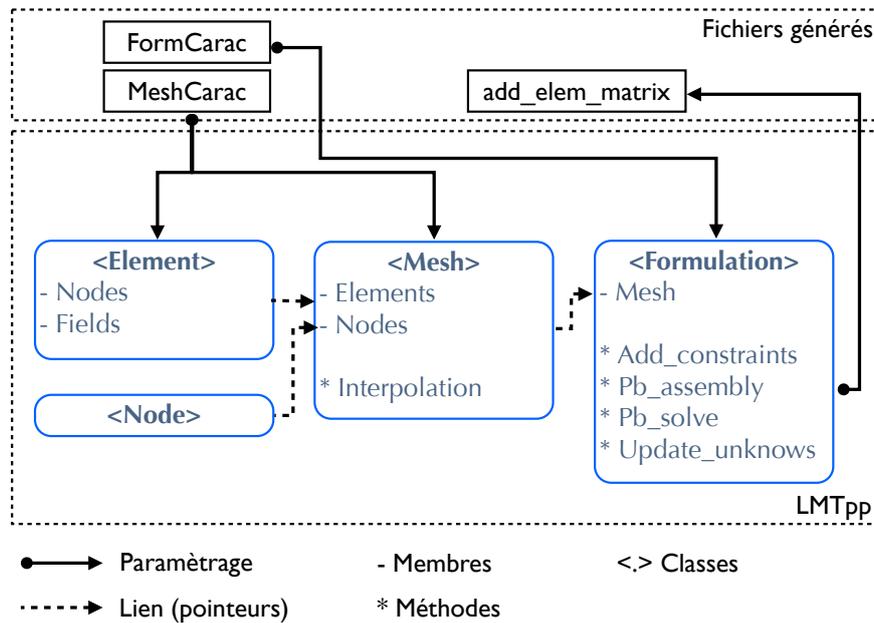


FIGURE 4.13: Schématisation simplifiée de l'architecture du code LMTpp et de la paramétrisation des grandes classes.

dans les présents travaux se base sur ces deux outils. Il exploite une version modifiée de l'outil de génération de code METIL, pour la génération des contributions à la matrice de rigidité, et de la structure du code LMTpp et de ces outils de résolution. Reprenons les opérations de la section 4.1 et détaillons dans quels outils elles ont été implantées (hormis les deux premières qui sont faites sous Matlab) :

1. **Calcul des fonctions d'enrichissement.** Cette opération de constitution du handbook requiert un calcul éléments finis classique, sans nécessité de développement supplémentaire particulier. Les matrices de rigidité élémentaires et seconds membres sont pré-calculés et générés sous Metil et le calcul effectué sous LMTpp.
2. **Gestion (ajout, positionnement) des motifs et enrichissement associés.** Cette gestion a été programmée en C++ pour LMTpp, par le biais d'une classe particulière, dédiée à faire l'interface entre le handbook numérique et le programme principal de LMTpp. Les données d'entrée sont issus du code CMC Morph. Cette classe prend en charge la sauvegarde, le mapping entre repères, la gestion des indices liés aux motifs et à l'évaluation des fonctions d'enrichissement. L'ajout des motifs se fait par un fichier XML, généré en même temps que l'identification des motifs à partir de l'étude des micrographies.
3. **Calcul et intégration des matrices de rigidité et second membre.** Cette opération clef a été programmée entre les outils Metil et LMTpp. Metil a été modifié pour permettre la génération des contributions à la matrice de rigidité liés aux enrichissement. Pour ce faire, des champs "fantômes" sont introduits pour représenter les

fonctions d'enrichissement, qui ne sont pas connues à cette étape. Ces contributions sont générées pour un point de Gauss, afin de limiter la taille du code générée. L'intégration globale est implantée dans le programme C++, en faisant appel à la classe de gestion du handbook, pour la détermination des indices et les évaluations de fonctions d'enrichissement.

4. **Résolution.** Cette opération classique est effectuée sous LMTpp, à l'aide des outils de résolution pré-existants (ici, il a été choisit un solveur de Cholevsky modifié).
5. **Reconstruction et tracé des champs.** De même que pour l'intégration, l'implantation de cette opération est partagée entre Metil et LMTpp. Le premier génère la routine de reconstruction, qui est ensuite utilisée dans LMTpp dans une fonction de traçage adaptée à la gestion d'interpolation enrichie, créée pour l'occasion.

Cette façon de procéder limite donc les entités décrites dans Metil, afin de pallier les difficultés de taille de code généré. Cependant, comme les opérations sont partagées, il a été nécessaire d'implanter de nouvelles méthodes dans les deux codes à la fois et avoir une stratégie de debuggage particulière.

Compte tenu de ces choix, l'organisation des grandes classes et outils dans la plateforme est résumée **figure 4.14**. La gestion des enrichissements se fait dans une structure dédiée, qui va faire interface entre le problème global et les motifs. Le logiciel Metil est quant à lui utilisé pour générer les entités élémentaires pour les problèmes du handbook et le problème GFEM (à ceci près que pour ce dernier, l'intégration est déportée dans LMTpp).

4.3.1 Détails sur le post-traitement des résultats

Le post-traitement des résultats est un point délicat de la méthode, vis-à-vis des outils à disposition. En effet, il faut pouvoir assembler des champs définis sur des maillages différents. Par exemple, lors de la reconstruction du champ de déplacement, il faut additionner en tout point le champ macro et le champ dû aux différents motifs et connus sur des maillages annexes. L'export de tous les maillages sous Paraview par exemple, ne permet pas de faire une telle reconstruction. De même, l'export des valeurs des champs par point de Gauss n'est pas utilisable.

Il a donc été choisi de reconstruire les champs point par point, recréant ainsi une image. On considère donc que l'on trace le champ d'intérêt sur une image d'une résolution donnée. La reconstruction se fait en deux étapes :

1. Construction du champ macroscopique sur l'étendue de l'image,
2. Correction liée aux différents patches.

Cette procédure est relativement longue. En effet, les calculs et opérations sur les images sont effectués par le CPU, qui ne dispose pas d'une architecture et surtout de jeux d'instructions optimisées pour ce genre d'opérations graphiques.

Cette solution reste donc provisoire, et d'autres solutions sont à l'étude. L'utilisation de la carte graphique pour effectuer cette reconstruction serait souhaitable, car son architecture largement parallélisée et ses instructions dédiées et optimisées accélèreraient

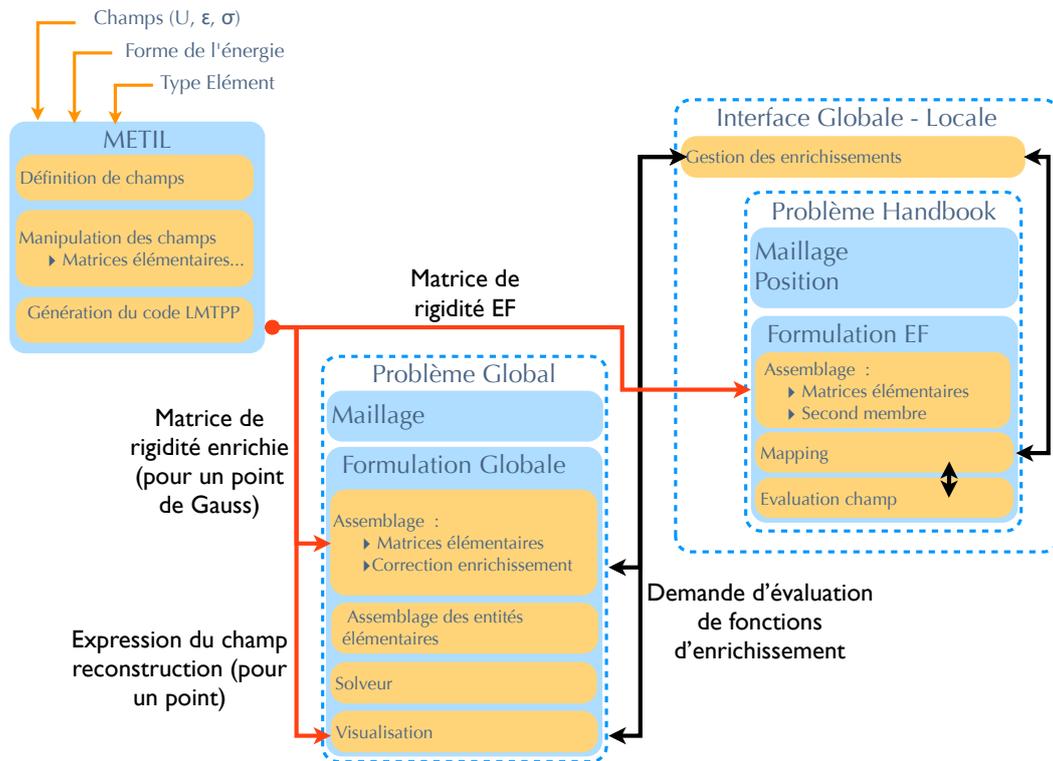


FIGURE 4.14: Schématisation simplifiée de l'architecture du code, avec la mise en place d'une classe dédiée faisant interface entre la formulation globale GFEM et le Handbook contenant tous les enrichissements.

largement le processus. Cela peut être fait de différentes façons, soit par la programmation d'une procédure dédiée, par exemple en CUDA, soit par l'utilisation d'un logiciel externe, capable de pouvoir faire des opérations entre champs définis sur des maillages différents, par exemple le logiciel de visualisation et de post-traitement Avizo. Ce logiciel permet en effet de reconstruire automatiquement une image 2D ou 3D (sorte de tomographie) des champs à partir d'un maillage. Lorsque plusieurs sont chargés, il est alors possible d'effectuer un ensemble d'opérations entre ces images (translation, rotation, mise à l'échelle, opérations mathématiques entre champs discrets (+,-,*...)). Cela permettrait, dans notre cas, de faire automatiquement (à l'aide d'un script) et rapidement la reconstruction des champs .

5 Bilan

Une nouvelle approche multiéchelle pour la simulation de microstructures complexes, dans le cadre de l'élasticité linéaire, a été proposée dans ce chapitre. Elle a été présentée comme un cas particulier de la méthode des éléments finis généralisés (GFEM), dans

laquelle une séparation d'échelle, entre la microstructure et le maillage global, est introduite. Il est ainsi possible de considérer les perturbations induites par les hétérogénéités localisées. Ce caractère local a deux conséquences fortes : le découplage des intégrations entre les échelles et entre les motifs d'enrichissement.

Ainsi, une approche originale est développée, qui se base sur un ensemble de motifs pour décrire à la fois la microstructure et la cinématique locale. Cette stratégie permet d'une part d'éviter les procédures de maillage de la totalité de la structure et d'autre part les problématiques d'intégration entre maillages non-conformes (support des fonctions d'enrichissement numériques), présente dans le cas dans la GFEM classique. La taille des systèmes linéaires globaux est de plus d'une très petite, par rapport à une méthode éléments finis classique.

Enfin, le modèle a été implanté dans le code nommé MGFEM, qui exploite une partie de la plateforme logicielle du laboratoire. Cet outil permet de bénéficier à la fois de la capacité de calcul du code C++, combiné à la souplesse d'implantation lié à l'outil de calcul formel et de génération de code. Le programme a fait l'objet de la rédaction d'un manuel [Tranquart, 2012], qui reprend les bases de fonctionnement de la plateforme logicielle du laboratoire, complétée par les développements spécifiques liés à ces travaux. On notera cependant que le post-traitement des résultats demeure un point dur, car aucun outil ne permet de faire la reconstruction des champs simplement et efficacement pour le moment.

Chapitre 5

Application à la modélisation du fil de CMCs

L'ensemble de la démarche de reconstruction et de simulation est à présent appliquée à la modélisation du fil de CMCs. Dans un premier temps, le choix des motifs, qui s'appuie sur un critère de distance d'interaction, est décrit. La démarche est ensuite appliquée à la simulation du fil en 2D. Enfin, la méthode est étendue à un cas simple de tronçon de fil 3D.

Sommaire

1	Modélisation du fil de CMC	111
2	Construction du Handbook : Choix des motifs	111
2.1	Premier critère de choix de groupes de fibres	112
2.2	Réduction du Handbook et approximation de la microstructure . . .	116
3	Simulation de sections 2D sous chargement transverse	118
3.1	Cas simple d'un composite avec une matrice homogène	119
3.2	Cas d'un composite avec une matrice multiséquencée de type CVI .	122
3.3	Cas d'un composite avec une matrice multiséquencée avec nodules de Voie Liquide type CVI/CVL	125
3.4	Evaluation du coût numérique	125
4	Extension au tronçon 3D du fil	128
4.1	Microstructure du tronçon 3D d'un fil de CMC et génération	128
4.2	La GFEM multiéchelle en 3D	131

4.3	Modélisation du tronçon 3D du fil	133
5	Bilan	133

1 Modélisation du fil de CMC

Les chapitres précédents ont mis en place les hypothèses et outils nécessaires à la modélisation du fil de CMC, en élasticité du moins. D'une part, les outils de génération de morphologie autorisent la production d'une large gamme de microstructures qui couvrent les différentes générations de CMCs comme nous allons le voir dans ce chapitre. Les générations vont de la matrice monocouche aux matrices multi-séquencées et hybrides des dernières générations élaborées par Snecma Propulsion Solide. D'autre part, une méthode multiéchelle est mise en place afin d'effectuer la modélisation et la simulation du fil par l'intermédiaire d'un Handbook de motifs. Ces derniers prennent en charge à la fois la description de la cinématique locale et la description locale du fil (du point de vue topologique). Nous allons donc à présent aborder l'application de cette démarche au fil de CMCs.

On considérera pour ce faire une situation simplifiée où le fil, supposé infini, est isolé du reste du matériau (*i.e.* du reste du tissage et du seal-coat). Ces derniers ont bien évidemment une influence importante sur le fil : sur sa forme tout d'abord (section, ondulation) et sur les conditions limites qui s'y appliquent.

Dans un premier temps, des sections 2D du fil sont considérées, sous chargement plan, et simulées sous l'hypothèse des déformations planes (ce qui correspond à un fil infini). Ces exemples vont permettre d'illustrer la démarche de modélisation et plus exactement :

1. la définition de Handbook et des motifs qui le constituent ;
2. la simulation en utilisant la GFEM multiéchelle.

En particulier, l'étape de création du Handbook, reposant sur la détermination d'une distance d'interaction, est détaillée. Il s'agit cependant plus d'une étude préliminaire et, comme nous le reverrons, un travail est encore nécessaire quant au choix des motifs. De plus, la qualité de la solution GFEM obtenue est abordée, par comparaison à une solution de référence obtenue par éléments finis et dont la qualité peut elle-même être estimée.

Enfin, l'extension de la démarche à la modélisation d'un tronçon 3D du fil est abordée. Elle soulève en effet un certain nombre de points durs, d'une part au niveau de la génération de la morphologie et l'extraction des motifs pertinents et d'autre part de la prise en compte de motifs « longs » traversant plusieurs éléments globaux et qui proviennent de la modélisation des fibres.

2 Construction du Handbook : Choix des motifs

La GFEM multiéchelle s'appuie sur un ensemble de motifs qui servent à la fois la reconstruction de la microstructure et la représentation de la cinématique locale. Le choix de ces motifs est donc au coeur de la modélisation car ils conditionnent la microstructure et les phénomènes que le modèle met en jeu. A ce titre, ce choix est avant tout un choix de modélisateur. De plus, les motifs retenus doivent répondre aux hypothèses définies lors de la formulation de la méthode, c'est-à-dire :

1. être de petite taille par rapport au maillage grossier de la structure ;
2. être (le plus possible) indépendants les uns aux autres, afin de respecter l'hypothèse de non-interaction des enrichissements.

Nous allons donc dans un premier temps détailler l'approche retenue pour l'extraction des groupes d'entités de la microstructure du fil de CMC, dont la reconstruction morphologique a été développée dans le chapitre 3. Puis un processus de sélection de motifs pertinents est abordé.

2.1 Premier critère de choix de groupes de fibres

Il a été montré dans le chapitre 4, section 2.1, qu'une inclusion ou un pore de petite taille induit une perturbation locale. Naturellement, il est donc possible de définir une distance à partir de laquelle deux fibres n'interagissent plus (ou, du moins, que l'interaction est faible). Un critère simple est donc d'utiliser cette distance d'interaction afin de regrouper les entités (les fibres par exemple) qui interagissent. Cette démarche est illustrée dans le cas d'une section 2D du fil.

2.1.1 Détermination d'une distance d'interaction

Pour déterminer cette distance d'interaction, une démarche simple se basant sur une étude de sensibilité est effectuée. Pour ce faire, on considère dans un domaine fixe deux fibres de diamètre d_f fixé et espacées d'une distance d , sous chargement de traction pure suivant l'axe x . La géométrie du problème est schématisée en **figure 5.1**. Ce problème est résolu, pour chaque espacement d entre les fibres, de deux façons : une fois par une méthode éléments finis classique (avec un maillage fin) et une autre par la GFEM multiéchelle. Cette dernière utilise un handbook constitué uniquement d'un motif d'une seule fibre, et donc ne prenant pas en compte l'interaction entre les deux fibres. Le maillage du motif et la norme des champs d'enrichissement associés sont présentés **figure 5.2**. On appellera ces deux solutions respectivement « solution de référence » et « solution GFEM ». On peut alors définir simplement la longueur d'interaction comme la distance critique d_c d'espacement entre les deux fibres à partir de laquelle l'erreur commise sur une quantité d'intérêt par la GFEM vis-à-vis de la référence est acceptable.

Pour ce faire, on s'intéresse à l'erreur commise sur la contrainte suivant l'axe du chargement (x), sur la ligne sonde (cf. **figure 5.1**). Parmi les différentes composantes de la contrainte, la plus intéressante et de plus forte amplitude est σ_{xx} . On définit donc l'erreur relative e sur σ_{xx} de la façon suivante :

$$e(\sigma_{xx})(x) = \frac{\sigma_{xx}^{GFEM}(x) - \sigma_{xx}^{ref}(x)}{\sigma_{xx}^{ref}(x)}$$

La valeur maximale de l'erreur relative pour un ensemble de distance inter-fibre d est présentée en **figure 5.3**. Deux exemples de tracé des deux solutions GFEM et de référence sont de plus présentés en **figure 5.4** et en **figure 5.5** pour deux espacements différents. On

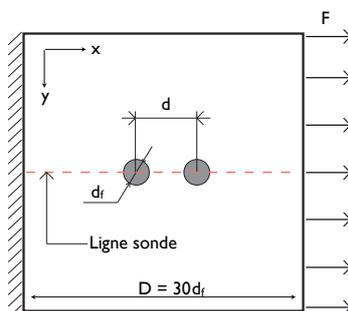


FIGURE 5.1: Schématisation du problème utilisé pour l'étude de sensibilité vis-à-vis de l'espacement inter-fibres pour la détermination de la distance d'interaction.

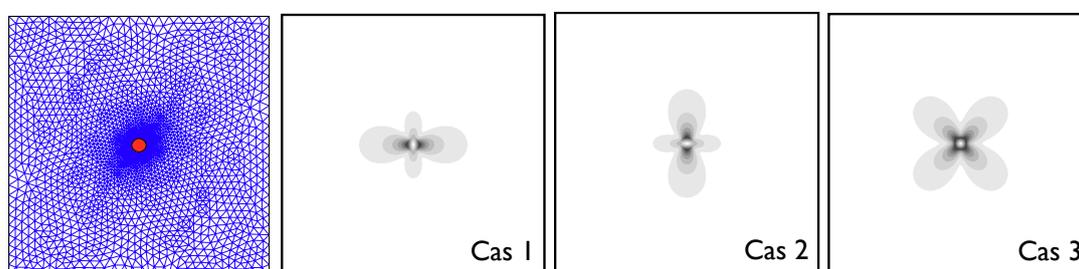


FIGURE 5.2: Maillage du motif à une fibre utilisé dans le Handbook et normes des champs d'enrichissement associés ($\|\psi_i\|$) aux trois cas de chargements (Cas 1 : traction horizontale ; Cas 2 : traction verticale ; Cas 3 : cisaillement).

remarque que, naturellement, l'erreur décroît à mesure que les deux fibres s'éloignent. Cette décroissance est particulièrement marquée lorsque les fibres sont plutôt proches (espacement de moins d'un diamètre de fibre). On nuancera enfin les valeurs de l'erreur pour deux fibres presque en contact (*i.e.* pour $d = 0.201\mu m$). En effet, la solution pour deux fibres se touchant peut mettre en jeu de fortes concentrations de contraintes au point de contact, et est même singulière dans certains cas [Zou et Li, 2002]. Dans notre cas, la solution éléments finis de référence n'est donc pas, au vu du maillage, satisfaisante lorsque les fibres sont trop proches.

On considèrera par la suite qu'une erreur de moins de 10% est acceptable, ce qui mène à un espacement critique entre centres de fibres de l'ordre 1.5 diamètre de fibre, voir **figure 5.3**. A noter que l'erreur résiduelle tend vers 0 seulement asymptotiquement avec l'espacement augmentant (hormis les erreurs liées à la discrétisation).

2.1.2 Détermination des groupes de fibres

Il convient à présent d'utiliser cette distance critique d'interaction pour déterminer les paquets de fibres. C'est une opération assez simple à effectuer car elle revient à tester les

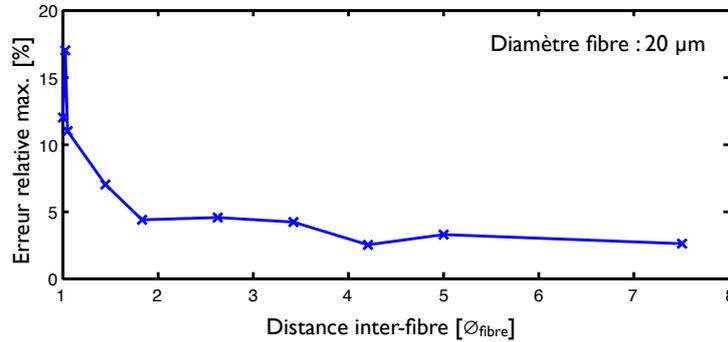


FIGURE 5.3: Tracé de l'erreur relative maximum commise sur la contrainte en fonction de l'espacement entre les fibres.

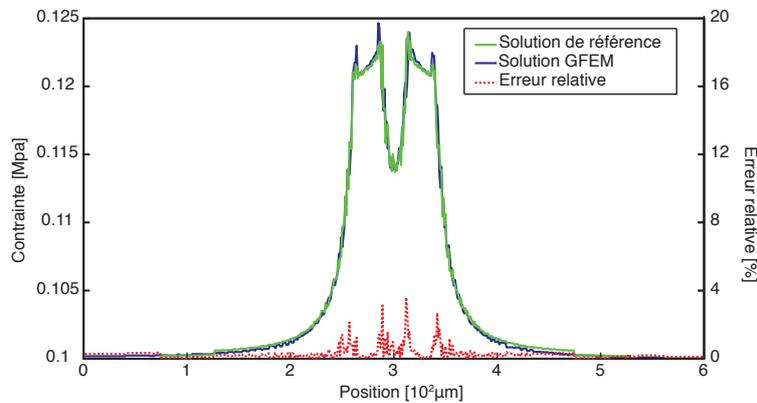


FIGURE 5.4: Tracé de la contrainte σ_{xx} le long de la ligne sonde pour la solution de référence, la solution GFEM, ainsi que l'erreur relative, pour un espacement de $d = 0.526D_f$.

distances qui séparent les centres des fibres. Pour ce faire, on se base sur une triangulation de Delaunay des centres des fibres. Ceci permet, pour chaque fibre, de déterminer les voisines naturelles avec lesquelles les espacements sont calculés. Les groupes de fibres dont les distances inter-fibres sont inférieures à la distance $d_c = 1.5d_f$ sont donc regroupés.

On note cependant qu'il y a très peu de fibres dont plus de deux voisines sont plus proches que d_c . Cela signifie qu'il n'y a quasiment pas de groupe de 4 fibres dans la distribution étudiée et donc, en première approximation, que l'on peut se contenter d'identifier les paquets de 3, 2 et 1 fibres. On procède donc par élimination et en identifiant successivement ces groupes en omettant les fibres déjà identifiées. On notera que cette décomposition en groupes de fibres n'est pas unique. En effet, la procédure étant séquentielle, un changement de l'ordre des fibres change la décomposition. Le résultat des trois étapes de sélection des groupes de fibres pour une distribution de fibres données est illustré

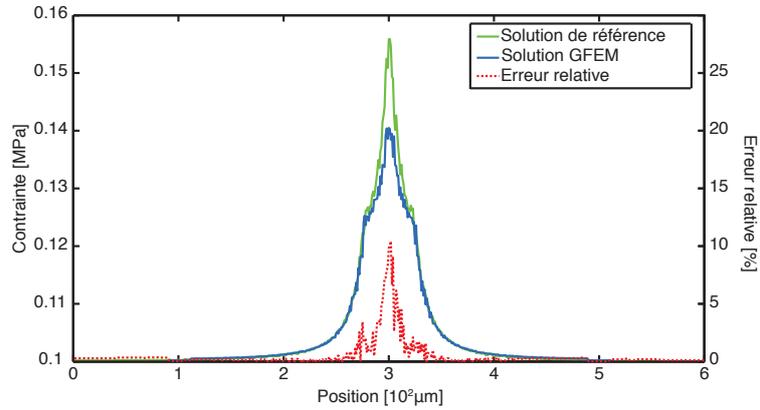


FIGURE 5.5: Tracé de la contrainte σ_{xx} le long de la ligne sonde pour la solution de référence, la solution GFEM, ainsi que l'erreur relative, pour un espacement de $d = 0.21D_f$.

figure 5.6. Le nombre de groupes identifiés est rappelé **tableau 5.1**.

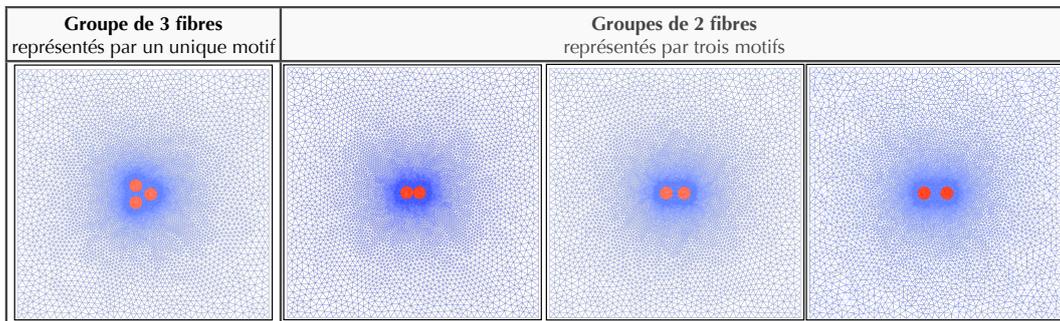


FIGURE 5.6: Exemple de regroupement des fibres par paquets de 3, 2 et 1 fibres.

Type de groupe	Nombre identifié
Groupes de 3 fibres	30
Groupes de 2 fibres	86
Groupes de fibre seule	97

TABLE 5.1: Nombre de paquets de 3, 2 et 1 fibres identifiés dans la distribution

2.2 Réduction du Handbook et approximation de la microstructure

2.2.1 Groupes de fibres

L'identification des groupes de fibres met en lumière un nombre assez important de groupes différents. Par exemple, il y a 30 groupes de trois fibres sur l'exemple traité dans la section précédente. Il n'y a *a priori* pas de limitation quant au nombre de motifs utilisables dans la GFEM multiéchelle mise en place dans ces travaux. On pourrait donc simplement utiliser chacun d'eux dans la constitution du Handbook. On peut cependant s'interroger quant à la pertinence d'une telle approche. S'il est vrai que le calcul d'un problème du Handbook est numériquement peu coûteux, ces motifs sont suffisamment proches les uns des autres pour pouvoir réduire chaque famille en y sélectionnant des représentants. Ceci permet de gérer un Handbook avec un nombre limité de motifs.

De plus, l'utilisation d'un petit nombre de motifs pour chaque groupe de fibres (groupes de 3 fibres par exemple) peut permettre dans certains cas (typiquement lors de l'utilisation d'éléments macro linéaires) de pré-calculer les termes qui y sont liés dans la matrice de rigidité et ainsi gagner en temps de calcul lors de l'intégration de la matrice, puisque l'ajout d'un motif est alors presque « gratuit ».

La sélection des représentants se fait en étudiant la distribution des groupes identifiés. Dans le cas des groupes de deux fibres, on peut choisir un représentant dont la distance inter-fibre correspond à la distance moyenne observée dans les groupes identifiés. Deux autres peuvent correspondre aux espacements extrêmes observés. Pour les groupes de trois fibres, cette sélection est moins triviale. En effet, il faut que le triangle formé par les centres des fibres ne soit pas trop écrasé, ce qui signifierait que les trois fibres sont presque alignées. Dans ce cas là, plusieurs solutions sont possibles sans avoir à créer un groupe de trois fibres. On peut par exemple représenter ces fibres par deux motifs distincts, l'un avec une fibre et l'autre avec deux, comme le montre la **figure 5.7**. C'est une solution simple et c'est celle qui sera utilisée par la suite. On pourrait tout-à-fait imaginer d'autres solutions, non testées à ce jour ; par exemple, associer à chaque fibre un motif d'une seule fibre, puis ajouter un motif d'interaction à deux fibres entre les couples de fibres. Cette dernière solution est séduisante, mais la définition du motif d'interaction à mettre en place n'est pas, à ce stade, très claire. Lors de la sélection des motifs, il a été choisi de trier ces groupes suivant la distance de chacune des fibres à ses voisines (*i.e.* suivant la longueur des trois côtés du triangle). On associe ensuite un motif correspondant à la moyenne des distances observées.

2.2.2 Traitement des pores et des nodules de matrice Voie Liquide

Le traitement des motifs liés aux pores et aux nodules de matrice Voie Liquide est sensiblement différent des motifs avec les fibres. En effet, les pores et les nodules ont des formes très variées et dépendent des fibres alentours. Il est donc difficile de réduire la famille de motifs, comme il est fait pour les groupes de fibres. Il est donc nécessaire de considérer chacun d'eux comme un motif unique, dans un domaine de taille adaptée. L'interaction directe entre nodules ou fibres et pores n'est pas prise en compte pour le mo-

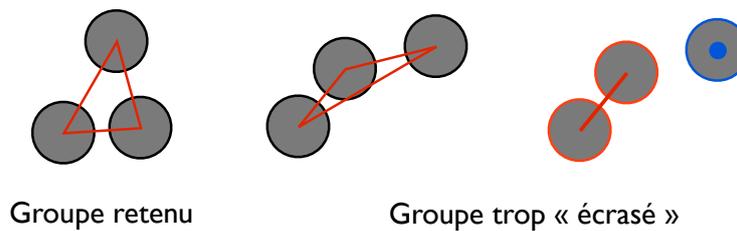


FIGURE 5.7: Schématisation d'un groupe de trois « écrasé », pouvant être représenté par deux motifs de deux et une fibres.

ment. Elle serait bien entendu envisageable, en définissant des motifs dédiés. Par exemple, en prenant les fibres entourant un pore directement dans le motif du pore.

2.2.3 Incidence sur la microstructure simulée

Naturellement, le fait de ne retenir qu'un nombre limité de motifs au sein du Handbook ne permet pas de simuler la microstructure générée initialement. Il y a une approximation de celle-ci, les groupes originaux étant remplacés par les motifs retenus dans le Handbook. Par exemple, la distribution des distances inter-fibre change. Pour se rendre compte de ce phénomène, prenons comme exemple le cas traité précédemment, en choisissant les motifs suivant :

- Les groupes de 3 fibres sont représentés par un unique motif. Il est formé d'un triangle équilatéral de côté la moyenne des distances inter-fibres observées dans les groupes de trois identifiés précédemment,
- Les groupes de 2 fibres sont représentés par trois motifs différents. L'un est construit avec un espacement inter-fibre correspondant à la moyenne des distances des groupes identifiés, les deux autres sont les extrêmes de la distribution.

Pour caractériser cette incidence, une estimation de la distribution de la distance inter-fibres¹ initiale et reconstruite à l'aide des motifs, peut être utilisée. Elles sont représentées en **figure 5.8**. On observe que l'influence reste tout de même très faible.

Au-delà de la modification de la loi de distribution, un inconvénient supplémentaire est l'effet d'interpénétration qui peut apparaître. Cet effet peut apparaître entre fibres, comme le montre la **figure 5.9**, ou entre les couches de matrice, comme nous le reverrons par la suite. Dans le cas des fibres, on négligera cet effet qui apparait rarement et est très limité (très petites zones de recouvrement).

1. Cette mesure a déjà été utilisée dans le chapitre 3 afin de caractériser les distributions de fibres réelles et simulées. On notera que les autres caractérisations qui ont été développées dans ce chapitre auraient pu être utilisées ici.

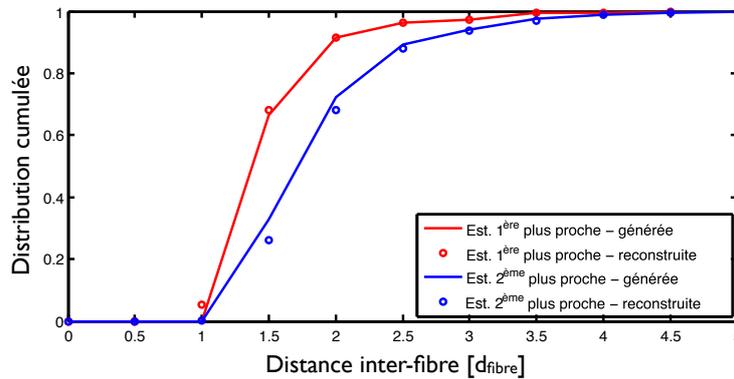


FIGURE 5.8: Effet de la réduction du Handbbook sur l'estimation de distribution cumulative de la distance inter-fibre.

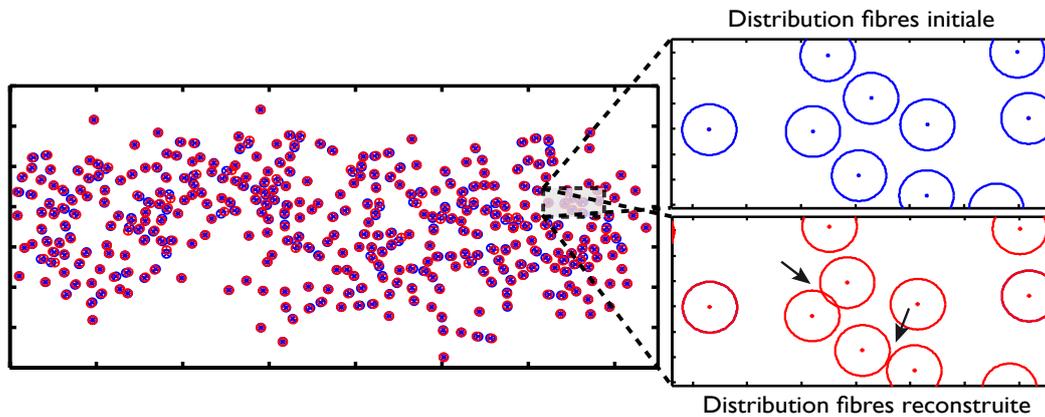


FIGURE 5.9: Effet d'interpénétration lors de la réduction du nombre de motifs du Handbook (indiqué par les flèches).

3 Simulation de sections 2D sous chargement transverse

Pour illustrer la démarche, elle est appliquée à plusieurs cas, successivement plus complexes du point de vue de la géométrie de la microstructure et qui correspondent à plusieurs générations de CMCs. Ainsi, nous allons commencer sur un cas simple contenant uniquement des fibres dans une matrice homogène continue. La complexité est ensuite augmentée par l'ajout d'un séquençage de la matrice (présence de plusieurs couches différentes) et des pores, pour finir avec un calcul de la microstructure de CMC hybride quasi-complète, avec une matrice multi-séquencee avec pores et nodules de matrice voie liquide.

Remarque 5.1:

L'interphase de PyC existant entre les fibres et la matrice n'est pas abordée ici. En effet, cette entité joue principalement sur le comportement en fissuration du matériau.

Les phénomènes de décohésions fibre/matrice et de fissuration seront pris en compte par le biais de motifs spéciaux ainsi que d'un algorithme adapté, qui seront abordés dans le chapitre 6.

3.1 Cas simple d'un composite avec une matrice homogène

Ce premier cas simple est constitué de 360 fibres dans une matrice continue homogène. Il va permettre de mettre en évidence deux points : d'une part, la qualité globale de la solution obtenue par la GFEM multiéchelle et ce, même avec un Handbook très simple et d'autre part, l'utilisation d'un Handbook plus complet permettant de mieux estimer les contraintes maximum dans la section. On se base pour ce faire sur une solution de référence obtenue par éléments finis classiques. Le cas traité, schématisé **figure 5.10**, correspond à un cas de chargement en traction suivant l'axe x (effort surfacique imposé $F = 0.1MPa$). Nous prendrons arbitrairement un ratio de module d'élasticité de 2 entre les fibres et la matrice mais le même coefficient de Poisson ($E_{fibre} = 2E_{matrice} = 200GPa$ et $\nu_{fibre} = \nu_{matrice} = 0.3$).

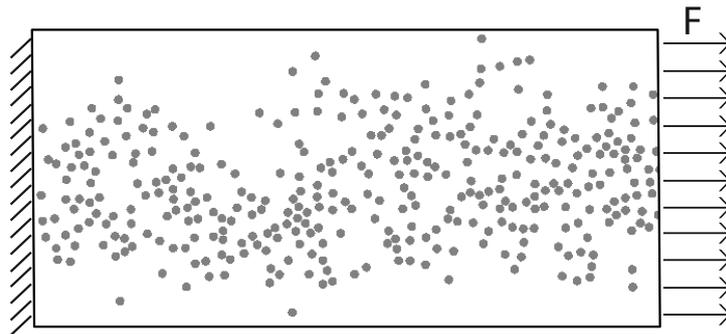


FIGURE 5.10: Schématisation du problème à matrice homogène et continue, en traction horizontale.

3.1.1 La solution de référence

La solution de référence est obtenue par éléments finis, en se basant sur un maillage fin réalisé sous GMSH, représenté en **figure 5.11**. La taille des éléments au niveau des fibres correspond à environ 1/10 du diamètre des fibres. Il est intéressant d'estimer la qualité de cette solution de référence, pour que les comparaisons faites par la suite aient un sens. Pour ce faire, les outils d'estimation d'erreur développés au laboratoire sont utilisés. En particulier, les outils implantés dans la plateforme LMTpp/Metil sont utilisés pour donner une estimation de l'erreur globale garantie, c'est-à-dire qui est strictement supérieure à l'erreur vraie entre la solution exacte et la solution par éléments finis [Pled *et al.*, 2011b, Pled *et al.*, 2011a].

On s'intéresse à deux quantités :

- L'estimation de l'erreur globale entre la solution exacte et la solution EF. Cet estimateur quantifie la distance entre la solution exacte u_{ex} et la solution approchée u_h au sens de la norme énergétique suivante :

$$\|u_{ex} - u_h\| = \int_{\Omega} \mathbf{H}\boldsymbol{\varepsilon}(u_{ex} - u_h) : \boldsymbol{\varepsilon}(u_{ex} - u_h) d\Omega$$

En normant par rapport à u_h , c'est à dire en calculant $\frac{\|u_{ex}-u_h\|}{\|u_h\|}$, nous obtenons une valeur relative globale de l'ordre de 18%, ce qui montre que notre solution de référence est globalement bonne. Il aurait été intéressant d'étudier l'erreur locale sur la contrainte, mais ces outils, en cours de développement, n'étaient pas disponibles au moment de l'étude.

- La carte de contribution à l'erreur globale, **figure 5.12**. Cette carte permet de mettre en évidence les zones où la solution de référence n'est pas optimale. Dans notre cas, ces zones se situent naturellement dans les zones de forts gradients : autour des fibres. La contribution reste toutefois plutôt limitée.

On peut donc conclure que notre référence a du sens, les outils nous garantissant que celle-ci est globalement proche de la solution exacte.

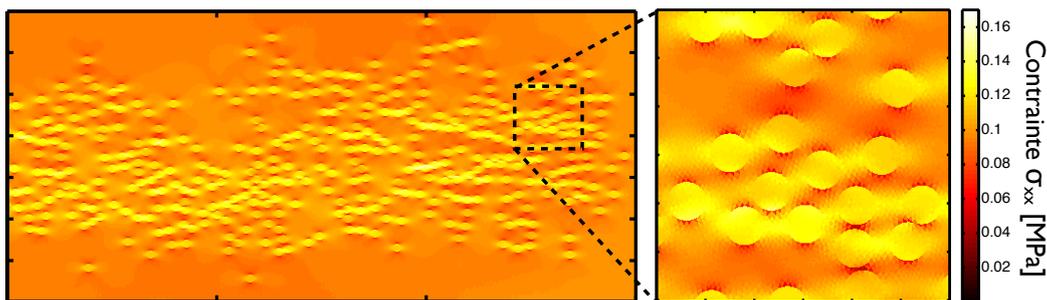


FIGURE 5.11: Contrainte σ_{xx} de la solution de référence.

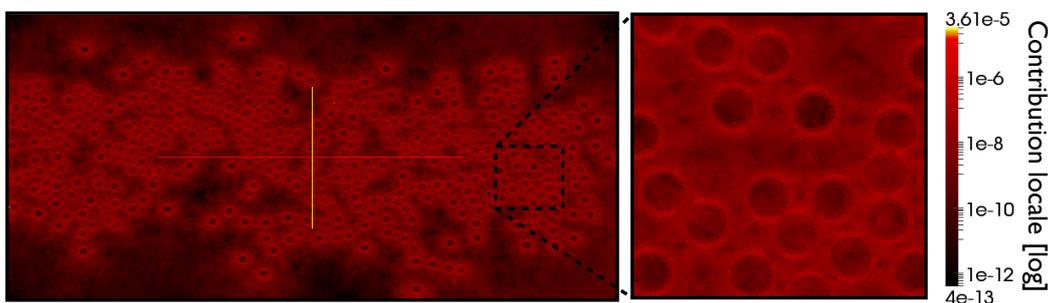


FIGURE 5.12: Carte de contribution à l'erreur globale par élément (normée par rapport à la taille des éléments), en échelle logarithmique.

3.1.2 Utilisation d'un unique motif d'une fibre

Dans un premier temps, un calcul simple est effectué où le handbook est uniquement constitué de l'enrichissement lié à un motif d'une fibre seule en milieu infini et qui a été présenté en **figure 5.2**. Le maillage grossier utilisé pour la GFEM est constitué de 6 éléments quadrangulaires linéaires à 4 noeuds. Le rapport d'échelle entre la taille des éléments grossiers et la taille des fibres est d'environ 20. En effet, le maillage macroscopique doit seulement permettre de capturer la cinématique macroscopique.

La solution en contrainte (la composante principale, σ_{xx}) obtenue par la GFEM multi-échelle est présentée **figure 5.13**. En comparant cette solution à celle de référence, on note que :

- La contrainte maximale observée est de $\max(\sigma_{xx}^{GFEM}) = 0.146MPa$ contre $\max(\sigma_{xx}^{ref}) = 0.164MPa$, soit une sous estimation d'environ 9% de la contrainte max. On relativisera cependant cette comparaison vis-à-vis de l'erreur globale sur la solution de référence qui est déjà de 18%. Une estimation de l'erreur locale de la solution de référence dans cette zone nous aurait permis une meilleure comparaison.
- L'erreur locale sur σ_{xx} est principalement concentrée dans les zones à contraintes faibles dans la matrice autour de la partie inférieure et supérieure des fibres (les zones déchargées à cause des fibres), cf. **figure 5.14**. Ceci s'explique par le fait que ces zones participent très peu à l'énergie du système. On notera en outre que ces zones ne sont pas les plus intéressantes du point de vue de l'initiation de la fissuration, ayant plutôt lieu dans les zones chargées.

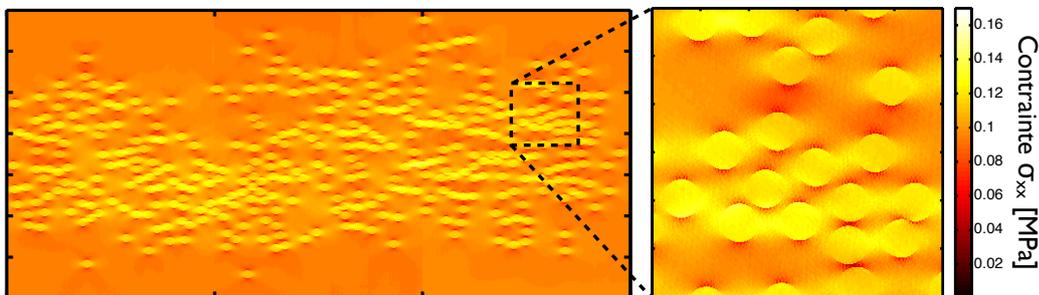


FIGURE 5.13: Contrainte σ_{xx} de la solution GFEM.

3.1.3 Utilisation d'un Handbook plus fourni

Comme il a été montré précédemment, la contrainte maximum est sous-estimée lorsque l'on utilise un Handbook contenant un unique motif d'une fibre seule car aucune interaction entre fibres très proches n'est prise en compte. Suivant la démarche présentée dans la section 2.1.2, les fibres sont à présent regroupées en fonction d'un critère de distance. Le Handbook est donc à présent composé d'un motif de 3 fibres, de trois motifs de 2 fibres et du motif d'une fibre. Les maillages de ces motifs sont présentés **figure 5.15**.

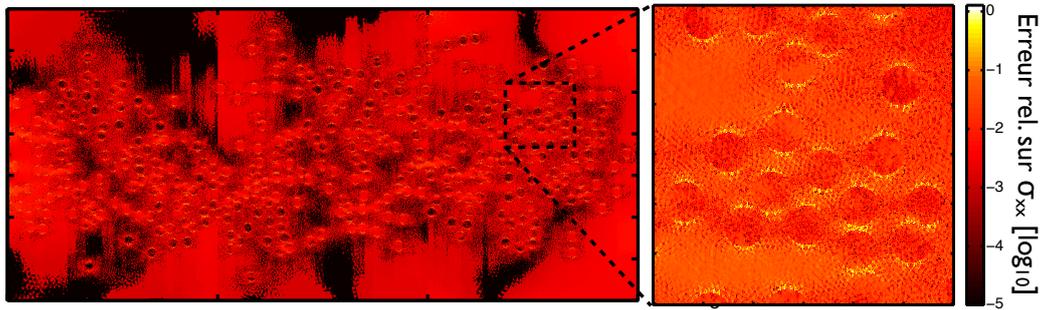


FIGURE 5.14: Erreur relative locale entre la contrainte σ_{xx} de la solution GFEM et de référence (échelle logarithmique).

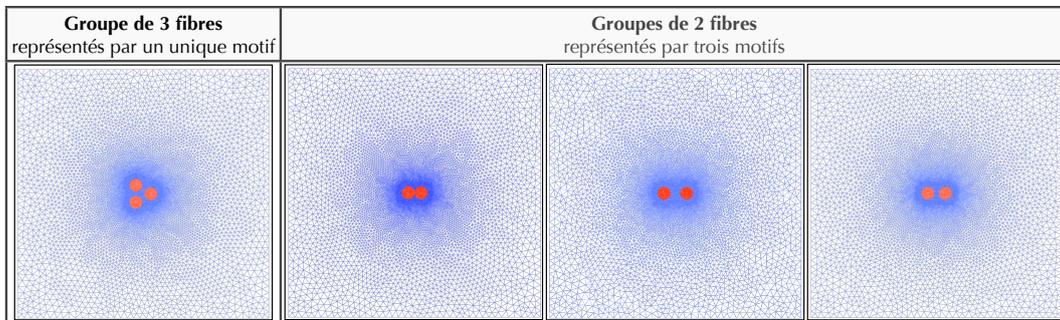


FIGURE 5.15: Motifs de 3 et 2 fibres constituant le Handbook.

La contrainte σ_{xx}^{GFEM} liée à la solution GFEM en utilisant cet Handbook est présentée **figure 5.16**. Les valeurs de contraintes sont légèrement plus élevées. En particulier, on a $\max(\sigma_{xx}^{GFEM}) = 0.154MPa$, ce qui est sensiblement plus proche de la valeur de référence ($0.164MPa$) que lors de l'utilisation du Handbook pauvre précédent (moins de 6% d'erreur). On notera que ce bénéfice de 3% semble tout de même plutôt limité, ce qui peut faire reconsidérer, dans ce cas, l'intérêt de l'utilisation d'un Handbook aussi complet.

3.2 Cas d'un composite avec une matrice multiséquencée de type CVI

Le cas simple a mis en évidence d'une part la bonne qualité générale de la GFEM multiéchelle malgré ses approximations (eu égard à la non prise en compte des interactions). La méthode est à présent appliquée à la simulation d'une section plus complexe de fil où la matrice est constituée de trois couches aux propriétés élastiques différentes, présentée **figure 5.17**. De plus, la microstructure générée met en évidence la présence de pores (une dizaine) de tailles variées. Ce type de microstructure est typique des CMCs de première génération fabriqués par Snecma Propulsion Solide (ex. : A410).

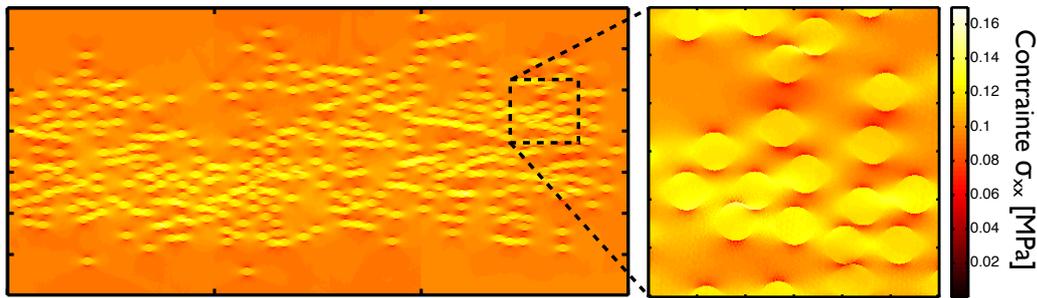


FIGURE 5.16: Contrainte σ_{xx} de la solution GFEM avec un Handbook contenant plus de motifs.

Les motifs utilisés sont légèrement différents des précédents. D'une part, les motifs liés aux groupes de fibres possèdent les deux premières couches de matrices, la troisième étant supposée infinie autour du motif. D'autre part, chaque pore fait l'objet d'un motif propre. L'ensemble des motifs sont rappelés en **figure 5.18**. On prendra les propriétés élastiques suivantes, choisies arbitrairement :

- Module d'élasticité : $E_{fibre} = 200GPa$ pour les fibres, $E_{c1} = 170GPa$ pour la première couche de matrice (la plus proche des fibres), $E_{c2} = 190GPa$ pour la seconde couche et $E_{c3} = 130GPa$ pour la dernière ;
- Coefficient de Poisson identique pour toutes les phases : $\nu = 0.3$.

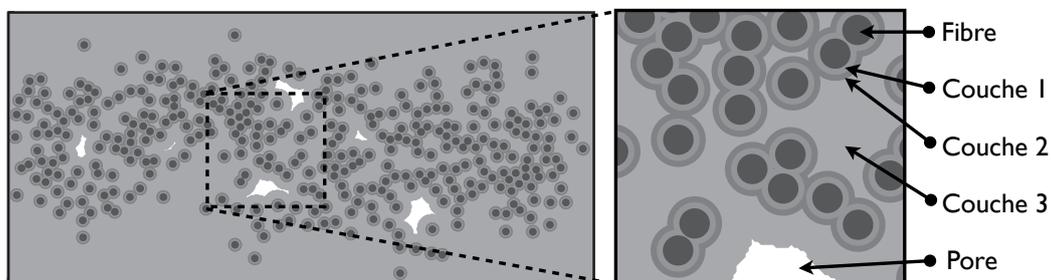


FIGURE 5.17: Problème de traction sur un microstructure mettant en jeu 360 fibres, 3 couches de matrices et une dizaine de pores.

La contrainte σ_{xx}^{GFEM} de la solution est présentée en **figure 5.19**. On notera à cet égard deux points importants. Le premier est que la prise en compte des pores crée naturellement des concentrations de contraintes importantes, la contrainte maximum passant à $0.423MPa$. Ces zones sont capitales car elles forment des sites privilégiés pour l'amorce des fissures qui se développent dans le fil. D'autre part, on notera sur le zoom à droite de la **figure 5.19** qu'il y a chevauchement des couches matricielles. Cet artifice est inhérent à la représentation par motifs de la microstructure et surtout à l'utilisation d'un nombre de motifs limité. L'utilisation d'un critère de distance d'interaction ne semble pas suffisant dans le cas des matrices multiséquencées et devrait être affiné dans ce cas là.

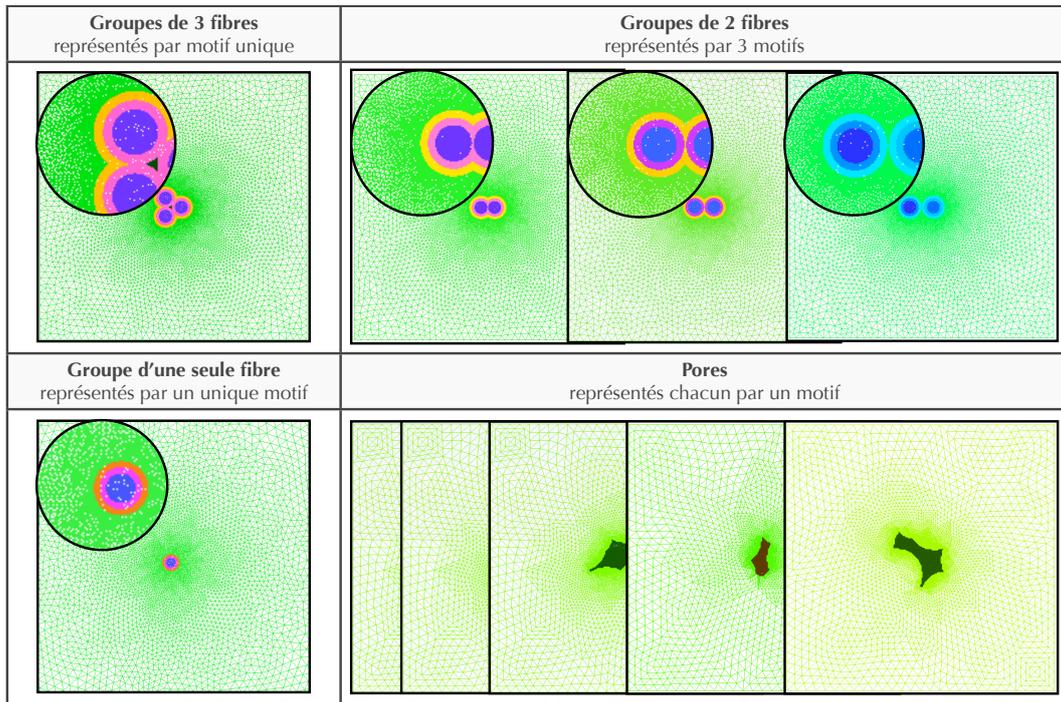


FIGURE 5.18: Motifs constituant le Handbook utilisé dans le cas d'une matrice multiséquencee et poreuse.

Par ailleurs, une référence pour ce type de microstructure est difficile à obtenir, car la définition de la géométrie et la création du maillage requièrent un effort important. Il n'y a donc pas, à ce jour, de comparaison avec une solution obtenue par une méthode purement éléments finis.

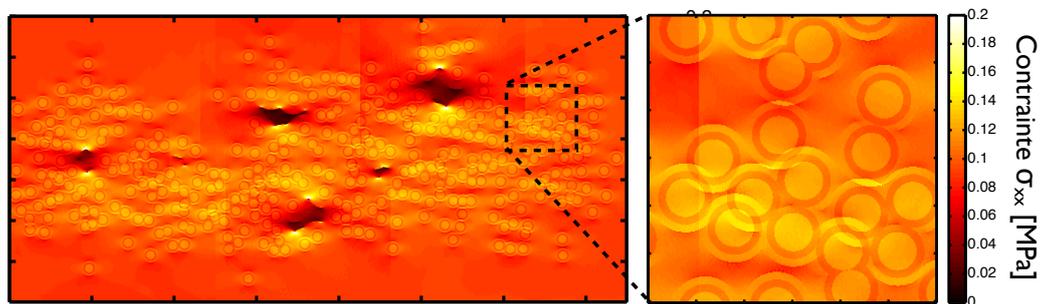


FIGURE 5.19: Contrainte σ_{xx} de la solution GFEM sur un problème de CMC à matrice multiséquencee.

3.3 Cas d'un composite avec une matrice multiséquencée avec nodules de Voie Liquide type CVI/CVL

Pour finir sur les cas d'application 2D, un cas de CMC à matrice hybride multi-séquencée et voie liquide est traité. La microstructure est présentée en **figure 5.20**. Les nodules de matrice issue de la voie liquide (une douzaine sur ce cas) sont en gris clair. La principale difficulté de ce type de morphologie réside dans la création des maillages associés aux nodules (cf. chapitre 3, section 3.1). Il peut en effet se produire des erreurs dans les contours (auto-intersections) et un certain nombre de corrections doit donc être apporté aux contours importés dans GMSH avant la phase effective de maillage. Le Handbook utilisé est semblable à celui utilisé dans le cas précédent, à ceci près que chaque nodule définit un nouveau motif, dont deux exemples sont montrés en **figure 5.21**. Enfin, les mêmes propriétés matériau que précédemment sont utilisés. Les nodules étant plus souples, nous choisissons $E_{nodule} = 80GPa$.

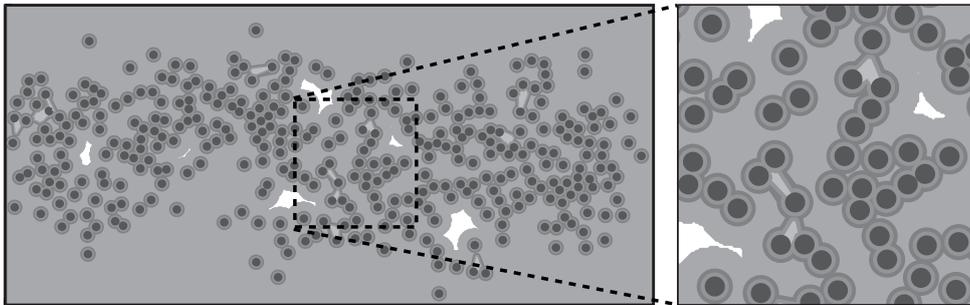


FIGURE 5.20: Microstructure de CMC à matrice multiséquencée et mettant en jeu pores et nodules de matrice voie liquide.

La contrainte associée à la solution GFEM σ_{xx}^{GFEM} est présentée **figure 5.22**. On notera que les valeurs sont assez proches de celles observées pour le cas d'une matrice multiséquencée, de même que la contrainte maximale ($\sigma_{xx}^{GFEM} = 0.421MPa$).

3.4 Evaluation du coût numérique

Nous venons de voir les capacités de la méthode à simuler des microstructures complexes pour lesquelles aucun maillage complet n'est nécessaire. Focalisons-nous à présent sur le coût numérique de la méthode comparativement à une méthode éléments finis classique. Pour ce faire, nous nous plaçons dans le cas où les deux représentations sont disponibles : le cas d'une distribution de fibre dans une matrice homogène continue présenté section 3.1, avec un Handbook constitué d'un unique motif d'une fibre (cas défavorable car donnant lieu à plus d'enrichissement). On rappelle dans le **tableau 5.2** diverses quantités (temps de maillage, nombre de degrés de liberté, temps d'assemblages et d'inversions) pour le calcul de la référence éléments finis (MEF) et le calcul GFEM. On notera

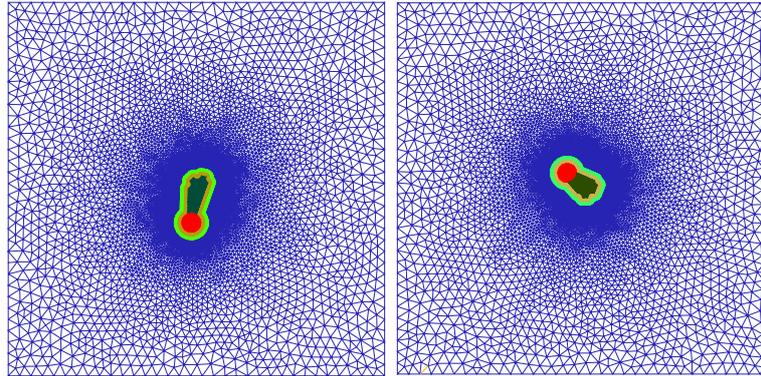


FIGURE 5.21: Exemple de maillage de deux motifs de nodules collés à une fibre.

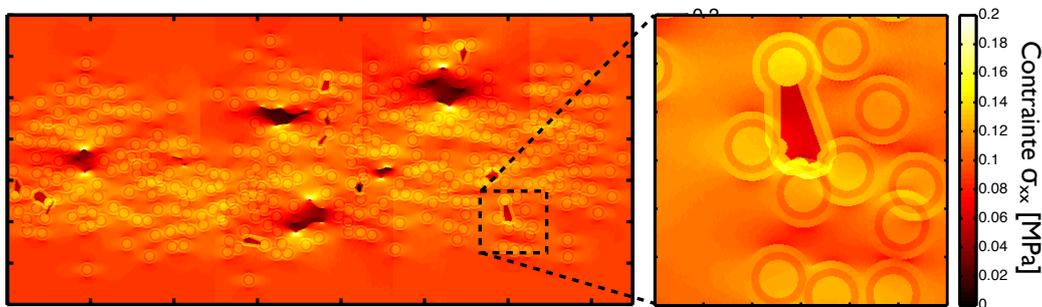


FIGURE 5.22: Contrainte σ_{xx} de la solution GFEM sur un problème de CMC hybride.

en particulier que les temps de maillage s'entendent comme les temps de maillage effectifs du logiciel, et donc ne prennent en compte le temps de « main d'oeuvre » de définition de la géométrie et paramètres (densité des mailles ...), qui peut être important.

De prime abord, on s'aperçoit que le nombre de DDLs mis en jeu par la GFEM est largement inférieur à une méthode éléments finis classique (dont on rappelle que les qualités n'étaient pas très éloignées). En effet, l'ajout d'un motif se résume à l'ajout de seulement 3 ddl (en 2D) au système global pour la GFEM. Le temps d'inversion du système est donc bien inférieur pour la GFEM que pour le modèle éléments finis. Cependant, un grand écart existe quant au temps d'intégration des matrices de raideur pour chacune des méthodes. On a alors un facteur 77 en faveur de la MEF. Cet écart de temps d'assemblage s'explique très bien en comparant le nombre d'évaluations requis pour le calcul des intégrales. Pour la MEF, il y a un point de Gauss par élément (triangle linéaire) soit environ 236 000 évaluations. Le cas de GFEM est plus pathologique, car pour chaque apparition du motif, il y a trois intégrations (pour chaque cas de chargement) sur le maillage associé, soit $359 * 3 * 4979 = 5.36e^6$ évaluations. En outre, chacune de ces évaluations est plus coûteuse que pour la MEF d'un facteur 3.5. Il est dans ces conditions naturel d'avoir un coût d'assemblage élevé pour la GFEM. Cependant, lorsque l'on prend en compte les

Opération	MEF	GFEM multiéchelle	GFEM multiéchelle pré-intégrée
Maillage			
- DDLs	236 442	684	684
- Temps de maillage (s) [#]	55	1.2	1.2
Calcul			
- Nombre d'évaluations (points de Gauss)	236 076	5 362 401	14 955
- Temps moyen évaluation par points de Gauss (s)	1.44e ⁻⁶	4.9e ⁻⁶	4.9e ^{-6*}
- Temps assemblage K (s)	0.34	26.1	0.073*
- Inversion système (Cholesky modifié) (s)	2.17	4.6e ⁻³	4.6e ^{-3*}
Post-traitement			
- Affichage d'une composante	n.c.	/	/

TABLE 5.2: Nombres de degrés de libertés (ddl) et temps de calcul pour l'exemple de la section 3.1. Les calculs sont effectués sur un seul CPU. (* estimations, [#] hormis temps de main d'oeuvre).

temps de maillage (même net de main d'oeuvre), la GFEM est pertinente, car le gain sur l'étape de maillage compense largement le déficit en intégration.

On remarque que les gains offerts par la GFEM vis-à-vis de la description de la structure (absence de maillage global conforme) se paie en partie au niveau de l'intégration, constat déjà dressé dans le chapitre 2. Cependant, dès l'utilisation d'un même motif à plusieurs endroits du problème global, des simplifications peuvent être faites afin de réduire considérablement le nombre d'évaluations nécessaires pour l'assemblage de la matrice de rigidité. Reprenons les termes à calculer lors de l'ajout d'un motif (cf. chapitre 4, section 2.3) :

$$\begin{aligned} \Delta K_{ij}^{EF} &= \sum_{k=1}^{n_{enr}} \int_{\omega_k} \Delta \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla \tilde{\phi}_j(x) \partial \Omega \text{ avec } i, j \in [0, n_{EF}] \\ K_{ii}^{enr} &= \int_{\omega_i} \mathbf{H}(x) \nabla(\tilde{\psi}_i(x)) \nabla(\tilde{\psi}_i(x)) \partial \Omega \text{ avec } i \in [0, n_{enr}] \\ K_{ij}^{EF/enr} &= \int_{\omega_j} \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla(\tilde{\psi}_j(x)) \partial \Omega \text{ avec } \begin{cases} i \in [0, n_{EF}] \\ j \in [0, n_{enr}] \end{cases} \end{aligned}$$

Premièrement, on remarque que les termes K_{ii}^{enr} sont invariants quelle que soit la position du motif dans le repère global. Ces termes peuvent donc être calculés une fois pour toutes. Restent les termes ΔK_{ij}^{EF} et $K_{ij}^{EF/enr}$ qui, eux, varient en fonction de la position du motif à cause du terme $\nabla \tilde{\phi}_i(x)$ mettant en jeu les fonctions de forme des éléments globaux. Une approximation peut, à ce niveau, être faite qui consiste à considérer $\nabla \tilde{\phi}_i(x)$ constant sur le domaine ω du motif. Pour des éléments globaux linéaires, cette hypothèse

est exacte, le gradient étant constant. Pour le cas général, c'est une approximation consistante avec l'hypothèse de séparation d'échelle introduite au chapitre 4. En appliquant ces hypothèses et en pré-calculant ces termes par motif, on diminue très largement le nombre d'évaluations requis pour la GFEM ainsi que les temps de calcul. Une estimation de ces gains est présentée en dernière colonne du **tableau 5.2**. On note que la GFEM est alors très compétitive vis-à-vis de la méthode des éléments fins.

Le post-traitement demeure un point à part, car il existe des logiciels dédiés pour la MEF, comme Paraview, alors que dans le cas de notre méthode, le tracé des champs se fait en point par point, ce qui est assez long. Des pistes sont néanmoins en cours pour pouvoir utiliser des logiciels dédiés et interfacés avec le code GFEM afin de palier cette lacune.

4 Extension au tronçon 3D du fil

Nous allons à présent considérer l'application de la démarche de modélisation et de simulation au cas d'un tronçon 3D de fil. La modélisation d'une section 2D n'est pas suffisante pour estimer, à terme, la durée de vie du fil. En effet, l'estimation de la durée de vie passe nécessairement par la prédiction du réseau de fissuration et en particulier des fissurations qui apparaissent orthogonalement à l'axe du fil (car elles sont des accès privilégiés pour l'oxygène au coeur du fil, cf. chapitre 1). Nous commençons donc par étendre la démarche à un tronçon 3D en élasticité.

Cette étude est une première étape dans cette extension et permet de soulever plusieurs points durs dans cette modélisation. D'une part, la microstructure, complexe, rend difficile la génération du tronçon et la sélection des motifs qui constitue le Handbook. D'autre part, la modélisation des fibres doit se faire différemment, car contrairement aux motifs rencontrés jusqu'alors, elles ne sont pas localisées et traversent le fil de part en part. Nous allons donc présenter des éléments de réponse pour une première modélisation du tronçon de fil 3D.

4.1 Microstructure du tronçon 3D d'un fil de CMC et génération

4.1.1 Considérations microstructurales

La **figure 5.23** montre une coupe longitudinale d'un minicomposite (c'est-à-dire d'un fil unique) ayant une composition légèrement différente (moins densifiée et moins compacte) des CMCs utilisés dans le programme ARCOCE. On notera que, compte tenu du procédé de fabrication des minicomposites, les fibres sont en général assez bien alignées, ce qui est moins le cas sur les composites tissés « de série ».

Cette coupe permet néanmoins de montrer la structure, plutôt complexe le long de l'axe du fil, et en particulier la forme et l'organisation des nodules de matrice voie liquide. Ces derniers forment des chaînes de blocs, d'une longueur et forme comparable (généralement de l'ordre de 20-66 μm dans le sens des fibres et de 6-30 μm perpendiculairement), dans les portions où les fibres sont alignées. Ces nodules se prêtent donc bien à une représentation par motif. Il y a cependant des zones plus chahutées (par exemple

au centre de l'image). Il n'est d'un autre côté pas possible, à partir de ce minicomposite, de conclure quant à la forme des pores dans l'axe du fil. Cette information est disponible sur la microtomographie d'une cellule du tissage comme celle en **figure 5.24**. De même, le matériau de la tomographie n'est pas exactement celui du programme ARCOCE, la matrice voie liquide étant absente. On notera seulement que les pores, en noir, situés dans le fil sont plutôt de petite taille (de l'ordre de 0.5 à 1.5 diamètre de fibre) dans la direction du fil et répartis assez aléatoirement.

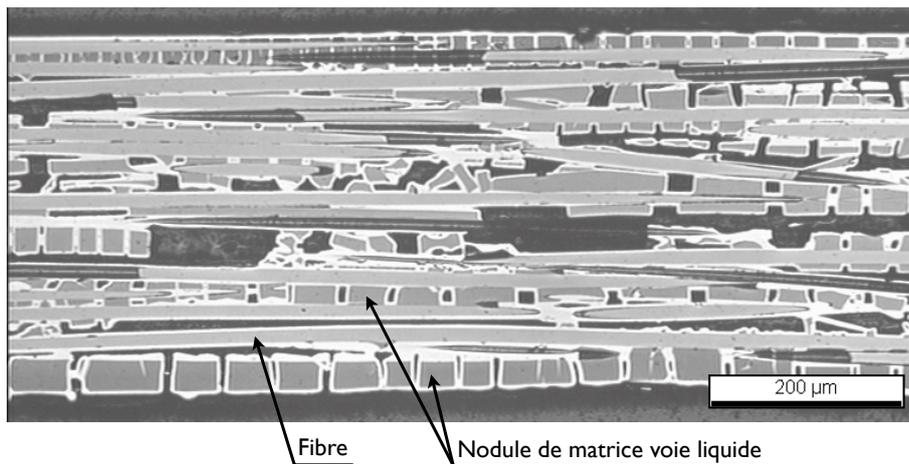


FIGURE 5.23: Coupe longitudinale d'un minicomposite (fil unique) de CMCs avec matrice hybride voie gazeuse et voie liquide [Etchart-Salas, 2011].

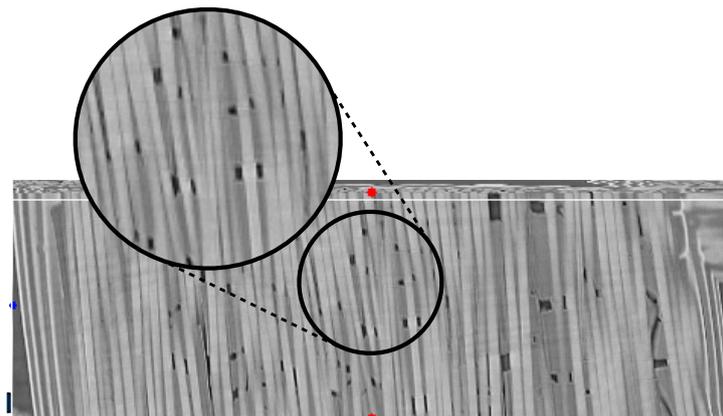


FIGURE 5.24: Coupe issue d'une tomographie d'un fil d'un CMC à matrice multiséquencée, sans nodule de matrice voie liquide [Ros, 2011].

4.1.2 Conséquences sur la génération de la microstructure et de la sélection des motifs

La courte étude précédente permet de mettre en avant les points suivants :

- les fibres ne sont pas nécessairement bien alignées ;
- les nodules de matrice de voie liquide forment des chaînes de blocs de taille comparable, dans les portions où les fibres sont parallèles ;
- les pores semblent être de taille limitée dans la direction des fibres, et de répartition aléatoire.

Les deux dernières constatations sont les bienvenues car elles signifient que les nodules et les pores peuvent être générés relativement simplement dans les zones où les fibres sont assez alignées. En effet, il pourra s'agir d'une simple extrusion des contours que l'on peut déjà générer et d'une hauteur paramétrée, comme le montre le schéma en **figure 5.25** pour les nodules de voies liquides. Par ailleurs, compte tenu de ces dimensions limitées, chaque pore et nodule peut faire l'objet d'un motif dédié dans le Handbook. Hors de ces zones, il est difficile de conclure à ce stade.

Le mésalignement des fibres est plus problématique. D'une part, ce mésalignement, bien que relativement facile à générer si les fibres restent droites, influe sur la forme des nodules et des pores. Ce qui fait que l'extension de la procédure de génération au 3D reste complexe. D'autre part, le choix des motifs pour les fibres interagissant devient difficile. En effet, les fibres en contact changent constamment dans les sections, comme le montre la **figure 5.26**. Par ailleurs, nous avons vu que dans le cas d'une section 2D simple (section 3.1.3) le gain en précision dû à l'emploi d'un Handbook contenant des groupes de fibres est plutôt limité (passage de 9% à 6% d'erreur). Ainsi, nous considérerons par la suite un Handbook simplement constitué de fibre seule.

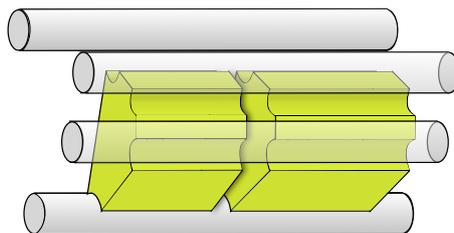


FIGURE 5.25: Blocs de matrice voie liquide.

Des études complémentaires de micrographie / microtomographie sont sans doute nécessaires pour acquérir des informations plus précises sur la forme des entités (nodules, pores), de même qu'une réflexion profonde sur le choix des motifs dans le cas où les fibres ne sont pas alignées. Enfin, l'outil de génération de la microstructure n'est pas, à l'heure de la rédaction de ce manuscrit, capable de générer la microstructure 3D du tronçon aussi complexe que celle des CMCs hybrides.

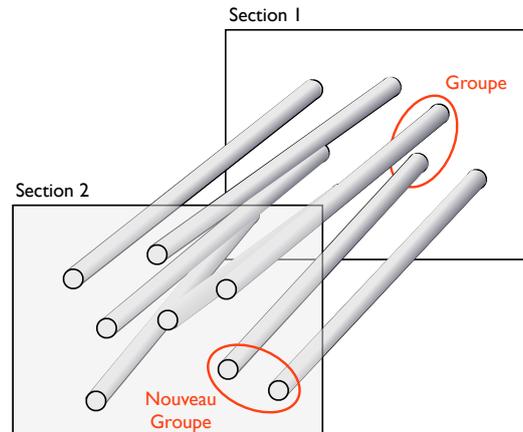


FIGURE 5.26: Changement des motifs de fibres le long du fil (cercle rouge), lorsque les fibres ne sont pas parallèles.

4.2 La GFEM multiéchelle en 3D

4.2.1 Extension naturelle de la GFEM multiéchelle

L'extension de la GFEM multiéchelle au 3D ne pose pas de difficulté majeure, pour peu que l'on reste dans le paradigme de motif « local », c'est-à-dire de petites dimensions dans l'espace. Dans le cas des sections 2D du fil, toutes les entités du fil étaient dans ce cadre (fibres, nodules...). Le passage au 3D pour ces motifs locaux, comme des inclusions et même les nodules de matrice voie liquide, est donc naturelle. On notera simplement que la base de chargement utilisée pour le calcul de l'enrichissement est plus large. On passe ainsi de 3 cas en 2D à 6 cas en 3D :

$$\hat{\varepsilon} = \left\{ \begin{array}{l} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \right\}$$

L'ajout d'un motif local ajoute donc maintenant 6 degrés de liberté au système global. Un exemple de démonstration est présenté en **figure 5.27** dans lequel une quarantaine d'inclusions noyées dans une matrice homogène sont soumises à un effort macroscopique de traction, d'amplitude $0.1MPa$. Le Handbook utilisé dans cet exemple est constitué d'un unique motif d'une inclusion. Les propriétés élastiques sont un module d'Young de $130GPa$ pour la matrice, de $200GPa$ pour les inclusions et un coefficient de Poisson identique pour chaque phase de 0.3.

4.2.2 Modélisation des fibres

Les fibres présentent quant à elles une difficulté supplémentaire lorsqu'il s'agit de modéliser le tronçon 3D. Elles traversent tout le tronçon et donc plusieurs éléments globaux, comme le montre le schéma **figure 5.28**. Les fibres ne sont donc pas « locales » dans

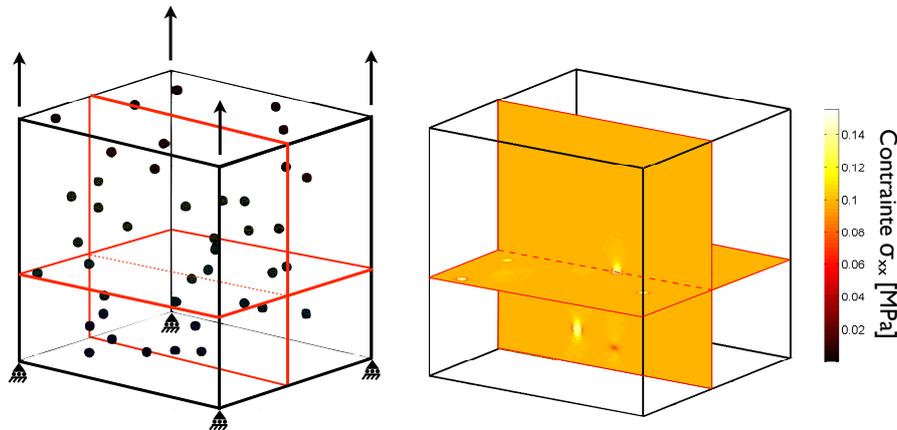


FIGURE 5.27: Exemple de calcul d'inclusions sphériques (40) dans un volume de matrice continue, sous traction pure.

la direction du fil. L'utilisation de motif telle qu'on l'a jusqu'à présent définie repose sur la localisation de la perturbation dans l'espace. Elle ne s'applique donc plus dans ce cas.

Jusqu'à présent, on a considéré l'hypothèse selon laquelle le motif est dans un milieu infini (cf. problème de l'inclusion, Chapitre 4). Cette hypothèse est étendue au problème des fibres 3D en considérant celles-ci infinies dans la troisième direction. Ainsi, l'enrichissement lié aux fibres est essentiellement plan et le problème associé est un problème plan en déformation plane, analogue au problème de l'inclusion utilisé en 2D. Dans ce cas, on se retrouve avec un motif dégénéré, « long » dans une direction. Il correspond en quelque sorte à l'extrusion du motif 2D.

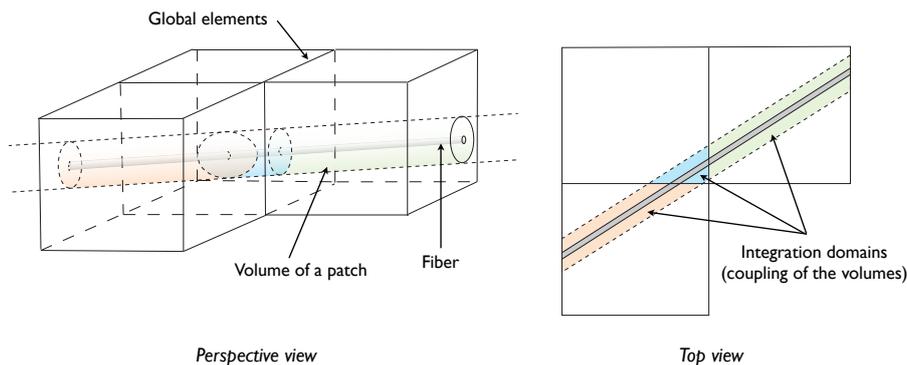


FIGURE 5.28: Couplage en volume entre un motif « long » et les différents éléments traversés.

Ces motifs longs posent des problèmes quant à leur introduction dans la GFEM et le code. Théoriquement, il est possible d'introduire ces enrichissements plans dans la base d'interpolation des éléments globaux. Se pose cependant le problème de l'intégration des

termes de la matrice de rigidité. En effet, le motif est alors couplé aux éléments qu'il traverse, **figure 5.28**. De même, les matrices EF de ces derniers doivent être corrigée pour prendre en compte les phases matériaux décrites par le motif. L'approche exacte consisterait à intégrer ces termes sur les zones communes entre élément global et élément appartenant au maillage du motif. Ces intégrations ne sont pas évidentes à calculer, compte tenu de la quadrature de Gauss utilisée jusqu'à présent.

On utilise donc, afin de simplifier ces évaluations, le fait que les éléments macroscopiques utilisés sont linéaires. Ainsi, il suffit d'estimer la longueur de fibre traversant chaque élément macro pour répartir les énergies de couplages et de correction, identiques à celles calculées précédemment, entre les éléments traversés. Plus précisément, pour un motif long ω , on évalue :

$$\begin{aligned}\Delta K_{ij}^{EF} &= \alpha_k \int_{\omega} \Delta \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla \tilde{\phi}_j(x) \partial \Omega \text{ avec } i, j \in [0, n_{EF}] \\ K_{ii}^{enr} &= \int_{\omega} \mathbf{H}(x) \nabla(\tilde{\psi}_i(x)) \nabla(\tilde{\psi}_i(x)) \partial \Omega \text{ avec } i \in [0, n_{enr}] \\ K_{ij}^{EF/enr} &= \alpha_k \int_{\omega} \mathbf{H}(x) \nabla \tilde{\phi}_i(x) \nabla(\tilde{\psi}_j(x)) \partial \Omega \text{ avec } \begin{cases} i \in [0, n_{EF}] \\ j \in [0, n_{enr}] \end{cases}\end{aligned}$$

où α_k est le rapport de la longueur de fibre dans l'élément macroscopique k courant sur la longueur totale de la fibre. On notera que, naturellement, les termes uniquement liés à l'enrichissement K_{ii}^{enr} ne sont pas concernés.

4.3 Modélisation du tronçon 3D du fil

Nous allons à présent effectuer une première modélisation du fil en 3D. Compte tenu de la microstructure complexe, nous nous focaliserons sur un composite à matrice simple, sans séquençage, matrice voie liquide ou porosité. Ce fil est considéré droit, et infini. Pour les besoins du calcul, on considérera un tronçon de longueur finie, soumis à un chargement en déplacements imposés. Naturellement, l'ondulation du fil ainsi que des conditions limites plus représentatives de ce que subit le fil au sein du tissage seront à étudier dans le futur. Par ailleurs, on considérera le mésalignement des fibres le long du fil ; elles restent cependant droites. Le mésalignement moyen est choisi arbitrairement de l'ordre de 5% (c'est-à-dire que l'inclinaison moyen de fibre par rapport à l'axe du fil est d'environ 3°). La géométrie et les conditions limites de la modélisation sont présentées en **figure 5.29**.

La simulation de ce tronçon met en jeu seulement 1113 degrés de liberté. Le champ de contraintes résultant est tracé en **figure 5.30** et **figure 5.31** pour les composantes σ_{zz} et σ_{xx} suivant différents plans de coupe.

5 Bilan

La démarche mise en place dans ce manuscrit, ainsi que les différents outils de génération et de simulation, ont été utilisés afin de simuler, en élasticité, différentes microstruc-

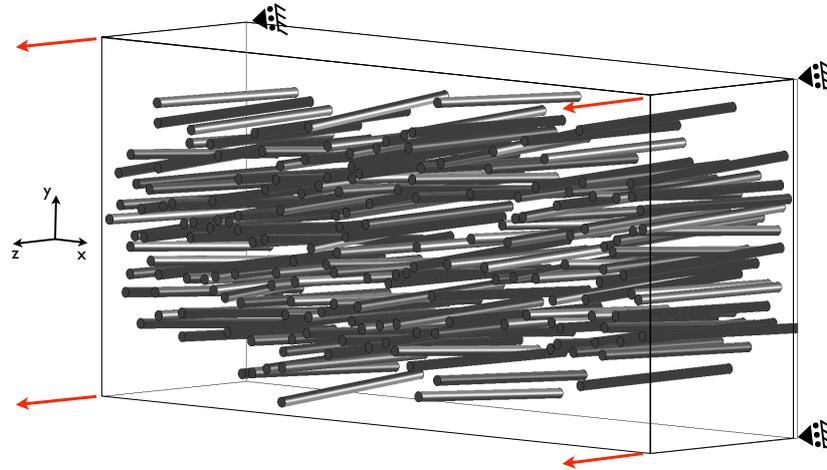


FIGURE 5.29: Géométrie du tronçon et conditions limites utilisées.

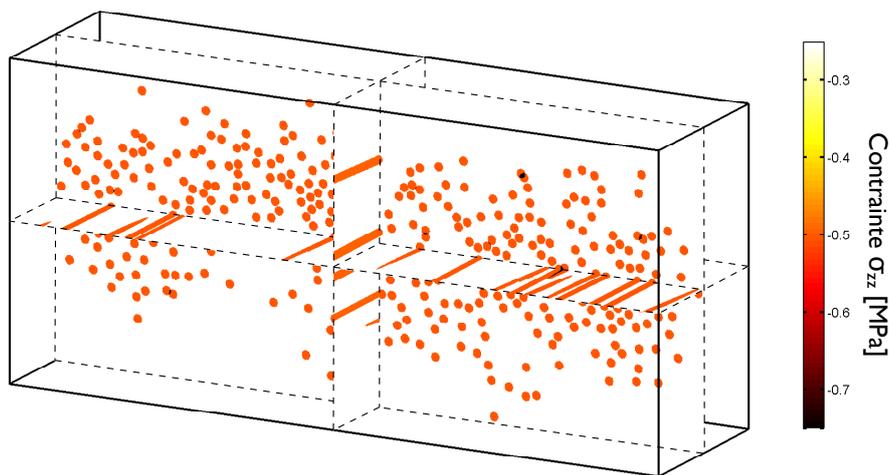


FIGURE 5.30: Reconstruction du champ de contrainte σ_{zz} .

tures de CMCs en 2D et 3D. Les avantages de la représentation par motifs des structures et des cinématiques locales ont ainsi pu être illustrés dans le cadre de la modélisation des composites à matrice céramique pour lesquels la complexité de la microstructure rend difficile l'utilisation de la méthode de type éléments finis classique. Ainsi, le coût de l'intégration de la matrice de rigidité relativement important dans le cas de GFEM multiéchelle, à l'heure actuelle, est largement compensé par le gain dû à l'absence de maillage global et conforme à la géométrie usuellement requise.

S'il est d'ores et déjà possible de générer et modéliser la microstructure quasi-complète des CMCs hybrides en 2D, des études complémentaires sont nécessaires dans le cas de tronçons 3D. D'une part, une étude systématique de la microstructure, par exemple par tomographie, permettrait de mieux caractériser les différentes phases du matériau, et en

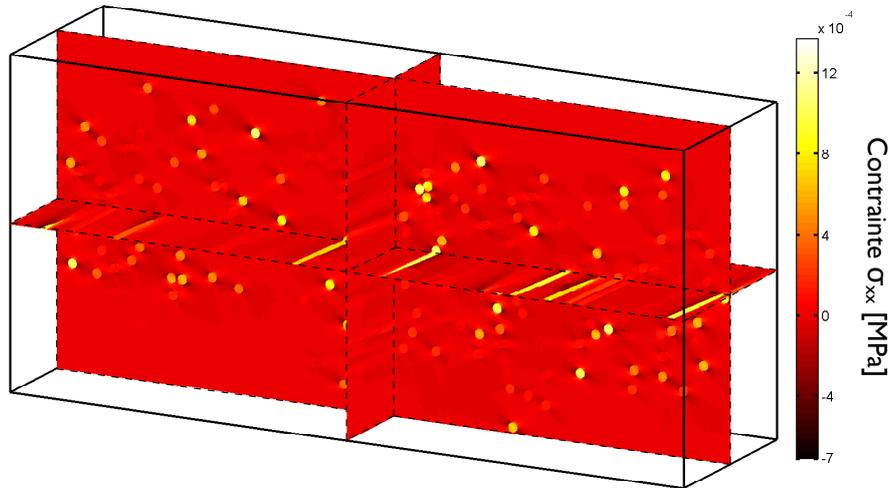


FIGURE 5.31: Reconstruction du champ de contrainte σ_{xx} .

particulier leurs formes dans la direction du fil. Par ailleurs, les outils de génération ont besoin d'être complétés, en particulier pour pouvoir prendre en compte le non alignement des fibres dans la génération des pores et des nodules de matrice voie liquide. D'autre part, l'intégration des motifs « longs » que sont les fibres requiert quelques développements supplémentaires pour que celle-ci reste valable pour des éléments d'ordre plus élevé. En effet, lorsque l'on considère le fil dans le tissage, d'une part le chargement n'est plus simplement de la traction (effort de contact aux endroits de chevauchement des fils) et, d'autre part, le fil n'est plus droit. Des éléments d'ordre supérieur permettraient alors de mieux représenter la cinématique globale du fil.

Chapitre 6

Extension à la prédiction de la fissuration

*C*E dernier chapitre présente une première analyse sur la représentation et la simulation de la fissuration au sein de la GFEM multiéchelle, basée sur l'étude de micrographies d'un fil de CMCs fissurés. Les besoins et conditions de la prise en compte de la fissuration au sein de la représentation par motifs sont abordés. De même un premier algorithme, basé sur la « Finite Fracture Mechanics » et des choix de motifs fissurés, sont présentés.

Sommaire

1	La fissuration des CMCs	138
2	Prédiction et représentation de la fissuration	139
2.1	La « Finite Fracture Mechanics » et modèle hybride	139
2.2	Définition d'une surface potentielle de rupture par les motifs	140
3	Travail préliminaire : fissuration des motifs pré-existants	142
3.1	Définition des motifs fissurés et calcul de l'enrichissement associé	142
3.2	Validation sur un cas simple de décohésion	143
3.3	Critère de fissuration	144
3.4	Exemple simple de démonstration	145
4	Bilan	146

1 La fissuration des CMCs

Comme nous l'avons vu, un défi majeur des modèles numériques est de pouvoir permettre l'optimisation de la microstructure même des matériaux. Dans le cas des CMCs, la quantité d'intérêt est principalement la durée de vie sous sollicitations thermomécaniques et chimiques. Pour ce faire, une nouvelle méthode multiéchelle a été développée conjointement à des outils de génération de microstructure. Comme il a été montré dans le chapitre précédant, ces outils permettent d'ores et déjà la simulation de microstructures complexes et réalistes de CMCs en élasticité. L'étude bibliographique sur les CMCs, chapitre 2, a montré que dans le cas de la durée de vie, le phénomène majeur est la fissuration du fil. En effet, les fissures qui s'y développent pilotent directement l'accès de l'oxygène au coeur du matériau, induisant sa dégradation. On distingue deux fissurations distinctes dans le fil, suivant le plan dans lequel elle se développe. Dans le cas de la prédiction de la durée de vie, la fissuration longitudinale (qui a lieu orthogonalement à la direction du fil) est plus critique, car elle offre un accès privilégié pour l'oxygène en exposant une majorité de fibres du fil. La **figure 6.1** présente une micrographie de ces deux types de fissuration, pour un matériau composite à matrice céramique et fibre en carbone. La **figure 6.2** présente quant à elle la fissuration longitudinale dans le cas des CMCs hybrides semblables au matériau du programme ARCOCE. On notera que les fissures sont déviées au niveau de fibres, mais ont tendance à traverser les nodules de matrice voie liquide, en dépit de la couche de PyC (déviateur de fissure, cf. chapitre 1) qui les entoure.

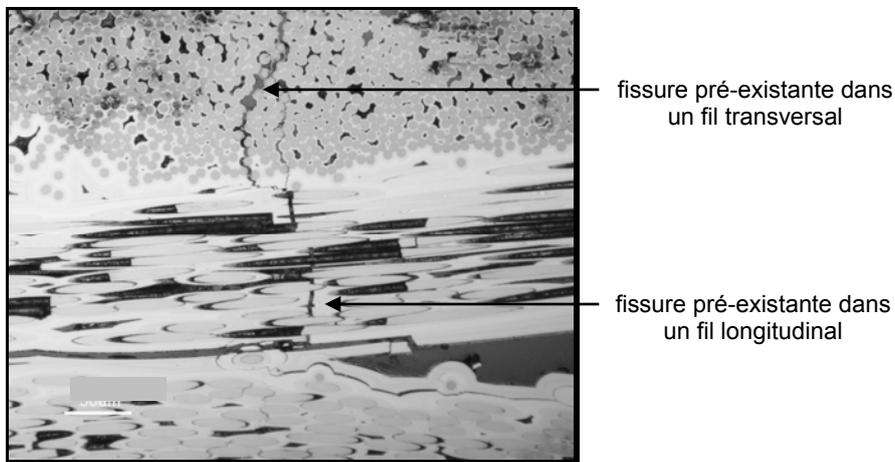


FIGURE 6.1: Les deux types de fissuration (suivant le plan dans lequel elle se développe) pour un composite à matrice céramique et fibre de carbone [Quemard, 2005].

On se limitera cependant dans cette étude à l'étude et la simulation de la fissuration transverse (qui a lieu dans un plan parallèle à la direction du fil), qui peut ainsi être traitée dans une simulation de section 2D du fil. On fera abstraction aussi dans un premier temps du séquençage de la matrice, considérant un ensemble de fibres dans une matrice homogène, avec une interphase de PyC entre elles. On supposera enfin, comme

précédemment que chaque phase du matériau est élastique fragile. Le problème est supposé quasi-statique.

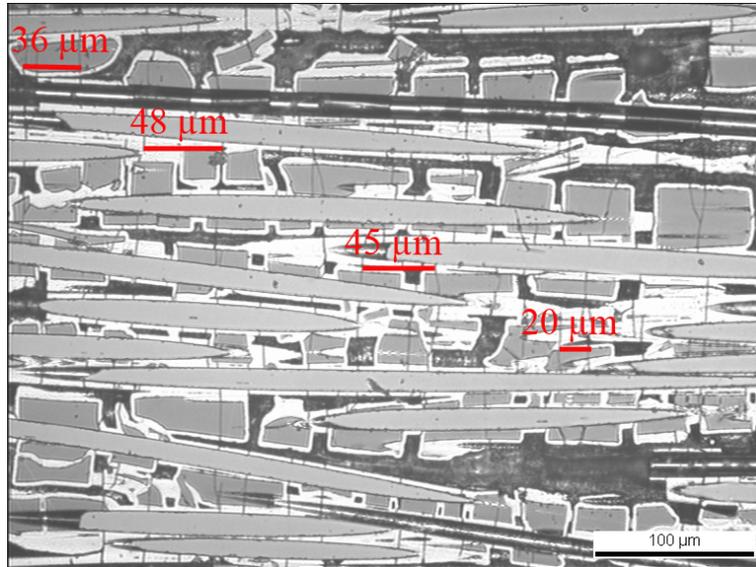


FIGURE 6.2: Fissuration longitudinale sur minicomposites hybrides (matrice voie liquide et gazeuse) [Etchart-Salas, 2011].

2 Prédiction et représentation de la fissuration

2.1 La « Finite Fracture Mechanics » et modèle hybride

Il faut à présent définir une façon de prendre en compte et de représenter la fissuration du matériau. Dans les méthodes présentées dans le chapitre 2, la XFEM est couramment utilisée pour ce type de problématique. Il n'est cependant pas aisé de coupler ce type de méthode avec la représentation par motifs sur laquelle se base la GFEM multiéchelle. Par ailleurs, compte tenu du nombre de fissures et d'interfaces, cela ne semble pas numériquement envisageable.

On remarque cependant que les faciès de rupture sont identifiés. Par exemple, la fissuration transverse met en jeu des trajectoires connues : la fissuration a tendance à se diriger d'une fibre à l'autre en déchaussant celle-ci de la matrice puis a se re-orienter vers la fibre suivante, comme le schématise la **figure 6.3** et observé en **figure 6.1**. Compte tenu de cette connaissance initiale, un modèle basé sur des surfaces potentielle de rupture, dont la forme et la taille peut être déduite des faciès de rupture, semble pertinent. On notera que cette démarche reste valable pour une large gamme de matériaux composites, les phénomènes de rupture (décohésion fibre-matrice, rupture de la matrice inter-fibres) étant très semblables. Ce type de modèle a en outre déjà été développé dans le cadre des CMO [Ladevèze *et al.*, 2006]. La rupture des surfaces potentielles se fait dans le cadre de

la « Finite Fracture Mechanics » [Hashin, 1996]. Un exemple d'une telle application peut être trouvé dans [Violeau, 2007], et présenté en **figure 6.4**. On notera que cette méthode ne pouvait être appliquée directement à notre modélisation du fil, compte tenu de la complexité de la microstructure.

La mise en place d'une méthode dérivée du modèle hybride dans la GFEM multiéchelle requière donc deux ingrédients :

1. La définition des surfaces de rupture et leur description ;
2. La mise en place d'un critère de rupture des surfaces potentielles.

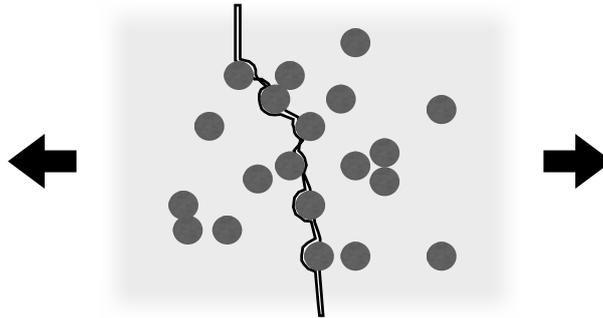


FIGURE 6.3: Schématisation de la fissuration transverse. Comme observé sur les micrographies, la fissure se ré-oriente de proche en proche entre les fibres.

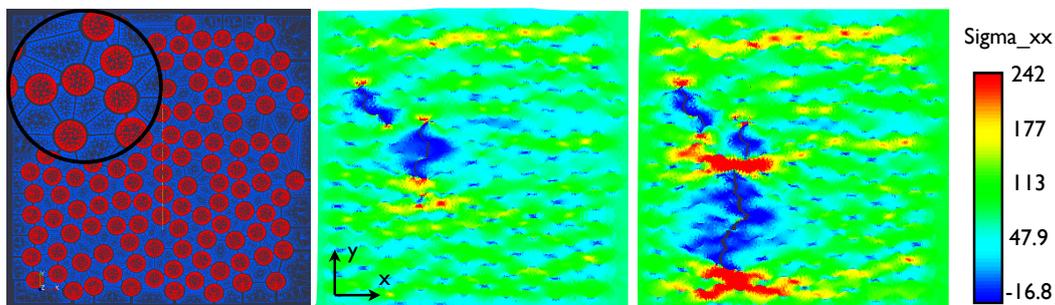


FIGURE 6.4: Exemple d'application des interfaces potentielles de rupture à la fissuration transverse d'un composite organique (CMO) [Violeau, 2007].

2.2 Définition d'une surface potentielle de rupture par les motifs

Classiquement, les surfaces potentielles de rupture sont intégrées directement dans le maillage, par exemple sous forme d'entités surfaciques. La surface est alors soit saine et donc traitée comme interface parfaite, soit rompue et traitée comme surface libre (avec ou sans frottement entre surfaces). Cette façon de procéder est difficilement intégrable

dans une représentation par motif, car plusieurs maillages existent, indépendamment les uns des autres. Une solution consiste à définir des motifs fissurés, qui vont prendre en charge la description de la fissure localement, et dont les enrichissements qui y sont liés seront calculés sous forme de résidu. On définit des familles de motifs, dont certains sont sains et d'autres rompus, comme schématisé **figure 6.5**. Bien entendu, plusieurs solutions sont imaginables vis-à-vis du choix des motifs. Un critère *ad hoc* peut être construit pour passer dynamiquement d'un motif à l'autre, en testant l'ensemble des motifs fissurés possibles pour le motif d'origine. Nous reviendrons par la suite sur un critère énergétique.

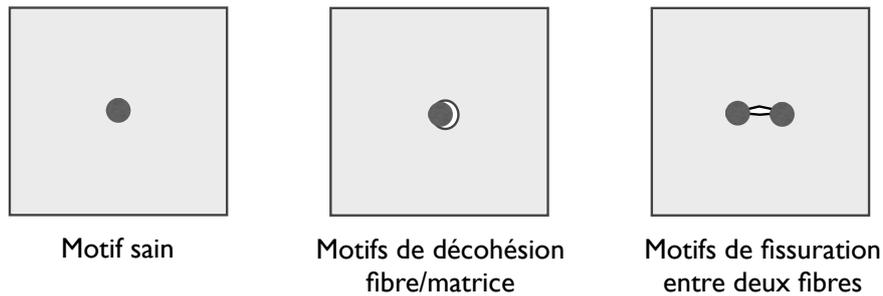


FIGURE 6.5: Schématisation d'une famille de motif, c'est-à-dire d'un scénario de fissuration, à partir du motif sain jusqu'à un état fissuré.

On peut distinguer deux cas de figure dans la représentation de la fissuration. Le premier cas correspond à l'apparition (ou la propagation) d'une fissure au sein d'un motif existant. La modélisation peut alors être envisagée de deux façons différentes : soit en remplaçant le motif sain par un motif fissuré, soit en superposant au motif sain un nouveau motif qui va prendre en charge la fissuration. C'est en outre le cas de la décohésion entre fibres et matrice, qui peut être abordée des deux façons. Le second cas de figure correspond à une fissure se développant entre deux motifs existants (par exemple entre deux fibres), et qui nécessite alors l'ajout *ex nihilo* d'un motif approprié en cours de calcul, **figure 6.6**. Dans ce dernier cas, une difficulté importante est que ces motifs, et leur géométrie, ne sont pas complètement connus *a priori*. Dans le cas de la fissuration transverse (*i.e.* parallèle à la direction du fil), la longueur de la fissure dépend de l'espacement entre deux fibres.

Remarque 6.1:

La mise en place de la fissuration peut mener à des problématiques en termes d'interactions entre motifs, en fonction du choix des motifs et du problème de résidu utilisé. En effet, l'hypothèse de non interaction entre les motifs n'est plus respectée car la présence de cette surface libre, possiblement d'une taille de plusieurs diamètres de fibre, mène à une zone déchargée de taille importante. Ainsi, il faut que cette décharge soit répercutée sur les motifs voisins. De même, l'interaction entre deux fissures doit être prise en compte.

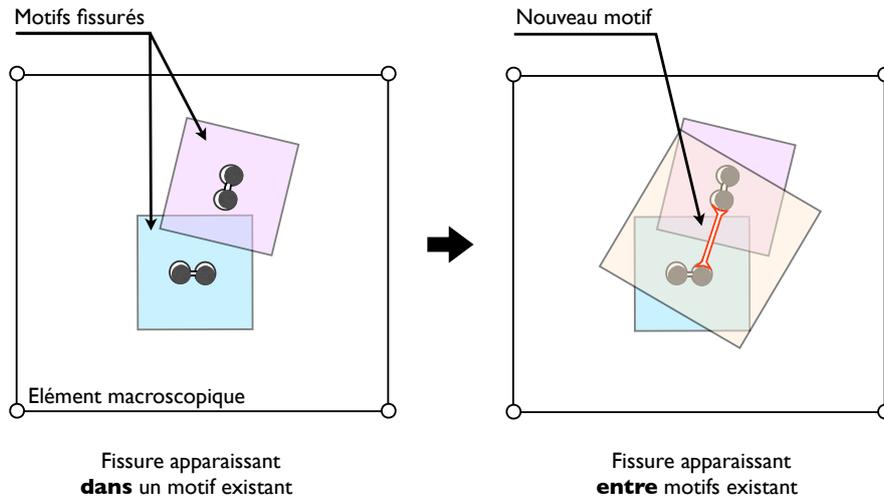


FIGURE 6.6: Schématisation des cas où la fissure s'initie dans des motifs existant initialement (à gauche) et où une fissure apparaît *ex nihilo* entre deux motifs (à droite).

3 Travail préliminaire : fissuration des motifs pré-existants

Dans un premier temps, un cas simple de décohésion fibre-matrice et de fissuration inter-fibres est étudié. Il s'agit d'une démonstration de principe, et des travaux sont encore nécessaires à la fois sur la modélisation de la fissuration (choix des motifs et interactions) et sur le critère de fissuration. Dans ce travail préliminaire, deux éléments sont à définir :

- les motifs associés au cas « endommagé » et la façon de calculer l'enrichissement cinématique associé ;
- le critère de sélection et de passage du motif sain au « meilleur » motif endommagé.

3.1 Définition des motifs fissurés et calcul de l'enrichissement associé

La définition de la géométrie du motif est, comme pour le choix initial des motifs en élasticité, un choix de modélisateur. Il s'appuie sur une étude des micrographies afin d'identifier les cas les plus récurrents. Cette étude n'est pour le moment pas exhaustive et les géométries qui seront choisies par la suite devront être affinées dans de futurs travaux.

Une fois la géométrie définie, l'enrichissement doit être calculé. Pour ce faire, le protocole est similaire au calcul des perturbations des motifs liés à la porosité en élasticité, dans le chapitre 4, section 3.2.2. On introduit un chargement sur les lèvres de la fissure, qui correspond à l'application d'une force surfacique, déduite de la précharge en contrainte s'appliquant sur le motif $\hat{\sigma}$. Soit \mathbf{n} la normale sortante sur les lèvres de la fissure, l'effort surfacique F_d appliqué vaut :

$$F_d = \hat{\sigma} \mathbf{n}$$

La **figure 6.7** présente deux exemples de motif endommagé (maillage et norme du champ de déplacement), l'un concernant la décohésion fibre matrice pour une fibre seule, l'autre pour une fissure existant entre deux fibres.

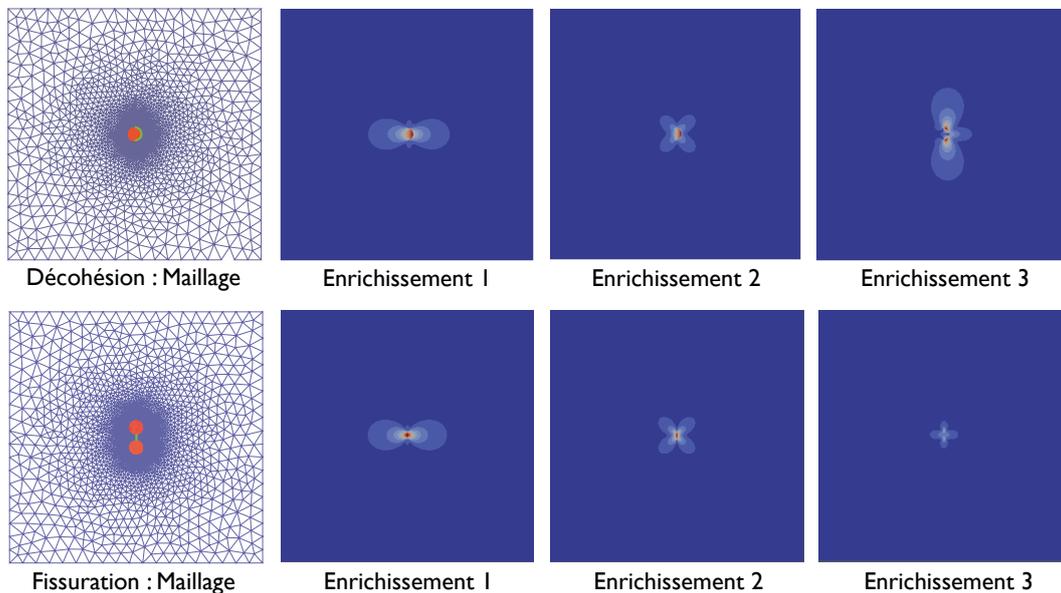


FIGURE 6.7: Exemples d'enrichissements liés à des motifs fissurés (ligne de rupture en vert) : a) décohésion fibre-matrice et b) fissuration de la matrice entre deux fibres.

3.2 Validation sur un cas simple de décohésion

Prenons un cas simple afin de valider et/ou mettre en évidence les limites actuelles de la modélisation. On considère le cas d'une inclusion dans une matrice homogène en traction. L'interphase est supposée rompue sur la demi-circonférence, voir **figure 6.8**. On compare deux solutions : l'une issue de la GFEM multiéchelle à l'aide d'un Handbook constitué du motif sain d'une inclusion et d'un motif de rupture d'interphase (cf. **figure 6.7**) et l'autre issue d'un calcul de référence éléments finis. Les champs de contrainte associés aux deux solutions sont tracés suivant la ligne sonde en **figure 6.9**.

On constate de prime abord que les deux solutions sont plutôt proches, et les gradients sont bien représentés par la solution GFEM. On remarque cependant qu'au droit de la décohésion (de la surface libre), la contrainte n'est pas nulle pour cette dernière. Ce phénomène s'explique par le fait que les deux enrichissements (les degrés de liberté liés aux motifs sain et fissuré) ne sont pas indépendants. En effet, la condition de surface libre (*i.e.* les contraintes normales nulles) qui les relie n'est pas prise en compte dans le calcul de la solution GFEM pour le moment. Cette condition pourra à l'avenir être prise en compte de façon simple par exemple à l'aide d'un multiplicateur de Lagrange entre ces degrés de liberté, les amplitudes étant connues lors du calcul du Handbook.

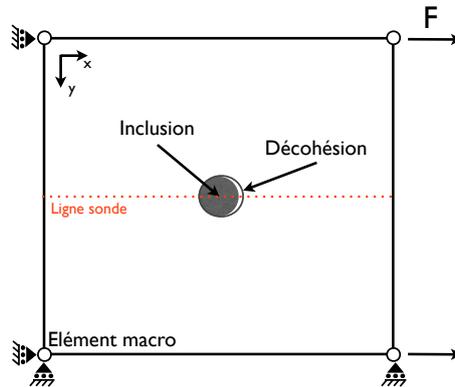


FIGURE 6.8: Géométrie du problème de décohésion d'une inclusion dans une matrice homogène soumis à de la traction.

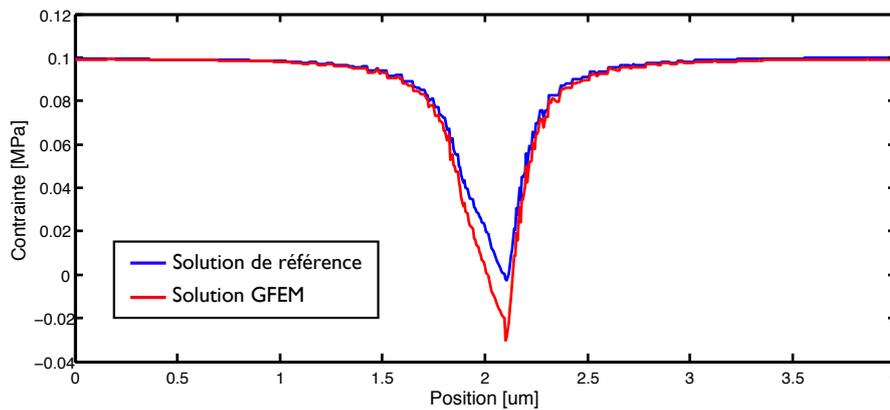


FIGURE 6.9: Comparaison de la contrainte σ_{xx} associée à la solution GFEM et à la solution de référence, suivant la ligne sonde.

3.3 Critère de fissuration

Supposons que chaque motif sain et fissuré soit connu. Un critère doit permettre d'une part de déterminer les motifs à rompre et choisir, parmi l'ensemble des motifs rompus possibles, le « meilleur » pour décrire cette rupture. Un critère classique se base sur un taux de restitution d'énergie, couramment utilisé pour la fissuration des matériaux quasi-fragile. Soit deux états t_0 et t_1 du système correspondant à deux pas de chargement consécutifs. La création d'une surface libre ΔS s'effectue lors du dépassement d'un taux de restitution d'énergie critique G_c , c'est-à-dire :

$$G(t_0, t_1) = \frac{\Delta E_p}{\Delta S} = -\frac{E_p(t_1) - E_p(t_0)}{\Delta S} \geq G_c \quad (6.1)$$

où E_p est l'énergie potentielle du système. On peut distinguer deux cas : l'initiation de la fissure ou la propagation d'une fissure existante. Ces deux phénomènes sont généralement associés à des taux critiques différents. On les supposera cependant identique dans la suite de ces travaux. Les motifs rompus étant définis, la surface créée ΔS est connue. Il suffit donc, pour chaque configuration possible et à chaque incrément de chargement, d'évaluer G et de le comparer au taux critique. Sous forme discrète, le calcul de $E_p(t)$ s'effectue en fonction des matrices de rigidité K_t (qui dépend de la configuration des motifs, et donc du chargement) et du second membre F :

$$E_p(t) = \frac{1}{2}u^T(t)K(t)u(t) - F^T(t)u(t) \quad (6.2)$$

Compte tenu du nombre de calculs devant être fait pour tester toutes les configurations possibles, et en outre la mise à jour de la matrice de rigidité K , cette procédure peut être coûteuse. Un critère de préselection, basé sur une contrainte maximum pourrait être mise en place afin de limiter le nombre de cas à traiter finement, comme dans les travaux de [Violeau, 2007]. Enfin, la prise en compte de la variabilité des propriétés matériaux, en particulier celles liées à la rupture, se retrouve dans une distribution des G_c (ou des contraintes à rupture dans le cas d'un critère en contrainte), similairement aux travaux de [Violeau, 2007].

3.4 Exemple simple de démonstration

Nous allons à présent mettre en place un essai simple de démonstration de prise en compte de la fissuration dans la GFEM multiéchelle. Pour ce test, un critère en énergie est utilisé. Evidemment, des travaux sont encore nécessaires pour définir un critère simplifié pour la fissuration, afin de ne pas devoir assembler les matrices de rigidité totales pour chaque configuration à tester. Les données matériaux utilisées sont rappelées en **tableau 6.1**.

Données	Valeurs	Source
Module élastique fibre (Hi-Nicalon)	280 GPa	[Bertrand <i>et al.</i> , 1999]
Module élastique matrice SiC	415 GPa	[Dalmaz, 1997]
Energie de décohésion fibre-matrice (PyC)	$< 5 J/m^2$	[Naslain, 1998]
Energie de fracture matrice	$20 J/m^2$	[Naslain, 1998]

TABLE 6.1: Propriétés matériau utilisées dans cet exemple de fissuration.

La configuration de test consiste en un domaine carré de matrice homogène et un ensemble de 4 fibres, et soumis à un effort de traction monotone croissant. Le problème est résolu en quasi-statique. On notera que la rupture totale de l'échantillon ne peut être représentée en l'état actuel du modèle. On se contentera donc ici de modéliser la décohésion entre fibres et matrices, puis la fissuration entre les fibres, au cours du chargement. La géométrie et le chargement sont rappelés **figure 6.10**.

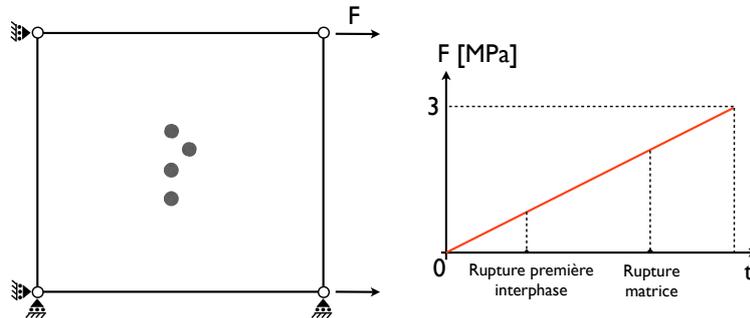


FIGURE 6.10: Géométrie et chargement de l'exemple de démonstration de la fissuration.

Les motifs de décohésion et de fissuration étant connus (on utilise ceux décrits en **figure 6.7**), la longueur de surface libre créée l'est aussi. Cela permet de déterminer les taux de restitution d'énergie critiques d'apparition des motifs de fissuration, à l'aide des taux donnés en **tableau 6.1**. On considère cependant une certaine variabilité de ces paramètres suivant les motifs, afin de modéliser la variabilité des propriétés au sein du matériau, en particulier dans le but d'éviter la rupture simultanée de plusieurs interphases au même pas de temps. On choisit ici de représenter cette dispersion par une loi normale tronquée, dont les paramètres sont donnés dans le **tableau 6.2**.

Propriété	Moyenne	Ecart-type	Intervalle
Energie de décohésion fibre-matrice	$5 (J/m^2)$	$1 (J/m^2)$	2 à $8 (J/m^2)$
Energie de fracture matrice	$20 (J/m^2)$	$4 (J/m^2)$	10 à $30 (J/m^2)$

TABLE 6.2: Propriétés des lois normales caractérisant la variabilité des propriétés de rupture des matériaux.

La **figure 6.11** présente le champ de contrainte en deux pas de temps du calcul global : à la rupture de la première interphase et enfin à la première rupture de la matrice. On s'aperçoit que dans un premier temps, la structure est saine. Puis, les interphases de PyC rompent, provoquant les décohésions entre les fibres et la matrice. Pour finir, la matrice rompt entre les fibres. Compte tenu des énergies de rupture des différents matériaux, ce scénario correspond à ce que l'on pouvait attendre.

4 Bilan

La fissuration est un phénomène clef dans la prédiction de la durée de vie du fil de CMC. Sa prise en compte dans la GFEM multiéchelle, suivant le cadre de la mécanique de la rupture finie, peut être réalisée par l'introduction des surfaces potentielles de rupture au sein de motifs dédiés. Le travail préliminaire présenté ici présente une première

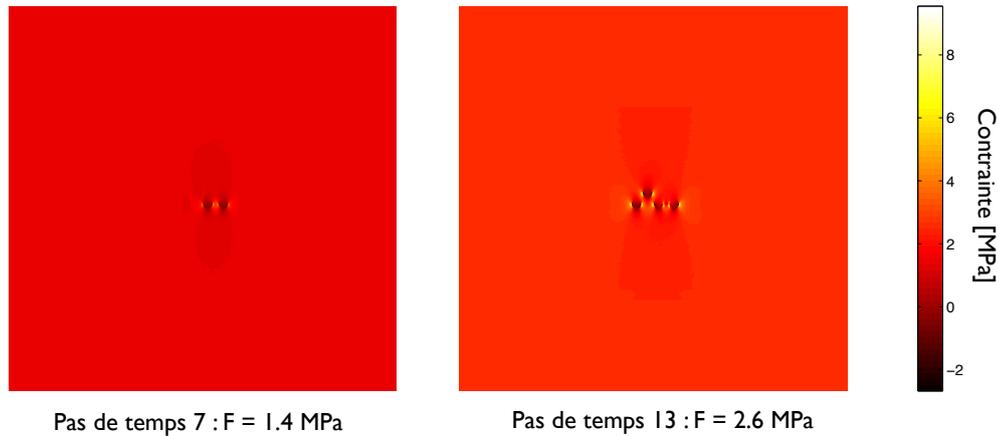


FIGURE 6.11: Champs de contrainte (σ_{xx}) en deux pas de chargement : lors de la première décohésion et lors de la première rupture de la matrice. On notera que les deux fibres dont les interphases ne sont pas rompues sont à peine discernable sur le pas de temps 7, à cause des gradients provoqués par les deux autres fibres.

approche utilisant les outils déjà disponibles. Bien que démontrant la faisabilité d'une telle approche, ce travail présente aussi les limitations de celle-ci dans le cadre des outils programmés pour le moment. D'une part, la non-interaction entre les motifs, fil conducteur de la méthode jusqu'à présent, montre ses limites. En effet, la rupture d'une surface provoque la décharge des motifs alentours, un phénomène qui n'est pour le moment pas pris en compte. Il faudrait alors gérer des intégrations entre maillages non compatibles, ce que l'on a souhaité éviter dès le début ou bien choisir des enrichissements judicieux (par exemple en orthogonalisant les fonctions d'enrichissement ajoutées). De plus, les enrichissements liés à un motif sain et à son homologue rompu, sont liés afin de vérifier la condition de bord libre. Une solution pourrait être de lier ces ddls grâce à des multiplicateurs de Lagrange.

D'autre part, l'utilisation d'un critère énergétique est coûteux car il faut, pour chaque configuration assembler et résoudre le problème global. Un critère plus local, en contrainte, serait une solution, qui permettrait de limiter le coût de test d'une configuration particulière.

Conclusion

L'utilisation croissante des matériaux sur mesure dans l'industrie aéronautique, et plus spécifiquement des composites, nécessite de nouveaux outils de simulation numérique capable d'orienter l'optimisation du matériau dans ses plus petites échelles et ce, afin de limiter des coûts de développement reposant presque uniquement sur une base expérimentale. Les présents travaux se focalisent sur l'un de ces matériaux, les composites à matrice céramique de type SiC-SiC, dans le cadre du programme de recherche et développement ARCOCE. Ces matériaux, utilisés dans la propulsion aéronautique et spatiale, concentrent un grand nombre de difficultés : microstructure (matrice multiséquencée et hybride), comportement à rupture complexe (déviations des fissures) et sensibilité à l'environnement (oxydation et cicatrisation). Le développement de modèles et méthodes numériques pour l'optimisation multiéchelle et multiphysique, en terme de durée de vie, de tels matériaux est un challenge scientifique et technique.

L'étude de la littérature concernant les CMCs a permis de montrer que la durée de vie des CMCs est principalement pilotée par le fil, car la plus grande partie des phénomènes mécaniques ou chimiques y interviennent. Ainsi, l'objectif de ces travaux est de proposer une méthodologie pour la modélisation du fil et de sa structure interne. Il s'agit en outre de mettre en place une démarche versatile, qui puisse suivre les évolutions du matériau et les anticiper, limitée dans cette étude au comportement mécanique.

De nombreux modèles et méthodes multiéchelles existent pour la simulation de structures complexes. Elles sont cependant limitées, soit par un cadre théorique qui s'applique difficilement à la modélisation du fil, comme les modèles dérivés de l'homogénéisation périodique, soit parce que le coût numérique et technique de la méthode la rend difficile à mettre en oeuvre. C'est le cas de la méthode des éléments finis, qui en plus fournir des systèmes linéaires très larges, requiert un maillage explicite de la microstructure, opération délicate et demandant un temps d'intervention humaine non négligeable. Les méthodes d'enrichissement cinématique, par exemple la XFEM ou la GFEM, s'affranchissent de cette discrétisation explicite des interfaces internes de la structure et dans une certaine mesure des difficultés de maillage. Compte tenu de la complexité de la microstructure du fil, du nombre d'interfaces et de leur forme, l'utilisation de la XFEM semble, à notre sens, compromise à cause de la finesse du maillage requis pour une description précise des interfaces par level-set. La GFEM, et en particulier la GFEM avec Handbook numérique, fournit au contraire une stratégie intéressante, en mettant en place une description à l'aide de motif de la structure. Son utilisation reste cependant limitée à notre connaissance, car elle pose des difficultés techniques importantes et peu courantes du

point de vue numérique et technique : intégration des matrices élémentaires, gestion du Handbook numérique et des enrichissements associés.

Une réponse à ces problématiques est le développement d'un « matériau virtuel », au sein duquel les entités composant la microstructure et les phénomènes mécaniques et physico-chimiques sont modélisés à leur échelle d'action. Le concept de matériau virtuel fait suite à des travaux précédents sur les composites à matrice organique ou céramique. Notre modèle se base sur une description par motif de la structure. Ces petits groupes d'entités topologiques ont pour but de décrire à la fois la microstructure locale (topologie locale des phases matérielles) et la cinématique locale liée aux champs de perturbation dus aux motifs. La démarche se décompose en deux étapes majeures :

- l'étude de micrographies et génération de la microstructure du fil ;
- la simulation numérique du fil sous chargement mécanique.

La première étape se base sur l'étude de micrographies (voire de tomographies) qui permet de caractériser la microstructure en termes de répartition spatiale des fibres, de la forme et du volume des autres entités topologiques comme les pores et les nodules de matrice voie liquide. Ces données morphologiques alimentent un outil de génération de la microstructure du fil. Bien qu'il ne s'agisse pas à proprement parler de simulation de procédé (traité par ailleurs dans ARCOCE), où les processus physiques du procédé sont explicitement simulés, il permet néanmoins de produire des microstructures réalistes dépendantes d'un certain nombre de paramètres de fabrication (séquençage de la matrice voie gazeuse, fraction volumique des phases ...). Par ailleurs, la représentation adoptée dans cet outil est semblable à celle des logiciels de CAO, pour lesquels les entités topologiques sont définies à l'aide de polylignes et polysurfaces. Cette représentation est importante. Elle permet d'une part l'extraction des motifs grâce à l'identification des contours et des objets. D'autre part, l'export des géométries vers des logiciels de maillage est aisé, car la représentation est comparable.

Dans un second temps, un modèle multiéchelle permet de simuler la structure. Ce modèle se base sur une description par motifs de la structure. Ces motifs permettent à la fois d'enrichir la cinématique locale et de décrire la structure locale. Cette méthode est inspirée de la méthode des éléments finis généralisés avec enrichissement numérique. Cependant, une séparation d'échelle est introduite entre le fil et les motifs, dont les perturbations induites sont supposées localisées. Compte tenu de cette localisation, une hypothèse de non-interaction entre motifs est ajoutée. Ainsi, l'intégration des termes de la matrice de rigidité liés à l'enrichissement est aisément évaluable au niveau de chaque motif, sans intégration entre champs définis sur des maillages différents comme c'est le cas pour la GFEM classique.

Cette démarche a été validée sur des cas simples en élasticité linéaire, qui ont permis de définir un premier critère simple de choix des motifs, par regroupement de paquets de fibres. Par ce biais, la méthode a été appliquée à plusieurs exemples de section de fil 2D, de complexité croissante, et représentant différentes générations de CMC. L'extension à la modélisation 3D du fil est enfin abordée. Les particularités de la microstructure 3D, de même que les points durs que soulève le passage au calcul 3D dans le choix des motifs

et la modélisation des fibres, sont identifiés. Des éléments de réponse sont introduits et un exemple de tronçon simple avec fibres non parallèles est traité. Ces exemples mettent en lumière les avantages de notre méthode pour la simulation de structures complexes avec un grand nombre d'entités topologiques. La maillage explicite n'est en effet plus nécessaire et le système linéaire global est de petite taille. On notera cependant que le coût numérique brut de la GFEM multiéchelle est plus élevé, en 2D, qu'une méthode de type éléments finis et ce, à cause de l'intégration de la matrice de rigidité, qui demeure importante. Cependant, ce coût est largement compensé par l'absence de maillage global à créer, du moins dans l'exemple traité.

Enfin, l'extension à la prédiction de la fissuration, basée sur la « Finite Fracture Mechanics » est discutée et le résultat d'un travail préliminaire présenté. Ce dernier montre qu'il est possible de mettre en place une telle modélisation de la fissuration dans la GFEM multiéchelle en intégrant les surfaces potentielles de rupture dans des motifs dédiés. Cependant, des travaux complémentaires sont nécessaires, d'une part dans la prise en compte des interactions entre motifs sains et leurs homologues fissurés pour respecter les conditions de surface libre et d'autre part, dans la définition d'un critère simplifié de fissuration afin de limiter le coût de test des configurations rompues.

Ces travaux constituent une première étape quant au développement du matériau virtuel pour l'optimisation du fil de CMC. Les outils de génération et de simulation ont été mis en place et testés en élasticité linéaire. Du point de vue du modèle, des études complémentaires sont nécessaires :

1. Il s'agira dans un premier temps de proposer une méthode efficace pour la prédiction de la fissuration, transverse et longitudinale, du toron, le phénomène clef de la durée de vie du fil.
2. Dans un second temps, une étude plus systématique du choix des motifs, couplée à une estimation quantitative des erreurs liées aux approximations faites dans la stratégie de résolution, devra être menée. Une telle étude permettrait de conforter, ou de préciser le domaine de validité, de certaines hypothèses comme la non-interaction entre motifs.
3. Enfin, une extension de l'outil d'analyse et de génération de la microstructure devrait être envisagée afin de permettre la génération plus robuste de tronçon 3D entier de fil, en attendant une simulation de procédé capable de générer celui-ci.

Du point de vue plus général de l'optimisation de CMC, les perspectives sont nombreuses. En particulier, on peut citer :

1. La définition d'un chargement mécanique représentatif de l'environnement du fil dans le tissu, et plus généralement, du chargement chimico-thermomécanique au sein du matériau.
2. Le couplage du modèle avec un modèle d'oxydation/cicatrisation, afin de prédire la durée de vie du fil en atmosphère oxydante. Cela comprend en particulier la définition de motifs de cicatrisation.

3. L'utilisation de la démarche dans un objectif d'optimisation du fil, en faisant varier les constituants (fibre, séquençage de la matrice) ou les distributions (espacement des fibres ...) au sein de la microstructure.

Bibliographie

- [Aoki *et al.*, 2001] AOKI, T., HATTA, H., HITOMI, T., FUKUDA, H. et SHIOTA, I. (2001). Sic/c multi-layered coating contributing to the antioxidation of c/c composites and the suppression of through-thickness cracks in the layer. *Carbon*, 39:1477–83.
- [Aragón *et al.*, 2010] ARAGÓN, A. M., DUARTE, C. A. et GEUBELLE, P. H. (2010). Generalized finite element enrichment functions for discontinuous gradient fields. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 82(2):242–268.
- [Ashby et Jones, 1993] ASHBY, M. et JONES, D. (1993). *Engineering materials*. Pergamon Pr.
- [Aubard *et al.*, 1998] AUBARD, X., CLUZEL, C., GUITARD, L. et LADEVEZE, P. (1998). Modelling of the mechanical behaviour of 4d carbon/carbon composite materials. *Composites science and technology*, 58(5):701–708.
- [Aubard *et al.*, 2000] AUBARD, X., CLUZEL, C., GUITARD, L. et LADEVEZE, P. (2000). Damage modelling of a 4d carbon/carbon composite for high temperature application. *Ceramics international*, 26(6):631–637.
- [Aveston *et al.*, 1971] AVESTON, J., COOPER, G. et KELLY, A. (1971). Single and multiple fracture. In *The Properties of Fiber Composites, Conference Proceedings, National Physical Laboratory, Guildford IPC Science and Tech. Press, Surrey, England*, pages 15–26.
- [Babuška et Andersson, 2005] BABUŠKA, I. et ANDERSSON, B. (2005). The splitting method as a tool for multiple damage analysis. *SIAM journal on scientific computing*, 26:1114.
- [Bass et Oden, 1987] BASS, J. et ODEN, J. (1987). Adaptive finite element methods for a class of evolution problems in viscoplasticity. *International Journal of Engineering Science*, 25(6):623–653.
- [Béchet *et al.*, 2005] BÉCHET, E., MINNEBO, H., MOËS, N. et BURGARDT, B. (2005). Improved implementation and robustness study of the x-fem for stress analysis around cracks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 64(8):1033–1056.
- [Belytschko et Black, 1999] BELYTSCHKO, T. et BLACK, T. (1999). Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(5):601–620.

- [Belytschko et Song, 2010] BELYTSCHKO, T. et SONG, J. (2010). Coarse-graining of multiscale crack propagation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 81(5):537–563.
- [Ben Dia, 1998] BEN DIA, H. (1998). Multiscale mechanical problems : the arlequin method. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Séries IIB, Mechanics Physics Astronomy*, 326(12):899–904.
- [Bertrand *et al.*, 1999] BERTRAND, S., FORIO, P., PAILLER, R. et LAMON, J. (1999). Hi-nicalon/sic minicomposites with (pyrocarbon/sic) n nanoscale multilayered interphases. *Journal of the American Ceramic Society*, 82(9):2465–2473.
- [Boitier *et al.*, 2002] BOITIER, G., DARZENS, S., CHERMANT, J.-L. et VICENS, J. (2002). Microstructural investigation of interfaces in cmcs. *Composites Part A*, 33:1467–1470.
- [Boroomand et Zienkiewicz, 1998] BOROOMAND, B. et ZIENKIEWICZ, O. (1998). Recovery procedures in error estimation and adaptivity : Adaptivity in non-linear problems of elasto-plasticity behaviour. In LADEVÈZE, P. et ODEN, J., éditeurs : *Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics*, volume 47 de *Studies in Applied Mechanics*, pages 383 – 410. Elsevier.
- [Bunsell et Berger, 2000] BUNSELL, A. et BERGER, M.-H. (2000). Fine diameter ceramic fibres. *Journal of the European Ceramic Society*, 20:2249–2260.
- [Camus, 2000] CAMUS, G. (2000). Modelling of the mechanical behavior and damage processes of fibrous ceramic matrix composites : application to a 2-d sic/sic. *International journal of solids and structures*, 37(6):919–942.
- [Carrère *et al.*, 2000] CARRÈRE, N., MARTIN, E. et LAMON, J. (2000). The influence of the interphase and associated interfaces on the deflection of matrix cracks in ceramic matrix composites. *Composites Part A*, 31:1179–1190.
- [Chamoin *et al.*, 2010] CHAMOIN, L., PRUDHOMME, S., BEN DHIA, H. et ODEN, T. (2010). Ghost forces and spurious effects in atomic-to-continuum coupling methods by the arlequin approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(8-9):1081–1113.
- [Cheng *et al.*, 2001] CHENG, L., XU, Y., ZHANG, L. et GAO, R. (2001). Effect of glass sealing on the oxidation behavior of three dimensional c/sic composites in air. *Carbon*, 39:1127–1133.
- [Chevalier, 2004] CHEVALIER, L. (2004). *Mécanique des systèmes et des milieux déformables : cours, exercices et problèmes corrigés*. Ellipses.
- [Chinesta *et al.*, 2010] CHINESTA, F., AMMAR, A. et CUETO, E. (2010). Proper generalized decomposition of multiscale models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(8-9):1114–1132.
- [Christman *et al.*, 1989] CHRISTMAN, T., NEEDLEMAN, A. et SURESH, S. (1989). An experimental and numerical study of deformation in metal-ceramic composites. *Acta metallurgica*, 37(11):3029–3050.

- [Cluzel, 2009] CLUZEL, C. (2009). Rapport final du programme cpr. Rapport technique, LMT Cachan.
- [Cluzel *et al.*, 2009] CLUZEL, C., BARANGER, E., LADEVÈZE, P. et MOURET, A. (2009). Mechanical behaviour and lifetime modelling of self-healing ceramic-matrix composites subjected to thermomechanical loading in air. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 40(8):976 – 984. Special Issue : 15th French National Conference on Composites - JNC15.
- [Couégnat, 2007] COUÉGNAT, G. (2007). Approche multiéchelle du comportement mécanique de matériaux composites à renfort tissé. JNC15, Marseille (France).
- [Cresta *et al.*, 2007] CRESTA, P., ALLIX, O., REY, C. et GUINARD, S. (2007). Nonlinear localization strategies for domain decomposition methods : application to post-buckling analyses. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 196(8): 1436–1446.
- [Dalmaz, 1997] DALMAZ, A. (1997). *Etude du comportement en fatigue cyclique à hautes températures des composites tissés fibres de carbone / matrice en carbure de silicium 2.5D-C/SiC*. Thèse de doctorat, INSA de Lyon.
- [Desmorat *et al.*, 2007] DESMORAT, R., GATUINGT, F. et RAGUENEAU, F. (2007). Non-local anisotropic damage model and related computational aspects for quasi-brittle materials. *Engineering fracture mechanics*, 74(10):1539–1560.
- [Devries *et al.*, 1989] DEVRIES, F., DUMONTET, H., DUVAUT, G. et LENE, F. (1989). Homogenization and damage for composite structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 27(2):285–298.
- [Dolbow *et al.*, 2000] DOLBOW, J., MOËS, N. et BELYTSCHKO, T. (2000). Discontinuous enrichment in finite elements with a partition of unity method. *Finite Elements in Analysis and Design*, 36(3-4):235–260.
- [Duarte *et al.*, 2000] DUARTE, C., BABUKA, I. et ODEN, J. (2000). Generalized finite element methods for three-dimensional structural mechanics problems. *Computers & Structures*, 77(2):215–232.
- [Duarte *et al.*, 2001] DUARTE, C., HAMZEH, O., LISZKA, T. et TWORZYDLO, W. (2001). A generalized finite element method for the simulation of three-dimensional dynamic crack propagation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(15-17):2227–2262.
- [Duarte et Kim, 2008] DUARTE, C. et KIM, D.-J. (2008). Analysis and applications of a generalized finite element method with global-local enrichment functions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(6-8):487 – 504.
- [Dumontet, 1986] DUMONTET, H. (1986). Study of a boundary layer problem in elastic composite materials. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér*, 20(2):265–286.
- [Eshelby, 1957] ESHELBY, J. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 241(1226):376.

- [Etchart-Salas, 2011] ETCHART-SALAS, R. (2011). Echange de données dans le cadre du programme arcoce.
- [Evans *et al.*, 1996] EVANS, A., ZOK, F., MCMEEKING, R. et DU, Z. (1996). Models of high-temperature, environmentally assisted embrittlement in ceramic-matrix composites. *Journal of American Ceramic Society*, 79:2345–52.
- [Fantozzi *et al.*, 2001] FANTOZZI, G., REYNAUD, P. et ROUBY, D. (2001). Thermomechanical behaviour of long fibres ceramic-ceramic composites. *Silicates industriels*, (9-10):109–119.
- [Farhat *et al.*, 2001] FARHAT, C., LESOINNE, M., LETALLEC, P., PIERSON, K. et RIXEN, D. (2001). Feti-dp : a dual-primal unified feti method part i : A faster alternative to the two-level feti method. *International journal for numerical methods in engineering*, 50(7):1523–1544.
- [Farhat *et al.*, 2000] FARHAT, C., PIERSON, K. et LESOINNE, M. (2000). The second generation feti methods and their application to the parallel solution of large-scale linear and geometrically non-linear structural analysis problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 184(2-4):333–374.
- [Farhat et Roux, 1991] FARHAT, C. et ROUX, F. (1991). A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32(6):1205–1227.
- [Fedorenko, 1964] FEDORENKO, R. (1964). On the speed of convergence of an iteration process. *USSR Comput. Math. and Math. Phys*, 4(3).
- [Fergus et Worrel, 1995] FERGUS, J. et WORREL, W. (1995). Silicon-carbide/boron-containing coatings for the oxydation protection of graphite. *Carbon*, 33:537–543.
- [Feyel, 1999] FEYEL, F. (1999). Multiscale fe2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16(1-4):344 – 354.
- [Feyel, 2003] FEYEL, F. (2003). A multilevel finite element method (fe2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28-30):3233 – 3244. Multiscale Computational Mechanics for Materials and Structures.
- [Feyel et Chaboche, 2000] FEYEL, F. et CHABOCHE, J.-L. (2000). Fe2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre sic/ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183(3-4):309 – 330.
- [Fish, 1992] FISH, J. (1992). The s-version of the finite element method. *Computers & Structures*, 43(3):539 – 547.
- [Fish *et al.*, 1995] FISH, J., PANDHEERADI, M. et BELSKY, V. (1995). An efficient multilevel solution scheme for large scale non-linear systems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 38(10):1597–1610.
- [Fish et Shek, 2000] FISH, J. et SHEK, K. (2000). Multiscale analysis of large scale non-linear structures and materials. *International Journal for Computational Civil and Structural Engineering*, 1(1):79–90.

- [Fish et Yuan, 2005] FISH, J. et YUAN, Z. (2005). Multiscale enrichment based on partition of unity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 62(10):1341–1359.
- [Fortin et Glowinski, 1983] FORTIN, M. et GLOWINSKI, R. (1983). Augmented lagrangian methods : Applications to the numerical solution of boundary-value problems.
- [Garikipati et Hughes, 2000] GARIKIPATI, K. et HUGHES, T. (2000). A variational multiscale approach to strain localization-formulation for multidimensional problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 188(1-3):39–60.
- [Gasser *et al.*, 1998] GASSER, A., LADEVÈZE, P. et PERES, P. (1998). Damage modelling for a laminated ceramic composite. *Materials Science and Engineering A*, 250(2):249–255.
- [Gauthier et Lamon, 2009] GAUTHIER, W. et LAMON, J. (2009). Delayed failure of hi-nicalon and hi-nicalon s multifilament tows and single filaments at intermediate temperatures (500°–800° c). *Journal of the American Ceramic Society*, 92(3):702–709.
- [Gauthier *et al.*, 2009] GAUTHIER, W., PAILLER, F., LAMON, J. et PAILLER, R. (2009). Oxidation of silicon carbide fibers during static fatigue in air at intermediate temperatures. *Journal of the American Ceramic Society*, 92(9):2067–2073.
- [Genet, 2010] GENET, M. (2010). *Vers un matériau virtuel pour les composites céramiques*. Thèse de doctorat, ENS-Cachan.
- [Gosselet et Rey, 2006] GOSSELET, P. et REY, C. (2006). Non-overlapping domain decomposition methods in structural mechanics. *Archives of computational methods in engineering*, 13(4):515–572.
- [Guidault *et al.*, 2008] GUIDAULT, P., ALLIX, O., CHAMPANEY, L. et CORNUAULT, C. (2008). A multiscale extended finite element method for crack propagation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(5):381–399.
- [Guillaumat et Lamon, 1996] GUILLAUMAT, L. et LAMON, J. (1996). Probabilistic-statistical simulation of the non-linear mechanical behavior of a woven sic/sic composite. *Composites science and technology*, 56(7):803–808.
- [Guillaumat et Lamon, 1999] GUILLAUMAT, L. et LAMON, J. (1999). Comportement mécanique et endommagement de composites 2d sic/sic. *Revue des Composites et Matériaux avancés*, 9:183–203.
- [Guo *et al.*, 1999] GUO, Q., SONG, J., LIU, L. et ZHANG, B. (1999). Relationship between oxidation resistance and structure of b₄c-sic/c composites with self-healing properties. *Carbon*, 37:33–44.
- [Hashin, 1962] HASHIN, Z. (1962). The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29:143–150.
- [Hashin, 1996] HASHIN, Z. (1996). Finite thermoelastic fracture criterion with application to laminate cracking analysis. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(7):1129–1145.

- [Hill, 1965] HILL, R. (1965). A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(4):213–222.
- [Hou et Wu, 1997] HOU, T. Y. et WU, X.-H. (1997). A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media. *Journal of Computational Physics*, 134(1):169 – 189.
- [Hughes, 1995] HUGHES, T. J. R. (1995). Multiscale phenomena : Green’s functions, the dirichlet-to-neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 127(1-4):387 – 401.
- [Hughes *et al.*, 1998] HUGHES, T. J. R., FEIJÓO, G. R., MAZZEI, L. et QUINCY, J.-B. (1998). The variational multiscale method—a paradigm for computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 166(1-2):3 – 24. Advances in Stabilized Methods in Computational Mechanics.
- [Ibrahimbegovic et Markovic, 2003] IBRAHIMBEGOVIC, A. et MARKOVIC, D. (2003). Strong coupling methods in multi-phase and multi-scale modeling of inelastic behavior of heterogeneous structures. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 192(28-30):3089–3107.
- [Jeulin, 2009] JEULIN, D. (2009). Physics and mechanics of random structure. Notes de cours, Centre de Morphologie Mathématique.
- [Johnson et Hansbo, 1992] JOHNSON, C. et HANSBO, P. (1992). Adaptive finite element methods in computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 101(1-3):143 – 181.
- [Kachanov, 1986] KACHANOV, L. (1986). *Introduction to continuum damage mechanics*, volume 10. Springer.
- [Kanit *et al.*, 2003] KANIT, T., FOREST, S., GALLIET, I., MOUNOURY, V. et JEULIN, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40(13-14):3647 – 3679.
- [Kotani *et al.*, 2003] KOTANI, M., INOUE, T., KOHYAMA, A., KATOH, Y. et OKAMURA, K. (2003). Effect of sic particle dispersion on microstructure and mechanical properties of polymer-derived sic/sic composite. *Materials Science & Engineering A*, A357:376–385.
- [Kotani *et al.*, 2002] KOTANI, M., INOUE, T., KOHYAMA, A., OKAMURA, K. et KATOH, Y. (2002). Consolidation of polymer-derived sic matrix composites : processing and microstructure. *Composites Science and Technology*, 62:2179–2188.
- [Kouznetsova *et al.*, 2002] KOUZNETSOVA, V., GEERS, M. et BREKELMANS, W. (2002). Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 54(8):1235–1260.

- [Kouznetsova *et al.*, 2004] KOUZNETSOVA, V., GEERS, M. et BREKELMANS, W. (2004). Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials : a nested finite element solution strategy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(48-51):5525–5550.
- [Lacroix *et al.*, 2002] LACROIX, C., LEGUILLON, D. et MARTIN, E. (2002). The influence of an interphase on the deflection of a matrix crack in a ceramic-matrix composite. *Composites science and technology*, 62(4):519–523.
- [Ladevèze, 1983] LADEVÈZE, P. (1983). Sur une théorie de l'endommagement anisotrope. *Internal Report*.
- [Ladevèze, 1995] LADEVÈZE, P. (1995). Modeling and simulation of the mechanical behavior of cmcs. In *High-Temperature Ceramic-Matrix Composites I (TH-CMC-1)*.
- [Ladevèze, 1999] LADEVÈZE, P. (1999). *Nonlinear computational structural mechanics : new approaches and non-incremental methods of calculation*. Springer.
- [Ladevèze, 2002] LADEVÈZE, P. (2002). *Continuum damage mechanics of materials and structures*, chapitre An anisotropic damage theory with unilateral effects : applications to laminate and three- and four-dimensional composites, pages 205–233. O. Allix and F. Hild.
- [Ladevèze et Dureisseix, 2000] LADEVÈZE, P. et DUREISSEIX, D. (2000). A micro/macro approach for parallel computing of heterogeneous structure. *International Journal for Computational Civil and Structural Engineering*, 1:18–28.
- [Ladevèze *et al.*, 1994] LADEVÈZE, P., GASSER, A. et ALLIX, O. (1994). Damage mechanisms modelling for ceramic composites. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 116:331–336.
- [Ladevèze et Genet, 2010] LADEVÈZE, P. et GENET, M. (2010). A new approach to the subcritical cracking of ceramic fibers. *Composites Science and Technology*, 70(11): 1575 – 1583.
- [Ladevèze *et al.*, 2001a] LADEVÈZE, P., LETOMBE, S. et CLUZEL, C. (2001a). A cmc damage model based on micro-and macromechanics for high-temperature and complex loading. *High Temperature Ceramic Matrix Composites*, pages 578–583.
- [Ladevèze *et al.*, 2001b] LADEVÈZE, P., LOISEAU, O. et DUREISSEIX, D. (2001b). A micro-macro and parallel computational strategy for highly heterogeneous structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52(1-2):121–138.
- [Ladevèze *et al.*, 2006] LADEVÈZE, P., LUBINEAU, G. et VIOLEAU, D. (2006). A computational damage micromodel of laminated composites. *International journal of fracture*, 137(1):139–150.
- [Ladevèze et Nouy, 2003] LADEVÈZE, P. et NOUY, A. (2003). On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28-30):3061 – 3087. Multiscale Computational Mechanics for Materials and Structures.

- [Ladevèze *et al.*, 2010] LADEVÈZE, P., PASSIEUX, J.-C. et NÉRON, D. (2010). The latin multiscale computational method and the proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(21-22):1287 – 1296. Multiscale Models and Mathematical Aspects in Solid and Fluid Mechanics.
- [Ladevèze et Pelle, 2004] LADEVÈZE, P. et PELLE, J. (2004). *Mastering calculations in linear and nonlinear mechanics*. Springer, NY.
- [Laforêt et Lamon, 2008] LAFORÊT, A. et LAMON, J. (2008). Static fatigue of multifilament tows at high temperatures above 900 c. *Mechanical Properties and Performance of Engineering Ceramics and Composites V*, pages 173–183.
- [Lamon, 2001] LAMON, J. (2001). A micromechanics-based approach to the mechanical behavior of brittle-matrix composites. *Composites science and technology*, 61(15): 2259–2272.
- [Lamon *et al.*, 1995] LAMON, J., REBILLAT, F. et EVANS, A. (1995). Microcomposite test procedure for evaluating the interface properties of ceramic matrix composites. *Journal of the American Ceramic Society*, 78(2):401–405.
- [Lamouroux *et al.*, 1999] LAMOUREUX, F., BERTRAND, S., PAILLER, R., NASLAIN, R. et CATALDI, M. (1999). Oxidation-resistant carbon-fiber-reinforced ceramic-matrix composites. *Composites Science and Technology*, 59:1073–1085.
- [Lantuéjoul, 2008] LANTUÉJOUL, C. (2008). Introduction to the simulation of random variables. Notes de cours, Centre de Géostatistique / Ecole des Mines de Paris.
- [Lawn, 1974] LAWN, B. (1974). Diffusion-controlled subcritical crack growth in the presence of a dilute gas environment. *Materials Science and Engineering*, 13(3):277–283.
- [Lecuyer *et al.*, 1987] LECUYER, F., ENGRAND, D. et DUMONTET, H. (1987). Comparaison de méthodes de couches limites pour l'étude des effets locaux dans les composites. *Annales des Composites*, 1:51–64.
- [Lemaitre, 1992] LEMAITRE, J. (1992). *A Course on Damage Mechanics*. Springer-Verlag.
- [Lemaitre et Chaboche, 1994] LEMAITRE, J. et CHABOCHE, J. (1994). *Mechanics of solid materials*. Cambridge Univ Pr.
- [Letombe, 2005] LETOMBE, S. (2005). *Modélisation du couplage oxydation/endommagement dans les composites à matrice céramique*. Thèse de doctorat, ENS-Cachan.
- [Letombe *et al.*, 2003] LETOMBE, S., CLUZEL, C. et LADEVÈZE, P. (2003). A macroscopic model coupling oxidation and damage for cmcs. *JNC13*, pages 713–722.
- [Lin et Becher, 1997] LIN, H.-T. et BECHER, P. F. (1997). Effect of fiber coating on lifetime of nicalon fiber-silicon carbide composites in air. *Materials Science & Engineering A*, 231:143–150.

- [Loehnert et Belytschko, 2007] LOEHNERT, S. et BELYTSCHKO, T. (2007). A multiscale projection method for macro/microcrack simulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 71(12):1466–1482.
- [Lubineau *et al.*, 2009] LUBINEAU, G., VIOLEAU, D. et LADEVÈZE, P. (2009). Illustrations of a microdamage model for laminates under oxidizing thermal cycling. *Composites Science and Technology*, 69(1):3–9.
- [Maire et Chaboche, 1997] MAIRE, J. et CHABOCHE, J. (1997). A new formulation of continuum damage mechanics (cdm) for composite materials. *Aerospace science and technology*, 1(4):247–257.
- [Maire et Lesne, 1997] MAIRE, J. et LESNE, P. (1997). A damage model for ceramic matrix composites. *Aerospace science and technology*, 1(4):259–266.
- [Mandel, 1993] MANDEL, J. (1993). Balancing domain decomposition. *Communications in numerical methods in engineering*, 9(3):233–241.
- [Markovic et Ibrahimbegovic, 2004] MARKOVIC, D. et IBRAHIMBEGOVIC, A. (2004). On micro-macro interface conditions for micro scale based fem for inelastic behavior of heterogeneous materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 193(48-51):5503–5523.
- [Martin *et al.*, 2002] MARTIN, E., LEGUILLON, D. et LACROIX, C. (2002). An energy criterion for the initiation of interface failure ahead of a matrix crack in brittle matrix composites. *Composite Interfaces*, 9(2):143–156.
- [Martinez et Martinez, 2002] MARTINEZ, W. et MARTINEZ, A. (2002). *Computational statistics handbook with MATLAB*. CRC Press.
- [Mazerat *et al.*, 2010] MAZERAT, S., LAMON, J. et PAILLER, R. (2010). Delayed failure of nicalon, tyranno zmi, tyranno lox-m and tyranno grade s tows in air at intermediate temperature (450-850 °c). In *High-Temperature Ceramic-Matrix Composites 7 (HT-CMC-7)*.
- [Melenk et Babuška, 1996] MELENK, J. M. et BABUŠKA, I. (1996). The partition of unity finite element method : Basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1-4):289 – 314.
- [Miracle et Donaldson, 2001] MIRACLE, D. et DONALDSON, S. (2001). *ASM handbook : Composites*, volume 21. Asm Intl.
- [Moës *et al.*, 2003] MOËS, N., CLOIREC, M., CARTRAUD, P. et REMACLE, J. F. (2003). A computational approach to handle complex microstructure geometries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28-30):3163 – 3177. Multiscale Computational Mechanics for Materials and Structures.
- [Moes *et al.*, 1999] MOES, N., DOLBOW, J. et BELYTSCHKO, T. (1999). A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46(1):131–150.
- [More *et al.*, 2000] MORE, K., TORTORELLI, P., FERBER, M., WALKER, L., KEISER, J., MIRIYALA, N., BRETNALL, W. et PRICE, J. (2000). Exposure of ceramics and

- ceramic matrix composites in simulated and actual combustor environments. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 122:212.
- [Mori et Tanaka, 1973] MORI, T. et TANAKA, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metallurgica*, 21(5): 571–574.
- [Nannetti *et al.*, 2002] NANNETTI, C., RICCARDI, B., ORTONA, A., LA BARBERA, A., SCAFČ, E. et VEKINIS, G. (2002). Development of 2d and 3d hi-nicalon fibres/sic matrix composites manufactured by a combined cvi-pip route. *Journal of nuclear materials*, 307:1196–1199.
- [Naslain, 1998] NASLAIN, R. (1998). The design of the fibre-matrix interfacial zone in ceramic matrix composites. *Composites Part A*, 29A:1145–1155.
- [Naslain, 2004] NASLAIN, R. (2004). Design, preparation and properties of non-oxide cmcs for application in engines and nuclear reactors : an overview. *Composites Science and Technology*, 64:155–170.
- [Naslain *et al.*, 2001] NASLAIN, R., PAILLER, R., BOURRAT, X., BERTRAND, S., HEURTEVENT, F., DUPEL, P. et LAMOUREUX, F. (2001). Synthesis of highly tailored ceramic matrix composites by pressure-plused cvi. *Solid State Ionics*, 141-142:541–548.
- [Oden *et al.*, 1999] ODEN, J. T., VEMAGANTI, K. et MOËS, N. (1999). Hierarchical modeling of heterogeneous solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172(1-4):3 – 25.
- [Oden et Zohdi, 1997] ODEN, J. T. et ZOHDI, T. I. (1997). Analysis and adaptive modeling of highly heterogeneous elastic structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 148(3-4):367 – 391.
- [Ogbuji, 1998] OGBUJI, L. U. J. T. (1998). A pervasive mode of oxidative degradation in a sic-sic composite. *Journal of American Ceramic Society*, 81:2777–2784.
- [Ogbuji, 2003] OGBUJI, L. U. J. T. (2003). Pest-resistance in sic/bn/sic composites. *Journal of the European Ceramic Society*, 23:613–617.
- [Oliver *et al.*, 2006] OLIVER, J., HUESPE, A. et SANCHEZ, P. (2006). A comparative study on finite elements for capturing strong discontinuities : E-fem vs x-fem. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 195(37-40):4732–4752.
- [Opila et Hann Jr, 1997] OPILA, E. et HANN JR, R. (1997). Paralineer oxidation of cvd sic in water vapor. *Journal of the American Ceramic Society*, 80(1):197–205.
- [Ortona *et al.*, 2000] ORTONA, A., DONATO, A., FILACCHIONI, G., DE ANGELIS, U., LA BARBERA, A., NANNETTI, C., RICCARDI, B. et YEATMAN, J. (2000). Sic-sic cmc manufacturing by hybrid cvi-pip techniques : process optimisation. *Fusion engineering and design*, 51:159–163.
- [Penas, 2002] PENAS, O. (2002). *Etude de composites SiC/SiBC à matrice multiséquencée en fatigue cyclique à hautes températures sous air*. Thèse de doctorat, INSA de Lyon.

- [Pineau *et al.*, 2010] PINEAU, P., COUÉGNAT, G. et LAMON, J. (2010). Virtual testing and simulation of multiple cracking in transverse tows of woven cmcs. *Mechanical Properties and Performance of Engineering Ceramics and Composites V*, pages 319–328.
- [Pineau et Lamon, 2009] PINEAU, P. et LAMON, J. (2009). Micromechanical and stochastic approach to transverse multiple cracking in a woven cmc. *In Comptes Rendus des JNC 16 - Toulouse 2009*.
- [Pled *et al.*, 2011a] PLED, F., CHAMOIN, L. et LADEVÈZE, P. (2011a). An enhanced method with local energy minimization for the robust a posteriori construction of equilibrated stress fields in finite element analyses. *Computational Mechanics*, pages 1–22.
- [Pled *et al.*, 2011b] PLED, F., CHAMOIN, L. et LADEVÈZE, P. (2011b). On the techniques for constructing admissible stress fields in model verification : Performances on engineering examples. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*.
- [Quemard, 2005] QUEMARD, L. (2005). *Corrosion à Haute Température et à Haute Pression de Composites Thermostructuraux à Matrice Séquencée SiCf/[Si,C,B]m et Cf/[Si,C,B]m pour Applications Aéronautiques*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux 1.
- [Quemard *et al.*, 2007a] QUEMARD, L., REBILLAT, F., GUETTE, A., TAWIL, H. et LOUCHET-POUILLERIE, C. (2007a). Degradation mechanisms of a sic fiber reinforced self-sealing matrix composite in simulated combustor environments. *Journal of the European Ceramic Society*, 27:377–388.
- [Quemard *et al.*, 2007b] QUEMARD, L., REBILLAT, F., GUETTE, A., TAWIL, H. et LOUCHET-POUILLERIE, C. (2007b). Self-healing mechanisms of a sic fiber reinforced multi-layered ceramic matrix composite in high pressure steam environments. *Journal of the European Ceramic Society*, 27:2085–2094.
- [Rabotnov, 1968] RABOTNOV, Y. (1968). Creep rupture. *In Proceedings of the XII international congress on applied mechanics*, pages 342–349.
- [Ramm *et al.*, 2011] RAMM, E., ERHART, A., HETTICH, T., BRUSS, I., HILCHENBACH, F. et KATO, J. (2011). Damage propagation in composites–multiscale modeling and optimization. *Multiscale Methods in Computational Mechanics*, pages 281–304.
- [Rebillat *et al.*, 2000] REBILLAT, F., LAMON, J. et GUETTE, A. (2000). The concept of a strong interface applied to sic/sic composites with bn interphase. *Acta Materialia*, 48:4609–4618.
- [Renard, 1990] RENARD, J. (1990). Modélisation de la dégradation d’une pièce composite par une simulation numérique à deux échelles. *La Recherche Aéronautique*, 1:57–66.
- [Reuge et Vignoles, 2005] REUGE, N. et VIGNOLES, G. (2005). Modeling of isobaric-isothermal chemical vapor infiltration : effects of reactor control parameters on a densification. *Journal of materials processing technology*, 166(1):15–29.
- [Ros, 2011] ROS, W. (2011). Echange de données dans le cadre du programme arcoce.

- [Sanchez-Palencia, 1974] SANCHEZ-PALENCIA, E. (1974). Comportements local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes. *International Journal of Engineering Science*, 12(4):331–351.
- [Sánchez-Palencia, 1980] SÁNCHEZ-PALENCIA, E. (1980). Non-homogeneous media and vibration theory. *In Lectures Notes in Physics*, volume 127.
- [Sanchez-Palencia et Zaoui, 1987] SANCHEZ-PALENCIA, E. et ZAOUÏ, A. (1987). Homogenization techniques for composite media. *In Homogenization Techniques for Composite Media*, volume 272.
- [Srinivasan *et al.*, 2008] SRINIVASAN, K., MATOUS, K. et GEUBELLE, P. (2008). Generalized finite element method for modeling nearly incompressible bimaterial hyperelastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(51-52):4882–4893.
- [Strouboulis *et al.*, 2000a] STROUBOULIS, T., BABUŠKA, I. et COPPS, K. (2000a). The design and analysis of the generalized finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 181(1-3):43 – 69.
- [Strouboulis *et al.*, 2006] STROUBOULIS, T., BABUŠKA, I. et HIDAJAT, R. (2006). The generalized finite element method for helmholtz equation : Theory, computation, and open problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(37-40):4711 – 4731. John H. Argyris Memorial Issue. Part I.
- [Strouboulis *et al.*, 2000b] STROUBOULIS, T., COPPS, K. et BABUŠKA, I. (2000b). The generalized finite element method : an example of its implementation and illustration of its performance. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 47(8): 1097–0207.
- [Strouboulis *et al.*, 2001] STROUBOULIS, T., COPPS, K. et BABUŠKA, I. (2001). The generalized finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(32-33):4081–4193.
- [Strouboulis *et al.*, 2008] STROUBOULIS, T., HIDAJAT, R. et BABUŠKA, I. (2008). The generalized finite element method for helmholtz equation. part ii : Effect of choice of handbook functions, error due to absorbing boundary conditions and its assessment. *Computer Methods In Applied Mechanics and Engineering*, 197(5):364–380.
- [Strouboulis *et al.*, 2003] STROUBOULIS, T., ZHANG, L. et BABUŠKA, I. (2003). Generalized finite element method using mesh-based handbooks : application to problems in domains with many voids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28-30):3109 – 3161.
- [Sukumar *et al.*, 2001] SUKUMAR, N., CHOPP, D., MOËS, N. et BELYTSCHKO, T. (2001). Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190(46-47):6183–6200.
- [Takano et Okuno, 2004] TAKANO, N. et OKUNO, Y. (2004). Three-scale finite element analysis of heterogeneous media by asymptotic homogenization and mesh superposition methods. *International journal of solids and structures*, 41(15):4121–4135.

- [Takeda *et al.*, 1998] TAKEDA, M., URANO, A., SAKAMOTO, J.-I. et IMAI, Y. (1998). Microstructure and oxidative degradation behavior of silicon carbide fiber hi-nicalon type s. *Journal of Nuclear Materials*, (258-263):1594–1599.
- [Terada et Kikuchi, 2001] TERADA, K. et KIKUCHI, N. (2001). A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(40-41):5427 – 5464.
- [Tong *et al.*, 2007] TONG, C., CHENG, L., YIN, X., ZHANG, L. et XU, Y. (2007). Oxidation behavior of 2d c/sic composite modified by sib4 particles in inter-bundle pores. *Composites Science and Technology*.
- [Tranquart, 2012] TRANQUART, B. (2012). *Manuel du code MGFEM et CMCmorph*. LMT Cachan.
- [Van der Sluis *et al.*, 1999a] Van der SLUIS, O., SCHREURS, P. et MEIJER, H. (1999a). Effective properties of a viscoplastic constitutive model obtained by homogenisation. *Mechanics of materials*, 31(11):743–759.
- [Van der Sluis *et al.*, 1999b] Van der SLUIS, O., VOSBEEK, P. et SCHREURS, P. (1999b). Homogenization of heterogeneous polymers. *International journal of solids and structures*, 36(21):3193–3214.
- [Veldhuizen, 1995] VELDHUIZEN, T. (1995). Template metaprograms. *C++ Report*, 7(4):36–43.
- [Vignoles *et al.*, 2011] VIGNOLES, G., ROS, W., SZELENGOWICZ, I., MULAT, C., GERMAIN, C. et DONIAS, M. (2011). Modelling infiltration of fibre preforms from x-ray tomography data. *Advances in Science and Technology*, 71:108–117.
- [Violeau, 2007] VIOLEAU, D. (2007). *Une stratégie de calcul pour l'analyse à l'échelle "micro" des endommagements jusqu'à rupture des composites stratifiés*. Thèse de doctorat, ENS-Cachan.
- [Viricelle *et al.*, 2001] VIRICELLE, J., GOURSAT, P. et BAHLOUL-HOURLIER, D. (2001). Oxidation behavior of a multi-layered ceramic-matrix composite (sic)_f/c/(sibc)_m. *Composites Science and Technology*, 61:607–614.
- [Wachtman, 1996] WACHTMAN, J. (1996). *Mechanical properties of ceramics*. John Wiley & Sons, Inc.
- [Wiederhorn, 1975] WIEDERHORN, S. (1975). Crack growth as an interpretation of static fatigue. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 19:169–181.
- [Zhu *et al.*, 2008] ZHU, Y., HUANG, Z., DONG, S., YUAN, M. et JIANG, D. (2008). The fabrication of 2d c_f/sic composite by a modified pip process using active al powders as active filler. *Materials Characterization*, 59:975–978.
- [Zienkiewicz et Taylor, 2000] ZIENKIEWICZ, O. et TAYLOR, R. (2000). *The finite element method : Solid mechanics*, volume 2. Butterworth-Heinemann.
- [Zohdi *et al.*, 1996] ZOHDI, T., ODEN, J. et RODIN, G. (1996). Hierarchical modeling of heterogeneous bodies. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 138(1-4):273–298.

- [Zohdi et Wriggers, 1999] ZOHDİ, T. et WRIGGERS, P. (1999). A domain decomposition method for bodies with heterogeneous microstructure based on material regularization. *International journal of solids and structures*, 36(17):2507–2525.
- [Zohdi *et al.*, 2001] ZOHDİ, T., WRIGGERS, P. et HUET, C. (2001). A method of substructuring large-scale computational micromechanical problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190(43-44):5639–5656.
- [Zou et Li, 2002] ZOU, Z. et LI, S. (2002). Stresses in an infinite medium with two similar circular cylindrical inclusions. *Acta mechanica*, 156(1):93–108.