



HAL
open science

Couplage endommagement-grandes déformations dans une modélisation multi-échelle pour composites particulaires fortement chargés

Marion Trombini

► **To cite this version:**

Marion Trombini. Couplage endommagement-grandes déformations dans une modélisation multi-échelle pour composites particulaires fortement chargés. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2015. Français. NNT : 2015ESMA0002 . tel-01151329

HAL Id: tel-01151329

<https://theses.hal.science/tel-01151329v1>

Submitted on 12 May 2015

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

Pour l'obtention du Grade de
**DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DE MÉCANIQUE
ET D'AÉROTECHNIQUE**
(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

École Doctorale :
Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Énergétique et Aéronautique

Secteur de Recherche :
Mécanique des Solides, des Matériaux, des Structures et des Surfaces

Présentée par :

Marion TROMBINI

COUPLAGE ENDOMMAGEMENT - GRANDES DÉFORMATIONS DANS UNE MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLE POUR COMPOSITES PARTICULAIRES FORTEMENT CHARGÉS

Directrice de thèse : **C. NADOT-MARTIN**
Co-directeur : **D. HALM**

Soutenue le 27 février 2015

JURY

C. FOND	Professeur, Université de Strasbourg, Strasbourg	Président
S. MERCIER	Professeur, Université de Lorraine, Metz	Rapporteur
Y. MONERIE	Professeur, Université Montpellier 2, Montpellier	Rapporteur
K. DERRIEN	Maître de conférences, Arts et Métiers ParisTech, Paris	Examineur
A. FANGET	Ingénieur de Recherche, CEA, Gramat	Examineur
E. LAFONTAINE	Responsable Adjoint DGA "Matériaux, Chimie, Énergie", Bagnoux	Examineur
D. HALM	Professeur, ISAE-ENSMA, Poitiers	Examineur
C. NADOT-MARTIN	Professeur, ISAE-ENSMA, Poitiers	Examineur

À ma Mamie

MERCI!

Ces travaux ont été financés par la Direction Générale pour l'Armement (D.G.A.) et la Région Poitou-Charentes. C'est pourquoi je leur adresse mes remerciements pour leur soutien financier et leur intérêt scientifique.

J'ai réalisé cette thèse au sein de l'axe Endommagement et Durabilité du Département de Physique et Mécanique des Matériaux de l'Institut Pprime. Je tiens en premier lieu à remercier chaleureusement la direction du laboratoire, assurée par Jean-Claude Grandidier puis par Yves Nadot, pour l'accueil qui m'a été réservé au cours de ces trois années.

Je poursuis ces remerciements en me tournant vers mon jury de thèse. Tout d'abord, je souhaite remercier monsieur Christophe Fond pour avoir accepté le rôle de président, ainsi que messieurs Sébastien Mercier et Yann Monerie, qui m'ont fait l'honneur de lire mon manuscrit de manière (très) approfondie. Je remercie également madame Katell Derrien, messieurs Alain Fanget et Éric Lafontaine qui ont accepté d'examiner ce travail. Les échanges que nous avons eus au cours de la soutenance de thèse ont été très constructifs et j'ai apprécié votre intérêt et votre curiosité scientifique envers mes travaux.

Les remerciements qui suivent s'adressent bien entendu à mes encadrants, Carole Nadot-Martin et Damien Halm, qui m'ont fait confiance durant ces trois années. Je ne peux pas être exhaustive, alors je vais essayer de rester simple. Carole, merci pour avoir apporté ton regard critique aiguisé et pour ton enthousiasme en toutes circonstances. Damien, merci pour nos multiples discussions scientifiques improvisées et pour ton sang-froid quand la situation semblait désespérée. Je vous suis reconnaissante à tous les deux pour avoir cru à un heureux dénouement quand je ne voyais pas toujours la lumière au bout du tunnel. Vous avez partagé avec moi vos compétences, votre expérience et vous m'avez beaucoup appris, tant sur le plan humain que professionnel.

Je m'éloigne à nouveau du laboratoire pour faire un petit détour par le Lot, au CEA Gramat. J'adresse mes remerciements à Alain Fanget pour le partage de son savoir et les échanges que nous avons pu avoir. Un grand merci également à Gérald Contesse pour sa patience et son assiduité : merci d'avoir répondu présent à mes appels et mes demandes, je suis ravie d'avoir collaboré avec vous.

À présent, retour à Poitiers. Toujours dans le cadre de ma thèse, mes remerciements vont à Mikaël Gueguen. Pour le clin d'œil, je dirais bien un "succinct" merci... mais ton investissement dans ma thèse était bien trop important pour que j'en reste là. Tu as fait ton possible pour que tout se passe pour le mieux dans mon apprentissage et mes développements numériques. Merci pour tout et surtout pour ta gentillesse.

Hors laboratoire mais tout de même, j'ouvre une parenthèse car je me dois de remercier Frédéric Pons, qui m'a accompagnée dans mes premiers pas en tant qu'enseignante tout en compétences et en humour.

De manière plus générale, je tiens à remercier les permanents et ingénieurs d'études. Et oui chers I.E., bien que je n'aie pas fait d'expérimental, votre bonne humeur et votre disponibilité sont appréciables, car j'estime que vous êtes pour beaucoup dans l'excellente ambiance de travail générale qui règne au sein du laboratoire. J'ajoute un petit mot plus particulier pour Florence, avec qui j'ai partagé des conversations édifiantes en tous sens : merci pour ta disponibilité, ton amitié et ta confiance.

Du côté des permanents, je tiens à citer Michel grâce à qui j'ai découvert la recherche durant mon stage ingénieur, et dont la gentillesse me touchera toujours. J'ai également une pensée pour toutes ces personnes avec qui, à chaque fois que nous nous croisons, je m'attarde à discuter et ce depuis trois ans, ou depuis seulement quelques mois : Azdine, Céline, Jonathan, Laurence, Marie-Christine, Séverine, Sylvie, Yannick, Yves... Je ne peux pas laisser un mot pour chacun, ni citer tout le monde. Il faut seulement savoir que j'ai passé aux côtés de tous d'excellents moments, qu'il s'agisse d'échanges professionnels ou personnels.

Je n'oublie bien évidemment pas "nos magiciennes" comme je les appelle parfois... Toujours présentes, dès que l'on a besoin de quelque chose et que l'on appelle à la rescousse. Brigitte, Éliane et Karine, merci pour votre disponibilité, votre gentillesse et vos sourires.

Et puis maintenant, au tour des doctorants. Ah! mes collègues doctorants. Qu'aurait été cette thèse sans vous? Sûrement beaucoup plus terne...

Je commence par remercier les membres du premier bureau qui m'a accueilli pour mes premiers pas en tant que thésarde : Marion, Matthieu et Thao. Puis, j'ai migré avec Thao dans le fameux B37; je remercie alors les membres successifs qui m'y ont tenu compagnie : Davi, Fanny, Antonio, Julien et Lorena. Merci pour l'ambiance à la fois studieuse et détendue en temps voulu. Je laisse un petit message pour les "jeunes" qui restent... Antonio, je te transmets le flambeau du "plus vieux" du bureau, c'est toi le chef maintenant! Julien, "expert Abaqus", continue sur cette voie : tu vas peut-être arriver à leur montrer que le numérique, ce n'est pas si terrible! Lorena, je compte sur toi pour mettre l'ambiance : je vous ai fait découvrir la "chanson française de référence" pour votre culture et vous faire rire; apporte la chaleur du Brésil dans les moments un peu difficiles!

Bien entendu, merci l'ATEM pour l'ensemble des actions menées au sein du laboratoire pour animer et surtout souder l'ensemble des personnels, notamment les doctorants et les stagiaires. Je n'oublierai pas les sourires croisés, le soutien que j'ai pu trouver, mais également les bons moments partagés. Une pensée notamment pour Alice, Antonio, Clara, Damien, Gaëlle, GhighiX, Juan Pedro, Julien, Layla, Lorena, Luc, Nathan, Romain, Schlap, Thao, Yessine... Je souhaite plein de courage à tous ceux qui n'ont pas terminé leur thèse, qu'ils soient plus ou moins loin du but. J'espère que vite, très vite, vous écrirez vous aussi vos propres remerciements!

Les remerciements qui suivent, je les destine à ceux que je n'ai pas encore cités et qui, déçus, se

disent “oh, mais elle m’a oublié(e)!!”. Ceux-là ont compté un peu plus et vont me manquer encore plus, car on s’attache parfois aux gens que l’on croise... surtout s’ils sont géniaux : Aline, Amélie, Andrea, Aurélien, Baptiste, Benjamin, Camille, Élodie, Fabien, Fanny, Louis, Rémi, Thibault. J’ai tourné et retourné ces remerciements dans tous les sens et je ne parviens pas à vous remercier individuellement par écrit, là, ici. Du coup, simplement un immense merci pour : avoir été les meilleurs “animaux du zoo” du monde, l’esprit Disney, les parties de coinche endiablées, les fous-rires devant Ciel mon Doctorat, les potins, l’accueil au sein du B001 étendu, les soirées chez Moe, m’avoir permis de me dépasser en courant ces 10 km (dédicace au Super Coach et à la Super Special Partner, sans vous ça n’aurait pas été possible), les confidences, les multiples soirées musicales / culinaires / dansantes / déguisées, les diverses séances “décoration d’intérieur” pendant les congés des copains, le scotch, les Schokobons, les sessions MDV, les post-its de soutien, les paresseux-garous et j’en passe... Et à tous ceux qui n’ont pas encore quitté le laboratoire, j’ai envie de dire “ne lâchez rien, ça en vaut la peine!”. Surtout, retrouvons-nous vite et souvent pour continuer nos aventures! Je ne rajouterai qu’une chose : graou!

Avant de quitter le laboratoire, j’envoie mes plus profondes pensées à Florian. Ton sourire m’a accompagnée. Merci.

Je poursuis en remerciant les amis qui, à l’extérieur du laboratoire, m’ont soutenue. Tout d’abord, merci aux copains ingénieurs de l’ENSMA qui ont fait le déplacement pour ma soutenance et qui, depuis que je les connais, ont toujours compté : Valérie et Valentin. Ensuite, Anaïs, merci pour nos sessions sportives et les instants détente. Maud, tu as été plus présente que tu ne le penses dans mes moments difficiles, merci. Kelly, disons que c’est à ton tour de tout déchirer et je serai là moi aussi... force et robustesse! Enfin, Élodie et Chloé, mes Cocottes, merci d’être là depuis “toujours” en toutes circonstances : vous êtes les meilleures!

À présent, il est temps que je commence à remercier les gens qui me sont le plus proche. Je remercie ainsi l’ensemble de ma famille. Merci Marie-France et Yvan de vous être déplacés pour me soutenir dans la dernière ligne droite. Un grand merci également à Christophe, Jocelyne, Sindy et Liliana : vos pensées m’ont accompagnée tout au long de mon parcours, et même de ma vie...

Au début du manuscrit, je dédie cette thèse à ma Mamie car je sais combien elle est fière de moi, même si elle ne peut pas être présente à tous les événements si importants de ma vie. Et tu sais quoi?! Je suis moi-même très fière de faire ton bonheur ma Maminoute.

Un grand merci également à mon frère et à sa compagne Cécilia. Matthieu, moi aussi je suis fière de toi, fais juste ce qu’il te plaît. Sache que je serai toujours là pour t’accompagner dans tes choix et te soutenir quoi qu’il arrive.

Il est grand temps que j’adresse un message à mes parents, sans qui je ne serais probablement jamais arrivée là. Merci d’avoir toujours été à l’écoute, d’avoir toujours cru en moi et de m’avoir parfois redonné confiance en moi-même. Merci aussi d’avoir toujours compris mes priorités et de m’avoir apporté le soutien dont j’avais besoin pour parvenir au but ultime. Je sais que vous êtes fiers, mais vous n’êtes pas pour rien dans tout ça. Je suis riche de votre Amour.

Je clôturerai ces interminables remerciements en envoyant des milliers de mercis à Romain. J'ai lu quelque part un jour, dans un roman de gare, une phrase que j'ai trouvé très vraie : *Il y a des gens dont le regard vous améliore. C'est très rare, mais quand on les rencontre, il ne faut pas les laisser passer.* Alors je ne t'ai pas laissé passer, et j'ai bien fait. Maintenant tu veux bien de moi pour la vie et je ne peux que te dire merci pour ta patience, tes attentions, pour m'avoir comprise, pour m'avoir attendue... L'année 2015 sera une belle année mais surtout la vie sera une belle vie, à tes côtés ! Je t'aime.

Courage doesn't always roar. Sometimes courage is the little voice at the end of the day that says "I'll try again tomorrow".

MARY ANNE RADMACHER

TABLE DES MATIÈRES

Conventions utilisées	v
Liste des notations	ix
Introduction générale	1
I Positionnement des travaux	7
Introduction	11
I.1 Contexte de l'étude	12
I.1.1 Problématique	12
I.1.2 Description de la classe de matériaux visée et de son comportement	12
I.1.3 Historique et motivation générale des travaux	16
I.2 L'homogénéisation non-linéaire : concepts et enjeux majeurs	18
I.2.1 Principe général de résolution	18
I.2.2 Méthodes de linéarisation	19
I.2.3 Prise en compte de l'hétérogénéité intraphase	19
I.2.4 Enjeux spécifiques en viscoélasticité : traitement direct et mémoire longue	21
I.3 Les composites énergétiques sous l'angle de la modélisation	23
I.3.1 Approches macroscopiques	23
I.3.2 Approches en champs complets	24
I.3.3 Approches en champs moyens	25
I.4 Bilan des objectifs et démarche adoptée	27
II L'Approche Morphologique : état de l'art	29
Liste des notations spécifiques au chapitre	33
Introduction	35
II.1 Schématisation de la microstructure initiale	36
II.2 Approche du problème local	38

II.2.1	Description cinématique	38
II.2.2	Relations de passage micro-macro	40
II.3	Principe de résolution	42
II.4	L'A.M. en présence d'endommagement : éléments complémentaires	45
II.4.1	Accès aux champs locaux et à la contrainte homogénéisée	45
II.4.2	Procédure de localisation-homogénéisation complémentaire	47
II.4.3	Description de l'évolution de l'endommagement : approche discrète	48
II.4.3.a	Critère de nucléation	50
II.4.3.b	Critère de fermeture	51
II.4.4	Illustration numérique	52
II.5	Discussion	56
II.5.1	Schématisation de la microstructure initiale	56
II.5.2	Hétérogénéité dans la matrice, accès aux champs locaux	56
II.5.3	Condition de compatibilité et Volume Élémentaire Représentatif	58
II.5.4	Système en contraintes, principe de résolution	58
II.5.5	Travaux d'évaluation antérieurs et poursuite des recherches	60
III	Évaluation de l'A.M. : effets de taille et d'interaction	61
	Liste des notations spécifiques au chapitre	65
	Introduction	67
III.1	Contexte de l'étude	68
III.1.1	Effet de la taille des particules	68
III.1.2	Effet d'interaction entre les particules	69
III.1.3	Bilan et démarche adoptée	72
III.2	Effets de taille et d'interaction entre particules pour des microstructures périodiques	74
III.2.1	Définition de la cellule de base	74
III.2.2	Représentation de la microstructure avec l'A.M.	75
III.2.3	Effet de la taille de particule	76
III.2.4	Effet d'interaction entre les particules	78
III.2.5	Bilan	79
III.3	Effet d'interaction entre particules au sein de microstructures aléatoires monomodales	81
III.3.1	Génération numérique	81
III.3.2	Méthodologie adoptée	81
III.3.3	Résultats	84
III.4	Chronologie des nucléations au sein d'une microstructure aléatoire bimodale	86
III.4.1	Génération numérique	86
III.4.2	Méthodologie adoptée	87
III.4.3	Résultats	90
III.5	Conclusion	93
IV	L'A.M. : couplage endommagement - transformations finies	95
	Liste des notations spécifiques au chapitre	99
	Introduction	101

IV.1 Schématisation de la microstructure initiale	102
IV.2 Approche du problème local	103
IV.2.1 Description cinématique	103
IV.2.1.a Hypothèses et forme du champ de déplacement	103
IV.2.1.b Configurations des interfaces et nouvelle forme du champ de déplacement dans une couche α	104
IV.2.1.c Analyse des différentes configurations d'endommagement et simplifications	106
IV.2.2 Relations de passage micro-macro	109
IV.2.2.a Compatibilité entre mouvement local et mouvement global	109
IV.2.2.b Relations de passage micro-macro sur les contraintes	111
IV.2.3 Principe général de résolution	112
IV.3 Approche complémentaire	115
Relations essentielles à configuration d'endommagement fixé	119
IV.4 Prise en compte de l'évolution de l'endommagement	120
IV.4.1 Définition de la normale actuelle	120
IV.4.2 Critère de nucléation	121
Relations essentielles pour décrire l'évolution de l'endommagement	123
IV.5 Comportement des constituants	124
IV.5.1 Forme de la densité d'énergie de déformation	124
IV.5.2 Expression des contraintes nominales	124
Relations essentielles dans le contexte de l'hyperélasticité pour un comportement de type Néo-Hooke	125
IV.6 Conclusion	126
V Mise en œuvre numérique, validations et discussion	129
Liste des notations spécifiques au chapitre	133
Introduction	135
V.1 Formulation du problème non-linéaire à résoudre	136
V.1.1 Définition des dépendances du problème et stratégie adoptée	136
V.1.2 Écriture de la matrice tangente	138
V.2 Procédure numérique de résolution	141
V.2.1 Architecture générale	141
V.2.2 Stockage des paramètres microstructuraux et calcul des grandeurs aux deux échelles	143
V.2.3 Mise en œuvre de l'algorithme de Newton-Raphson	144
V.2.3.a Implémentation de l'algorithme	144
V.2.3.b Écriture matricielle du système et de la matrice tangente	145
V.2.4 Démarche de validation	146
V.3 Validations sur microstructures périodiques non endommagées	148
V.3.1 Principe de l'étude	148
V.3.2 Description de l'hyperélasticité des phases et chargement appliqué	148

V.3.3	Simulation d'une compression oedométrique sur une microstructure périodique simple	150
V.3.3.a	Présentation de la microstructure	150
V.3.3.b	Résultats	150
V.3.4	Simulation d'une compression oedométrique sur une microstructure périodique complexe	153
V.3.4.a	Présentation de la microstructure périodique complexe	153
V.3.4.b	Résultats	156
V.4	Test du critère de nucléation	159
V.4.1	Évaluation sur microstructures périodiques simples	159
V.4.1.a	Démarche adoptée	159
V.4.1.b	Effet de la taille de particule	160
V.4.1.c	Effet d'interaction entre les particules	161
V.4.1.d	Bilan	161
V.4.2	Évaluation sur une microstructure périodique complexe	162
V.4.2.a	Démarche adoptée	162
V.4.2.b	Résultats	162
V.5	Perspectives à envisager	164
V.5.1	À propos de la résolution numérique du problème couplé	164
V.5.2	Ajout d'un critère de fermeture	166
V.6	Conclusion	167
Conclusion générale		169
A Homogénéisation par les méthodes de moyenne		177
B Cinématique d'une couche α en fonction de l'état de ses interfaces		183
C Principe de l'algorithme de Newton-Raphson		193
D Dérivées tensorielles		197
Listes des figures et des tableaux		201
Références bibliographiques		209

CONVENTIONS UTILISÉES

Typographie

Dans ce manuscrit, nous avons adopté les conventions typographiques suivantes :

- les nombres réels sont tous écrits en police romaine non grasse.
- les vecteurs sont en minuscules, police romaine, surmontés d'une flèche.
- les tenseurs sont en gras, police romaine, quel que soit leur ordre.

Indiçage des éléments tensoriels

Lorsque nous nous placerons dans le cadre des transformations finies, les composantes des tenseurs seront labellisées par l'intermédiaire d'indices majuscules et / ou minuscules, suivant la nature du tenseur considéré :

- les indices des tenseurs de type lagrangien sont des majuscules.
Exemple : le tenseur des déformations de Green-Lagrange E_{IJ} .
- les indices des tenseurs de type eulérien sont des minuscules.
Exemple : le tenseur des contraintes de Cauchy σ_{ij} .
- les indices des tenseurs hybrides sont mixtes, majuscule et minuscule.
Exemple : le tenseur gradient de la transformation f_{iJ} .

Nous aurons recours à une description lagrangienne du mouvement avec pour configuration de référence la configuration initiale non déformée. Les tenseurs considérés seront majoritairement de nature lagrangienne ou hybride.

Lorsque nous nous placerons dans le cadre des petites perturbations (H.P.P.), le gradient de déplacement restant faible, il sera possible de confondre les indices des composantes quelle que soit la nature du tenseur au sens de ce qui a été défini plus haut. Ces indices seront des lettres minuscules.

LISTE DES NOTATIONS

Références aux couches

α	nom générique donné à n'importe quelle couche du matériau.	—
β	nom générique donné à n'importe quelle couche du matériau avec des défauts ouverts à ses interfaces.	—
f	nom générique donné à n'importe quelle couche du matériau avec des défauts fermés à ses interfaces.	—
N^α	nombre de couches α ($\alpha \equiv \beta$ ou f)	entier

Caractéristiques microstructurales (configuration initiale de référence)

h^α	épaisseur de la couche α .	réel
\vec{n}^α	normale à la couche α .	vecteur (3)
\vec{d}^α	vecteur reliant les centroïdes des grains entourant la couche α .	vecteur (3)
A^α	aire projetée de la couche α .	réel
$ V^\alpha $	volume de la couche α .	réel
$ V_0 $	volume total de la microstructure schématisée (grains et couches).	réel
c	concentration volumique de couches.	réel
$I_{i \{i=1,2\}}^\alpha$	nom générique donné à l'interface i de la couche α .	—

Grandeurs cinématiques

$(\vec{b}^{\alpha i})_{\{i=1,2\}}$	saut de déplacement sur l'interface $I_{i \{i=1,2\}}^\alpha$ de la couche α .	vecteur (3)
$\langle \vec{b}^\alpha \rangle_{I_{i \{i=1,2\}}^\alpha}$	saut moyen de déplacement sur l'interface $I_{i \{i=1,2\}}^\alpha$ de la couche α .	vecteur (3)

Évolution de l'endommagement

λ	[<i>Critère de nucléation</i>] demi-longueur caractéristique entre deux points P_1 et P_2 situés de part et d'autre de l'interface I_1^α d'une couche α .	réel
d_{norm}^α	[<i>Critère de nucléation</i>] projection normale de la différence de positions actuelles des points P_1 et P_2 .	réel
d_{critique}	[<i>Critère de nucléation</i>] distance critique reflétant les propriétés d'adhésion de la matrice sur les grains.	réel

Tenseurs identité et opérateurs spécifiques

Id	matrice identité.	tenseur o.2 (3×3)
δ_{ij}	composante du symbole de Kronecker, définie tel que : $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$, $= 0$ sinon.	tenseur o.2
${}^t\mathbf{A}$	transposée du tenseur \mathbf{A} . <i>Exemple</i> : si \mathbf{A} est un tenseur d'ordre 2, ${}^tA_{ij} = A_{ji}$.	tenseur o.2
	<i>Exemple</i> : si \mathbf{A} est un tenseur d'ordre 4, ${}^tA_{ijkl} = A_{klij}$.	tenseur o.4
$\cdot \otimes \cdot$	produit tensoriel. <i>Exemple</i> : entre deux vecteurs \vec{u} et \vec{v} , défini par : $W_{ij} = u_i v_j$.	tenseur o.2
$\cdot : \cdot$	produit doublement contracté. <i>Exemple</i> : entre deux tenseurs d'ordre deux \mathbf{A} et \mathbf{B} , défini par : $C = A_{ij}B_{ji}$.	réel
	<i>Exemple</i> : entre un tenseur d'ordre quatre \mathbf{A} et un tenseur d'ordre deux \mathbf{B} , défini par : $C_{ij} = A_{ijkl}B_{lk}$.	tenseur o.2
$\langle \cdot \rangle_{ V_0 }$	moyenne volumique d'une grandeur scalaire ou tensorielle, définie par : $\frac{1}{ V_0 } \int_{V_0} \cdot dV$.	même type que la grandeur moyennée
$\ \mathbf{A}\ _\infty$	norme infinie (ou norme du maximum) du tenseur \mathbf{A} de dimensions $n \times n$, définie par : $\ \mathbf{A}\ _\infty = \max_{1 \leq i, j \leq n} A_{ij} $.	réel

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Les secteurs de la propulsion spatiale ou encore de la défense utilisent les composites particuliers énergétiques pour mener à bien des actions bien précises. Les propergols solides sont notamment utilisés dans les moteurs de fusées ou de navettes spatiales pour fournir une partie de la poussée nécessaire durant les premières minutes du vol. Dans le secteur militaire, les moteurs à propulsion solide sont utilisés pour les missiles. Étant des matériaux réactifs, les propergols solides doivent être manipulés avec précaution et stockés dans des conditions garantissant leur sécurité. En effet, des fonctionnements non-nominaux peuvent intervenir suite à des sollicitations accidentelles ou malveillantes menant à une réaction pyrotechnique inattendue ne pouvant être arrêtée. Cette problématique est un sujet d'étude d'intérêt majeur pour la D.G.A.¹ et le Centre d'Études de Gramat², qui ont mis en œuvre un programme de recherche à long terme visant à prédire la vulnérabilité des composites particuliers fortement chargés du type propergols solides.

La complexité de la morphologie de ce type de matériaux (taux de charges importants) ainsi que les nombreuses non-linéarités qui caractérisent leur comportement (grandes déformations et visco-élasticité de la matrice, endommagement par décohésion d'interface, *etc.*) rendent la modélisation de leur comportement effectif très complexe. Compte-tenu de ces difficultés et de l'application visée (étude de vulnérabilité), le choix d'une modélisation multi-échelle spécifique fournissant le comportement macroscopique du composite ainsi que l'accès aux champs locaux, données d'entrée de modèles réactifs à greffer en aval, a été réalisé il y a une vingtaine d'années.

Cette méthode d'estimation, inspirée des travaux de Christoffersen [Christoffersen 1983] pour des composites particuliers sains à constituants élastiques linéaires isotropes, a été peu à peu enrichie par des extensions non-linéaires. La viscoélasticité linéaire a d'abord été traitée [Nadot-Martin *et al.* 2003] avant que la méthodologie ne soit transposée au cadre des transformations finies [Guiot *et al.* 2006, Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. L'endommagement par décohésion d'interfaces a ensuite été introduit dans un contexte élastique linéaire et viscoélastique linéaire [Nadot *et al.* 2006] pour un état d'endommagement fixé et un nombre donné de défauts d'interfaces ouverts et / ou fermés. Enfin, la notion d'évolution de l'endommagement pour des constituants élastiques linéaires isotropes a été traitée, et les modifications d'état des défauts en tant qu'une succession d'événements (nucléations, fermetures, *etc.*) a permis de restituer le comportement unilatéral [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. Cette méthodologie, baptisée en 2006 "Approche Morphologique" (A.M.), adopte une description explicite de la morphologie granulaire et un cadre cinématique simplificateur lui conférant un caractère direct. La simplicité d'utilisation de l'approche permet d'envisager l'introduction simultanée de plusieurs non-linéarités physiques et / ou géométriques, tout en bénéficiant de temps de calculs intéressants par rapport aux méthodes de calculs éléments finis en champs complets.

Il est important, au travers d'un modèle de comportement, de pouvoir non seulement prendre en compte de manière précise les effets d'une configuration d'endommagement donnée, mais également de savoir saisir les différentes étapes de la dégradation au sein d'une microstructure ainsi que ses effets aux différentes échelles. Les présents travaux visent à évaluer dans un premier temps

1. Direction Générale pour l'Armement.

2. Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, Centre d'Études de Gramat, Gramat, France.

l'A.M. dans sa version en petites déformations avec évolution de l'endommagement [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] vis-à-vis des effets de taille et d'interaction entre particules observés au sein des matériaux étudiés. Puis, nous nous attachons à coupler deux non-linéarités préalablement traitées séparément : les transformations finies et l'endommagement. L'évolution de l'endommagement est également envisagée et une première évaluation de l'implémentation du modèle est proposée.

La synthèse de ce travail s'articule autour de cinq chapitres. Le premier permet de positionner de manière plus précise le contexte de l'étude en introduisant les enjeux liés à l'utilisation de la classe de matériaux étudiée. Après avoir présenté de manière succincte les caractéristiques morphologiques et mécaniques de ce type de matériaux, nous justifions le choix d'une modélisation de type multi-échelle. Les principales difficultés liées à l'homogénéisation des milieux non-linéaires sont ensuite mises en avant, afin de saisir les défis essentiels à relever lors de l'étude qui suit. Puis, la présentation de différentes familles de modélisation appliquées aux propegols solides nous permet d'aborder le choix de l'Approche Morphologique au regard des exigences évoquées plus haut.

Le second chapitre est consacré à la présentation parallèle de l'Approche Morphologique dans deux versions issues des travaux antérieurs : l'A.M. en transformations finies pour le matériau sain [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] et l'A.M. en élasticité linéaire isotrope pour le matériau endommagé [Nadot *et al.* 2006, Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. Les principales étapes de la formulation du problème de localisation-homogénéisation y sont synthétisées. L'évolution d'état et de configuration de l'endommagement au sein de la microstructure (apparition de défauts, fermeture de défauts) [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] est également présentée. Enfin, l'approche est positionnée vis-à-vis des autres méthodes d'estimation et ses aptitudes à relever les enjeux spécifiques à l'étude des composites énergétiques, évoqués au chapitre I, sont analysées.

Au chapitre III, nous explorons les capacités de l'A.M. à reproduire des phénomènes couramment observés au sein des composites particuliers fortement chargés. À partir de la version en petites déformations avec prise en compte de l'évolution de l'endommagement [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] présentée au chapitre précédent, nous tentons d'observer un effet de la taille de particule et d'interaction entre particules sur la chronologie des décohésions. Nous réalisons une étude sur des microstructures générées numériquement de complexité croissante (périodiques et aléatoires). Les résultats légitiment la suite des travaux.

Le chapitre IV fait l'objet du couplage entre les deux non-linéarités traitées séparément dans les versions de l'A.M. présentées au chapitre II. Ainsi, l'A.M. est étendue en reprenant l'ensemble des développements analytiques à la source afin de coupler, au sein de la modélisation, les transformations finies et l'endommagement d'interfaces. Les ingrédients principaux au départ de l'A.M. validés en transformations finies dans le cas sain par l'intermédiaire de simulations éléments finis en champs complets [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] sont conservés. L'extension est tout d'abord réalisée pour une configuration d'endommagement fixée avant d'aborder la formulation d'un critère de nucléation de défauts aux interfaces particules / matrice.

Le cinquième et dernier chapitre est quant à lui consacré à la description de la mise en œuvre numérique des développements analytiques présentés au chapitre précédent. Le choix de l'algorithme de résolution et du langage de programmation est justifié. La procédure numérique de résolution est présentée dans le cas général, de même que tous les outils qui lui sont nécessaires. Enfin, les programmes réalisés sont tout d'abord évalués dans le cas sain au regard des résultats antérieurs de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008], puis en activant le critère de nucléation de défauts afin d'appréhender les aptitudes de l'A.M. à restituer les effets de taille et d'interaction étudiés au chapitre III, cette fois dans le cadre plus réaliste des transformations finies. Des perspectives d'amélioration pour faire face aux verrous restant à lever sont enfin formulés.

CHAPITRE

I

POSITIONNEMENT DES TRAVAUX

Plan du chapitre

Introduction	11
I.1 Contexte de l'étude	12
I.1.1 Problématique	12
I.1.2 Description de la classe de matériaux visée et de son comportement	12
I.1.3 Historique et motivation générale des travaux	16
I.2 L'homogénéisation non-linéaire : concepts et enjeux majeurs	18
I.2.1 Principe général de résolution	18
I.2.2 Méthodes de linéarisation	19
I.2.3 Prise en compte de l'hétérogénéité intraphase	19
I.2.4 Enjeux spécifiques en viscoélasticité : traitement direct et mémoire longue .	21
I.3 Les composites énergétiques sous l'angle de la modélisation	23
I.3.1 Approches macroscopiques	23
I.3.2 Approches en champs complets	24
I.3.3 Approches en champs moyens	25
I.4 Bilan des objectifs et démarche adoptée	27

Les travaux exposés dans ce manuscrit traitent de la modélisation de composites particuliers fortement chargés du type propergols solides. Ces matériaux présentent une certaine complexité morphologique, de forts taux de charges ainsi qu'un comportement fortement non-linéaire (grandes déformations de la matrice, viscosité, endommagement par décohésion charges / matrice, etc.). Dans ce contexte, le but du chapitre est de formuler les enjeux de l'étude et ses objectifs.

Ainsi, la classe de matériaux énergétiques envisagée est présentée succinctement (paragraphe I.1.2), mettant en avant les phénomènes principaux nécessaires à la compréhension de leur comportement mécanique. La nécessité de préserver la sécurité et, par conséquent, de prédire la vulnérabilité des composites énergétiques est explicitée et les besoins en termes de modélisation y sont analysés (paragraphe I.1.1 et I.1.3). Une étude bibliographique permet de présenter les différentes techniques d'homogénéisation dans un contexte non-linéaire (paragraphe I.2). La modélisation du comportement mécanique de la classe de matériaux étudiée est ensuite abordée (paragraphe I.3), avant de récapituler les objectifs du programme de recherche, de justifier et de décrire la démarche adoptée (paragraphe I.4).

I.1 Contexte de l'étude

I.1.1 Problématique

La vulnérabilité des composites énergétiques (propergols solides et explosifs) à des sollicitations accidentelles ou malveillantes est une thématique d'intérêt majeur dans le secteur de la propulsion spatiale ou de la défense. C'est pourquoi le Centre d'Études de Gramat¹ a mis en place une collaboration avec le Département de Physique et Mécanique des Matériaux (D.P.M.M.) de l'Institut Pprime² depuis maintenant une vingtaine d'années.

La manipulation ou le stockage de composites énergétiques sont soumis à des règles de sécurité strictes. En effet, suite à une erreur humaine, un accident ou une sollicitation malveillante, ces matériaux peuvent se retrouver endommagés. Or, l'apparition de défauts au sein des matériaux de type propergols solides augmente leur vulnérabilité [Cornwell et Schapery 1975]. En effet, les défauts sont le site privilégié de réactions chimiques pouvant mener à l'initiation et à la propagation d'une combustion au sein du matériau : la présence de défauts d'interfaces augmente notamment la surface spécifique offerte à une flamme, ce qui accroît la réactivité de manière considérable. Richter *et al.* [Richter *et al.* 1989] ont établi qu'un accroissement de 1% du volume de vides au sein d'un composite énergétique doublait sa sensibilité aux chocs. De telles réactions chimiques sont par ailleurs favorisées par l'échauffement local induit par l'ensemble des processus dissipatifs, non seulement l'endommagement mais aussi la viscoélasticité de la matrice.

Le paragraphe qui suit s'attache à exposer les principales spécificités de la classe de matériaux étudiée, concernant leur morphologie et leur comportement mécanique.

I.1.2 Description de la classe de matériaux visée et de son comportement

Le type de composite étudié est un composite particulière fortement chargé de type propergol solide. Les propergols solides sont principalement utilisés dans le secteur de la propulsion spatiale. Le bloc de propergol est coulé et constitue une partie du moteur d'une fusée. Sa combustion permet la production de gaz chauds engendrant la poussée nécessaire à la propulsion.

Dans l'état solide, ces matériaux sont constitués d'une matrice élastomère (liant) ainsi que de particules réactives en forte proportion volumique (de 60% à 80%) aléatoirement réparties (figure I.1). Plusieurs additifs tels que des plastifiants, des catalyseurs de combustion, des antioxydants et des agents de surface et d'adhésion particules / matrice sont ajoutés à la composition du liant. Les taux de charges sont importants mais restent inférieurs à ceux des explosifs comprimés, qui constituent une classe de matériaux énergétiques particulière. Nous ne traiterons pas de ces matériaux bien spécifiques dans cette étude.

Les particules des composites énergétiques considérés sont quasi-rigides et leur nature peut être variée : il peut s'agir de cristaux explosifs ou d'un mélange de cristaux oxydo-réducteurs (perchlorate d'ammonium - aluminium par exemple). Plus le taux de charges est important, plus la répartition granulométrique est étalée : des particules de quelques micromètres viennent combler les vides

1. Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, Centre d'Études de Gramat, Gramat, France.

2. Département de Physique et Mécanique des Matériaux, Axe Endommagement et Durabilité, Institut Pprime - CNRS - ENSMA - Université de Poitiers, UPR 3346, Futuroscope Chasseneuil Cedex, France. *Anciennement* : Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux (L.M.P.M.).

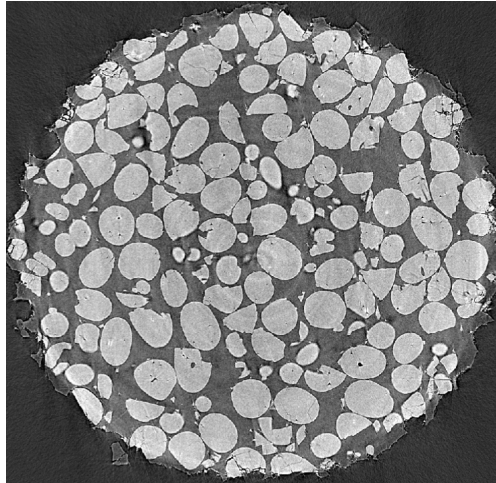
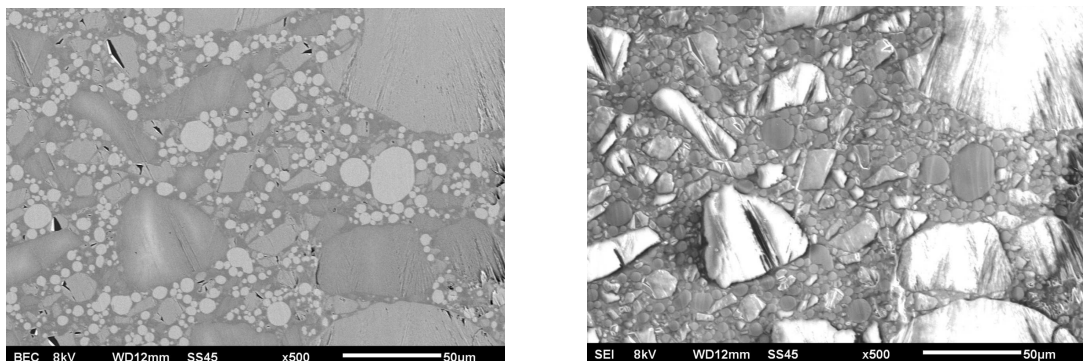


Figure I.1 – Propergol solide observé par microtomographie à rayons X [Gillibert et Jeulin 2013].

entre les particules de taille plus importante (quelques centaines de micromètres) afin de fournir un remplissage optimisé de la microstructure.

La figure I.2 illustre la répartition de charges de perchlorate d'ammonium et d'aluminium dans un propergol solide à liant inerte [Azoug 2010]. En figure I.2(a), il est possible d'observer en gris clair les particules d'aluminium et en gris foncé les charges de perchlorate d'ammonium. La figure I.2(b) permet quant à elle d'observer la topologie de ce type de matériau. La fraction massique totale de charges au sein de cet échantillon est de 88% en masse et Azoug a relevé plusieurs granulométries, allant de 5 à 500 μm .



(a) Nature des charges.

(b) Topologie.

Figure I.2 – Observations au microscope électronique à balayage d'un propergol solide à liant inerte [Azoug 2010].

Le liant a un comportement de type visco-hyperélastique à la température ambiante [François 1996]. Sa nature élastomère rend le composite capable d'importantes déformations ainsi que de variations de volume importantes au sein du composite en raison du confinement dû aux forts taux de charges.

Mateille a, lors de ses travaux, tenté de caractériser le comportement du liant d'un propergol "modèle" fabriqué par l'ONERA³, de type polybutadiène (PBHT) [Mateille 2010]. Ainsi, lors

3. Office National d'Études et de Recherches Aéronautiques.

d'essais de traction / compression uniaxiaux, il a montré un effet plutôt marqué de la viscosité, le module d'Young apparent à l'origine évoluant sensiblement avec la vitesse de déformation (figure I.3). Le caractère hyperélastique du liant est particulièrement visible grâce à la non-linéarité des courbes de compression.

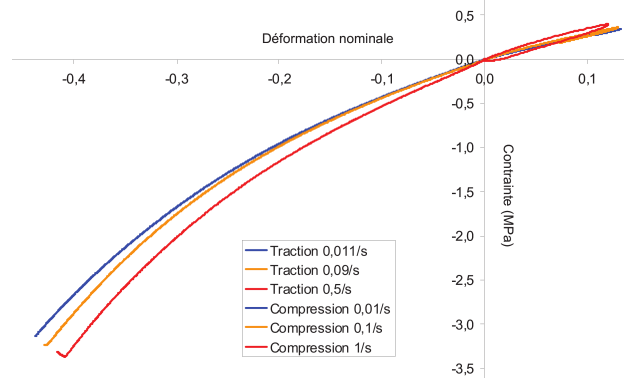


Figure I.3 – Essais de traction / compression uniaxiaux à vitesses variables sur le liant PBHT d'un propergol "modèle" fabriqué par l'ONERA [Mateille 2010].

La figure I.4 issue des travaux de Azoug [Azoug 2010] montre une très forte dépendance du composite à la vitesse de sollicitation et à la température lorsqu'il est soumis à une traction uniaxiale.

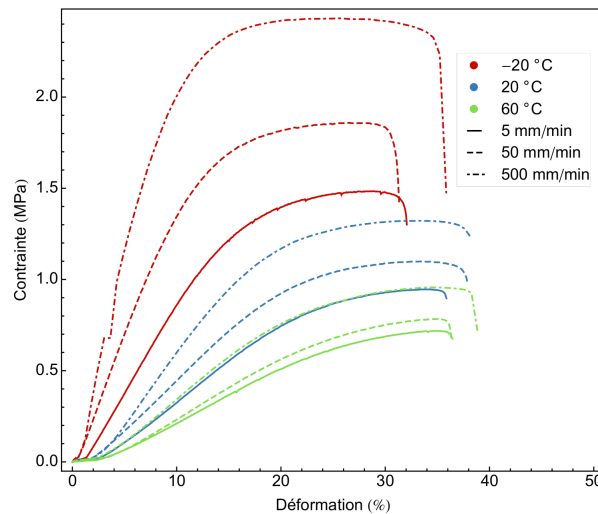


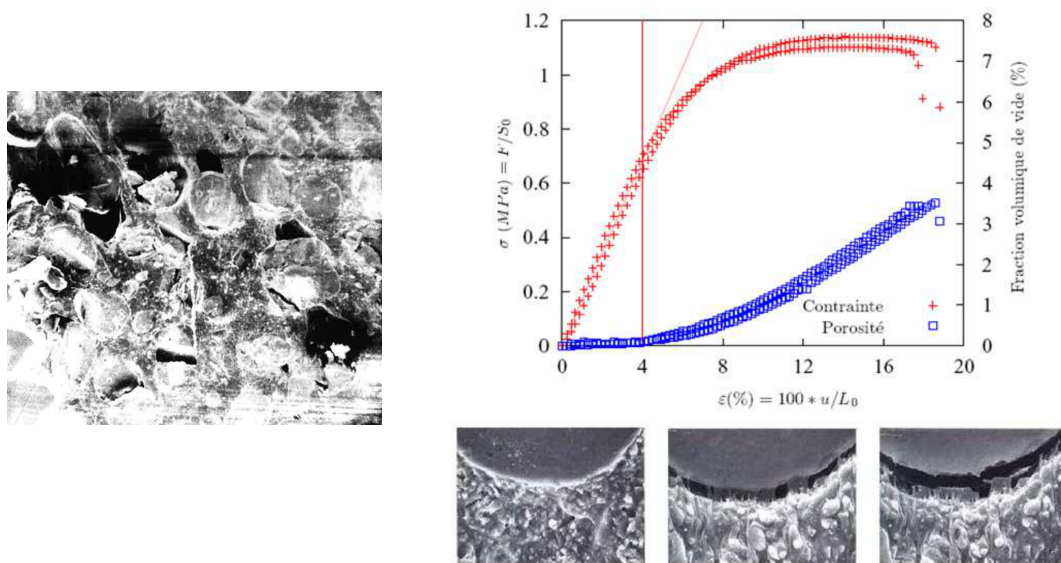
Figure I.4 – Essais de traction uniaxiale sur un propergol à différentes vitesses et températures [Azoug 2010].

La nature du liant confère aux composites étudiés un comportement similaire [Kakavas 2014], bien que l'ajout de charges en modifie les propriétés. À faibles vitesses de sollicitation, le liant, très déformable, accomode la déformation macroscopique tandis que les particules restent très rigides. Lorsque le liant n'est plus en mesure d'accomoder la déformation macroscopique, les interfaces entre les particules et la matrice cèdent [Tao *et al.* 2013] : l'endommagement observé au sein du composite est alors un endommagement par décohésion (figure I.5(a)).

Funfschilling [Funfschilling 2007] a suivi l'évolution de l'endommagement par décohésion au sein d'un propergol solide par une observation de la microstructure associée à une mesure de l'évolution

de la porosité du matériau (figure I.5(b)). La décohésion a été essentiellement observée en mode d'ouverture (mode I) de manière systématiquement orientée par rapport au trajet de chargement (perpendiculairement à l'axe de sollicitation en traction et compression uniaxiales). Les mesures de porosité ainsi que les observations microscopiques peuvent être mises en regard de l'évolution de la contrainte lors d'un essai de traction uniaxiale, afin d'analyser le phénomène d'endommagement au sein du propergol. Ainsi, il est possible de distinguer trois phases :

- Aux faibles déformations, le comportement macroscopique du matériau peut être défini comme viscoélastique linéaire. La fraction volumique de vides est quasi-nulle, le matériau est quasi-incompressible.
- Puis, la contrainte axiale et la porosité évoluent de manière non-linéaire. Des défauts d'interface apparaissent progressivement.
- Aux déformations plus importantes, la contrainte n'évolue presque plus. L'évolution de la fraction volumique de vides, qui est quasi-linéaire, est plutôt attribuée à la croissance des défauts déjà existants. Il est cependant difficile de distinguer, avec cette méthode, la croissance de vides de leur création.



(a) Cavités aux interfaces liant / charges au sein d'un propergol solide sous sollicitation quasi-statique [Cornwell et Schapery 1975].

(b) Mesure de la variation de volume durant une traction uniaxiale [Funfschilling 2007] associée à des observations au microscope électronique à balayage de la nucléation et de la croissance d'un vide au cours d'une traction uniaxiale lente (observations de la Société Nationale des Poudres et des Explosifs (SNPE) tirées de [Funfschilling 2007]).

Figure I.5 – Endommagement d'interface au sein de propergols solides.

À grande vitesse de sollicitation, le liant devient vitreux. Ce sont donc les particules qui sont fortement sollicitées. Ceci se caractérise par une fissuration intragranulaire voire une fragmentation des particules [Trumel 1996, Mateille 2010].

Les caractéristiques du comportement précédemment décrites concernent uniquement des sollicitations faiblement confinées. Or, la pression joue un rôle fondamental sur les deux caractéristiques

du comportement des composites énergétiques : leur viscoélasticité mais aussi leur comportement granulaire. D'une part, l'augmentation de pression contribue à la rigidification du liant et, de fait, du composite. D'autre part, la superposition d'une pression de confinement à un chargement uniaxial provoque une transition de type fragile-ductile des particules. Ainsi, une pression, même modérée, inhibe partiellement voire totalement le mécanisme de décohésion observé à basse vitesse (voir par exemple [Ninous *et al.* 1993, Park et Schapery 1997]). Si la pression est suffisamment forte, le processus de décohésion est remplacé par la plastification des particules. De même, à hautes vitesses, les phénomènes de plasticité des particules augmentent avec le niveau de triaxialité, et précèdent ou se superposent aux processus de microfissuration ou de fragmentation des particules induits par la vitesse de sollicitation.

Enfin, bien que tous les composites énergétiques se comportent qualitativement de façon identique selon les mécanismes précédemment évoqués, il existe néanmoins des différences quantitatives dues aux diverses compositions existantes. Les paramètres *a priori* les plus influents sont la nature du liant élastomère, la fraction volumique des charges, et enfin leur taille, qui influence fortement la décohésion, cette dernière touchant préférentiellement les charges les plus grosses quelle que soit la qualité de l'adhésion.

I.1.3 Historique et motivation générale des travaux

La prévision des risques d'une réaction pyrotechnique inattendue sous l'effet d'une sollicitation accidentelle ou malveillante repose en priorité sur l'évaluation de la probabilité d'initiation. C'est cette problématique qui a constitué la motivation de la thèse d'Hervé Trumel [Trumel 1996], qui fut la première thèse du programme de collaboration entre le Centre d'Études de Gramat et le Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux de l'ENSMA, devenu depuis une composante de l'Institut Pprime⁴. Trumel a alors développé un modèle de formulation macroscopique en vue de simuler un essai de pénétration d'un projectile conique animé d'une vitesse d'impact initiale de 1000 m/s dans un composite énergétique. Il s'agissait de quantifier l'échauffement global résultant de la dissipation mécanique afin de se prononcer sur les risques d'initiation d'une combustion au sein du matériau. Suite à une campagne expérimentale ciblée sur l'IEX3, un équivalent inerte de l'Octorane, un modèle thermodynamique tridimensionnel de formulation lagrangienne en transformations finies a été mis en place. Ce modèle [Trumel *et al.* 2001a, Trumel *et al.* 2001b] inclut les phénomènes dissipatifs suivants : viscoélasticité, plasticité, écrouissage, compaction et endommagement. Les simulations révèlent la présence de zones très fortement endommagées, mises en évidence par leurs conséquences macroscopiques, notamment par la dissipation correspondante. L'échauffement global par dissipation mécanique est de l'ordre de 40°C, ce qui permet d'estimer (sans bien sûr pouvoir le quantifier) l'échauffement local correspondant à environ 200°C. Une telle valeur, proche de la température d'inflammation de la plupart des cristaux énergétiques, rend l'allumage d'une combustion possible. Cette modélisation présente cependant plusieurs limites :

- le modèle, de nature macroscopique, n'est adapté qu'au composite considéré et son application à un autre composite, même de morphologie voisine, nécessite une nouvelle campagne d'essais de caractérisation et d'identification ;

4. Département de Physique et Mécanique des Matériaux, Axe Endommagement et Durabilité, Institut Pprime - CNRS - ENSMA - Université de Poitiers, UPR 3346, Futuroscope Chasseneuil Cedex, France.

- le modèle ne permet pas de quantifier la dissipation locale, ni de décrire l'évolution microstructurale. Ainsi, si le modèle de Trumel est suffisant pour quantifier l'échauffement global et renseigner par extrapolation sur les risques d'initiation, il n'est en revanche plus suffisant si l'objectif devient la compréhension ou la prévision des mécanismes d'initiation, ou encore l'estimation de la vitesse de combustion. En effet, ces deux points exigent l'accès à la dissipation locale et à la surface spécifique offerte à une flamme, c'est-à-dire à l'état microstructural d'endommagement.

C'est pourquoi une modélisation mécanique de type multi-échelle a ensuite été envisagée afin de se greffer en amont des modèles réactifs permettant d'estimer les risques de fonctionnement non-nominal des composites énergétiques (initiation et cinétique de propagation). Ainsi, à partir de la description de la microstructure, ce modèle permettrait l'accès au comportement macroscopique ainsi qu'à une estimation des champs locaux et des caractéristiques morphologiques de l'endommagement. Les informations obtenues à l'échelle locale seraient par la suite introduites comme données d'entrée de modèles réactifs développés en parallèle au Centre d'Études de Gramat.

Étant donné la complexité du comportement des matériaux considérés, une telle modélisation multi-échelles ne pouvait être abordée que de manière progressive. Aussi les recherches ont-elles été d'emblée restreintes à la description du comportement sous sollicitations quasi-statiques isothermes faiblement confinées.

Même dans ce cadre plus restreint, l'enjeu scientifique pour la classe de matériaux visés revêt plusieurs aspects délicats. Sans même parler d'endommagement, le seul examen de la littérature consacrée à l'homogénéisation des milieux non-linéaires (non endommagés) suffit à en mesurer l'étendue. Il s'agit du propos du prochain paragraphe.

I.2 L'homogénéisation non-linéaire : concepts et enjeux majeurs

Ce paragraphe se focalise sur l'homogénéisation par les méthodes de moyenne, dont le principe est rappelé en Annexe A, dans le cadre de milieux non-linéaires. Ainsi, le principe de résolution est rappelé et quelques techniques de linéarisation sont présentées. Les enjeux majeurs à prendre en compte sont ensuite discutés.

I.2.1 Principe général de résolution

L'homogénéisation des milieux non-linéaires s'appuie le plus souvent sur une reformulation du problème non-linéaire initial sous la forme d'un problème linéaire que l'on sait résoudre. La notion de "composite linéaire de comparaison" (C.L.C.) a été introduite pour la première fois par Ponte-Castañeda [Ponte-Castañeda 1991]. Le composite non-linéaire étudié est figé dans un état de déformation donné et des propriétés linéarisées sont affectées à chaque point.

Dans le cas de conditions de déformations homogènes au contour et d'un comportement non-linéaire des phases, le système à résoudre se transforme donc de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \boldsymbol{\sigma}(\vec{y}) = \mathbf{C}(\boldsymbol{\epsilon}(\vec{y})) : \boldsymbol{\epsilon}(\vec{y}) & \text{dans } V \\ \vec{\text{div}}(\boldsymbol{\sigma}(\vec{y})) = \vec{0} & \text{dans } V \\ \boldsymbol{\epsilon} = \nabla_{\text{sym}} \vec{u} & \text{dans } V \\ \vec{u} = \mathbf{E} \cdot \vec{y} & \text{sur } \partial V \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{ll} \boldsymbol{\sigma}(\vec{y}) = \mathbf{C}^{\text{lin}} : \boldsymbol{\epsilon}(\vec{y}) \quad (+\boldsymbol{\tau}^r) & \text{dans } V \\ \vec{\text{div}}(\boldsymbol{\sigma}(\vec{y})) = \vec{0} & \text{dans } V \\ \boldsymbol{\epsilon} = \nabla_{\text{sym}} \vec{u} & \text{dans } V \\ \vec{u} = \mathbf{E} \cdot \vec{y} & \text{sur } \partial V \\ \mathbf{C}^{\text{lin}} = \mathbf{C}^{\text{lin}}(\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}) & \\ (\boldsymbol{\tau}^r = \boldsymbol{\tau}^r(\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}})) & \end{array} \right. \quad (\text{I.1})$$

où : \mathbf{C} est le tenseur de rigidité dépendant de la déformation en chaque point matériel ;

\mathbf{C}^{lin} est un tenseur de rigidité linéarisé ;

$\boldsymbol{\tau}^r$ est une précontrainte éventuelle dans la phase r ;

$\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}$ est une déformation de référence qui sera décrite en aval.

Les quatre premières équations du système (I.1)₂ constituent un problème d'homogénéisation linéaire qui peut-être résolu par l'un des nombreux schémas d'homogénéisation déjà existants : bornes de Hashin-Shtrikman, schéma auto-cohérent, schéma de Mori-Tanaka, *etc.* La non-linéarité des lois de comportement locales de chaque phase est prise en compte uniquement par l'intermédiaire de la dernière relation du système (I.1)₂. Elle constitue une équation complémentaire caractérisant le tenseur de rigidité qui définit le problème linéarisé.

Un autre type d'approche consiste à utiliser des principes variationnels afin d'accéder au comportement effectif [Ponte-Castañeda 1991]. Ainsi, en premier lieu, le comportement des phases n'est plus traduit par l'intermédiaire d'une relation contrainte - déformation impliquant le tenseur de rigidité : la contrainte dérive du potentiel. Le problème à résoudre correspond alors à un problème de minimisation de l'énergie potentielle. Le comportement homogénéisé du milieu hétérogène non-linéaire est ainsi défini à partir du potentiel effectif, valeur du minimum, obtenu par l'intermédiaire d'approches variationnelles. La linéarisation est réalisée sur le potentiel au lieu d'être réalisée sur

la relation contrainte / déformation comme décrit dans le système (I.1).

I.2.2 Méthodes de linéarisation

Diverses approches permettent de linéariser la loi de comportement locale d'une phase non-linéaire. La linéarisation de la loi de comportement via le tenseur de rigidité \mathbf{C}^{lin} s'opère en général autour d'une valeur de référence, notée plus haut $\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}$.

Ainsi, la formulation tangente [Hutchinson 1976] issue d'une approche incrémentale [Hill 1965], propose de définir les modules linéarisés à partir des modules tangents de chaque phase, évalués en la déformation moyenne de la phase considérée. Cette procédure se trouvant souvent en violation de la borne supérieure de Hashin-Shtrikman, de nouvelles formulations ont alors été proposées. La formulation sécante introduite par Berveiller et Zaoui [Berveiller et Zaoui 1979] suggère l'utilisation de modules sécants par phase. Masson *et al.* [Masson *et al.* 2000] ont quant à eux introduit une description affine : la linéarisation des lois constitutives locales s'effectue sur le même principe que la méthode tangente, mais un terme de précontrainte additionnel $\boldsymbol{\tau}^r$ est introduit au sein de la phase r . Le problème non-linéaire initial est ainsi transformé en un problème thermo-élastique. Les estimations des méthodes sécante et affine sont évaluées en la valeur moyenne du champ de déformation pour chaque phase ($\boldsymbol{\epsilon}^{\text{ref}}$).

L'approche variationnelle du second ordre proposée par Ponte-Castañeda [Ponte-Castañeda 1996] consiste à approcher le potentiel thermodynamique de la phase r par son développement à l'ordre deux en série de Taylor en faisant intervenir les modules tangents calculés aux déformations moyennes par phase. Cette méthode a entre autres été généralisée en transformations finies [Ponte-Castañeda et Tiberio 2000]. Elle a également été étendue par Lahellec et Suquet [Lahellec et Suquet 2004] afin de faire correspondre les estimations du comportement effectif à celles obtenues par la méthode affine, tout en conservant les qualités de la méthode du second ordre de Ponte-Castañeda. Lahellec *et al.* [Lahellec *et al.* 2004] ont également travaillé au prolongement des approches de Ponte-Castañeda [Ponte-Castañeda 1996, Ponte-Castañeda et Tiberio 2000] : l'approche variationnelle du second-ordre a été envisagée dans le cas de composites hyperélastiques périodiques et incompressibles.

Les différentes méthodes d'homogénéisation d'un milieu non-linéaire se distinguent à deux niveaux : au travers de la procédure de linéarisation retenue (définition des modules linéarisés et des déformations de référence auxquelles ils sont évalués), et bien sûr au travers du schéma d'homogénéisation linéaire choisi pour résoudre le problème linéarisé.

I.2.3 Prise en compte de l'hétérogénéité intraphase

Les méthodes précitées ne considèrent que le "premier moment", c'est-à-dire la déformation moyenne par phase. Ces approches dites "classiques" ne prennent ainsi en compte que les fluctuations des champs d'une phase à une autre (fluctuations interphases). La non-linéarité du milieu rend cependant l'influence de l'hétérogénéité intraphase (variations des champs au sein d'une même phase) non négligeable. La seule utilisation d'une grandeur moyenne par phase ne paraît donc plus suffisante pour obtenir un comportement effectif correct. En effet, quelle que soit la procédure de linéarisation utilisée, les estimations des propriétés macroscopiques sont souvent trop raides pouvant

aller jusqu'à violer une borne supérieure [Gilormini 1996, Bornert et Ponte-Castañeda 1998]. Des indicateurs ont donc été peu à peu introduits afin de prendre en compte au moins partiellement les fluctuations intraphases des champs locaux [Bornert *et al.* 2001, Moulinec et Suquet 2004].

Dans une première mesure et en plus d'offrir une prise en compte plus fine de la morphologie microstructurale, l'approche par "motifs morphologiques représentatifs" [Stolz et Zaoui 1991, Bornert *et al.* 1996, Bornert 2003] permet de répondre à cet enjeu via un enrichissement de la notion de phase. En effet, la définition de motifs particuliers permet d'affecter à une seule et même phase physique des déformations différentes. Par exemple, il est possible de décrire un matériau à renforts comme un assemblage de sphères composites, chacune constituée d'un grain entouré de plusieurs couches de matrice auxquelles des modules différents sont affectés [Bornert 2003]. Ceci permet notamment de traduire le fait que les interactions entre renforts et matrice s'estompent au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'interface charge/matrice. La mise en œuvre de ce type d'approche dans un cadre non-linéaire reste néanmoins complexe.

Les fluctuations intraphases peuvent également être évaluées grâce à l'utilisation des moments d'ordre supérieur des champs locaux. En effet, de nombreux auteurs considèrent le "moment d'ordre deux" par phase, $\langle \epsilon \otimes \epsilon \rangle_r$, afin de définir la déformation de référence ϵ^{ref} en laquelle le tenseur de rigidité linéarisé est évalué. Ainsi, par exemple, nous pouvons citer [Suquet 1995, Moulinec et Suquet 2003] pour la méthode sécante, [Brenner *et al.* 2001, Brenner et Masson 2005] pour la méthode affine ou encore [Ponte-Castañeda 2002a, Ponte-Castañeda 2002b, Idiart et Ponte-Castañeda 2003, Idiart *et al.* 2006] pour l'approche du second ordre.

Les termes "diagonaux" du second moment renseignent sur l'hétérogénéité locale du champ de déformation dans la phase r . En apportant une indication supplémentaire par rapport à la déformation moyenne par phase (le premier moment), ce tenseur permet donc d'assouplir les estimations. Une analyse numérique détaillée des premier et second moments des champs de déformation estimés par les méthodes sécantes classiques réalisée par Moulinec et Suquet [Moulinec et Suquet 2003] a permis d'établir un lien entre la rigidité excessive des modules macroscopiques obtenus via ces approches et la sous-estimation des moments d'ordre deux. Pourtant, il peut parfois arriver que l'assouplissement résultant de la prise en compte de fluctuations intraphases soit trop important. Rezik *et al.* [Rezik *et al.* 2007] ont en effet observé, sur un composite particulière périodique à constituants non linéaires, que les modules macroscopiques estimés par la procédure du second ordre modifiée sont plus souples que ceux donnés par la solution de référence, via un calcul éléments finis. D'autre part, les auteurs observent que les différentes techniques de linéarisation peuvent parfois conduire à des résultats proches, si bien que l'une ou l'autre ne peut pas être clairement privilégiée pour résoudre un problème donné.

Ainsi, de nombreuses méthodes de linéarisation sont disponibles mais leurs atouts respectifs ne sont pas immédiatement visibles par un utilisateur inexpérimenté. Ces méthodes ont été évaluées par différents auteurs [Moulinec et Suquet 2003, Idiart *et al.* 2006, Rezik *et al.* 2005, Rezik *et al.* 2007, Rezik *et al.* 2012].

Enfin, dans une toute autre catégorie, la N.T.F.A. (Non-uniform Transformation Field Analysis) [Michel et Suquet 2003, Michel et Suquet 2004, Roussette *et al.* 2009, Fritzen et Böhlke 2013]

permet elle aussi de prendre en compte des hétérogénéités intraphases dans les estimations des propriétés macroscopiques de composites à constituants non-linéaires. Cette approche s'appuie sur une décomposition du Volume Élémentaire Représentatif (V.E.R.) en plusieurs sous-volumes dans lesquels le champ local de déformation anélastique est non-uniforme. Une évolution apparaît donc par rapport à la T.F.A. (Transformation Field Analysis) proposée par Dvorak [Dvorak 1992] et étendue par exemple dans [Kruch et Chaboche 2011], dans laquelle les champs de transformation étaient uniformes par morceaux (c'est-à-dire uniformes par phase ou éventuellement selon un découpage des phases en plusieurs sous-domaines). Cette méthodologie semble efficace pour différents comportements non-linéaires, présente un caractère direct (pas de linéarisation) et permet un retour aux champs locaux (et non simplement l'accès aux premier et second moments par phase). Cependant, la méthode requiert l'utilisation de simulations en champs complets pour le calcul des modes anélastiques, ce qui implique qu'elle est coûteuse numériquement.

I.2.4 Enjeux spécifiques en viscoélasticité : traitement direct et mémoire longue

Dans des milieux à constituants viscoélastiques, le couplage entre viscosité et élasticité génère à l'échelle locale des interactions complexes, retardées, appelées "effet mémoire longue" par [Suquet 1987] et ayant une conséquence notable à l'échelle macroscopique. Suquet démontre analytiquement que la loi homogénéisée d'un agrégat de constituants Maxwéliens n'est pas de type Maxwell mais intègre un terme supplémentaire issu de la nature spatio-temporelle des interactions locales et traduisant précisément la mémoire longue précitée. Quelques années plus tard, l'approche héréditaire de Rougier *et al.* [Rougier *et al.* 1994] confirme d'une autre manière cette caractéristique. La prise en compte de l'effet mémoire longue constitue un défi essentiel en homogénéisation des milieux dépendant du temps que bon nombre de modèles anciens [Weng 1981, Nemat-Nasser et Obata 1986, Harren 1991] ou même récents ne parviennent pas à relever, ou sinon de façon détournée par l'ajout d'une "back stress" *a posteriori* du processus d'homogénéisation (voir par exemple Xu *et al.* [Xu *et al.* 2008] pour les propergols). Cette déficience, reconnue au début des années 90 par Zaoui et Raphanel [Zaoui et Raphanel 1993], a depuis suscité des efforts notables au sein de la communauté micromécanicienne [Paquin *et al.* 1999, Masson et Zaoui 1999, Beurthey et Zaoui 2000]. Nous retiendrons que la description de la nature véritablement spatio-temporelle des interactions locales et de leur manifestation macroscopique (effet mémoire longue) constitue un critère incontournable pour évaluer la pertinence d'une transition d'échelle en viscoélasticité.

Un autre enjeu réside dans le principe même de résolution du problème de localisation - homogénéisation. En effet, dans la plupart des cas, le principe de correspondance est utilisé pour transformer un problème hétérogène viscoélastique en un problème élastique symbolique. Ce dernier est résolu par une méthode d'homogénéisation linéaire dans l'espace de Laplace. Le retour dans l'espace réel s'effectue par inversion des transformées de Laplace-Carson. Dans le cas de constituants viscoélastiques non-linéaires, le problème est d'abord linéarisé (voir paragraphe I.2.1), puis la procédure décrite plus haut est mise en œuvre pour le problème linéarisé. La complexité du couplage espace - temps dans le milieu hétérogène rend une telle approche extrêmement ardue, notamment au niveau du retour à l'espace - temps réel. Le calcul de l'inversion des transformées de Laplace-Carson est souvent très coûteux et implique un recours à des approximations ou la mise en place de procédures spécifiques qui font encore l'objet de nombreux travaux. Cette difficulté a

conduit certains scientifiques à s'interroger sur des moyens de simplifier le traitement des milieux dépendant du temps. Lahellec et Suquet [Lahellec et Suquet 2007a] ont ainsi proposé une méthode de résolution permettant de s'affranchir du principe de correspondance. Ils opèrent directement dans l'espace - temps réel en ramenant l'intégration des lois d'évolution des variables internes à un problème variationnel incrémental. Cette première contribution, réservée aux milieux viscoélastiques linéaires, a été étendue en viscoélasticité non-linéaire [Lahellec et Suquet 2007b, Lahellec et Suquet 2007c] puis améliorée pour traiter une large gamme de comportements dans des situations de chargements complexes [Lahellec et Suquet 2013, Badulescu *et al.* 2015]. Ces contributions constituent des avancées très significatives pour l'homogénéisation des milieux dépendant du temps. Elles permettent, dans la catégorie des méthodes basées sur la notion C.L.C., de traiter pour la première fois des comportements rigoureusement décrits par deux potentiels (comme la N.T.F.A. dans une autre catégorie).

I.3 Les composites énergétiques sous l'angle de la modélisation

Les taux de charges importants au sein des composites énergétiques représentent une difficulté particulière pour la modélisation du comportement de ces matériaux. En effet, la multiplicité des non-linéarités (transformations finies, endommagement par décohésion d'interface, *etc.*) dans un milieu siège d'interactions fortes et complexes entre particules est un challenge. La nécessité d'accéder à la réponse macroscopique et aux champs locaux (paragraphe I.1.3) tout en intégrant la complexité morphologique, la physique de la déformation et de l'endommagement, associée aux enjeux exposés au paragraphe précédent (résolution non-linéaire, prise en compte de l'hétérogénéité intraphase et de l'"effet mémoire longue"), sont autant de défis à relever pour la modélisation micromécanique des matériaux de type propergols solides. Avant de nous attarder sur les approches en champs complets et moyens existantes dans la littérature pour les composites énergétiques, nous passons préalablement en revue quelques approches macroscopiques. Ce paragraphe permettra de justifier le choix de la modélisation retenue dans les présents travaux.

I.3.1 Approches macroscopiques

Swanson et Christensen [Swanson et Christensen 1983] ont développé un modèle phénoménologique en transformations finies dans un cadre lagrangien pour des propergols solides, via une approche héréditaire de la viscoélasticité. Cette nouvelle approche a été enrichie par Francis et Thompson [Francis et Thompson 1984] pour des chargements complexes. Simo [Simo 1987] a quant à lui introduit la notion de variable interne viscoélastique, tranchant ainsi avec les formulations intégrales jusque là employées. L'auteur exploite le formalisme thermodynamique pour proposer une modélisation tridimensionnelle réputée rigoureuse de l'endommagement d'un milieu viscoélastique. Özüpek et Becker [Özüpek et Becker 1992, Özüpek et Becker 1997] ont développé un modèle phénoménologique basé sur une formulation viscoélastique non-linéaire compressible couplant les ingrédients essentiels des approches de Swanson et Christensen [Swanson et Christensen 1983] et de Simo [Simo 1987] pour plusieurs chargements complexes, implanté par Canga *et al.* [Canga *et al.* 2001] et modifié par Jung *et al.* [Jung et Youn 1999, Jung *et al.* 2000]. Ce modèle permet de prendre en compte l'influence de la pression sur la cinétique d'évolution de la fraction volumique de vides au sein du propergol étudié.

Park et Schapery [Park et Schapery 1997] ont quant à eux développé un modèle permettant de décrire la réponse thermo-viscoélastique de propergols solides endommagés suite à un chargement axisymétrique. Un principe d'équivalence temps-température est notamment utilisé pour modéliser les effets de la variation de température sur la microstructure. Ha et Schapery [Ha et Schapery 1998] ont par la suite enrichi ce modèle afin d'accéder à l'état de contrainte effectif de ces matériaux soumis à un chargement tridimensionnel. Ce dernier modèle a quant à lui été complété par Hinterhoelzl et Schapery [Hinterhoelzl et Schapery 2004] afin de rendre compte de l'évolution de l'anisotropie induite par l'endommagement en cours de chargement depuis l'état sain, initialement isotrope, dans le cadre des petites déformations. Un modèle thermo-viscoélastique endommageable pour des propergols à matrice polybutadiène (PBHT) a, dans le prolongement de ces travaux, été mis en place [Xu *et al.* 2014]. Les différentes variables et différents paramètres de la modélisation ont été identifiés à partir de tests de relaxation et d'essais en extension uniaxiale à vitesse constante.

Nous rappelons également la démarche de Trumel *et al.* [Trumel 1996, Trumel *et al.* 2001b,

Trumel *et al.* 2001a] qui ont développé une modélisation macroscopique du comportement d'un composite énergétique pour simuler l'impact d'un projectile conique (détails au paragraphe I.1.3).

Le modèle viscoélastique endommageable de Matheson et Nguyen [Matheson et Nguyen 2005] propose une formulation de type Maxwell dont les paramètres sont fonction du temps et de l'endommagement. Ce modèle reproduit correctement les réponses en traction uniaxiale à faibles et fortes vitesses, de même que la réponse à un essai de Taylor.

Tengattini *et al.* [Tengattini *et al.* 2014, Das *et al.* 2014] ont quant à eux développé un modèle thermomécanique adapté aux matériaux granulaires cimentaires (par exemple : roches sédimentaires, matériaux de construction ou encore propergols solides et explosifs comprimés). L'usage de variables internes mesurables permet de décrire l'évolution de la phase anélastique du comportement. Cela amène à établir un lien entre le comportement macromécanique simulé et les observations de l'évolution de la microstructure. La modélisation est capable de reproduire la réponse macroscopique et les effets de rupture de particules et de décohésion du liant pour une large gamme de sollicitations à partir d'un unique jeu de paramètres.

Enfin, Yildirim et Özüpek [Yildirim et Özüpek 2011] ont réalisé une analyse structurelle sur un moteur à propergol solide à partir d'un modèle viscoélastique non-linéaire pour différentes sollicitations thermiques et pressions d'initiation. L'influence du vieillissement du propergol a été prise en compte au sein des lois constitutives des matériaux non-vieillis et vieillis. Des simulations éléments finis ont permis de déterminer des indicateurs de l'endommagement au sein du propergol ce qui permet d'estimer la durée de vie en service des moteurs de fusée.

Ces approches permettent toutes de reproduire avec une certaine précision le comportement des matériaux considérés sous sollicitations quasi-statiques et / ou dynamiques ciblées en fonction de l'application. Cependant, elles restent spécifiques aux matériaux pour lesquels les paramètres ont été identifiés et une nouvelle campagne d'identification est nécessaire pour une application à un autre matériau, même si celui-ci est issu de la même classe de composites énergétiques. De plus, la formulation des approches macroscopiques ne permet pas, par essence, d'accéder aux champs locaux ni à une description complète de l'évolution microstructurale. Cette problématique avait déjà été évoquée au paragraphe I.1.3.

I.3.2 Approches en champs complets

Matouš et Geubelle [Matous et Geubelle 2006a] ont développé un schéma éléments finis incorporant une loi cohésive non-linéaire afin de décrire la décohésion aux interfaces particules / matrice. Les simulations ont été réalisées sur des cellules contenant une à quatre particules hyperélastiques au sein d'une matrice hyperélastique. Les résultats sont en accord avec les effets attendus (non-linéarité de la réponse macroscopique, déchaussement des particules, évolution de l'endommagement au cours du chargement). Zhao [Zhao 2011] a réalisé des mesures d'angles de contact qui ont permis de déterminer les paramètres de la loi cohésive utilisée pour des simulations éléments finis, avec des constituants élastiques linéaires isotropes. Les effets de l'endommagement sur la réponse constitutive du matériau sont mis en évidence. Zhi *et al.* [Zhi *et al.* 2012] ont quant à eux généré des microstructures de propergols solides, constituées de particules sphériques dans le cas 3-D, en forme de disque dans une configuration 2-D. Les particules sont supposées avoir un comportement linéaire élastique, tandis que la matrice présente un comportement viscoélastique linéaire. La loi

cohésive utilisée est non-classique au sens où elle définit le comportement cohésif au contact de deux interfaces. En accord avec les données expérimentales, les auteurs observent une importante influence de l'apparition de l'endommagement sur le comportement effectif du composite. Han *et al.* [Han *et al.* 2012] ont pratiqué des simulations éléments finis permettant d'observer l'apparition de l'endommagement et son évolution au sein de propergols solides. La loi cohésive utilisée permet de prendre en compte une rupture en mode mixte, fournit la réponse macroscopique et un trajet de fissure au sein du matériau en accord avec l'expérience. L'insertion de l'influence de la vitesse de déformation au sein de la loi cohésive à l'aide d'un modèle rhéologique permet d'obtenir des résultats cohérents avec les données expérimentales.

Les approches en champs complets permettent l'accès à des solutions numériques qui peuvent être considérées comme des "solutions de référence". La morphologie des matériaux considérés y est prise en compte explicitement. Les simulations donnent l'accès à l'estimation des champs locaux hétérogènes même lorsqu'un endommagement d'interfaces est observé, et fournissent la réponse macroscopique qui est influencée par la présence de défauts. Par contre, ces méthodes sont très coûteuses numériquement et ne permettent pas encore d'aborder des calculs non-linéaires sur des microstructures complexes en 3-D, comportant un nombre important de particules.

I.3.3 Approches en champs moyens

Les approches en champs moyens sont aussi utilisées pour modéliser la réponse macroscopique de composites particuliers fortement chargés. Tan *et al.* ont ainsi travaillé sur des volumes représentant le PBX-9501 [Tan *et al.* 2005b], un explosif comprimé, grâce à la mise en œuvre de la méthode de Mori-Tanaka dans le cas de constituants élastiques linéaires [Tan *et al.* 2005a] ainsi qu'une loi cohésive bilinéaire pour décrire le comportement de l'interface particules / matrice, qui constitue alors une phase à part entière. Cependant, Inglis *et al.* [Inglis *et al.* 2007] ont comparé cette approche aux calculs éléments finis proposés par Matouš et Geubelle [Matous et Geubelle 2006b] adaptés à l'élasticité linéaire. Leur analyse a pu montrer que l'approche proposée par Tan *et al.* [Tan *et al.* 2005a] fournit des estimations qui se détériorent pour des concentrations volumiques de charges supérieures à 50%.

Lorsqu'elles sont utilisées pour des composites non-linéaires, les approches en champs moyens de type Eshelby nécessitent la linéarisation préalable des lois constitutives locales. Brassart *et al.* [Brassart *et al.* 2009] ont mis en œuvre une méthode originale permettant de s'affranchir de cette difficulté dans le cadre des transformations finies sur un propergol solide simplifié. Une extension du schéma d'homogénéisation de Mori-Tanaka est proposée pour rendre compte des décohésions aux interfaces particules / matrice, les constituants étant hyperélastiques. La décohésion est décrite via une loi cohésive exponentielle décrite par Matouš et Geubelle [Matous et Geubelle 2006a]. Au lieu de s'appuyer sur la solution d'Eshelby, le problème d'inclusion isolée est résolu grâce aux éléments finis. La comparaison aux solutions de référence en champs complets [Matous et Geubelle 2006b] permet de confirmer l'inaptitude des approches en champs moyens classiques à tenir compte des effets de fluctuations intraphases dans l'estimation du comportement effectif du matériau.

Funfschilling [Funfschilling 2007] propose de modéliser un propergol endommagé comme un composite triphasé constitué de particules élastiques, d'une matrice viscoélastique linéaire et de cavités. Les travaux sont fondés sur l'utilisation du schéma de Mori-Tanaka. Une proposition est

ensuite faite pour prendre en compte le déchaussement des particules. Ce dernier n'est pas progressif, les particules décollées sont directement remplacées par des vides. L'évolution de la fraction volumique de vides est pilotée par une loi de probabilité de type gaussienne. L'effet mémoire longue n'est pas restitué par ce type d'approche. Xu *et al.* [Xu *et al.* 2008] ont quant à eux proposé un travail très complet allant jusqu'à la confrontation à des données expérimentales en traction uniaxiale avec relaxation. Le modèle est construit en grandes déformations en utilisant, comme souligné par les auteurs "the state-of-the-art homogenization theory for non linear composite materials" en évoquant les travaux de Ponte-Castañeda [Ponte-Castañeda 1991, Ponte-Castañeda 1996] ou encore de Suquet [Suquet 1995] (et d'autres contributions de Suquet antérieures à 1998). De même que dans les travaux de Funfschilling [Funfschilling 2007], le propergol est vu comme un composite triphasé (particules, cavités, matrice) sauf qu'ici, la matrice est supposée élasto-viscoplastique. Le modèle suppose le taux de déformation macroscopique additif de parties élastique et visqueuse découplées, chacune dérivant d'un processus d'homogénéisation spécifique. La plasticité est traitée sur un plan macroscopique et l'évolution de la fraction volumique de vides est contrôlée par une loi de probabilité de type gaussienne. Le point de départ même du modèle s'oppose à la restitution de l'effet mémoire longue, ce qui conduit les auteurs à une correction *a posteriori* via l'ajout d'une "back stress".

Les approches évoquées sont moins coûteuses numériquement que les approches en champs complets et permettent également une description plus fine de la réponse que les approches macroscopiques, dans le sens où elles fournissent l'accès aux grandeurs moyennes par phase. Cependant, elles ne permettent pas de relever l'un des défis qui s'impose à nous, qui est d'accéder à une estimation des champs locaux et des caractéristiques microstructurales de la décohesion (position et morphologie des défauts). De plus, les approches présentées semblent pour la plupart inadaptées à la prise en compte des fortes hétérogénéités de champs dans la matrice dues aux interactions complexes entre particules inhérentes aux taux de charges élevés (> 50% en volume).

I.4 Bilan des objectifs et démarche adoptée

Au paragraphe I.1.3, nous avons présenté la démarche phénoménologique de Trumel *et al.* [Trumel 1996, Trumel *et al.* 2001b, Trumel *et al.* 2001a] à l'origine des travaux menés en collaboration avec le Centre d'Études de Gramat. Les conclusions apportées ont orienté vers le choix d'une technique multi-échelles dans le but d'accéder à la fois au comportement effectif des composites énergétiques et aux mécanismes locaux responsables de leur vulnérabilité. Les paragraphes qui ont suivi visaient à exposer le principe général des techniques d'homogénéisation non-linéaire et les enjeux correspondants (paragraphe I.2). La classe de composite considérée, les matériaux de type propergols solides, a ensuite été présentée sous l'angle de la modélisation (paragraphe I.3) par l'intermédiaire de trois grandes familles de modèles (macroscopique, champs complets, champs moyens).

La présentation du comportement mécanique des matériaux étudiés (paragraphe I.1.2) souligne la nécessité de prendre en compte leur complexité morphologique, notamment le caractère aléatoire de la répartition granulaire et les taux de charges importants. Les différentes caractéristiques du comportement fortement non-linéaire (transformations finies, viscoélasticité, endommagement par décohésion aux interfaces particules / matrice) doivent également pouvoir être envisagées de manière efficace. Dans ce contexte, la prise en compte des fluctuations intraphases est un aspect ne pouvant pas être négligé, surtout dans la matrice étant donné le fort taux de charges. De plus, l'approche retenue doit être de formulation suffisamment "souple" pour incorporer à terme les différentes non-linéarités, c'est-à-dire revêtir un caractère le plus direct possible. Elle doit aussi être à même de traiter efficacement le couplage espace-temps et ses manifestations aux deux échelles (interactions spatio-temporelles et effet mémoire longue). Enfin, l'accès aux caractéristiques microstructurales de l'endommagement s'avère être un critère de choix essentiel pour alimenter ultérieurement les modèles réactifs (initiation et propagation d'une combustion).

Tous ces critères réunis, replacés dans le contexte bibliographique à la fin des travaux de Trumel [Trumel 1996] où bon nombre des approches non-linéaires citées au paragraphe I.3 n'existaient pas, ont orienté vers une méthodologie multi-échelle alternative, fondée sur les travaux de Christoffersen [Christoffersen 1983] pour des composites élastiques fortement chargés. Elle prend notamment en compte la complexité microstructurale des matériaux étudiés grâce à une schématisation explicite de la microstructure réelle, chaque interface particules / matrice y étant explicitement décrite. Cette technique a fait l'objet de différents développements et / ou extensions visant à introduire pas à pas les non-linéarités caractéristiques des composites énergétiques. Le chapitre suivant s'attache à présenter les fondements de la modélisation, baptisée en 2006 "Approche Morphologique" (A.M.), ainsi qu'à décrire deux des extensions réalisées.

CHAPITRE

II

L'APPROCHE MORPHOLOGIQUE :
ÉTAT DE L'ART

Plan du chapitre

Liste des notations spécifiques au chapitre	33
Introduction	35
II.1 Schématisation de la microstructure initiale	36
II.2 Approche du problème local	38
II.2.1 Description cinématique	38
II.2.2 Relations de passage micro-macro	40
II.3 Principe de résolution	42
II.4 L'A.M. en présence d'endommagement : éléments complémentaires . .	45
II.4.1 Accès aux champs locaux et à la contrainte homogénéisée	45
II.4.2 Procédure de localisation-homogénéisation complémentaire	47
II.4.3 Description de l'évolution de l'endommagement : approche discrète	48
II.4.3.a Critère de nucléation	50
II.4.3.b Critère de fermeture	51
II.4.4 Illustration numérique	52
II.5 Discussion	56
II.5.1 Schématisation de la microstructure initiale	56
II.5.2 Hétérogénéité dans la matrice, accès aux champs locaux	56
II.5.3 Condition de compatibilité et Volume Élémentaire Représentatif	58
II.5.4 Système en contraintes, principe de résolution	58
II.5.5 Travaux d'évaluation antérieurs et poursuite des recherches	60

Liste des notations spécifiques au chapitre

Les notations plus générales et utilisées tout au long du manuscrit sont listées en page ix. Les conventions d'usage sont exposées en page v.

Grandeurs cinématiques

→ Version en transformations finies

\mathbf{F}	gradient de la transformation macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}	champ de gradient de la transformation.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^0	gradient de la transformation des particules.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^α	gradient de la transformation de la couche α .	tenseur o.2 (3×3)

→ Version en H.P.P.

\mathbf{F}	gradient de déplacement macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}	champ de gradient de déplacement.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^0	gradient de déplacement des particules.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^α	gradient de déplacement de la couche α .	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{f}^{\alpha D}$	contribution des défauts présents aux interfaces de la couche α sur son gradient de déplacement.	tenseur o.2 (3×3)

Déformations et rotations

→ Version en H.P.P.

\mathbf{E}	déformation macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{e}^α	déformation totale de la couche α .	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{e}^{\alpha D}$	contribution des défauts présents aux interfaces de la couche α sur sa déformation.	tenseur o.2 (3×3)
$\boldsymbol{\omega}^{\alpha D}$	contribution des défauts présents aux interfaces de la couche α sur sa rotation.	tenseur o.2 (3×3)

Contraintes

→ Version en transformations finies

\mathbf{S}^*	contrainte nominale homogénéisée.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{s}^*	champ de contrainte nominale.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{s}^{*0}	contrainte nominale moyenne dans les particules.	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{s}^{*\alpha}$	contrainte nominale moyenne dans la couche α .	tenseur o.2 (3×3)

→ Version en H.P.P.

Σ	contrainte de Cauchy homogénéisée.	tenseur o.2 (3×3)
σ	champ de contrainte de Cauchy.	tenseur o.2 (3×3)
σ^0	contrainte moyenne de Cauchy dans les particules.	tenseur o.2 (3×3)
σ^α	contrainte moyenne de Cauchy dans la couche α .	tenseur o.2 (3×3)

Paramètres macroscopiques divers

→ Version en H.P.P.

$\bar{\mathbf{T}}$	tenseur représentatif de la morphologie initiale globale du composite.	tenseur o.4 ($3 \times 3 \times 3 \times 3$)
\mathbf{D}	paramètre reflétant la dégradation induite par les défauts ouverts.	tenseur o.2 (3×3)
$\bar{\mathbf{D}}$	paramètre reflétant la dégradation induite par les défauts ouverts.	tenseur o.4 ($3 \times 3 \times 3 \times 3$)

L'Approche Morphologique, approche multi-échelle réservée aux composites particuliers fortement chargés, est le fruit d'extensions non-linéaires progressives des travaux de Christoffersen [Christoffersen 1983]. Les premiers travaux ont été réalisés dans un cadre viscoélastique linéaire [Nadot-Martin *et al.* 2003]. Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] ont revisité la méthodologie initialement proposée par Christoffersen [Christoffersen 1983] afin de traiter le cas de composites fortement chargés victimes d'endommagement par décohésion d'interfaces entre les particules et la matrice dans le cas de constituants élastiques linéaires et viscoélastiques linéaires. Les configurations considérées étaient caractérisées par un état d'endommagement fixé et un nombre donné de défauts ouverts et / ou fermés. Les travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] ont ensuite introduit la notion d'évolution de l'endommagement pour des constituants élastiques linéaires isotropes. Le cadre des transformations finies, plus réaliste pour les matériaux énergétiques, a été introduit dans les travaux de Guiot [Guiot *et al.* 2006] et poursuivi dans ceux de Touboul [Touboul 2007] publiés en 2008 [Nadot-Martin *et al.* 2008]. Les travaux en transformations finies ne concernent que le matériau sain. La chronologie des différentes étapes de construction et d'évolution de l'Approche Morphologique est présentée en figure II.1. Outre les papiers déjà cités, le lecteur pourra trouver un résumé dans le papier de synthèse [Nadot-Martin *et al.* 2013].

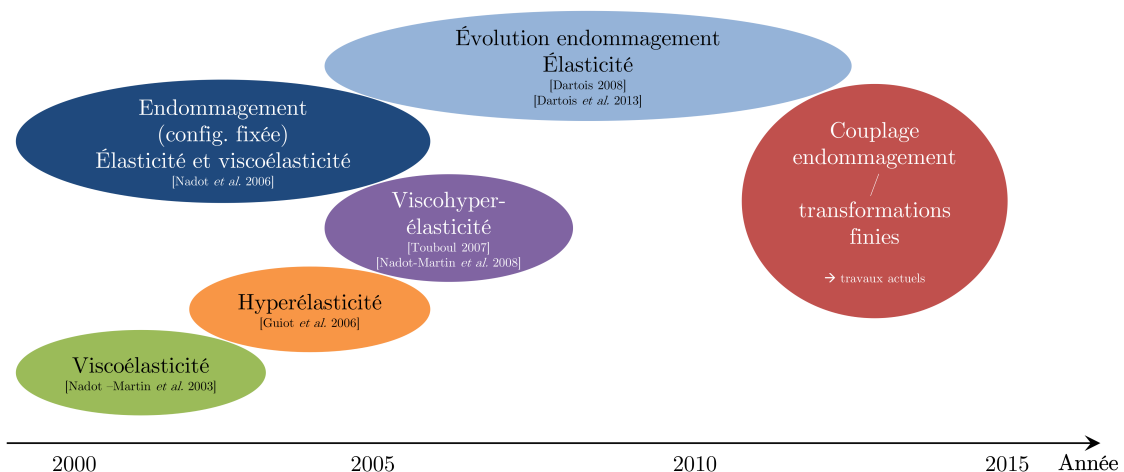


Figure II.1 – Chronologie des différentes étapes de construction de l'Approche Morphologique.

Dans ce chapitre, les fondements théoriques de l'Approche Morphologique (A.M.) ainsi développée sont exposés. Nous considérons en parallèle l'A.M. pour le matériau sain et l'A.M. pour le matériau endommagé. Les deux versions évoquées se réfèrent cependant à deux formulations différentes : la première version (matériau sain) a été formulée dans le cadre des transformations finies [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] tandis que la seconde (matériau endommagé) se place dans l'hypothèse des petites perturbations (H.P.P.) en considérant les constituants élastiques linéaires isotropes [Nadot *et al.* 2006, Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. La présentation des deux versions est nécessaire à la compréhension de la suite de l'étude. En effet, il va s'agir de coupler deux non-linéarités considérées séparément lors des études antérieures : les transformations finies et la présence d'endommagement au sein du composite.

II.1 Schématisation de la microstructure initiale

La microstructure initiale du composite particulaire fortement chargé étudié est schématisée grâce à un processus numérique. Les particules du composite réel (figure II.2(a)) sont approchées par un agrégat de particules polyédriques en forte proportion volumique et dont les interfaces en regard sont parallèles (figure II.2(b)). Tout l'enjeu du processus de polyédrisation réside dans son optimisation, afin d'obtenir la meilleure correspondance entre microstructures réelle et schématisée et ainsi garantir une représentativité maximale de la morphologie.

La zone de matrice entre deux particules voisines est appelée "couche α ". Les facettes des deux particules opposées étant parallèles, l'épaisseur d'une couche est constante. Pour chaque couche de matrice α dans la configuration initiale du volume schématisé, quatre paramètres sont identifiés (figure II.2(c)) :

- h^α , l'épaisseur de couche, constante pour une couche donnée mais pouvant varier d'une couche à l'autre ;
- \vec{n}^α , la normale unitaire de la couche, caractérisant l'orientation des interfaces particules / couche de matrice ;
- \vec{d}^α , le vecteur reliant les centroïdes de deux particules situées de part et d'autre de la couche α ;
- A^α , l'aire projetée. Le volume associé à la couche α dans sa configuration initiale est : $|V^\alpha| = A^\alpha h^\alpha$.

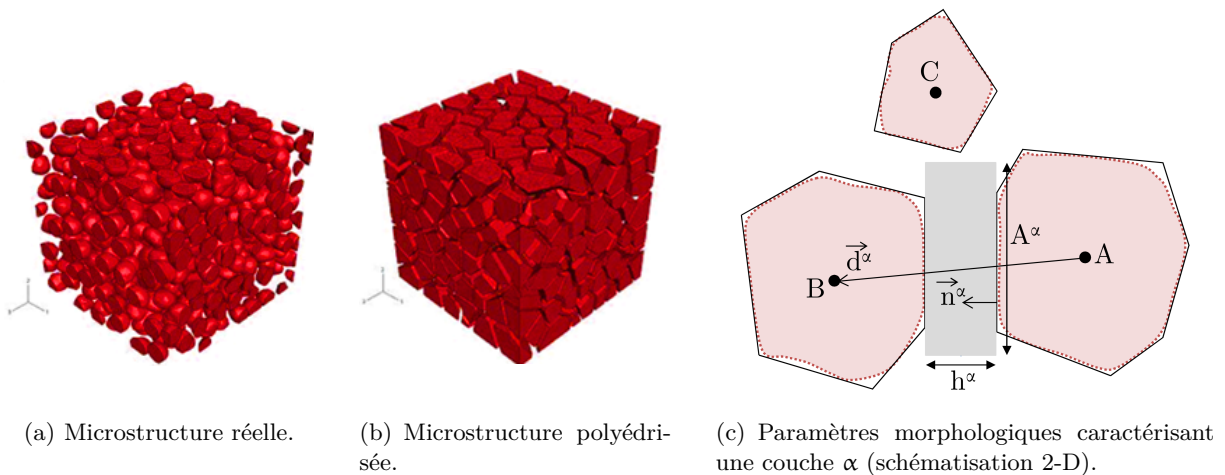


Figure II.2 – Illustration de la schématisation géométrique.

Une fois les particules réelles approchées par des polyèdres (sous contrainte de parallélisme des facettes de particules en vis-à-vis), les paramètres \vec{d}^α , \vec{n}^α et h^α sont fixés et directement identifiables par simples mesures géométriques. Au contraire, l'identification de l'aire projetée A^α , d'où découle la définition de la zone de matrice qualifiée de "couche α " entre deux polyèdres, requiert un traitement supplémentaire. Pour une microstructure aléatoire, A^α est définie comme la moyenne arithmétique des deux aires obtenues par projection des deux facettes de particules opposées, depuis leurs centroïdes et sur le plan médian de la couche concernée (figure II.3(a)). Par suite, la

couche α de volume $|V^\alpha|$ n'est pas exactement confinée entre les deux facettes de particules en regard : elle peut notamment déborder dans les zones adjacentes au voisinage des arêtes et sommets de polyèdres (figure II.3(b)). Il est alors possible d'observer dans ces régions des zones de recouvrement de couches, appelées "zones médianes" (Z.M.).

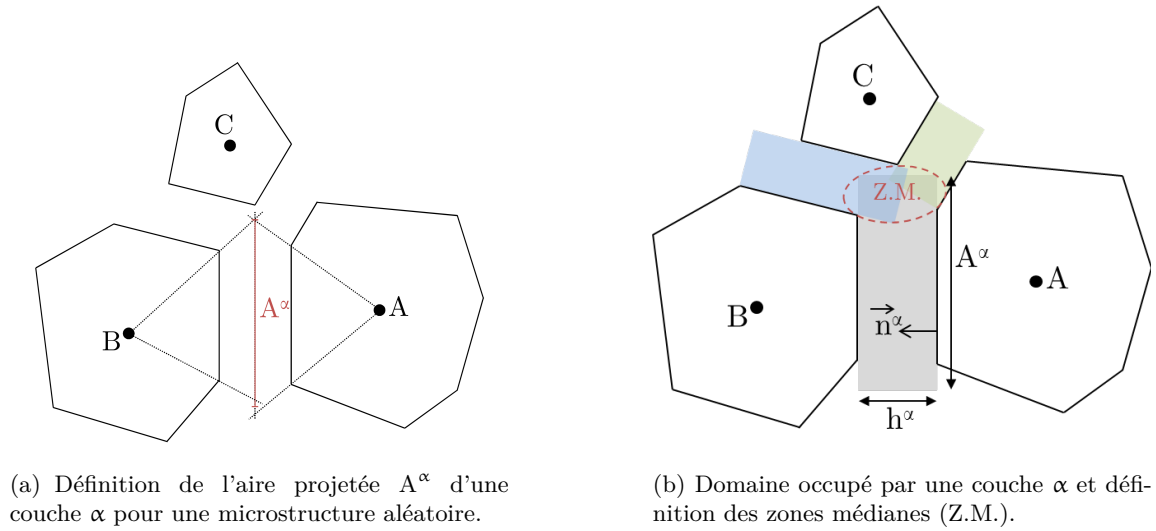


Figure II.3 – Définition d'une couche α avec l'aire projetée A^α .

II.2 Approche du problème local

À présent, la formulation du problème de localisation-homogénéisation va être synthétisée de manière à mettre en regard les deux versions de l'Approche Morphologique présentées dans ce chapitre. Les équations auxquelles le lecteur sera invité à se référer figurent dans le tableau II.1. Seuls les aspects méthodologiques et les relations essentielles seront présentés ici. Ces notions seront nécessaires à la compréhension et à l'analyse de la suite des travaux exposés. Pour plus de détails, le lecteur pourra consulter [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] pour la formulation en transformations finies (matériau sain) et [Nadot *et al.* 2006, Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] pour la formulation en H.P.P. avec prise en compte de l'endommagement. Tous les développements sont réalisés dans le cadre d'une description lagrangienne du mouvement.

II.2.1 Description cinématique

L'approche du problème local est fondée sur un cadre cinématique simplificateur par le biais de quatre hypothèses sur le gradient de déplacement au sein du volume schématisé. Ces hypothèses, initialement proposées par Christoffersen [Christoffersen 1983] dans le cadre de ses travaux sur les composites sains, ont été conservées par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006], Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] et Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

- (i) Les centroïdes des particules sont supposés avoir un mouvement d'ensemble défini par le gradient de déplacement macroscopique \mathbf{F} (donnée du problème).
- (ii) Toutes les particules sont supposées avoir un gradient de déplacement homogène et identique pour toutes, noté \mathbf{f}^0 .
- (iii) Chaque couche α est supposée avoir un gradient de déplacement homogène, mais variable d'une couche à l'autre, noté \mathbf{f}^α .
- (iv) Les perturbations localisées aux coins et arêtes des particules, dans les zones éventuelles de recouvrement de couches, sont négligées.

Remarque : En transformations finies, les hypothèses précédentes sont équivalentes en termes de gradient de la transformation. Afin de faciliter une présentation simultanée des deux versions de l'A.M., les mêmes notations seront utilisées dans les deux cas, à savoir :

- dans la version H.P.P., \mathbf{F} , \mathbf{f}^0 et \mathbf{f}^α désigneront les gradients de déplacement respectivement macroscopique, des particules et d'une couche α ;
- dans la version en transformations finies, \mathbf{F} , \mathbf{f}^0 et \mathbf{f}^α désigneront les gradients de la transformation respectivement macroscopique, des particules et d'une couche α .

Les hypothèses (i) et (ii) permettent dans un premier temps d'exprimer le champ de déplacement linéaire dans les particules en fonction de leur gradient de déplacement et du gradient macroscopique. Le champ de déplacement linéaire au sein d'une couche α quelconque est ensuite déduit de l'écriture des conditions cinématiques au travers des interfaces avec les particules qu'elle sépare. Le gradient de déplacement de la couche α est obtenu simultanément.

Ainsi, considérant la continuité du champ de déplacement au travers des deux interfaces d'une couche α avec les particules adjacentes (équation (II.1)), le gradient de déplacement d'une couche saine (c'est-à-dire ne comportant pas de défaut) s'exprime en fonction de la morphologie locale de la couche ainsi que des gradients de déplacement des particules et macroscopique. Pour le matériau sain en transformations finies, l'expression analytique obtenue est donnée par l'équation (II.3).

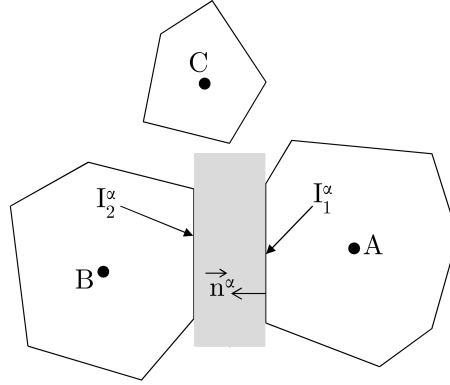


Figure II.4 – Définition des interfaces d'une couche α .

Les défauts aux interfaces particules / matrice ont été introduits de manière compatible avec les hypothèses cinématiques rappelées ci-dessus [Nadot *et al.* 2006] par l'introduction de sauts de déplacement non nuls au niveau des interfaces concernées. La linéarité du champ de déplacement (hypothèses cinématiques (i) à (iii)) conduit à assigner une forme affine au saut de déplacement le long d'une interface décollée (équation (II.2)). Le cadre cinématique envisagé n'autorise donc pas de décohésion partielle d'une interface, ce qui n'exclut pas la décohésion partielle d'une particule dont le profil est approché par un polyèdre à plusieurs facettes. De plus, seules deux configurations sont considérées pour une couche α :

- La couche est saine et ne présente pas de défaut à ses interfaces. La continuité du champ de déplacement aux interfaces de cette couche est alors toujours valable.
- La couche présente une double décohésion : ses deux interfaces I_1^α et I_2^α (figure II.4) comportent des défauts. La paire de défauts est caractérisée par des sauts de déplacement qui sont des fonctions affines des coordonnées spatiales le long des interfaces (équation (II.2) avec $\mathbf{f}^{\alpha D}$ considéré comme une donnée).

Ainsi, les travaux antérieurs [Nadot *et al.* 2006, Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] n'envisagent pas la possibilité qu'une couche ne soit décollée que d'un seul côté. Ce choix sera discuté au chapitre IV. Afin de rendre acceptable la double décohésion, Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] ont rajouté une contrainte au processus de polyédrisation de la microstructure initiale, imposant des propriétés géométriques proches (forme et surface) aux deux interfaces en regard.

L'écriture des conditions de saut de déplacement au niveau des interfaces de la couche α permet d'obtenir le gradient de déplacement \mathbf{f}^α d'une couche décollée (équation (II.4)). Celui-ci dépend du gradient de déplacement global \mathbf{F} , du gradient de déplacement des particules \mathbf{f}^0 , de la morphologie de la couche α ainsi que d'un terme additionnel $\mathbf{f}^{\alpha D}$, gradient de déplacement représentant la contribution directe des deux défauts présents aux interfaces de la couche α . Lorsque la couche est saine, $\mathbf{f}^{\alpha D}$ n'existe pas.

II.2.2 Relations de passage micro-macro

La compatibilité entre la description du mouvement local ci-dessus et le mouvement global caractérisé par la donnée du gradient de déplacement macroscopique est assurée au sens de la relation de moyenne volumique sur les gradients de déplacement. La relation : $\mathbf{F} = \langle \mathbf{f} \rangle_{|V_0|}$ est ainsi imposée pour le matériau sain. Pour le matériau endommagé, cette relation de moyenne intègre classiquement la contribution de toutes les discontinuités présentes au sein du volume d'étude, soit : $\mathbf{F} = \langle \mathbf{f} \rangle_{|V_0|} + [\text{termes intégraux impliquant les sauts}]$. Finalement, la relation de moyenne imposée dans laquelle est insérée l'expression de \mathbf{f}^α (équation (II.3), respectivement (II.4)) fait émerger une condition à satisfaire par les paramètres morphologiques (équation (II.7)). Cette condition est la même dans les deux cas (matériau sain ou endommagé). Qualifiée de *condition de compatibilité*, elle représente à la fois un critère d'applicabilité de l'A.M. et un critère de choix du V.E.R. mécanique relatif à la méthodologie. Nous y reviendrons au paragraphe II.5.3.

Le principe de macro-homogénéité de Hill-Mandel en transformations finies pour le matériau sain et le lemme de Hill généralisé en H.P.P. pour le matériau endommagé, associés à des conditions aux limites en contraintes homogènes, sont écrits en conformité avec la double discrétisation géométrique et cinématique propre à l'A.M. En y insérant l'expression de \mathbf{f}^α (équation (II.3), respectivement (II.4)) et la condition de compatibilité (II.7), et en considérant successivement deux valeurs particulières pour \mathbf{F} et \mathbf{f}^0 , le système (II.8) pour le matériau sain (respectivement (II.9) pour le matériau endommagé) est établi. Ce système réunit deux expressions différentes du tenseur des contraintes macroscopique en fonction du tenseur des contraintes moyen sur le volume des particules et des tenseurs des contraintes moyens sur le volume de chaque couche α . La première des deux équations est une relation de moyenne volumique classique, tandis que la seconde est spécifique à la méthodologie employée, mettant l'accent sur la description du caractère granulaire du matériau : la transmission des efforts s'effectue d'une particule à une autre par l'intermédiaire de la couche qui les sépare via l'effort \vec{t}^α .

À ce stade, tous les ingrédients sont en place pour achever la résolution du problème local par la détermination de l'inconnue cinématique principale, à savoir le gradient de la transformation (respectivement de déplacement) des particules \mathbf{f}^0 duquel peuvent être ensuite déduits ceux des couches via (II.3) (respectivement (II.4)) et finalement les estimations aux deux échelles. L'inconnue principale \mathbf{f}^0 est recherchée de sorte que le champ de contrainte estimé (relié au champ de déformation par l'intermédiaire des lois de comportement locales) satisfasse l'équation (II.10) (respectivement (II.11)). L'équation (II.10) (respectivement (II.11)) est donc au centre de la résolution du problème de localisation-homogénéisation pour un comportement local donné.

Matériau sain Transformations finies [Touboul 2007, Nadot-Martin <i>et al.</i> 2008]	Matériau endommagé H.P.P. [Nadot <i>et al.</i> 2006, Dartois 2008, Dartois <i>et al.</i> 2013]	
<i>Conditions cinématiques aux interfaces I_1^α et I_2^α d'une couche α</i>		
$\begin{aligned} b_I^{\alpha 1} (\vec{Y}^{I_1^\alpha}) &= 0 \\ b_I^{\alpha 2} (\vec{Y}^{I_2^\alpha}) &= 0 \end{aligned} \quad (II.1)$	$\begin{aligned} b_i^{\alpha 1} (\vec{Y}^{I_1^\alpha}) &= f_{ij}^{\alpha D} Y_j^{I_1^\alpha} \\ b_i^{\alpha 2} (\vec{Y}^{I_2^\alpha}) &= f_{ij}^{\alpha D} Y_j^{I_2^\alpha} \end{aligned} \quad (II.2)$	
<i>Gradient de la transformation d'une couche α</i>		
$f_{ij}^\alpha = f_{ij}^0 + (F - f^0)_{iK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} \quad (II.3)$	<i>Gradient de déplacement d'une couche α</i>	
$f_{ij}^\alpha = f_{ij}^0 + (F - f^0)_{ik} \frac{d_k^\alpha n_j^\alpha}{h^\alpha} + f_{ij}^{\alpha D} \quad (II.4)$		
<i>avec : $f^{\alpha D}$ inexistant si la couche α est saine.</i>		
<i>Relation de moyenne sur les gradients de déplacement (imposée)</i>		
$\mathbf{F} = \langle \mathbf{f} \rangle_{ V_0 } \quad (II.5)$	$\mathbf{F} = \langle \mathbf{f} \rangle_{ V_0 } + [\text{termes de sauts}] \quad (II.6)$	
<i>avec : $\langle \mathbf{f} \rangle_{ V_0 } = (1-c)\mathbf{f}^0 + \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha \mathbf{f}^\alpha A^\alpha h^\alpha$</i>		
<i>Condition de compatibilité</i>		
$\frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha \vec{d}^\alpha \otimes \vec{n}^\alpha A^\alpha = \mathbf{Id} \quad (II.7)$		
<i>Système en contraintes</i>		
$\begin{cases} S_{ij}^* = \langle s_{ij}^* \rangle_{ V_0 } = (1-c)s_{ij}^{*0} + \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha s_{ij}^{*\alpha} A^\alpha h^\alpha \\ S_{ij}^* = \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha d_I^\alpha t_j^\alpha ; t_j^\alpha = s_{Kj}^{*\alpha} n_K^\alpha A^\alpha \end{cases} \quad (II.8)$	$\begin{cases} \Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle_{ V_0 } = (1-c)\sigma_{ij}^0 + \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha \sigma_{ij}^\alpha A^\alpha h^\alpha \\ \Sigma_{ij} = \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha d_i^\alpha t_j^\alpha ; t_j^\alpha = \sigma_{kj}^\alpha n_k^\alpha A^\alpha \end{cases} \quad (II.9)$	
<i>\mathbf{f}^0 recherché de sorte que :</i>		
$(1-c)s_{ij}^{*0} + \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha s_{ij}^{*\alpha} A^\alpha h^\alpha - \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha d_I^\alpha \underbrace{s_{Kj}^{*\alpha} n_K^\alpha A^\alpha}_{=t_j^\alpha} = 0 \quad (II.10)$	$(1-c)\sigma_{ij}^0 + \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha \sigma_{ij}^\alpha A^\alpha h^\alpha - \frac{1}{ V_0 } \sum_\alpha d_i^\alpha \underbrace{\sigma_{kj}^\alpha n_k^\alpha A^\alpha}_{=t_j^\alpha} = 0 \quad (II.11)$	

où : $\vec{b}^{\alpha k}$ est le saut de déplacement au niveau de l'interface I_k^α ;

$\vec{Y}^{I_k^\alpha}$ est le vecteur position initial d'un point de l'interface I_k^α ;

$\mathbf{f}^{\alpha D}$ est un gradient de déplacement représentant l'influence des défauts présents aux interfaces de la couche α ;

$|V_0|$ est le volume total initial de la microstructure schématisée ;

$c = \frac{1}{|V_0|} \sum_\alpha A^\alpha h^\alpha$ est la concentration volumique des couches par rapport au volume total $|V_0|$;

\mathbf{S}^* (respectivement Σ) est le tenseur des contraintes nominales (respectivement de Cauchy) macroscopique ;

\mathbf{s}^{*0} (respectivement σ^0) est le tenseur des contraintes nominales (respectivement de Cauchy) moyen sur le volume des particules ;

$\mathbf{s}^{*\alpha}$ (respectivement σ^α) est le tenseur des contraintes nominales (respectivement de Cauchy) moyen sur le volume d'une couche α ;

\vec{t}^α représente la force totale transmise à travers la couche α .

Tableau II.1 – Relations essentielles de l'A.M. pour les deux versions exposées : version pour le matériau sain en transformations finies et version en H.P.P. en présence d'un état d'endommagement fixé.

II.3 Principe de résolution

Qu'il s'agisse de l'A.M. en transformations finies pour le matériau sain ou de l'A.M. en H.P.P. pour le matériau endommagé, le principe de résolution général reste en pratique le même. Ainsi, considérons une microstructure schématisée telle que décrite au paragraphe II.1, satisfaisant la condition de compatibilité (II.7). Un chargement macroscopique est appliqué au volume schématisé. Par conséquent, le problème considéré est conditionné par les données d'entrée suivantes :

- les paramètres morphologiques caractérisant les couches, soit $\{A^\alpha, h^\alpha, \vec{n}^\alpha, \vec{d}^\alpha; \forall \alpha\}$;
- le gradient de la transformation ou de déplacement macroscopique \mathbf{F} associé au chargement imposé ;
- les propriétés mécaniques des constituants (particules et matrice) correspondant aux lois constitutives choisies pour décrire leur comportement respectif.

Nous considérons un nombre de défauts ouverts et / ou fermés fixé (éventuellement nul) : il n'y a pas d'évolution de l'endommagement. Une couche comportant une paire de défauts ouverts à ses interfaces sera notée "couche β " ($\alpha \equiv \beta$) et une couche comportant une paire de défauts fermés à ses interfaces sera notée "couche f " ($\alpha \equiv f$). Les données du problème sont alors complétées par :

- l'ensemble des tenseurs $\{\mathbf{f}^{\alpha D}\}$ relatifs aux défauts présents au sein de la microstructure, avec $\alpha \equiv \beta$ ou $\alpha \equiv f$.

Outre le choix des lois de comportement pour les particules et la matrice, la résolution de l'équation (II.11) en présence d'endommagement requiert d'explicitier les forces totales transmises au travers des couches α , $\{\vec{t}^\alpha\}$ selon que la couche ne comporte pas de défaut à ses interfaces ou présente des défauts ouverts ou fermés. Si les défauts sont ouverts, $\vec{t}^\beta = \vec{0}$. Si au contraire les défauts sont fermés, Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] ont émis l'hypothèse d'un coefficient de frottement infini aux lèvres des défauts, de sorte que la totalité de la force \vec{t}^f est transmise au travers de la couche α , de la même manière que pour les couches saines.

Les principales étapes de la résolution sont alors les suivantes :

- (i) La loi constitutive des particules permet d'exprimer la contrainte moyenne en leur sein en fonction de \mathbf{f}^0 .
- (ii) De même, la loi constitutive de la matrice donne la contrainte moyenne au niveau d'une couche α en fonction de \mathbf{f}^α , qui lui-même dépend de \mathbf{F} , de \mathbf{f}^0 , des paramètres morphologiques de la couche α et de $\mathbf{f}^{\alpha D}$ si la couche est décollée (équation (II.3), respectivement (II.4)).
- (iii) Ainsi, l'équation (II.10) (respectivement (II.11)) fait intervenir les données morphologiques $\{A^\alpha, h^\alpha, \vec{n}^\alpha, \vec{d}^\alpha; \forall \alpha\}$, le gradient macroscopique \mathbf{F} , les propriétés mécaniques et l'inconnue principale \mathbf{f}^0 . En présence d'endommagement, l'équation (II.11) est de plus paramétrée par l'ensemble des tenseurs $\{\mathbf{f}^{\alpha D}\}$ relatifs aux défauts présents au sein de la microstructure.
- (iv) La résolution de l'équation ainsi formulée (équation (II.10), respectivement (II.11)) permet d'obtenir \mathbf{f}^0 .

- (v) La connaissance de \mathbf{f}^0 mène à la détermination de l'ensemble des champs locaux, notamment à l'obtention de \mathbf{f}^α pour chacune des couches α via (II.3) (respectivement (II.4)) et par suite des déformations et des contraintes locales.
- (vi) Le tenseur des contraintes homogénéisé est calculé à partir de la relation de moyenne volumique (II.8)₁ (respectivement (II.9)₁).

Les deux versions de l'A.M. exposées dans ce chapitre présentent une structure similaire du problème à résoudre et un principe de résolution général commun dont le déroulement est récapitulé sur la figure II.5. Dans les deux cas, la formulation est la même quel que soit le comportement des constituants (matrices et particules), linéaire ou non. La seule hypothèse concerne le comportement des défauts fermés, bloqués par frottement infini par simplicité.

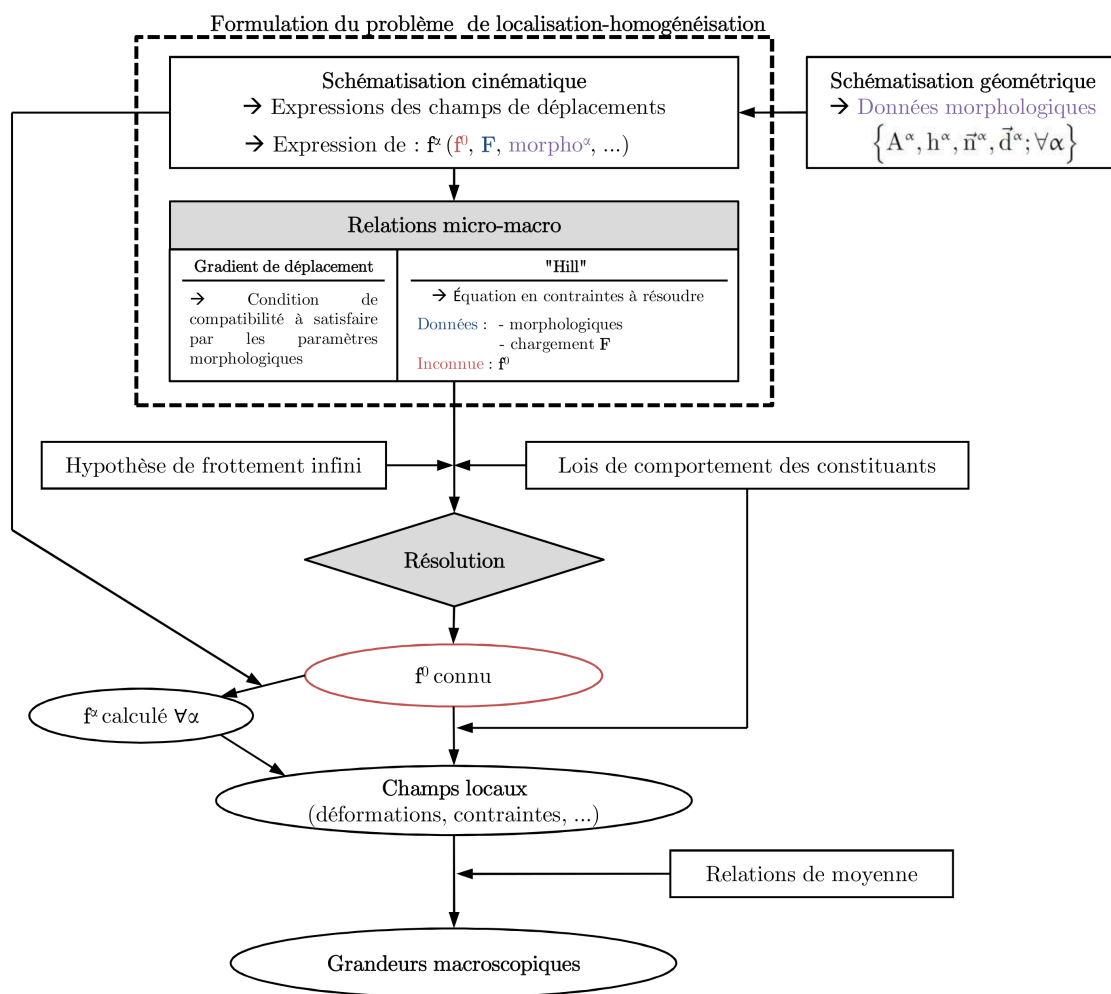


Figure II.5 – Méthodologie et principe de résolution de l'A.M.

Dans le cadre des transformations finies pour le matériau sain, l'A.M. a été évaluée pour des constituants hyperélastiques d'une part, puis en considérant la matrice viscohyperélastique d'autre part [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. Dans les deux cas, l'équation (II.10) devient fortement non-linéaire de l'inconnue principale \mathbf{f}^0 . La résolution s'effectue par l'intermédiaire d'un algorithme de Newton-Raphson avec Mathematica® et \mathbf{f}^0 est ainsi estimé de manière numérique. Dans le cas du matériau endommagé en H.P.P., l'équation (II.11) a été résolue pour des consti-

tuants élastiques linéaires isotropes d'une part, puis en considérant la matrice viscoélastique linéaire d'autre part [Nadot *et al.* 2006, Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. Dans les deux cas, l'expression du gradient de déplacement des particules \mathbf{f}^0 est obtenue analytiquement en fonction des données.

Dans le paragraphe qui suit, nous allons nous intéresser aux enrichissements apportés à l'A.M. par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] et Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] pour traiter la présence d'endommagement et son évolution au sein de la microstructure. Ces éléments seront ici rapportés de manière succincte. Seules les dépendances des expressions analytiques obtenues aux deux échelles seront mentionnées. Le lecteur est invité à se référer aux documents précités pour les expressions complètes.

II.4 L'Approche Morphologique en présence d'endommagement : éléments complémentaires

II.4.1 Accès aux champs locaux et à la contrainte homogénéisée

La procédure de résolution décrite au paragraphe II.3 mène tout d'abord à l'obtention de l'inconnue principale \mathbf{f}^0 de laquelle découle les autres estimations aux deux échelles (figure II.5). Les expressions sont ici analysées dans le cas de l'élasticité linéaire, cadre dans lequel l'évolution de l'endommagement a été traitée dans les travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. Dans ce cas, l'expression de \mathbf{f}^0 est obtenue sous la forme additive suivante [Nadot *et al.* 2006] :

$$\mathbf{f}^0 = \boldsymbol{\Phi}(\bar{\mathbf{T}}, \mathbf{D}, \bar{\mathbf{D}}) : \mathbf{F} + \mathbf{f}^{0(d)}(\bar{\mathbf{T}}, \mathbf{D}, \bar{\mathbf{D}}, \{\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}\}, \{\boldsymbol{\epsilon}^{fD}\}) \quad (\text{II.12})$$

$$\text{où : } \bar{\mathbf{T}} = \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \bar{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \bar{\mathbf{n}}^{\alpha} \otimes \bar{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \bar{\mathbf{n}}^{\alpha} \frac{A^{\alpha}}{h^{\alpha}} ;$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{|V_0|} \sum_{\beta} \bar{\mathbf{d}}^{\beta} \otimes \bar{\mathbf{n}}^{\beta} A^{\beta} ;$$

$$\bar{\mathbf{D}} = \frac{1}{|V_0|} \sum_{\beta} \bar{\mathbf{d}}^{\beta} \otimes \bar{\mathbf{n}}^{\beta} \otimes \bar{\mathbf{d}}^{\beta} \otimes \bar{\mathbf{n}}^{\beta} \frac{A^{\beta}}{h^{\beta}} ;$$

$\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D} = \text{Sym}(\mathbf{f}^{\beta D})$ (respectivement $\boldsymbol{\epsilon}^{fD} = \text{Sym}(\mathbf{f}^{fD})$) pour une couche β (respectivement une couche f) comportant des défauts ouverts (respectivement fermés) à ses interfaces.

Nous distinguons alors dans l'équation (II.12) :

- un premier terme linéaire par rapport au gradient de déplacement macroscopique \mathbf{F} ;
- un second terme dépendant des déformations induites par les défauts ouverts et fermés, $\{\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}\}$ et $\{\boldsymbol{\epsilon}^{fD}\}$.

Les deux termes dépendent de deux grandeurs tensorielles d'ordres deux et quatre, \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$, impliquant les paramètres morphologiques des couches sièges de défauts ouverts à leurs interfaces. La grandeur \mathbf{f}^0 dépend également d'un tenseur macroscopique d'ordre quatre noté $\bar{\mathbf{T}}$ impliquant tous les paramètres morphologiques. Ce tenseur déjà présent dans les travaux de Christoffersen [Christoffersen 1983] pour le matériau sain représente la morphologie initiale du composite dans son ensemble. En effet, il reflète sa texture éventuelle et rend compte des irrégularités de forme des particules et d'épaisseurs de couches de matrice.

De la connaissance de \mathbf{f}^0 sont déduites les expressions de \mathbf{f}^{α} (équation (II.4)), du champ de déformation par passage à la partie symétrique relativement à la schématisation géométrique du milieu, et finalement de la contrainte homogénéisée. Ainsi, le champ de déformation est obtenu sous la forme additive suivante :

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{C}(\bar{\mathbf{T}}, \mathbf{D}, \bar{\mathbf{D}}) : \mathbf{E} + \boldsymbol{\epsilon}^{(d)}(\bar{\mathbf{T}}, \mathbf{D}, \bar{\mathbf{D}}, \{\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}\}, \{\boldsymbol{\epsilon}^{fD}\}) + \boldsymbol{\epsilon}^D \quad (\text{II.13})$$

où : $\boldsymbol{\epsilon}^D = \boldsymbol{\epsilon}^{\alpha D}$ pour une couche α comportant des défauts à ses frontières ;

$\boldsymbol{\epsilon}^D = 0$ sinon.

La forme de la contrainte homogénéisée est la suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{L} \left(\bar{\mathbf{T}}, \mathbf{D}, \bar{\mathbf{D}} \right) : \mathbf{E} + \boldsymbol{\Sigma}^{(d)} \left(\bar{\mathbf{T}}, \mathbf{D}, \bar{\mathbf{D}}, \{\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}\}, \{\boldsymbol{\epsilon}^{FD}\} \right) \quad (\text{II.14})$$

Au final, les estimations aux deux échelles prennent en compte la morphologie et la répartition spatiale initiales des particules au sein du volume au travers de la présence du tenseur macroscopique d'ordre quatre $\bar{\mathbf{T}}$. De plus, l'A.M. fait émerger deux grandeurs tensorielles \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$ qui traduisent la dégradation des propriétés (tenseur de localisation \mathbf{C} et tenseur de rigidité \mathbf{L}) induite par les seuls défauts ouverts en conséquence de l'hypothèse de coefficient frottement infini introduite en amont de la résolution. Les tenseurs $\bar{\mathbf{T}}$, \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$ sont de nature lagrangienne, impliquant les caractéristiques morphologiques des couches identifiées dans la configuration non déformée du milieu schématisé. En effet, rappelons que la première occurrence des paramètres morphologiques, dont découlent toutes les autres, se situe au niveau de l'équation (II.4) établie selon une description lagrangienne du mouvement. Nous noterons que la forme des tenseurs \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$ reflète le caractère granulaire du milieu considéré dans la façon dont il est dégradé. En effet, apparaissent non seulement l'orientation des défauts grâce aux vecteurs $\{\bar{\mathbf{n}}^\beta\}$ mais également les vecteurs $\{\bar{\mathbf{d}}^\beta\}$ reliant les centroïdes des particules. Par suite, \mathbf{D} n'est pas symétrique et l'anisotropie induite par endommagement susceptible d'être décrite peut être très complexe. Ainsi, l'A.M. permet de rendre compte des effets de couplage entre une éventuelle anisotropie primaire (via $\bar{\mathbf{T}}$) et l'anisotropie induite par endommagement, elle-même conditionnée par la morphologie granulaire initiale considérée.

Au côté d'une partie linéaire de la déformation macroscopique \mathbf{E} , le champ de déformation (II.13) du milieu endommagé en tout point des particules et des couches (décollées ou non) comporte une partie $\boldsymbol{\epsilon}^{(d)}$ (de moyenne nulle) linéaire des ensembles $\{\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}\}$ et $\{\boldsymbol{\epsilon}^{FD}\}$ caractérisant les déformations induites par les deux populations de défauts présentes au sein du volume. Cette dépendance résulte directement du terme $\mathbf{f}^{0(d)}$ (équation (II.12)) qui, via l'équation (II.4) se retrouve également dans l'expression de \mathbf{f}^α , et par suite dans celle du champ de déformation. En particulier, la déformation dans une zone intergranulaire spécifique (couche α) est influencée par sa morphologie, par les défauts éventuellement présents à ses interfaces (via $\boldsymbol{\epsilon}^{\alpha D}$) mais aussi par les autres défauts présents ailleurs dans le composite (via $\boldsymbol{\epsilon}^{\alpha(d)}$).

La décomposition additive du champ de déformation se retrouve à l'échelle globale au niveau de l'expression de la contrainte homogénéisée (II.14). Une partie linéaire de \mathbf{E} et une partie induite par endommagement $\boldsymbol{\Sigma}^{(d)}$, toutes deux influencées par la morphologie initiale et l'état d'endommagement global, se distinguent.

Les résultats présentés ci-dessus de manière très succincte sont issus d'une procédure de résolution dans laquelle \mathbf{f}^0 , et par suite l'ensemble des estimations, ont été extraites en fonction des grandeurs connues du problème (paragraphe II.3) et des grandeurs tensorielles $\{\mathbf{f}^{\alpha D}\}$ considérées comme des données. La résolution revêt de ce fait un caractère partiel. En effet, mise à part la linéarité du saut de déplacement le long des interfaces décollées, conséquence directe de la cinématique, rien n'a été formulé ni même postulé pour les défauts ouverts concernant la dépendance du saut (même moyen) par rapport au niveau de chargement. Vis-à-vis d'une stratégie qui aurait consisté à incorporer, en amont de la résolution, d'éventuelles expressions de ces sauts ou les $\{\mathbf{f}^{\beta D}\}$ correspondants en fonction du gradient de déplacement macroscopique \mathbf{F} , la stratégie adoptée a

permis d'identifier de manière explicite les contributions respectives des défauts ouverts et fermés, $\{\mathbf{e}^{\beta D}\}$ et $\{\mathbf{e}^{FD}\}$. Une étape complémentaire, utilisant le comportement des constituants, devait donc être rajoutée pour expliciter les contributions induites par les défauts ouverts.

II.4.2 Procédure de localisation-homogénéisation complémentaire

Étant donnée l'hypothèse de coefficient de frottement infini pour les défauts fermés, chaque déformation de l'ensemble $\{\mathbf{e}^{FD}\}$ est indépendante de la déformation macroscopique \mathbf{E} . En effet, cette grandeur représente une déformation induite par le blocage des défauts fermés aux interfaces de la couche f . L'ensemble $\{\mathbf{e}^{FD}\}$ acquiert en conséquence le statut de variables d'état rendant compte de la distorsion par blocage des défauts fermés au sein du composite.

Par contre, $\mathbf{e}^{\beta D}$ représentant la déformation induite par l'ouverture des défauts présents aux interfaces d'une couche β a toutes les raisons de dépendre du chargement macroscopique \mathbf{E} , à l'image du degré d'ouverture des défauts. Des considérations énergétiques figurant dans [Nadot *et al.* 2006] confirment cette dépendance.

L'A.M. a donc été enrichie d'une étape qualifiée par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] d'approche de localisation-homogénéisation complémentaire. Cette procédure vise à établir la dépendance explicite des déformations $\{\mathbf{e}^{\beta D}\}$ en fonction de la déformation macroscopique \mathbf{E} . Elle utilise la thermodynamique comme guide et les expressions analytiques de la contrainte et de l'énergie libre homogénéisées comme points de départ. Par là, elle s'inscrit sans doute mieux dans les "entrailles" de l'A.M. qu'une stratégie qui consisterait à formuler le saut moyen au niveau des interfaces comportant des défauts ouverts par une approche "extérieure". En outre, la procédure proposée pourrait être généralisée dans le cas d'un comportement viscoélastique de la matrice. Enfin, comme nous le verrons au paragraphe II.4.3.a, la partie antisymétrique de $\mathbf{f}^{\beta D}$ pourra être déduite de l'expression de $\mathbf{e}^{\beta D}$ établie via la présente approche, ce qui offrira finalement une possibilité de remonter au saut moyen.

En élasticité, la déformation $\mathbf{e}^{\beta D}$ induite par les défauts ouverts aux interfaces d'une couche β est recherchée en fonction de la déformation macroscopique \mathbf{E} de sorte que la relation entre la contrainte de Cauchy macroscopique homogénéisée Σ et l'énergie libre homogénéisée W :

$$\Sigma = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{E}} \quad (\text{II.15})$$

soit explicitement satisfaite,

$$\text{avec : } \Sigma = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{|V_0|};$$

$$W = \langle w \rangle_{|V_0|}.$$

L'équation (II.15) est résolue en supposant que chaque déformation $\mathbf{e}^{\beta D}$ dépend linéairement de la déformation macroscopique \mathbf{E} . Il est également supposé que les N^β fonctions $\mathbf{e}^{\beta D} = \mathbf{e}^{\beta D}(\mathbf{E})$ (où N^β est le nombre de couches sièges de défauts ouverts) sont de forme identique, aspect en accord avec les fondements de l'A.M. Ceci fait émerger de l'unique équation disponible un système de N^β équations différentielles $\frac{\partial \mathbf{e}^{\beta D}}{\partial \mathbf{E}}$.

Après résolution, la forme générique des relations recherchées est la suivante [Nadot *et al.* 2006] :

$$\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D} = \boldsymbol{\Psi} \left(\bar{\mathbf{T}}, \mathbf{D}, \bar{\mathbf{D}}, h^\beta, \bar{\mathbf{n}}^\beta, \bar{\mathbf{d}}^\beta \right) : \mathbf{E} + \mathbf{r}^{\beta D} \quad (\text{II.16})$$

pour toute couche β comportant des défauts ouverts à ses interfaces.

La déformation induite par les défauts ouverts aux interfaces d'une couche β est ainsi obtenue, sous forme linéaire de \mathbf{E} en fonction de :

- sa morphologie locale ;
- la morphologie initiale du composite ($\bar{\mathbf{T}}$) ;
- la configuration globale de l'endommagement considérée (\mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$).

Le tenseur constant par rapport à \mathbf{E} , noté $\mathbf{r}^{\beta D}$, représente la déformation résiduelle induite par l'ouverture des défauts qui subsisterait à déformation macroscopique nulle ($\mathbf{E} = \mathbf{0}$), aspect physiquement relié à la rugosité des interfaces. Se posait alors la question de l'identification de ce tenseur. Dans un souci d'approche progressive, il a pour l'instant été négligé, soit : $\mathbf{r}^{\beta D} = \mathbf{0}$.

Ainsi, grâce à l'expression de $\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}$ pour chaque couche β , tous les champs locaux et les grandeurs homogénéisées peuvent être exprimés en fonction de la déformation macroscopique \mathbf{E} , des variables de distorsion $\{\boldsymbol{\epsilon}^{\text{FD}}\}$, aux côtés des paramètres tensoriels macroscopiques morphologique ($\bar{\mathbf{T}}$) et d'endommagement (\mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$). Le principe de résolution de la transition d'échelle en deux étapes (A.M. et approche complémentaire) pour un composite endommagé aux constituants élastiques est illustré en figure II.6.

II.4.3 Description de l'évolution de l'endommagement : approche discrète

La schématisation explicite de la microstructure, et notamment des interfaces, ainsi que la description des champs locaux qui en découle permettent de décrire l'évolution de l'endommagement à l'échelle des constituants en s'appuyant sur le cadre cinématique décrit au paragraphe II.2.1. Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] ont émis une hypothèse de frottement infini aux lèvres des défauts fermés. Dans le prolongement de cette hypothèse, les interfaces sont supposées subir une décohésion en mode normal. Par conséquent, un défaut passe toujours par un état ouvert avant un état fermé. Donc, l'évolution de l'endommagement au sein de la microstructure correspond à :

- la décohésion d'une nouvelle paire de défauts ouverts (évolution d'état) ;
- la fermeture de défauts existants (évolution de configuration).

La mise en place d'un critère de nucléation permet ainsi de décrire la création de nouveaux défauts d'interfaces. Ensuite, la formulation d'un critère de fermeture de défauts permet de décrire la fermeture des défauts préalablement créés. Dans une telle description, les tenseurs \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$ conservent leur statut de paramètres rendant compte de la dégradation et de l'anisotropie induites aux deux échelles par les défauts ouverts.

Ce paragraphe rappelle les deux critères proposés par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] ainsi que les méthodes d'évaluation des grandeurs requises à leur mise en œuvre, notamment celle dédiée au calcul du saut de déplacement moyen associé à un défaut ouvert à partir de l'expression de $\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}$. Bien que la mise en œuvre finale de l'ensemble de la modélisation

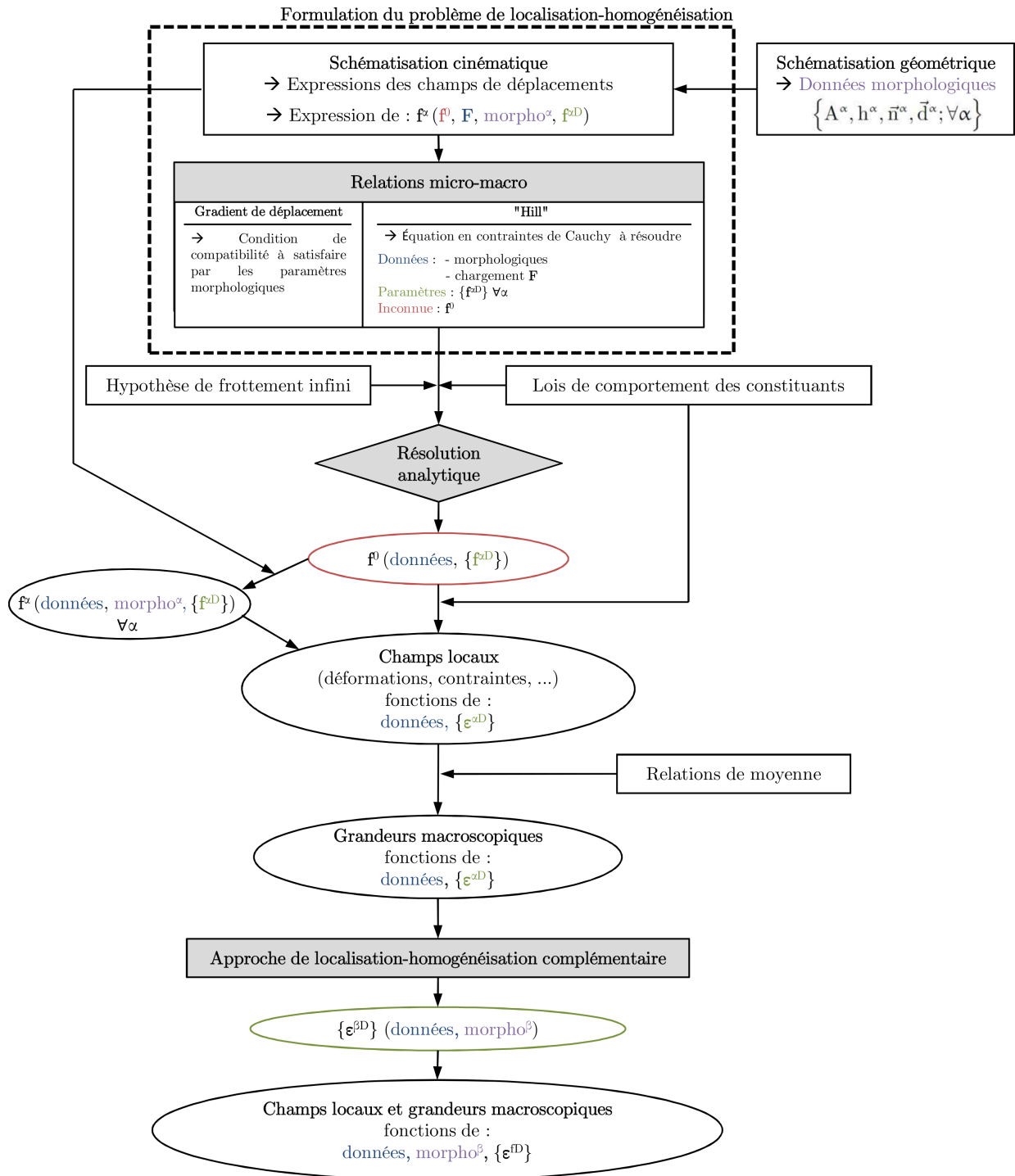


Figure II.6 – Méthodologie et principe de résolution de l'A.M. en présence d'endommagement (état fixé) dans le cadre H.P.P., d'après Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006].

ait été réalisée uniquement en élasticité, les critères restent valables pour des comportements plus généraux. Ils privilégient une formulation cinématique en accord avec la philosophie de l'A.M., fondée sur le respect des conditions cinématiques aux interfaces (conditions de continuité ou de saut de déplacement). En pratique, les critères sont testés à chaque incrément de chargement. Quand l'un ou l'autre est satisfait pour une ou plusieurs interfaces, les paramètres tensoriels \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$ sont actualisés en conséquence par ajout ou retrait des couches correspondantes dans les

sommations qui les définissent (équation (II.12)).

II.4.3.a Critère de nucléation

La formulation du critère de nucléation s'appuie sur la connaissance du champ de déplacement de part et d'autre des interfaces avant l'apparition de défauts. La décohésion au niveau des interfaces particules / matrice est supposée se produire uniquement en mode d'ouverture.

Considérons une couche α saine. Deux points P_1 et P_2 sont définis de part et d'autre de l'interface de référence I_1^α de cette couche dans la configuration initiale non déformée, respectivement dans la particule et dans la matrice (figure II.7). Ces deux points sont chacun à une distance λ de leur projection normale B_1 sur l'interface, B_1 étant le centre de gravité de I_1^α . Les points P_1 et P_2 sont soumis au déplacement de la phase à laquelle ils appartiennent. La différence de position actuelle de ces points, projetée sur la normale \vec{n}^α de l'interface I_1^α permet de formuler la grandeur d_{norm}^α :

$$d_{\text{norm}}^\alpha = 2\lambda + \Delta\vec{u} \cdot \vec{n}^\alpha \quad (\text{II.17})$$

où : $\Delta\vec{u} = \lambda \left[2\mathbf{f}^0 + (\mathbf{F} - \mathbf{f}^0) \frac{\vec{d}^\alpha \otimes \vec{n}^\alpha}{h^\alpha} \right] \cdot \vec{n}^\alpha$ est la différence des vecteurs déplacement des points P_2 et P_1 .

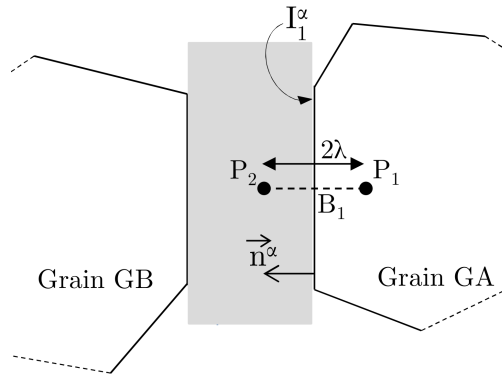


Figure II.7 – Schématisation et paramètres utilisés pour définir la nucléation de défauts en H.P.P. [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

La nucléation d'une paire de défauts au niveau des deux interfaces de la couche α est supposée apparaître lorsque la distance d_{norm}^α atteint une valeur critique notée d_{critique} . Ainsi, le critère de nucléation est formulé de la manière suivante :

$$d_{\text{norm}}^\alpha \geq d_{\text{critique}} \Rightarrow \text{décohésion} \quad (\text{II.18})$$

La distance critique d_{critique} est liée aux propriétés d'adhésion entre la matrice et les particules du composite considéré. Elle doit être identifiée expérimentalement en utilisant par exemple des mesures de champs cinématiques *in situ* [Hild *et al.* 2011, Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. L'identification de d_{critique} est indissociable du choix de la longueur caractéristique 2λ (distance initiale entre les deux points P_1 et P_2 de part et d'autre des interfaces). Cela ne signifie pas pour autant que le critère lui-même dépende de cette longueur : il est en effet invariant lorsque λ est remplacé par $k\lambda$, dès lors que la valeur de d_{critique} est identifiée en conséquence. Dans tous les cas, λ doit né-

cessairement être choisi plus petit que la plus petite distance intergranulaire au sein du composite schématisé.

Au vu de l'expression de d_{norm}^α (équation (II.17)), la nucléation d'une paire de défauts au niveau d'une couche α dépend de :

- la morphologie initiale globale du composite et de son état d'endommagement si d'autres couches sont déjà décollées (via \mathbf{f}^0) ;
- l'orientation des interfaces de la couche α via $\vec{\mathbf{n}}^\alpha$;
- son épaisseur h^α et le vecteur $\vec{\mathbf{d}}^\alpha$ reliant les centroïdes des particules entourant la couche α .

Si le critère (II.18) est vérifié pour une couche α , celle-ci devient une couche comportant une paire de défauts ouverts à ses interfaces, c'est-à-dire une couche de type β . Les paramètres \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$ sont donc incrémentés de la couche correspondante.

Le gradient de déplacement de la couche est donné par l'équation (II.4), avec $\alpha \equiv \beta$. Dans cette expression, le terme additionnel $\mathbf{f}^{\beta\text{D}}$ n'est connu que partiellement : seule $\boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}}$, la déformation induite par les défauts aux interfaces de la couche β et impliquée dans les estimations aux deux échelles, est connue grâce à l'approche complémentaire décrite au paragraphe II.4.2 (équation (II.16)). La part rotation $\boldsymbol{\omega}^{\beta\text{D}}$, telle que $\mathbf{f}^{\beta\text{D}} = \boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}} + \boldsymbol{\omega}^{\beta\text{D}}$, est inconnue. Or, la connaissance de $\mathbf{f}^{\beta\text{D}}$ est nécessaire à l'évaluation du vecteur moyen de discontinuité de déplacement le long des interfaces décollées (voir la forme (II.2)), lui-même requis pour la formulation cinématique d'un critère de fermeture. La rotation $\boldsymbol{\omega}^{\beta\text{D}}$ est alors déterminée à partir de la connaissance de $\boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}}$, de sorte que les sauts moyens sur les deux interfaces de la couche soient opposés. Ceci conduit à résoudre : $\det(\mathbf{f}^{\beta\text{D}}) = \det(\boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}} + \boldsymbol{\omega}^{\beta\text{D}}) = 0$, où $\boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}}$ est donné par l'équation (II.16). En se plaçant dans un repère local lié à la couche au moment de son décollement et conservé ultérieurement, le calcul de $\boldsymbol{\omega}^{\beta\text{D}}$ se ramène à l'évaluation d'une unique inconnue. Un retour dans le repère global permet l'obtention du tenseur de rotation $\boldsymbol{\omega}^{\beta\text{D}}$ dans ce repère, permettant d'évaluer $\mathbf{f}^{\beta\text{D}} = \boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}} + \boldsymbol{\omega}^{\beta\text{D}}$ et par suite le saut moyen $\langle \vec{\mathbf{b}}^\beta \rangle_{I_1^\beta} = \mathbf{f}^{\beta\text{D}} \cdot \vec{\mathbf{Y}}^{\beta\text{B}_1}$, B_1 étant le barycentre de l'interface I_1^β . Le détail de la procédure de résolution pourra être consulté dans [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

Calculées à partir de l'expression (II.16) de $\boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}}$, les valeurs de $\langle \vec{\mathbf{b}}^\beta \rangle_{I_1^\beta} = -\langle \vec{\mathbf{b}}^\beta \rangle_{I_2^\beta}$ jouissent implicitement des mêmes dépendances que $\boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}}$ (morphologie locale de la couche concernée, morphologie globale du composite, effets des autres défauts éventuellement présents aux interfaces des autres couches). Enfin, la méthode de détermination de $\boldsymbol{\omega}^{\beta\text{D}}$, $\mathbf{f}^{\beta\text{D}}$ et $\langle \vec{\mathbf{b}}^\beta \rangle_{I_1^\beta} = -\langle \vec{\mathbf{b}}^\beta \rangle_{I_2^\beta}$ ne dépend du comportement des constituants (particules et matrice) qu'au travers de la forme de $\boldsymbol{\epsilon}^{\beta\text{D}}$. À ce titre, elle pourrait être réutilisée pour des comportements plus complexes que l'élasticité.

II.4.3.b Critère de fermeture

Considérons une couche β , c'est-à-dire une couche comportant des défauts ouverts à ses interfaces. Le critère de fermeture proposé par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tant que : } \langle \vec{\mathbf{b}}^\beta \rangle_{I_1^\beta} \cdot \vec{\mathbf{n}}^\beta > 0 \quad , \text{ les défauts restent ouverts.} \\ \text{Dès que : } \langle \vec{\mathbf{b}}^\beta \rangle_{I_1^\beta} \cdot \vec{\mathbf{n}}^\beta = 0 \quad , \text{ les défauts se ferment.} \end{array} \right. \quad (\text{II.19})$$

Le critère est testé à chaque pas de chargement suivant la nucléation des défauts, avec : $\langle \vec{b}^\beta \rangle_{I_1^\beta} = \mathbf{f}^{\beta D} \cdot \vec{Y}^{B_1}$ évalué selon la méthodologie du paragraphe précédent, assurant la vérification systématique de la relation d'opposition entre les sauts moyens de déplacement aux interfaces.

Si le critère (II.19) est vérifié pour une couche β , celle-ci devient une couche de type f, avec des défauts fermés à ses interfaces. La contribution \mathbf{e}^{fD} à la déformation totale d'une couche f est calculée à partir de la déformation $\mathbf{e}^{\beta D}$ à l'instant de la fermeture des défauts, soit pour $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{fermeture couche } \beta}$, soit :

$$\mathbf{e}^{fD} = \mathbf{e}^{\beta D} (\mathbf{E}_{\text{fermeture couche } \beta}) \quad (\text{II.20})$$

L'hypothèse d'un coefficient de frottement infini pour les défauts fermés suggère que la déformation \mathbf{e}^{fD} induite par ces défauts reste inchangée tant qu'ils ne sont pas réouverts. De même, les sauts moyens de déplacement aux interfaces $\langle \vec{b}^f \rangle_{I_1^f} = \mathbf{f}^{fD} \cdot \vec{Y}^{B_1} = -\langle \vec{b}^f \rangle_{I_2^f}$ (avec : $\mathbf{f}^{fD} = \mathbf{f}^{\beta D} (\mathbf{F}_{\text{fermeture couche } \beta})$) n'évoluent pas tant que les défauts restent fermés. Enfin, juste après la fermeture, les paramètres \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$ sont actualisés par retrait de la couche f des sommes correspondantes.

II.4.4 Illustration numérique

L'ensemble du modèle - estimations aux deux échelles via l'A.M. complétées de l'approche complémentaire (figure II.6) et dotées des trois critères précédents - a été mis en œuvre numériquement grâce à une procédure de résolution séquentielle [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. La programmation a été réalisée en Fortran 90. La boucle principale du programme intègre un algorithme de "prédiction-correction" qui permet d'adapter automatiquement le pas de chargement au séquençage précis des nucléations, assurant ainsi une bonne prise en compte des effets associés à chaque nouvelle nucléation sur la redistribution des champs locaux, et par suite sur les tests d'interface ultérieurs. Le lecteur est invité à se reporter à la thèse de Dartois [Dartois 2008] ou au papier associé [Dartois *et al.* 2013] pour les détails. Ce paragraphe a pour objectif d'illustrer, à travers une simulation réalisée par Dartois en élasticité linéaire, les aptitudes de l'A.M. à fournir l'accès à l'estimation simultanée des caractéristiques de l'endommagement et de ses manifestations aux deux échelles.

Le composite considéré est une microstructure aléatoire à particules polyédriques générée numériquement, constituée de 400 particules polyédriques occupant 75% du volume total. Elle présente un étalement granulométrique plutôt modéré et satisfait par construction les critères de la schématisation. La condition de compatibilité (II.7) est vérifiée pour le nombre de particules considéré avec une très bonne précision. Les paramètres morphologiques initiaux des 2400 couches sont identifiés par de simples mesures géométriques. Les constituants ont un comportement élastique linéaire isotrope. Les propriétés mécaniques sont répertoriées dans le tableau II.2.

	Particules	Matrice
Module de Young E (GPa)	120	4
Coefficient de Poisson ν	0.3	0.45

Tableau II.2 – Propriétés élastiques des constituants considérés dans les travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

Afin d'exprimer la grandeur d_{norm}^α (équation (II.17)) intervenant dans le critère de nucléation (II.18), la demi-longueur caractéristique λ est fixée à $h_{\text{min}}/10$, où $h_{\text{min}} = 0.029$ mm est la plus petite épaisseur de couches. La valeur de d_{critique} est fixée arbitrairement à $3.5 \mu\text{m}$. Enfin, les effets de rugosité sont négligés et par suite les tenseurs \mathbf{r}^{BD} , traduisant les déformations résiduelles à la décharge complète du matériau, sont nuls.

Le chargement est imposé sous forme d'incrémentes du gradient de déplacement macroscopique $\Delta\mathbf{F}$. Il comprend les trois phases successives suivantes :

- (i) extension dans la direction 1 ($\Delta F_{11} > 0$) et contractions dans les directions transverses 2 et 3 avec $\Delta F_{22} = \Delta F_{33} = -0.3\Delta F_{11}$;
- (ii) glissement simple dans le plan (1,2), avec $\Delta F_{12} > 0$;
- (iii) contraction dans la direction 1 ($\Delta F_{11} < 0$) et extensions dans les directions transverses 2 et 3 ($\Delta F_{22} = \Delta F_{33} = -0.3\Delta F_{11}$), chargement inverse au chargement (i). Le niveau de glissement atteint à la fin de la phase (ii) est maintenu.

Les résultats brièvement présentés dans ce paragraphe présentent des estimations obtenues aux deux échelles pour la microstructure à particules polyédriques considérée.

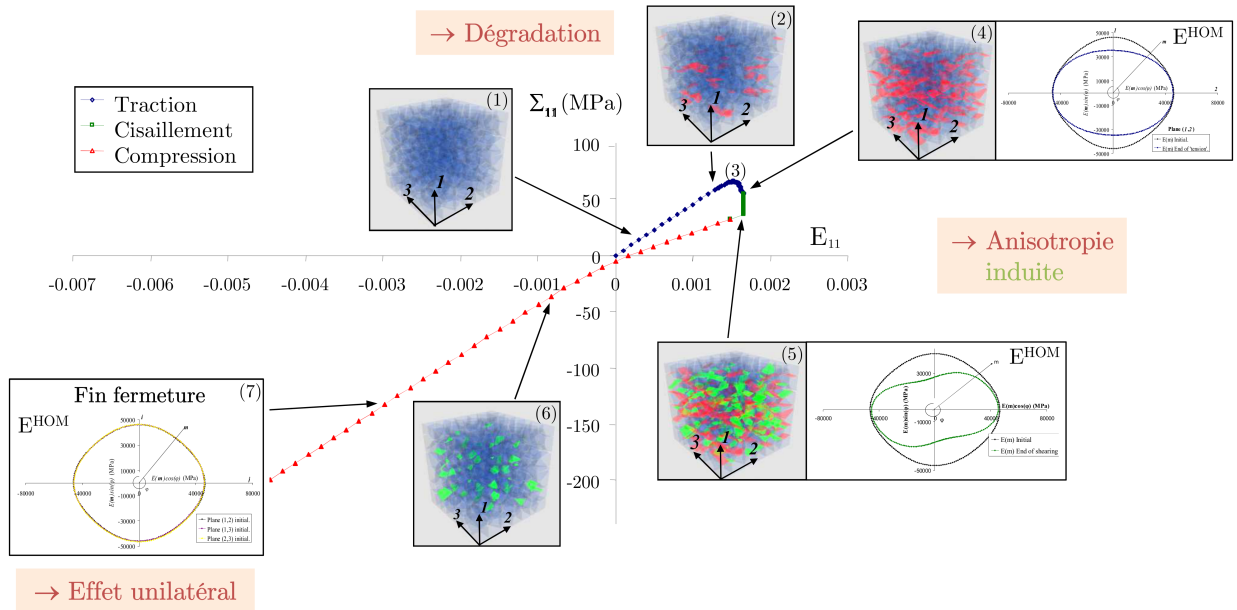


Figure II.8 – Contrainte homogénéisée Σ_{11} en fonction de la déformation macroscopique E_{11} lors de la simulation d'un trajet "traction - glissement simple - compression".

La figure II.8 présente l'évolution de la contrainte homogénéisée Σ_{11} en fonction de la déformation macroscopique E_{11} associée à des représentations 3-D de la microstructure montrant la position et l'orientation des défauts ouverts et également des représentations du module de Young homogénéisé dans les plans (1,2), (1,3) ou (2,3). Le module $E(m)$ y est tracé, m étant une direction arbitraire de chaque plan. La valeur $E(m)$ est déduite du tenseur de rigidité homogénéisé $\mathbf{L}(\bar{\mathbf{T}}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\bar{\mathbf{D}}})$. Ces représentations du module de Young permettent de suivre l'évolution de l'anisotropie induite par l'endommagement (traduite via les paramètres tensoriels $\bar{\mathbf{D}}$ et $\bar{\bar{\mathbf{D}}}$).

En (1), le matériau est sain et la réponse homogénéisée est élastique linéaire. La linéarité de la réponse est perdue avec l'apparition des premières nucléations de défauts. Le rapprochement

des points traduit l'activation de l'algorithme de "prédiction-correction". Le seuil d'initiation de l'endommagement peut être détecté précisément dès lors que les points commencent à se rapprocher sur la courbe. De (2) à (4), les nucléations de défauts sont de plus en plus nombreuses et rapprochées. Les défauts apparaissent sur les interfaces dont la normale est très proche de la direction 1 d'extension. Nous observons un adoucissement de la réponse homogénéisée à partir de (3). Au terme de la phase de "traction", le module de Young E est principalement dégradé suivant la direction 1 d'extension. Entre (4) et (5), durant la phase de glissement simple, de nouveaux défauts apparaissent, dont les normales sont plus dispersées. Au terme de la phase de glissement simple (5), l'anisotropie est encore plus prononcée (voir la forme ellipsoïdale de $E(m)$). Puis, après l'étape (5), la phase de "compression" commence. Une première étape consiste à décharger la phase (i) de "traction" jusqu'à $E_{11} = 0$. Après quoi, la phase réellement compressive démarre avec $E_{11} < 0$. Les défauts ouverts lors de la phase d'extension se ferment alors progressivement et sont tous fermés en (6). Ceci mène à la récupération progressive du module initial, qui devient complète en (7) lorsque les défauts apparus durant la phase de glissement simple sont également fermés. Des considérations plus précises concernant l'analyse de cette réponse homogénéisée avec le suivi parallèle de l'anisotropie induite et la visualisation simultanée des défauts figurent dans [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

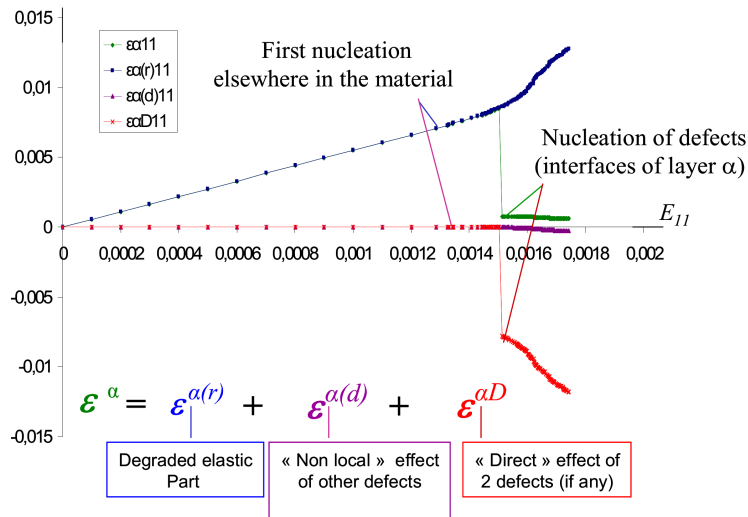


Figure II.9 – Déformation totale et induites par endommagement (composante 11) dans une couche de matrice dont la normale est orientée suivant la direction 1, en fonction de la déformation macroscopique E_{11} lors de la simulation d'un trajet en extension (phase (i)).

Afin d'illustrer l'accès aux champs locaux, nous présentons ici succinctement l'influence progressive de l'endommagement apparaissant au sein de la microstructure sur la déformation d'une couche α particulière dont la normale est orientée suivant la direction 1 d'extension. La figure II.9 représente l'évolution des composantes des trois contributions (équation (II.13)) impliquées dans la déformation totale ϵ^α de la couche α considérée durant la phase d'"extension" (phase (i) du chargement). Ainsi :

- tant que le matériau est sain, $\epsilon_{11}^\alpha = \epsilon_{11}^{\alpha(r)}$ reste une fonction linéaire de la déformation macroscopique \mathbf{E} .

- lorsque les premiers défauts apparaissent ailleurs dans la microstructure, le terme $\epsilon_{11}^{\alpha(d)}$ traduisant leur influence est activé, tandis que $\epsilon_{11}^{\alpha D}$ relatif à l'effet d'un éventuel endommagement aux interfaces de la couche considérée reste nul. La contribution $\epsilon_{11}^{\alpha(d)}$, bien plus faible que $\epsilon_{11}^{\alpha(r)}$ ($10^{-5} \ll 10^{-2}$), est difficile à distinguer. Du fait de la nucléation progressive des défauts au sein du composite, l'évolution de $\epsilon_{11}^{\alpha} \approx \epsilon_{11}^{\alpha(r)}$ devient non-linéaire via la dépendance du tenseur de localisation $\mathbf{C}^{\alpha}(\bar{\mathbf{T}}, \mathbf{D}, \bar{\mathbf{D}})$ aux paramètres d'endommagement qui évoluent (ajout des couches correspondantes pour chaque nouvelle nucléation).
- le saut observé pour ϵ_{11}^{α} (courbe verte) correspond à la décohésion de la couche α . Après la nucléation des défauts à ses interfaces, l'évolution de la déformation totale de la couche α est quasi-nulle. La compétition entre les contributions $\epsilon_{11}^{\alpha(r)}$ et $\epsilon_{11}^{\alpha D}$ peut être observée. $\epsilon_{11}^{\alpha(r)}$ représente l'extension progressive de la couche, du fait du chargement macroscopique, tandis que $\epsilon_{11}^{\alpha D}$ rend compte de la contraction de la couche induite par l'ouverture progressive des défauts nucléés à ses interfaces.

Tous les éléments nécessaires à la compréhension de l'Approche Morphologique développée en présence d'endommagement jusqu'au début des présents travaux de thèse viennent d'être présentés. Une approche complémentaire a été mise en œuvre afin d'accéder aux déformations locales induites par les défauts ouverts [Nadot *et al.* 2006]. Des critères ont été introduits à l'échelle des constituants afin de décrire l'évolution de l'endommagement et ses effets aux deux échelles [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

Le paragraphe suivant propose une discussion plus large sur les deux versions de l'A.M. présentées dans ce chapitre. Cette analyse permettra notamment de positionner l'A.M. vis-à-vis des enjeux relatifs à la modélisation multi-échelle des composites énergétiques qui ont été relevés au paragraphe I.4.

II.5 Discussion

La schématisation géométrique et la description cinématique au départ de l'Approche Morphologique lui confèrent un caractère non classique permettant de la distinguer des approches existantes. Ce paragraphe met en évidence quelques aspects donnant la possibilité de dégager les spécificités de l'A.M., ses avantages et ses limites vis-à-vis des objectifs fixés.

II.5.1 Schématisation de la microstructure initiale

La représentation de la microstructure à la base de l'A.M. présente un caractère explicite : chaque particule, et surtout chaque zone intergranulaire du composite, sont représentées et caractérisées par des paramètres morphologiques. De ce point de vue, l'A.M. se distingue des méthodes d'estimation basées sur le principe d'Eshelby. Cela permet d'une part l'accès à une estimation des champs dans les zones intergranulaires et, d'autre part, d'intégrer dans les estimations aux deux échelles une information relativement riche concernant la répartition et la morphologie des constituants (sous réserve que le processus de polyédrisation soit optimisé). La distribution spatiale des vecteurs \vec{d}^α reliant les centroïdes des particules constitue par exemple un indicateur de leur répartition au sein du volume. Le tenseur $\bar{\mathbf{T}}$, émergeant au sein des expressions obtenues dans la version H.P.P., se présente comme un tenseur de "fabrique" témoin de la morphologie globale initiale du composite. La schématisation géométrique au départ de l'A.M. est de plus adaptée, même exclusivement réservée, aux composites particuliers fortement chargés de par l'hypothèse de faible épaisseur initiale des couches.

Enfin, en mettant l'accent sur la description du caractère granulaire et en particulier des interfaces (via \vec{n}^α notamment), la schématisation géométrique constitue en outre un atout pour la prise en compte de l'endommagement par décohésion. Les positions et orientations des défauts sont implicitement prises en compte dès le départ. Les deux tenseurs \mathbf{D} et $\bar{\mathbf{D}}$, présents dans les estimations aux deux échelles obtenues en présence d'endommagement, permettent de décrire l'influence du caractère granulaire sur la façon dont le matériau se dégrade avec une anisotropie induite conditionnée par ce même caractère.

II.5.2 Hétérogénéité dans la matrice, accès aux champs locaux

L'exploitation de la double schématisation (géométrique et cinématique) au départ de l'A.M. conduit à la relation (II.3) (respectivement (II.4)) qui exprime le gradient de la transformation (respectivement de déplacement) \mathbf{f}^α d'une couche α quelconque en fonction du gradient macroscopique \mathbf{F} , de celui des particules \mathbf{f}^0 et des paramètres morphologiques propres à la couche α considérée. Si nous examinons les développements conduisant à cette relation, nous sommes en mesure de dissocier les contributions respectives de chacune des deux schématisations sur ce résultat. Il apparaît en effet que la prise en compte de fluctuations dans la matrice, fonctions de la morphologie locale, est rendue possible par la représentation microstructurale. L'accès à une expression analytique, permettant d'en témoigner de manière explicite, résulte quant à lui des hypothèses cinématiques. Quoi qu'il en soit, la double schématisation au départ de l'A.M. offre un moyen de décrire une certaine hétérogénéité de champs au sein de la phase matrice - représentée par un assemblage de couches aux caractéristiques morphologiques différentes - et d'en tenir compte dans l'estimation

du comportement homogénéisé. Ceci constitue un point positif dans un contexte d'homogénéisation non-linéaire puisqu'il est de nos jours bien établi que la prise en compte d'indicateurs des fluctuations intraphases des champs locaux est essentielle à une estimation correcte du comportement global (paragraphe I.2.3).

D'un point de vue physique, la déformation dans une zone intergranulaire spécifique résulte des interactions entre particules. La forme (II.3) (respectivement (II.4)) obtenue ici pour \mathbf{f}^α montre que les effets d'interaction entre deux particules opposées dépendent de l'épaisseur et de l'orientation de la zone intergranulaire considérée et impliquent un indicateur de la taille des deux particules environnantes (via \vec{d}^α). Comme le montre l'expression (II.4) pour le matériau endommagé en H.P.P., l'hétérogénéité de champ dans la matrice est renforcée par la présence des décohésions (voir le terme additionnel $\mathbf{f}^{\alpha D}$ pour les couches décollées). Les effets d'interaction entre deux particules opposées sont ainsi influencés par l'état des interfaces. Les dépendances précitées aux paramètres morphologiques sont particulièrement bienvenues étant donné la forte influence des interactions entre particules sur les mécanismes de décohésion observés et de l'hétérogénéité induite dans la matrice au sein des composites fortement chargés étudiés sous sollicitations lentes. En particulier, ces dépendances pour le champ de déplacement d'une couche α saine se retrouvent dans l'expression de d_{norm}^α impliqué dans le critère de nucléation cinématique proposé par Dartois (équation (II.17)). De cette façon, nous nous attendons à ce qu'un certain effet de taille de particule sur la chronologie des décohésions puisse être décrit (via la présence de \vec{d}^α , indicateur de la taille des particules opposées). À titre d'illustration simple, considérons trois couches α identiques (en termes d'orientation, d'épaisseur et d'orientation de \vec{d}^α), la première séparant deux grosses particules, la seconde une petite et une grosse particules, et la troisième deux petites particules. Selon l'équation (II.17), le décollement de la première couche devrait précéder celui de la deuxième, lui-même plus précoce que celui de la troisième.

Si l'A.M. prend en compte une hétérogénéité au sein de la matrice, ce n'est en revanche pas le cas dans la phase des particules, beaucoup moins déformables dans la gamme de sollicitations retenues.

Dans l'A.M., chaque couche α est uniquement sollicitée par le biais de ses interfaces avec les particules qu'elle sépare. Le champ de déplacement correspondant, supposé linéaire, d'où découle l'expression (II.3) (respectivement (II.4)) de \mathbf{f}^α y est en effet recherché de sorte à assurer les conditions cinématiques aux seules interfaces. Ainsi, rien n'est directement transmis d'une couche à l'autre via les zones de recouvrement (zone encerclée en figure II.3(b)) où la compatibilité des champs n'est d'ailleurs pas assurée. La transmission des effets au sein de la matrice, et plus généralement au sein de l'assemblage grains / couches, est décrite via les particules comme l'exprime la présence de \mathbf{f}^0 dans les équations (II.3) et (II.4). C'est donc au travers de \mathbf{f}^0 qu'une zone intergranulaire particulière ressent les effets d'une autre zone du composite, par exemple ceux des défauts aux interfaces des autres couches (voir la dépendance de $\boldsymbol{\epsilon}^\alpha$ aux ensembles $\{\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}\}$ et $\{\boldsymbol{\epsilon}^{\beta D}\}$ résultant de la forme II.12 et commentée au paragraphe II.4.1). Une telle transmission, conséquence directe de la façon dont est recherché le champ de déplacement au sein d'une couche, est reliée à la dernière hypothèse cinématique négligeant la description des perturbations au voisinage des arêtes des polyèdres. Cette hypothèse constitue en quelques sortes un moyen de s'affranchir des effets des concentrateurs de champ artificiellement introduits par la polyédrisation des particules, en réalité

émoussées. Pour le matériau sain, des confrontations A.M. / E.F. ont montré que l'A.M., qui d'un côté introduit des concentrateurs et de l'autre en néglige les effets, est plus proche de la solution E.F. sur une microstructure réelle que sur une microstructure réelle polyédrique [Touboul 2007].

II.5.3 Condition de compatibilité et Volume Élémentaire Représentatif

Revenons à présent sur la condition de compatibilité évoquée au paragraphe II.2.2. Elle permet d'assurer la compatibilité entre mouvement global et local au sens de la relation de moyenne (II.5) (respectivement (II.6)). En portant sur la taille et les paramètres morphologiques du volume schématisé (configuration initiale), et par suite sur la morphologie initiale réelle du matériau considéré, elle se présente comme un critère d'applicabilité de l'A.M. à un composite donné et comme un critère de choix du V.E.R. relatif à cette méthodologie. En effet, il est possible d'imaginer que certains composites ne puissent pas être schématisés selon les exigences de l'A.M. tout en assurant simultanément la condition (II.7) et ce, quelle que soit la taille du volume initial considéré. Pour de tels matériaux, la compatibilité cinématique entre les échelles micro et macroscopiques n'est pas satisfaite, si bien que l'A.M. ne leur est pas applicable. Dans le cas contraire, il se pourrait néanmoins qu'un volume statistiquement représentatif de la morphologie du matériau étudié (V.E.R. morphologique) ne soit pas de taille suffisante pour que la condition (II.7) soit satisfaite après schématisation (même optimisée). Des tailles croissantes devront alors être testées jusqu'à satisfaire ce critère purement géométrique avec une précision raisonnable. En conséquence, la condition de compatibilité doit être testée en amont de toute tentative d'estimation des champs locaux ou de la réponse macroscopique.

II.5.4 Système en contraintes, principe de résolution

Le système (II.8) pour le matériau sain, respectivement (II.9) pour le matériau endommagé, ainsi que la relation qui en découle permettant de déterminer \mathbf{f}^0 , méritent d'être commentés. Si l'accès à l'estimation des champs locaux hétérogènes dans la matrice tient plutôt de la schématisation explicite de la microstructure, la relative simplicité de la résolution et de cet accès, en présence de différentes non-linéarités, résulte principalement de la schématisation cinématique. C'est en effet grâce aux hypothèses cinématiques, et indépendamment du comportement local, que le gradient de la transformation (respectivement de déplacement) \mathbf{f}^α d'une couche α quelconque est obtenu sous une forme additive du gradient macroscopique \mathbf{F} et de celui des particules \mathbf{f}^0 (équation (II.3), respectivement (II.4)). En présence d'endommagement, l'hypothèse de linéarité du champ de déplacement de part et d'autre d'une interface impose une forme affine au saut de déplacement de sorte que la structure additive de \mathbf{f}^α n'est pas modifiée mais juste complétée d'un terme, $\mathbf{f}^{\alpha D}$, caractéristique du saut en question. L'additivité de l'expression de \mathbf{f}^α induit alors naturellement (à partir du principe de macrohomogénéité ou du lemme de Hill) celle de l'équation à résoudre pour déterminer \mathbf{f}^0 . C'est finalement une telle structure additive pour la relation (II.10) pour le matériau sain, respectivement (II.11) pour le matériau endommagé, au centre du problème de localisation-homogénéisation qui en facilite la résolution. Découlent de cette structure additive des expressions analytiques, dès lors que les relations contrainte-déformation locales (matrice et particules) sont elles-mêmes additives de plusieurs contributions linéaires. C'est le cas en H.P.P. pour un comportement élastique, mais également pour un comportement viscoélastique linéaire de la matrice et ce,

même en présence d'endommagement [Nadot *et al.* 2006].

Par ailleurs, nous noterons qu'ici, même si la première relation apparaissant dans le système en contraintes (II.8) (respectivement (II.9)) est une relation de moyenne « classique » adaptée à la discrétisation introduite, la seconde relation est au contraire tout à fait spécifique à l'A.M. et aux microstructures particulières auxquelles elle se destine. En effet, les contraintes y sont vues d'un point de vue granulaire, comme des forces transmises d'une particule à l'autre via les couches jouant le rôle de zones de contact entre particules. Cette seconde relation résulte de la façon dont est décrite la transmission des effets au sein de l'agrégat, cet aspect étant lui-même issu de la description cinématique (voir paragraphe II.5.2).

Que ce soit en transformations finies pour le matériau sain ou en H.P.P. pour le matériau endommagé, la formulation du problème de localisation-homogénéisation jusqu'à l'obtention de l'équation à résoudre pour déterminer \mathbf{f}^0 est réalisée indépendamment du comportement des particules et de la matrice. Dans chacun des deux cas, le principe de la résolution décrit au paragraphe II.3 est ainsi identique quel que soit le comportement local envisagé. La résolution revêt par ailleurs un caractère direct sans linéarisation préalable des lois constitutives non-linéaires locales, contrairement aux méthodes de type Eshelby. Par là même, l'A.M. évite les questionnements liés au choix d'une procédure de linéarisation. Bien que non présentée dans ce manuscrit, une autre manifestation du caractère direct de la résolution s'apprécie en viscoélasticité (petites ou grandes déformations) [Nadot *et al.* 2006, Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. La résolution s'effectue en effet dans l'espace réel, c'est-à-dire sans recours aux transformées de Laplace et à la "lourdeur" associée au retour dans l'espace - temps réel. Ces deux aspects concernant la résolution s'ajoutent à une autre manifestation du caractère direct de l'A.M., intimement liée à la schématisation microstructurale explicite, à savoir l'accessibilité aux champs locaux dans les zones intergranulaires.

Enfin, malgré les points positifs que ce chapitre a permis de dégager vis-à-vis des capacités de l'A.M. à répondre aux enjeux recensés au paragraphe I.4 (hétérogénéité dans la matrice, aspect direct de la résolution permettant d'intégrer simultanément plusieurs non-linéarités, accès à une estimation des champs locaux et aux caractéristiques de la décohésion en H.P.P.), quelques commentaires s'imposent concernant l'"admissibilité" théorique des estimations locales. Tout d'abord, les champs dans les petites zones de recouvrement des couches au voisinage immédiat des arêtes des polyèdres (zone encerclée en figure II.3(b)) ne sont pas accessibles. D'autre part, l'homogénéité par morceaux du gradient de déplacement local (inhérente à la description cinématique) engendre naturellement celle du champ de contraintes estimé dès lors que les propriétés mécaniques des particules et de la matrice sont considérées homogènes. Dans ce cas, la réciprocité des contraintes aux interfaces particules / matrice n'est pas assurée. Nous pouvons néanmoins montrer que la façon de calculer \mathbf{f}^0 , pour le matériau sain par exemple - de sorte à satisfaire l'équation (II.10) -, permet toujours au champ de contraintes estimé de respecter l'égalité fondamentale $\mathbf{S}^* : \mathbf{F} = \langle \mathbf{s}^* : \mathbf{f} \rangle_{|V_0|}$, avec $\mathbf{S}^* = \langle \mathbf{s}^* \rangle_{|V_0|}$ et ce, même si celui-ci ne vérifie pas la continuité du vecteur contrainte au départ du principe de macrohomogénéité ayant servi à établir l'équation (II.10). Ce défaut était déjà présent dans les travaux originaux de Christoffersen [Christoffersen 1983] en H.P.P., dont l'A.M. en transformations finies constitue une extension directe.

II.5.5 Travaux d'évaluation antérieurs et poursuite des recherches

Une évaluation quantitative de la base cinématique au départ de l'A.M. (version en transformations finies pour le matériau sain) a été réalisée dans les travaux de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] grâce à la confrontation des estimations locales et globales aux solutions de référence résultant de simulations éléments finis en champs complets. Cette campagne de confrontation a été menée en hyperélasticité et viscohyperélasticité pour une microstructure périodique 3-D simple [Nadot-Martin *et al.* 2008], une microstructure périodique complexe et finalement une microstructure propergol réelle [Touboul 2007]. Les résultats révèlent la pertinence du cadre cinématique original de Christoffersen [Christoffersen 1983] qui a été conservé dans la version de l'A.M. en transformations finies. Par ailleurs, les confrontations en viscohyperélasticité ont confirmé de manière quantitative les aptitudes de l'A.M. (auparavant mises en évidence en viscoélasticité H.P.P. au travers de l'analyse des expressions analytiques [Nadot *et al.* 2006]) à traduire correctement la nature spatio-temporelle des interactions locales induites par le couplage espace-temps dans le milieu hétérogène, de même que leur manifestation macroscopique, l'effet mémoire longue. L'A.M. satisfait en cela l'un des critères essentiels pour une méthode de transition d'échelle destinée à décrire des milieux viscoélastiques (voir paragraphes I.2.4 et I.4).

Pour ce qui est de la version de l'A.M. en H.P.P. avec endommagement, les simulations réalisées par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013], dont certaines ont été reportées dans ce chapitre (paragraphe II.4.4), ont illustré qualitativement les aptitudes de la modélisation à décrire l'évolution de la réponse homogénéisée, notamment celle de son anisotropie, et des champs locaux en fonction des événements discrets se produisant à l'échelle des interfaces : nucléations ou fermetures des décohésions. La possibilité d'accéder simultanément à la position et aux caractéristiques (orientation et morphologie) des défauts au sein de la microstructure a été démontrée. L'accès en H.P.P. à des expressions analytiques a par ailleurs offert la possibilité de simuler l'évolution des différentes contributions de l'endommagement sur la déformation d'une zone intergranulaire spécifique. Tous ces résultats ont permis d'illustrer le potentiel de l'A.M. à fournir les données d'entrée des modèles réactifs conformément au cahier des charges initial (paragraphe I.4).

Enfin, la façon de traduire les interactions complexes entre particules opposées inhérentes aux forts taux de charges en termes d'hétérogénéité induite dans la matrice a été discutée, de même que la restitution potentielle d'effets de taille sur la chronologie des nucléations grâce à cette hétérogénéité dépendante de la morphologie des zones intergranulaires. En revanche, la discussion est restée théorique et aucune illustration concrète n'a pour l'instant été fournie. Le chapitre suivant propose de pallier cette déficience avant d'envisager au chapitre IV la poursuite des développements théoriques par la prise en compte au sein de l'A.M. du couplage entre les transformations finies et l'endommagement.

CHAPITRE

— III —

ÉVALUATION DE
L'APPROCHE MORPHOLOGIQUE :
EFFETS DE TAILLE ET D'INTERACTION
ENTRE PARTICULES

Plan du chapitre

Liste des notations spécifiques au chapitre	65
Introduction	67
III.1 Contexte de l'étude	68
III.1.1 Effet de la taille des particules	68
III.1.2 Effet d'interaction entre les particules	69
III.1.3 Bilan et démarche adoptée	72
III.2 Effets de taille et d'interaction entre particules pour des microstructures périodiques	74
III.2.1 Définition de la cellule de base	74
III.2.2 Représentation de la microstructure avec l'A.M.	75
III.2.3 Effet de la taille de particule	76
III.2.4 Effet d'interaction entre les particules	78
III.2.5 Bilan	79
III.3 Effet d'interaction entre particules au sein de microstructures aléatoires monomodales	81
III.3.1 Génération numérique	81
III.3.2 Méthodologie adoptée	81
III.3.3 Résultats	84
III.4 Chronologie des nucléations au sein d'une microstructure aléatoire bimodale	86
III.4.1 Génération numérique	86
III.4.2 Méthodologie adoptée	87
III.4.3 Résultats	90
III.5 Conclusion	93

Liste des notations spécifiques au chapitre

Les notations plus générales et utilisées tout au long de ce manuscrit sont listées en page ix. Les conventions d'usage sont exposées en page v.

Grandeurs cinématiques

\mathbf{F}	gradient de déplacement macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^0	gradient de déplacement des grains.	tenseur o.2 (3×3)
$\Delta\mathbf{F}$	incrément de gradient de déplacement macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)

Déformations

\mathbf{E}	déformation macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
$E_{\text{debonding}}$	[<i>Étude de microstructures périodiques</i>] déformation macroscopique axiale pour laquelle a lieu la première décohésion de la couche de référence.	réel
$E_{11,\text{debonding}}$	[<i>Étude de microstructures aléatoires monomodales</i>] déformation macroscopique axiale pour laquelle a lieu la première nucléation.	réel
$E_{\text{nucleation}}$	[<i>Étude d'une microstructure aléatoire bimodale</i>] déformation macroscopique axiale de nucléation de défauts.	réel

Contraintes

Σ	contrainte de Cauchy homogénéisée.	tenseur o.2 (3×3)
Σ_{max}	[<i>Étude de microstructures périodiques</i>] contrainte de Cauchy homogénéisée axiale maximale.	réel

Paramètres morphologiques divers

$\bar{\mathbf{T}}$	tenseur représentatif de la morphologie initiale globale du composite.	tenseur o.4 ($3 \times 3 \times 3 \times 3$)
--------------------	--	---

Paramètres et éléments spécifiques à l'étude des effets de taille et d'interaction

L	dimension de particule.	réel
h, h'	[<i>Étude de microstructures périodiques</i>] épaisseurs des zones intergranulaires.	réel
c_{mat}	concentration volumique de matrice.	réel
D_z^2	variance de la grandeur z.	réel
\bar{z}	moyenne arithmétique de la grandeur z.	réel
θ	angle entre la direction de sollicitation et la normale unitaire à une couche α .	réel

Dans ce chapitre, nous cherchons à estimer les capacités de l'A.M. à restituer une chronologie de décohésion d'interfaces en fonction de la taille de particule ou du taux de charges. La reproduction de ces effets constitue en effet un défi majeur à relever pour l'étude des composites particulaires fortement chargés. Cette démarche s'inscrit dans le prolongement des travaux d'évaluation antérieurs dont une synthèse a été présentée au paragraphe II.5.5. La suite des présents travaux consistant à coupler le comportement en grandes déformations de la matrice avec l'endommagement d'interface, une confirmation préalable des capacités de l'A.M. à restituer les effets de taille et d'interaction attendus dans le cadre élastique linéaire est apparue indispensable.

Un premier paragraphe (III.1), consacré à une analyse bibliographique, introduit le contexte des travaux. Il permettra de comprendre les phénomènes observables dans les matériaux étudiés, dans un cadre expérimental ou encore un cadre de modélisation associé à des simulations en champs complets. Ceci permettra une meilleure interprétation des résultats obtenus. Ces résultats sont présentés de manière progressive et analysés vis-à-vis de la modélisation employée (paragraphe III.2-III.4).

III.1 Contexte de l'étude

III.1.1 Effet de la taille des particules

La taille de particule influence les propriétés réactives des composites énergétiques de manière significative. En effet, les caractéristiques de combustion au sein des propergols solides (à base de particules explosives de type HMX par exemple) sont en partie gouvernées par la composition chimique mais également la taille des particules et la distance qui les sépare [Naya et Kohga 2013]. L'initiation d'une réaction au sein de propergols solides constitués de particules de perchlorate d'ammonium a été étudiée par Kimura et Oyumi [Kimura et Oyumi 1998] avec la mise en œuvre de tests de sensibilité sur différents échantillons. Les auteurs ont montré que les composites comportant de grosses particules sont plus réactifs que ceux comportant de petites particules. Tan *et al.* [Tan *et al.* 2005a] ont quant à eux souligné l'influence de la taille de particule sur la réactivité au travers d'une approche en champs moyens fondée sur la méthode de Mori-Tanaka en élasticité linéaire et associée à une loi cohésive bilinéaire. Ces travaux mettent en évidence un endommagement extrêmement brutal accompagné d'une importante libération d'énergie en présence de grosses particules. Ce phénomène est encore plus prononcé en présence d'un mélange de petites et de grosses particules. La même forme de conclusion a été apportée par l'étude expérimentale de Fleming *et al.* [Fleming *et al.* 1985] sur des composites énergétiques à base de particules de type HMX : l'explosivité des échantillons est plus importante lorsque des grosses et des petites particules sont combinées au sein du matériau que lorsqu'il y a uniquement des petites particules. Les auteurs mentionnent également que plus la taille de particule est importante, plus le matériau est réactif.

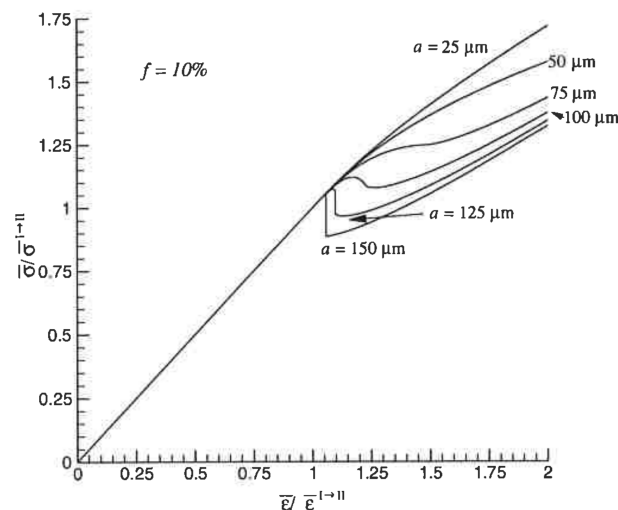


Figure III.1 – Courbe contraintes - déformations macroscopiques normalisées (sollicitation en traction uniaxiale) pour des V.E.R. comportant des particules sphériques de différents rayons a et pour une concentration volumique de particules $f = 10\%$ [Tan *et al.* 2007].

Le comportement mécanique et la phénoménologie de l'endommagement sont eux aussi conditionnés par la taille de particule. Tan *et al.* [Tan *et al.* 2005a] ont ainsi montré que les grosses particules adoucissent le comportement du matériau, tandis que les petites particules le rigidifient. La taille critique de particule séparant les deux domaines a été identifiée. Tan *et al.* [Tan *et al.*

2007] ont utilisé une approche similaire à celle adoptée dans [Tan *et al.* 2005a] avec l'utilisation d'un schéma dilué. Les mêmes conclusions ont été obtenues et sont illustrées en figure III.1, la courbe correspondant à une taille de particule $a = 75 \mu\text{m}$ marquant approximativement la transition entre les deux types de comportement.

Les travaux de Tan *et al.* [Tan *et al.* 2005a] sur une microstructure constituée de particules sphériques de deux tailles différentes suggère une chronologie de l'endommagement : les particules de taille plus importante subissent des décohésions d'interfaces avant les particules plus petites. Ceci est en accord avec les observations expérimentales de Rae *et al.* [Rae *et al.* 2002] sur un explosif comprimé, le PBX-9501 : sous chargement quasi-statique, les décohésions d'interfaces se produisent préférentiellement au niveau des grosses particules. Tao *et al.* [Tao *et al.* 2013] ont pu observer le même phénomène sur des "matériaux témoins", dont la composition est typique des propergols solides, soumis à des chargements quasi-statiques de traction (figure III.2).

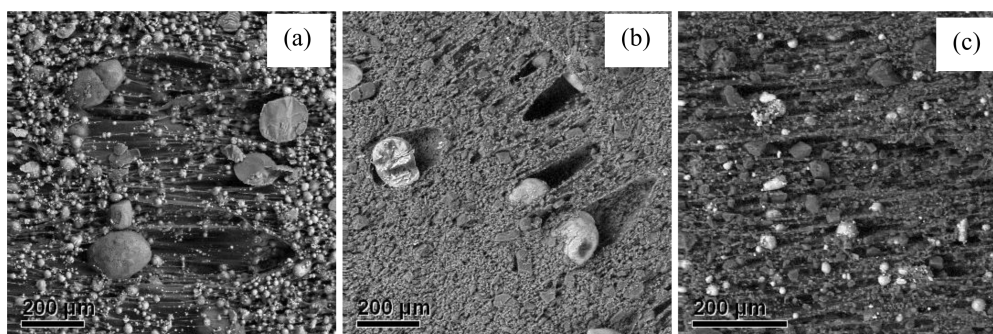


Figure III.2 – Observations au microscope électronique à balayage de microstructures pour une déformation de 5 mm [Tao *et al.* 2013]. (a) Échantillon 1 (59% de particules d'aluminium, 15% de perchlorate d'ammonium) ; (b) Échantillon 2 (15% de perchlorate d'ammonium, 59% de particules HMX) ; (c) Échantillon 3 (18% de particules d'aluminium, 5% de particules de perchlorate d'ammonium, 51% de particules HMX). Les pourcentages sont des fractions volumiques.

Zhao [Zhao 2008] a confirmé cet effet de taille au travers de simulations éléments finis en considérant des phases hyperélastiques et une loi cohésive exponentielle pour les interfaces particules / matrice. Au sein d'un volume contenant quatre particules sphériques de trois tailles différentes, l'endommagement d'interface a été remarqué sur les grosses particules. De la même manière, Ma *et al.* [Ma *et al.* 2011] ont réalisé des calculs éléments finis sur une microstructure comportant 98 particules ellipsoïdales de différentes tailles en se basant sur la distribution spatiale réelle d'un propergol solide. Une loi cohésive bilinéaire a été employée pour modéliser l'endommagement d'interface et tous les constituants ont été supposés élastiques linéaires. La réponse est fortement non-linéaire et l'endommagement se produit en premier au niveau des interfaces des particules les plus grosses.

III.1.2 Effet d'interaction entre les particules

Les taux de charges conséquents des composites énergétiques ont une influence certaine sur la phénoménologie de l'endommagement. Les effets observés sont la conséquence d'une interaction forte entre les particules, répercussion directe des concentrations volumiques de charges importantes. Une première illustration pourrait être l'étude expérimentale de Salvia [Salvia 1981] qui a comparé des composites à matrice polybutadiène comportant différents taux de charges massiques soumis à une traction uniaxiale quasi-statique (figure III.3). La figure III.3(a) met en évidence le fait que la

rigidité initiale du composite ainsi que la contrainte à la rupture augmentent avec la proportion de particules. À mesure que la déformation augmente, des décohésions vont apparaître aux interfaces entre les particules et la matrice. En plus de se multiplier, ces défauts vont s'ouvrir pour des niveaux de déformations plus importants. La figure III.3(b) illustre la dilatation volumique due à l'apparition et à la croissance des décohésions créées. Ainsi, il est possible de constater des décohésions d'interfaces d'autant plus précoces que le taux de charges est important, avec une fraction volumique de vides augmentant d'autant plus rapidement que ce taux est élevé.

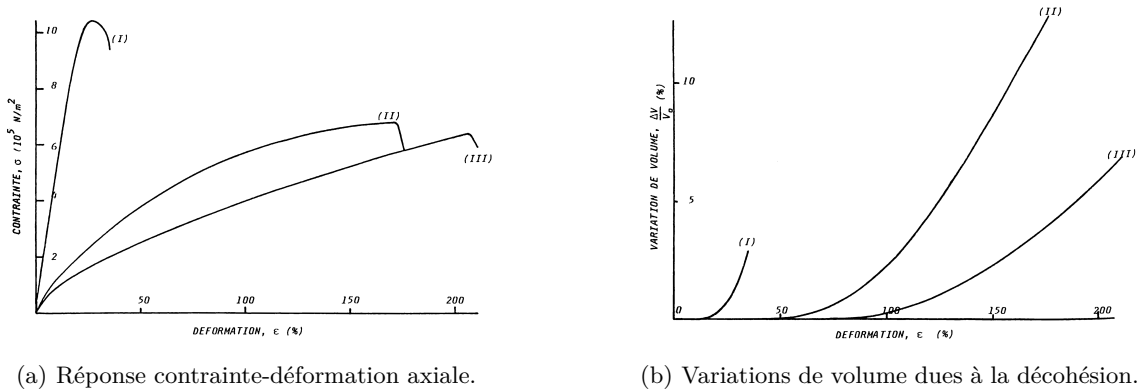


Figure III.3 – Effets du taux de charges massique en traction uniaxiale quasi-statique pour trois compositions chargées [Salvia 1981] : (I) 80%, (II) 60%, (III) 40%.

Zhong et Knauss [Zhong et Knauss 2000] ont évalué l'effet d'interaction entre les particules au travers de calculs éléments finis en transformations finies. Une loi cohésive non-linéaire décrit la nucléation de défauts aux interfaces particules / matrice. Plusieurs microstructures ont été considérées, comportant quatre puis seize inclusions sphériques de dimensions variables avec différents taux de charges. Dans leurs simulations sur des volumes comportant quatre particules dans une proportion volumique de 68.4%, les auteurs ont notamment observé que :

- lorsque toutes les inclusions ont le même rayon r , l'endommagement se produit au niveau des interfaces proches du plan de symétrie perpendiculaire à la direction de chargement et les décohésions formées se dilatent avec l'augmentation de la déformation macroscopique ;
- lorsque les rayons des particules sont légèrement différents ($r \pm 1.43\%$), la microstructure perd sa symétrie géométrique. La configuration de la microstructure traduit fortement les effets dus aux interactions entre inclusions. En figure III.4, la réponse globale de la microstructure étudiée indique que lorsqu'une première décohésion significative se produit (chute de contrainte pour une déformation de 2%), le comportement diffère considérablement de celui d'un composite constitué de particules de la même taille.

Tan *et al.* [Tan *et al.* 2005a] ont eux aussi mis en évidence une forte influence de la concentration volumique de charges par l'intermédiaire de leur approche fondée sur le schéma de Mori-Tanaka en élasticité linéaire associé à une loi cohésive bilinéaire. Des V.E.R. constitués de grosses particules à différents taux de charges allant de 10% à 69.5% sont soumis à une pression hydrostatique. Les résultats sont donnés en figure III.5. Bien que les courbes soient identiques quelle que soit la

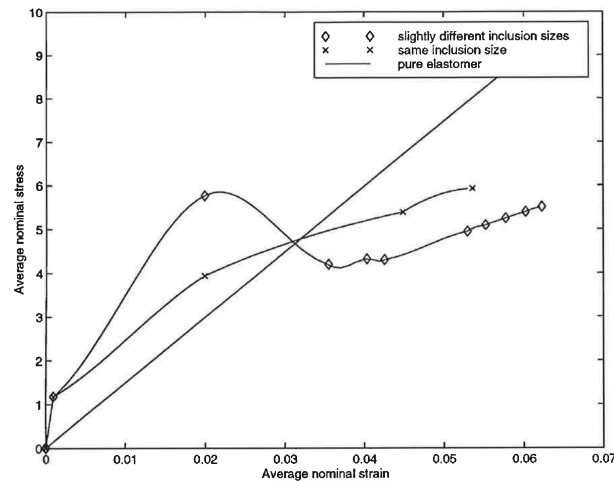


Figure III.4 – Effet d'interaction entre les inclusions : courbes contrainte-déformation macroscopiques pour des microstructures constituées de quatre particules (taux de charges : 68.4%) [Zhong et Knauss 2000].

concentration volumique de particules durant l'étape I, elles se distinguent lors des étapes II et III : ceci illustre une dépendance au taux de charges.

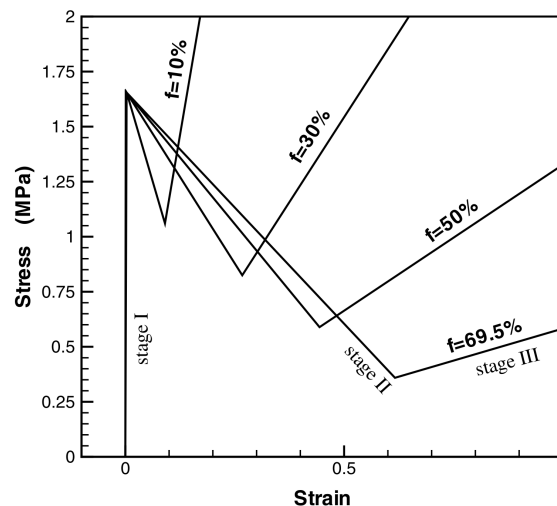


Figure III.5 – Courbe contrainte - déformation (sous pression hydrostatique) pour des V.E.R. comportant de grosses particules et pour différentes concentrations volumiques de particules f [Tan *et al.* 2005a].

Enfin, l'endommagement d'interface est observé préférentiellement dans des zones où la concentration volumique de particules est localement élevée [Inglis *et al.* 2007]. À partir d'un schéma éléments finis initialement proposé par Matouš et Geubelle [Matous et Geubelle 2006a] incorporant une loi cohésive bilinéaire, Inglis *et al.* [Inglis *et al.* 2007] ont souligné ce phénomène. Les constituants sont considérés élastiques linéaires et le V.E.R. est constitué de 50 particules sphériques réparties aléatoirement au sein du volume. La distribution de taille de particules est bimodale et un chargement en déformation macroscopique équibiaxiale est appliqué. Il est possible d'observer (figure III.6) que l'endommagement débute au niveau des grosses particules (effet de taille, voir paragraphe III.1.1) et dans des zones où le taux de charges est localement élevé. Ces conclusions sont extraites d'une analyse plus large visant aussi à confronter les travaux en champs moyens de Tan *et*

al. [Tan *et al.* 2005a] évoqués précédemment à des solutions éléments finis de référence en champs complets [Matous et Geubelle 2006a].

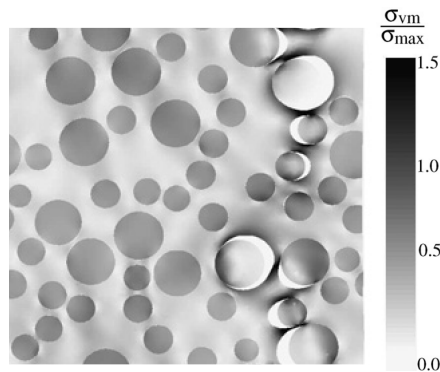


Figure III.6 – Distribution des contraintes de Von Mises tracée sur le profil déformé du V.E.R. (facteur 10 sur les déplacements) au sein d'une microstructure particulaire bimodale sous chargement en déformation équibiaxiale [Inglis *et al.* 2007].

III.1.3 Bilan et démarche adoptée

Comme nous l'avons vu, la taille de particule est un facteur influençant fortement à la fois les propriétés explosives et le comportement mécanique de la classe de matériau étudiée. La chronologie de l'endommagement est notamment régie par la taille de particule : l'endommagement au niveau des interfaces particules / matrice apparaît préférentiellement au niveau des grosses particules, avant de toucher les particules les plus petites. Une forte dépendance au taux de charges a également été mise en évidence. Ainsi, plus la concentration volumique de particules est grande, plus les interactions entre les charges sont importantes. Ceci favorise l'initiation de l'endommagement d'interface particules / matrice qui se produira en premier lieu dans des zones du matériau où le taux de charges est localement plus élevé.

Les phénomènes ci-dessus ont été mis en évidence de manière expérimentale et au moyen de simulations éléments finis en champs complets. Toutefois, le coût numérique élevé des simulations en champs complets ne permettent pas d'envisager pour l'instant des calculs tridimensionnels sur des microstructures complexes constituées d'un nombre élevé de particules. Enfin, les travaux de Inglis *et al.* [Inglis *et al.* 2007], confrontant les estimations de Tan *et al.* [Tan *et al.* 2005a] aux solutions éléments finis de référence, soulignent dans le contexte particulier des composites énergétiques l'inaptitude des approches en champs moyens classiques (c'est-à-dire sans fluctuations intraphases) à rendre compte des effets d'interactions fortes entre particules dus aux taux de charges élevés. En effet, bien que la loi cohésive utilisée soit précise, le schéma de Mori-Tanaka au cœur du modèle de Tan *et al.* n'est valable que pour des fractions volumiques de renforts faibles à modérées. Par suite, le modèle ne parvient pas à capter correctement les effets d'interaction avant et pendant le processus de décohésion lorsque les concentrations volumiques de particules deviennent supérieures à 50%.

Dans ce chapitre, les capacités prédictives de l'Approche Morphologique telle que proposée par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] sont évaluées vis-à-vis des effets de la taille de particule et des effets d'interaction entre les particules. Ainsi notre objectif est :

- d'identifier une chronologie de décohésion dépendant de la taille de particule, établissant que les grosses particules subissent un endommagement d'interface plus précoce que les particules de dimensions plus faibles ;
- d'identifier une chronologie de décohésion dépendant du taux de charges, mettant en évidence un endommagement d'interfaces d'autant plus précoce que les interactions entre particules sont importantes, l'idée sous-jacente étant simultanément de quantifier les aptitudes de l'A.M., en tant que méthode d'estimation, à relever le challenge d'une description correcte des interactions complexes entre particules dues aux forts taux de charges.

La formulation relative à la version de l'A.M. considérée est décrite au chapitre II. Les relations essentielles sont recensées dans le tableau II.1 (page 41), colonne de droite. Pour cette étude, seule la nucléation de défauts (paragraphe II.4.3.a) est envisagée ; dans ce cadre, le lecteur est invité à se référer aux relations (II.17) et (II.18) pour l'expression du critère.

Nous essayons d'observer les phénomènes décrits plus haut au travers de simulations numériques au moyen de l'A.M. Une approche progressive est adoptée en considérant tour à tour des microstructures générées numériquement :

- périodiques (cellules unitaires) ;
- aléatoires monomodales ;
- aléatoire bimodale.

Les résultats sont présentés, analysés et discutés quant aux effets attendus et à la méthode considérée.

III.2 Effets de taille et d'interaction entre particules pour des microstructures périodiques

III.2.1 Définition de la cellule de base

En première approche, nous considérons un composite tri-dimensionnel similaire à celui étudié dans [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. La cellule de base correspondante est constituée d'une particule cubique de dimension L intégrée au sein d'un cube de matrice (concentration volumique : c_{mat}) tel qu'illustré en figure III.7. Contrairement aux travaux antérieurs de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008], la distance intergranulaire dans la direction \vec{e}^1 , notée h , peut être différente de celle dans les directions \vec{e}^2 et \vec{e}^3 , notée h' . L'expression de c_{mat} en fonction de (L, h, h') permet d'extraire une relation entre les caractéristiques géométriques de la cellule de base :

$$h' = L \left[\left(\frac{L}{(1 - c_{\text{mat}})(L + h)} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (\text{III.1})$$

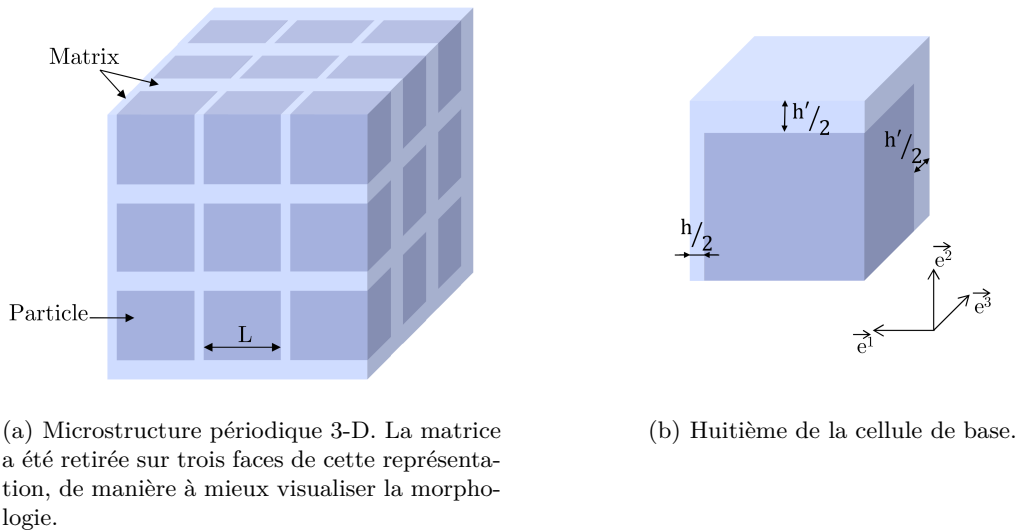


Figure III.7 – Microstructure périodique étudiée.

Les constituants ont un comportement élastique linéaire isotrope comme dans [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. Les propriétés mécaniques sont répertoriées dans le tableau III.1. Les paramètres d'endommagement sont choisis tels que : ($d_{\text{critique}} = 2 \mu\text{m}$, $\lambda = 1 \mu\text{m}$).

	Particules	Matrice
Module de Young E (GPa)	120	4
Coefficient de Poisson ν	0.3	0.45

Tableau III.1 – Propriétés mécaniques des constituants pour l'étude des effets de taille et d'interaction entre particules [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

Le chargement appliqué est le même que celui considéré dans les travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013], à savoir défini par la donnée du gradient de déplacement macroscopique suivant :

$$\begin{aligned} F_{22} &= F_{33} = -0.3 \times F_{11} && \text{avec } F_{11} > 0 \\ F_{ij} &= 0 && \text{si } i \neq j. \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

L'expression (III.2) traduit une extension dans la direction \vec{e}^1 (composante F_{11}) couplée à une contraction identique dans les directions transverses \vec{e}^2 et \vec{e}^3 (composantes $F_{22} = F_{33}$).

La nucléation ayant lieu en mode d'ouverture, les décohésions d'interface auront lieu sur les facettes de particules dont la normale est colinéaire à la direction d'extension. Dans chaque étude (effet de taille, effet d'interaction), la distance intergranulaire h dans la direction d'extension \vec{e}^1 est choisie identique pour les différentes microstructures qui seront comparées :

- Pour l'étude de l'effet de la taille de particule (paragraphe III.2.3), la concentration volumique de matrice c_{mat} est fixée et la taille de particule L varie d'une microstructure à l'autre. Ainsi, h et c_{mat} restent inchangées quelle que soit la microstructure considérée, tandis que L et par conséquent h' donnée par l'équation (III.1) sont différentes.
- Pour l'étude des effets d'interaction entre particules (paragraphe III.2.4), la taille de particule L est fixée et la concentration volumique de matrice c_{mat} varie d'une microstructure à l'autre. Ainsi, h et L restent inchangées quelle que soit la microstructure considérée, tandis que c_{mat} et par conséquent h' donnée par l'équation (III.1) sont différentes.

Pour chacune des deux études, nous comparerons la déformation macroscopique correspondant à la nucléation d'un défaut sur la facette normale à \vec{e}^1 pour les différentes microstructures considérées.

III.2.2 Représentation de la microstructure avec l'A.M.

Les microstructures périodiques considérées respectent, par construction, les exigences de la schématisation géométrique propre à l'A.M. (interfaces opposées parallèles avec formes et surfaces proches, ici identiques) rappelées au chapitre II, paragraphes II.1 et II.2.1. Pour chaque microstructure, la périodicité permet de ne considérer qu'une particule cubique de dimension L et trois couches de matrice (figure III.8) :

- la “couche 1” dont la normale unitaire \vec{n}^1 est \vec{e}^1 et l'épaisseur h^1 est égale à h ;
- la “couche 2” dont la normale unitaire \vec{n}^2 est \vec{e}^2 et l'épaisseur h^2 est h' donnée par l'équation (III.1) ;
- la “couche 3” dont la normale unitaire \vec{n}^3 est \vec{e}^3 et l'épaisseur h^3 est égale à h' .

Les vecteurs $\{\vec{d}^\alpha\}$ ($\alpha = 1, 2, 3$) sont colinéaires aux vecteurs $\{\vec{n}^\alpha\}$ et leurs composantes sont calculées grâce à la taille de particule L et à l'épaisseur des couches :

$$d_i^\alpha = (L + h^\alpha)n_i^\alpha \quad (\text{III.3})$$

Les aires projetées $\{A^\alpha\}$ ($\alpha = 1, 2, 3$) sont calculées de manière à satisfaire précisément l'équation de compatibilité (II.7), comme proposé par Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] pour des microstructures périodiques analogues. Les valeurs ainsi obtenues pour les aires projetées $\{A^\alpha\}$ ne sont pas égales aux aires des facettes de particules. Par conséquent, le volume $A^\alpha h^\alpha$ occupé par chacune des trois couches α ne correspond pas exactement à la région strictement

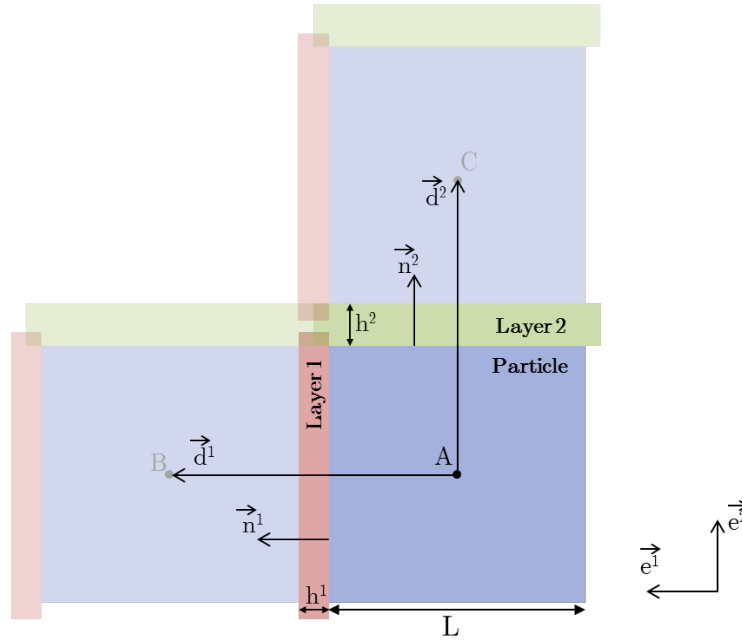


Figure III.8 – “Motif” représentatif de la microstructure périodique pour l’A.M. et paramètres morphologiques associés (représentation schématique 2-D).

confinée entre les facettes de deux particules opposées. Nous retrouvons ici la notion de “zones médianes”, évoquée au paragraphe II.1, et illustrée en figures II.3(b) pour une microstructure aléatoire et III.8 pour la microstructure considérée.

Il est possible de constater que le V.E.R. associé à l’A.M. dans le cas périodique ne correspond pas à une cellule de base classique [Nadot-Martin *et al.* 2008]. Le volume $|V_0|$ défini plus haut doit être vu comme un “motif élémentaire équivalent” propre à l’A.M. dont les paramètres morphologiques sont suffisants pour rendre compte de la périodicité de la solution grâce à la description cinématique [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. De plus, les travaux antérieurs [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] ont montré un excellent accord entre les estimations de l’A.M. et les simulations éléments finis pour une microstructure périodique à particules cubiques analogue à celles considérées ici. L’accord précité concerne aussi bien la réponse homogénéisée que les champs locaux (dans la matrice et dans les particules). L’absence d’une description correcte des effets locaux dans les zones de recouvrement de couches (voir hypothèse cinématique (iv), paragraphe II.2.1) n’affecte donc pas ici la qualité des estimations ailleurs dans la microstructure. Cette conclusion, apportée sur matériau sain, confirme la pertinence des estimations de l’A.M. sur nos microstructures périodiques avant la nucléation.

La couche 1, qui sera concernée par la décohésion d’interface étant donnée son orientation (perpendiculaire à l’axe d’extension), est appelée “couche de référence” dans toute la suite.

III.2.3 Effet de la taille de particule

Pour l’étude de l’effet de la taille de particule, nous considérons trois microstructures périodiques (paragraphe III.2.2) caractérisées par :

- des tailles de particules différentes, soit : $L = 100 \mu\text{m}$, $200 \mu\text{m}$ ou $400 \mu\text{m}$;
- une concentration volumique de matrice identique, $c_{\text{mat}} = 25\%$;

– la même distance intergranulaire $h = 10 \mu\text{m}$.

Les paramètres morphologiques correspondants sont identifiés en accord avec la méthodologie présentée au paragraphe III.2.2 : les épaisseurs de couches $h^1 = h$ et $h^2 = h^3 = h'$ avec h' donnée par l'équation (III.1), les vecteurs $\{\vec{d}^\alpha\}$ via l'équation (III.3) et les aires projetées $\{A^\alpha\}$ avec l'équation (II.7). Les paramètres obtenus sont résumés dans le tableau III.2. Le pas de calcul est identique pour chaque cas considéré. Il est choisi suffisamment faible pour être certain d'observer un réel ordre de décohésion et non un écart dû à un artefact numérique. Ainsi, l'incrément de chargement appliqué est tel que : $\Delta F_{11} = 10^{-10}$.

L (μm)	$h^1(\mu\text{m})$	$\ \vec{d}^1\ $ (μm)	$A^1(\text{mm}^2)$
100		110	0.013
200	10	210	0.052
400		410	0.214

L (μm)	$h^2 = h^3(\mu\text{m})$	$\ \vec{d}^2\ = \ \vec{d}^3\ $ (μm)	$A^2 = A^3(\text{mm}^2)$
100	10	110	0.013
200	25	225	0.049
400	56	456	0.192

Tableau III.2 – Paramètres morphologiques des microstructures périodiques considérées pour l'étude de l'effet de la taille. Concentration volumique de matrice : $c_{\text{mat}} = 25\%$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 10 \mu\text{m}$.

La figure III.9 représente pour chaque microstructure périodique la contrainte axiale homogénéisée Σ_{11} normalisée par la contrainte axiale maximale Σ_{max} , en fonction de la déformation macroscopique imposée E_{11} normalisée par la déformation macroscopique $E_{\text{debonding}}$ pour laquelle la décohésion de la couche de référence apparaît en premier.

Nous constatons que la décohésion la plus précoce se produit pour la microstructure dont la taille de particule vaut $400 \mu\text{m}$ de côté. Puis, elle a lieu pour la microstructure dont la taille de particule est de $200 \mu\text{m}$ et enfin pour celle dont la taille de particule est de $100 \mu\text{m}$.

Pour éclairer l'ordre précédemment obtenu, conforme aux attentes, revenons sur l'expression de d_{norm}^α (équation (II.17)) impliquée dans le critère de nucléation (II.18) pour la couche 1 de référence siège de la décohésion pour les trois microstructures. Pour cette couche, $\vec{d}^1 = \|\vec{d}^1\| \vec{n}^1$ avec $\|\vec{d}^1\| = L + h^1$. Ainsi, d_{norm}^1 (voir équation II.17) devient :

$$\begin{aligned}
 d_{\text{norm}}^1 &= 2\lambda + \lambda \left\{ \left[2\mathbf{f}^0 + (\mathbf{F} - \mathbf{f}^0) \frac{\vec{d}^1 \otimes \vec{n}^1}{h^1} \right] \cdot \vec{n}^1 \right\} \cdot \vec{n}^1 \\
 &= 2\lambda + \lambda \left\{ \left[2\mathbf{f}^0 + (\mathbf{F} - \mathbf{f}^0) \frac{\|\vec{d}^1\|}{h^1} \vec{n}^1 \otimes \vec{n}^1 \right] \cdot \vec{n}^1 \right\} \cdot \vec{n}^1
 \end{aligned} \tag{III.4}$$

L'orientation \vec{n}^1 et l'épaisseur h^1 de la couche de référence étant identiques pour les trois microstructures, l'ordre de décohésion observé est principalement le fruit de la présence de \vec{d}^1 dans l'équation (III.4). Plus précisément, c'est la valeur de $\|\vec{d}^1\|$ directement reliée à la taille de particule qui, ici, contribue à cet ordre.

Après l'apparition de la première nucléation, le calcul numérique s'arrête, le composite étant totalement rompu du fait de sa simplicité.

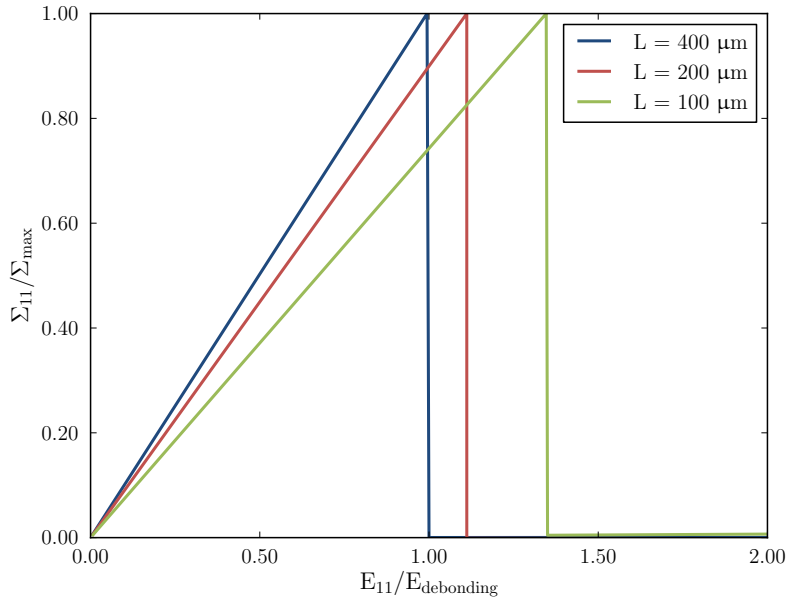


Figure III.9 – Effet de la taille de particule pour des microstructures périodiques sous chargement “uniaxial”. Concentration volumique de matrice : $c_{\text{mat}} = 25\%$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 10 \mu\text{m}$.

Les résultats obtenus sur des microstructures périodiques simples illustrent bien le fait que, pour des couches identiques (en termes d’orientation, de direction du vecteur \vec{d}^α et d’épaisseur) au sein d’une microstructure plus complexe, la décohésion interviendra plus tôt pour des particules opposées de tailles importantes, via une plus grande valeur de $\|\vec{d}^\alpha\|$. Une telle chronologie est en accord avec les observations expérimentales effectuées par exemple par Rae *et al.* [Rae *et al.* 2002] et avec les simulations numériques de la littérature [Zhao 2008, Ma *et al.* 2011].

III.2.4 Effet d’interaction entre les particules

Pour l’étude de l’effet d’interaction entre les particules, nous considérons trois microstructures périodiques caractérisées par :

- différentes concentrations volumiques de matrice, soit : $c_{\text{mat}} = 15\%$, 25% ou 35% ;
- la même taille de particule, $L = 400 \mu\text{m}$;
- la même distance intergranulaire $h = 20 \mu\text{m}$.

Les paramètres morphologiques correspondants pour l’A.M. sont reportés dans le tableau III.3. Le pas de calcul est, dans cette étude également, identique pour chaque cas considéré. L’incrément de chargement appliqué est tel que : $\Delta F_{11} = 10^{-10}$.

Les résultats sont illustrés en figure III.10. Une fois encore, un ordre peut être observé au niveau de la déformation macroscopique de décohésion de l’interface de la couche de référence. L’endommagement d’interface a lieu préférentiellement pour une concentration volumique de matrice de 15% , puis de 25% et enfin de 35% .

Dans ce cas, $\|\vec{d}^1\|$ et par conséquent $\frac{\|\vec{d}^1\|}{h^1}$ sont identiques pour les trois microstructures. Ainsi, l’équation (III.4) montre que l’ordre de décohésion sus-mentionné ne peut être dû qu’à la présence du

c_{mat}	$h^1 (\mu\text{m})$	$\ \vec{d}^1\ (\mu\text{m})$	$A^1 (\text{mm}^2)$
15%			0.181
25%	20	420	0.210
35%			0.252

c_{mat}	$h^2 = h^3 (\mu\text{m})$	$\ \vec{d}^2\ = \ \vec{d}^3\ (\mu\text{m})$	$A^2 = A^3 (\text{mm}^2)$
15%	23	423	0.180
25%	51	451	0.195
35%	84	484	0.219

Tableau III.3 – Paramètres morphologiques des microstructures périodiques considérées pour l'étude de l'effet d'interaction entre les particules. Taille de particule : $L = 400 \mu\text{m}$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 20 \mu\text{m}$.

gradient de déplacement des particules \mathbf{f}^0 . Ce dernier dépend en effet de la concentration volumique de matrice et d'un tenseur de "fabrication" $\bar{\mathbf{T}}$ qui implique tous les paramètres, autres que $\|\vec{d}^1\|$ et h^1 , variables d'une microstructure à l'autre.

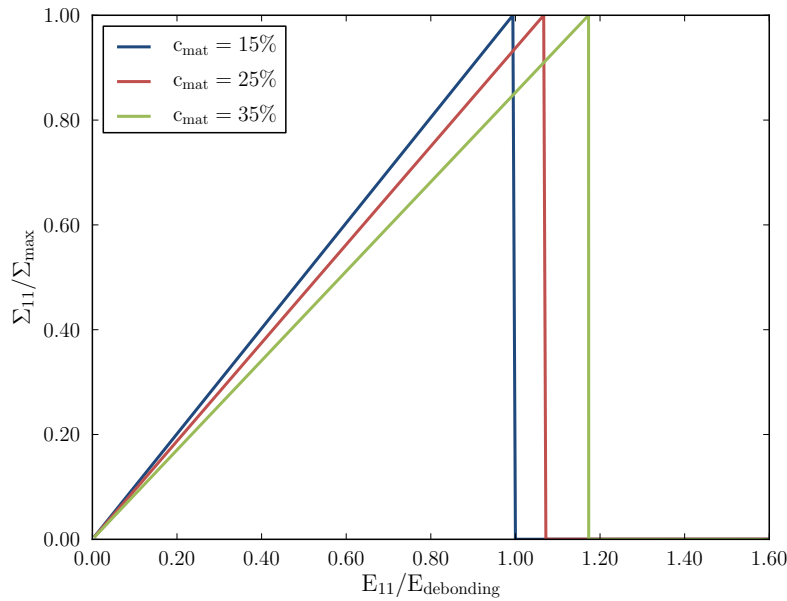


Figure III.10 – Effet d'interaction entre les particules pour des microstructures périodiques sous chargement "uniaxial". Taille de particule : $L = 400 \mu\text{m}$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 20 \mu\text{m}$.

III.2.5 Bilan

À l'issue de ces premières simulations numériques réalisées sur des microstructures spécifiques, il est possible d'affirmer que l'A.M. démontre ses capacités à restituer les effets de taille et d'interaction attendus. Des configurations de calcul ciblées ont en effet permis d'obtenir un ordre de première décohésion dépendant de la taille de particule et du taux de charges, et ceci de manière cohérente avec les résultats rencontrés dans la littérature (voir paragraphe III.1). La simplicité des microstructures considérées a permis une identification simple des paramètres morphologiques

nécessaires à l'A.M. Grâce à cela, nous avons été capables d'évaluer quels termes du critère de nucléation jouaient un rôle dans l'ordre observé lors des deux études.

Cependant, aussitôt qu'une paire de défauts apparaît aux interfaces de la couche de référence, la microstructure périodique est rompue : ceci est illustré par la chute brutale de la contrainte axiale homogénéisée sur les figures III.9 et III.10. Les évaluations présentées ici, fondées sur l'instant de première nucléation comme indicateur des effets de taille et d'interaction, ont cependant constitué un élément suffisant pour de premières conclusions.

Afin de progresser dans notre approche d'évaluation de l'A.M., nous allons nous intéresser à présent à des microstructures aléatoires monomodales. Ces microstructures sont artificielles et la génération permet d'obtenir une dimension de particule moyenne dominante au sein du composite. Même si elles sont monomodales, leur caractère aléatoire les rend plus proches des matériaux réels que les microstructures périodiques présentées plus haut. De plus, la présence d'une taille de particule majoritaire permet de minimiser les effets de la taille au sein d'une même microstructure. Un éventuel effet de la taille de particule ne pourra être observé qu'en comparant deux microstructures pour lesquelles la taille moyenne de particule est différente. L'évaluation de l'influence du taux de charges pour une taille moyenne donnée pourra ainsi être découplée.

III.3 Effet d'interaction entre particules au sein de microstructures aléatoires monomodales

Dans ce paragraphe, nous exposons des simulations numériques sur des microstructures aléatoires monomodales : les particules dont la dimension correspond à la dimension moyenne des particules s'y trouvent en majorité. Les autres particules ont des dimensions modérément réparties autour de cette moyenne. L'objectif principal est d'étudier l'aptitude de l'A.M. à rendre compte des effets d'interaction dans le cas monomodal. L'étude est menée pour trois tailles moyennes différentes. La méthode de génération des volumes est exposée au paragraphe III.3.1 et la démarche suivie pour l'analyse au paragraphe III.3.2. Les résultats de la campagne de calculs sont présentés et discutés au paragraphe III.3.3.

III.3.1 Génération numérique

Les microstructures monomodales considérées sont constituées de 1000 particules polyédriques dont les volumes sont modérément répartis autour d'une valeur moyenne. Elles ont été générées numériquement de manière à respecter par construction les exigences de la schématisation géométrique de l'A.M. (particules polyédriques, interfaces opposées parallèles avec formes et surfaces proches, voir paragraphes II.1 et II.2.1).

Les étapes principales de la génération numérique réalisée par le Centre d'Études de Gramat¹ sont les suivantes (figure III.11) :

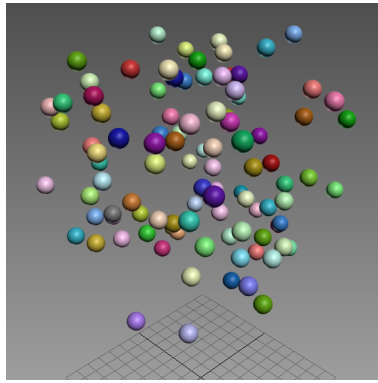
- (i) Des sphères identiques (de même diamètre) sont disposées de manière aléatoire dans un volume donné jusqu'à ce que la proportion attendue (ici : 1000 particules) soit atteinte (figure III.11(a)-(b)).
- (ii) Les plans médians entre les centroïdes de sphères sont progressivement déterminés (figure III.11(c)-(d)) et définissent les faces des polyèdres (figure III.11(e)). Cette opération continue jusqu'à ce que tout le domaine soit polyédrisé (voir l'obtention d'un polyèdre en figure III.11(f)).
- (iii) Une homothétie est appliquée aux polyèdres de manière à obtenir la fraction volumique de particules souhaitée (figure III.11(g)). Cette transformation permet de faire apparaître les couches de matrice de manière à obtenir des interfaces particules / matrice parallèles deux à deux.

Dans la suite, L fait référence au diamètre d'une sphère dont le volume correspond à celui d'une particule polyédrique. Un exemple de microstructure monomodale avec particules polyédriques et la répartition granulométrique associée sont illustrés en figure III.12.

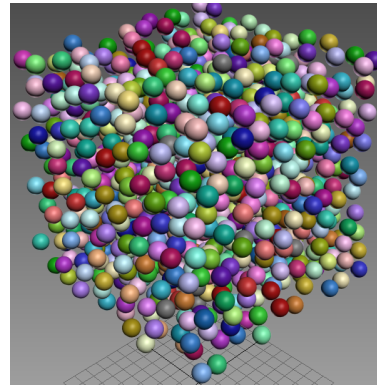
III.3.2 Méthodologie adoptée

Quelle que soit la microstructure considérée, le même chargement en "extension uniaxiale" est appliqué (voir équation (III.2)), avec un incrément de chargement : $\Delta F_{11} = 10^{-4}$. Les constituants ont un comportement élastique linéaire isotrope [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] comme dans

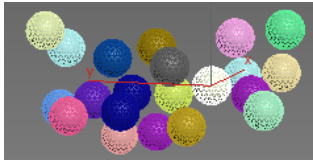
1. G. Contesse, Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, Centre d'Études de Gramat, Gramat, France.



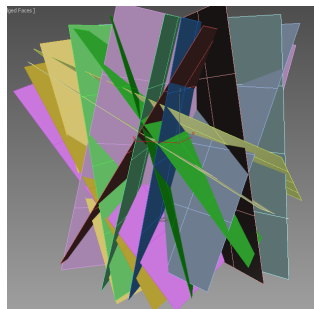
(a) Remplissage du volume par des sphères identiques : arrêt sur image pour une quantité de cent sphères.



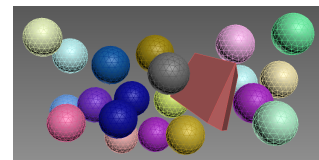
(b) Remplissage du volume total par des sphères identiques jusqu'à obtenir mille particules.



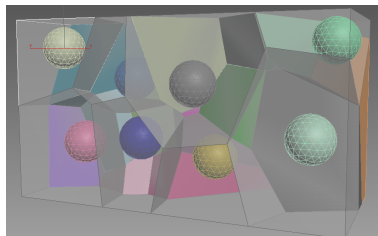
(c) Sélection d'une sphère et de ses plus proches voisins.



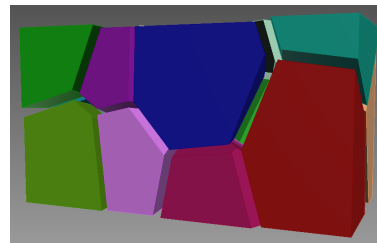
(d) Détermination des plans médians entre les centroïdes de sphères.



(e) Obtention d'un polyèdre.



(f) Visualisation de quelques sphères et des polyèdres correspondants.



(g) Homothétie appliquée aux polyèdres.

Figure III.11 – Étapes de génération d'une microstructure aléatoire monomodale à particules polyédriques.

l'étude sur les microstructures périodiques du paragraphe III.2 (tableau III.1). Chaque cas de calcul est réalisé avec les mêmes paramètres d'endommagement ($d_{\text{critique}} = 3.5 \mu\text{m}$, $\lambda = 1.8 \mu\text{m}$). Ces valeurs sont extraites des travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. La distance λ devant être inférieure à la plus petite épaisseur de couche du volume étudié, seules les microstructures générées respectant cette condition ont été sélectionnées.

Nous nous intéressons à la déformation macroscopique axiale, notée $E_{11,\text{debonding}}$, correspondant à la première décohésion d'interface. Les deux cas suivants sont étudiés :

- La taille moyenne de particule L est fixée et l'effet d'interaction entre les particules est étudié au travers du lien entre $E_{11,\text{debonding}}$ et la concentration volumique de matrice c_{mat} .

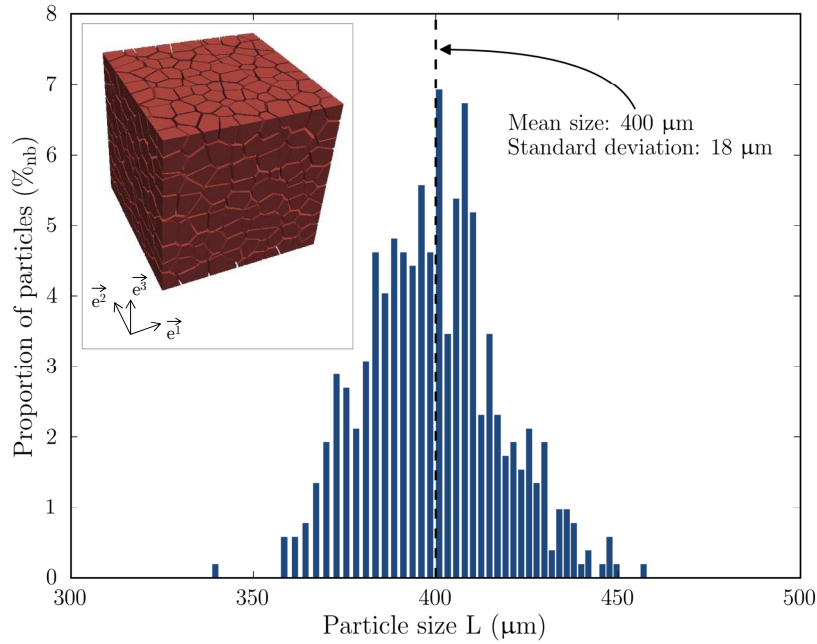


Figure III.12 – Exemple d’une microstructure aléatoire monomodale artificielle polyédrique pour l’A.M. et répartition granulométrique associée. Taux de charges volumique : 75%.

- La concentration volumique de matrice est fixée et le lien entre $E_{11, \text{debonding}}$ et la taille moyenne de particule L est observé. Chaque microstructure étant générée indépendamment l’une de l’autre (et non par homothétie), la question d’un éventuel effet de taille de particule mérite en effet d’être étudiée.

c_{mat}		
25%	40%	55%
L (μm)		
100	200	400

Tableau III.4 – Concentrations volumiques de matrice c_{mat} et tailles de particule L considérées pour les différentes configurations (c_{mat}, L) étudiées.

Trois différentes concentrations volumiques de matrice c_{mat} et trois dimensions de particules L sont considérées (tableau III.4). Neuf configurations (c_{mat}, L) différentes sont ainsi étudiées. Considérant le caractère aléatoire des microstructures, les calculs sont réalisés sur dix réalisations de chaque configuration (c_{mat}, L) . Les déformations axiales macroscopiques correspondant à la première décohésion d’interface sont analysées statistiquement : la moyenne arithmétique sur les dix réalisations de chaque configuration (c_{mat}, L) est calculée et présentée sur la figure III.13 avec l’intervalle de variation associé. L’intervalle de variation pour une configuration (c_{mat}, L) donnée est défini à partir de la variance (voir par exemple Kanit *et al.* [Kanit *et al.* 2003, Kanit *et al.* 2006]) :

$$D_z^2 = (\bar{z}^2) - \bar{z}^2 \quad (\text{III.5})$$

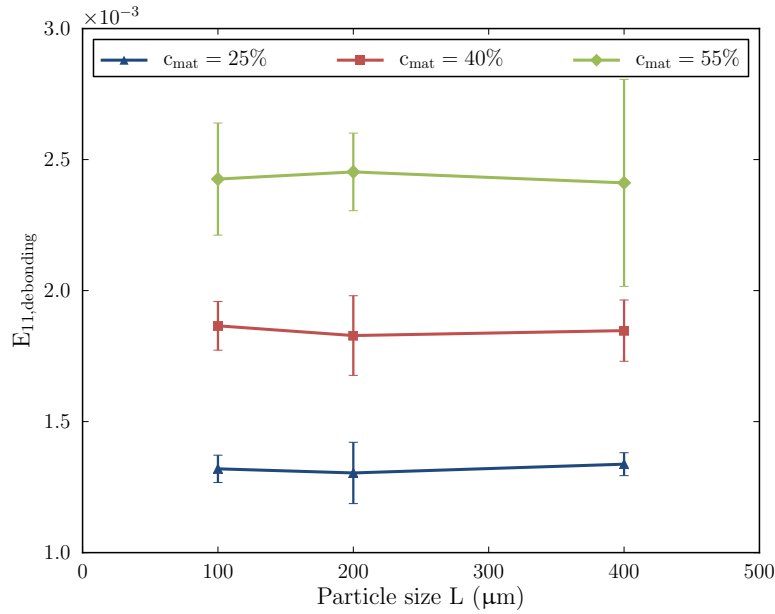


Figure III.13 – Effet de la taille de particule et effet d'interaction entre les particules pour des microstructures aléatoires monomodales à particules polyédriques. Les valeurs moyennes et intervalles de variation de la déformation macroscopique $E_{11,debonding}$ correspondant à la première nucléation sont représentées en fonction de la taille de particule L pour trois concentrations volumiques de matrice c_{mat} .

où : z est $E_{11,debonding}$, la déformation axiale macroscopique de première nucléation ;

D_z^2 est la variance de z ;

\bar{z} est la moyenne arithmétique de z sur les dix réalisations.

L'intervalle de variation autour de la valeur moyenne, représenté sur la figure III.13, est défini par les bornes $[\bar{z} - 2D_z, \bar{z} + 2D_z]$ [Kanit *et al.* 2003, Kanit *et al.* 2006].

III.3.3 Résultats

La figure III.13 montre qu'à taille de particule fixée, la première nucléation se produit d'autant plus tôt que la concentration volumique de particules est importante. De plus, l'amplitude des intervalles de variation autour de la moyenne diminue avec la fraction volumique de matrice (c'est-à-dire quand la concentration volumique de particules augmente). Ceci est vrai pour les trois dimensions de particules. Une telle constatation tend à prouver que l'efficacité de l'A.M. augmente avec la fraction volumique de particules contrairement au schéma de Mori-Tanaka utilisé par Tan *et al.* [Tan *et al.* 2005a] et évalué dans [Inglis *et al.* 2007] (voir paragraphe III.1.2). L'Approche Morphologique, particulièrement adaptée aux composites particulaires à forts taux de charges (supérieurs à 70%), montre ici son efficacité vis-à-vis des applications qu'elle vise.

À concentration volumique de matrice constante, et ce quelle que soit la valeur considérée ($c_{mat} = 25\%, 40\%, 55\%$), aucune tendance particulière n'est détectée sur la figure III.13. En d'autres termes, aucun effet de taille n'est mis en évidence sur la déformation moyenne de première nucléation des trois microstructures ($L = 100 \mu\text{m}, 200 \mu\text{m}, 400 \mu\text{m}$), bien qu'elles aient été générées

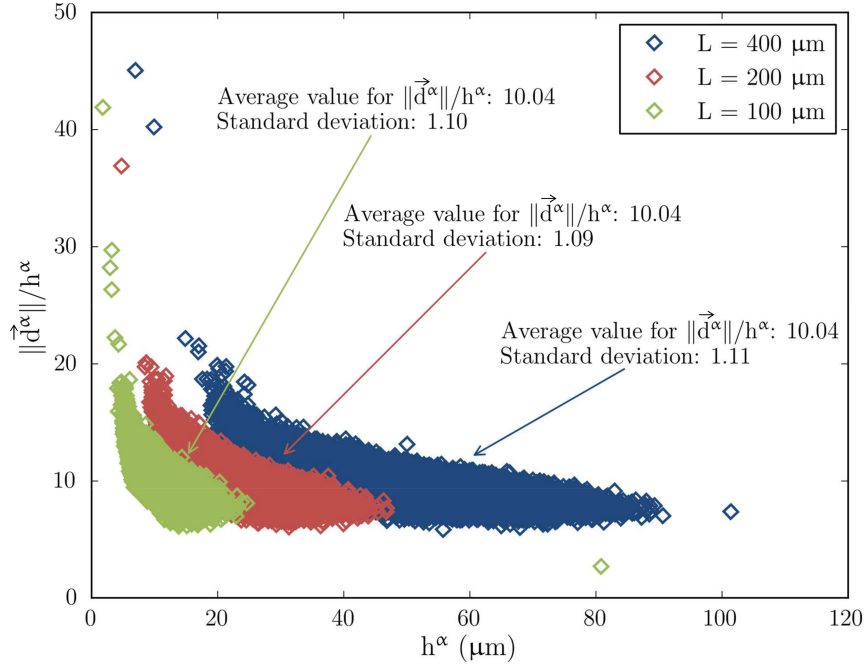


Figure III.14 – Effet de la variation de taille de particule sur le rapport $\frac{\|\vec{d}^\alpha\|}{h^\alpha}$. Taux de charges : 75% ($c_{\text{mat}} = 25\%$).

indépendamment les unes des autres, c'est-à-dire sans recours à un processus d'homothétie. Ainsi, même si non exactement identiques, ces microstructures aléatoires monomodales présentent de fortes similitudes morphologiques. À titre d'illustration, pour une fraction volumique de matrice de 25%, nous considérons sur la figure III.14 le rapport $\frac{\|\vec{d}^\alpha\|}{h^\alpha}$ influençant la nucléation (voir critère (II.18)). Ce dernier y est représenté pour toutes les couches α et chacune des dix réalisations des trois configurations ($c_{\text{mat}} = 25\%$, L). Nous observons alors que la valeur moyenne de $\frac{\|\vec{d}^\alpha\|}{h^\alpha}$, de même que la dispersion autour de cette valeur moyenne, restent quasi-invariantes quelle que soit la dimension moyenne de particule considérée ($L = 100 \mu\text{m}$, $200 \mu\text{m}$, $400 \mu\text{m}$). Ceci explique que nous n'observons pas d'effet de taille sur la déformation moyenne de première nucléation. En revanche, si les valeurs des déformations de première nucléation sont proches lorsque L varie, la position des premiers défauts créés diffère d'une configuration à l'autre. Ainsi, à fraction volumique de matrice fixée, la déformation macroscopique de première nucléation est gouvernée par d'autres paramètres morphologiques, comme par exemple l'orientation des interfaces par rapport à l'axe d'extension.

Remarque : Dans le cas des microstructures périodiques monomodales du paragraphe III.2, $\frac{\|\vec{d}^1\|}{h^1}$ variait avec la taille de particule pour la couche de référence siège de la décohésion (via $\|\vec{d}^1\|$).

III.4 Chronologie des nucléations au sein d'une microstructure aléatoire bimodale

Dans les paragraphes III.2 et III.3 consacrés à des microstructures monomodales respectivement périodiques et aléatoires, il s'agissait de comparer, pour une fraction volumique de matrice fixée, la déformation macroscopique de première nucléation pour des microstructures présentant des tailles de particule différentes. Nous nous intéressons ici à l'influence de la taille de particule sur la chronologie des nucléations au sein d'une même microstructure. À cet effet, nous considérons une microstructure aléatoire bimodale, c'est-à-dire dans laquelle les dimensions des particules polyédriques sont réparties autour de deux valeurs moyennes distinctes.

III.4.1 Génération numérique

La microstructure étudiée contient environ 7000 particules (proportion volumique : 76%) ce qui permet d'avoir une confiance raisonnable dans la représentativité des résultats malgré une seule réalisation. Elle respecte par construction les exigences de la schématisation géométrique de l'A.M. (particules polyédriques, interfaces opposées parallèles avec formes et surfaces proches). Les étapes de la génération numérique réalisée par le Centre d'Études de Gramat² sont les suivantes (figure III.15) :

- (i) Une boîte de taille fixée est définie de manière à délimiter le volume à considérer (figure III.15(a)).
- (ii) De grandes sphères de diamètres identiques sont lâchées dans la boîte et remplissent le volume (figure III.15(b)).
- (iii) Une fois le volume rempli par les grandes sphères, une homothétie leur est appliquée dans le but de créer de la place pour introduire les petites sphères (figure III.15(c)).
- (iv) La taille de la boîte d'origine est réduite d'une distance inférieure au rayon des grandes sphères (figure III.15(d)).
- (v) De petites sphères de diamètres identiques sont lancées dans la nouvelle boîte obtenue après réduction (figure III.15(e)-(f)).
- (vi) La génération des polyèdres à partir des sphères et l'homothétie finale pour parvenir à la concentration volumique de particules souhaitée, présentée au paragraphe III.3 (voir étapes (ii) et (iii)), sont ensuite réalisées.

Remarque : Même si nous partons de sphères pour générer les particules polyédriques, l'objectif n'est pas de schématiser une microstructure à charges sphériques avec un processus de polyédrisation optimisé comme pour un composite énergétique réel (chapitre II). De même que dans le cas monomodal, la finalité est ici de générer une microstructure à charges polyédriques.

La microstructure obtenue et la répartition granulométrique associée apparaissant en figure III.16 permettent de visualiser deux populations de particules polyédriques distinctes. Le volume moyen

². G. Contesse, Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, Centre d'Études de Gramat, Gramat, France.

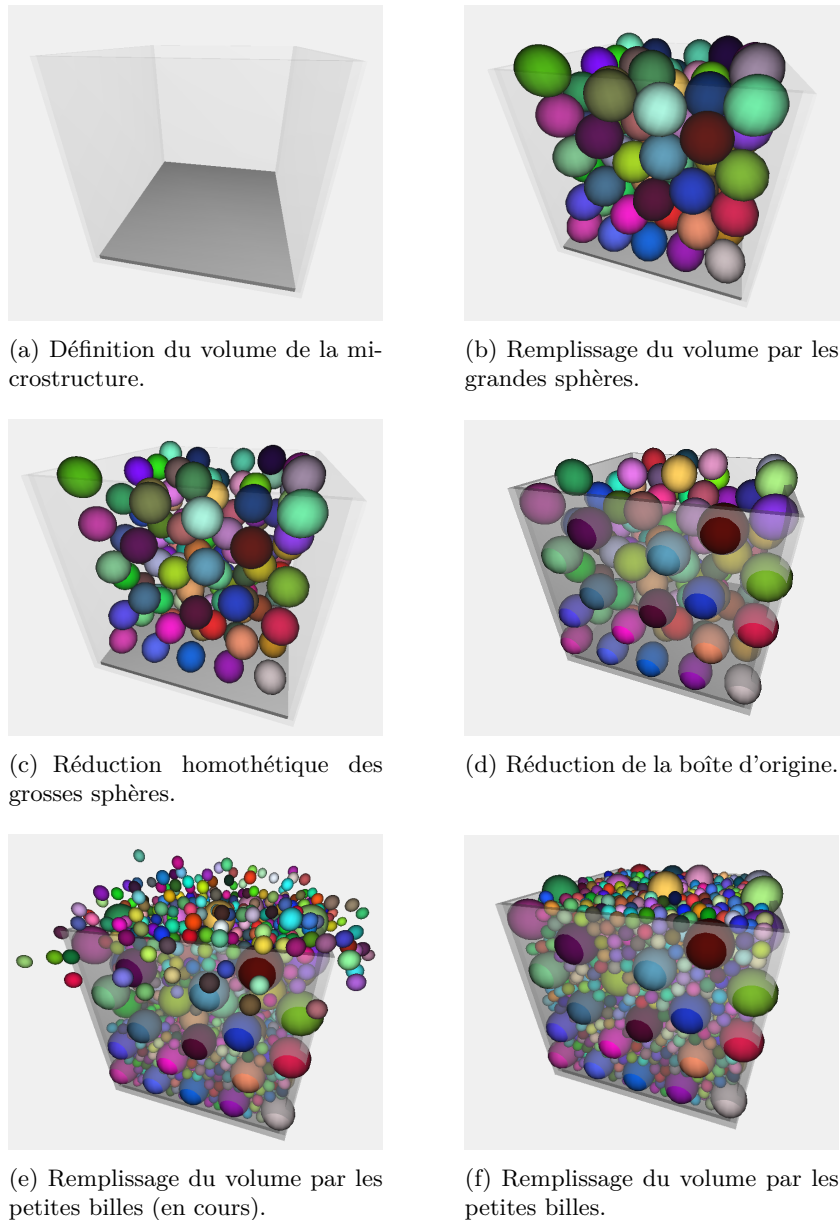


Figure III.15 – Étapes de génération d'une microstructure aléatoire bimodale artificielle avant construction des polyèdres.

des petites particules correspond au volume d'une sphère de diamètre $L_{\text{avg}}^{\text{SP}} = 202 \mu\text{m}$ et celui des grosses particules au volume d'une sphère de diamètre $L_{\text{avg}}^{\text{LP}} = 347 \mu\text{m}$. La concentration volumique des petites particules par rapport au volume total de particules est de 54%, et celle des grosses particules est de 46%.

III.4.2 Méthodologie adoptée

Les propriétés élastiques des constituants restent inchangées (tableau III.1). Les paramètres d'endommagement ($d_{\text{critique}} = 3.5 \mu\text{m}$, $\lambda = 1.8 \mu\text{m}$) sont identiques à ceux considérés dans les configurations monomodales (paragraphe III.3.2).

La microstructure bimodale considérée est définie dans le repère $(\vec{e}^1, \vec{e}^2, \vec{e}^3)$ (figure III.16). Neuf chargements en "extension uniaxiale" du type (III.2), c'est-à-dire selon neuf directions différentes,

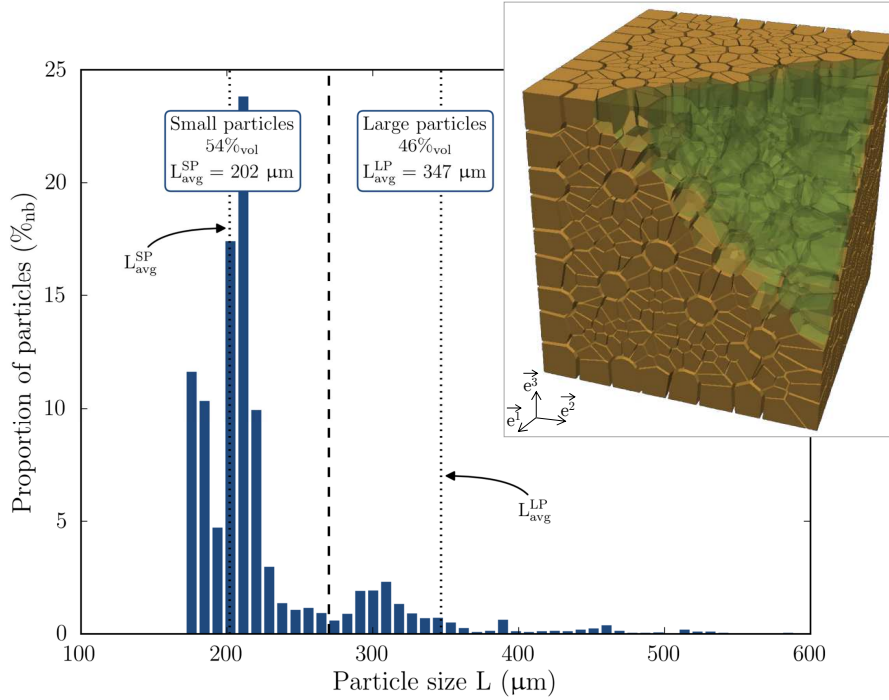


Figure III.16 – Illustration de la microstructure aléatoire bimodale artificielle étudiée et répartition granulométrique associée. Une partie de la microstructure (en vert) a été mise en transparence de manière à visualiser différentes tailles de particules au sein du volume.

lui sont appliqués. Chacun de ces chargements est défini dans un repère $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ obtenu par rotation autour de l'axe \vec{e}^1 , \vec{e}^2 ou \vec{e}^3 . Dans chaque cas, une extension selon un axe donné du repère $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ est donc couplée à une contraction identique dans les directions transverses de ce même repère. L'incrément de chargement dans la direction d'extension est de 10^{-4} . Les neuf configurations de chargement considérées sont ainsi les suivantes (figure III.17) :

- trois chargements en extension suivant les trois directions définies par le repère $(\vec{e}^1, \vec{e}^2, \vec{e}^3)$ (figure III.17(a)-(b)-(c)) ;
- deux chargements en extension suivant la direction définie par l'axe \vec{x} du repère $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ obtenu par une rotation du repère $(\vec{e}^1, \vec{e}^2, \vec{e}^3)$ autour de l'axe \vec{e}^3 d'un angle $\varphi = 45^\circ$ (figure III.17(d)) et $\varphi = 135^\circ$ (figure III.17(e)) respectivement ;
- deux chargements en extension suivant la direction définie par l'axe \vec{y} du repère $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ obtenu par une rotation du repère $(\vec{e}^1, \vec{e}^2, \vec{e}^3)$ autour de l'axe \vec{e}^1 d'un angle $\varphi = 45^\circ$ (figure III.17(f)) et $\varphi = 135^\circ$ (figure III.17(g)) respectivement ;
- deux chargements en extension suivant la direction définie par l'axe \vec{z} du repère $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ obtenu par une rotation du repère $(\vec{e}^1, \vec{e}^2, \vec{e}^3)$ autour de l'axe \vec{e}^2 d'un angle $\varphi = 45^\circ$ (figure III.17(h)) et $\varphi = 135^\circ$ (figure III.17(i)) respectivement.

Les résultats pour les neuf chargements sont superposés en figure III.18 de manière à observer des tendances générales statistiquement indépendantes de l'axe d'extension.

En figure III.18, la répartition granulométrique de la microstructure est superposée à des points caractérisant la nucléation des défauts au sein du volume : le graphe représente la déformation macroscopique axiale $E_{\text{nucléation}}$ correspondant à chaque décohésion d'interface. Lorsqu'une nucléation

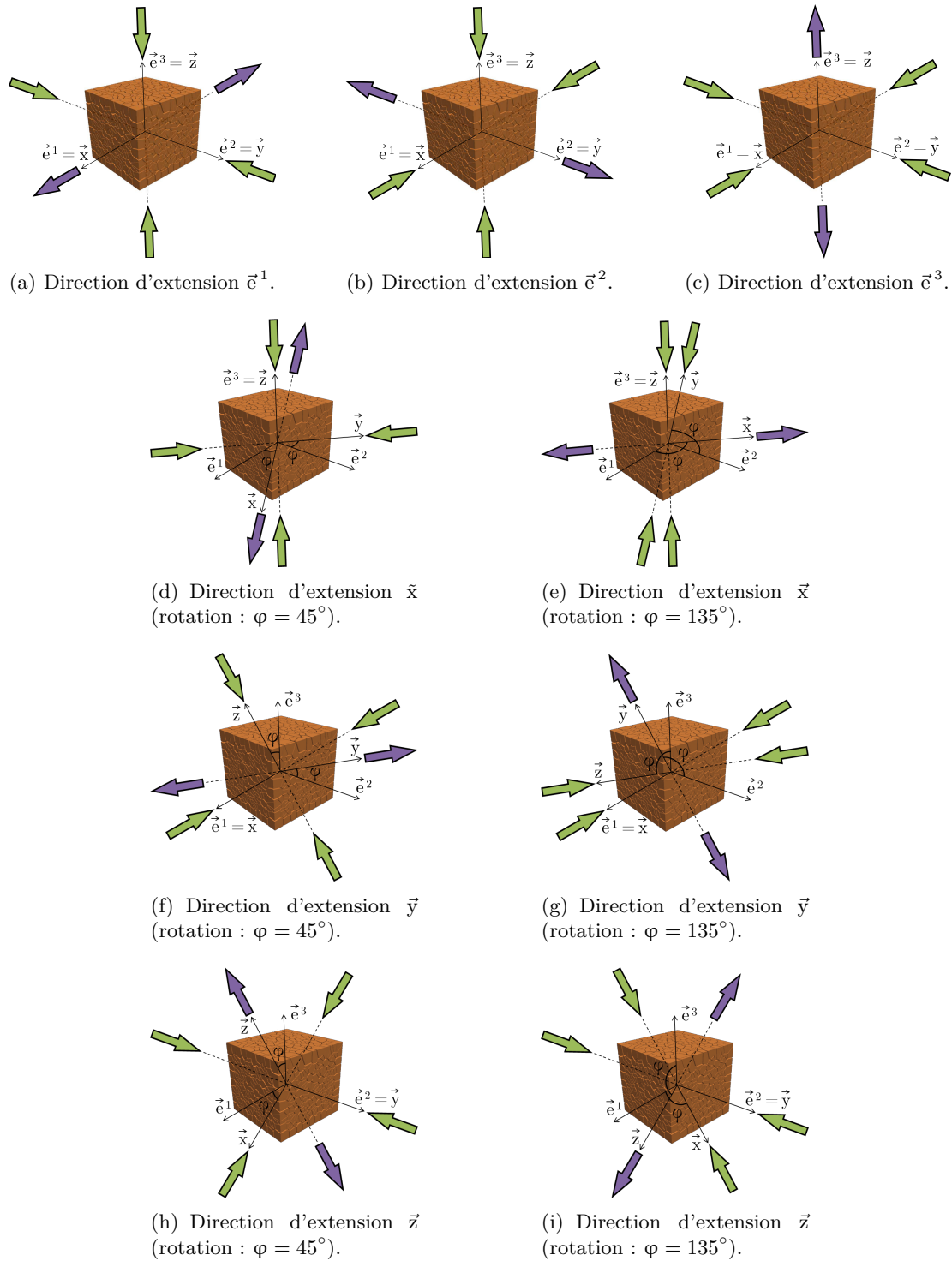


Figure III.17 – Illustration des neuf chargements en “extension uniaxiale” appliqués à la microstructure bimodale. En violet : extension ; en vert : contraction dans les directions transverses.

est détectée pour une couche α donnée, les deux interfaces sont impactées par le phénomène de décohésion (voir paragraphe II.2.1). De plus, plusieurs couches peuvent se décoller simultanément. Ainsi, sur le graphe III.18, à chaque valeur de déformation macroscopique $E_{\text{nucléation}}$ (ordonnée sur l'axe de gauche) correspondent au moins deux tailles de particules (c'est-à-dire deux points

d'abscisses différents). Les résultats pour les neuf chargements γ sont reportés.

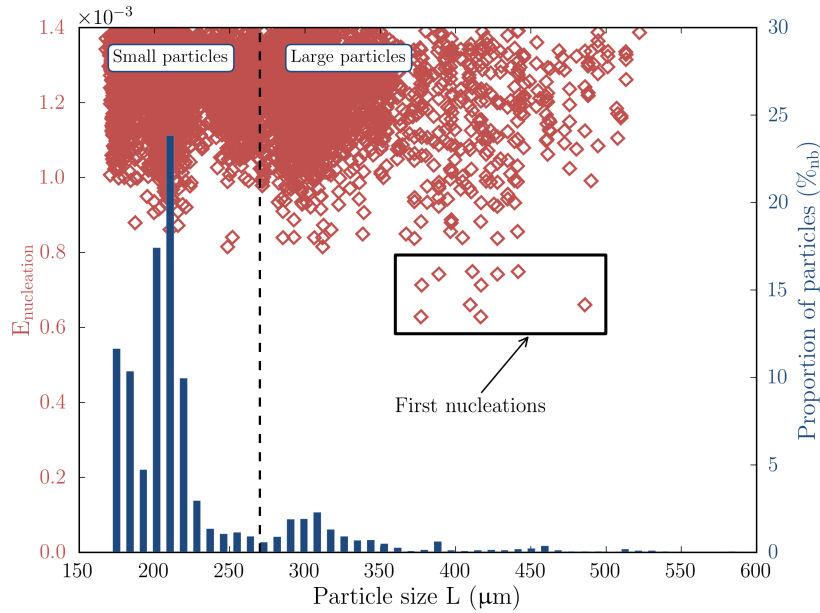


Figure III.18 – Répartition granulométrique de la microstructure aléatoire bimodale et influence de la taille de particule sur la chronologie de décohésion.

III.4.3 Résultats

Analysons la figure III.18 pour des valeurs croissantes de la déformation macroscopique. Nous constatons dans un premier temps, à droite de la ligne pointillée séparant les deux domaines de tailles de particules, que les premières nucléations ont lieu pour de grosses particules (voir l'encadré). Puis, lorsque la déformation macroscopique $E_{\text{nucléation}}$ augmente, la décohésion touche quelques petites particules, tandis que le phénomène persiste au niveau des grosses particules. D'un point de vue statistique, plus la déformation macroscopique est importante, plus les petites particules subissent de décohésions d'interfaces. Ces constatations semblent révéler une influence de la taille de particule : l'endommagement se produirait en priorité sur les grosses particules avant que des défauts n'apparaissent aux interfaces entre les petites particules et la matrice.

Cependant, pour la microstructure bimodale considérée, la chronologie des nucléations résulte nécessairement du couplage entre l'orientation des interfaces avec d'autres caractéristiques morphologiques, telle que la taille de particule. Cela explique sans doute pourquoi certaines grosses particules subissent des décohésions d'interface après que le phénomène ait été observé aux interfaces de particules plus petites, probablement mieux orientées vis-à-vis de l'axe d'extension. Afin d'évaluer le poids de l'orientation des interfaces, notamment sur les premières nucléations concernant les grosses particules, l'angle θ entre la direction d'extension et le vecteur normal unitaire \vec{n}^α d'une couche α est évalué (figure III.19). Les valeurs de $|\cos \theta|$ pour chaque couche décollée sont représentées sur la figure III.20 en fonction de la déformation macroscopique axiale correspondante $E_{\text{nucléation}}$. Les résultats sont superposés pour les neuf chargements en extension et nous avons distingué les nucléations au niveau des grosses et petites particules en référence à la répartition granulométrique de la figure III.16. Sur le graphe III.20, une valeur : $|\cos \theta| = 1$ se réfère à des

couches dont la normale unitaire \vec{n}^α est colinéaire à l'axe de chargement.

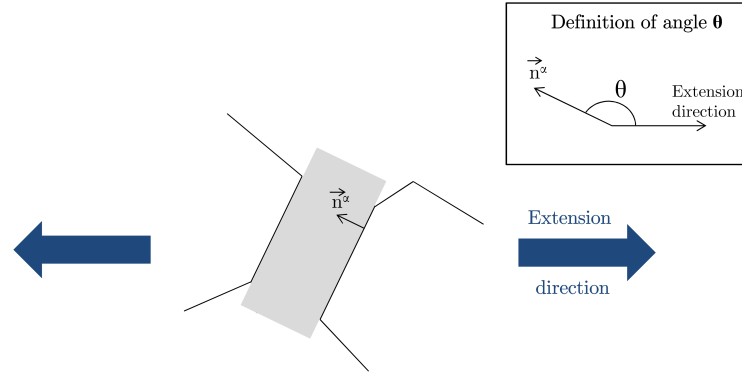


Figure III.19 – Définition de l'angle θ entre la direction d'extension et la normale unitaire \vec{n}^α d'une couche fixée α .

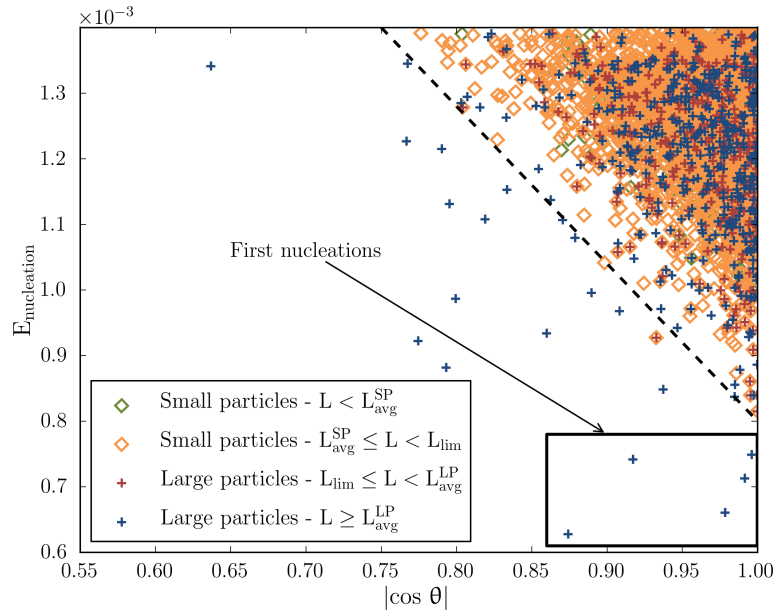


Figure III.20 – Influence de l'orientation sur la chronologie de décohéation pour la microstructure bimodale. θ est l'angle entre la direction de chargement et la normale unitaire d'une couche α . L_{avg}^{SP} et L_{avg}^{LP} sont les dimensions moyennes respectives des petites particules et des grosses particules (figure III.16). L_{lim} est la taille délimitant les deux domaines.

La figure III.20 montre un nuage de points dont l'allure générale indique l'augmentation du nombre de couches "non-idéalement orientée" ($|\cos \theta| < 1$) avec la déformation macroscopique $E_{nucleation}$, qu'il s'agisse de grosses particules ou de petites particules. À partir d'un certain niveau de déformation ($E_{nucleation} \geq 0.8 \times 10^{-3}$), nous observons la décohéation de couches dont la normale est exactement ou quasi-colinéaire à la direction d'extension ($|\cos \theta| = 1$ ou $\simeq 1$) et ce, quelle que soit la déformation macroscopique. Ce résultat illustre l'influence de l'orientation des interfaces sur les mécanismes de décohéation. Cependant, les premières décohésions (pour $E_{nucleation} < 0.8 \times 10^{-3}$, sur la partie inférieure droite du graphe, voir l'encadré) ne se produisent pas uniquement pour des couches "bien orientées" : par exemple, la toute première nucléation a lieu pour $|\cos \theta| = 0.87$,

soit une orientation de l'interface par rapport à la direction d'extension de $\theta = 29^\circ$. Ainsi, pour les particules concernées, il semblerait que l'effet de taille local ait pris le dessus sur l'effet de l'orientation des interfaces vis-à-vis de la direction de sollicitation. Le graphe III.20 révèle aussi que toutes les nucléations les moins "bien orientées" par rapport à la tendance globale indiquée par le nuage de points (en-dessous de la ligne pointillée noire) se trouvent être au niveau des plus grosses particules de la microstructure ($L \geq L_{avg}^{LP}$). Cette observation semble confirmer la conclusion apportée par l'étude des premières décohésions : l'apparition de défauts d'interfaces se produira préférentiellement sur les grosses particules si leurs dimensions sont suffisantes, même si l'orientation n'est pas "idéale".

III.5 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était d'évaluer les aptitudes de l'A.M. à relever deux challenges importants dans le domaine des composites particulaires fortement chargés, à savoir les effets de taille et d'interaction de particules sur la chronologie de décohésion. Pour une première approche, l'analyse a été réalisée avec la version de l'A.M. proposée par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013], c'est-à-dire dans le cadre des petites perturbations en considérant les phases (particules et matrice) élastiques linéaires isotropes (voir chapitre II). L'étude a été effectuée au travers de simulations numériques sur des microstructures périodiques simples, aléatoires monomodales et bimodale contenant des particules polyédriques, générées numériquement.

L'analyse sur microstructures périodiques a illustré la capacité de l'A.M. à rendre compte du résultat plus général suivant : au sein d'une microstructure plus complexe, des particules de même forme et séparées par des zones intergranulaires identiques subiront des décohésions d'interfaces d'autant plus précoces que leur taille sera élevée. D'autre part, l'effet de taille sur la chronologie des nucléations au sein d'une microstructure aléatoire bimodale a pu être mis en évidence. Il existe un couplage fort entre l'orientation des interfaces (intrinsèquement reliée à la forme des particules polyédriques) et la taille des particules. L'effet de taille prend néanmoins le dessus sur l'effet d'orientation dès lors que la taille des particules est suffisante.

Les effets inhérents aux interactions entre particules significatives des forts taux de charges ont pu être restitués par des simulations numériques sur microstructures périodiques et aléatoires monomodales. La décohésion est d'autant plus précoce que la fraction volumique de particules est importante. De plus, l'efficacité de l'A.M. augmente avec le taux de charges.

L'ensemble des capacités constatées plus haut sont issues de la prise en compte de la dépendance des champs au sein de la matrice aux caractéristiques morphologiques propres à chaque zone intergranulaire.

Suite aux évaluations de l'A.M. réalisées lors des travaux antérieurs et au cours de ce chapitre, le chapitre qui suit expose une nouvelle extension de la méthode. Les développements analytiques visant à mettre en place un couplage entre l'endommagement et les transformations finies y sont alors exposés.

CHAPITRE

— IV —

COUPLAGE ENDOMMAGEMENT /
TRANSFORMATIONS FINIES
AU SEIN DE
L'APPROCHE MORPHOLOGIQUE

Plan du chapitre

Liste des notations spécifiques au chapitre	99
Introduction	101
IV.1 Schématisation de la microstructure initiale	102
IV.2 Approche du problème local	103
IV.2.1 Description cinématique	103
IV.2.1.a Hypothèses et forme du champ de déplacement	103
IV.2.1.b Configurations des interfaces et nouvelle forme du champ de déplacement dans une couche α	104
IV.2.1.c Analyse des différentes configurations d'endommagement et simplifications	106
IV.2.2 Relations de passage micro-macro	109
IV.2.2.a Compatibilité entre mouvement local et mouvement global	109
IV.2.2.b Relations de passage micro-macro sur les contraintes	111
IV.2.3 Principe général de résolution	112
IV.3 Approche complémentaire	115
Relations essentielles à configuration d'endommagement fixé	119
IV.4 Prise en compte de l'évolution de l'endommagement	120
IV.4.1 Définition de la normale actuelle	120
IV.4.2 Critère de nucléation	121
Relations essentielles pour décrire l'évolution de l'endommagement	123
IV.5 Comportement des constituants	124
IV.5.1 Forme de la densité d'énergie de déformation	124
IV.5.2 Expression des contraintes nominales	124
Relations essentielles dans le contexte de l'hyperélasticité pour un comportement de type Néo-Hooke	125
IV.6 Conclusion	126

Liste des notations spécifiques au chapitre

Les notations plus générales et utilisées tout au long du manuscrit sont listées en page ix. Les conventions d'usage sont exposées en page v.

Grandeurs cinématiques

\mathbf{H}	gradient de déplacement macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{h}	champ de gradient de déplacement.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{h}^0	gradient de déplacement des particules.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{h}^α	gradient de déplacement de la couche α .	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{F}	gradient de la transformation macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}	champ de gradient de la transformation.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^0	gradient de la transformation des particules.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^α	gradient de la transformation de la couche α .	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{H}^{\alpha D}$	gradient de déplacement traduisant la contribution des défauts présents aux interfaces de la couche α sur \mathbf{f}^α .	tenseur o.2 (3×3)
$\vec{\mathbf{u}}^0$	champ de déplacement des particules.	vecteur (3)
$\vec{\mathbf{u}}^\alpha$	champ de déplacement de la couche α .	vecteur (3)
J^0	jacobien de la transformation des particules.	réel
J^α	jacobien de la transformation d'une couche α .	réel

Déformations

\mathbf{c}^0	tenseur de Cauchy-Green droit pour les particules.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{c}^α	tenseur de Cauchy-Green droit pour une couche α .	tenseur o.2 (3×3)

Contraintes

\mathbf{S}^*	contrainte nominale homogénéisée.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{s}^*	champ de contrainte nominale.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{s}^{*0}	contrainte nominale moyenne dans les particules.	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{s}^{*\alpha}$	contrainte nominale moyenne dans la couche α .	tenseur o.2 (3×3)

Description de l'hyperélasticité

I_1	premier invariant du tenseur de Cauchy-Green droit.	réel
\tilde{I}_1	premier invariant modifié du tenseur de Cauchy-Green droit (non prise en compte de la variation de volume).	réel
C_{10}^g, C_{10}^m	coefficient de Néo-Hooke pour les grains et pour la matrice respectivement.	réel
K^g, K^m	module de compressibilité pour les grains et pour la matrice respectivement.	réel

Évolution de l'endommagement

\vec{n}^α	normale à l'interface grains / couche à l'instant t.	vecteur (3)
------------------	--	-------------

Les développements proposés dans ce chapitre s’inscrivent dans le prolongement des travaux présentés au chapitre II. Nous y avons exposé deux versions de l’Approche Morphologique :

- la première version de l’A.M. s’adressait à des composites particulières fortement chargés non endommagés dans le cadre des transformations finies [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. Les estimations avaient été confrontées avec succès à des simulations éléments finis en champs complets ;
- la seconde version de l’A.M. concernait des composites particulières fortement chargés au sein desquels un endommagement par décohésion aux interfaces particules / matrice est observé, dans l’hypothèse des petites perturbations [Nadot *et al.* 2006, Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. Des simulations dans le cas particulier de constituants élastiques linéaires isotropes présentées au paragraphe II.4 ont rappelé les aptitudes de l’A.M. à restituer des effets saillants aux deux échelles (évolution de l’anisotropie induite par l’endommagement, effet unilatéral). Le chapitre III a prolongé l’évaluation qualitative de cette version de l’A.M. en montrant ses capacités à restituer les effets de taille et d’interaction entre particules attendus dans des composites à forts taux de charges.

L’objectif de ce chapitre est d’étendre l’A.M. en envisageant un couplage entre l’endommagement et les transformations finies. Nous choisissons de conserver le socle cinématique au départ de l’A.M. fournissant en transformations finies des résultats quantitativement satisfaisants pour le matériau sain, avec pour but de mesurer dans ce cadre la faisabilité du couplage avec l’endommagement. Tout en suivant le même type de démarche que nos prédécesseurs, tous les développements analytiques sont repris à la source. Ils sont toujours réalisés dans le cadre d’une description lagrangienne du mouvement avec, comme configuration de référence, la configuration non déformée.

Dans un premier temps, nous rappelons brièvement la schématisation géométrique au départ de l’approche (paragraphe IV.1). Puis, dans le paragraphe suivant (paragraphe IV.2), toutes les étapes (développements cinématiques, relations de passage micro-macro, *etc.*) relatives à la formulation du problème de localisation-homogénéisation pour une configuration d’endommagement donnée (c’est-à-dire pour un nombre fixé de défauts ouverts et / ou fermés) sont revisitées. Une approche complémentaire de la même veine que celle proposée par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013], mais dont le positionnement dans la démarche d’ensemble diffère, fait l’objet du paragraphe IV.3. Nous nous attachons ensuite à formuler des outils permettant de décrire la création de défauts ouverts au cours d’un chargement de la microstructure (paragraphe IV.4). Enfin, les lois de comportement affectées aux constituants sont précisées au paragraphe IV.5.

IV.1 Schématisation de la microstructure initiale

La polyédrisation de la microstructure initiale du composite particulaire fortement chargé reste un processus constituant le point de départ de l'Approche Morphologique. La procédure décrite au paragraphe II.1 est ici conservée. Pour rappel, la microstructure particulaire étudiée est représentée par un assemblage de particules polyédriques en forte proportion volumique séparées par de fines couches de matrice appelées "couches α ". La figure IV.1 rappelle les quatre paramètres morphologiques à identifier dans la configuration non déformée du milieu schématisé, qui sont :

- h^α , l'épaisseur de couche ;
- \vec{n}^α , la normale unitaire définissant l'orientation de la couche ;
- \vec{d}^α , le vecteur reliant les centroïdes de deux particules situées de part et d'autre de la couche α ;
- A^α , l'aire projetée définissant la zone de matrice qualifiée de "couche α ".

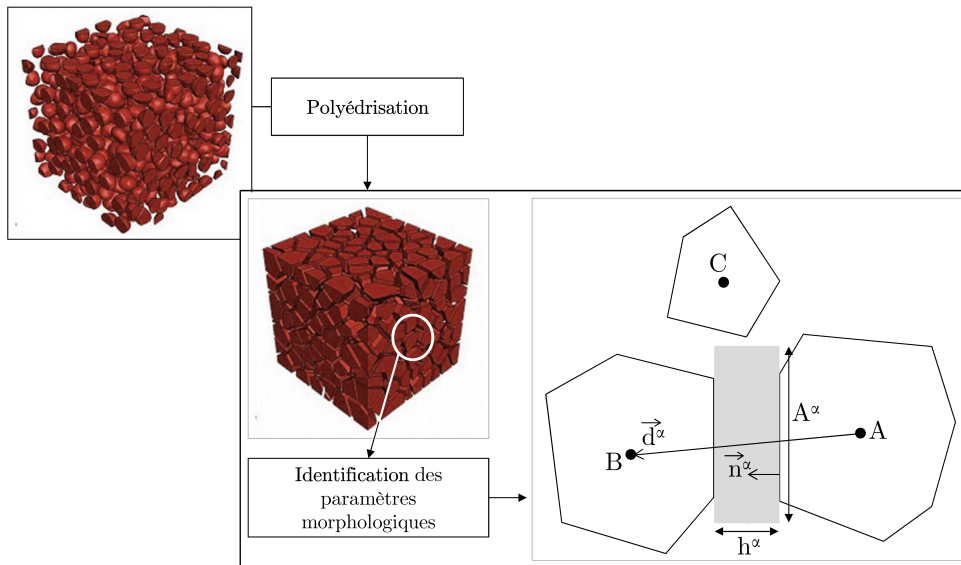


Figure IV.1 – Schématisation de la microstructure et rappel des paramètres morphologiques à identifier (configuration initiale).

IV.2 Approche du problème local

IV.2.1 Description cinématique

IV.2.1.a Hypothèses et forme du champ de déplacement

Les hypothèses cinématiques exposées au paragraphe II.2.1 sont reconduites. Ainsi :

- (i) Les centroïdes des particules sont supposés avoir un mouvement d'ensemble défini par le gradient de déplacement macroscopique \mathbf{H} (donnée du problème).
- (ii) Toutes les particules sont supposées avoir un gradient de déplacement homogène et identique pour toutes, noté \mathbf{h}^0 .
- (iii) Chaque couche α est supposée avoir un gradient de déplacement homogène, mais variable d'une couche à l'autre, noté \mathbf{h}^α .
- (iv) Les perturbations localisées aux coins et arêtes de particules, dans les zones éventuelles de recouvrement de couches (zones médianes), sont négligées en raison de la finesse initiale des couches.

De manière équivalente, les hypothèses précédentes peuvent être formulées en gradients de la transformation, avec : $\mathbf{F} = \mathbf{Id} + \mathbf{H}$, $\mathbf{f}^0 = \mathbf{Id} + \mathbf{h}^0$ et $\mathbf{f}^\alpha = \mathbf{Id} + \mathbf{h}^\alpha$.

La première étape consiste à exploiter les deux premières hypothèses cinématiques en vue d'exprimer (à un déplacement global de solide rigide près) le champ de déplacement linéaire dans chacune des particules en fonction du gradient de déplacement macroscopique \mathbf{H} (donné) et de celui des particules \mathbf{h}^0 . Selon la même méthodologie que dans les versions antérieures [Nadot *et al.* 2006], elle-même identique aux travaux initiaux de Christoffersen [Christoffersen 1983], l'hypothèse (i) mène à l'expression des déplacements des centroïdes A et B des deux grains GA et GB séparés par une couche α :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_I^A(\vec{\mathbf{Y}}^A) &= \mathbf{u}_I^* + \mathbf{H}_{IJ} \mathbf{Y}_J^A \\ \mathbf{u}_I^B(\vec{\mathbf{Y}}^B) &= \mathbf{u}_I^* + \mathbf{H}_{IJ} \mathbf{Y}_J^B \end{aligned} \quad (\text{IV.1})$$

où : $\vec{\mathbf{u}}^*$ désigne un vecteur global constant ;

$\vec{\mathbf{Y}}^A$ et $\vec{\mathbf{Y}}^B$ sont les vecteurs position initiaux des deux centroïdes.

L'association de l'hypothèse (ii) et de l'équation (IV.1) mène aux champs de déplacement des grains GA et GB :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_I^{\text{GA}}(\vec{\mathbf{Y}}) &= \mathbf{u}_I^* + (\mathbf{H} - \mathbf{h}^0)_{IJ} \mathbf{Y}_J^A + \mathbf{h}_{IJ}^0 \mathbf{Y}_J \\ \mathbf{u}_I^{\text{GB}}(\vec{\mathbf{Y}}) &= \mathbf{u}_I^* + (\mathbf{H} - \mathbf{h}^0)_{IJ} \mathbf{Y}_J^B + \mathbf{h}_{IJ}^0 \mathbf{Y}_J \end{aligned} \quad (\text{IV.2})$$

Enfin, l'hypothèse (iii) permet d'exprimer le champ de déplacement d'une couche α par :

$$\mathbf{u}_I^\alpha(\vec{\mathbf{Y}}) = \mathbf{u}_I^\alpha(\vec{\mathbf{Y}}^{\text{AB}}) + \mathbf{h}_{IJ}^\alpha (\mathbf{Y}_J - \mathbf{Y}_J^{\text{AB}}) \quad (\text{IV.3})$$

où : AB est un point quelconque de l'interface I_1^α entre la couche α et le grain GA.

IV.2.1.b Configurations des interfaces et nouvelle forme du champ de déplacement dans une couche α

Comme dans les travaux de Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006], les défauts et les sauts de déplacement associés sont introduits de manière compatible avec la description géométrique et cinématique postulée au départ de l'A.M. Les sauts précités sont par ailleurs considérés comme des données du problème de localisation-homogénéisation en accord avec l'esprit original de l'approche, s'appuyant sur l'écriture des conditions cinématiques aux interfaces. La linéarité du champ de déplacement de part et d'autre de l'interface considérée comme endommagée (I_1^α ou I_2^α) conduit à supposer une forme linéaire pour le vecteur de discontinuité de déplacement associé :

$$b_I^{\alpha k}(\vec{Y}^M) = H_{IJ}^{\alpha Dk} Y_J^M \quad (\text{IV.4})$$

où : $k = 1, 2$ se réfère à l'interface I_k^α ;

\vec{Y}^M est le vecteur position initial d'un point M sur l'interface I_k^α ;

$H^{\alpha Dk}$ est un gradient de déplacement homogène.

L'obtention du champ de déplacement \vec{u}^α d'une couche α quelconque et de son gradient de déplacement \mathbf{h}^α découle de l'écriture successive des conditions cinématiques au niveau de chacune des deux interfaces de la couche α . Deux configurations sont possibles pour une couche α : soit cette couche est saine (voir chapitre II), soit elle présente un décollement. Dans ce dernier cas, et contrairement aux travaux de Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006], deux situations sont ici considérées :

- l'une des interfaces est saine et l'autre comporte un défaut ;
- les deux interfaces comportent chacune un défaut (comme dans Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006]).

Les relations présentées dans ce paragraphe sont établies en considérant en premier lieu l'état de l'interface I_1^α puis celui de l'interface opposée I_2^α (voir Annexe B). Sur chacune des deux interfaces considérées, une condition de continuité ou de saut sur les champs de déplacement est écrite pour décrire respectivement un état non endommagé ou endommagé. Ainsi, pour l'interface I_k^α entre la couche α et le grain GX, nous avons :

- si l'interface I_k^α est saine : $u_I^\alpha(\vec{Y}^M) = u_I^{GX}(\vec{Y}^M), \forall M \in I_k^\alpha$;
- si l'interface I_k^α est endommagée : $u_I^\alpha(\vec{Y}^M) = u_I^{GX}(\vec{Y}^M) + b_I^{\alpha k}(\vec{Y}^M), \forall M \in I_k^\alpha$.

où : $k = 1, 2$ se réfère à l'interface I_k^α ;

\vec{u}^{GX} est le champ de déplacement du grain GX ;

$\vec{b}^{\alpha k}$ est le saut de déplacement au niveau de l'interface I_k^α .

Après avoir traité chacune des conditions cinématiques possibles sur chacune des interfaces I_1^α puis I_2^α , les expressions des sauts de déplacement et du gradient de la transformation pour une couche α associées aux différentes configurations envisageables sont obtenues. Le tableau IV.1 synthétise les résultats des développements détaillés en Annexe B.

	La couche α est saine	L'une des interfaces est saine et l'autre comporte un défaut		Les deux interfaces comportent chacune un défaut
I_1^α	Saine $b_I^{\alpha 1}(\vec{Y}^{AB}) = 0$	Saine $b_I^{\alpha 1}(\vec{Y}^{AB}) = 0$	Défaut $b_I^{\alpha 1}(\vec{Y}^{AB}) = -V_I^\alpha n_j^\alpha Y_j^{AB}$ \rightarrow équation (B.28)	Défaut $b_I^{\alpha 1}(\vec{Y}^{AB}) = H_{IJ}^{\alpha D} Y_j^{AB}$ \rightarrow équation (B.39) ₁
I_2^α	Saine $b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^{BA}) = 0$	Défaut $b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^{BA}) = -V_I^\alpha n_j^\alpha Y_j^{BA}$ \rightarrow équation (B.15)	Saine $b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^{BA}) = 0$	Défaut $b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^{BA}) = H_{IJ}^{\alpha D} Y_j^{BA} - V_I^\alpha n_j^\alpha Y_j^{BA}$ \rightarrow équation (B.39) ₂
$h_{IJ}^\alpha =$	$h_{IJ}^0 + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_j^\alpha}{h^\alpha}$ \rightarrow équation (B.7)	$-V_I^\alpha n_j^\alpha \frac{(Y_K^{BA} n_K^\alpha)}{h^\alpha}$ \rightarrow équation (B.16)	$+V_I^\alpha n_j^\alpha \frac{(Y_K^{AB} n_K^\alpha)}{h^\alpha}$ \rightarrow équation (B.30)	$+H_{IJ}^{\alpha D} - V_I^\alpha n_j^\alpha \frac{(Y_K^{BA} n_K^\alpha)}{h^\alpha}$ \rightarrow équation (B.40)
où : \vec{v}^α est un vecteur homogène ; AB est un point de l'interface I_1^α , BA est un point de l'interface I_2^α .				

Tableau IV.1 – Synthèse des différentes configurations possibles pour une couche α : expressions des sauts de déplacement correspondants et du gradient de déplacement de la couche α .

Une couche α peut se trouver dans plusieurs configurations :

- La couche est saine et ne présente pas de défaut à ses interfaces. Nous nommerons cette configuration : “configuration saine”.
- La couche présente un unique défaut au niveau de l’une de ses interfaces. Le saut de déplacement le long de cette interface est uniforme quel que soit le point considéré sur l’interface. Nous nommerons cette configuration : “configuration simple”.
- La couche présente une double décohésion : ses deux interfaces comportent des défauts. La paire de défauts est caractérisée par des sauts de déplacement qui sont des fonctions affines des coordonnées spatiales le long des interfaces dans leur configuration d’origine. Nous nommerons cette configuration : “configuration double”.

Avant de poursuivre, une analyse des résultats recensés dans le tableau IV.1 s’impose. En effet, les développements menés en Annexe B et dont les résultats figurent dans le tableau IV.1 introduisent une nouvelle configuration d’endommagement encore jamais envisagée auparavant. Le paragraphe qui suit permet de discuter cette nouvelle configuration au regard des travaux antérieurs [Nadot *et al.* 2006], et de réaliser des choix pour la suite de l’étude.

IV.2.1.c Analyse des différentes configurations d’endommagement et simplifications

Les travaux antérieurs développant l’Approche Morphologique en présence d’endommagement [Nadot *et al.* 2006] n’envisageaient que deux configurations pour une couche α : soit aucune des deux interfaces I_1^α et I_2^α n’était décollée, soit les deux l’étaient simultanément. Nous venons ici de montrer qu’en traitant le problème avec une méthodologie similaire à Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006], c’est-à-dire en revisitant chacune des étapes du raisonnement original de Christoffersen [Christoffersen 1983], ces deux configurations peuvent être considérées mais qu’une nouvelle forme d’endommagement de la couche α peut aussi être envisagée : la “configuration simple”. Les hypothèses cinématiques au départ de l’A.M. n’excluent donc pas le décollement d’une couche d’un seul côté.

La “configuration simple” implique un saut de déplacement constant le long de l’interface endommagée tel que (tableau IV.1) :

$$b_I^\alpha \left(\vec{Y}^M \right) = -v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^M \quad (\text{IV.5})$$

où : \vec{v}^α est un vecteur homogène caractérisant la discontinuité au niveau de l’interface et M est un point de l’interface considérée.

La même expression du saut est donc obtenue quelle que soit la “configuration simple” envisagée : I_1^α saine - I_2^α décollée, ou l’inverse (voir respectivement les relations (B.13) et (B.26) donnant $\mathbf{H}^{\alpha Dk}$ pour $k = 2$ et $k = 1$, conduisant aux expressions (B.15) et (B.28)).

En “configuration double”, bien que partant de deux formes linéaires *a priori* distinctes (c’est-à-dire avec $\mathbf{H}^{\alpha D1} \neq \mathbf{H}^{\alpha D2}$), les développements débouchent finalement sur un lien notable entre les sauts sur les deux interfaces décollées (tableau IV.1) découlant de la relation (B.38) en posant $\mathbf{H}^{\alpha D1} = \mathbf{H}^{\alpha D}$:

$$b_I^{\alpha 1} \left(\vec{Y}^{AB} \right) = H_{IJ}^{\alpha D} Y_J^{AB} \quad ; \quad b_I^{\alpha 2} \left(\vec{Y}^{BA} \right) = H_{IJ}^{\alpha D} Y_J^{BA} - v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^{BA} \quad (\text{IV.6})$$

où : AB (respectivement BA) est un point de l'interface I_1^α (respectivement I_2^α).

Le gradient impliqué dans la part linéaire des deux sauts est ainsi identique. Au niveau de la seconde interface décollée, le saut dépend additionnellement d'un terme constant identique à celui de la configuration simple (équation (IV.5)). Cette analogie permet d'en donner une "interprétation", à savoir le saut que nous aurions sur la seconde interface en l'absence de discontinuité sur la première. Plus généralement, les expressions de la "configuration simple" (I_1^α saine, I_2^α décollée) se retrouvent à partir des expressions de la "configuration double" en considérant $\vec{b}^{\alpha 1} = \vec{0}$ et $\mathbf{H}^{\alpha D}$ inexistant. Cela reflète l'unité méthodologique des développements relatifs au traitement, pourtant séparé, des différentes configurations envisagées.

Envisager toutes les configurations de décohésion ("simple" et "double") que nous venons de présenter serait certainement bien plus représentatif de ce qu'il est susceptible de se produire dans la réalité au sein des matériaux étudiés. Contrairement aux travaux antérieurs menés en H.P.P. [Nadot *et al.* 2006], nous prendrions ainsi en compte des décohésions partielles de couches, au lieu de ne considérer que des décohésions sur les deux interfaces. Cependant, ce choix aurait plusieurs conséquences qui complexifieraient grandement la suite de la résolution. En effet, nous devrions d'abord différencier toutes les configurations possibles (saine, les deux "simples" et la "double") pour une couche donnée. D'autre part, cela ferait émerger un ensemble d'inconnues supplémentaires, $\{\vec{v}^\alpha\}$, pour toutes les couches α comportant un ou deux défauts à leurs interfaces. Ce set d'inconnues s'ajouterait à $\{\mathbf{H}^{\alpha D}\}$ pour les couches victimes d'une double décohésion. Enfin, pour la prise en compte de l'évolution de l'endommagement à venir, le critère de nucléation devrait être testé au niveau des deux interfaces (au lieu d'une seule), afin de déterminer si la décohésion est "simple" ou "double". Il existerait par ailleurs plusieurs successions d'évènements à prendre en compte pour l'évolution de l'endommagement en termes d'état et / ou configuration d'une couche au sein du composite :

- "saine" / "simple" / "fermée" ;
- "saine" / "double" / "fermée" ;
- "saine" / "simple" / "double" / "fermée" ;
- *etc.*

au lieu de l'enchaînement "saine" / "double" / "fermée" envisagé par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

L'objectif de ce travail est d'opérer un couplage entre les transformations finies et l'endommagement, et de parvenir à le simuler numériquement. Nous choisissons donc en première approche de nous limiter à une unique configuration de décohésion, tout en restant cohérent avec la construction de la modélisation. À ce titre, et compte-tenu des liens précédemment discutés, il paraît incohérent de rejeter la "configuration double" tout en conservant la "configuration simple". En effet, l'élimination de la "configuration double" revient d'une part à ne pas considérer de défaut sur la première interface (éliminant de fait la part linéaire des deux sauts dans (IV.6)), et d'autre part

à supprimer la part uniforme du saut sur la seconde interface, ce qui exclut d'office la "configuration simple" et ramène à la seule "configuration saine". En revanche, il apparaît plus judicieux de conserver la "configuration double" en négligeant la part uniforme du saut sur la seconde interface (soit : $\vec{v}^\alpha = \vec{0}$). Ce choix conduit en effet à ne plus considérer de "configuration simple" et simplifie la "configuration double". Nous nous retrouvons alors dans un cadre similaire à celui adopté par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006].

Nous envisageons donc à présent les seuls cas sain et de double décohésion. Dans ce dernier cas, les défauts sont décrits sous la forme de sauts de déplacement le long des interfaces I_1^α et I_2^α respectivement définis de la manière suivante :

$$b_I^{\alpha 1}(\vec{Y}^M) = H_{IJ}^{\alpha D} Y_J^M \quad ; \quad b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^M) = H_{IJ}^{\alpha D} Y_J^M \quad (\text{IV.7})$$

Dans le chapitre II, nous avons évoqué la contrainte géométrique rajoutée par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] dans le but de rendre plus acceptable la double décohésion : deux interfaces en regard doivent disposer de propriétés géométriques proches (forme et surface). Étant donné que nous considérons une configuration d'endommagement identique à celle de Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006], nous conserverons cette contrainte à imposer lors du processus de polyédrisation de la microstructure initiale.

De plus, nous retiendrons les expressions du gradient de déplacement \mathbf{h}^α d'une couche α pour les configurations retenues (tableau IV.1) :

$$\begin{aligned} h_{IJ}^\alpha &= h_{IJ}^0 + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} && \text{si la couche } \alpha \text{ est saine;} \\ h_{IJ}^\alpha &= h_{IJ}^0 + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} + H_{IJ}^{\alpha D} && \text{si la couche } \alpha \text{ est décollée.} \end{aligned} \quad (\text{IV.8})$$

Les expressions correspondantes en termes de gradient de la transformation nécessaires à la suite des développements s'ensuivent :

$$\begin{aligned} f_{IJ}^\alpha &= f_{IJ}^0 + (F - f^0)_{iK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} && \text{si la couche } \alpha \text{ est saine;} \\ f_{IJ}^\alpha &= f_{IJ}^0 + (F - f^0)_{iK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} + \delta_{iK} H_{KJ}^{\alpha D} && \text{si la couche } \alpha \text{ est décollée.} \end{aligned} \quad (\text{IV.9})$$

Remarque : Le symbole de Kronecker δ_{iK} au niveau du dernier terme de l'équation (IV.9)₂ a été introduit pour assurer la cohérence de l'écriture indicielle de l'équation, étant donné les notations utilisées depuis le début de ce manuscrit. En effet, en considérant la notation :

- u_i pour la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur déplacement \vec{u} fonction du vecteur position \vec{Y} en description lagrangienne,
- y_i (respectivement Y_I) pour la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur position actuel (respectivement initial) d'un point,

la relation $\vec{y} = \vec{Y} + \vec{u}(\vec{Y})$ s'écrit en notation indicielle : $y_i = \delta_{iI} Y_I + \delta_{iI} u_I$. Par suite, l'écriture indicielle de la relation $\mathbf{f} = \mathbf{I}d + \mathbf{h}$ devient : $f_{iK} = \frac{\partial y_i}{\partial Y_K} = \delta_{iK} + \delta_{iI} h_{IK}$.

Enfin, le champ de déplacement au sein de la microstructure schématisée est défini à un déplacement de solide rigide près, sous la forme :

$$u_I^0(\vec{Y}) = u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J \quad (\text{IV.10})$$

pour un grain de centroïde A (voir équation (IV.2)) et :

$$u_I^\alpha(\vec{Y}) = u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} (Y - Y^{\alpha B_1})_J + \begin{cases} \emptyset & \text{si la couche } \alpha \text{ est saine;} \\ H_{IJ}^{\alpha D} Y_J & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{IV.11})$$

où : B_1 est le barycentre de l'interface I_1^α séparant la couche α du grain de centroïde A (voir équation (B.41)).

Un parallèle avec l'A.M. dans sa version avec endommagement en H.P.P. (voir chapitre II) met en évidence la similitude évidente entre les expressions (II.4) et (IV.8) du gradient de déplacement d'une couche α . L'expression du gradient de la transformation \mathbf{f}^α d'une couche α présente quant à elle une forme analogue à celle du gradient de déplacement \mathbf{h}^α . Qu'il s'agisse d'une couche saine (équation (IV.9)₁) ou décollée (équation (IV.9)₂), le gradient de la transformation d'une couche α est gouverné par le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} , le gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 et la morphologie de la couche α considérée. Si la couche est décollée, l'expression de \mathbf{f}^α est complétée d'un gradient de déplacement $\mathbf{H}^{\alpha D}$ traduisant l'influence des défauts aux interfaces de la couche α . L'hétérogénéité au sein de la phase matrice est donc renforcée par la présence des défauts.

IV.2.2 Relations de passage micro-macro

À la description du mouvement local succède la mise en place des relations de moyenne liant les deux échelles. Ces relations sont indispensables à la résolution du problème de localisation-homogénéisation et notamment à la détermination de l'inconnue principale \mathbf{f}^0 de laquelle pourront être déduites les réponses aux deux échelles. À ce stade du cheminement, les gradients de déplacement $\{\mathbf{H}^{\alpha D}\}$ sont considérés comme des paramètres. Dans le même esprit que pour les développements cinématiques (paragraphe IV.2), nous réexaminons chacune des étapes de la méthodologie originale [Christoffersen 1983] comme cela avait été fait en transformations finies pour le matériau sain par Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] et en H.P.P. pour le matériau endommagé par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006].

IV.2.2.a Compatibilité entre mouvement local et mouvement global

Afin d'assurer la compatibilité entre la description du mouvement local en accord avec la cinématique décrite au paragraphe précédent et le mouvement global, la relation de moyenne sur le gradient de déplacement est imposée :

$$\mathbf{H} = \langle \mathbf{h} \rangle_{|V_0|} + \frac{1}{|V_0|} \sum_k \left[\int_{I_1^k} \vec{b}^{k1} \otimes \vec{n}^k dS - \int_{I_2^k} \vec{b}^{k2} \otimes \vec{n}^k dS \right] \quad (\text{IV.12})$$

ou, de manière équivalente, sur le gradient de la transformation :

$$\mathbf{F} = \langle \mathbf{f} \rangle_{|V_0|} + \frac{1}{|V_0|} \sum_k \left[\int_{I_1^k} \vec{b}^{k1} \otimes \vec{n}^k dS - \int_{I_2^k} \vec{b}^{k2} \otimes \vec{n}^k dS \right] \quad (\text{IV.13})$$

où : l'indice de sommation k se réfère aux couches dont les interfaces comportent des défauts (ouverts ou fermés) ;

\vec{b}^{ki} est le saut de déplacement au niveau de l'interface I_i^k ;

$|V_0|$ représente le volume total du volume schématisé (somme des volumes des particules et des couches) dans sa configuration initiale non déformée ;

le gradient de déplacement (respectivement de la transformation) moyen sur le volume total s'exprime en fonction des gradients de déplacement (respectivement de la transformation) des particules et des couches :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{h} \rangle_{|V_0|} &= (1-c)\mathbf{h}^0 + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} h^{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} \\ \langle \mathbf{f} \rangle_{|V_0|} &= (1-c)\mathbf{f}^0 + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \mathbf{f}^{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} \quad , \text{ respectivement ;} \end{aligned} \quad (\text{IV.14})$$

c désigne la concentration volumique des couches α par rapport au volume total $|V_0|$:

$$c = \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} \quad (\text{IV.15})$$

En injectant dans (IV.14)₂ l'expression (IV.9) du gradient de la transformation \mathbf{f}^{α} d'une couche α , la relation de moyenne (IV.13) mène à l'équation suivante :

$$\begin{aligned} (\mathbf{F} - \mathbf{f}^0) \left[\mathbf{Id} - \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{n}^{\alpha} A^{\alpha} \right] - \frac{1}{|V_0|} \sum_k \mathbf{H}^{kD} A^k h^k \\ - \frac{1}{|V_0|} \sum_k \left[\int_{I_1^k} \vec{b}^{k1} \otimes \vec{n}^k dS - \int_{I_2^k} \vec{b}^{k2} \otimes \vec{n}^k dS \right] = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (\text{IV.16})$$

Cette équation constitue le pendant en présence d'endommagement de l'équation établie en transformations finies pour le matériau sain au même stade du raisonnement par Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] :

$$(\mathbf{F} - \mathbf{f}^0) \left[\mathbf{Id} - \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{n}^{\alpha} A^{\alpha} \right] = \mathbf{0} \quad (\text{IV.17})$$

L'équation (IV.17) conduisait alors à une condition géométrique portant sur le volume schématisé dans sa configuration initiale, qualifiée de "condition de compatibilité" (équation (II.7)) :

$$\frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{n}^{\alpha} A^{\alpha} = \mathbf{Id} \quad (\text{IV.18})$$

La relation (IV.18) permet d'assurer la relation de moyenne sur le gradient de transformation pour le matériau sain. En présence d'endommagement, il paraît naturel de conserver le respect

de (IV.18) portant sur la microstructure initiale, puisque le matériau sera sain avant de contenir des défauts. Ce choix avait d'ailleurs été fait de manière analogue en H.P.P. L'insertion de la relation (IV.18) permet alors de réduire la condition (IV.16) à :

$$\frac{1}{|V_0|} \sum_k \left[\int_{I_1^k} \vec{b}^{k1} \otimes \vec{n}^k dS - \int_{I_2^k} \vec{b}^{k2} \otimes \vec{n}^k dS \right] = -\frac{1}{|V_0|} \sum_k \mathbf{H}^{kD} \mathbf{A}^k \mathbf{h}^k \quad (\text{IV.19})$$

La relation (IV.19) prolonge la condition (IV.18) du cas sain en impliquant les grandeurs introduites pour décrire la présence des défauts aux interfaces particules / matrice. Comme en H.P.P., il est possible de montrer qu'elle est satisfaite quelle que soit la configuration fixée d'endommagement considérée en s'appuyant sur la dernière hypothèse cinématique consistant à négliger les perturbations dans les zones médianes (relativement à leur faible volume initial).

IV.2.2.b Relations de passage micro-macro sur les contraintes

La suite fait appel au principe de Hill-Mandel associé à des conditions aux limites en contraintes nominales homogènes. Il est ici exprimé dans une forme étendue aux transformations finies et en présence de discontinuités, tout en restant conforme à la double discrétisation géométrique et cinématique adoptée, soit :

$$\mathbf{S}^* : \mathbf{F} = \langle \mathbf{s}^* : \mathbf{f} \rangle_{|V_0|} + \frac{1}{|V_0|} \sum_k \left[\int_{I_1^k} {}^t \mathbf{s}^* \vec{n}^k \cdot \vec{b}^{k1} dS - \int_{I_2^k} {}^t \mathbf{s}^* \vec{n}^k \cdot \vec{b}^{k2} dS \right] \quad (\text{IV.20})$$

avec :

$$\langle \mathbf{s}^* : \mathbf{f} \rangle_{|V_0|} = (1 - c) \mathbf{s}^{*0} : \mathbf{f}^0 + \frac{1}{|V_0|} \sum_\alpha \mathbf{s}^{*\alpha} : \mathbf{f}^\alpha \quad (\text{IV.21})$$

pour tout \mathbf{F} et \mathbf{f}^0 arbitraires et tout champ de contrainte nominale \mathbf{s}^* (non nécessairement associé) statiquement admissible. À ce stade du cheminement, \mathbf{s}^{*0} représente la contrainte nominale moyenne sur le volume des particules et $\mathbf{s}^{*\alpha}$ représente la contrainte nominale moyenne sur le volume d'une couche α .

En injectant dans (IV.21) l'expression (IV.9) du gradient de la transformation \mathbf{f}^α d'une couche α , la relation de moyenne (IV.20) mène à l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^* : \mathbf{F} &= \langle \mathbf{s}^* \rangle_{|V_0|} : \mathbf{f}^0 + \frac{1}{|V_0|} \sum_\alpha \vec{t}^\alpha \cdot (\mathbf{F} - \mathbf{f}^0) \vec{d}^\alpha \\ &+ \frac{1}{|V_0|} \sum_k \mathbf{s}^{*k} : \mathbf{H}^{kD} \mathbf{A}^k \mathbf{h}^k + \frac{1}{|V_0|} \sum_k \left[\int_{I_1^k} {}^t \mathbf{s}^* \vec{n}^k \cdot \vec{b}^{k1} dS - \int_{I_2^k} {}^t \mathbf{s}^* \vec{n}^k \cdot \vec{b}^{k2} dS \right] \end{aligned} \quad (\text{IV.22})$$

où : $\langle \mathbf{s}^* \rangle_{|V_0|} = (1 - c) \mathbf{s}^{*0} + \frac{1}{|V_0|} \sum_\alpha \mathbf{s}^{*\alpha} \mathbf{A}^\alpha \mathbf{h}^\alpha$ représente la moyenne du champ de contrainte nominale sur le volume total $|V_0|$;

$\vec{t}^\alpha = {}^t \mathbf{s}^{*\alpha} \vec{n}^\alpha \mathbf{A}^\alpha$ désigne la force totale transmise à travers la couche α dans la configuration actuelle, exprimée dans la configuration initiale.

Un raisonnement analogue à celui mené pour démontrer la relation (IV.19) permet de montrer que la dernière ligne de l'équation (IV.22) est nulle.

Si maintenant, nous reconduisons les deux cas particuliers envisagés dans les versions antérieures de l'A.M., il vient en prenant $\mathbf{f}^0 = \mathbf{F}$:

$$\mathbf{S}^* = \langle \mathbf{s}^* \rangle_{|V_0|} \quad (\text{IV.23})$$

et avec $\mathbf{f}^0 = \mathbf{Id}$:

$$\mathbf{S}^* = \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{t}^{\alpha} \quad (\text{IV.24})$$

Le système à résoudre en vue de la détermination du gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 se formule de la façon suivante :

$$\begin{cases} \mathbf{S}^* &= \langle \mathbf{s}^* \rangle_{|V_0|} = (1 - c)\mathbf{s}^{*0} + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{*\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} \\ \mathbf{S}^* &= \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{t}^{\alpha} \end{cases} \quad (\text{IV.25})$$

avec : $\vec{t}^{\alpha} = {}^t \mathbf{s}^{*\alpha} \vec{n}^{\alpha} A^{\alpha}$.

La forme du système est similaire à celle obtenue dans les travaux antérieurs (voir chapitre II). Ainsi, l'équation (IV.25)₁ est une relation de moyenne classique sur les contraintes nominales tandis que l'équation (IV.25)₂ est propre à la méthodologie employée et reflète la transmission des efforts (via \vec{t}^{α}) au sein de la microstructure par l'intermédiaire des couches jouant le rôle de zones de contact.

Par différence entre les deux équations du système (IV.25), nous obtenons une équation en contrainte nominale :

$$(1 - c)\mathbf{s}^{*0} + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{*\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} - \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{t}^{\alpha} = \mathbf{0} \quad (\text{IV.26})$$

C'est cette équation qui sera au centre de la résolution du problème de localisation-homogénéisation pour un comportement local donné. L'inconnue principale \mathbf{f}^0 devra être calculée de sorte que le champ de contrainte réel satisfasse l'équation (IV.26).

IV.2.3 Principe général de résolution

Soit un volume schématisé respectant les conditions géométriques décrites au paragraphe IV.1, vérifiant la condition de compatibilité (IV.18) et soumis à un chargement macroscopique défini par le gradient de la transformation associé \mathbf{F} . La configuration envisagée pour le volume étudié est figée : le nombre de défauts (ouverts et / ou fermés) est fixé et il n'y a aucune évolution de l'endommagement. Une couche comportant une paire de défauts ouverts à ses interfaces est notée "couche β " ($\alpha \equiv \beta$), une couche comportant une paire de défauts fermés à ses interfaces est notée "couche f " ($\alpha \equiv f$). Le problème considéré est donc conditionné par les données d'entrée suivantes :

- les paramètres morphologiques caractérisant les couches, soit $\{A^{\alpha}, h^{\alpha}, \vec{n}^{\alpha}, \vec{d}^{\alpha}; \forall \alpha\}$;
- le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} ;
- l'ensemble des tenseurs $\{\mathbf{H}^{\alpha D}\}$ relatifs aux défauts présents au sein de la microstructure, avec $\alpha \equiv \beta$ ou $\alpha \equiv f$;

- les propriétés mécaniques des particules et de la matrice, associées aux lois constitutives qui seront choisies plus loin pour décrire leur comportement respectif.

La résolution de l'équation (IV.26) requiert d'explicitier les forces totales transmises au travers des couches α , $\{\vec{t}^\alpha\}$, selon la configuration dans laquelle se trouve la couche : saine, défauts ouverts au niveau de ses interfaces (couche β), défauts fermés au niveau de ses interfaces (couche f). Pour les couches avec une paire de défauts ouverts, $\vec{t}^\beta = \vec{0}$. Pour les couches comportant des défauts fermés à leurs interfaces, nous conservons l'hypothèse de frottement infini comme dans les travaux antérieurs de sorte que l'intégralité de la force \vec{t}^α est transmise comme pour les couches saines.

Les principales étapes de la résolution peuvent alors être envisagées comme suit :

- (i) La loi constitutive des particules permet d'exprimer la contrainte nominale moyenne \mathbf{s}^{*0} en leur sein en fonction du gradient de la transformation \mathbf{f}^0 , inconnue principale du problème de localisation-homogénéisation à traiter.
- (ii) De la même manière, la loi constitutive de la matrice donne la contrainte nominale moyenne $\mathbf{s}^{*\alpha}$ sur le volume d'une couche α en fonction du gradient de la transformation \mathbf{f}^α , alors explicitée grâce à l'équation (IV.9).
- (iii) Après insertion des expressions précédentes, l'équation (IV.26) fait intervenir les données morphologiques $\{A^\alpha, h^\alpha, \vec{n}^\alpha, \vec{d}^\alpha; \forall \alpha\}$, le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} , les propriétés mécaniques et l'inconnue \mathbf{f}^0 . Elle est paramétrée par l'ensemble des tenseurs $\{\mathbf{H}^{\alpha D}\}$ relatifs aux défauts présents au sein de la microstructure.
- (iv) La résolution de l'équation (IV.26) ainsi explicitée permettra alors d'accéder à la connaissance du gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 .
- (v) Une fois \mathbf{f}^0 évalué, l'ensemble des champs locaux pourront être déterminés : \mathbf{f}^α pour chacune des couches α via (IV.9), déformations, contraintes.
- (vi) Finalement, le tenseur des contraintes nominales homogénéisé sera calculé à partir de la relation (IV.25)₁. Les autres grandeurs macroscopiques pourront également être estimées par moyenne volumique.

Les étapes (i) et (ii) seront détaillées au paragraphe IV.5 en hyperélasticité compressible, tandis que les étapes (iv) à (vi) feront l'objet du chapitre V. Le processus de résolution envisagé est donc analogue à celui des travaux antérieurs présentés au chapitre II. Il est rappelé en figure IV.2.

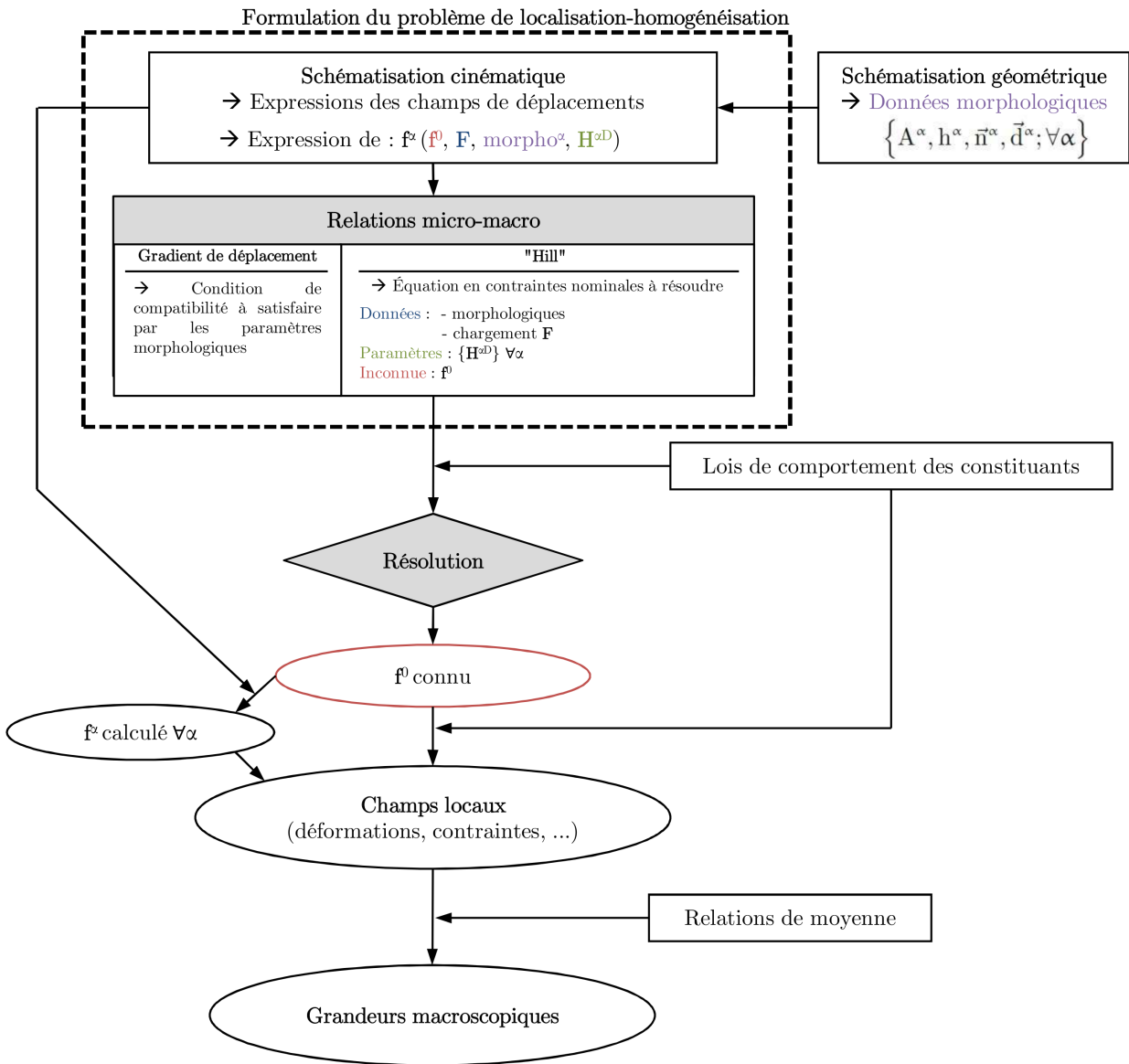


Figure IV.2 – Méthodologie et principe de résolution de l'A.M. dans le cadre des transformations finies à endommagement fixé.

IV.3 Approche complémentaire

Contrairement aux travaux en H.P.P., la résolution du problème de localisation-homogénéisation en transformations finies telle que décrite au paragraphe précédent (figure IV.2) ne peut être envisagée autrement que de manière numérique. Or, le gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 ne peut être évalué numériquement tant que les grandeurs liées à l'influence des défauts au sein du volume schématisé, c'est-à-dire les gradients de déplacement $\{\mathbf{H}^{\alpha D}\}$, sont inconnues. Il nous est ainsi nécessaire de connaître ces paramètres afin de pouvoir déterminer \mathbf{f}^0 . Une approche complémentaire, telle que celle envisagée en H.P.P. [Nadot *et al.* 2006], doit donc être ici greffée en amont de la résolution visant à déterminer \mathbf{f}^0 .

L'hypothèse d'un coefficient de friction infini aux lèvres des défauts fermés interdit le glissement et implique le blocage de ces défauts au sein du volume considéré. Le terme \mathbf{H}^{FD} pour chaque couche comportant des défauts fermés ne peut donc pas dépendre du gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} .

Par ailleurs, un couple de défauts sera ouvert avant d'être fermé. Cela permettra d'évaluer \mathbf{H}^{FD} au moment de la fermeture. Au contraire, $\mathbf{H}^{\beta D}$, pilotant les sauts de déplacement le long des interfaces d'une couche β avec des défauts ouverts, a toutes les chances de dépendre du chargement macroscopique.

Sur le même schéma que Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006], une seconde étape venant compléter l'approche de localisation-homogénéisation présentée au paragraphe précédent est mise en place, mais cette fois en amont de la détermination de \mathbf{f}^0 . Cette procédure a pour but d'établir une relation de dépendance entre les $\mathbf{H}^{\beta D}$ et le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} , jusque là considérés comme des paramètres donnés du problème, et ce pour chaque couche β .

Dans ce travail, et afin de limiter le nombre de non-linéarités dans une première approche, la résolution sera abordée pour un comportement local (matrice et particules) hyperélastique. Dans ce contexte et en s'inspirant des travaux antérieurs, la relation précitée est recherchée de sorte à satisfaire la loi d'état macroscopique reliant la contrainte nominale macroscopique homogénéisée \mathbf{S}^* et l'énergie libre homogénéisée W , soit :

$$\mathbf{S}^* = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \quad (\text{IV.27})$$

où : $\mathbf{S}^* = \langle \mathbf{s}^* \rangle_{|V_0|}$ est donnée par (IV.25)₁ ;

$W = \langle w \rangle_{|V_0|}$ est la moyenne de l'énergie libre locale.

L'énergie libre macroscopique W s'écrit : $W = (1 - c) w^0 + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} w^{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha}$, où w^0 et w^{α} sont les énergies de déformation moyennes respectivement sur le volume initial des particules et d'une couche α . La dérivation de cette grandeur par rapport au gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} s'exprime par :

$$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} = (1 - c) \mathbf{s}^{*0} : \frac{\partial \mathbf{f}^0}{\partial \mathbf{F}} + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{*\alpha} : \frac{\partial \mathbf{f}^{\alpha}}{\partial \mathbf{F}} A^{\alpha} h^{\alpha} \quad (\text{IV.28})$$

Le gradient de la transformation \mathbf{f}^α d'une couche α est donné par (IV.9). Sachant que \mathbf{H}^{FD} ne dépend pas du gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} pour les couches f avec des défauts fermés (défauts bloqués), la dérivée de \mathbf{f}^α par rapport à \mathbf{F} s'écrit :

$$\frac{\partial \mathbf{f}_{\text{kL}}^\alpha}{\partial \mathbf{F}_{\text{jI}}} = \begin{cases} \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{kL}}^0}{\partial \mathbf{F}_{\text{jI}}} + \frac{\mathbf{d}_{\text{P}}^\alpha \mathbf{n}_{\text{L}}^\alpha}{h^\alpha} \left[\delta_{\text{jk}} \delta_{\text{PI}} - \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{kP}}^0}{\partial \mathbf{F}_{\text{jI}}} \right] & \text{si la couche est saine,} \\ & \text{ou pour une couche } f. \\ \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{kL}}^0}{\partial \mathbf{F}_{\text{jI}}} + \frac{\mathbf{d}_{\text{P}}^\alpha \mathbf{n}_{\text{L}}^\alpha}{h^\alpha} \left[\delta_{\text{jk}} \delta_{\text{PI}} - \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{kP}}^0}{\partial \mathbf{F}_{\text{jI}}} \right] + \delta_{\text{kP}} \frac{\partial \mathbf{H}_{\text{PL}}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}_{\text{jI}}} & \text{pour une couche } \beta. \end{cases} \quad (\text{IV.29})$$

L'insertion de (IV.29) dans (IV.28) permet d'obtenir l'expression analytique de la dérivée de l'énergie libre homogénéisée :

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} &= \left[(1-c) \mathbf{s}^{*0} + \frac{1}{|\mathbf{V}_0|} \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{*\alpha} \mathbf{A}^\alpha h^\alpha - \frac{1}{|\mathbf{V}_0|} \sum_{\alpha} \vec{\mathbf{d}}^\alpha \otimes \vec{\mathbf{t}}^\alpha \right] : \frac{\partial \mathbf{f}^0}{\partial \mathbf{F}} \\ &+ \frac{1}{|\mathbf{V}_0|} \sum_{\alpha} \vec{\mathbf{d}}^\alpha \otimes \vec{\mathbf{t}}^\alpha + \frac{1}{|\mathbf{V}_0|} \sum_{\beta} \mathbf{s}^{*\beta} : \frac{\partial \mathbf{H}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{A}^\beta h^\beta \end{aligned} \quad (\text{IV.30})$$

où : α se réfère à n'importe quelle couche ;

β se réfère aux couches comportant des défauts ouverts ;

$\vec{\mathbf{t}}^\alpha = {}^t \mathbf{s}^{*\alpha} \vec{\mathbf{n}}^\alpha \mathbf{A}^\alpha$ désigne la force totale transmise à travers la couche α .

Sachant que le gradient de la transformation des particules est calculé de sorte que l'équation (IV.26) soit satisfaite, la première ligne de la relation (IV.30) s'annule. Avec de plus l'équation (IV.25)₂, nous obtenons :

$$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} = \mathbf{S}^* + \frac{1}{|\mathbf{V}_0|} \sum_{\beta} \mathbf{s}^{*\beta} : \frac{\partial \mathbf{H}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{A}^\beta h^\beta \quad (\text{IV.31})$$

Ainsi, pour satisfaire la relation (IV.27), l'équation à vérifier s'écrit finalement :

$$\frac{1}{|\mathbf{V}_0|} \sum_{\beta} \mathbf{s}^{*\beta} : \frac{\partial \mathbf{H}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{A}^\beta h^\beta = \mathbf{0} \quad (\text{IV.32})$$

Selon le même principe qu'en H.P.P. [Nadot *et al.* 2006] et en accord avec les fondements de l'A.M., nous supposons que les N^β fonctions $\mathbf{H}^{\beta\text{D}} = \mathbf{H}^{\beta\text{D}}(\mathbf{F})$ (avec N^β le nombre de couches sièges de défauts ouverts) sont de forme identique. Ceci fait émerger de l'unique équation dont nous disposons en (IV.32), N^β équations tensorielles à associer à chacune des couches β . La forme générique de ces N^β relations est la suivante :

$$\mathbf{s}^{*\beta} : \frac{\partial \mathbf{H}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}} = \mathbf{0} \quad (\text{IV.33})$$

L'approche complémentaire qui vient d'être exposée complète la formulation de départ du problème de localisation-homogénéisation (paragraphe IV.2) par l'ajout de N^β équations supplémentaires. Le principe de la méthodologie ainsi complétée est résumé sur la figure IV.3.

Dans les travaux menés en H.P.P., la résolution du problème de départ, bien que partielle, pouvait être réalisée analytiquement et fournissait l'expression de \mathbf{f}^0 et par suite celles de l'énergie et de la contrainte homogénéisée, sur lesquelles s'appuyait l'approche complémentaire pour dériver les expressions des contributions des défauts ouverts en fonction du chargement. Les étapes étaient analytiques et successives. Ici, les équations (IV.26) et (IV.33) devront être résolues numériquement et simultanément. Dans les deux cas (H.P.P. et transformations finies), les contributions des défauts fermés sont considérées comme des paramètres connus.

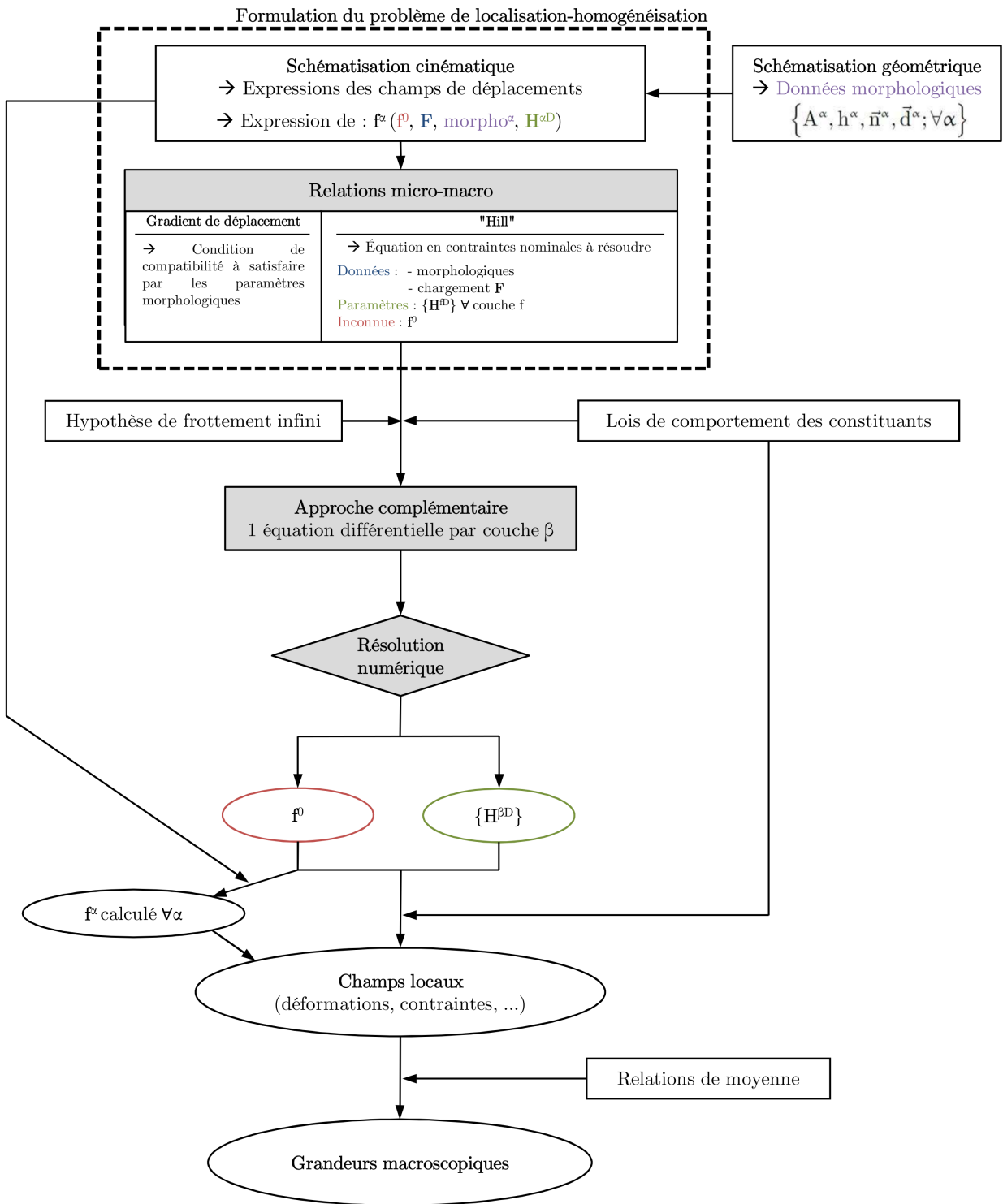


Figure IV.3 – Méthodologie et principe de résolution de l'A.M. dans le cadre des transformations finies à endommagement fixé avec procédure complémentaire.

Relations essentielles à configuration d'endommagement fixé :

- **Sauts de déplacement au niveau des interfaces I_1^α et I_2^α d'une couche α avec défauts d'interfaces** \rightarrow équation (IV.7)

$$b_I^{\alpha 1}(\vec{Y}) = H_{IJ}^{\alpha D} Y_J \quad \text{et} \quad b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}) = H_{IJ}^{\alpha D} Y_J$$

- **Champs de déplacement** \rightarrow équations (IV.10) et (IV.11)

$$\begin{aligned} u_I^0(\vec{Y}) &= u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J \\ u_I^\alpha(\vec{Y}) &= u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J + (H - h^0)_{iK} \frac{d_{KJ}^{\alpha n}}{h^\alpha} (Y - Y^{\alpha B_1})_J \\ &+ \begin{cases} \emptyset & \text{si la couche } \alpha \text{ est saine;} \\ H_{IJ}^{\alpha D} Y_J & \text{sinon.} \end{cases} \end{aligned}$$

- **Gradient de la transformation d'une couche α** \rightarrow équation (IV.9)

$$\begin{aligned} f_{ij}^\alpha &= f_{ij}^0 + (F - f^0)_{iK} \frac{d_{KJ}^{\alpha n}}{h^\alpha} && \text{si la couche } \alpha \text{ est saine.} \\ f_{ij}^\alpha &= f_{ij}^0 + (F - f^0)_{iK} \frac{d_{KJ}^{\alpha n}}{h^\alpha} + \delta_{iK} H_{KJ}^{\alpha D} && \text{si la couche } \alpha \text{ est décollée.} \end{aligned}$$

- **Condition de compatibilité** \rightarrow équation (IV.18)

$$\frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^\alpha \otimes \vec{n}^\alpha A^\alpha = \mathbf{Id}$$

- **Système en contraintes nominales** \rightarrow équation (IV.25)

$$\begin{cases} \mathbf{S}^* &= \langle \mathbf{s}^* \rangle_{|V_0|} = (1 - c) \mathbf{s}^{*0} + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{*\alpha} A^\alpha h^\alpha \\ \mathbf{S}^* &= \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^\alpha \otimes \vec{t}^\alpha \end{cases}$$

- **f^0 recherché tel que...** \rightarrow équation (IV.26)

$$(1 - c) \mathbf{s}^{*0} + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{*\alpha} A^\alpha h^\alpha - \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^\alpha \otimes \vec{t}^\alpha = \mathbf{0}$$

- **Avec $\mathbf{H}^{\beta D}$ pour chaque couche β recherché tel que...** \rightarrow équation (IV.33)

$$\mathbf{s}^{*\beta} : \frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}} = \mathbf{0}$$

où : $\mathbf{H}^{\alpha D}$ est un gradient de déplacement traduisant l'influence des défauts ;

\vec{u}^* est un déplacement global de solide rigide ;

A et B_1 sont les barycentres respectifs du grain considéré et de l'interface de normale \vec{n}^α entre la couche α et le grain précité ;

\mathbf{S}^* , \mathbf{s}^{*0} , $\mathbf{s}^{*\alpha}$ sont les tenseurs des contraintes nominales respectivement macroscopique, moyen sur le volume des particules et moyen sur le volume d'une couche α ;

$\vec{t}^\alpha = {}^t \mathbf{s}^{*\alpha} \vec{n}^\alpha A^\alpha$ désigne la force totale transmise à travers la couche α dans la configuration actuelle, exprimée dans la configuration initiale ;

$c = \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} A^\alpha h^\alpha$ est la concentration volumique des couches par rapport au volume total initial $|V_0|$.

IV.4 Prise en compte de l'évolution de l'endommagement

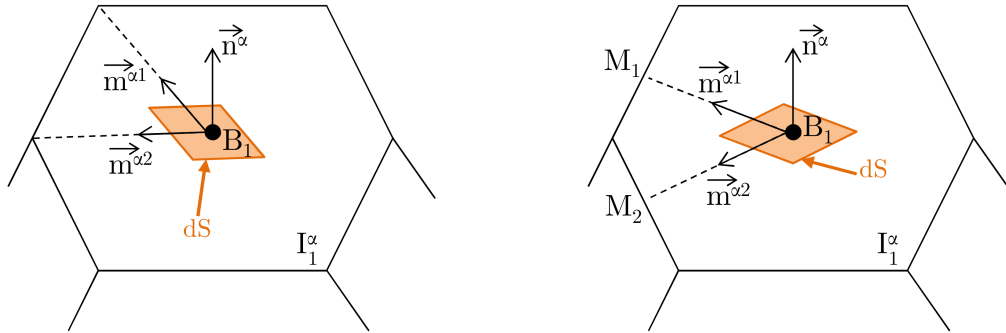
Afin de prendre en compte l'évolution de l'endommagement, nous mettons en place la formulation d'un critère de nucléation à l'échelle des constituants sur la même base que Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. Ce critère, présenté au paragraphe II.4.3, est ici adapté au contexte des transformations finies.

Nous conservons une hypothèse de frottement infini aux lèvres de défauts fermés, ainsi qu'une hypothèse de décohésion en mode normal. Les défauts sont donc nécessairement ouverts (couche β) avant d'être fermés (couche f). Le critère de nucléation est ainsi formulé afin de traduire l'apparition de défauts aux interfaces d'une couche. À chaque instant, l'état de toutes les interfaces sera testé à l'aide de ce critère, et actualisé en conséquence.

IV.4.1 Définition de la normale actuelle

Afin d'être valable en transformations finies, le critère de nucléation formulé à l'échelle des interfaces doit prendre en compte l'évolution d'orientation de ces interfaces au cours du temps, contrairement à ce qui avait été effectué dans le cadre H.P.P. [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. En effet, dans les travaux précédents, Dartois *et al.* considéraient plutôt la normale initiale \vec{n}^α à la couche α , car le cadre H.P.P. permettait de supposer que les configurations initiales et actuelles étaient suffisamment proches pour les confondre. Dans le contexte des transformations finies, cette hypothèse n'est plus valable et nous devons à chaque instant déterminer la normale actuelle $\vec{n}^{\prime\alpha}$.

Pour cela, nous devons définir un petit élément de surface de l'interface initiale I_1^α de normale \vec{n}^α , puis en évaluer le transporté, qui sera un petit élément de l'interface I_1^α dans la configuration déformée, et dont la normale sera le vecteur $\vec{n}^{\prime\alpha}$ recherché. Afin de définir ce petit élément de surface initial, nous considérons par exemple les vecteurs unitaires $\vec{m}^{\alpha 1}$ et $\vec{m}^{\alpha 2}$ de deux directions définies comme reliant le barycentre B_1 et deux points situés sur les arêtes de la facette, comme par exemple les deux extrémités d'une arête (figure IV.4(a)) ou les milieux respectifs M_1 et M_2 de deux arêtes adjacentes (figure IV.4(b)).



(a) En reliant le barycentre B_1 et deux sommets de la facette.

(b) En reliant le barycentre B_1 et les milieux d'arêtes M_1 et M_2 .

Figure IV.4 – Définition des vecteurs unitaires $\vec{m}^{\alpha 1}$ et $\vec{m}^{\alpha 2}$ pour le calcul de la normale actuelle.

L'élément de surface de l'interface I_1^α dans la configuration initiale non déformée est donc défini par :

$$dS \vec{n}^\alpha = \vec{m}^{\alpha 1} \wedge \vec{m}^{\alpha 2} \quad (\text{IV.34})$$

La transportée de cette surface élémentaire, d'aire ds et de normale \vec{n}'^α , est telle que :

$$ds \vec{n}'^\alpha = \vec{m}'^{\alpha 1} \wedge \vec{m}'^{\alpha 2} \quad (\text{IV.35})$$

où : $\vec{m}'^{\alpha 1}$, respectivement $\vec{m}'^{\alpha 2}$ est le transporté du vecteur $\vec{m}^{\alpha 1}$, respectivement $\vec{m}^{\alpha 2}$, tel que :

$$\begin{aligned} \vec{m}'^{\alpha 1} &= \mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 1} \\ \vec{m}'^{\alpha 2} &= \mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 2} \end{aligned} \quad (\text{IV.36})$$

avec : \mathbf{f}^0 le gradient de la transformation des particules.

Nous en déduisons l'expression de \vec{n}'^α via la relation (IV.35) :

$$\vec{n}'^\alpha = \frac{\mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 1} \wedge \mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 2}}{\|\mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 1} \wedge \mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 2}\|} \quad (\text{IV.37})$$

IV.4.2 Critère de nucléation

Afin de prendre en compte la création de défauts aux interfaces d'une couche α , le critère de nucléation établi lors des travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] est ici reformulé dans le cadre des transformations finies.

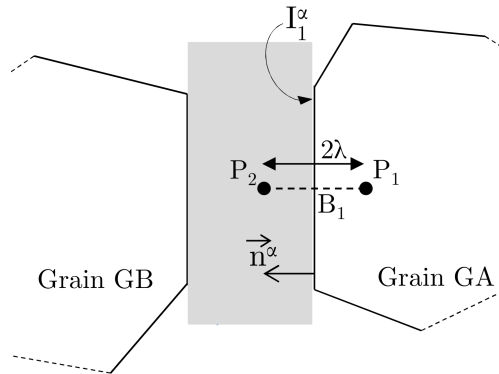


Figure IV.5 – Schématisation et paramètres utilisés pour définir la nucléation de défauts (rappel : figure II.7).

Pour cela, considérons deux points P_1 et P_2 situés initialement de part et d'autre de l'interface de référence I_1^α d'une couche α saine dans la configuration initiale, respectivement dans le grain et dans la matrice (figure IV.5). Comme dans les travaux antérieurs, ces deux points sont chacun à une distance λ de leur projection normale B_1 sur l'interface, B_1 étant le barycentre de I_1^α . Ainsi, les vecteurs position initiaux des points P_1 et P_2 s'écrivent :

$$\begin{aligned} \vec{Y}^{P_1} &= \vec{Y}^{B_1} - \lambda \vec{n}^\alpha \\ \vec{Y}^{P_2} &= \vec{Y}^{B_1} + \lambda \vec{n}^\alpha \end{aligned} \quad (\text{IV.38})$$

où : λ reste une constante inférieure à l'épaisseur de la plus fine des couches au sein du volume schématisé.

Le point P_1 est assujéti au mouvement des particules et le point P_2 au mouvement de la couche α à laquelle il appartient. La différence entre les vecteurs déplacement des points P_2 et P_1 s'écrit :

$$\begin{aligned}\Delta\vec{u} &= \vec{u}^\alpha(\vec{Y}^{P_2}) - \vec{u}^0(\vec{Y}^{P_1}) \\ &= \left[2\mathbf{h}^0 + (\mathbf{H} - \mathbf{h}^0) \frac{\vec{d}^\alpha \otimes \vec{n}^\alpha}{h^\alpha} \right] \lambda \vec{n}^\alpha\end{aligned}\quad (\text{IV.39})$$

Les vecteurs position à l'instant t des points P_1 et P_2 , notées \vec{y}^{P_1} et \vec{y}^{P_2} , permettent d'exprimer la différence de positions actuelles de ces deux points en fonction de leur distance initiale 2λ et de la différence de déplacement (IV.39). Cette différence est ensuite projetée sur la normale à l'interface à l'instant t , notée $\vec{n}^{\prime\alpha}$. La distance obtenue, d_{norm}^α , s'écrit ainsi :

$$\begin{aligned}d_{\text{norm}}^\alpha &= (\vec{y}^{P_2} - \vec{y}^{P_1}) \cdot \vec{n}^{\prime\alpha} \\ &= (2\lambda \vec{n}^\alpha + \Delta\vec{u}) \cdot \vec{n}^{\prime\alpha}\end{aligned}\quad (\text{IV.40})$$

La nucléation d'une paire de défauts aux interfaces de la couche α est supposée se produire lorsque la distance d_{norm}^α atteint la valeur critique d_{critique} . Ainsi, le critère de nucléation en transformations finies est formulé de la manière suivante :

$$d_{\text{norm}}^\alpha \geq d_{\text{critique}} \Rightarrow \text{décohésion} \quad (\text{IV.41})$$

La valeur critique d_{critique} , reliée aux propriétés d'adhésion entre la matrice et les particules, est à identifier expérimentalement de manière cohérente avec la distance initiale λ séparant les points P_1 et P_2 .

Nous constatons que l'expression (IV.40) de d_{norm}^α diffère de celle en H.P.P. (équation (II.17)) via la seule normale à l'interface, ici actuelle (initiale dans (II.17)). L'expression de $\Delta\vec{u}$ (équation (IV.39)) est en effet la même qu'en H.P.P. Le gradient de la transformation \mathbf{f}^0 (et de déplacement \mathbf{h}^0) étant le même pour toutes les particules, les orientations actuelles des interfaces à un instant t donné émanent toutes de la même "opération" appliquée aux orientations initiales. Aussi, bien que la nucléation d'une paire de défauts pour une couche α donnée à un instant t dépende de son orientation actuelle vis-à-vis de l'axe de chargement, la chronologie des nucléations au sein du matériau reste implicitement conditionnée par les orientations initiales des interfaces. De plus, l'expression de $\Delta\vec{u}$ restant analogue au cadre H.P.P., la nucléation pour une couche α dépend de manière identique de l'épaisseur de la couche h^α et du vecteur \vec{d}^α . Les capacités de l'A.M. vis-à-vis de la restitution des effets de la taille de particule sont ainsi inchangées. Enfin, bien que nous ne disposions plus d'expression analytique pour \mathbf{f}^0 pour en avoir une confirmation explicite, la nucléation aux interfaces d'une couche α reste influencée par la morphologie initiale du composite et par son état d'endommagement si d'autres couches sont déjà décollées.

Un critère de nucléation de défauts pour décrire l'évolution de l'endommagement vient d'être développé. Dans le prolongement des travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013],

il a été formulé à l'échelle des constituants, mais en prenant en compte l'évolution d'orientation des interfaces particules / matrice. Il conserve une formulation cinématique et reste indépendant du comportement considéré pour la matrice et les charges.

Le critère de nucléation vient se greffer à la description géométrique et cinématique introduites au début du chapitre (paragraphe IV.1 et IV.2), ainsi qu'à la procédure de transition d'échelle que nous avons mise en place à endommagement fixé (paragraphe IV.2 et IV.3). Le paragraphe qui suit s'attache à préciser les lois hyperélastiques retenues pour les particules et la matrice.

Relations essentielles pour décrire l'évolution de l'endommagement :

– **Normale actuelle** \rightarrow équation (IV.37)

$$\vec{n}'^\alpha = \frac{\mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 1} \wedge \mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 2}}{\|\mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 1} \wedge \mathbf{f}^0 \vec{m}^{\alpha 2}\|}$$

– **Critère de nucléation** \rightarrow équations (IV.39) à (IV.41)

$$d_{\text{norm}}^\alpha \geq d_{\text{critique}} \Rightarrow \text{décohésion}$$

$$\text{avec : } d_{\text{norm}}^\alpha = (2\lambda \vec{n}^\alpha + \Delta \vec{u}) \cdot \vec{n}'^\alpha$$

$$\text{et : } \Delta \vec{u} = \left[2\mathbf{h}^0 + (\mathbf{H} - \mathbf{h}^0) \frac{\vec{d}^\alpha \otimes \vec{n}^\alpha}{h^\alpha} \right] \lambda \vec{n}^\alpha$$

où : $\vec{m}^{\alpha 1}$ et $\vec{m}^{\alpha 2}$ sont deux vecteurs unitaires définissant un petit élément de surface de l'interface initiale I_1^α d'une couche α , voir figure IV.4;

λ est la demi-longueur entre deux points P_1 et P_2 situés de part et d'autre de l'interface I_1^α d'une couche α .

IV.5 Comportement des constituants

IV.5.1 Forme de la densité d'énergie de déformation

Les forts taux de charges des composites étudiés génèrent des niveaux de confinement au sein de la matrice rendant nécessaire la prise en compte de la compressibilité de l'élastomère. Un formalisme avec découplage distorsion - volume est donc retenu comme dans les travaux antérieurs de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. Dans un souci d'approche progressive, surtout dans le présent contexte de couplage avec l'endommagement, une loi de Néo-Hooke est ici choisie pour décrire la part distorsion du comportement. Pour les mêmes raisons, la part volumique est décrite de manière la plus simple possible (c'est-à-dire avec une relation pression - variation de volume linéaire). Bien qu'une telle description soit insuffisante d'un point de vue strictement physique, elle est quand même mieux adaptée à la réalité du comportement de la matrice que l'élasticité linéaire considérée dans les travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. Enfin, les deux phases (particules et matrice) sont supposées avoir chacune des propriétés homogènes et le comportement des particules est défini à partir de celui de la matrice par l'intermédiaire d'un contraste sur les propriétés. Ce dernier sera important, pour limiter la déformabilité des charges quasi-rigides devant celle de la matrice.

La densité d'énergie de déformation locale est ainsi définie par :

$$w = C_{10} (\tilde{I}_1 - 3) + \frac{K}{2} (J - 1)^2 \quad (\text{IV.42})$$

où : C_{10} est le coefficient de Néo-Hooke ;

K est le module de compressibilité ;

\tilde{I}_1 est le premier invariant modifié calculé à partir du premier invariant I_1 du tenseur de Cauchy-Green droit par : $\tilde{I}_1 = I_1 J^{-2/3}$;

$J = \det(\mathbf{f})$ est le jacobien de la transformation.

IV.5.2 Expression des contraintes nominales

Le tenseur de contrainte nominale locale est obtenu par dérivation de l'énergie libre hyperélastique par rapport au gradient de la transformation. En présence de propriétés homogènes dans chacune des phases, l'hétérogénéité du champ de contraintes nominales devient identique à celle du champ de gradient de la transformation issue de la discrétisation cinématique au départ de l'A.M. Ainsi, la contrainte nominale moyenne $\mathbf{s}^{*\alpha}$ sur le volume d'une couche α est une contrainte homogène au sein de la couche α , mais variable d'une couche à l'autre. La contrainte nominale moyenne \mathbf{s}^{*0} sur le volume des particules correspond quant à elle à une contrainte homogène dans les particules. Elles sont données par :

$$\begin{aligned} s_{I_j}^{*0} &= 2 J^{0-2/3} C_{10}^g \left[{}^t f_{I_j}^0 - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{c}^0) f_{I_j}^{0-1} \right] + K^g J^0 (J^0 - 1) f_{I_j}^{0-1} \\ s_{I_j}^{*\alpha} &= 2 J^{\alpha-2/3} C_{10}^m \left[{}^t f_{I_j}^\alpha - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{c}^\alpha) f_{I_j}^{\alpha-1} \right] + K^m J^\alpha (J^\alpha - 1) f_{I_j}^{\alpha-1} \end{aligned} \quad (\text{IV.43})$$

où : les exposants “0” et “ α ” font référence aux grandeurs calculées au sein de la phase particules et d’une couche α respectivement ;

C_{10}^g est le coefficient de Néo-Hooke des particules ;

K^g est le module de compressibilité des particules ;

C_{10}^m est le coefficient de Néo-Hooke de la matrice ;

K^m est le module de compressibilité de la matrice ;

$\mathbf{c}^0 = {}^t\mathbf{f}^0\mathbf{f}^0$, respectivement $\mathbf{c}^\alpha = {}^t\mathbf{f}^\alpha\mathbf{f}^\alpha$, est le tenseur de Cauchy-Green droit homogène des particules, respectivement de la couche α ;

$J^0 = \det(\mathbf{f}^0)$, respectivement $J^\alpha = \det(\mathbf{f}^\alpha)$, est le jacobien de la transformation des particules, respectivement de la couche α .

Relations essentielles dans le contexte de l’hyperélasticité pour un comportement de type Néo-Hooke :

– **Contraintes nominales des constituants** \longrightarrow équation (IV.43)

$$\begin{aligned} s_{ij}^{*0} &= 2J^{0-2/3}C_{10}^g \left[{}^t f_{ij}^0 - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{c}^0) f_{ij}^{0-1} \right] + K^g J^0 (J^0 - 1) f_{ij}^{0-1} \\ s_{ij}^{*\alpha} &= 2J^{\alpha-2/3}C_{10}^m \left[{}^t f_{ij}^\alpha - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{c}^\alpha) f_{ij}^{\alpha-1} \right] + K^m J^\alpha (J^\alpha - 1) f_{ij}^{\alpha-1} \end{aligned}$$

où : les exposants “0” et “ α ” font référence aux grandeurs calculées au sein de la phase particules et d’une couche α respectivement ;

C_{10}^g est le coefficient de Néo-Hooke des particules ;

K^g est le module de compressibilité des particules ;

C_{10}^m est le coefficient de Néo-Hooke de la matrice ;

K^m est le module de compressibilité de la matrice ;

$\mathbf{c}^0 = {}^t\mathbf{f}^0\mathbf{f}^0$, respectivement $\mathbf{c}^\alpha = {}^t\mathbf{f}^\alpha\mathbf{f}^\alpha$, est le tenseur de Cauchy-Green droit homogène des particules, respectivement de la couche α ;

$J^0 = \det(\mathbf{f}^0)$, respectivement $J^\alpha = \det(\mathbf{f}^\alpha)$, est le jacobien de la transformation des particules, respectivement de la couche α .

IV.6 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était de coupler au sein de l'A.M. deux non-linéarités caractéristiques des composites énergétiques jusque-là traitées séparément, à savoir les transformations finies et l'endommagement par décohésion d'interfaces. La schématisation géométrique de la microstructure initiale a été conservée et nous avons fait le choix de reconduire les hypothèses cinématiques en nous appuyant sur la qualité des estimations obtenues par Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] en transformations finies pour le matériau sain, c'est-à-dire en amont d'un endommagement éventuel du matériau.

Afin de caractériser la présence de défauts au niveau des interfaces entre les particules et la matrice à un instant t donné, des discontinuités de déplacement sont introduites en compatibilité avec les hypothèses cinématiques, à la manière de Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006]. Les développements cinématiques, entièrement revisités, montrent trois configurations possibles pour une couche α :

- elle est saine ;
- elle présente un unique défaut au niveau de l'une de ses interfaces et le saut est constant (“configuration simple”) ;
- elle présente une paire de défauts au niveau de ses interfaces et les sauts correspondants sont linéaires (“configuration double”).

L'étude de ces configurations met en évidence un lien fort entre les configurations “double” et “simple”, via notamment la présence d'un vecteur homogène qui peut s'interpréter comme le saut constant qu'il y aurait le long de la seconde interface en l'absence de discontinuité sur la première. La configuration “simple” n'avait pas été envisagée en H.P.P. par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006]. Ainsi, les développements présentés dans ce chapitre, bien que de principe analogue, sont plus riches que ceux des travaux de Nadot *et al.* et constituent une contribution importante offrant un potentiel pour l'A.M. jamais mis en évidence auparavant. Néanmoins, la prise en compte de la configuration “simple” multiplie le nombre de configurations possibles des couches et introduit un nuage d'inconnues supplémentaires pour le problème à résoudre. Dans ce contexte et pour une première approche, nous avons fait le choix de ne considérer que les configurations saine et “double”. Cela a aussi permis de conserver un parallélisme avec les travaux antérieurs, bienvenu pour un meilleur contrôle des développements suivants.

La suite a consisté à revisiter les étapes de mise en place des relations de passage micro-macro. Au final, les relations obtenues définissant le problème de localisation-homogénéisation pour un état d'endommagement fixé (c'est-à-dire pour un nombre fixé de défauts ouverts et / ou fermés) apparaissent sensiblement similaires aux expressions présentées au chapitre II dans le cas du matériau sain (tableau II.1, colonne 1). La différence majeure réside dans le gradient de déplacement $\mathbf{H}^{\alpha D}$ qui apparaît au sein de l'expression du gradient de la transformation d'une couche α décollée. Ce terme additionnel témoigne de l'influence des défauts (ouverts ou fermés) à ses frontières. L'ensemble $\{\mathbf{H}^{\alpha D}\}$ renforce l'hétérogénéité au sein de la phase matrice. L'équation en contrainte nominale à résoudre, dont l'inconnue principale reste le gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 , présente quant à elle la même forme générique. Le gradient de la transformation des grains \mathbf{f}^0 conserve son rôle de transmission des effets au sein du matériau.

Une approche complémentaire permettant d'établir une relation de dépendance entre les contributions $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$ des défauts ouverts et le chargement appliqué (caractérisé par le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F}) a été proposée. Elle permet d'obtenir une équation supplémentaire par couche décollée. Alors qu'en H.P.P., \mathbf{f}^0 était déterminé analytiquement en amont de la mise en œuvre de l'approche complémentaire, en transformations finies, toutes les équations devront être résolues numériquement et simultanément.

Sur la même base que Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013], nous avons formulé un critère de nucléation permettant de traiter l'évolution de l'endommagement. La normale actuelle à l'interface particules / matrice est considérée de manière à s'adapter au contexte des transformations finies. Le critère, de formulation cinématique, reste indépendant du comportement des phases. La nucléation pourra ainsi être testée à chaque instant au cours d'un chargement macroscopique afin d'estimer l'évolution du nombre de défauts présents aux interfaces entre les particules et la matrice.

Pour finir, les lois constitutives des deux phases ont été précisées. Un formalisme hyperélastique avec découplage distorsion-volume, impliquant un potentiel de Néo-Hooke, est envisagé pour les deux constituants, avec un contraste important entre les particules et la matrice.

Le chapitre qui suit présente la mise en place des algorithmes, des outils et des hypothèses nécessaires à la résolution d'un problème mettant en jeu une microstructure fortement chargée sous un chargement macroscopique particulier.

CHAPITRE

V

MISE EN ŒUVRE NUMÉRIQUE,
VALIDATIONS ET DISCUSSION

Plan du chapitre

Liste des notations spécifiques au chapitre	133
Introduction	135
V.1 Formulation du problème non-linéaire à résoudre	136
V.1.1 Définition des dépendances du problème et stratégie adoptée	136
V.1.2 Écriture de la matrice tangente	138
V.2 Procédure numérique de résolution	141
V.2.1 Architecture générale	141
V.2.2 Stockage des paramètres microstructuraux et calcul des grandeurs aux deux échelles	143
V.2.3 Mise en œuvre de l'algorithme de Newton-Raphson	144
V.2.3.a Implémentation de l'algorithme	144
V.2.3.b Écriture matricielle du système et de la matrice tangente	145
V.2.4 Démarche de validation	146
V.3 Validations sur microstructures périodiques non endommagées	148
V.3.1 Principe de l'étude	148
V.3.2 Description de l'hyperélasticité des phases et chargement appliqué	148
V.3.3 Simulation d'une compression œdométrique sur une microstructure périodique simple	150
V.3.3.a Présentation de la microstructure	150
V.3.3.b Résultats	150
V.3.4 Simulation d'une compression œdométrique sur une microstructure périodique complexe	153
V.3.4.a Présentation de la microstructure périodique complexe	153
V.3.4.b Résultats	156
V.4 Test du critère de nucléation	159
V.4.1 Évaluation sur microstructures périodiques simples	159
V.4.1.a Démarche adoptée	159
V.4.1.b Effet de la taille de particule	160
V.4.1.c Effet d'interaction entre les particules	161
V.4.1.d Bilan	161
V.4.2 Évaluation sur une microstructure périodique complexe	162
V.4.2.a Démarche adoptée	162
V.4.2.b Résultats	162
V.5 Perspectives à envisager	164
V.5.1 À propos de la résolution numérique du problème couplé	164
V.5.2 Ajout d'un critère de fermeture	166
V.6 Conclusion	167

Liste des notations spécifiques au chapitre

Les notations plus générales et utilisées tout au long du manuscrit sont listées en page ix. Les conventions d'usage sont exposées en page v.

Grandeurs cinématiques

\mathbf{F}	gradient de la transformation macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^0	gradient de la transformation des particules.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{f}^α	gradient de la transformation de la couche α .	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{H}^{\alpha D}$	gradient de déplacement traduisant la contribution des défauts présents aux interfaces de la couche α sur \mathbf{f}^α .	tenseur o.2 (3×3)
$\Delta \mathbf{F}$	incrément de gradient de la transformation macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{J}^0	jacobien de la transformation des particules.	réel
\mathbf{J}^α	jacobien de la transformation d'une couche α .	réel

Déformations

\mathbf{C}	tenseur de Cauchy-Green droit macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{c}^0	tenseur de Cauchy-Green droit pour les particules.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{c}^α	tenseur de Cauchy-Green droit pour une couche α .	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{E}	déformation de Green-Lagrange macroscopique.	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{E}_{\text{debonding}}$	[<i>Étude de microstructures périodiques simples</i>] déformation de Green-Lagrange macroscopique axiale pour laquelle a lieu la première décohésion de la couche de référence.	réel

Contraintes

\mathbf{S}^*	contrainte nominale homogénéisée.	tenseur o.2 (3×3)
\mathbf{s}^{*0}	contrainte nominale moyenne dans les particules.	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{s}^{*\alpha}$	contrainte nominale moyenne dans la couche α .	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{\Pi}$	contrainte de Piola-Kirchoff 1 homogénéisée.	tenseur o.2 (3×3)
$\mathbf{\Pi}_{\text{max}}$	[<i>Étude de microstructures périodiques simples</i>] contrainte de Piola-Kirchoff 1 homogénéisée axiale maximale.	réel

Paramètres et éléments spécifiques à la description des microstructures étudiées

L	dimension de particule.	réel
h, h'	[<i>Étude de microstructures périodiques simples</i>] épaisseurs des zones intergranulaires.	réel
c_{mat}	concentration volumique de matrice.	réel
$\lambda^{\text{comp}}, \lambda^{\text{trac}}$	facteurs de charge en compression œdométrique et en traction œdométrique respectivement.	réel

La mise en œuvre numérique des développements analytiques présentés au chapitre IV doit permettre à terme de réaliser des simulations, en venant localiser précisément les lieux de décohé- sion, à la manière des approches en champs complets. La méthodologie adoptée permet cependant de pratiquer des calculs beaucoup moins coûteux numériquement et donc de profiter d'un gain de temps de calcul appréciable.

Ainsi, la méthodologie couplant au sein de l'Approche Morphologique les transformations finies et l'endommagement d'interfaces au sein de composites particulières fortement chargés est ici présentée sous l'angle de l'implémentation numérique. Nous exposons ici tout d'abord les différents enjeux liés à la mise en œuvre numérique et les choix réalisés (paragraphe V.1 et V.2). Nous tentons ensuite progressivement de tester la validité de la programmation ainsi que la reproductibilité de résultats obtenus lors des études antérieures [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. Des simulations numériques permettront de vérifier la pertinence des outils et des méthodologies mises en places (paragraphe V.3 et V.4). Nous discuterons enfin des perspectives de développement analytique et numérique qui permettraient de lever certains verrous rencontrés au cours de la résolution (paragraphe V.5).

V.1 Formulation du problème non-linéaire à résoudre

V.1.1 Définition des dépendances du problème et stratégie adoptée

Les développements analytiques présentés au chapitre IV ont permis d'établir des équations à résoudre pour estimer le comportement de composites particulières dans le cadre des transformations finies pour un état d'endommagement fixé.

La première équation à résoudre est l'équation (IV.26), relation établie entre les contraintes nominales $\{\mathbf{s}^{*\alpha}; \forall \alpha\}$ associées à chaque couche α et la contrainte nominale \mathbf{s}^{*0} des particules (paragraphe IV.2.2.b). Cette équation est au centre de la résolution du problème de localisation-homogénéisation pour un comportement local donné. Elle doit être satisfaite quelle que soit la configuration dans laquelle se trouve la microstructure considérée et permettra de déterminer l'inconnue principale \mathbf{f}^0 , que le matériau soit sain ou siège de défauts. L'évolution de l'endommagement a quant à elle été introduite via la formulation d'un critère de nucléation qui, dans le même esprit que dans les travaux antérieurs, sera testé à chaque incrément de chargement imposé.

En présence d'endommagement, nous rappelons qu'un terme additionnel apparaît dans l'expression du gradient de déplacement (IV.8) et du gradient de la transformation (IV.9) de la couche α . Il s'agit du gradient de déplacement $\mathbf{H}^{\alpha D}$ attestant de l'influence des défauts présents aux interfaces de la couche α . Il prend la valeur $\mathbf{H}^{\beta D}$ lorsque la couche α est une couche β comportant des défauts ouverts à ses interfaces, et la valeur \mathbf{H}^{FD} si la couche est une couche f avec des défauts fermés. Cette valeur, qui pourrait être ultérieurement évaluée au moment de la fermeture des défauts (paragraphe IV.3), est figée par frottement infini. Les grandeurs $\{\mathbf{H}^{\beta D}; \forall \beta\}$ sont donc les seules grandeurs évoluant en cours de chargement à configuration d'endommagement fixée (c'est-à-dire pour un nombre donné de défauts ouverts et / ou fermés au sein de la microstructure). L'approche complémentaire du paragraphe IV.3 a permis d'établir, dans un contexte hyperélastique, une relation de dépendance entre $\mathbf{H}^{\beta D}$ et le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} . À chaque couche β comportant des défauts ouverts est alors associée une équation de la forme (IV.33), qui régit l'évolution de la grandeur tensorielle $\mathbf{H}^{\beta D}$ associée.

Le système d'équations non-linéaire à résoudre présente ainsi la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} (1 - c)\mathbf{s}^{*0} + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{*\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} - \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{t}^{\alpha} = \mathbf{0} \quad (\Phi^* = 0) \\ \text{Pour chaque couche } \beta : \quad \mathbf{s}^{*\beta} : \frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}} = \mathbf{0} \quad (\Phi^{\beta} = 0) \end{array} \right. \quad (\text{V.1})$$

Nous noterons $\Phi^* = 0$ l'équation en contraintes nominales (V.1)₁ et $\Phi^{\beta} = 0$ l'équation (V.1)₂ associée à une couche β donnée. N'ayant pas encore formulé de critère de fermeture, nous nous limitons dans la suite à des configurations d'endommagement impliquant uniquement des défauts ouverts.

La matrice et les particules sont décrites par un potentiel de Néo-Hooke avec découplage distorsion-volume (équation (IV.42)). Les expressions des contraintes nominales \mathbf{s}^{*0} dans les particules, et $\mathbf{s}^{*\alpha}$ dans une couche α (équations (IV.43)) associée à la relation exprimant le gradient de la transformation \mathbf{f}^{α} d'une couche α (équation (IV.9)), permettent de caractériser les dépendances explicites de chacune des équations de (V.1) vis-à-vis des inconnues et des données du problème :

$$\begin{cases} \mathbf{s}^{*0} &= \mathbf{s}^{*0}(\mathbf{f}^0, C_{10}^g, K^g) \\ \mathbf{s}^{*\alpha} &= \mathbf{s}^{*\alpha}(\mathbf{f}^\alpha, C_{10}^m, K^m) \\ \mathbf{f}^\alpha &= \mathbf{f}^\alpha(\mathbf{h}^\alpha, \vec{\mathbf{n}}^\alpha, \vec{\mathbf{d}}^\alpha, \mathbf{F}, \mathbf{f}^0, \mathbf{H}^{\alpha D}) \end{cases} \quad (\text{V.2})$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \Phi^* &= \Phi^*\left(\left\{A^\alpha, \mathbf{h}^\alpha, \vec{\mathbf{n}}^\alpha, \vec{\mathbf{d}}^\alpha; \forall \alpha\right\}, \mathbf{F}, \mathbf{f}^0, \{\mathbf{H}^{\alpha D}\}, C_{10}^g, K^g, C_{10}^m, K^m\right) \\ \Phi^\beta &= \Phi^\beta\left(\mathbf{h}^\beta, \vec{\mathbf{n}}^\beta, \vec{\mathbf{d}}^\beta, \mathbf{F}, \mathbf{f}^0, \mathbf{H}^{\beta D}, C_{10}^m, K^m\right) \text{ pour chaque couche } \beta. \end{cases}$$

où : C_{10}^g , respectivement C_{10}^m , est le coefficient de Néo-Hooke des particules, respectivement de la matrice ;

K^g , respectivement K^m , est le module de compressibilité des particules, respectivement de la matrice.

Le gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 et les grandeurs tensorielles $\{\mathbf{H}^{\beta D}; \forall \beta\}$ apparaissent clairement dans toutes les équations du système (voir (V.2)). Bien que la structure additive de l'expression de \mathbf{f}^α en fonction \mathbf{f}^0 et de $\mathbf{H}^{\alpha D}$ (équation (IV.9)) ainsi que celle de l'équation (V.1)₁ aient pu être conservées (par maintien des mêmes hypothèses cinématiques), le système revêt, en transformations finies comparativement au cadre H.P.P., un caractère à la fois fortement non-linéaire et couplé du fait de la non-linéarité du comportement des phases (particules et matrice).

Pour N^β couches comportant une paire de défauts ouverts, le système (V.1) est constitué de $(1 + N^\beta)$ équations tensorielles non-linéaires impliquant les inconnues tensorielles \mathbf{f}^0 et $\{\mathbf{H}^{\beta D}; \forall \beta\}$. Le tableau V.1 établit un bilan des dimensions de chaque tenseur impliqué et permet d'envisager $9(1 + N^\beta)$ équations scalaires non-linéaires à résoudre pour déterminer les 9 composantes scalaires de \mathbf{f}^0 et les $9N^\beta$ composantes scalaires des N^β tenseurs $\mathbf{H}^{\beta D}$.

Équations				
Grandeur	Dimension	Nb. de composantes	Nb. d'équations tensorielles	Nb. d'équations scalaires
Φ^*	3×3	9	1	9
Φ^β	3×3	9	N^β	$9N^\beta$

Inconnues				
Grandeur	Dimension	Nb. de composantes	Nb. d'inconnues tensorielles	Nb. d'inconnues scalaires
\mathbf{f}^0	3×3	9	1	9
$\mathbf{H}^{\beta D}$	3×3	9	N^β	$9N^\beta$

Tableau V.1 – Bilan du nombre d'équations à résoudre et du nombre d'inconnues associées.

Afin de procéder à la résolution numérique du problème (V.1), notre choix s'est porté sur un algorithme de Newton-Raphson (Annexe C). Cet algorithme présente une convergence rapide, avec un taux de convergence quadratique. De plus, le principe de l'algorithme reste simple d'application malgré les dimensions importantes du problème.

L'une des contributions majeures de ce travail a été de formuler la matrice tangente associée

au système (V.1) de manière analytique, afin de la calculer de manière exacte lors de la résolution associée à l'algorithme choisi. La résolution sera alors plus rapide que dans des situations où elle est par exemple réalisée à partir d'une estimation de la matrice tangente par différences finies.

V.1.2 Écriture de la matrice tangente

La matrice tangente associée aux $(1 + N^\beta)$ équations tensorielles du système (V.1) sera obtenue par dérivation de chaque équation par rapport à chacune des inconnues du problème, soit \mathbf{f}^0 et $\{\mathbf{H}^{\beta D}; \forall \beta\}$. Elle sera donc constituée de quatre blocs principaux, formés de chacune des dérivées $\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0}$, $\left\{ \frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} \right\}$, $\left\{ \frac{\partial \Phi^\beta}{\partial \mathbf{f}^0} \right\}$ et $\left\{ \frac{\partial \Phi^\beta}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} \right\}$, de la manière qui suit :

$$\begin{array}{c}
 \left[\begin{array}{ccc|ccc}
 \left[\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0} \right] & & & \left[\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{H}^{\beta_1 D}} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{H}^{\beta_{N\beta} D}} \right] \\
 \text{BLOC 1} & & & \text{BLOC 2} & & \\
 \hline
 & & & & & \\
 \text{BLOC 3} & & & \text{BLOC 4} & & \\
 \hline
 \left[\frac{\partial \Phi^{\beta_1}}{\partial \mathbf{f}^0} \right] & & & \left[\frac{\partial \Phi^{\beta_1}}{\partial \mathbf{H}^{\beta_1 D}} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial \Phi^{\beta_1}}{\partial \mathbf{H}^{\beta_{N\beta} D}} \right] \\
 \vdots & & & \vdots & & \vdots \\
 \left[\frac{\partial \Phi^{\beta_{N\beta}}}{\partial \mathbf{f}^0} \right] & & & \left[\frac{\partial \Phi^{\beta_{N\beta}}}{\partial \mathbf{H}^{\beta_1 D}} \right] & \cdots & \left[\frac{\partial \Phi^{\beta_{N\beta}}}{\partial \mathbf{H}^{\beta_{N\beta} D}} \right]
 \end{array} \right. \quad (\text{V.3})
 \end{array}$$

La matrice tangente (V.3) représentée schématiquement ci-dessus est donc un assemblage de tenseurs d'ordre quatre. Il s'agit d'une matrice tangente "dynamique", au sens où ses dimensions sont dépendantes du nombre de grandeurs tensorielles $\mathbf{H}^{\beta D}$ impliquées dans le problème. Ainsi, si le matériau est sain, il apparaît évident que seul le "bloc 1" constituera la matrice tangente, les autres "blocs" dépendant du nombre de couches β comportant des défauts ouverts à leurs interfaces, étant nul dans cette configuration. Pour une configuration d'endommagement fixée, les "bloc 2", "bloc 3" et "bloc 4" auront une dimension correspondant au nombre N^β considéré de couches avec des défauts ouverts. Lorsque de plus l'évolution de l'endommagement sera considérée, c'est-à-dire le test de nucléation (IV.41) activé, le nombre de couches N^β avec des défauts ouverts évoluera, ainsi que les dimensions des "bloc 2", "bloc 3" et "bloc 4". Dans tous les cas, la dimension du "bloc 1" sera la même.

L'expression de chacune des dérivées n'est pas détaillée dans ce chapitre. Nous présentons ici uniquement la forme générale des entités constituant chaque "bloc". Les détails permettant de retrouver les expressions finales et complètes sont explicités en Annexe D.

Le "bloc 1", constitué de la dérivée de l'équation en contraintes nominales $(V.1)_1$ par rapport à l'inconnue principale \mathbf{f}^0 , sera la partie invariante de la matrice tangente (V.3) du point de vue de

sa forme, que le composite considéré soit sain ou endommagé. Par contre, les grandeurs tensorielles $\mathbf{H}^{\beta D}$ liées à l'influence des défauts étant présents au sein de l'équation (V.1)₁, la présence du dommage influera sur les termes mêmes de ce bloc et également sur la forme du reste de la matrice tangente comme nous l'avons expliqué plus haut. La dérivée $\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0}$ s'écrit, sous la forme intrinsèque suivante :

$$\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0} = (1 - c) \frac{\partial \mathbf{s}^{*0}}{\partial \mathbf{f}^0} + \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \frac{\partial \mathbf{s}^{*\alpha}}{\partial \mathbf{f}^0} A^{\alpha h^{\alpha}} - \frac{1}{|V_0|} \sum_{\alpha} \frac{\partial (\vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{t}^{\alpha})}{\partial \mathbf{f}^0} \quad (\text{V.4})$$

où : $\frac{\partial \mathbf{s}^{*\alpha}}{\partial \mathbf{f}^0} = \frac{\partial \mathbf{s}^{*\alpha}}{\partial \mathbf{f}^{\alpha}} : \frac{\partial \mathbf{f}^{\alpha}}{\partial \mathbf{f}^0}$;

$$\frac{\partial d_{mn}^{\alpha} t_j^{\alpha}}{\partial f_{mn}^0} = d_{mn}^{\alpha} n_k^{\alpha} \frac{\partial s_{kj}^{*\alpha}}{\partial f_{mn}^0} A^{\alpha} \text{ si } \vec{t}^{\alpha} \neq \vec{0}, \text{ avec } d_{mn}^{\alpha} t_j^{\alpha} \text{ la composante } ij \text{ du produit tensoriel } \vec{d}^{\alpha} \otimes \vec{t}^{\alpha}.$$

Sinon, comme $\vec{t}^{\beta} = \vec{0}$ pour chaque couche β comportant une paire de défauts ouverts à ses interfaces, $\frac{\partial (\vec{d}^{\beta} \otimes \vec{t}^{\beta})}{\partial \mathbf{f}^0} = \mathbf{0}$.

Le “**bloc 2**” est constitué des dérivées de l'équation en contraintes nominales (V.1)₁ par rapport à chacun des tenseurs $\mathbf{H}^{\beta D}$. La forme intrinsèque de la dérivée $\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}$, pour β fixé, est la suivante :

$$\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} = \frac{1}{|V_0|} \frac{\partial \mathbf{s}^{*\beta}}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} A^{\beta h^{\beta}} \quad (\text{V.5})$$

avec : $\frac{\partial \mathbf{s}^{*\beta}}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} = \frac{\partial \mathbf{s}^{*\beta}}{\partial \mathbf{f}^{\beta}} : \frac{\partial \mathbf{f}^{\beta}}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}$, la dépendance de $\mathbf{s}^{*\beta}$ vis-à-vis de \mathbf{f}^{β} étant connue via son expression (IV.43)₂ et \mathbf{f}^{β} étant relié à $\mathbf{H}^{\beta D}$ via la relation (IV.9).

Le “**bloc 3**” est constitué des dérivées des équations (V.1)₂ associées aux couches β , par rapport à l'inconnue principale \mathbf{f}^0 . Pour β fixé, $\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0}$ s'exprime comme suit :

$$\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0} = {}^t \left(\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}} \right) : \frac{\partial \mathbf{s}^{*\beta}}{\partial \mathbf{f}^0} \quad (\text{V.6})$$

avec : $\frac{\partial \mathbf{s}^{*\beta}}{\partial \mathbf{f}^0} = \frac{\partial \mathbf{s}^{*\beta}}{\partial \mathbf{f}^{\beta}} : \frac{\partial \mathbf{f}^{\beta}}{\partial \mathbf{f}^0}$, la dépendance de $\mathbf{s}^{*\beta}$ vis-à-vis de \mathbf{f}^{β} étant connue via son expression (IV.43)₂ et \mathbf{f}^{β} étant relié à \mathbf{f}^0 via la relation (IV.9) ;

la transposée d'un tenseur \mathbf{A} d'ordre quatre est définie par : ${}^t A_{ijkl} = A_{klij}$.

Le “**bloc 4**” est constitué des dérivées des équations (V.1)₂ associées aux couches β , par rapport à chacun des tenseurs de l'ensemble $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$. Ici encore, nous fournissons la forme intrinsèque de la dérivée $\frac{\partial \Phi^{\beta_i}}{\partial \mathbf{H}^{\beta_j D}}$, β_i et β_j désignant deux couches β différentes :

$$\frac{\partial \Phi^{\beta_i}}{\partial \mathbf{H}^{\beta_j D}} = \begin{cases} {}^t \left(\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta_i D}}{\partial \mathbf{F}} \right) : \frac{\partial \mathbf{s}^{*\beta_i}}{\partial \mathbf{H}^{\beta_j D}} + \mathbf{s}^{*\beta_i} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}^{\beta_j D}} \left(\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta_i D}}{\partial \mathbf{F}} \right) & \text{si } \beta_i = \beta_j ; \\ \mathbf{0} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{V.7})$$

L'expression analytique de la grandeur $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}}$ ou encore de sa dérivée par rapport à $\mathbf{H}^{\beta\text{D}}$ n'est pas détaillée. $\mathbf{H}^{\beta\text{D}}$ étant une inconnue du problème, nous ne disposons pas de son expression analytique et le calcul de sa dérivée exacte vis-à-vis des différentes inconnues ou données n'est pas envisageable sans développements ou outils complémentaires.

Nous poursuivons néanmoins la mise en œuvre numérique dans le cas général. Des détails quant à la détermination de $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}}$ via l'ajout d'équations supplémentaires seront apportés et discutés au paragraphe V.5. Entre temps, des validations intermédiaires sur microstructures non endommagées (saines) et jusqu'à la nucléation des premiers défauts seront proposées (paragraphe V.3 et V.4).

V.2 Procédure numérique de résolution

La résolution numérique du problème associé à l'Approche Morphologique dans sa version en transformations finies avec prise en compte de l'endommagement est ici envisagée dans le cas général. La programmation est réalisée en Python®, qui est un langage de programmation interprété orienté-objet. Notre choix s'est porté sur ce langage car il dispose d'un grand nombre de modules qu'il est possible d'importer pour en récupérer les bibliothèques de calcul. Ainsi, par exemple, nous utiliserons le module *numpy* qui englobe tout un ensemble d'outils très puissants pour traiter les objets multidimensionnels (tableaux, tenseurs, *etc.*) et notamment pour réaliser du calcul tensoriel. Un autre avantage est que Python® permet, via des modules spécifiques, l'extension des programmes déjà réalisés par l'importation de programmes écrits dans d'autres langages comme le C++ ou Fortran, ou encore constitue une éventuelle passerelle vers des calculs éléments finis avec Abaqus (via la création de scripts spécifiques). Cette fonctionnalité ne sera pas utilisée ici, mais pourra être envisagée lors de travaux futurs. C'est donc pour faciliter l'implémentation de nos calculs mais aussi en prévision de l'exploitation future de l'A.M. que nous avons choisi ce langage de programmation.

V.2.1 Architecture générale

Nous souhaitons pouvoir réaliser des simulations numériques permettant d'évaluer l'ensemble du travail de modélisation réalisé au chapitre IV et la mise en équation nécessaire à l'algorithme de résolution, c'est-à-dire l'expression de la matrice tangente (paragraphe V.1). Nous présentons ci-dessous les grandes étapes de la résolution telles que nous l'envisageons à terme, c'est-à-dire pour des simulations générales depuis l'état sain, et avec la prise en compte de nucléations progressives au sein du matériau ainsi que de leurs effets. Les étapes en question sont les suivantes :

- (i) Une microstructure aléatoire à particules polyédriques satisfaisant les critères de la schématisation géométrique et la condition de compatibilité (IV.18) est générée numériquement. Ce travail est réalisé en amont par le Centre d'Études de Gramat ¹.
- (ii) Les paramètres morphologiques $\{A^\alpha, h^\alpha, \vec{n}^\alpha, \vec{d}^\alpha; \forall \alpha\}$ nécessaires à la description de la microstructure sont importés, mais également les barycentres des interfaces de référence $\{I_1^\alpha; \forall \alpha\}$ et les milieux des arêtes des polyèdres nécessaires au calcul de la normale actuelle (paragraphe IV.4.1) pour le critère de nucléation (IV.41).
- (iii) Le gradient de la transformation des grains est initialisé : $\mathbf{f}^0 = \mathbf{Id}$. À ce stade, l'ensemble des $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$ n'existe pas, la microstructure étant non endommagée.
- (iv) La microstructure est soumise à un chargement macroscopique par l'intermédiaire du gradient de la transformation macroscopique associé. Le gradient de la transformation est appliqué à la microstructure de manière incrémentale, l'incrément étant noté $\Delta \mathbf{F}$.
- (v) Les gradients de la transformation des couches $\{\mathbf{f}^\alpha; \forall \alpha\}$ sont évalués pour l'incrément de chargement considéré, ce qui permet de calculer toutes les grandeurs qui en dépendent.
- (vi) L'algorithme de Newton-Raphson permet d'évaluer le gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 et les grandeurs $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$. Lorsqu'aucun défaut n'est présent au sein

1. G. Contesse, Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, Centre d'Études de Gramat, Gramat, France.

de la microstructure (tant que la microstructure est saine, au moins pour le premier incrément de chargement), seul \mathbf{f}^0 est évalué. Les tenseurs $\{\mathbf{H}^{\beta\text{D}}\}$ sont évalués sur les seules couches s'étant décollées à l'incrément de chargement précédent.

- (vii) Toutes les grandeurs locales (dans les particules et dans les couches) sont actualisées.
- (viii) Le critère de nucléation (IV.41) est testé. S'il y a eu création de défauts aux interfaces d'une ou plusieurs couches, les grandeurs tensorielles $\{\mathbf{H}^{\beta\text{D}}\}$ correspondantes sont initialisées.
- (ix) L'ensemble des grandeurs macroscopiques sont actualisées afin de fournir la réponse macroscopique pour l'incrément considéré.

Jusqu'à la fin du chargement complet, les étapes (iv) à (ix) sont répétées en boucle. Ces étapes, qui constituent l'architecture globale du programme, sont regroupées sur la figure V.1. Ce paragraphe, visant à présenter la mise en œuvre numérique, vient se greffer en tant que complément du principe de résolution présenté au paragraphe IV.2.3 et en figure IV.3.

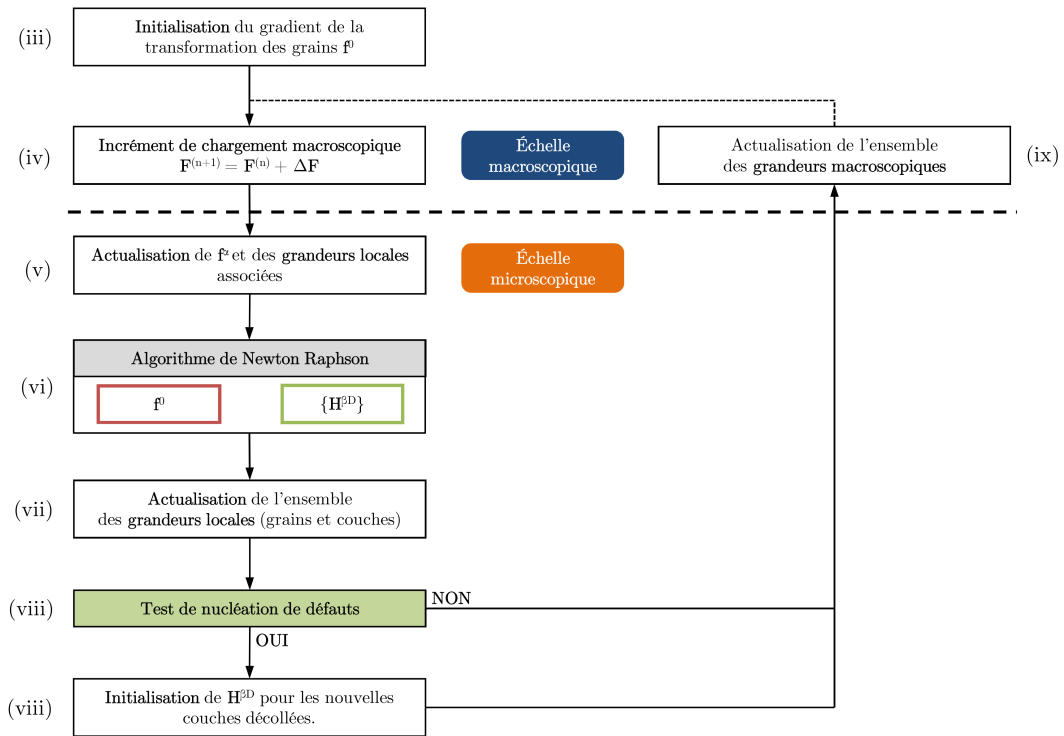


Figure V.1 – Représentation schématique de la procédure générale de résolution numérique.

Nous avons choisi de tester le critère de nucléation à la fin de la “boucle” correspondant au calcul des grandeurs pour un incrément de gradient de la transformation fixé (étape (viii)). Ceci permet de calculer (étape (v)), au début de l'incrément de chargement suivant, le gradient de la transformation \mathbf{f}^α associé à chaque couche α en prenant en considération son décollement éventuel à l'incrément précédent. Toutes les grandeurs associées tiennent également compte. Ainsi, pour un incrément de chargement donné, la nucléation calculée à l'incrément précédent est considérée comme étant une nucléation de défauts apparaissant au début de l'incrément actuel. Nous avons considéré que cette hypothèse est acceptable dans la mesure où l'incrément de gradient de la transformation $\Delta\mathbf{F}$ est

suffisamment faible. Ceci nous permet de nous affranchir (pour le moment) de la mise en place d’une procédure adaptative permettant de se placer de manière exacte et systématique au moment précis de chaque nouvelle nucléation de défauts, telle que proposée par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

Une autre remarque concernant l’architecture générale envisagée sur la figure V.1 porte sur l’initialisation des inconnues. L’utilisation d’un algorithme de Newton-Raphson nécessite en effet l’introduction d’une solution initiale suffisamment proche de la solution réelle, afin de faciliter la convergence et d’éviter les problèmes de minima locaux pouvant être rencontrés lors de la résolution. La définition de la solution initiale pour le gradient de la transformation \mathbf{f}^0 est triviale. La microstructure étant saine avant l’application d’un quelconque chargement, nous imposons : $\mathbf{f}^0 = \mathbf{Id}$. Par contre, pour $\mathbf{H}^{\beta D}$, le choix d’une “valeur initiale” la plus proche possible de la “valeur” à estimer au premier incrément de chargement qui suit la nucléation des défauts aux interfaces de la couche β reste à approfondir.

V.2.2 Stockage des paramètres microstructuraux et calcul des grandeurs aux deux échelles

Lorsqu’une microstructure d’étude est générée, nous disposons de fichiers texte avec l’ensemble des paramètres morphologiques nécessaires. Nous avons alors mis en place une méthode permettant de lire ces fichiers et de stocker les paramètres dans la classe d’objets *morpho*. Ainsi, nous récupérons notamment les grandeurs $\{A^\alpha, h^\alpha, \bar{n}^\alpha, \bar{d}^\alpha; \forall \alpha\}$ mais aussi les barycentres des interfaces de référence de chaque couche α et les milieux des arêtes d’interfaces polyédriques nécessaires au calcul des normales actuelles aux interfaces.

Nous avons ensuite mis en place trois classes d’objets associées respectivement aux particules, aux couches de matrice et aux grandeurs macroscopiques. La méthode associée à chaque classe permet notamment d’évaluer :

	Grains	Couches	Macro.
Gradient de la transformation		\mathbf{f}^α	
Jacobien de la transformation	$J^0 = \det(\mathbf{f}^0)$	$J^\alpha = \det(\mathbf{f}^\alpha)$	$J = \det(\mathbf{F})$
Tenseur de Cauchy-Green droit	$\mathbf{c}^0 = {}^t\mathbf{f}^0 \cdot \mathbf{f}^0$	$\mathbf{c}^\alpha = {}^t\mathbf{f}^\alpha \cdot \mathbf{f}^\alpha$	$\mathbf{C} = {}^t\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}$
Tenseur de contrainte nominale	\mathbf{s}^{*0}	$\mathbf{s}^{*\alpha}$	\mathbf{S}^*

Dans chacune des classes est prévu le calcul d’autres tenseurs des contraintes, tels que le tenseur de Piola-Kirchoff 1 (transposée du tenseur de contrainte nominale), ou encore celui du tenseur des déformations de Green-Lagrange.

Au sein de la classe *macro*, il est possible d’attribuer à l’objet relatif au gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} sa nouvelle valeur, à chaque nouvel incrément de chargement.

La classe *grains* permet également de stocker le coefficient C_{10}^g du potentiel de Néo-Hooke et le module de compressibilité K^g . Un objet associé au gradient de la transformation \mathbf{f}^0 est actualisé à partir de la valeur issue de la résolution, à chaque incrément de chargement.

De même, la classe *couches* contient le coefficient C_{10}^m du potentiel de Néo-Hooke de la matrice et son module de compressibilité K^m . Nous y incluons également les grandeurs nécessaires au test

du critère de nucléation, c'est-à-dire la normale actuelle (IV.37) et la distance d_{norm}^α (IV.40). Les grandeurs tensorielles $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$ calculées sont également stockées au sein de la classe *couches*.

Lorsque nous actualisons les grandeurs locales et macroscopiques, il nous suffit de faire appel aux méthodes rattachées à chaque classe et les évaluations sont toutes réalisées simultanément.

V.2.3 Mise en œuvre de l'algorithme de Newton-Raphson

Au paragraphe V.1, le choix d'un algorithme de Newton-Raphson pour réaliser la résolution nous a menés à la présentation de la structure de la matrice tangente (équation (V.3)) associée au système (V.1) à résoudre. À présent, nous allons nous attacher à détailler la mise en place de cet algorithme.

V.2.3.a Implémentation de l'algorithme

Sur la base du principe général décrit en Annexe C, nous avons programmé un algorithme de Newton-Raphson adapté à la formulation tensorielle de notre problème. Nous nous plaçons au cours de la résolution, pour un incrément de chargement macroscopique fixé. Les valeurs initiales des inconnues tensorielles \mathbf{f}^0 et $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$ sont alors connues. L'ensemble des grandeurs locales viennent par ailleurs d'être actualisées (étape (v), figure V.1). Les principales étapes de l'algorithme se décomposent alors de la manière suivante :

- (i) Le système et la matrice tangente sont calculés. Pour la première itération de l'algorithme, les données d'entrée sont les valeurs initiales mentionnées ci-dessus. Pour les itérations suivantes, les évaluations des différentes grandeurs à l'itération précédente sont utilisées.
- (ii) L'incrément de solution à appliquer à chacune des inconnues est calculé par résolution d'un système linéaire de la forme (C.4). Nous utilisons pour cela la fonction d'un package de Python®.
- (iii) L'incrément de solution est appliqué à la solution initiale ou à la solution fournie à l'itération précédente pour chaque inconnue.
- (iv) La valeur du résidu associé à chacune des inconnues est calculée, de manière séparée. Ceci permet de gérer distinctement la convergence de toutes les grandeurs à évaluer, et de n'arrêter le calcul que lorsqu'elles ont toutes atteint des valeurs acceptables.
- (v) Si tous les résidus sont inférieurs à la valeur maximale tolérée imposée pour chaque grandeur, alors la convergence est atteinte. Les solutions calculées grâce à l'algorithme sont celles évaluées à l'étape (iii). Sinon, l'ensemble des étapes est réitéré jusqu'à convergence.

Dans toute l'étude, le résidu est une grandeur relative définie comme le rapport suivant :

$$\text{Res} = \frac{\|\Delta \mathbf{A}\|_\infty}{\|\mathbf{A}^{\text{old}}\|_\infty} \quad (\text{V.8})$$

où : $\|\mathbf{A}\|_\infty$ est la norme infinie (ou norme du maximum) du tenseur \mathbf{A} , telle que : $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1 \leq i, j \leq n} |A_{ij}|$;

\mathbf{A}^{old} est l'inconnue tensorielle \mathbf{A} à l'itération précédente de l'algorithme ;

$\Delta\mathbf{A}$ est l'incrément de solution calculé lors de la résolution, à l'itération actuelle.

La fonction mentionnée en étape (ii) pour la résolution du système *linéaire* au sein d'une itération de l'algorithme de Newton-Raphson est une fonction permettant de résoudre des systèmes linéaires *matriciels* classiques, ce qui n'est pas le cas du système linéaire associé au système non-linéaire (V.1). En effet, le système (V.1) associe $(1 + N^\beta)$ équations tensorielles d'ordre deux (dimensions 3×3). Les inconnues, \mathbf{f}^0 et $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$, sont toutes des tenseurs d'ordre deux (dimensions 3×3). Enfin, la matrice tangente est la dérivée d'équations tensorielles d'ordre deux par rapport à des variables d'ordre deux : il s'agit ainsi d'une association de plusieurs tenseurs d'ordre quatre (dimensions $3 \times 3 \times 3 \times 3$), qui constituent les "sous-blocs" des "blocs" 1 à 4 (paragraphe V.1.2). Nous avons donc réécrit le système linéaire à résoudre au sein de l'algorithme de Newton-Raphson sous forme d'un système matriciel simple.

V.2.3.b Écriture matricielle du système et de la matrice tangente

Le système linéaire à résoudre au sein de l'algorithme de Newton-Raphson dont la matrice tangente a été établie au paragraphe V.1.2 est schématiquement illustré en figure V.2(a). Les cadres colorés en bleu, rouge, vert et orange correspondent aux "sous-blocs", c'est-à-dire respectivement aux grandeurs $\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0}$, $\left\{ \frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} \right\}$, $\left\{ \frac{\partial \Phi^\beta}{\partial \mathbf{f}^0} \right\}$, $\left\{ \frac{\partial \Phi^\beta}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} \right\}$. Les cadres gris correspondent aux incréments de solution calculés pour chacune des inconnues, et les cadres violets aux équations du système non-linéaire (V.1). Au sein de l'algorithme de Newton-Raphson, le système linéaire visant à déterminer l'incrément de solution implique donc une somme de produits doublement contractés. Pour le matériau sain, un seul produit doublement contracté apparaît, soit :

$$\frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0} : \Delta \mathbf{f}^0 = -\Phi^* \quad (\text{V.9})$$

En présence d'une seule couche β décollée, nous avons :

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{f}^0} : \Delta \mathbf{f}^0 + \frac{\partial \Phi^*}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} : \Delta \mathbf{H}^{\beta D} = -\Phi^* \\ \frac{\partial \Phi^\beta}{\partial \mathbf{f}^0} : \Delta \mathbf{f}^0 + \frac{\partial \Phi^\beta}{\partial \mathbf{H}^{\beta D}} : \Delta \mathbf{H}^{\beta D} = -\Phi^\beta \end{cases} \quad (\text{V.10})$$

et ainsi de suite pour N^β couches décollées.

Afin de se ramener à un système matriciel simple, chacun des produits doublement contractés entre un tenseur d'ordre quatre \mathbf{A} ("sous-bloc" bleu, rouge, vert ou orange en figure V.2(a)) et un tenseur d'ordre deux \mathbf{B} (incrément de solution associé, cadre gris en figure V.2(a)), soit : $\mathbf{A} : \mathbf{B}$, est écrit sous la forme d'un produit matriciel de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} A_{1111} & A_{1112} & A_{1113} & A_{1121} & \cdots & A_{11kl} & \cdots \\ A_{1211} & A_{1212} & A_{1213} & A_{1221} & \cdots & A_{12kl} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{ij11} & A_{ij12} & A_{ij13} & A_{ij21} & \cdots & A_{ijkl} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} B_{11} \\ B_{21} \\ B_{31} \\ B_{12} \\ \vdots \\ B_{lk} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (\text{V.11})$$

Chaque tenseur d'ordre deux \mathbf{C} , "sous-bloc" violet du second membre du système linéaire en figure V.2(a), est quant à lui transformé en un vecteur de taille 9 sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ C_{13} \\ C_{21} \\ \vdots \\ C_{ij} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (\text{V.12})$$

Nous remarquerons que les transformations des tenseurs d'ordre deux et de dimensions 3×3 en vecteurs de taille 9 ne sont pas identiques entre (V.11) et (V.12).

Nous avons appliqué les transformations précédentes au système linéaire original (figure V.2(a)), équation par équation (figure V.2(b)). De cette manière, la matrice tangente devient une matrice de dimensions $9(1 + N^\beta) \times 9(1 + N^\beta)$. Les transformations (V.11) et (V.12) assurent l'équivalence entre les deux systèmes linéaires (figure V.2).

La mise en place du système linéaire a été programmée de manière à ce que sa taille soit adaptative, en fonction du nombre de couches comportant des défauts. Le nombre de lignes et de colonnes de la matrice tangente varie ainsi suivant le nombre de couches β . Alors, si pour un incrément de chargement donné, les dimensions du système sont fixes, elles sont réactualisées à chaque nouvel incrément de chargement, suivant le résultat du test du critère de nucléation.

V.2.4 Démarche de validation

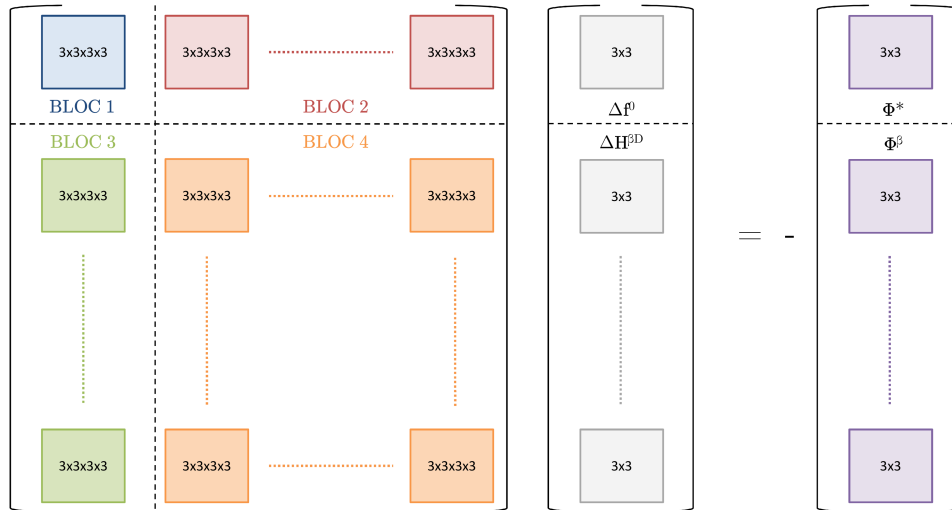
Afin de valider progressivement les travaux réalisés, nous allons procéder à des simulations numériques successives de difficultés croissantes.

Dans un premier temps, nous désactiverons le critère de nucléation : la résolution s'effectuera dans le cas sain. Nous pourrions alors effectuer une comparaison des résultats avec les travaux de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] dans un cadre similaire, afin de confirmer en première approche la mise en place analytique de la matrice tangente et l'implémentation numérique de la méthodologie.

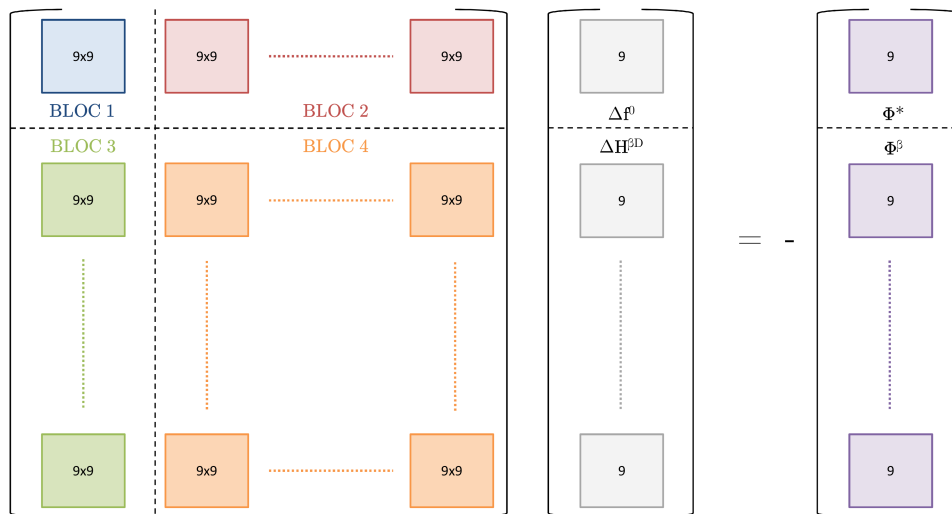
Puis, nous activerons simplement le critère sans poursuivre le calcul en aval. Cela constituera d'une part un pas supplémentaire dans l'évaluation du programme mis en place et, d'autre part, permettra d'appréhender les aptitudes de l'A.M., dans le cadre plus réaliste des transformations

finies, à restituer les effets de taille et d'interaction mis en évidence en H.P.P. (chapitre III).

Enfin, nous proposerons des éléments complémentaires pour poursuivre les simulations avec l'A.M. telle qu'elle est formulée à ce stade.



(a) Écriture originale.



(b) Écriture matricielle.

Figure V.2 – Formes du système linéaire à résoudre par l'algorithme de Newton-Raphson.

V.3 Validations sur microstructures périodiques non endommagées

V.3.1 Principe de l'étude

Dans un premier temps, nous nous attachons à évaluer la validité des développements analytiques et numériques sur des microstructures de complexités croissantes (périodique simple, périodique complexe), sans endommagement. Ainsi, le critère de nucléation est désactivé de manière à ne pas être testé lors de chaque incrément de chargement. Les calculs sont alors réalisés sur des microstructures initialement saines au sein desquelles n'apparaîtra aucun défaut. La matrice tangente conserve donc des dimensions constantes tout au long de la simulation, de même que le système à résoudre, qui ne consiste plus qu'en l'équation (V.1)₁.

Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] ont réalisé des simulations avec l'A.M. dans un cadre hyperélastique sur une microstructure périodique simple et une microstructure périodique plus complexe. Les constituants avaient un comportement de type Mooney-Rivlin, avec prise en compte d'un découplage distorsion - volume. Les estimations de l'A.M., à l'époque obtenues grâce au logiciel Mathematica® (sans calcul de la matrice tangente), avaient été confrontées avec succès aux résultats de simulations éléments finis en champs complets. Du point de vue de la résolution numérique du problème dans le cas sain, une valeur ajoutée de nos travaux par rapport aux travaux antérieurs de Touboul *et al.* est d'avoir formulé la matrice tangente et mis en place un programme en langage Python® pour la résolution numérique. Toutefois, dans ce travail (voir chapitre IV, paragraphe IV.5), nous avons choisi de nous limiter à un comportement hyperélastique de type Néo-Hooke. Comme évoqué plus haut, l'objectif est ici de valider les nouveaux programmes pour le matériau sain en guise de validation préliminaire, avant d'aborder leur version tenant compte de l'endommagement par décohésion. Plutôt que de confronter les estimations issues des nouveaux programmes à des simulations éléments finis, nous choisissons de les confronter aux résultats obtenus avec les programmes Mathematica® de Touboul *et al.*. Ce choix a été fait afin de minimiser les temps de calculs et de post-traitement nécessaires à l'obtention des résultats aux deux échelles qui seront utilisés comme référence de comparaison. Nous avons donc adapté et refait tourner les programmes de Touboul pour un comportement de type Néo-Hooke.

V.3.2 Description de l'hyperélasticité des phases et chargement appliqué

Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] ont considéré un comportement hyperélastique de type Mooney-Rivlin pour chacune des deux phases (particules et matrice), avec découplage distorsion - volume. Le potentiel de la matrice s'écrit :

$$w^{\text{matrice,MR}} = C_{10}^m (\tilde{I}_1^m - 3) + C_{01}^m (\tilde{I}_2^m - 3) + \frac{K^m}{2} (J^m - 1)^2 \quad (\text{V.13})$$

où : C_{10}^m et C_{01}^m sont les coefficients de Mooney-Rivlin de la matrice ;
 K^m est son module de compressibilité ;
 \tilde{I}_1^m est le premier invariant modifié ;
 \tilde{I}_2^m est le second invariant modifié ;
 J^m est le jacobien de la transformation au sein de la matrice.

Le potentiel des particules est quant à lui relié à celui de la matrice (V.13) via un contraste, soit :

$$w^{\text{particules,MR}} = w^{\text{matrice,MR}} \times \xi \quad (\text{V.14})$$

où : ξ est le contraste entre les propriétés des particules et de la matrice.

Les simulations de Touboul *et al.* ont été réalisées avec le jeu de coefficients consigné dans le tableau V.2.

	Particules	Matrice
$C_{10} = C_{01}$ (MPa)	5	0.5
K (GPa)	1	0.1

Tableau V.2 – Propriétés mécaniques hyperélastiques des constituants avec un potentiel de Mooney-Rivlin, pour les simulations réalisées par Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] (contraste : $\xi = 10$).

Ces valeurs ont été choisies de manière arbitraire. Elles conduisaient néanmoins à un module de cisaillement initial de la matrice valant $\mu^m = 2(C_{10}^m + C_{01}^m) = 2$ MPa, ce qui constitue un ordre de grandeur satisfaisant vis-à-vis des liants utilisés dans la composition des composites étudiés. Le choix du module de compressibilité K conduisait à un coefficient de Poisson initial de 0.495.

Dans un souci d'approche progressive des difficultés, nous avons retenu dans cette étude un potentiel de Néo-Hooke pour décrire le comportement des deux phases. La description de la non-linéarité du comportement est donc moins précise qu'avec un potentiel de Mooney-Rivlin lorsque la déformation augmente. Les coefficients "équivalents" permettant de reproduire un comportement de Mooney-Rivlin avec une loi Néo-Hookéenne ont été déterminés. Ce sont ces modules (tableau V.3) que nous utilisons pour la suite de l'évaluation proposée sur les microstructures périodiques.

	Particules	Matrice
C_{10} (MPa)	5	0.5
K (GPa)	1	0.1

Tableau V.3 – Propriétés mécaniques hyperélastiques des constituants avec un potentiel de Néo-Hooke.

Les microstructures périodiques étudiées sont soumises à une compression oedométrique définie par le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} :

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda^{\text{comp}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{V.15})$$

Le facteur de charge λ^{comp} varie linéairement de 1 jusqu'à la valeur du facteur de charge $\lambda^{\text{comp,final}}$ final imposé.

V.3.3 Simulation d'une compression œdométrique sur une microstructure périodique simple

V.3.3.a Présentation de la microstructure

La microstructure étudiée est une microstructure périodique comportant des grains cubiques de côté $L = 200 \mu\text{m}$ régulièrement répartis au sein de la matrice. Les détails sur ce type de composite ont été exposés au paragraphe III.2 (figure III.7, rappelée en figures V.3(a)-(b)). Comme dans les travaux de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008], la distance intergranulaire est ici la même dans les trois directions de l'espace, soit : $h = h' = 20 \mu\text{m}$. La concentration volumique de matrice est telle que : $c_{\text{mat}} = 25\%$.

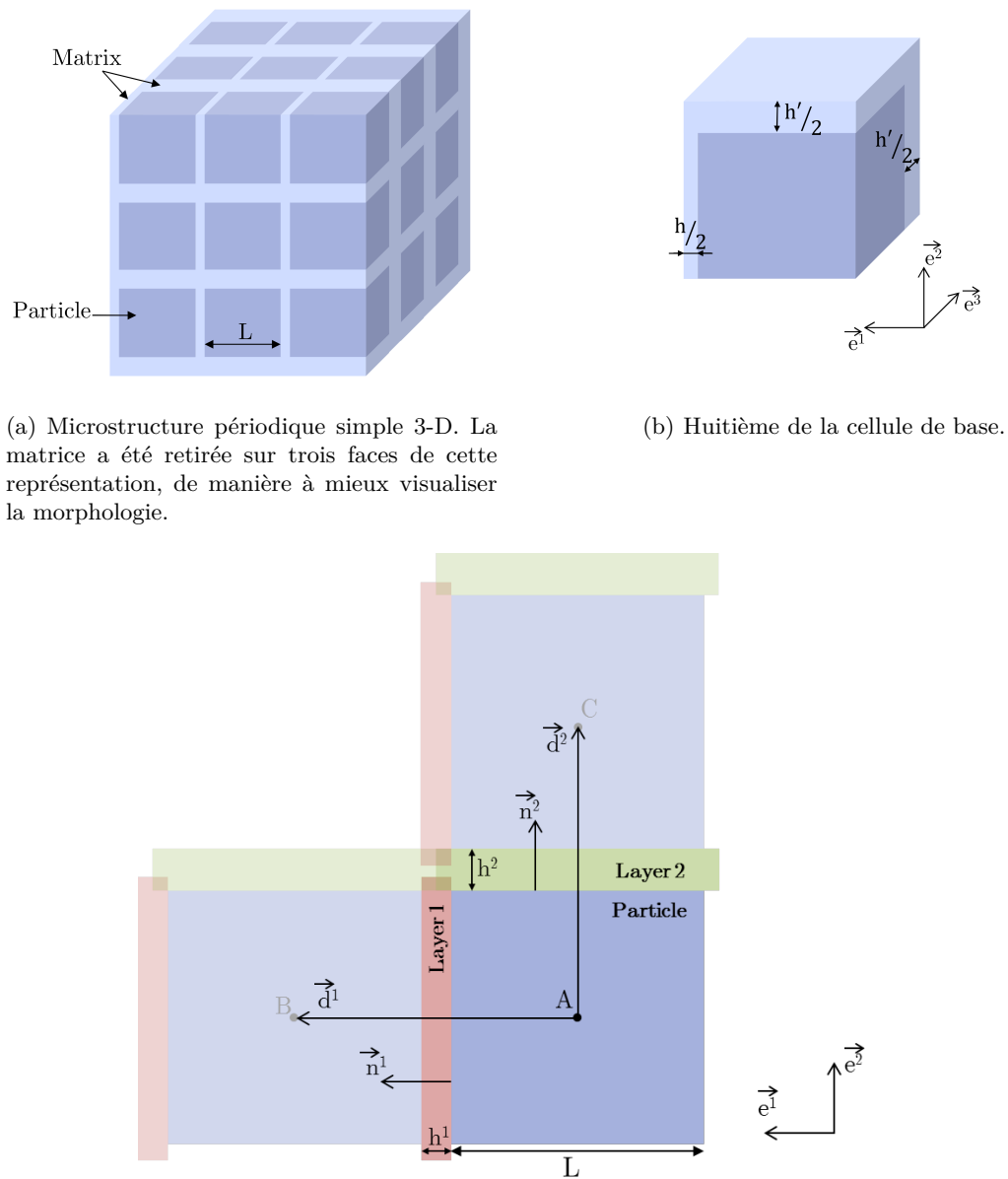
Au sein de l'A.M., la périodicité de la microstructure permet de ne considérer qu'une particule cubique de dimension L et trois couches de matrices (figure III.8, rappelée en figure V.3(c)). Les trois épaisseurs de couches sont ici égales ($h^1 = h^2 = h^3 = h$). Les vecteurs $\{\vec{d}^\alpha\}$ ($\alpha = 1, 2, 3$) sont colinéaires aux vecteurs $\{\vec{n}^\alpha\}$. Les aires projetées $\{A^\alpha\}$ sont évaluées de manière à satisfaire exactement la condition de compatibilité (IV.18). Des détails sur la détermination de ces paramètres morphologiques figurent au paragraphe III.2.2. Le tableau (V.4) récapitule l'ensemble des paramètres morphologiques permettant de décrire la microstructure étudiée.

L (μm)	$h^1 = h^2 = h^3$ (μm)	$\ \vec{d}^1\ = \ \vec{d}^2\ = \ \vec{d}^3\ $ (μm)	$A^1 = A^2 = A^3$ (mm^2)
200	20	220	0.05

Tableau V.4 – Paramètres morphologiques de la microstructure périodique utilisée par Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. Concentration volumique de matrice : $c_{\text{mat}} = 25\%$.

V.3.3.b Résultats

La microstructure périodique simple décrite au paragraphe précédent est soumise au chargement en compression œdométrique défini par l'équation (V.15). Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] ont résolu l'équation en contraintes nominales $(V.1)_1$ pour un comportement hyperélastique de Mooney-Rivlin grâce à l'algorithme de Newton-Raphson déjà implanté dans le logiciel Mathematica®. Notre étude se focalisant sur un comportement local hyperélastique de Néo-Hooke, nous avons modifié le programme original de Touboul *et al.* dans le but d'avoir une base de comparaison adaptée à notre cas. La figure V.4 permet d'illustrer les réponses aux échelles locales et macroscopiques de la microstructure périodique considérée obtenues par les deux versions du programme Mathematica® de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008], c'est-à-dire pour un comportement local de Mooney-Rivlin et la version modifiée pour un comportement local de Néo-Hooke.



(a) Microstructure périodique simple 3-D. La matrice a été retirée sur trois faces de cette représentation, de manière à mieux visualiser la morphologie.

(b) Huitième de la cellule de base.

(c) "Motif" représentatif de la microstructure périodique simple pour l'A.M. et paramètres morphologiques associés (représentation schématique 2-D).

Figure V.3 – Microstructure périodique simple (rappel : figures III.7 et III.8).

Sur les trois graphes représentés en figure V.4, nous observons que les réponses aux deux échelles obtenues avec le programme de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] modifié $(Touboul07)_{NH}$ sont très proches de celles obtenues avec le programme d'origine $(Touboul07)_{MR}$ depuis la valeur initiale du facteur de charge $F_{11} = \lambda^{comp} = 1$, jusqu'à environ $F_{11} = \lambda^{comp} = 0.8$. Au-delà ($F_{11} < 0.8$), des écarts notables apparaissent, notamment au niveau de la description de la réponse des couches de matrice. Ces écarts ont en conséquence une influence sur l'allure des courbes de la contrainte de Piola-Kirchoff 1 homogénéisée (figure V.4(c)). Les différences observées sont dues aux différences des deux potentiels utilisés. Aucun écart notable n'est relevé au niveau

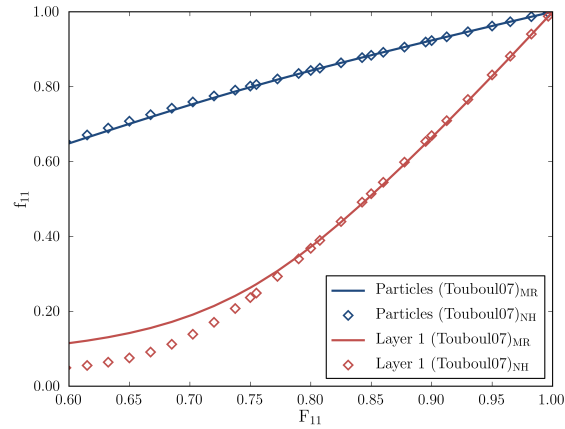
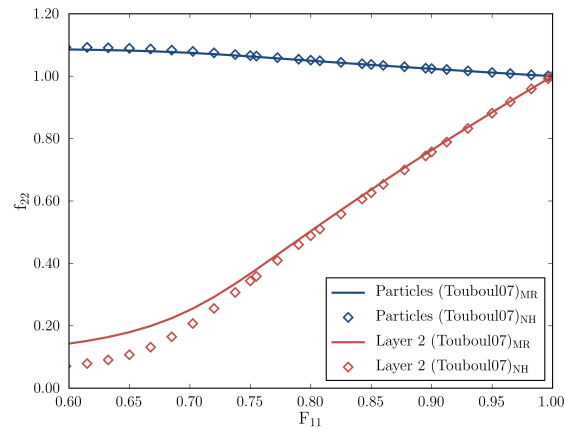
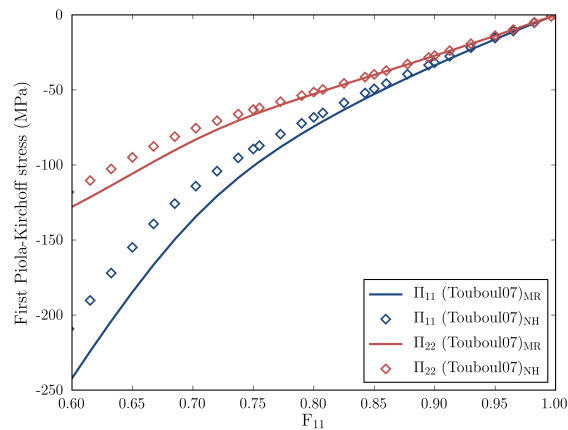
(a) Composante f_{11} au sein des particules et de la couche 1.(b) Composante f_{22} au sein des particules et de la couche 2.(c) Composantes non-nulles du tenseur des contraintes de Piola-Kirchoff 1 homogénéisé Π .

Figure V.4 – Résultats aux deux échelles estimés par l'A.M. en transformations finies pour la microstructure périodique simple. Programmes Mathematica® de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] avec un potentiel de Mooney-Rivlin (Touboul07)_{MR} et avec un potentiel de Néo-Hooke (Touboul07)_{NH}.

de la réponse des particules, probablement du fait de leur rigidité dix fois plus importante. Le bon accord de l'ensemble des courbes en début de chargement permet de valider l'adaptation des programmes de Touboul *et al.*

Par la suite, nous conservons la version du programme Mathematica® que nous avons notée (Touboul07)_{NH}. L'objectif est à présent de valider les développements analytiques et notamment la formulation de la matrice tangente dans le cas sain, ainsi que la nouvelle implémentation de l'A.M. sous la forme d'un programme en langage Python® (appelé (Trombini15)_{NH}).

Afin de compléter cette validation, nous avons aussi remplacé, dans une autre version du programme (Trombini15)_{NH}, l'algorithme de Newton-Raphson par une fonction d'optimisation de la bibliothèque de Python®. Cette fonction permet de réaliser une résolution du problème non-linéaire tout en s'affranchissant du calcul analytique de la matrice tangente qui, au lieu d'être évaluée de manière exacte, est alors estimée par différences finies. Cette autre version de nos programmes est appelée (Optimize)_{NH}.

Les résultats obtenus sont illustrés en figure V.5. Les points fournis par le programme (Optimize)_{NH} sont exactement superposés à ceux calculés via un algorithme de Newton-Raphson avec le calcul de la matrice tangente exacte ((Trombini15)_{NH}). Cette comparaison permet de valider dans le cas sain les expressions analytiques obtenues au paragraphe V.1.2 ainsi que leur implémentation (paragraphe V.2).

De plus, l'excellent accord entre les estimations issues des programmes (Trombini15)_{NH} et (Touboul07)_{NH} préalablement confrontées avec succès aux solutions de référence en champs complets garantissent la validité de l'A.M. et de sa nouvelle implémentation pour la microstructure périodique et le comportement local envisagés.

V.3.4 Simulation d'une compression œdométrique sur une microstructure périodique complexe

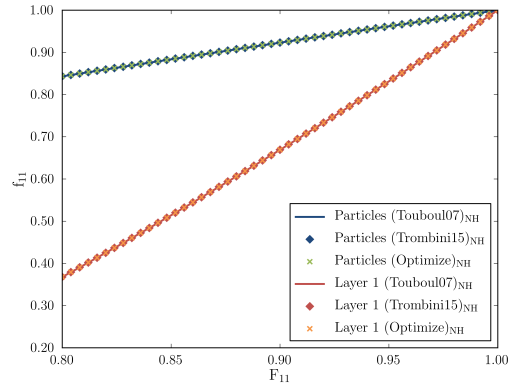
V.3.4.a Présentation de la microstructure périodique complexe

Dans un deuxième temps, une structure également périodique, mais plus complexe, est envisagée. Elle a été proposée par Touboul [Touboul 2007] lors de ses travaux de thèse. La cellule de base contient 21 particules et 72 zones intergranulaires. La concentration volumique de matrice est de 25%. Les particules sont réparties sur trois niveaux, contenant chacun 7 particules. Une illustration de la cellule de base est présentée en figure V.6.

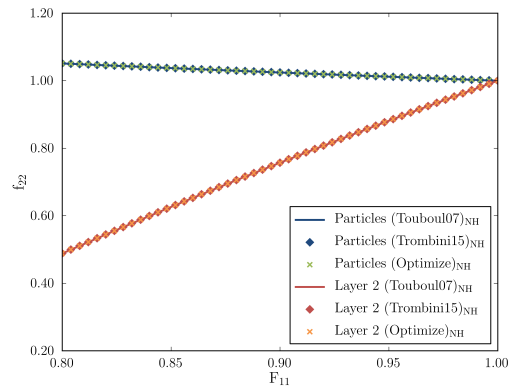
La cellule de base respecte par construction les exigences de la schématisation géométrique au départ de l'A.M. (interfaces en regard parallèles et de surfaces proches). Elle mesure 180 mm de côté et présente trois plans de symétrie ($x_1 = 90$ mm, $x_2 = 90$ mm, $x_3 = 90$ mm), facilitant ainsi l'identification des paramètres morphologiques et le calcul de la condition de compatibilité.

Les particules du niveau 1 (les 7 particules situées le plus bas le long de l'axe \vec{e}_3) sont numérotées de 1 à 7 selon la figure V.7. Sur les deux autres niveaux, les grains sont numérotés selon le même principe de 11 à 17 et de 21 à 27 respectivement. Compte-tenu des symétries, les grains 1, 4, 6, 7, 21, 24, 26, 27 ont des géométries identiques.

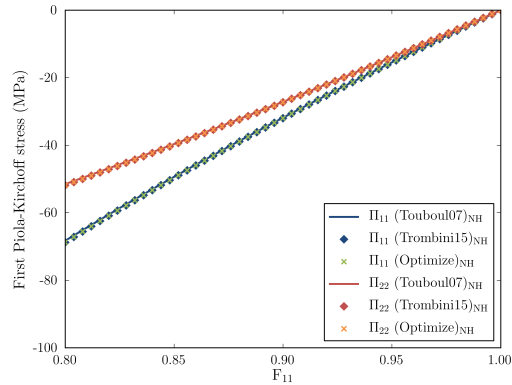
Les zones intergranulaires sont également définies : "ZI_1-2" sépare les grains 1 et 2, "ZI_2-3" sépare les grains 2 et 3 (en rouge sur la figure V.7), *etc.* Cependant, parfois, une ambiguïté peut apparaître dans la labellisation de ces zones. Entre les grains 1 et 4 par exemple, deux "ZI_1-



(a) Composante f_{11} au sein des particules et de la couche 1.



(b) Composante f_{22} au sein des particules et de la couche 2.



(c) Composantes non-nulles du tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 homogénéisé Π .

Figure V.5 – Résultats aux deux échelles estimés par l’A.M. en transformations finies pour la microstructure périodique simple avec description du comportement local via un potentiel de Néo-Hooke, avec le programme Mathematica® modifié de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] ((Touboul07)_{NH}), le programme implanté en langage Python® avec calcul de la matrice tangente exacte ((Trombini15)_{NH}) et le programme implanté en langage Python® avec estimation de la matrice tangente par différences finies ((Optimize)_{NH}).

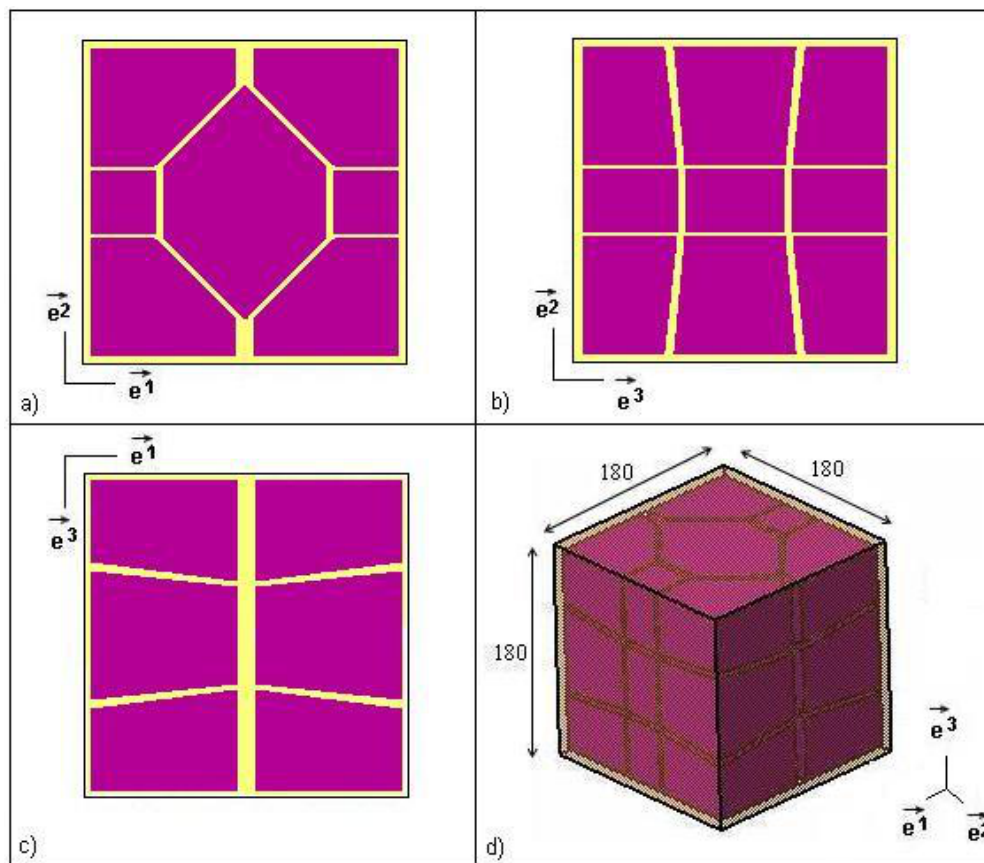


Figure V.6 – Cellule de base du composite périodique “complexe” [Touboul 2007] : (a) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}^1, \vec{e}^2) ; (b) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}^2, \vec{e}^3) ; (c) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}^1, \vec{e}^3) ; (d) vue 3-D (dimensions en mm).

4” peuvent être définies : la première est “interne” (en bleu sur la figure V.7) et la seconde est “externe” (en jaune sur la figure V.7). Cette dernière est alors appelée “ZI_1-4bis”. Chaque zone intergranulaire “externe”, c’est-à-dire située sur les bords de la cellule, ayant son équivalent en zone “interne” se voit qualifiée de zone “bis” pour lever toute ambiguïté.

Le lecteur est invité à se référer à [Touboul 2007] pour la description de l’identification des paramètres morphologiques propres à l’A.M. qui, associés à la description cinématique, assurent la périodicité de la solution.

L’intérêt d’une telle microstructure était de pouvoir pratiquer des calculs éléments finis 3-D sur un volume plus élaboré que la microstructure périodique simple, plus proche du cas aléatoire, tout en conservant un coût de calcul et de post-traitement raisonnable. Dans le cadre de cette étude, nous ne pratiquerons pas de calcul éléments finis. La stratégie adoptée reste identique à celle du paragraphe précédent, mais pour une microstructure plus élaborée impliquant d’avantage de paramètres morphologiques et des interactions plus complexes entre particules. Il s’agit donc toujours de comparer les résultats des programmes Python® développés à ceux donnés par les programmes Mathematica® de Touboul adaptés à un comportement local de Néo-Hooke.

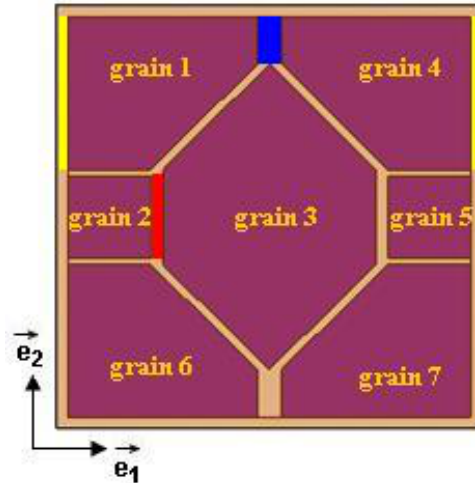


Figure V.7 – Numérotation des particules et des zones intergranulaires sur le niveau 1 de la cellule de base du composite périodique complexe (représentation 2-D) [Touboul 2007].

V.3.4.b Résultats

La microstructure périodique complexe est soumise au chargement en compression oedométrique défini par l'équation (V.15). Comme pour la microstructure périodique simple, la figure V.8 permet d'illustrer tout d'abord les réponses aux échelles locales et macroscopiques obtenues par les programmes Mathematica® de Touboul [Touboul 2007] dans leurs versions originale $(Touboul07)_{MR}$ et modifiée $(Touboul07)_{NH}$.

Sur les deux graphes représentés en figure V.8, nous observons que les réponses aux deux échelles obtenues avec le programme $(Touboul07)_{NH}$ sont très proches de celles obtenues avec le programme d'origine $(Touboul07)_{MR}$. Un écart apparaît au niveau de la contrainte de Piola-Kirchoff 1 homogénéisée. Le bon accord entre les réponses pour les deux types de comportement local s'explique par le domaine de chargement considéré, sur lequel les deux descriptions restent encore analogues, avant de se distinguer aux plus grandes déformations.

Par la suite, nous conservons la version du programme Mathematica® notée $(Touboul07)_{NH}$. L'objectif est à présent d'observer un accord entre le programme en langage Python®, $(Trombini15)_{NH}$, et celui de Touboul *et al.*, $(Touboul07)_{NH}$, à la manière de ce qui a été constaté pour la microstructure périodique simple.

De même que précédemment, nous utilisons la version $(Optimize)_{NH}$ afin de disposer d'une comparaison supplémentaire, tout en s'affranchissant du calcul exact de la matrice tangente. Les résultats obtenus sont illustrés en figure V.9. Les points fournis par le programme $(Optimize)_{NH}$ sont exactement superposés à ceux calculés via un algorithme de Newton-Raphson avec le calcul de la matrice tangente exacte ($(Trombini15)_{NH}$). Cette comparaison permet de confirmer la validation des expressions analytiques impliquées dans la matrice tangente ainsi que leur implémentation dans le cas sain. De plus, un excellent accord entre les programmes $(Trombini15)_{NH}$ et $(Touboul07)_{NH}$ est de nouveau observable aux deux échelles. La comparaison des temps de calcul (123.25 s avec $(Trombini15)_{NH}$, 284.57 s avec $(Optimize)_{NH}$) met en avant l'avantage de disposer d'une matrice tangente exacte (calcul à partir d'expressions analytiques) pour la résolution.

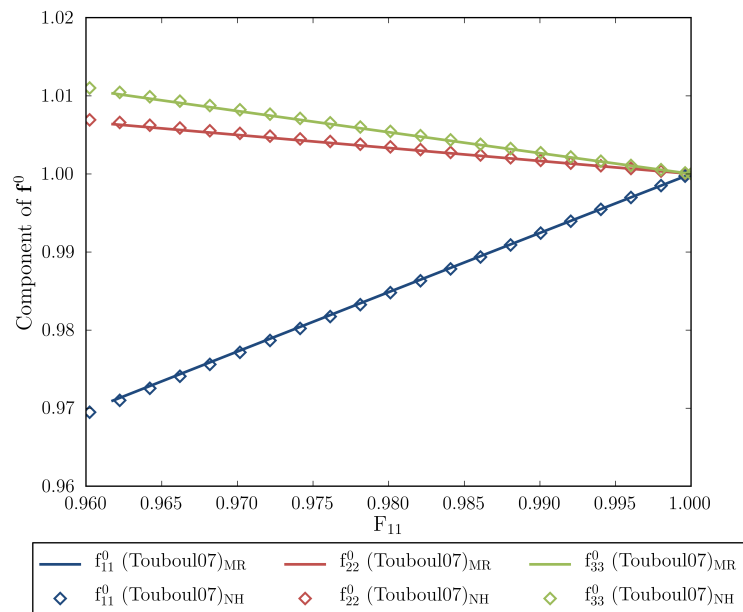
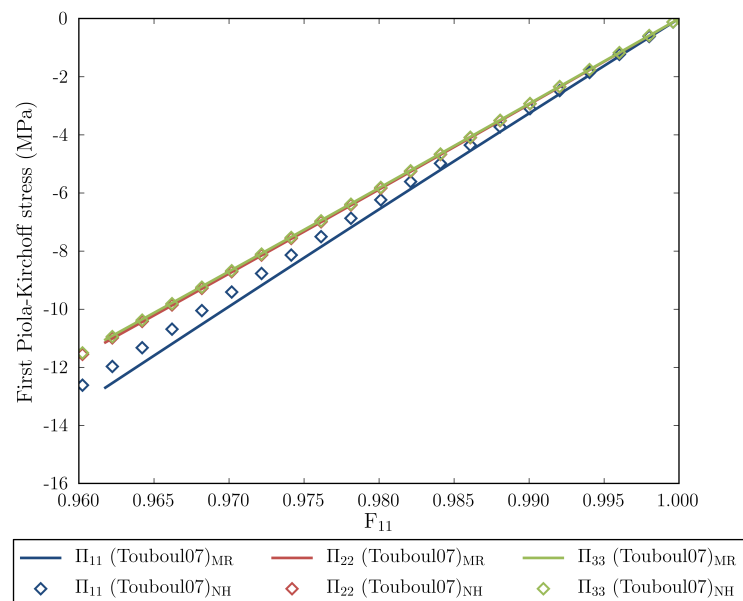
(a) Composantes diagonales du tenseur \mathbf{f}^0 .(b) Composantes diagonales du tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 homogénéisé $\mathbf{\Pi}$.

Figure V.8 – Résultats aux deux échelles estimés par l’A.M. en transformations finies pour la microstructure périodique complexe. Programmes Mathematica® de Touboul [Touboul 2007] avec un potentiel de Mooney-Rivlin (Touboul07)_{MR} et avec un potentiel de Néo-Hooke (Touboul07)_{NH}.

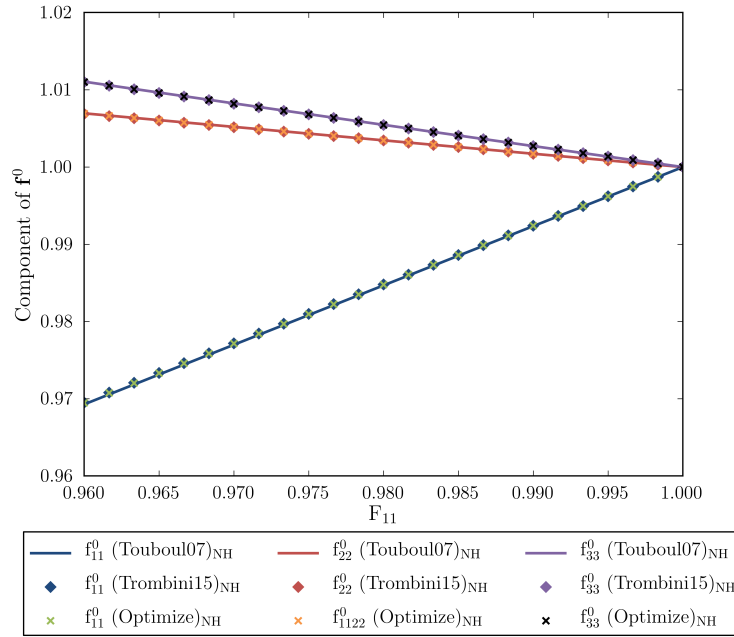
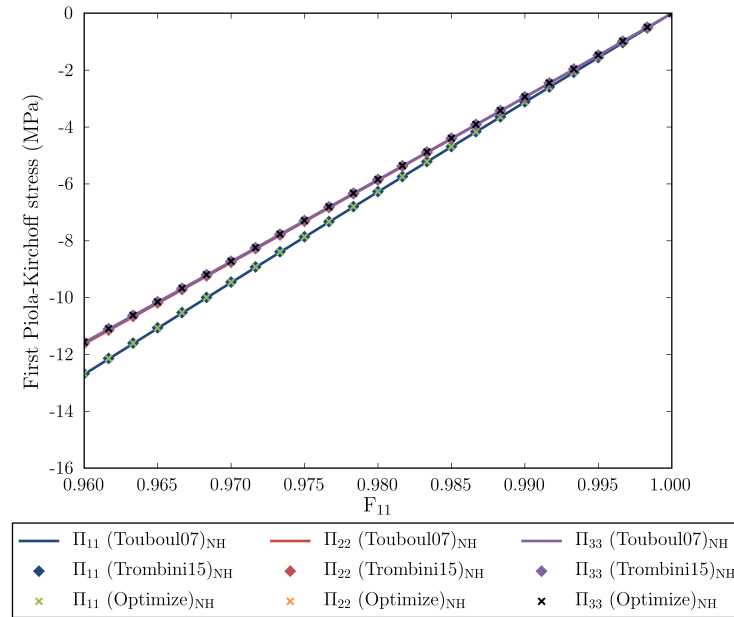
(a) Composantes diagonales du tenseur \mathbf{f}^0 .(b) Composantes diagonales du tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff 1 homogénéisé $\mathbf{\Pi}$.

Figure V.9 – Résultats aux deux échelles estimés par l’A.M. en transformations finies pour la microstructure périodique complexe avec description du comportement local via un potentiel de Néo-Hooke, avec le programme Mathematica® modifié de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] ((Touboul07)_{NH}), le programme implanté en langage Python® avec calcul de la matrice tangente exacte ((Trombini15)_{NH}) et le programme implanté en langage Python® avec estimation de la matrice tangente par différences finies ((Optimize)_{NH}).

V.4 Test du critère de nucléation

Nous cherchons dans cette partie à évaluer les capacités de l'A.M. en transformations finies avec prise en compte de l'endommagement (chapitre IV) à restituer les effets de taille et d'interaction au sein de microstructures constituées de particules polyédriques en forte proportion volumique, et respectant les exigences de la schématisation (interfaces en regard de formes et surfaces proches). Nous utilisons alors le programme Python® que nous avons baptisé (Trombini15)_{NH} au paragraphe précédent. Le critère de nucléation y est activé, afin de pouvoir être testé à la fin de chaque incrément de chargement (figure V.1). Le calcul est volontairement interrompu dès qu'une nucléation de défauts se produit.

L'objectif est donc de tester le bon fonctionnement du critère de nucléation formulé dans le cadre des transformations finies et de vérifier qu'il est capable de restituer un ordre de première décohésion dépendant de la taille ou encore du taux de charges. Pour cela, nous procédons dans un premier temps à des simulations numériques sur les mêmes microstructures périodiques simples que celles envisagées au chapitre III. Puis, un calcul est réalisé sur la microstructure périodique complexe envisagée au paragraphe V.3.4.

V.4.1 Évaluation sur microstructures périodiques simples

V.4.1.a Démarche adoptée

Comme au chapitre III, nous considérons un composite tri-dimensionnel similaire à celui étudié dans [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008], dont la cellule de base est constituée d'une particule cubique de dimension L intégrée au sein d'un cube de matrice (concentration volumique : c_{mat}) tel qu'illustré en figure V.3. La distance intergranulaire dans la direction \vec{e}^1 , notée h , peut être différente de celle dans les directions \vec{e}^2 et \vec{e}^3 , notée h' .

Les constituants ont un comportement de type Néo-Hooke avec découplage distorsion - volume dont les coefficients sont référencés dans le tableau V.3. Les paramètres d'endommagement sont choisis tels que : ($d_{\text{critique}} = 2.5 \mu\text{m}, \lambda = 1 \mu\text{m}$). λ est choisi de manière à être plus petit que l'épaisseur de couche la plus faible. Le choix de la valeur de d_{critique} , distance caractérisant les propriétés d'adhésion entre les particules et la matrice, est arbitraire.

Le chargement appliqué est une traction oedométrique définie par le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} :

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda^{\text{trac}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{V.16})$$

Le facteur de charge λ^{trac} varie linéairement de 1 jusqu'à la valeur du facteur de charge final imposé $\lambda^{\text{trac,final}} = 1.4$.

Comme au chapitre III, nous souhaitons vérifier que l'A.M. munie du critère de nucléation formulé au paragraphe IV.4 permet de restituer, en transformations finies cette fois, un ordre de décohésion pour les différentes microstructures périodiques. Pour le chargement étudié, la nucléation ayant lieu en mode d'ouverture, les décohésions d'interface sont attendues au niveau des facettes de particules dont la normale est colinéaire à la direction d'extension. Ici encore, dans chaque

étude (effet de taille, effet d'interaction), la distance intergranulaire h dans la direction d'extension \vec{e}^1 est choisie identique pour les différentes microstructures qui sont comparées. Pour chacune des deux études, nous comparons la déformation macroscopique de Green-Lagrange dans la direction d'extension correspondant à la nucléation d'un défaut sur la facette normale à \vec{e}^1 pour les différentes microstructures considérées.

La définition du “motif” élémentaire représentatif associé à l'A.M. est détaillée au paragraphe III.2.2. Nous considérons une particule cubique et trois couches de matrice (figure V.3(c)). La couche 1, qui sera concernée par la décohésion d'interface étant donnée son orientation (perpendiculaire à l'axe d'extension), est appelée “couche de référence”.

V.4.1.b Effet de la taille de particule

Pour l'étude de l'effet de la taille de particule, nous considérons les trois microstructures périodiques du paragraphe III.2.3. Le pas de calcul est identique pour chaque cas considéré : $\Delta F_{11} = 4 \cdot 10^{-4}$.

La figure V.10 représente pour chaque microstructure périodique la contrainte de Piola-Kirchoff 1 axiale homogénéisée Π_{11} normalisée par la contrainte de Piola-Kirchoff 1 axiale maximale Π_{\max} , en fonction de la déformation de Green-Lagrange macroscopique imposée E_{11} normalisée par la déformation de Green-Lagrange macroscopique $E_{\text{debonding}}$ pour laquelle la décohésion de la couche de référence apparaît en premier.

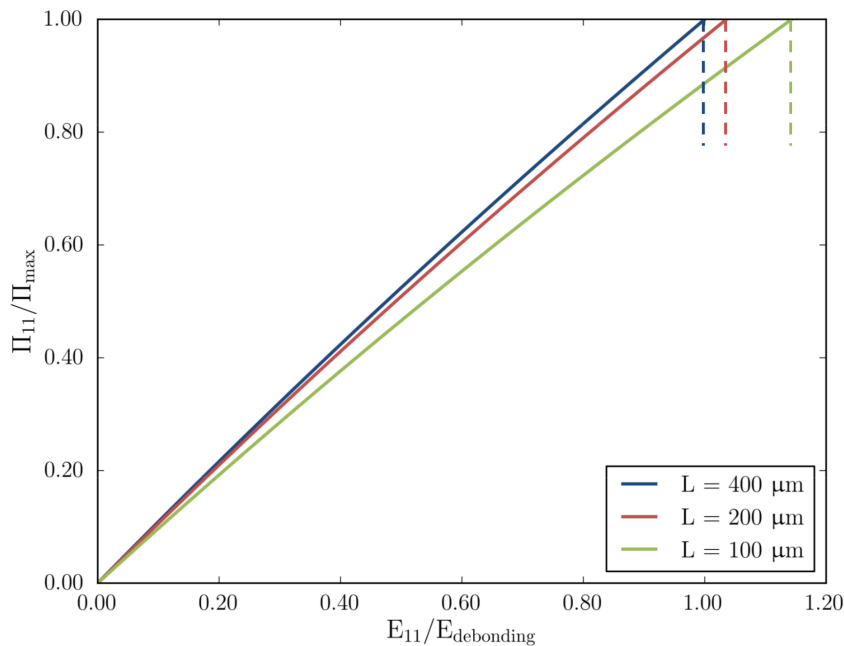


Figure V.10 – Effet de la taille de particule pour des microstructures périodiques simples soumises à une traction œdométrique. Concentration volumique de matrice : $c_{\text{mat}} = 25\%$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 10 \mu\text{m}$.

Nous pouvons tout d'abord observer que la réponse homogénéisée de chaque microstructure est non-linéaire, en raison du type de comportement attribué à chacune des phases (particules et matrice).

Nous constatons comme attendu que la décohésion la plus précoce se produit pour la micro-

structure dont la taille de particule vaut $400\ \mu\text{m}$ de côté. Puis, elle a lieu pour la microstructure dont la taille de particule est de $200\ \mu\text{m}$ et enfin pour celle dont la taille de particule est de $100\ \mu\text{m}$.

Dès l'apparition de la première nucléation, le calcul numérique s'arrête. Les lignes verticales pointillées signalent la décohésion de la couche de référence, menant à une rupture totale du matériau du fait de la simplicité de la microstructure, par analogie à ce qui se produisait en élasticité linéaire (figure III.9).

V.4.1.c Effet d'interaction entre les particules

Pour l'étude de l'effet d'interaction entre les particules, nous considérons les trois microstructures périodiques simples envisagées au paragraphe III.2.4. Les résultats sont illustrés en figure V.11. Une fois encore, un ordre peut être observé au niveau de la déformation de Green-Lagrange macroscopique correspondant à la décohésion de l'interface de la couche de référence. L'endommagement d'interface a lieu préférentiellement pour une concentration volumique de matrice de 15%, puis de 25% et enfin de 35%.

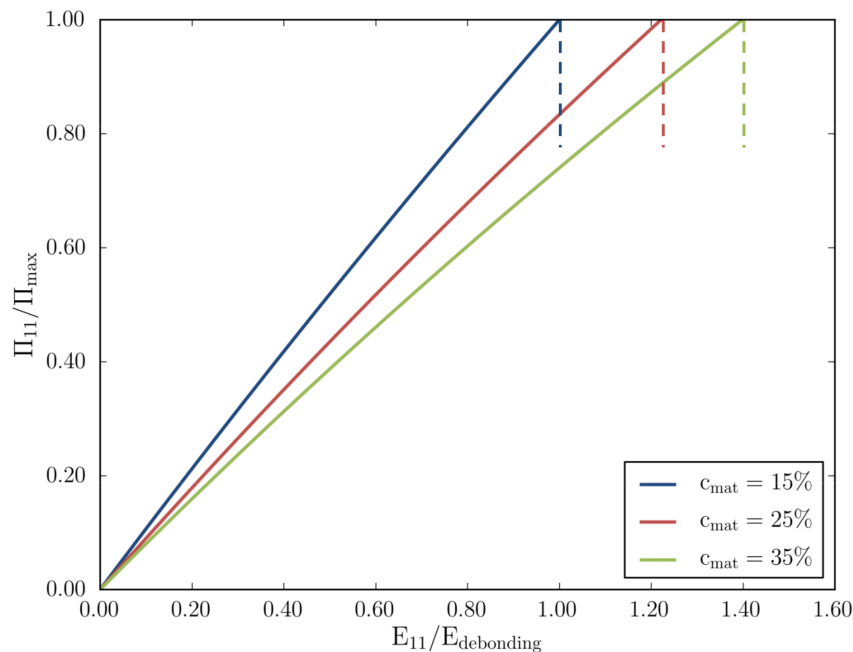


Figure V.11 – Effet d'interaction entre les particules pour des microstructures périodiques simples soumises à une traction œdométrique. Taille de particule : $L = 400\ \mu\text{m}$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 20\ \mu\text{m}$.

V.4.1.d Bilan

Les simulations précédentes confirment, dans le cadre plus réaliste des transformations finies, les aptitudes de l'A.M. à restituer les effets de taille et d'interaction entre particules mis en évidence en élasticité linéaire sur les microstructures périodiques simples considérées. Les estimations de l'A.M. en transformations finies ayant été confrontées avec succès aux solutions éléments finis de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] pour des chargements œdométriques dans le cas sain (c'est-à-dire avant le seuil) et les nouveaux programmes donnant des résultats similaires aux anciens programmes Mathematica® pour le même jeu de paramètres matériau, nous pouvons

être raisonnablement confiants quant à la pertinence des résultats obtenus dans ce paragraphe. Ils permettent de franchir une étape supplémentaire dans l'évaluation de l'A.M.

V.4.2 Évaluation sur une microstructure périodique complexe

V.4.2.a Démarche adoptée

Nous considérons à présent la microstructure périodique complexe présentée au paragraphe V.3.4. Cette microstructure présentant plusieurs particules de tailles et de formes différentes, nous nous attendons à observer des effets de taille de particules mais également des effets liés à l'orientation des interfaces.

Les constituants ont un comportement de type Néo-Hooke avec découplage distorsion - volume dont les coefficients sont référencés dans le tableau V.3. Les paramètres d'endommagement sont choisis tels que : ($d_{\text{critique}} = 0.6 \text{ mm}$, $\lambda = 0.25 \text{ mm}$). Le chargement appliqué est une traction cédométrique (équation (V.16)). Le facteur de charge final imposé est défini tel que : $\lambda^{\text{trac. final}} = 1.2$, et l'incrément de chargement tel que : $\Delta F_{11} = 2 \cdot 10^{-3}$.

V.4.2.b Résultats

Suite à l'application du chargement, les premières nucléations apparaissent au niveau des zones intergranulaires "ZI_11-13", "ZI_14-13", "ZI_16-13" et "ZI_17-13" (figure V.12), pour une déformation de Green-Lagrange macroscopique axiale $E_{11, \text{nucléation}} = 8.27 \cdot 10^{-2}$.

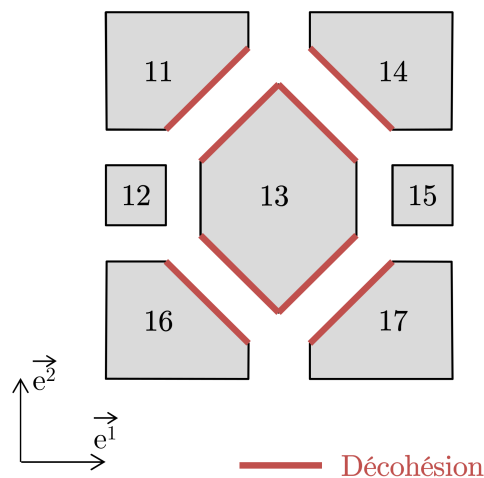


Figure V.12 – Localisation des défauts apparus sur le niveau 2 de la cellule de base du composite périodique complexe suite à une sollicitation en traction cédométrique.

C'est donc la particule numérotée 13 qui subit une décohésion au niveau de quatre de ses interfaces, et les particules 11, 14, 16 et 17 qui subissent une décohésion au niveau de leur interface en regard de la particule 13. Les volumes des particules répertoriés dans le tableau V.5 dans l'ordre croissant montrent que les particules les plus grosses de la microstructure sont les particules 3 et 23. Viennent ensuite la particule 13 puis les particules 11, 14, 16 et 17. Par contre, les particules (1, 4, 6, 7, 21, 24, 26, 27) environnant les plus grosses particules 3 et 23 ont des volumes plus faibles. Nous constatons alors que les premières décohésions d'interfaces ont lieu au niveau de l'une des trois particules les plus grosses, celle dont les particules en regard ont les volumes les plus importants : la particule 13. Cela semble confirmer les aptitudes de l'A.M. munie du critère de nucléation (IV.41)

à restituer les effets de taille attendus sur l'apparition des premières décohésions dans le cadre des transformations finies.

Particules n°	Volume (mm ³)
3,23	420 800
13	382 500
11,14,16,17	241000
1,4,6,7,21,24,26,27	214 500
12,15	65 540
2,5,22,25	65 230

Tableau V.5 – Volumes des particules de la microstructure périodique complexe.

Les décohésions observées ne sont pas localisées au niveau d'interfaces perpendiculaires à la direction de sollicitation (direction \vec{e}^1). Ceci est probablement dû au fait que les tailles de particules concernées par la décohésion sont suffisantes pour que l'effet de taille prenne le dessus sur l'effet d'orientation (paragraphe III.4).

V.5 Perspectives à envisager

V.5.1 À propos de la résolution numérique du problème couplé

Le problème non-linéaire à résoudre (V.1) a jusqu'à présent été traité comme un système menant à l'obtention de deux types d'inconnues : le gradient de la transformation des grains \mathbf{f}^0 et les N^β gradients de déplacement $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$ associés aux couche β comportant une paire de défauts ouverts à leurs interfaces. À la fin du paragraphe V.1.2, nous avons évoqué la difficulté rencontrée pour évaluer les grandeurs $\left\{\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}\right\}$. Il s'agit alors d'inconnues supplémentaires, tenseurs d'ordre quatre qui introduisent $81N^\beta$ inconnues scalaires supplémentaires à déterminer (tableau V.6). Nous ne disposons donc pas de suffisamment d'équations pour évaluer l'ensemble des inconnues du problème. Ce paragraphe vise à effectuer quelques propositions permettant d'obtenir les $81N^\beta$ équations manquantes ou de réduire le nombre d'inconnues.

Équations				
Grandeur	Dimension	Nb. de composantes	Nb. d'équations tensorielles	Nb. d'équations scalaires
Φ^*	3×3	9	1	9
Φ^β	3×3	9	N^β	$9N^\beta$

Inconnues				
Grandeur	Dimension	Nb. de composantes	Nb. d'inconnues tensorielles	Nb. d'inconnues scalaires
\mathbf{f}^0	3×3	9	1	9
$\mathbf{H}^{\beta D}$	3×3	9	N^β	$9N^\beta$
$\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}$	$3 \times 3 \times 3 \times 3$	81	N^β	$81N^\beta$

Tableau V.6 – Bilan du nombre d'équations à résoudre et du nombre d'inconnues associées en considérant les grandeurs $\left\{\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}\right\}$ comme des inconnues du problème.

Afin de pallier cette difficulté, nous avons envisagé en première approche d'écrire une relation de dépendance entre les grandeurs tensorielles $\{\mathbf{H}^{\beta D}\}$ et les dérivées $\left\{\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}\right\}$. Nous pourrions proposer cette relation sous la forme suivante :

$$\mathbf{H}^{\beta D} = \frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{F} \quad (\text{V.17})$$

La formulation en H.P.P., via l'approche de localisation-homogénéisation complémentaire (paragraphe II.4.2), permettait d'obtenir une relation directe entre la déformation traduisant l'influence des défauts $\mathbf{e}^{\beta D}$ et la déformation macroscopique \mathbf{E} . Le choix proposé ici permettrait de nous fournir une relation similaire et par suite de réécrire entièrement le système uniquement en fonction des grandeurs \mathbf{f}^0 et $\left\{\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}\right\}$. Le tableau V.7 dénombre les équations dont nous disposerions alors vis-à-vis des inconnues restantes : il nous manquerait $72N^\beta$ équations à définir pour résoudre le problème non-linéaire.

Nous proposons pour ce faire de discuter la forme du tenseur d'ordre quatre : $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}$. L'idée serait de considérer ce tenseur dans un repère local lié à la couche β au moment de son décollement.

Équations				
Grandeur	Dimension	Nb. de composantes	Nb. d'équations tensorielles	Nb. d'équations scalaires
Φ^*	3×3	9	1	9
Φ^β	3×3	9	N^β	$9N^\beta$

Inconnues				
Grandeur	Dimension	Nb. de composantes	Nb. d'inconnues tensorielles	Nb. d'inconnues scalaires
\mathbf{f}^0	3×3	9	1	9
$\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}$	$3 \times 3 \times 3 \times 3$	81	N^β	$81N^\beta$

Tableau V.7 – Bilan du nombre d'équations à résoudre et du nombre d'inconnues associées en introduisant une relation liant les grandeurs $\mathbf{H}^{\beta D}$ et $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}$.

L'application de chargements particuliers dans ce repère associé à des hypothèses sur la forme du saut de déplacement et, par suite, sur celle du gradient de déplacement $\mathbf{H}^{\beta D}$ pourrait permettre de statuer sur une forme spécifique du tenseur $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}$ écrit dans le repère local. De nouvelles équations émergeraient donc, permettant de compléter le système à résoudre. Imposer une forme particulière au tenseur $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}$, à condition de veiller à la pertinence de la forme du saut de déplacement induit, permettrait, en première approche, d'observer la réponse du modèle couplé après la première nucléation.

Au-delà de la solution “pragmatique” précédente, un travail plus fondamental doit pouvoir être envisagé avec différents axes. Le premier serait de regarder les symétries que présente éventuellement le tenseur $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}$ en revenant sur les propriétés de l'énergie libre homogénéisée (dérivées croisées) à partir de laquelle la relation (V.1)₂ a été établie. Le second pourrait être de tenter une décomposition polaire pour une évaluation “séparée” des parts rotation et déformation induites dans la couche par les défauts à ses interfaces. En H.P.P., ces deux parts résultaient de deux traitements différents : seule la part déformation découlait de l'approche complémentaire. L'évaluation de la rotation (bien que s'appuyant sur l'expression analytique de $\mathbf{e}^{\beta D}$) était séparée. La méthodologie H.P.P. n'est pas directement transposable étant donné que le caractère analytique a disparu et que la décomposition entre les deux parts n'est plus additive mais multiplicative. Malgré cela, certaines des idées pourraient éventuellement être mises à profit. Par exemple, l'axe de rotation pourrait être déterminé au moment de la nucléation et conservé ultérieurement, l'angle pourrait être évalué dans un repère local lié à la couche de sorte à ce que les sauts moyens soient opposés. Enfin, nous pourrions aussi considérer en première approche une résolution restreinte à des chargements macroscopiques sans rotation, ce qui réduirait notamment le nombre de composantes de $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta D}}{\partial \mathbf{F}}$.

Une fois la résolution du problème avec création progressive de défauts achevée, nous pourrions proposer l'introduction d'un test permettant de gérer la fermeture de défauts préalablement ouverts au cours d'un chargement. À cet effet, la formulation du critère de fermeture dans le cadre H.P.P. proposé par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] pourrait être généralisée aux

transformations finies.

V.5.2 Ajout d'un critère de fermeture

Soit une couche β présentant une paire de défauts ouverts à ses interfaces. La généralisation en transformations finies du critère de fermeture proposé par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] s'écrit :

$$\begin{cases} \text{Tant que : } \langle \vec{b}^\beta \rangle_{I_1^\beta} \cdot \vec{n}^\beta > 0 & , \text{ les défauts restent ouverts.} \\ \text{Dès que : } \langle \vec{b}^\beta \rangle_{I_1^\beta} \cdot \vec{n}^\beta = 0 & , \text{ les défauts se ferment.} \end{cases} \quad (\text{V.18})$$

avec : $\langle \vec{b}^\beta \rangle_{I_1^\beta} = \mathbf{H}^{\beta D} \vec{Y}^{B_1}$

La fermeture simultanée des deux défauts suggère de supposer que les vecteurs moyens de discontinuité de déplacement sur les deux interfaces opposées parallèles sont de signe opposé. Déjà utilisée dans le cadre H.P.P. (paragraphe II.4.3.b), cette hypothèse paraît cohérente étant donné l'homogénéité de déformation supposée dans la couche pour des interfaces en regard de forme et surface proches et restant parallèles en cours de chargement. L'équation d'opposition formulée sera à satisfaire pour chaque couche β dès la nucléation des défauts à ses interfaces. Elle se rajoute donc obligatoirement au système (V.1).

Si le critère (V.18) est satisfait pour une couche β , celle-ci devient une couche de type f avec des défauts fermés à ses interfaces. Le gradient \mathbf{H}^{fD} sera évalué à l'instant de la fermeture, soit pour $\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\text{fermeture couche } \beta}$, c'est-à-dire :

$$\mathbf{H}^{\text{fD}} = \mathbf{H}^{\beta D} (\mathbf{F}_{\text{fermeture couche } \beta}) \quad (\text{V.19})$$

Les défauts étant bloqués par frottement infini, \mathbf{H}^{fD} et par suite le saut moyen $\langle \vec{b}^\beta \rangle_{I_1^\beta}$ resteront figés tant que les défauts resteront fermés.

V.6 Conclusion

Le calcul de la matrice tangente a donc été entrepris et poussé le plus loin possible, bien que faisant émerger un terme dont nous n'avons pas pu, dans le temps imparti, trouver l'expression. Même si la mise en place de la matrice tangente n'a pu être achevée, les développements effectués constituent déjà une contribution nouvelle par rapport aux travaux antérieurs de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] qui, dans le cas plus simple du matériau sain, avaient eu recours au logiciel Mathematica® permettant de s'affranchir du calcul de la matrice tangente. Nous avons ensuite mis en place l'architecture générale de l'algorithme de résolution qui permettra de simuler à terme la réponse du composite depuis l'état sain et la nucléation progressive en cours de chargement des défauts. Le tout a été programmé en langage Python® avec la mise en place d'objets spécifiques pour le stockage et le calcul des différentes grandeurs. Cela inclut un remplissage dynamique de la matrice tangente dont la taille s'auto-adapttera au nombre croissant de couches avec des défauts ouverts à leurs interfaces. La mise en œuvre de l'algorithme de Newton-Raphson a été rendue possible par une écriture matricielle de cette matrice tangente.

La seconde partie de ce chapitre a été consacrée à l'évaluation progressive des développements et programmes associés. De façon naturelle, nous avons tout d'abord cherché à comparer nos estimations aux estimations antérieures de Touboul *et al.* pour le matériau sain. Le critère de nucléation a donc été désactivé pour cette étape de validation particulière. Les programmes originaux de Touboul ont par ailleurs été adaptés à un comportement des constituants de type Néo-Hooke. Enfin, nous avons développé une version de notre programme dans laquelle la matrice tangente n'est plus évaluée de manière exacte mais par différences finies. Les résultats sont extrêmement favorables et permettent de valider, dans le cas sain, le calcul analytique de la matrice tangente, l'architecture générale du programme proposé et la mise en œuvre de l'algorithme de Newton-Raphson.

Puis, nous avons activé le critère de nucléation de défauts étendu au cadre des transformations finies. Afin de valider sa formulation et sa mise en œuvre, nous avons procédé à une étude semblable à celle réalisée dans le chapitre III sur les effets de taille de particule et d'interaction entre particules. Notre attention s'est portée sur des microstructures périodiques simples, puis sur la microstructure périodique complexe de Touboul [Touboul 2007]. Dans les deux cas, et cette fois en transformations finies, les effets attendus semblent restitués. Des simulations sur des microstructures plus complexes permettront de confirmer les aptitudes de l'A.M. à restituer ces effets en transformations finies.

Enfin, des perspectives ont été proposées quant à l'introduction d'équations supplémentaires afin de rendre le système complet exploitable. Nous avons également proposé l'introduction d'un critère de fermeture de défauts s'inscrivant dans le prolongement des travaux antérieurs en H.P.P. [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013].

CONCLUSION GÉNÉRALE

Les travaux présentés dans ce manuscrit s'inscrivent dans le cadre des études de vulnérabilité des composites énergétiques de type propergols solides à des sollicitations accidentelles ou malveillantes. Ainsi, des modèles réactifs sont nécessaires pour quantifier les risques d'initiation d'une réaction au sein de ces matériaux. Ces risques étant intimement liés aux processus dissipatifs et à l'état d'endommagement, des modèles de comportement mécanique doivent être mis en place en amont afin de fournir les données requises par les modèles réactifs. La complexité morphologique et le nombre conséquent de non-linéarités caractéristiques des composites énergétiques rend difficile l'usage de modèles phénoménologiques, dont la nature macroscopique ne permet pas de traiter l'ensemble de la classe étudiée sans la mise en œuvre de lourdes campagnes expérimentales d'identification. En outre, la compréhension et la prévision des mécanismes d'initiation nécessitent l'accès aux champs mécaniques locaux et à l'état microstructural d'endommagement (position, morphologie des décohésions d'interfaces), à fournir en donnée d'entrée des modèles réactifs. Ainsi, au vu de ces enjeux, il apparaît indispensable de considérer une modélisation multi-échelle fournissant à la fois la réponse macroscopique du milieu mais aussi une estimation des champs locaux et des caractéristiques locales de l'endommagement. Vis-à-vis de ces exigences, les approches en champs complets paraissent apporter une réponse très satisfaisante, étant donné qu'elles peuvent prendre en compte la morphologie locale des microstructures de manière précise et donnent l'accès à l'estimation de champs locaux hétérogènes. Cependant, le coût numérique de ces méthodes ne permet pas d'envisager le traitement simultané des non-linéarités caractéristiques des composites énergétiques dans le cadre de calculs en 3-D sur des volumes suffisamment grands. Les approches d'homogénéisation non-linéaire paraissent de leur côté être un bon compromis entre les modèles macroscopiques et les approches en champs complets. Cependant, l'accès aux champs locaux et à la répartition des défauts n'est pas facilement envisageable, notamment pour les approches de type Eshelby fournissant des grandeurs moyennes par phases. Ces méthodes sont d'autant moins adaptées au contexte qui est le nôtre qu'elles ne peuvent pas capter les effets d'interaction dus aux forts taux de charges ($> 50\%$ en volume).

La modélisation adoptée dans ce contexte est une approche d'estimation alternative, baptisée "Approche Morphologique" (A.M.), et fondée sur les travaux de Christoffersen [Christoffersen 1983] pour des composites élastiques fortement chargés. Via la description explicite de la microstructure étudiée, l'A.M. permet d'accéder à la réponse homogénéisée ainsi qu'à une estimation des champs locaux. Elle est le fruit de nombreuses extensions, en viscoélasticité [Nadot-Martin *et al.* 2003], en transformations finies [Guiot *et al.* 2006, Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008], en élasticité et viscoélasticité en présence d'un état fixé d'endommagement [Nadot *et al.* 2006], et en élasticité linéaire avec prise en compte de l'évolution de l'endommagement [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013]. L'objectif des travaux présentés dans ce manuscrit a été de réaliser un travail d'évaluation de l'A.M. et d'introduire une nouvelle extension visant à se rapprocher de la réalité du comportement des composites énergétiques.

Les fondements théoriques de l'A.M. ont été présentés dans le cadre des transformations finies pour le matériau sain [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] et dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (H.P.P.) pour le matériau endommagé [Nadot *et al.* 2006, Dartois 2008,

Dartois *et al.* 2013]. La microstructure initiale réelle est approchée via une schématisation explicite, sous forme d'un assemblage de grains polyédriques séparés par de fines couches de matrice, tandis que la formulation du problème de localisation-homogénéisation s'appuie sur un cadre cinématique simplifié. La version avec endommagement introduit des discontinuités de déplacement le long des interfaces de manière compatible avec les hypothèses cinématiques, afin de décrire la présence de défauts d'interfaces. Il est important de mettre en avant que la formulation et la résolution du problème local peuvent être menées indépendamment des lois non-linéaires locales choisies. Le choix d'un comportement élastique linéaire isotrope pour les constituants (particules et matrice) conduit à l'obtention d'expressions analytiques des grandeurs globales et locales dans lesquelles les contributions des deux catégories de défauts (ouverts et fermés) sont clairement identifiables. Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013] ont introduit les ingrédients nécessaires à la prise en compte de l'évolution de l'endommagement sous la forme de création de nouvelles interfaces endommagées ou de fermeture de défauts. Les critères proposés ont été formulés en compatibilité avec la cinématique à la base de l'A.M., à l'échelle des interfaces. L'A.M. munie de ces critères permet de simuler la réponse homogénéisée du matériau, notamment l'évolution de l'anisotropie induite par endommagement, en fonction des événements discrets se produisant au niveau des interfaces, et simultanément d'accéder à la position et aux caractéristiques des défauts (orientation, morphologie). Les champs locaux dans la matrice sont également accessibles avec une hétérogénéité gouvernée par la morphologie des zones intergranulaires et l'état des interfaces.

L'analyse des travaux antérieurs au démarrage de cette thèse a montré la nécessité d'évaluer de manière concrète, avant d'aborder la poursuite de son enrichissement, les aptitudes de l'A.M. à restituer les effets de taille et d'interaction entre particules sur la chronologie de décohesion qui sont classiquement observés expérimentalement ou au moyen de simulations en champs complets dans la littérature. Au travers de simulations numériques via l'A.M. dans sa version proposée par Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013], différentes microstructures artificielles ont successivement été considérées comme support de l'analyse : des microstructures périodiques simples, des microstructures aléatoires monomodales et enfin une microstructure aléatoire bimodale. L'effet de taille de particule a tout d'abord été mis en évidence sur des microstructures périodiques simples puis sur une microstructure aléatoire bimodale contenant des charges polyédriques. L'analyse sur microstructures périodiques a illustré la capacité de l'A.M. à rendre compte du résultat plus général suivant : si les particules ont la même forme et sont séparées par des zones intergranulaires identiques (en termes d'orientation et d'épaisseur), la décohesion sera plus précoce aux interfaces des grosses particules qu'aux interfaces des plus petites. Une telle chronologie est en accord avec les observations expérimentales [Rae *et al.* 2002, Tao *et al.* 2013] et avec les simulations en champs complets disponibles dans la littérature pour des charges de formes identiques (voir par exemple [Zhao 2008, Ma *et al.* 2011]). La simulation sur la microstructure aléatoire bimodale à particules polyédriques a également mis en relief le rôle crucial de l'orientation des interfaces (intrinsèquement reliée à la forme des particules) sur la chronologie des nucléations. L'effet d'orientation est couplé, comme physiquement attendu, à l'effet de taille. L'effet de taille semble toutefois prendre le dessus sur l'effet d'orientation si les particules sont suffisamment grosses. La capacité de l'A.M. à rendre compte des influences précédentes sur la chronologie des nucléations résulte principalement de la

dépendance du champ de déplacement dans la matrice aux caractéristiques morphologiques propres à chaque zone intergranulaire.

D'autre part, les résultats obtenus sur les microstructures périodiques et aléatoires monomodales ont montré que la décohésion est d'autant plus précoce que la fraction volumique de particules est importante. De plus, l'efficacité de l'A.M. semble augmenter avec cette fraction volumique. Ces résultats prouvent ainsi l'aptitude de l'A.M. à tenir compte des interactions complexes entre les particules générées par les forts taux de charges. Ceci est rendu possible grâce à la description de l'hétérogénéité de champ dans la matrice résultant des interactions entre particules opposées dépendant de la morphologie des zones intergranulaires. Il s'agit d'un important avantage de l'A.M. par rapport aux approches en champs moyens classiques utilisant le schéma de Mori-Tanaka (sans indicateur de fluctuations intraphases) incapables, comme le soulignent les travaux de Inglis *et al.* [Inglis *et al.* 2007], de restituer les effets d'interaction complexes entre particules avant et pendant le processus de décohésion pour des fractions volumiques de charges supérieures à 50%.

Sur la base des travaux de validation du cadre cinématique en transformations finies de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] et des résultats précédents, l'A.M. a été étendue pour incorporer le couplage entre les transformations finies et l'endommagement, auparavant traités dans deux versions séparées de l'approche. La description géométrique et cinématique introduite lors des travaux antérieurs [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] a donc été conservée, et les développements analytiques ont été repris dans leur ensemble dans le cas sain puis poursuivis en introduisant les décohésions d'interface en nombre fixé à la manière de Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006]. Ainsi, nous avons introduit des discontinuités de déplacement au niveau des interfaces particules / matrice. Chaque couche de matrice peut alors se trouver dans trois configurations, dont une qui n'avait pas été envisagée dans le cadre H.P.P. par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006]. Ainsi, elle peut être saine, présenter un unique défaut au niveau de l'une de ses interfaces (configuration "simple", caractérisée par un saut constant), ou encore présenter une paire de défauts au niveau de ses deux interfaces (configuration "double"). Les configurations "simple" et "double" sont reliées par la présence d'un vecteur homogène qui peut s'interpréter comme le saut constant qu'il y aurait le long de la seconde interface en l'absence de discontinuité sur la première. Ces développements, plus fournis que ceux de Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] en introduisant la "configuration simple", permettent d'envisager un état microstructural d'endommagement beaucoup plus riche qu'auparavant. Cependant, afin de pallier le nombre conséquent d'inconnues supplémentaires introduit par la "configuration simple", nous avons justifié le choix de ne considérer que les configurations saine et "double". Cela a aussi permis de conserver un parallélisme avec les travaux antérieurs, bienvenu pour un meilleur contrôle des développements suivants. Enfin, les étapes de mise en place des relations de passage micro-macro ont été revisitées.

Au final, pour un état d'endommagement fixé (c'est-à-dire pour un nombre fixé de défauts ouverts et / ou fermés), l'analogie des relations obtenues avec celles du cas sain a été mise en évidence, tout en notant l'apparition d'un gradient de déplacement noté $\mathbf{H}^{\alpha D}$, qui caractérise l'influence des défauts (ouverts ou fermés) aux frontières de la zone intergranulaire associée. L'ensemble $\{\mathbf{H}^{\alpha D}\}$ renforce l'hétérogénéité au sein de la phase matrice. L'équation en contrainte nominale à résoudre, dont l'inconnue principale reste le gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 , présente

quant à elle la même forme générique que lors des travaux antérieurs de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008]. Une approche complémentaire inspirée de celle proposée par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006], mais dont le positionnement dans la démarche de résolution globale (numérique en transformations finies) diffère, a été proposée pour établir une relation de dépendance entre les contributions des défauts ouverts et le chargement macroscopique. Alors qu'en H.P.P., l'inconnue principale \mathbf{f}^0 était déterminé analytiquement en amont de l'approche complémentaire, toutes les équations doivent être résolues numériquement et simultanément dans le cadre des transformations finies.

Un critère de nucléation de défauts a été formulé, en analogie aux travaux de Dartois *et al.* [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013], de manière à prendre en compte l'apparition de nouveaux défauts d'interfaces au sein d'une microstructure. Construit pour une décohésion en mode normal du fait de l'hypothèse de coefficient de frottement infini proposée par Nadot *et al.* [Nadot *et al.* 2006] ici reconduite, sa généralisation au contexte des transformations finies oblige à considérer la normale actuelle à l'interface particules / matrice, et non plus la normale initiale.

Pour terminer, nous avons détaillé la mise en œuvre numérique de l'ensemble des développements précédents, c'est-à-dire de l'A.M. dans sa version en transformations finies couplée avec l'endommagement. Nous avons choisi un algorithme de Newton-Raphson, dont le taux de convergence est rapide, pour résoudre le système d'équations fortement non-linéaire correspondant. La matrice tangente associée au problème traité a été formulée de manière analytique, afin d'être calculée de manière exacte lors du processus de résolution. Les développements ont été poussés le plus loin possible, même si un terme ne nous a pas permis d'obtenir l'expression complète de cette matrice tangente dans le cas endommagé. Malgré cela, le calcul analytique de la matrice tangente est une nouveauté dans l'approche de résolution de l'A.M., qui utilisait dans le cas sain [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] un algorithme préalablement implanté au sein du logiciel Mathematica® pour estimer la matrice tangente.

L'architecture générale de l'algorithme de résolution destiné à simuler la réponse du composite depuis l'état sain jusqu'à la nucléation progressive des défauts en cours de chargement a été mise en place. L'ensemble de l'implémentation numérique réalisé en langage Python® a été présenté. Les programmes développés permettent notamment un remplissage dynamique de la matrice tangente dont la taille s'auto-adaptait au nombre croissant de couches avec des défauts ouverts à leurs interfaces. La mise en œuvre de l'algorithme de Newton-Raphson a été rendue possible par une écriture matricielle de cette matrice tangente.

Dans une dernière partie, les développements et programmes associés ont été partiellement validés au travers de simulations de difficultés progressives. Dans un premier temps, nous avons considéré le cas d'un composite sain en désactivant le critère de nucléation. Les simulations ont été effectuées pour un comportement local de type Néo-Hooke (avec découplage distorsion-volume) sur des microstructures périodiques simples puis sur une microstructure périodique plus complexe générée par Touboul [Touboul 2007]. Les résultats aux deux échelles ont été comparés avec succès à ceux obtenus par les programmes Mathematica® de Touboul *et al.* [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008] adaptés au comportement de Néo-Hooke considéré. Le calcul de la matrice tangente dans le cas sain ainsi que la programmation de l'algorithme de Newton-Raphson peuvent ainsi être

validés.

Puis, nous avons activé le critère de nucléation de défauts étendu au cadre des transformations finies. Une étude sur l’instant de première nucléation, au sein de microstructures périodiques simples puis sur la microstructure périodique complexe de Touboul, a fourni une première démonstration des aptitudes de l’A.M. à restituer des effets de taille de particule ou encore d’interaction entre particules dans le cadre des transformations finies, plus proche de la réalité que le cadre géométriquement linéaire envisagé dans le chapitre III. Le très bon agrément entre les estimations de l’A.M. et les solutions de référence en champs complets mis préalablement en relief par Touboul *et al.* pour le matériau sain (c’est-à-dire avant le seuil) nous permet d’être confiants quant à la validité des résultats obtenus. Ces derniers constituent donc une étape supplémentaire franchie dans la validation de l’A.M.

Des perspectives ont été proposées quant à l’introduction d’équations supplémentaires afin de rendre le système complet exploitable en évaluant le terme qui n’avait pas pu être exprimé au cours de la première étude de la matrice tangente. Ce verrou doit être levé avant toute autre chose, afin de pouvoir poursuivre la résolution du problème non-linéaire après l’apparition des premiers défauts.

Il sera ensuite possible de considérer l’introduction d’un critère de fermeture de défauts s’inscrivant dans le prolongement des travaux antérieurs en H.P.P. [Dartois 2008, Dartois *et al.* 2013], afin de considérer la fermeture des défauts d’interfaces préalablement ouverts. Ceci permettra de simuler des chargements complexes, incluant des cycles, et autorisant la présence simultanée de plusieurs populations de défauts (ouverts, fermés) dont l’état pourra évoluer en tant qu’une succession d’évènements au cours du chargement appliqué.

Nous proposons ensuite l’exploitation et le développement d’une campagne de caractérisation expérimentale déjà initiée au Centre d’Études de Gramat ². Des mesures de champs cinématiques 3-D *in situ* pourraient permettre d’obtenir des données quantitatives afin d’identifier le seuil critique d_{critique} impliqué dans le critère de nucléation et relié aux propriétés d’adhésion entre la matrice et les particules. Enfin, la réponse homogénéisée estimée pourra être confrontée à la réponse expérimentale et le champ de déformation local aux mesures de champs précitées. La position réelle des défauts au sein du matériau pourra également être confrontée à celle prévue par l’A.M., mais également leur chronologie d’apparition.

À plus long terme, nous pourrions également exploiter la nouvelle configuration d’endommagement introduite lors des développements cinématiques, la “configuration simple”, qui présente un potentiel d’ouverture important pour l’A.M. Enfin, nous pourrions reconsidérer l’hypothèse de coefficient frottement infini au niveau des défauts fermés : la prise en compte d’un glissement avec frottement permettra d’envisager une nucléation de défauts en mode mixte et non simplement en ouverture. Cette amélioration de l’A.M. permettra de considérer un processus dissipatif supplémentaire, et ainsi d’élargir le champ d’investigation des multiples sources d’échauffement au sein du matériau pouvant accroître sa vulnérabilité.

2. A. Fanget, Commissariat à l’Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, Centre d’Études de Gramat, Gramat, France.

ANNEXE

A

L'HOMOGENÉISATION PAR LES
MÉTHODES DE MOYENNE :
PRINCIPE DE BASE

Cette annexe s'attache à présenter les bases principales des méthodes d'homogénéisation dites "de moyenne" (voir par exemple [Bornert *et al.* 2001]). Ces techniques cherchent à prendre en compte au mieux la morphologie du matériau ainsi que les interactions entre ses constituants, pour finalement fournir le comportement effectif du matériau.

Choix de l'échelle de description

Le choix de l'échelle de description dépend des propriétés à estimer. C'est l'objectif visé qui va permettre de connaître la dimension pertinente d'hétérogénéité à prendre en compte. Cette dimension ne devra pas être inutilement plus faible que nécessaire pour traduire les effets à évaluer, et l'échelle ne devra pas être trop fine de manière à ce que les outils de la mécanique des milieux continus restent applicables. Par ailleurs, cette taille caractéristique ne pourra pas être trop élevée, afin de prendre en compte toutes les interactions et tous les éléments de la microstructure responsables des propriétés macroscopiques recherchées.

Le raisonnement adopté doit être ajusté à chaque situation. Il s'agit d'évaluer la taille caractéristique des hétérogénéités structurales, notée d , permettant de décrire correctement les propriétés recherchées. La solution doit faire l'objet d'un compromis issu de choix pertinents.

Les hétérogénéités seront par la suite considérées comme homogènes même si elle sont constituées d'hétérogénéités à une échelle inférieure (précipités, atomes, *etc.*).

Choix d'un Volume Élémentaire Représentatif

Il est ensuite nécessaire de définir une seconde dimension caractéristique, notée l , qui caractérise le volume à partir duquel le comportement macroscopique va être calculé. Pour un milieu "désordonné", par opposition aux milieux périodiques, le domaine de taille caractéristique l doit vérifier une condition de séparation des échelles avec les tailles caractéristiques d des hétérogénéités prises en compte et L de la structure ou de l'échantillon considéré (figure A.1), soit :

$$d \ll l \ll L \quad (\text{A.1})$$

S'il vérifie la condition (A.1), le domaine de taille l constitue un Volume Élémentaire Représentatif (V.E.R.) du matériau hétérogène considéré. L'inégalité $l \ll L$ permet de traiter l'échantillon comme un milieu macroscopiquement continu. L'autre inégalité, $d \ll l$, assure la macrohomogénéité au sens de Hill-Mandel [Mandel 1964, Hill 1967]. Il s'agit d'une condition nécessaire pour pouvoir affecter à chaque point macroscopique de l'échantillon un comportement homogène (figure A.1), en l'occurrence le comportement global du V.E.R. En effet, si l n'était pas suffisamment grand par rapport aux dimensions des hétérogénéités, le comportement global du V.E.R. dépendrait trop de la constitution interne des particules et serait trop fluctuant d'une particule à l'autre. Dans le respect de la condition $d \ll l$, le milieu hétérogène réel constitutif de l'échantillon peut donc être remplacé par un Milieu Homogène Équivalent (M.H.E.).

Pour un milieu de morphologie donnée, les dimensions d'un V.E.R. dépendent de la propriété / réponse à estimer, de la nature du comportement des constituants (linéaire, non-linéaire), du type de non-linéarité et du contraste de propriétés entre les constituants. En général, il n'y a pas coïncidence entre le V.E.R. dit "morphologique", c'est-à-dire statistiquement représentatif de

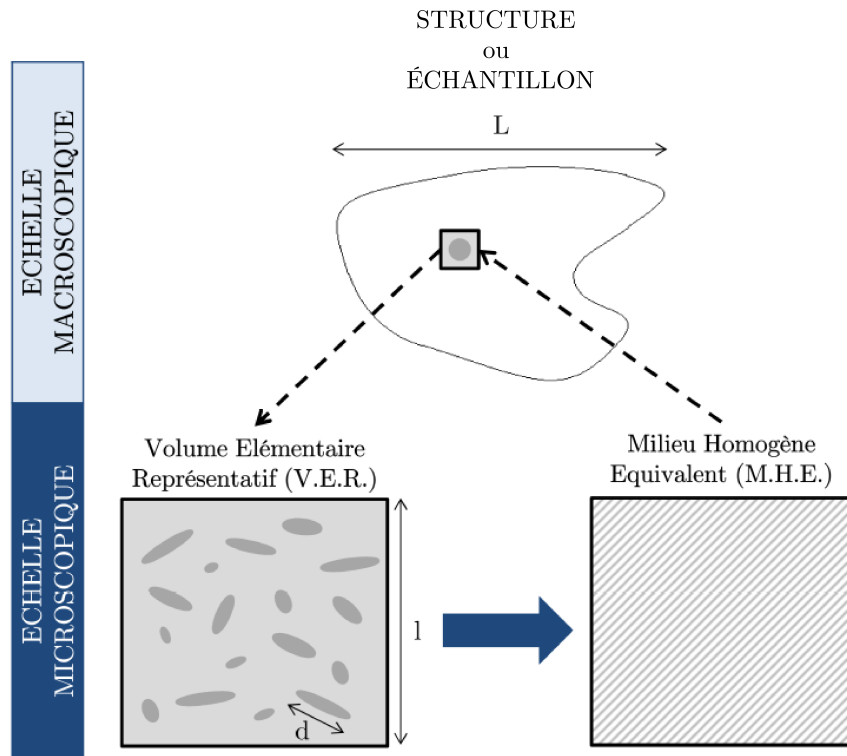


Figure A.1 – Principe de séparation des échelles et notions de base pour un milieu hétérogène macroscopiquement homogène.

la morphologie du matériau, et un V.E.R. dit “mécanique” (sauf dans le cas d’un milieu périodique soumis à des conditions aux limites périodiques). Les critères de définition du V.E.R. pour des milieux non périodiques font continuellement l’objet de travaux [Forest *et al.* 2002, Kanit *et al.* 2003, Pelissou *et al.* 2009, Salmi *et al.* 2012]. Au fur et à mesure du temps, les études en champs complets ont notamment permis d’affiner la notion de V.E.R. De nos jours, l’approche classique, considérant le V.E.R. atteint à la stabilité de la propriété recherchée vis-à-vis de la taille de volume, est supplantée par les approches statistiques. Ces dernières reposent sur une définition élargie du V.E.R. Pour un milieu donné (c’est-à-dire pour une structure morphologique et un comportement local fixés), le V.E.R. n’est pas unique. Sa taille peut être associée à une précision souhaitée sur l’estimation, et au nombre de réalisations considérées d’un volume de taille donnée.

Représentation

Une fois l’échelle de description et un V.E.R. choisis, il est nécessaire de décrire le mieux possible le comportement mécanique des différents constituants, d’identifier les paramètres géométriques caractéristiques influençant le comportement macroscopique (concentration, répartition, morphologie, taille des hétérogénéités, *etc.*) et de trouver le moyen d’en tenir compte. Cette étape couple donc une modélisation mécanique à une schématisation de la microstructure. Très souvent, la phase de description géométrique fait appel à une approche statistique. Une description déterministe du V.E.R. est généralement impossible (sauf dans le cadre des approches en champs complets ou lorsqu’il s’agit de milieux périodiques où le volume à considérer est la cellule de base). Pour les milieux aléatoires, des hypothèses sont formulées pour remplacer les informations manquantes à la

description de la microstructure. Ceci mène à des encadrements ou encore à des estimations des caractéristiques homogénéisées du milieu considéré.

Localisation

Le comportement du V.E.R. choisi doit être équivalent en moyenne au comportement du point matériel qu'il représente au sens de l'échantillon ou de la structure considéré. Les sollicitations subies par ce V.E.R. correspondent donc aux grandeurs mécaniques macroscopiques relevées au point considéré (contraintes, déformations, ...). L'étape de localisation consiste à déterminer les champs locaux, à partir d'un état macroscopique donné. Le problème de localisation suivant écrit sous l'hypothèse des petites perturbations (H.P.P.) doit donc être résolu :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Lois de comportement locales} \\ \text{Équilibre : } \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \vec{0} \\ \text{Compatibilité cinématique : } \boldsymbol{\epsilon} = \nabla_{\text{sym}} \vec{u} \\ \text{Relations de moyenne : } \left\{ \begin{array}{l} \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{|V|} = \mathbf{E} \\ \text{ou } \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{|V|} = \boldsymbol{\Sigma} \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (\text{A.2})$$

où : $\boldsymbol{\sigma}$ est la contrainte à l'échelle locale ;

$\boldsymbol{\epsilon}$ est la déformation à l'échelle locale ;

\vec{u} est le champ de déplacement à l'échelle locale ;

$\boldsymbol{\Sigma}$ est la contrainte à l'échelle macroscopique ;

\mathbf{E} est la déformation à l'échelle macroscopique.

L'équation (A.2)₄ s'applique suivant que l'on travaille en déformation ou en contrainte moyenne imposée.

La formulation du problème (A.2) est incomplète sans l'adjonction de conditions aux limites adéquates, qui doivent vérifier plusieurs conditions :

- (i) respecter le principe de Hill-Mandel énoncé ci-après ;
- (ii) assurer l'existence et l'unicité de la solution au problème (A.2) auquel sont rajoutées les conditions aux limites.

Principe de macrohomogénéité de Hill-Mandel : Pour tout champ de contrainte statiquement admissible avec $\boldsymbol{\Sigma}$ et tout champ de déformation cinématiquement admissible avec \mathbf{E} non nécessairement associé :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{|V|} = \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{E} \quad (\text{A.3})$$

Plusieurs types de conditions aux limites peuvent être considérées :

- Les conditions en contraintes homogènes au contour, imposant : $\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{n} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \vec{n}$ sur ∂V dont la normale extérieure est \vec{n} . La démonstration de l'équation (A.2)₄, $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{|V|} = \boldsymbol{\Sigma}$ est

alors immédiate.

- Les conditions en déformations homogènes au contour, imposant : $\vec{u} = \mathbf{E} \cdot \vec{y}$ sur ∂V . La démonstration de l'équation (A.2)₄, $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{|V|} = \mathbf{E}$ est alors immédiate.
- Les conditions aux limites périodiques cinématiques telles que : $\vec{u} - \mathbf{E} \cdot \vec{y}$ est périodique sur ∂V et $\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{n}$ est anti-périodique sur ∂V . La démonstration de l'équation (A.2)₄ est alors immédiate.

Les conditions périodiques, qui sont les conditions naturelles aux frontières de la cellule de base d'un milieu périodique, sont également très souvent appliquées pour les milieux désordonnés.

Que le milieu soit périodique ou désordonné, les conditions aux limites homogènes au contour ne sont justifiées que si la taille du volume vérifie bien la condition de séparation d'échelles $d \ll l$ (A.1). Alors, $(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\Sigma}) \cdot \vec{n}$ ou $\vec{u} - \mathbf{E} \cdot \vec{y}$ fluctuent sur ∂V autour de valeurs moyennes nulles et avec une longueur d'onde petite par rapport à la taille caractéristique l . Les effets de ces fluctuations peuvent être négligés dans la majeure partie du volume et n'influencent donc plus les grandeurs moyennes. Pour les mêmes raisons, une claire séparation d'échelle doit être respectée pour un milieu désordonné avec des conditions aux limites périodiques. L'influence des conditions aux limites en élasticité a par exemple été étudiée dans les travaux de Michel *et al.* [Michel *et al.* 1999] pour un composite périodique et ceux de Kanit *et al.* [Kanit *et al.* 2003, Kanit *et al.* 2006] pour un milieu aléatoire. Ces travaux montrent que les conditions aux limites périodiques sont les plus avantageuses. En effet, la stabilité d'une propriété effective donnée (moyenne sur plusieurs réalisations dans le cas aléatoire) est atteinte pour une taille de volume plus petite avec des conditions de ce type. Le V.E.R. qualifié de "déterministe" (lorsqu'il existe) est donc plus petit. Pour une taille de volume donnée inférieure à celle du V.E.R. "déterministe", l'erreur commise sur l'estimation de la grandeur recherchée est toujours plus petite avec des conditions aux limites périodiques. Pour une précision donnée, la taille du volume à utiliser pour atteindre la précision souhaitée est également plus petite.

Homogénéisation

Les étapes qui précèdent s'appuient sur deux types de relations entre les grandeurs locales et globales :

- les relations de moyenne (relations de passage micro-macro), dont le champ d'application reste général ;
- les relations de localisation (relations de passage macro-micro), issues de modélisations spécifiques.

La dernière étape, l'homogénéisation, permet d'estimer le comportement du milieu homogène équivalent. L'association des lois de comportement locales avec les relations précitées permet de déboucher sur l'évaluation des grandeurs effectives décrivant le comportement global du V.E.R.

ANNEXE

B

CINÉMATIQUE D'UNE COUCHE α
EN FONCTION DE L'ÉTAT
DE SES INTERFACES

L'objectif de cette annexe est d'établir les expressions du champ de déplacement \vec{u}^α et simultanément le gradient de déplacement \mathbf{h}^α d'une couche α en fonction de la configuration de ses interfaces. Il s'agit donc de réexaminer chacune des étapes de la méthodologie originale de Christoffersen non seulement dans le cadre des transformations finies mais aussi en présence d'une décohésion sur une ou deux interfaces. Pour fixer les idées, nous commençons par rappeler les étapes originales dans le cas où les deux interfaces sont saines et qui ont conduit à l'expression (II.3) dans le cas du matériau sain [Touboul 2007, Nadot-Martin *et al.* 2008].

Dans tous les développements, la première interface considérée est I_1^α . Puis, la configuration de l'interface opposée, notée I_2^α , est envisagée.

Les deux interfaces sont saines

Considérons l'interface I_1^α de la couche α observée. Cette interface ne présente pas de défaut. Nous recherchons le champ de déplacement de la couche α en écrivant la continuité du champ de déplacement à travers l'interface, soit :

$$u_1^\alpha(\vec{Y}^{AB}) = u_1^{GA}(\vec{Y}^{AB}) \quad \forall AB \in I_1^\alpha \quad (\text{B.1})$$

En reportant (B.1) dans (IV.3), où \vec{u}^{GA} est exprimé en utilisant (IV.2)₁, le champ de déplacement d'une couche α vient :

$$u_1^\alpha(\vec{Y}) = u_1^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + (h^0 - h^\alpha)_{IJ} Y_J^{AB} + h_{IJ}^\alpha Y_J \quad (\text{B.2})$$

Cette expression devant être indépendante du choix du point AB de l'interface I_1^α , la condition suivante apparaît :

$$(h^0 - h^\alpha)_{IJ} m_J^\alpha = 0 \quad (\text{B.3})$$

et doit être vérifiée quel que soit le vecteur tangent \vec{m}^α à l'interface I_1^α . Il s'ensuit la forme du gradient de déplacement de la couche α :

$$h_{IJ}^\alpha = h_{IJ}^0 + g_I^\alpha n_J^\alpha \quad (\text{B.4})$$

où : \vec{g}^α est un vecteur homogène.

Avec (B.4), la forme (B.2) du champ \vec{u}^α devient indépendante du point AB de l'interface I_1^α et s'écrit :

$$u_1^\alpha(\vec{Y}) = u_1^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J + g_I^\alpha z^{AB} \quad (\text{B.5})$$

où : $z^{AB} = \vec{n}^\alpha \cdot (\vec{Y} - \vec{Y}^{AB})$ est la distance du point considéré à l'interface I_1^α (selon la normale à l'interface).

Considérons que l'interface I_2^α est une interface saine. Le vecteur homogène \vec{g}^α est déterminé de manière à satisfaire la condition de continuité du champ de déplacement au travers de cette

interface, soit : $u_I^\alpha(\vec{Y}^{BA}) = u_I^{GB}(\vec{Y}^{BA}) \quad \forall BA \in I_2^\alpha$, où \vec{u}^α est donné par l'équation (B.5) et \vec{u}^{GB} est donné par l'équation (IV.2)₂. Dans ce cas, le vecteur \vec{g}^α s'écrit :

$$g_I^\alpha = \frac{1}{h^\alpha} [(H - h^0)_{IJ} d_J^\alpha] \quad (B.6)$$

La forme (B.6) est indépendante du choix du point BA de l'interface I_2^α . La condition de continuité est donc vérifiée quel que soit ce point BA.

Finalement, l'insertion de (B.6) dans (B.4) et (B.5) fournit les expressions du gradient de déplacement \mathbf{h}^α et du champ de déplacement \vec{u}^α de la couche α . \mathbf{h}^α est donné par :

$$h_{IJ}^\alpha = f_{IJ}^0 + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} \quad (B.7)$$

De même, \vec{u}^α s'écrit :

$$u_I^\alpha(\vec{Y}) = u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} (Y - Y^{AB})_J \quad (B.8)$$

La première interface est saine et la seconde interface comporte un défaut

Considérons l'interface I_1^α de la couche α observée. Cette interface ne présente pas de défaut. Le raisonnement et les équations (B.1) à (B.5) résultantes sont identiques.

Conformément au principe de la méthodologie originale, le vecteur homogène \vec{g}^α est déterminé en considérant la configuration de l'interface opposée. Nous considérons ici que cette seconde interface comporte un défaut.

La présence d'un défaut est décrite par un vecteur de discontinuité de déplacement linéaire des coordonnées spatiales le long de l'interface I_2^α , considéré comme une donnée du problème local et noté $\vec{b}^{\alpha 2}$:

$$b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^{BA}) = H_{IJ}^{\alpha D 2} Y_J^{BA} \quad (B.9)$$

où : le tenseur $\mathbf{H}^{\alpha D 2}$ est un gradient de déplacement homogène caractérisant le défaut d'interface ;

BA est un point quelconque de l'interface I_2^α .

Le vecteur homogène \vec{g}^α est alors recherché de manière à satisfaire la condition de saut de déplacement le long de l'interface I_2^α , soit :

$$u_I^\alpha(\vec{Y}^{BA}) = u_I^{GB}(\vec{Y}^{BA}) + b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^{BA}) \quad \forall BA \in I_2^\alpha \quad (B.10)$$

où : $\vec{b}^{\alpha 2}$ est donné par l'équation (B.9) ;

\vec{u}^α est donné par l'équation (B.5) ;

\vec{u}^{GB} est donné par l'équation (IV.2)₂.

Le vecteur \vec{g}^α s'écrit alors :

$$g_I^\alpha = \frac{1}{h^\alpha} [(H - h^0)_{IJ} d_J^\alpha + H_{IJ}^{\alpha D2} Y_J^{\text{BA}}] \quad (\text{B.11})$$

La condition de saut devant être satisfaite quel que soit le point BA de I_2^α , (B.11) doit être indépendante du choix de ce point BA. Ceci mène à la condition :

$$H_{IJ}^{\alpha D2} m_J'^\alpha = 0 \quad (\text{B.12})$$

qui doit être vérifiée quel que soit le vecteur tangent \vec{m}'^α à l'interface I_2^α . Le gradient de déplacement $\mathbf{H}^{\alpha D2}$ peut donc s'écrire sous la forme :

$$H_{IJ}^{\alpha D2} = -v_I^\alpha n_J^\alpha \quad (\text{B.13})$$

où : \vec{v}^α est un vecteur homogène.

Avec (B.13), la forme (B.11) de \vec{g}^α devient indépendante du point BA choisi sur l'interface I_2^α et s'écrit :

$$g_I^\alpha = \frac{1}{h^\alpha} [(H - h^0)_{IJ} d_J^\alpha - v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^{\text{BA}}] \quad (\text{B.14})$$

De plus, compte-tenu de (B.13), le saut de déplacement (B.9) au niveau de l'interface I_2^α s'écrit de la manière suivante :

$$b_I^{\alpha 2} (\vec{Y}^{\text{BA}}) = -v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^{\text{BA}} \quad (\text{B.15})$$

La grandeur $n_J^\alpha Y_J^{\text{BA}}$ étant constante quel que soit le point BA de l'interface I_2^α et \vec{v}^α étant homogène, le saut sur la seconde interface I_2^α est obtenu constant lorsque la première interface I_1^α est saine.

Finalement, l'insertion de (B.14) dans (B.4) et (B.5) fournit les expressions du gradient de déplacement \mathbf{h}^α et du champ de déplacement \vec{u}^α de la couche α . \mathbf{h}^α est donné par :

$$h_{IJ}^\alpha = f_{IJ}^0 + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} - v_I^\alpha n_J^\alpha \frac{(Y_K^{\text{BA}} n_K^\alpha)}{h^\alpha} \quad (\text{B.16})$$

De même, \vec{u}^α s'écrit :

$$\begin{aligned} u_I^\alpha (\vec{Y}) &= u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} (Y - Y^{\text{AB}})_J \\ &- v_I^\alpha n_J^\alpha \frac{(Y_K^{\text{BA}} n_K^\alpha)}{h^\alpha} (Y - Y^{\text{AB}})_J \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

La première interface comporte un défaut et la seconde interface est saine

Considérons l'interface I_1^α de la couche α observée. La présence d'un défaut est décrite par un vecteur de discontinuité de déplacement linéaire des coordonnées spatiales le long de I_1^α noté $\vec{b}^{\alpha 1}$, considéré comme une donnée du problème local, soit :

$$b_I^{\alpha 1}(\vec{Y}^{AB}) = H_{IJ}^{\alpha D1} Y_J^{AB} \quad (\text{B.18})$$

où : le tenseur $\mathbf{H}^{\alpha D1}$ est un gradient de déplacement homogène caractérisant le défaut d'interface ;

AB est un point quelconque de l'interface I_1^α .

Nous recherchons donc le champ de déplacement d'une couche α de sorte à satisfaire la condition de saut de déplacement sur l'interface I_1^α , soit :

$$u_I^\alpha(\vec{Y}^{AB}) = u_I^{GA}(\vec{Y}^{AB}) + b_I^{\alpha 1}(\vec{Y}^{AB}) \quad \forall AB \in I_1^\alpha \quad (\text{B.19})$$

En reportant (B.19) dans (IV.3), avec \vec{u}^{GA} et $\vec{b}^{\alpha 1}$ exprimés en utilisant respectivement (IV.2)₁ et (B.18), nous obtenons finalement le champ de déplacement d'une couche α :

$$u_I^\alpha(\vec{Y}) = u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + (h^0 - h^\alpha)_{IJ} Y_J^{AB} + h_{IJ}^\alpha Y_J + H_{IJ}^{\alpha D1} Y_J^{AB} \quad (\text{B.20})$$

Cette expression devant être indépendante du choix du point AB de l'interface I_1^α , la condition suivante apparaît :

$$(h^0 - h^\alpha + H^{\alpha D1})_{IJ} m_J^\alpha = 0 \quad (\text{B.21})$$

qui doit être vérifiée quel que soit le vecteur tangent \vec{m}^α à l'interface I_1^α . Nous en déduisons la forme du gradient de déplacement de la couche α :

$$h_{IJ}^\alpha = h_{IJ}^0 + H_{IJ}^{\alpha D1} + g_I^\alpha n_J^\alpha \quad (\text{B.22})$$

où : \vec{g}^α est un vecteur homogène.

Avec (B.22), la forme (B.20) du champ de déplacement \vec{u}^α devient indépendante du point AB de l'interface I_1^α et s'écrit :

$$u_I^\alpha(\vec{Y}) = u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J + g_I^\alpha z^{AB} + H_{IJ}^{\alpha D1} Y_J \quad (\text{B.23})$$

où : $z^{AB} = \vec{n}^\alpha \cdot (\vec{Y} - \vec{Y}^{AB})$ est la distance du point considéré à l'interface I_1^α (selon la normale à l'interface).

Le vecteur homogène \vec{g}^α est là encore déterminé en considérant la configuration de l'interface I_2^α .

Considérons qu'il s'agit d'une interface saine. Le vecteur homogène \vec{g}^α est alors recherché de manière à satisfaire la condition de continuité du champ de déplacement au travers de cette interface, soit : $u_i^\alpha(\vec{Y}^{BA}) = u_i^{GB}(\vec{Y}^{BA}) \quad \forall BA \in I_2^\alpha$, où \vec{u}^α est donné par l'équation (B.23) et \vec{u}^{GB} est donné par l'équation (IV.2)₂. Dans ce cas, le vecteur \vec{g}^α s'écrit :

$$g_i^\alpha = \frac{1}{h^\alpha} [(H - h^0)_{IJ} d_J^\alpha - H_{IJ}^{\alpha D1} Y_J^{BA}] \quad (B.24)$$

La condition de continuité devant être satisfaite quel que soit le point BA de I_2^α , (B.24) doit être indépendante du choix de ce point BA, ce qui mène à la condition :

$$H_{IJ}^{\alpha D1} m'_J{}^\alpha = 0 \quad (B.25)$$

qui doit être vérifiée quel que soit le vecteur tangent \vec{m}'^α à l'interface I_2^α . Le gradient de déplacement $H^{\alpha D1}$ peut donc s'écrire sous la forme :

$$H_{IJ}^{\alpha D1} = -v_I^\alpha n_J^\alpha \quad (B.26)$$

où : \vec{v}^α est un vecteur homogène.

Avec (B.26), la forme (B.24) du vecteur \vec{g}^α devient indépendante du point BA de l'interface I_2^α et s'écrit :

$$g_i^\alpha = \frac{1}{h^\alpha} [(H - h^0)_{IJ} d_J^\alpha + v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^{BA}] \quad (B.27)$$

De plus, compte-tenu de (B.26), le saut de déplacement (B.18) au niveau de la première interface I_1^α s'écrit de la manière suivante :

$$b_i^{\alpha 1}(\vec{Y}^{AB}) = -v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^{AB} \quad (B.28)$$

La distance $n_J^\alpha Y_J^{AB}$ étant constante quel que soit le point AB de l'interface I_1^α et \vec{v}^α étant homogène, le saut sur la première interface est obtenu constant lorsque la seconde interface I_2^α est saine.

Finalement, l'insertion de (B.27) dans (B.22) et (B.23) fournit les expressions du gradient de déplacement \mathbf{h}^α et du champ de déplacement \vec{u}^α de la couche α . \mathbf{h}^α est donné par :

$$h_{IJ}^\alpha = h_{IJ}^0 + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} + v_I^\alpha n_J^\alpha \left[\frac{(Y_K^{BA} n_K^\alpha)}{h^\alpha} - 1 \right] \quad (B.29)$$

La distance $Y_J^{BA} n_J^\alpha$ étant elle aussi constante quel que soit le point BA de l'interface I_2^α , nous pouvons écrire : $\frac{(Y_K^{BA} n_K^\alpha)}{h^\alpha} - 1 = \frac{(Y_K^{AB} n_K^\alpha)}{h^\alpha} \quad \forall AB \in I_1^\alpha, \forall BA \in I_2^\alpha$. Le gradient de déplacement \mathbf{h}^α s'exprime finalement :

$$h_{IJ}^\alpha = f_{IJ}^0 + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} + v_I^\alpha n_J^\alpha \frac{(Y_K^{AB} n_K^\alpha)}{h^\alpha} \quad (B.30)$$

De même, \vec{u}^α s'écrit :

$$\begin{aligned} u_I^\alpha(\vec{Y}) &= u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} (Y - Y^{AB})_J \\ &+ v_I^\alpha n_J^\alpha \frac{(Y_K^{AB} n_K^\alpha)}{h^\alpha} (Y - Y^{BA})_J \end{aligned} \quad (B.31)$$

La première et la seconde interfaces comportent un défaut

Considérons l'interface I_1^α de la couche α . Celle-ci comporte un défaut. Les équations (B.18) à (B.23) permettent de traiter la condition de saut au niveau de cette interface.

Considérons à présent que l'interface I_2^α est une interface présentant un défaut. De même que pour la première interface, la présence d'un défaut sur l'interface I_2^α est décrite par un vecteur de discontinuité de déplacement linéaire, donnée du problème local :

$$b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^{BA}) = H_{IJ}^{\alpha D2} Y_J^{BA} \quad (B.32)$$

où : le tenseur $\mathbf{H}^{\alpha D2}$ est un gradient de déplacement homogène caractérisant le défaut sur l'interface I_2^α . $\mathbf{H}^{\alpha D2}$ peut *a priori* être différent de $\mathbf{H}^{\alpha D1}$ caractérisant le défaut sur l'interface I_1^α ;

BA est un point quelconque sur l'interface I_2^α .

Le vecteur homogène \vec{g}^α de l'équation (B.22) est alors recherché de manière à satisfaire la condition de saut de déplacement sur l'interface I_2^α , soit :

$$u_I^\alpha(\vec{Y}^{BA}) = u_I^{GB}(\vec{Y}^{BA}) + b_I^{\alpha 2}(\vec{Y}^{BA}) \quad \forall BA \in I_2^\alpha \quad (B.33)$$

où : $\vec{b}^{\alpha 2}$ est donné par l'équation (B.32) ;

\vec{u}^α est donné par l'équation (B.23) ;

\vec{u}^{GB} est donné par l'équation (IV.2)₂.

Le vecteur \vec{g}^α s'écrit alors :

$$g_I^\alpha = \frac{1}{h^\alpha} [(H - h^0)_{IJ} d_J^\alpha + (H^{\alpha D2} - H^{\alpha D1})_{IJ} Y_J^{BA}] \quad (B.34)$$

La condition de saut devant être satisfaite quel que soit le point BA de l'interface I_2^α , (B.34) doit être indépendante du choix de ce point BA. Ceci mène à la condition :

$$(H_{IJ}^{\alpha D2} - H_{IJ}^{\alpha D1}) m_J'^\alpha = 0 \quad (B.35)$$

qui doit être vérifiée quel que soit le vecteur tangent \vec{m}'^α à l'interface I_2^α . Le gradient de déplacement $\mathbf{H}^{\alpha D2}$ peut donc s'écrire sous la forme :

$$H_{IJ}^{\alpha D2} = H_{IJ}^{\alpha D1} - v_I^\alpha n_J^\alpha \quad (B.36)$$

où : \vec{v}^α est un vecteur homogène.

Avec (B.36), la forme (B.34) devient indépendante du point BA choisi sur l'interface I_2^α et s'écrit :

$$g_I^\alpha = \frac{1}{h^\alpha} [(H - h^0)_{IJ} d_J^\alpha - v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^{BA}] \quad (\text{B.37})$$

De plus, compte-tenu de (B.36), le saut de déplacement (B.32) au niveau de l'interface I_2^α s'écrit de la manière suivante :

$$b_I^{\alpha 2} (\vec{Y}^{BA}) = H_{IJ}^{\alpha D1} Y_J^{BA} - v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^{BA} \quad (\text{B.38})$$

La distance $n_J^\alpha Y_J^{BA}$ étant constante quel que soit le point BA de l'interface I_2^α et \vec{v}^α étant homogène, le second terme de (B.38) est constant le long de l'interface I_2^α .

Le tenseur impliqué dans la part linéaire de l'expression de $\vec{b}^{\alpha 2}$ est donc le même que pour $\vec{b}^{\alpha 1}$ au niveau de l'interface I_1^α . Posons : $\mathbf{H}^{\alpha D1} = \mathbf{H}^{\alpha D}$. Les sauts de déplacement au niveau des deux interfaces de la couche deviennent alors :

$$\begin{aligned} b_I^{\alpha 1} (\vec{Y}^{AB}) &= H_{IJ}^{\alpha D} Y_J^{AB} \\ b_I^{\alpha 2} (\vec{Y}^{BA}) &= H_{IJ}^{\alpha D} Y_J^{BA} - v_I^\alpha n_J^\alpha Y_J^{BA} \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Finalement, l'insertion de (B.37) dans (B.22) et (B.23) fournit les expressions du gradient de déplacement \mathbf{h}^α et du champ de déplacement \vec{u}^α de la couche α sous la forme :

$$h_{IJ}^\alpha = f_{IJ}^0 + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} + H_{IJ}^{\alpha D} - v_I^\alpha n_J^\alpha \frac{(Y_K^{BA} n_K^\alpha)}{h^\alpha} \quad (\text{B.40})$$

De même, \vec{u}^α s'écrit :

$$\begin{aligned} u_I^\alpha (\vec{Y}) &= u_I^* + (H - h^0)_{IJ} Y_J^A + h_{IJ}^0 Y_J + (H - h^0)_{IK} \frac{d_K^\alpha n_J^\alpha}{h^\alpha} (Y - Y^{AB})_J \\ &+ H_{IJ}^{\alpha D} Y_J - v_I^\alpha n_J^\alpha \frac{(Y_K^{BA} n_K^\alpha)}{h^\alpha} (Y - Y^{BA})_J \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

Dans (B.41), les grandeurs $\vec{n}^\alpha \cdot (\vec{Y} - \vec{Y}^{AB})$ et $\vec{n}^\alpha \cdot (\vec{Y} - \vec{Y}^{BA})$ correspondent aux distances séparant le point considéré dans la couche des deux interfaces. Elles sont indépendantes du choix des points AB et BA choisis sur ces interfaces.

ANNEXE

C

PRINCIPE DE L'ALGORITHME
DE NEWTON-RAPHSON

Nous considérons un système constitué de N équations non-linéaires à N inconnues x_i $\{i = 1, 2, \dots, N\}$:

$$S_i(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0 \quad \{i = 1, 2, \dots, N\} \quad (\text{C.1})$$

Soit alors \vec{x} le vecteur constitué des valeurs x_i et \vec{S} le vecteur constitué des équations S_i . Au voisinage de \vec{x} , chaque équation S_i peut être développée de la manière suivante :

$$S_i(\vec{x} + \delta\vec{x}) = S_i(\vec{x}) + \sum_{j=1}^N \frac{\partial S_i}{\partial x_j} \delta x_j + O(\delta\vec{x}^2) \quad (\text{C.2})$$

La matrice des dérivées partielles apparaissant dans l'équation (C.2) est la matrice tangente, ou matrice jacobienne, notée \mathbf{M} :

$$M_{ij} = \frac{\partial S_i}{\partial x_j} \quad (\text{C.3})$$

En négligeant les termes d'ordre deux et en supposant que l'incrément $\delta\vec{x}$ permet d'approcher les différentes équations de la valeur nulle simultanément ($\vec{S}(\vec{x} + \delta\vec{x}) = \vec{0}$), le système (C.2) devient un système d'équations linéaires, soit :

$$\mathbf{M} \cdot \delta\vec{x} = -\vec{S} \quad (\text{C.4})$$

L'algorithme de Newton-Raphson est itératif. Pour un incrément donné de chargement, une suite d'itérations est réalisée depuis une valeur initiale \vec{x}_0 . À chaque itération, le système (C.4) est résolu. L'incrément de solution $\delta\vec{x}$ ainsi calculé est appliqué pour obtenir $\vec{x}_{\text{new}} = \delta\vec{x} + \vec{x}_{\text{old}}$. La procédure itérative s'arrête lorsque la convergence est atteinte (valeur acceptable du résidu).

ANNEXE

D

DÉRIVÉES TENSORIELLES

L'objectif de cette annexe est de répertorier les expressions de dérivées utiles à la mise en place de la matrice tangente (paragraphe V.1.2).

Soit \mathbf{A} un tenseur d'ordre 2 hybride. Nous établissons alors les relations suivantes :

$$\frac{\partial A_{iJ}}{\partial A_{mN}} = \delta_{im} \delta_{JN} \quad (\text{D.1})$$

$$\frac{\partial A_{iJ}^2}{\partial A_{mN}} = \delta_{Lk} \left[\frac{\partial A_{iL}}{\partial A_{mN}} A_{kJ} + A_{iL} \frac{\partial A_{kJ}}{\partial A_{mN}} \right] \quad (\text{D.2})$$

$$\frac{\partial {}^t A_{Ji}}{\partial A_{mN}} = \delta_{im} \delta_{JN} \quad (\text{D.3})$$

Soit \mathbf{A} un tenseur d'ordre 2 quelconque. Nous établissons alors les relations suivantes :

$$\frac{\partial \text{tr}(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A}} = \mathbf{Id} \quad (\text{D.4})$$

$$\frac{\partial \text{tr}(\mathbf{A}^2)}{\partial \mathbf{A}} = 2 {}^t \mathbf{A} \quad (\text{D.5})$$

$$\frac{\partial \text{tr}(\mathbf{A}^3)}{\partial \mathbf{A}} = 3 {}^t \mathbf{A}^2 \quad (\text{D.6})$$

Soit \mathbf{f} un gradient de la transformation. La dérivée du tenseur de Cauchy-Green droit, défini par : $\mathbf{c} = {}^t \mathbf{f} \mathbf{f}$, par rapport à \mathbf{f} s'écrit :

$$\frac{\partial \text{tr}(\mathbf{c})}{\partial f_{mN}} = 2 {}^t f_{Nm} \quad (\text{D.7})$$

Le jacobien de la transformation, défini par : $J = \det(\mathbf{f})$, ainsi que l'inverse du gradient de la transformation \mathbf{f}^{-1} peuvent être formulés comme suit :

$$J = \frac{1}{6} \left[(\text{tr}(\mathbf{f}))^3 + 2 \text{tr}(\mathbf{f}^3) - 3 \text{tr}(\mathbf{f}^2) \text{tr}(\mathbf{f}) \right] \quad (\text{D.8})$$

$$f_{ij}^{-1} = \frac{1}{2J} \left\{ \delta_{ij} \left[(\text{tr}(\mathbf{f}))^2 - \text{tr}(\mathbf{f}^2) \right] + 2 \delta_{Lj} \delta_{ki} \left[f_{kL}^2 - \text{tr}(\mathbf{f}) f_{kL} \right] \right\} \quad (\text{D.9})$$

Leurs dérivées respectives par rapport au gradient de la transformation associé \mathbf{f} s'écrit :

$$\frac{\partial J}{\partial f_{mN}} = J f_{Nm}^{-1} \quad (\text{D.10})$$

$$\frac{\partial f_{ij}^{-1}}{\partial f_{mN}} = -\frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial f_{mN}} f_{ij}^{-1} + \frac{1}{2J} \left\{ \begin{array}{l} \delta_{ij} \left[2 \text{tr}(\mathbf{f}) \frac{\partial \text{tr}(\mathbf{f})}{\partial f_{mN}} - \frac{\partial \text{tr}(\mathbf{f}^2)}{\partial f_{mN}} \right] \\ + 2 \delta_{Kj} \delta_{qi} \left[\frac{\partial f_{qK}^2}{\partial f_{mN}} - \frac{\partial \text{tr}(\mathbf{f})}{\partial f_{mN}} f_{qK} - \text{tr}(\mathbf{f}) \frac{\partial f_{qK}}{\partial f_{mN}} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{D.11})$$

Nous rappelons que la contrainte nominale issue d'un comportement de type Néo-Hooke s'écrit :

$$s_{ij}^* = 2 J^{-2/3} C_{10} \left[{}^t f_{ij} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{c}) f_{ij}^{-1} \right] + K J (J - 1) f_{ij}^{-1} \quad (\text{D.12})$$

Sa dérivée par rapport au gradient de la transformation \mathbf{f} associé devient alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial s_{ij}^*}{\partial f_{mN}} &= 2 C_{10} \left\{ \begin{array}{l} -\frac{2}{3} J^{-5/3} \left[{}^t f_{ij} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{c}) f_{ij}^{-1} \right] \frac{\partial J}{\partial f_{mN}} \\ + J^{-2/3} \left[\frac{\partial {}^t f_{ij}}{\partial f_{mN}} - \frac{1}{3} f_{ij}^{-1} \frac{\partial \text{tr}(\mathbf{c})}{\partial f_{mN}} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{c}) \frac{\partial f_{ij}^{-1}}{\partial f_{mN}} \right] \end{array} \right\} \\ &+ K \left\{ (J - 1) \left[f_{ij}^{-1} \frac{\partial J}{\partial f_{mN}} + J \frac{\partial f_{ij}^{-1}}{\partial f_{mN}} \right] + J f_{ij}^{-1} \frac{\partial J}{\partial f_{mN}} \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Pour finir, et en lien plus spécifique avec le problème traité, la dérivée du gradient de la transformation \mathbf{f}^α d'une couche α donné par : $\mathbf{f}^\alpha = \mathbf{f}^0 + (\mathbf{F} - \mathbf{f}^0) \frac{\vec{d}^\alpha \otimes \vec{n}^\alpha}{h^\alpha} + \mathbf{H}^{\alpha D}$, par rapport au gradient de la transformation des particules \mathbf{f}^0 ou au gradient de déplacement $\mathbf{H}^{\alpha D}$ lié à l'influence des défauts aux interfaces d'une couche α sont reportés ci-dessous. Les grandeurs \mathbf{f}^0 et $\mathbf{H}^{\alpha D}$ sont considérées indépendantes les unes des autres.

$$\frac{\partial f_{ij}^\alpha}{\partial f_{mN}^0} = \frac{\partial f_{iK}^0}{\partial f_{mN}^0} \left(\delta_{Kj} - \frac{d_K^\alpha n_j^\alpha}{h^\alpha} \right) \quad (\text{D.14})$$

$$\frac{\partial f_{ij}^\alpha}{\partial H_{MN}^{\alpha D}} = \delta_{iK} \frac{\partial H_{KJ}^{\alpha D}}{\partial H_{MN}^{\alpha D}} \quad (\text{D.15})$$

LISTES DES FIGURES
ET DES TABLEAUX

LISTE DES FIGURES

I.1	Propergol solide observé par microtomographie à rayons X [Gillibert et Jeulin 2013].	13
I.2	Observations au microscope électronique à balayage d'un propergol solide à liant inerte [Azoug 2010].	13
I.3	Essais de traction / compression uniaxiales à vitesses variables sur le liant PBHT d'un propergol "modèle" fabriqué par l'ONERA [Mateille 2010].	14
I.4	Essais de traction uniaxiale sur un propergol à différentes vitesses et températures [Azoug 2010].	14
I.5	Endommagement d'interface au sein de propergols solides.	15
II.1	Chronologie des différentes étapes de construction de l'Approche Morphologique. . .	35
II.2	Illustration de la schématisation géométrique.	36
II.3	Définition d'une couche α avec l'aire projetée A^α	37
II.4	Définition des interfaces d'une couche α	39
II.5	Méthodologie et principe de résolution de l'A.M.	43
II.6	Méthodologie et principe de résolution de l'A.M. en présence d'endommagement (état fixé) dans le cadre H.P.P., d'après Nadot <i>et al.</i> [Nadot <i>et al.</i> 2006].	49
II.7	Schématisme et paramètres utilisés pour définir la nucléation de défauts en H.P.P. [Dartois 2008, Dartois <i>et al.</i> 2013].	50
II.8	Contrainte homogénéisée Σ_{11} en fonction de la déformation macroscopique E_{11} lors de la simulation d'un trajet "traction - glissement simple - compression".	53
II.9	Déformation totale et induites par endommagement (composante 11) dans une couche de matrice dont la normale est orientée suivant la direction 1, en fonction de la déformation macroscopique E_{11} lors de la simulation d'un trajet en extension (phase (i)).	54

III.1	Courbe contraintes - déformations macroscopiques normalisées (solicitation en traction uniaxiale) pour des V.E.R. comportant des particules sphériques de différents rayons a et pour une concentration volumique de particules $f = 10\%$ [Tan <i>et al.</i> 2007].	68
III.2	Observations au microscope électronique à balayage de microstructures pour une déformation de 5 mm [Tao <i>et al.</i> 2013]. (a) Échantillon 1 (59% de particules d'aluminium, 15% de perchlorate d'ammonium); (b) Échantillon 2 (15% de perchlorate d'ammonium, 59% de particules HMX); (c) Échantillon 3 (18% de particules d'aluminium, 5% de particules de perchlorate d'ammonium, 51% de particules HMX). Les pourcentages sont des fractions volumiques.	69
III.3	Effets du taux de charges massique en traction uniaxiale quasi-statique pour trois compositions chargées [Salvia 1981] : (I) 80%, (II) 60%, (III) 40%.	70
III.4	Effet d'interaction entre les inclusions : courbes contrainte-déformation macroscopiques pour des microstructures constituées de quatre particules (taux de charges : 68.4%) [Zhong et Knauss 2000].	71
III.5	Courbe contrainte - déformation (sous pression hydrostatique) pour des V.E.R. comportant de grosses particules et pour différentes concentrations volumiques de particules f [Tan <i>et al.</i> 2005a].	71
III.6	Distribution des contraintes de Von Mises tracée sur le profil déformé du V.E.R. (facteur 10 sur les déplacements) au sein d'une microstructure particulière bimodale sous chargement en déformation équibiaxiale [Inglis <i>et al.</i> 2007].	72
III.7	Microstructure périodique étudiée.	74
III.8	"Motif" représentatif de la microstructure périodique pour l'A.M. et paramètres morphologiques associés (représentation schématique 2-D).	76
III.9	Effet de la taille de particule pour des microstructures périodiques sous chargement "uniaxial". Concentration volumique de matrice : $c_{\text{mat}} = 25\%$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 10 \mu\text{m}$	78
III.10	Effet d'interaction entre les particules pour des microstructures périodiques sous chargement "uniaxial". Taille de particule : $L = 400 \mu\text{m}$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 20 \mu\text{m}$	79
III.11	Étapes de génération d'une microstructure aléatoire monomodale à particules polyédriques.	82
III.12	Exemple d'une microstructure aléatoire monomodale artificielle polyédrisée pour l'A.M. et répartition granulométrique associée. Taux de charges volumique : 75%.	83
III.13	Effet de la taille de particule et effet d'interaction entre les particules pour des microstructures aléatoires monomodales à particules polyédriques. Les valeurs moyennes et intervalles de variation de la déformation macroscopique $E_{11, \text{debonding}}$ correspondant à la première nucléation sont représentées en fonction de la taille de particule L pour trois concentrations volumiques de matrice c_{mat}	84
III.14	Effet de la variation de taille de particule sur le rapport $\frac{\ \vec{d}^\alpha\ }{h^\alpha}$. Taux de charges : 75% ($c_{\text{mat}} = 25\%$).	85
III.15	Étapes de génération d'une microstructure aléatoire bimodale artificielle avant construction des polyèdres.	87

III.16	Illustration de la microstructure aléatoire bimodale artificielle étudiée et répartition granulométrique associée. Une partie de la microstructure (en vert) a été mise en transparence de manière à visualiser différentes tailles de particules au sein du volume.	88
III.17	Illustration des neuf chargements en “extension uniaxiale” appliqués à la microstructure bimodale. En violet : extension ; en vert : contraction dans les directions transverses.	89
III.18	Répartition granulométrique de la microstructure aléatoire bimodale et influence de la taille de particule sur la chronologie de décohésion.	90
III.19	Définition de l’angle θ entre la direction d’extension et la normale unitaire \vec{n}^α d’une couche fixée α .	91
III.20	Influence de l’orientation sur la chronologie de décohésion pour la microstructure bimodale. θ est l’angle entre la direction de chargement et la normale unitaire d’une couche α . L_{avg}^{SP} et L_{avg}^{LP} sont les dimensions moyennes respectives des petites particules et des grosses particules (figure III.16). L_{lim} est la taille délimitant les deux domaines.	91
IV.1	Schématisation de la microstructure et rappel des paramètres morphologiques à identifier (configuration initiale).	102
IV.2	Méthodologie et principe de résolution de l’A.M. dans le cadre des transformations finies à endommagement fixé.	114
IV.3	Méthodologie et principe de résolution de l’A.M. dans le cadre des transformations finies à endommagement fixé avec procédure complémentaire.	118
IV.4	Définition des vecteurs unitaires $\vec{m}^{\alpha 1}$ et $\vec{m}^{\alpha 2}$ pour le calcul de la normale actuelle.	120
IV.5	Schématisation et paramètres utilisés pour définir la nucléation de défauts (rappel : figure II.7).	121
V.1	Représentation schématique de la procédure générale de résolution numérique.	142
V.2	Formes du système linéaire à résoudre par l’algorithme de Newton-Raphson.	147
V.3	Microstructure périodique simple (rappel : figures III.7 et III.8).	151
V.4	Résultats aux deux échelles estimés par l’A.M. en transformations finies pour la microstructure périodique simple. Programmes Mathematica® de Touboul <i>et al.</i> [Touboul 2007, Nadot-Martin <i>et al.</i> 2008] avec un potentiel de Mooney-Rivlin (Touboul07) _{MR} et avec un potentiel de Néo-Hooke (Touboul07) _{NH} .	152
V.5	Résultats aux deux échelles estimés par l’A.M. en transformations finies pour la microstructure périodique simple avec description du comportement local via un potentiel de Néo-Hooke, avec le programme Mathematica® modifié de Touboul <i>et al.</i> [Touboul 2007, Nadot-Martin <i>et al.</i> 2008] ((Touboul07) _{NH}), le programme implanté en langage Python® avec calcul de la matrice tangente exacte ((Trombini15) _{NH}) et le programme implanté en langage Python® avec estimation de la matrice tangente par différences finies ((Optimize) _{NH}).	154
V.6	Cellule de base du composite périodique “complexe” [Touboul 2007] : (a) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}^1, \vec{e}^2) ; (b) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}^2, \vec{e}^3) ; (c) empreinte des grains dans le plan (\vec{e}^1, \vec{e}^3) ; (d) vue 3-D (dimensions en mm).	155

V.7	Numérotation des particules et des zones intergranulaires sur le niveau 1 de la cellule de base du composite périodique complexe (représentation 2-D) [Touboul 2007].	156
V.8	Résultats aux deux échelles estimés par l'A.M. en transformations finies pour la microstructure périodique complexe. Programmes Mathematica® de Touboul [Touboul 2007] avec un potentiel de Mooney-Rivlin (Touboul07) _{MR} et avec un potentiel de Néo-Hooke (Touboul07) _{NH}	157
V.9	Résultats aux deux échelles estimés par l'A.M. en transformations finies pour la microstructure périodique complexe avec description du comportement local via un potentiel de Néo-Hooke, avec le programme Mathematica® modifié de Touboul <i>et al.</i> [Touboul 2007, Nadot-Martin <i>et al.</i> 2008] ((Touboul07) _{NH}), le programme implanté en langage Python® avec calcul de la matrice tangente exacte ((Trombini15) _{NH}) et le programme implanté en langage Python® avec estimation de la matrice tangente par différences finies ((Optimize) _{NH}).	158
V.10	Effet de la taille de particule pour des microstructures périodiques simples soumises à une traction œdométrique. Concentration volumique de matrice : $c_{\text{mat}} = 25\%$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 10 \mu\text{m}$	160
V.11	Effet d'interaction entre les particules pour des microstructures périodiques simples soumises à une traction œdométrique. Taille de particule : $L = 400 \mu\text{m}$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 20 \mu\text{m}$	161
V.12	Localisation des défauts apparus sur le niveau 2 de la cellule de base du composite périodique complexe suite à une sollicitation en traction œdométrique.	162
A.1	Principe de séparation des échelles et notions de base pour un milieu hétérogène macroscopiquement homogène.	180

LISTE DES TABLEAUX

II.1	Relations essentielles de l'A.M. pour les deux versions exposées : version pour le matériau sain en transformations finies et version en H.P.P. en présence d'un état d'endommagement fixé.	41
II.2	Propriétés élastiques des constituants considérés dans les travaux de Dartois <i>et al.</i> [Dartois 2008, Dartois <i>et al.</i> 2013].	52
III.1	Propriétés mécaniques des constituants pour l'étude des effets de taille et d'interaction entre particules [Dartois 2008, Dartois <i>et al.</i> 2013].	74
III.2	Paramètres morphologiques des microstructures périodiques considérées pour l'étude de l'effet de la taille. Concentration volumique de matrice : $c_{\text{mat}} = 25\%$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 10 \mu\text{m}$	77
III.3	Paramètres morphologiques des microstructures périodiques considérées pour l'étude de l'effet d'interaction entre les particules. Taille de particule : $L = 400 \mu\text{m}$. Épaisseur de la couche de référence : $h^1 = 20 \mu\text{m}$	79
III.4	Concentrations volumiques de matrice c_{mat} et tailles de particule L considérées pour les différentes configurations (c_{mat}, L) étudiées.	83
IV.1	Synthèse des différentes configurations possibles pour une couche α : expressions des sauts de déplacement correspondants et du gradient de déplacement de la couche α	105
V.1	Bilan du nombre d'équations à résoudre et du nombre d'inconnues associées.	137
V.2	Propriétés mécaniques hyperélastiques des constituants avec un potentiel de Mooney-Rivlin, pour les simulations réalisées par Touboul <i>et al.</i> [Touboul 2007, Nadot-Martin <i>et al.</i> 2008] (contraste : $\xi = 10$).	149
V.3	Propriétés mécaniques hyperélastiques des constituants avec un potentiel de Néo-Hooke.	149

V.4	Paramètres morphologiques de la microstructure périodique utilisée par Touboul <i>et al.</i> [Touboul 2007, Nadot-Martin <i>et al.</i> 2008]. Concentration volumique de matrice : $c_{\text{mat}} = 25\%$	150
V.5	Volumes des particules de la microstructure périodique complexe.	163
V.6	Bilan du nombre d'équations à résoudre et du nombre d'inconnues associées en considérant les grandeurs $\left\{ \frac{\partial \mathbf{H}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}} \right\}$ comme des inconnues du problème.	164
V.7	Bilan du nombre d'équations à résoudre et du nombre d'inconnues associées en introduisant une relation liant les grandeurs $\mathbf{H}^{\beta\text{D}}$ et $\frac{\partial \mathbf{H}^{\beta\text{D}}}{\partial \mathbf{F}}$	165

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[Azoug 2010]

AZOUG, A. (2010). *Micromécanismes et comportement macroscopique d'un élastomère fortement chargé*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique.

[Badulescu *et al.* 2015]

BADULESCU, C., LAHELLEC, N. et SUQUET, P. (2015). Field statistics in linear viscoelastic composites and polycrystals. *Eur. J. Mech. - A/Solids*, 49:329–344.

[Berveiller et Zaoui 1979]

BERVEILLER, M. et ZAOUÏ, A. (1979). An extension of the self-consistent scheme to plastically-following polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 26(26):325–344.

[Beurthey et Zaoui 2000]

BEURTHEY, S. et ZAOUÏ, A. (2000). Structural morphology and relaxation spectra of viscoelastic heterogeneous materials. *Eur. J. Mech. - A/Solids*, 19:1–16.

[Bornert 2003]

BORNERT, M. (2003). Estimations et encadrements des modules d'élasticité des milieux aléatoires. *Cours de l'école d'été CNRS - Homogénéisation en Mécanique Phys. des Matériaux*.

[Bornert *et al.* 2001]

BORNERT, M., BRETHEAU, T. et GILORMINI, P. (2001). *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 - Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Paris, hermès sci édition.

[Bornert et Ponte-Castañeda 1998]

BORNERT, M. et PONTE-CASTAÑEDA, P. (1998). Second-order estimates of the self-consistent type for viscoplastic polycrystals. *Proc. R. Soc. London A*, 356:3035–3045.

[Bornert *et al.* 1996]

BORNERT, M., STOLZ, C. et ZAOUÏ, A. (1996). Morphologically representative pattern-based bounding in elasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(3):307–331.

[Brassart *et al.* 2009]

BRASSART, L., INGLIS, H. M., DELANNAY, L., DOGHRI, I. et GEUBELLE, P. H. (2009). An

extended Mori-Tanaka homogenization scheme for finite strain modeling of debonding in particle-reinforced elastomers. *Comput. Mater. Sci.*, 45(3):611–616.

[Brenner *et al.* 2001]

BRENNER, R., CASTELNAU, O. et GILORMINI, P. (2001). A modified affine theory for the overall properties of nonlinear composites. *Comptes Rendus l'Académie des Sci.*, 329:649–654.

[Brenner et Masson 2005]

BRENNER, R. et MASSON, R. (2005). Improved affine estimates for nonlinear viscoelastic composites. *Eur. J. Mech. - A/Solids*, 24:1002–1015.

[Canga *et al.* 2001]

CANGA, M. E., BECKER, E. B. et ÖZÜPEK, S. (2001). Constitutive modeling of viscoelastic materials with damage-computational aspects. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 190:2207–2226.

[Christoffersen 1983]

CHRISTOFFERSEN, J. (1983). Bonded granulates. *J. Mech. Phys. Solids*, 31(1):55–83.

[Cornwell et Schapery 1975]

CORNWELL, L. R. et SCHAPER, R. A. (1975). SEM study of microcracking in strained solid propellant. *Metallography*, 8(5):445–452.

[Dartois 2008]

DARTOIS, S. (2008). *Prise en compte de l'évolution de l'endommagement anisotrope dans une modélisation par transition d'échelle pour des composites particulaires fortement chargés*. Thèse de doctorat, Université de Poitiers - ENSMA.

[Dartois *et al.* 2013]

DARTOIS, S., NADOT-MARTIN, C., HALM, D., DRAGON, A., FANGET, A. et CONTESSE, G. (2013). Micromechanical modelling of damage evolution in highly filled particulate composites - Induced effects at different scales. *Int. J. Damage Mech.*, 22(7):927–966.

[Das *et al.* 2014]

DAS, A., TENGATTINI, A., NGUYEN, G. D., VIGGIANI, G., HALL, S. A. et EINAV, I. (2014). A thermomechanical constitutive model for cemented granular materials with quantifiable internal variables. Part II - Validation and localization analysis. *J. Mech. Phys. Solids*, 70:382–405.

[Dvorak 1992]

DVORAK, G. (1992). Transformation field analysis of inelastic composite materials. *Proc. R. Soc. A*, 437:311–327.

[Fleming *et al.* 1985]

FLEMING, K. A., BIRD, R., BURT, M. W. G. et WHATMORE, C. E. (1985). The influence of formulation variables on the growth of reaction in plastic bonded explosives. In SHORT, J. et DEAL, W., éditeurs : *Proc. 8th Int. Detonation Symp.*, pages 1035–1044, Albuquerque, NM, USA.

[Forest *et al.* 2002]

FOREST, S., CAILLETAUD, G., JEULIN, D., FEYEL, F., GALLIET, I., MOUNOURY, V. et QUILICI, S. (2002). Introduction au calcul de microstructures. *Mécanique Ind.*, 3:439–456.

[François 1996]

FRANÇOIS, M. (1996). *Etude du comportement en déchirement de trois liants PBHT*. Thèse de doctorat, INSA Lyon.

[Francis et Thompson 1984]

FRANCIS, E. C. et THOMPSON, R. E. (1984). Nonlinear structural modeling of solid propellants. In AIAA, éditeur : *Proc. AIAA/SAE/ASME Jt. Propuls. Conf.*, pages 1–5, New York.

[Fritzen et Böhlke 2013]

FRITZEN, F. et BÖHLKE, T. (2013). Reduced basis homogenization of viscoelastic composites. *Compos. Sci. Technol.*, 76:84–91.

[Funfschilling 2007]

FUNFSCHILLING, C. (2007). *Comportement et endommagement de composites viscoélastiques. Application aux composites énergétiques*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris.

[Gillibert et Jeulin 2013]

GILLIBERT, L. et JEULIN, D. (2013). 3D reconstruction and analysis of the fragmented grains in a composite material. *Image Anal. Stereol.*, 32(2):107.

[Gilormini 1996]

GILORMINI, P. (1996). A critical evaluation for various nonlinear extensions of the self-consistent model. In PINEAU, A. et ZAOUÏ, A., éditeurs : *IUTAM Symp. Micromechanics Plast. Damage Multiph. Mater.*, pages 67–74. Kluwer Academic Publishers.

[Guiot *et al.* 2006]

GUIOT, B., NADOT-MARTIN, C. et DRAGON, A. (2006). Towards a non-linear micromechanics-based analysis for particulate composites. *Compos. Sci. Technol.*, 66(15):2726–2735.

[Ha et Schapery 1998]

HA, K. et SCHAPERY, R. A. (1998). Three-dimensional viscoelastic constitutive model for particulate composites with growing damage and its experimental validation. *Int. J. Solids Struct.*, 35:3497–3517.

[Han *et al.* 2012]

HAN, B., JU, Y. et ZHOU, C. (2012). Simulation of crack propagation in HTPB propellant using cohesive zone model. *Eng. Fail. Anal.*, 26:304–317.

[Harren 1991]

HARREN, V. (1991). The finite deformation of rate-dependent polycrystals - I. A self consistent framework. *J. Mech. Phys. Solids*, 39:345–360.

[Hild *et al.* 2011]

HILD, F., FANGET, A., ADRIEN, J., MAIRE, E. et ROUX, S. (2011). Three-dimensional analysis of a tensile test on a propellant with digital volume correlation. *Arch. Mech.*, 63(5-6):459–478.

[Hill 1965]

HILL, R. (1965). Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 13:89–101.

[Hill 1967]

HILL, R. (1967). The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 15:79–95.

[Hinterhoelzl et Schapery 2004]

HINTERHOELZL, R. M. et SCHAPERY, R. A. (2004). FEM implementation of a three-dimensional viscoelastic constitutive model for particulate composites with damage growth. *Mech. Time-dependent Mater.*, 8:65–94.

[Hutchinson 1976]

HUTCHINSON, J. W. (1976). Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. London*, A348:101–127.

[Idiart et al. 2006]

IDIART, M. I., DANAS, K. et PONTE CASTAÑEDA, P. (2006). Second-order theory for nonlinear composites and application to isotropic constituents. *Comptes Rendus Mécanique*, 334(10):575–581.

[Idiart et Ponte-Castañeda 2003]

IDIART, M. I. et PONTE-CASTAÑEDA, P. (2003). Field fluctuations and macroscopic properties for non-linear composites. *Int. J. Solids Struct.*, 40:7015–7033.

[Inglis et al. 2007]

INGLIS, H. M., GEUBELLE, P. H., MATOUS, K., TAN, H. et HUANG, Y. (2007). Cohesive modeling of dewetting in particulate composites : micromechanics vs. multiscale finite element analysis. *Mech. Mater.*, 39(6):580–595.

[Jung et Youn 1999]

JUNG, G.-D. et YOUN, S.-K. (1999). A nonlinear viscoelastic constitutive model of solid propellant. *Int. J. Solids Struct.*, 36:3755–3777.

[Jung et al. 2000]

JUNG, G.-D., YOUN, S.-K. et KIM, B.-K. (2000). A three-dimensional nonlinear viscoelastic constitutive model of solid propellant. *Int. J. Solids Struct.*, 37:4715–4732.

[Kakavas 2014]

KAKAVAS, P. (2014). Mechanical properties of propellant composite materials reinforced with ammonium perchlorate particles. *Int. J. Solids Struct.*, 51(10):2019–2026.

[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. *Int. J. Solids Struct.*, 40(13-14):3647–3679.

[Kanit et al. 2006]

KANIT, T., N’GUYEN, F., FOREST, S., JEULIN, D., REED, M. et SINGLETON, S. (2006). Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials : Representativity of samples of two materials from food industry. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 195(33-36):3960–3982.

[Kimura et Oyumi 1998]

KIMURA, E. et OYUMI, Y. (1998). Shock ignitability test for azide polymer propellants. *J. Energ. Mater.*, 16:173–185.

[Kruch et Chaboche 2011]

KRUCH, S. et CHABOCHE, J.-L. (2011). Multi-scale analysis in elasto-viscoplasticity coupled with damage. *Int. J. Plast.*, 27(12):2026–2039.

[Lahellec *et al.* 2004]

LAHELLEC, N., MAZEROLLE, F. et MICHEL, J. (2004). Second-order estimate of the macroscopic behavior of periodic hyperelastic composites : theory and experimental validation. *J. Mech. Phys. Solids*, 52(1):27–49.

[Lahellec et Suquet 2004]

LAHELLEC, N. et SUQUET, P. (2004). Nonlinear composites : a linearization procedure, exact to second-order in contrast and for which the strain-energy and affine formulations coincide. *Comptes Rendus Mécanique*, 332(9):693–700.

[Lahellec et Suquet 2007a]

LAHELLEC, N. et SUQUET, P. (2007a). Effective behavior of linear viscoelastic composites : a time integration approach. *Int. J. Solids Struct.*, 44(2):507–529.

[Lahellec et Suquet 2007b]

LAHELLEC, N. et SUQUET, P. (2007b). On the effective behavior of nonlinear inelastic composites : I. Incremental variational principles. *J. Mech. Phys. Solids*, 55:1932–1963.

[Lahellec et Suquet 2007c]

LAHELLEC, N. et SUQUET, P. (2007c). On the effective behavior of nonlinear inelastic composites : II- A second-order procedure. *J. Mech. Phys. Solids*, 55:1964–1992.

[Lahellec et Suquet 2013]

LAHELLEC, N. et SUQUET, P. (2013). Effective response and field statistics in elasto-plastic and elasto-viscoplastic composites under radial and non-radial loadings. *Int. J. Plast.*, 42:1–30.

[Ma *et al.* 2011]

MA, C. B., QIANG, H. F., WU, W. M. et XUE, J. (2011). Microstructure and damage analysis of solid propellant. In *Adv. Heterog. Mater. Mech.*, pages 218–221.

[Mandel 1964]

MANDEL, J. (1964). Contribution théorique à l'étude de l'érouissage et des lois de l'écoulement plastique. In SPRINGER, éditeur : *11th Int. Congr. Appl. Mech.*, pages 502–509, Berlin.

[Masson *et al.* 2000]

MASSON, R., BORNERT, M., SUQUET, P. et ZAOUI, A. (2000). An affine formulation for the prediction of the effective properties of non linear composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 48:1203–1227.

[Masson et Zaoui 1999]

MASSON, R. et ZAOUI, A. (1999). Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behavior of polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 47:1543–1568.

[Mateille 2010]

MATEILLE, P. (2010). *Analyse multi-échelle des phénomènes d'endommagement d'un matériau composite de type propergol soumis à un impact de faible intensité*. Thèse de doctorat, Doctorat de l'Université de Montpellier II.

[Matheson et Nguyen 2005]

MATHESON, E. et NGUYEN, D. (2005). A rate-dependent viscoelastic damage model for simulation of solid propellant impacts. In FURNISH, E., éditeur : *Shock Compression Condens. Matter - Am. Inst. Phys.*, pages 913–916.

[Matous et Geubelle 2006a]

MATOUS, K. et GEUBELLE, P. (2006a). Multiscale modelling of particle debonding in reinforced elastomers subjected to finite deformations. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 65:190–223.

[Matous et Geubelle 2006b]

MATOUS, K. et GEUBELLE, P. H. (2006b). Finite element formulation for modeling particle debonding in reinforced elastomers subjected to finite deformations. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 196(1-3):620–633.

[Michel *et al.* 1999]

MICHEL, J., MOULINEC, H. et SUQUET, P. (1999). Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 172:109–143.

[Michel et Suquet 2003]

MICHEL, J. et SUQUET, P. (2003). Nonuniform transformation field analysis. *Int. J. Solids Struct.*, 40(25):6937–6955.

[Michel et Suquet 2004]

MICHEL, J. et SUQUET, P. (2004). Computational analysis of nonlinear composite structures using the nonuniform transformation field analysis. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 193(48-51):5477–5502.

[Moulinec et Suquet 2003]

MOULINEC, H. et SUQUET, P. (2003). Intraphase strain heterogeneity in nonlinear composites : a computational approach. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 22:751–770.

[Moulinec et Suquet 2004]

MOULINEC, H. et SUQUET, P. (2004). Homogenization for non-linear composites in the light of numerical simulations. In PONTE-CASTAÑEDA, P. et TELEGA, J. J., éditeurs : *Nonlinear Homog. Its Appl. to Compos. Polycrystals Smart Mater.*, volume 170, pages 193–223. Kluwer Academic Publishers.

[Nadot *et al.* 2006]

NADOT, C., DRAGON, A., TRUMEL, H. et FANGET, A. (2006). Damage modelling framework for viscoelastic particulate composites via a scale transition approach. *J. Theor. Appl. Mech.*, 44(3):553–583.

[Nadot-Martin *et al.* 2013]

NADOT-MARTIN, C., HALM, D., DARTOIS, S., TOUBOUL, M., DRAGON, A. et FANGET, A. (2013). Direct multiscale "morphological approach" for non-linear highly-filled particulate composites : theory and applications. *Int. J. Mater. Struct. Integr.*, 7(1-3):109–130.

[Nadot-Martin *et al.* 2008]

NADOT-MARTIN, C., TOUBOUL, M., DRAGON, A. et FANGET, A. (2008). Direct scale transition approach for highly-filled viscohyperelastic particulate composites : computational study. In CAZACU, O., éditeur : *Multiscale Model. Heterog. Mater. from Microstruct. to macro-scale Prop.*, chapitre 12, pages 218–237. ISTE/Wiley.

[Nadot-Martin *et al.* 2003]

NADOT-MARTIN, C., TRUMEL, H. et DRAGON, A. (2003). Morphology-based homogenization

- for viscoelastic particulate composites : Part I : Viscoelasticity sole. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 22(1):89–106.
- [Naya et Kohga 2013]
NAYA, T. et KOHGA, M. (2013). Influences of particle size and content of HMX on burning characteristics of HMX-based propellant. *Aerosp. Sci. Technol.*, 27(1):209–215.
- [Nemat-Nasser et Obata 1986]
NEMAT-NASSER, S. et OBATA, M. (1986). Rate dependent finite elastoplastic deformation of polycrystals. *Proc. R. Soc. A London*, A407:343–375.
- [Ninous et al. 1993]
NINOUS, J., BESSON, J. M., TRAISSAC, Y. et POUYET, J. (1993). Influence de la pression hydrostatique sur le comportement d'un propergol composite. *Composites*, 2:31–36.
- [Özüpek et Becker 1992]
ÖZÜPEK, S. et BECKER, E. B. (1992). Constitutive modeling of high-elongation solid propellants. *J. Eng. Mater. Technol.*, 114:111–115.
- [Özüpek et Becker 1997]
ÖZÜPEK, S. et BECKER, E. B. (1997). Constitutive equations for solid propellants. *J. Eng. Mater. Technol.*, 119:125–132.
- [Paquin et al. 1999]
PAQUIN, A., SABAR, H. et BERVEILLER, M. (1999). Integral formulation and self-consistent modelling of elastoviscoplastic heterogeneous materials. *Arch. Appl. Mech.*, 69(1):14–35.
- [Park et Schapery 1997]
PARK, S. W. et SCHAPERY, R. A. (1997). A viscoelastic constitutive model for particulate composites with growing damage. *Int. J. Solids Struct.*, 34(8):931–947.
- [Pelissou et al. 2009]
PELISSOU, C., BACCOU, J., MONERIE, Y. et PERALES, F. (2009). Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites. *Int. J. Solids Struct.*, 46:2842–2855.
- [Ponte-Castañeda 1991]
PONTE-CASTAÑEDA, P. (1991). The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 39:45–71.
- [Ponte-Castañeda 1996]
PONTE-CASTAÑEDA, P. (1996). Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(8):827–862.
- [Ponte-Castañeda 2002a]
PONTE-CASTAÑEDA, P. (2002a). Second-order homogenization estimates for non-linear composites incorporating field fluctuations : I- Theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 50:737–757.
- [Ponte-Castañeda 2002b]
PONTE-CASTAÑEDA, P. (2002b). Second-order homogenization estimates for non-linear composites incorporating field fluctuations : II- Applications. *J. Mech. Phys. Solids*, 50:759–782.

[Ponte-Castañeda et Tiberio 2000]

PONTE-CASTAÑEDA, P. et TIBERIO, E. (2000). A second-order homogenization method in finite elasticity and applications to black-filled elastomers. *J. Mech. Phys. Solids*, 48:1389–1411.

[Rae et al. 2002]

RAE, P. J., PALMER, S. J. P., GOLDREIN, H. T., FIELD, J. E. et LEWIS, A. L. (2002). Quasi-static studies of the deformation and failure of PBX 9501. *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, 458(2025):2227–2242.

[Rekik et al. 2007]

REKIK, A., AUSLENDER, F., BORNERT, M. et ZAOUI, A. (2007). Objective evaluation of linearization procedures in nonlinear homogenization : A methodology and some implications on the accuracy of micromechanical schemes. *Int. J. Solids Struct.*, 44(10):3468–3496.

[Rekik et al. 2012]

REKIK, A., BORNERT, M. et AUSLENDER, F. (2012). A critical evaluation of local field statistics predicted by various linearization schemes in nonlinear mean-field homogenization. *Mech. Mater.*, 54:1–17.

[Rekik et al. 2005]

REKIK, A., BORNERT, M., AUSLENDER, F. et ZAOUI, A. (2005). A methodology for an accurate evaluation of the linearization procedures in nonlinear mean field homogenization. *Comptes Rendus Mécanique*, 333(11):789–795.

[Richter et al. 1989]

RICHTER, H., BOYER, L., GRAHAM, K., LEPIC, A. et ZWIERZCHOWSKI, N. (1989). Shock sensitivity of damaged energetic materials. *In 9th Int. Symp. Detonation*.

[Rougier et al. 1994]

ROUGIER, Y., STOLZ, C. et ZAOUI, A. (1994). Self-consistent modelling of elastic-viscoplastic polycrystals. *Comptes Rendus l'Académie des Sci. II*, 318:145–151.

[Roussette et al. 2009]

ROUSSETTE, S., MICHEL, J. et SUQUET, P. (2009). Nonuniform transformation field analysis of elastic-viscoplastic composites. *Compos. Sci. Technol.*, 69(1):22–27.

[Salmi et al. 2012]

SALMI, M., AUSLENDER, F., BORNERT, M. et FOGLI, M. (2012). Various estimates of Representative Volume Element sizes based on a statistical analysis of the apparent behavior of random linear composites. *Comptes Rendus Mécanique*, 340(4-5):230–246.

[Salvia 1981]

SALVIA, M. (1981). *Propriétés dynamiques des propergols solides composites*. Thèse de doctorat, Université de Lyon.

[Simo 1987]

SIMO, J. C. (1987). On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model : formulation and computational aspects. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 60:153–173.

[Stolz et Zaoui 1991]

STOLZ, C. et ZAOUI, A. (1991). Analyse morphologique et approches variationnelles du comportement d'un milieu élastique hétérogène. *Comptes Rendus l'Académie des Sci.*, 312:143–150.

[Suquet 1987]

SUQUET, P. (1987). Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. *In* SANCHEZ-PALENCIA, E. et ZAOUÏ, A., éditeurs : *Homog. Tech. Compos. Media*. Berlin, springer-v édition.

[Suquet 1995]

SUQUET, P. (1995). Overall properties of nonlinear composites : a modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda's nonlinear variational procedure. *Comptes Rendus Mécanique*, 320:563–571.

[Swanson et Christensen 1983]

SWANSON, S. et CHRISTENSEN, L. (1983). A constitutive formulation for high-elongation propellants. *J. Spacecr.*, 20(6):559–566.

[Tan et al. 2005a]

TAN, H., HUANG, Y., LIU, C. et GEUBELLE, P. H. (2005a). The Mori-Tanaka method for composite materials with nonlinear interface debonding. *Int. J. Plast.*, 21(10):1890–1918.

[Tan et al. 2007]

TAN, H., HUANG, Y., LIU, C., RAVICHANDRAN, G., INGLIS, H. et GEUBELLE, P. (2007). The uniaxial tension of particulate composite materials with nonlinear interface debonding. *Int. J. Solids Struct.*, 44:1809–1822.

[Tan et al. 2005b]

TAN, H., LIU, C., HUANG, Y. et GEUBELLE, P. (2005b). The cohesive law for the particle/matrix interfaces in high explosives. *J. Mech. Phys. Solids*, 53(8):1892–1917.

[Tao et al. 2013]

TAO, Z., PING, S., MEI, Z. et CHENG, Z. (2013). Microstructure Deformation and Fracture Mechanism of Highly Filled Polymer Composites under Large Tensile Deformation. *J. Phys. Conf. Ser.*, 419:012014.

[Tengattini et al. 2014]

TENGATTINI, A., DAS, A., NGUYEN, G. D., VIGGIANI, G., HALL, S. a. et EINAV, I. (2014). A thermomechanical constitutive model for cemented granular materials with quantifiable internal variables. Part I - Theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 70:281–296.

[Touboul 2007]

TOUBOUL, M. (2007). *Approche multi-échelle morphologique et directe pour une classe de composites particulaires fortement chargés hyperélastiques et viscohyperélastiques*. Thèse de doctorat, Université de Poitiers - ENSMA.

[Trumel 1996]

TRUMEL, H. (1996). *Un modèle viscoélastique-viscoplastique pour un composite particulière. Application à un problème de pénétration dynamique*. Thèse de doctorat, Université de Poitiers - ENSMA.

[Trumel et al. 2001a]

TRUMEL, H., DRAGON, A., FANGET, A. et LAMBERT, P. (2001a). A constitutive model for the dynamic and high-pressure behaviour of a propellant-like material. Part I : Experimental background and general structure of the model. *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech.*, 25(6): 551–579.

[Trumel *et al.* 2001b]

TRUMEL, H., DRAGON, A., FANGET, A. et LAMBERT, P. (2001b). A constitutive model for the dynamic and high-pressure behaviour of a propellant-like material. Part II : Model development and applications. *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech.*, 25(6):581–603.

[Weng 1981]

WENG, G. J. (1981). Self-consistent determination of time-dependant behavior of metals. *J. Appl. Mech.*, 103(1).

[Xu *et al.* 2008]

XU, F., ARAVAS, N. et SOFRONIS, P. (2008). Constitutive modeling of solid propellant materials with evolving microstructural damage. *J. Mech. Phys. Solids*, 56(5):2050–2073.

[Xu *et al.* 2014]

XU, J., CHEN, X., WANG, H., ZHENG, J. et ZHOU, C. (2014). Thermo-damage-viscoelastic constitutive model of HTPB composite propellant. *Int. J. Solids Struct.*, 51(18):3209–3217.

[Yildirim et Özüpek 2011]

YILDIRIM, H. C. et ÖZÜPEK, S. (2011). Structural assessment of a solid propellant rocket motor : Effects of aging and damage. *Aerosp. Sci. Technol.*, 15(8):635–641.

[Zaoui et Raphanel 1993]

ZAOUI, A. et RAPHANEL, J. L. (1993). On the nature of the intergranular accommodation in the modeling of elastoviscoplastic behavior of polycrystalline aggregates. In TEODOSIU, RAPHANEL et SIDOROFF, éditeurs : *Large Plast. Deform. Fundam. Appl. to Met. Form.*, Rotterdam. Balkema.

[Zhao 2011]

ZHAO, J. (2011). Composite propellant dewetting simulation based on CZM model and contact angle measurements. In FAN, J., ZHANG, J., CHEN, H. et JIN, Z., éditeurs : *Adv. Heterog. Mater. Mech.*, pages 1100–1103, Shanghai, China. DEStech Publications, Inc.

[Zhao 2008]

ZHAO, J. L. (2008). HTPB propellant debonding damage research. In FAN, J. et CHEN, H., éditeurs : *Adv. Heterog. Mater. Mech.*, pages 352–355, Huangshan, China. DEStech Publications, Inc.

[Zhi *et al.* 2012]

ZHI, S.-J., SUN, B. et ZHANG, J.-W. (2012). Multiscale modeling of heterogeneous propellants from particle packing to grain failure using a surface-based cohesive approach. *Acta Mech. Sin.*, 28(3):746–759.

[Zhong et Knauss 2000]

ZHONG, X. A. et KNAUSS, W. G. (2000). Effects of particle interaction and size variation on damage evolution in filled elastomers. *Mech. Compos. Mater. Struct.*, 7(1):35–53.

Couplage endommagement - grandes déformations dans une modélisation multi-échelle pour composites particulaires fortement chargés

Résumé : Cette thèse traite de la modélisation multi-échelle de composites particulaires fortement chargés. La méthode d'estimation, qualifiée d'“Approche Morphologique” (A.M.), repose sur une double schématisation géométrique et cinématique du composite permettant de fournir la réponse aux deux échelles. Afin d'évaluer les capacités prédictives de l'A.M. en élasticité linéaire avec évolution de l'endommagement, l'A.M. est testée vis-à-vis de ses aptitudes à rendre compte des effets de taille et d'interaction de particules sur la chronologie de décohésion. Pour cela, différentes microstructures périodiques simples, aléatoires monomodales et bimodale générées numériquement sont considérées. Les résultats obtenus sont cohérents avec les données de la littérature : la décohésion des grosses particules précède celle des plus petites et est d'autant plus précoce que le taux de charges est important. Puis, l'objectif est de coupler deux non-linéarités traitées séparément dans deux versions antérieures de l'A.M. : l'endommagement par décohésion charges/matrice et les grandes déformations. La formulation du problème de localisation-homogénéisation est reprise à la source de manière analytique. Le critère de nucléation de défauts est étendu en transformations finies. Le problème obtenu, fortement non-linéaire, est résolu numériquement via un algorithme de Newton-Raphson. Les étapes sous-jacentes à la résolution (calcul de la matrice tangente, codage en langage Python®) sont explicitées. Des évaluations progressives (matériaux sain et endommagé) permettent de valider la mise en œuvre numérique. Les effets de taille et d'interaction sont alors restitués en transformations finies.

Mots-clés : composites énergétiques, transition d'échelle, morphologie, décohésion d'interfaces, grandes déformations, simulations numériques, résolution non-linéaire, effet de taille.

Coupling between damage and finite strains in a multi-scale modeling for highly-filled particulate composites

Abstract : This study is devoted to multi-scale modeling of highly-filled particulate composites. This method, the “Morphological Approach” (M.A.), is based on a geometrical and kinematical schematization which allows the access to both local fields and homogenized response. In order to evaluate the predictive capacities of the M.A. considering a linear elastic behavior for the constituents and evolution of damage, analysis is performed regarding the ability of the M.A. to account for particle size and interaction effects on debonding chronology. For that purpose, simple periodic, random monomodal and bimodal microstructures are considered. The results are consistent with literature data : debonding of large particles occurs before the one of smaller particles and the higher the particle volume fraction, the sooner the debonding. Finally, the objective is to operate the coupling of two non linearities which were separately studied in previous versions of the M.A. : debonding between particles and matrix, and finite strains. The whole analytical background of the approach is reconsidered in order to define the localization-homogenization problem. The nucleation criterion is extended to the finite strains context. The final problem, strongly non linear, is numerically solved through a Newton-Raphson algorithm. The different solving steps (jacobian matrix, coding with Python®) are developed. Progressive evaluations (sound and damage materials) allow the validation of numerical implementation. Then, size and interaction effects are reproduced in finite strains.

Keywords : energetic composites, scale transition, morphology, interfacial debonding, finite strains, numerical simulations, non linear solving, particle size effect.