



HAL
open science

Modélisation multi échelle du comportement thermomécanique des bétons incluant des matériaux à changement de phase micro encapsulés

Jérôme Kodjo

► **To cite this version:**

Jérôme Kodjo. Modélisation multi échelle du comportement thermomécanique des bétons incluant des matériaux à changement de phase micro encapsulés. Matériaux. Université Paris-Est, 2019. Français. NNT : 2019PESC2010 . tel-02390520

HAL Id: tel-02390520

<https://theses.hal.science/tel-02390520v1>

Submitted on 3 Dec 2019

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.

T H E S E

pour l'obtention du diplôme de

Docteur de l'Université Paris-Est

Spécialité : SCIENCE DES MATÉRIAUX

par

Jérôme KODJO

Modélisation multi échelle du comportement thermomécanique
des bétons incluant des matériaux à changement de phase
micro encapsulés

Soutenue le 09 Janvier 2019 devant le jury composé de :

Frédéric GRONDIN	Professeur Ecole Centrale de Nantes	Président
Hamid ZAHROUNI	Professeur Université de Lorraine Metz	Rapporteur
Patrick GLOUANNEC	Professeur Université Bretagne Sud	Rapporteur
Julien YVONNET	Professeur (Directeur de thèse) Université Paris-Est Marne-la-Vallée	Examineur
Karam SAB	Professeur (Co-Directeur de thèse) Ecole des Ponts ParisTech	Examineur
Mustapha KARKRI	Maître des Conférences HDR (Co-encadrant) Université Paris-Est Créteil	Examineur

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé au sein des laboratoires Modélisation et Simulation Multi Echelle – MSME (UPEM), Navier (ENPC) et du Centre d’Etudes et de Recherche en Thermique, Environnement et Systèmes – CERTES (UPEC).

Je tiens, en premier lieu, à exprimer ma grande gratitude à mes directeurs et encadrant de thèse, Julien Yvonnet, Karam Sab et Mustapha Karkri, sans qui cette thèse n’aurait pas pu être réalisée. Je les remercie, pour leur patience, leur soutien et leurs conseils. Merci de m’avoir offert l’opportunité de réaliser cette recherche doctorale pleine de défis scientifiques enrichissants.

Je remercie vivement Monsieur Frédéric Grondin qui a présidé le jury, Messieurs Hamid Zahrouni et Patrick Glouannec qui ont pris soin de rapporter ce manuscrit. Leurs lectures détaillées sont d’une grande valeur et m’ont permis d’améliorer ma présentation et de mieux cerner le potentiel du travail effectué ainsi que ses limites. Je remercie particulièrement Monsieur Hamid Zahrouni de m’avoir initié à la simulation numérique pendant son encadrement de mon stage de master 2 recherche (MMSP) au Laboratoire d’Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux – LEM3 à Metz.

J’adresse ma sincère reconnaissance à Monsieur Patrick Aïmedieu, Ingénieur de recherche CNRS au Laboratoire Navier, pour son aide sur les essais réalisés au microtomographe. Son expertise et sa disponibilité m’ont été précieux. J’adresse aussi ma reconnaissance à Madame Siyimane Mohaine, doctorante au GeM (Nantes), qui m’a fourni les échantillons utilisés dans ce travail.

J’ai eu la chance d’avoir passé ces trois ans au sein de différentes équipes constituées de gens sympathiques et bienveillants. Je remercie donc tous les membres du laboratoire MSME, en particulier mes collègues doctorants pour les moments passés au laboratoire ou en conférences. Je retiendrai toujours de nos échanges amicaux et scientifiques des souvenirs inoubliables. Je pense à Jean-Luc, Brian, Anthony H, Anthony P, Quentin, Vincent et Justin.

J’adresse aussi ma reconnaissance aux doctorants et chercheurs du CERTES, particulièrement Manel et Danh Viet qui m’ont aidé sur les essais thermo-physiques.

Je souhaite remercier ma famille et mes amis au Togo et ici en France qui m’ont toujours soutenu par leurs encouragements. Enfin, j’exprime du fond de mon cœur mes sincères remerciements à ma fiancée Emily, qui m’a soutenu dans mes moments de dur labeur et surtout pour ses efforts de patience.

Modélisation multi échelle du comportement thermomécanique des bétons incluant des matériaux à changement de phase micro encapsulés

Résumé

Les matériaux à changement de phase (MCP) constituent une alternative prometteuse pour l'amélioration de l'inertie thermique des matériaux de construction. Grâce à leur chaleur latente, ces matériaux permettent de stocker des quantités importantes d'énergie thermique, ce qui permet de réduire la consommation d'énergie liée au chauffage et à la climatisation. Cependant, leur incorporation dans les matériaux cimentaires entraîne une baisse de la résistance mécanique du nouveau matériau composite ainsi obtenu. Durant ces dernières décennies, les composites MCP/bétons ont suscité un grand intérêt conduisant à un grand nombre de travaux expérimentaux. Cependant, les modèles théoriques et numériques pour prédire les comportements de ces matériaux complexes sont aujourd'hui très peu développés en raison de la complexité du comportement thermique avec changement de phase, de la séparation d'échelle et de la difficulté que représente la prédiction de l'endommagement par fissuration à l'échelle des hétérogénéités microscopiques. L'objectif de cette thèse est précisément de développer des outils de modélisation numériques pour prédire le comportement thermomécanique effectif du matériau en vue de calculs de structures. Pour cela, des modèles numériques sont développés pour simuler le transfert de chaleur, le comportement mécanique, la fissuration ainsi que la fuite du MCP liquide à travers les fissures, à l'échelle d'un Volume Élémentaire Représentatif du matériau. Après avoir étudié les effets des changements de phase dans le MCP sur le comportement mécanique effectif, une approche multi-échelle (méthode EF²) est proposée afin de réaliser des calculs de structures en tenant compte des phénomènes à l'échelle des micro capsules. Des caractérisations expérimentales thermo-physiques sont menées afin de prouver l'utilité des MCP dans les matériaux de construction et de faire des comparaisons avec les outils d'homogénéisation développés. Enfin, nous proposons une étude dans le but de comprendre et d'évaluer les effets du MCP dans la dégradation des propriétés mécaniques de ces nouveaux matériaux.

Mots clés : Multi échelle, thermomécanique, changement de phase, béton, fissuration.

Multi-scale modeling of thermomechanical behavior of concrete embedding microencapsulated phase change materials

Abstract

A promising way to enhance thermal inertia of buildings is the use of phase change materials (PCMs). Thanks to their high latent heat, PCMs can be used to store a significant amount of thermal energy in order to reduce energy consumption related to air conditioning. However, their use leads to a decrease in the mechanical strength of the obtained composites. During the last decades, the incorporation of PCMs in concrete has been of great interest leading to many experimental works. However, theoretical and numerical models to predict the behavior of such complex materials are not developed so far, due to the complexity of the phase change behavior, the scale separation and issues associated to the damage which is mainly induced by microcracking at the scale of microstructural heterogeneities. The objective of this thesis is precisely to develop numerical modeling tools to predict the effective thermomechanical behavior of the material with aim of structural calculations. For this purpose, numerical tools based on microstructures at the scale of microencapsulated PCM are developed to simulate heat transfer, mechanical response, cracks propagation as well as leakage of liquid PCM through cracks. After studying the effects of phase changes in the PCM on the effective mechanical response of the composites, a multi-scale approach (FE² method) is proposed to carry out structural calculations taking into account phenomena at micro scale. Thermo-physical experimental characterizations are carried out to show the usefulness of PCMs in building materials and to make comparisons with the developed homogenization tools. Finally, we propose a study to understand and evaluate the effects of PCMs in the degradation of the mechanical properties of these new materials.

Keywords : Multi-scale, thermomechanical, phase change, concrete, cracks.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Contexte et objectifs	1
1.1.1	Contexte de la thèse	1
1.1.2	Problématique	3
1.2	Les matériaux à changement de phase	4
1.2.1	Historique et classification	4
1.2.2	Principe de fonctionnement et caractéristiques physiques	6
1.2.3	Modélisation du comportement thermique avec changement de phase	8
1.2.4	Applications dans le bâtiment	9
1.2.5	L'encapsulation	10
1.3	Méthodes d'homogénéisation	12
1.3.1	Concept du VER	12
1.3.2	Méthodes d'homogénéisation analytiques	13
1.3.3	Méthodes d'homogénéisation numériques pour les problèmes linéaires	13
1.3.4	Méthodes d'homogénéisation numériques pour les problèmes non linéaires	13
1.4	Méthodes numériques pour modéliser les interactions entre fissuration et fluides	15
1.4.1	Méthodes numériques de modélisation de la fissuration	15
1.4.2	Interaction entre fissuration et présence d'un fluide	22
1.5	Plan de la thèse	23
2	Modélisation multi échelle du comportement thermomécanique des bétons contenant des matériaux à changement de phase : une approche EF²	25
2.1	Introduction	26
2.2	Le modèle de changement de phase thermique à l'échelle microscopique	26
2.2.1	Equations décrivant le MCP	26
2.2.2	Un exemple 3D du modèle de changement de phase thermique	29
2.2.3	Illustration du comportement thermique du MCP en 2D	33
2.3	Homogénéisation des propriétés mécaniques pendant les changements de phase	37
2.3.1	Le problème d'homogénéisation	37
2.3.2	Résultats	39
2.4	Modélisation multi échelle (EF ²) du comportement thermique transitoire avec changement de phase	40
2.4.1	Le problème à l'échelle microscopique	41
2.4.2	Le problème à l'échelle macroscopique	41
2.5	Résultats numériques	45
2.5.1	Transfert de chaleur en régime stationnaire	45

2.5.2	Conduction de chaleur transitoire en 2D	49
2.5.3	Conduction thermique transitoire en 3D	50
2.5.4	Exemple d'étude thermo-mécanique en 3D	52
2.5.5	Effets de la fraction volumique du MCP	54
2.6	Conclusion	55
3	Etude expérimentale des propriétés physico-thermiques des bétons contenant des microcapsules de matériaux à changement de phase	57
3.1	Introduction	57
3.2	Imagerie du composite contenant des microcapsules de MCP	58
3.2.1	Les échantillons	58
3.2.2	Essai au microtomographe	59
3.2.3	Essai au microscope électronique à balayage (MEB)	60
3.3	Caractérisations thermophysiques	61
3.3.1	Préparation des échantillons	61
3.3.2	Hot Plate (HP)	63
3.3.3	Le Hot Disk (HD)	65
3.3.4	Conductivités thermiques effectives par homogénéisation numérique	67
3.4	Résultats et discussion	69
3.4.1	Conductivité thermique	69
3.4.2	Stockage d'énergie thermique	72
3.4.3	Effets des cycles thermiques	74
3.5	Conclusion	76
4	Modélisation du comportement mécanique effectif et de la fissuration des composites incluant des microcapsules de matériaux à changement de phase	77
4.1	Introduction	78
4.2	La méthode de champs de phase pour la simulation de l'initiation et la propagation des fissures	79
4.2.1	Représentation diffuse de la fissure	79
4.2.2	Problème de champs de phase	82
4.2.3	Formulation variationnelle et discrétisation du problème de champs de phase	83
4.2.4	Formulation variationnelle et discrétisation du problème mécanique	84
4.3	Fissuration d'une microstructure hétérogène contenant des microcapsules de MCP solide	85
4.3.1	Exemple en 2D	86
4.3.2	Résultats numériques	86
4.4	Interaction fluide-structure	87
4.4.1	Le mouvement du fluide	87
4.4.2	Le couplage avec la structure et procédure de résolution	92

4.4.3	Effets de l'incompressibilité du fluide sur un matériau élastique	93
4.5	Effets de l'affaiblissement par les microcapsules de MCP	97
4.5.1	Evolution des propriétés élastiques en fonction de la fraction volumique de MCP	98
4.5.2	Taille du VER et distribution aléatoire des microcapsules de MCP	99
4.6	Effets des microcapsules de MCP sur la fissuration	101
4.6.1	Fissuration de microstructures aléatoires	103
4.6.2	Résultats numériques	104
4.7	Diffusion du MCP liquide dans la matrice fissurée	105
4.7.1	Modélisation de l'écoulement non saturé du fluide dans le milieu poreux fissuré	106
4.7.2	Formulation Eléments Finis	113
4.7.3	Exemples numériques	114
4.8	Conclusion	118
5	Conclusions générales et perspectives	123
A	Les transitions d'échelles	127
A.1	Moyenne du gradient temperature	127
A.2	Moyenne du flux de chaleur	128
A.3	Lemme de Hill Mandel	128
	Bibliographie	129

Table des figures

1.1	Microcapsule de MCP lors des variations de température.	2
1.2	Microcapsules de MCP (Micronal DS 5040 X), enrobées dans une matrice en pâte de ciment au microscope électronique à balayage [1].	3
1.3	Les familles de MCP [2].	5
1.4	Principe de fonctionnement des MCP.	7
1.5	Résistance mécanique à la compression à 3, 7 et 28 jours de différents mortiers [3]. CONTROL : mortier de référence, PT4 : mortier contenant des agrégats légers imprégnés de MCP, PCM6 : mortier contenant des agrégats légers imprégnés de paraffine et MICROENC : mortier contenant des microcapsules de MCP.	9
1.6	Température sur la face intérieure d'un bâtiment expérimental contenant des microcapsules de MCP [4]. (a) le bâtiment ; (b) l'évolution de la température sur la face intérieure du mur.	11
1.7	Illustration de l'homogénéisation numérique [5].	14
1.8	Fissuration par remaillage dans une éprouvette avec une fissure initiale [6].	15
1.9	Illustration de la fonction de pondération ξ	17
1.10	Illustration des modèles cohésifs pour la fissuration : (a) la zone cohésive ; (b) loi de comportement traction-ouverture intrinsèque ; (c) loi de comportement traction-ouverture extrinsèque.	18
1.11	Stratégie de dédoublement de noeuds pour la propagation de fissures [7].	19
1.12	Noeuds d'enrichissement pour une fissure dans la méthode X-FEM.	20
1.13	Résultat de simulation d'une fissure par la méthode TLS pour 3 maillages [8]. La zone blanche indique la surface endommagée et la courbe noire indique le front de fissure.	21
1.14	Fissuration avec interaction d'un fluide (embedded interface methods) [9].	22
2.1	VER contenant une microcapsule de MCP : (a) géométrie ; (b) maillage Eléments Finis.	27
2.2	Géométrie du problème de changement de phase en 3D avec la position des billes de MCP dans le domaine.	29
2.3	Profil de température imposée sur la face $x = 0$ mm et température au point $x = y = z = 1$ mm en fonction du temps.	30
2.4	Solution du problème 3D au temps $t = 3, 6$ s ; (a) isosurfaces de température ; (b) indicateur de phase.	30
2.5	Solution du problème 3D au temps $t = 4$ s ; (a) isosurfaces de température ; (b) indicateur de phase.	31

2.6	Solution du problème 3D au temps $t = 5,5$ s; (a) isosurfaces de température; (b) indicateur de phase.	31
2.7	Solution du problème 3D au temps $t = 10,7$ s; (a) isosurfaces de température; (b) indicateur de phase.	32
2.8	Solution du problème 3D au temps $t = 11,2$ s; (a) isosurfaces de température; (b) indicateur de phase.	32
2.9	Température imposée aux bords du VER.	33
2.10	Evolution de $f(T)$ pendant la fusion ($0 < t < 3.5$ s). La zone rouge indique la phase liquide, la zone bleue désigne la phase solide.	34
2.11	Evolution de $f(T)$ pendant la solidification ($3.5 < t < 7$ s). La zone rouge indique la phase liquide, la zone bleue désigne la phase solide.	34
2.12	Température et la fonction indicatrice de phase $f(T)$ pendant la fusion.	35
2.13	Variations de ρC_{pa} dans le MCP pendant la fusion.	35
2.14	Variations de λ_a dans le MCP pendant la fusion.	35
2.15	Taille du VER : variation de la conductivité thermique en fonction de la taille de la cellule unitaire pour 20% de fraction volumique de MCP : (a) exemple de microstructure périodique avec des particules de MCP aléatoirement réparties ($L = 5.013 \times 10^{-3}$ m, seul le maillage du domaine en MCP est affiché); (b) valeurs moyennes et écarts-types de la conductivité thermique effective (la courbe rouge désigne la réponse effective de la microstructure contenant une seule particule de MCP).	36
2.16	VER en 2D avec un maillage symétrique montrant les nœuds pour l'application des conditions aux limites.	38
2.17	Variation des composantes de \mathbb{C} pendant les changements de phase.	40
2.18	Schéma de la procédure FE^2	42
2.19	Problème 2D stationnaire : géométrie de la structure à l'échelle macroscopique.	46
2.20	Le VER : la géométrie; (a) VER en 2D; (b) VER en 3D.	46
2.21	Solution EF^2 en régime permanent de la structure 2D.	47
2.22	Structure utilisée pour la validation de la procédure EF^2	47
2.23	Analyse complète par la méthode des Eléments Finis : (a) composante x du flux de chaleur; (b) fonction indicatrice de phase.	48
2.24	Comparaison entre les résultats obtenus par EF^2 et par la Méthode des Eléments Finis (MEF) suivant l'axe x : (a) champs de température; (b) flux de chaleur.	48
2.25	Géométrie et conditions aux limites pour le problème thermique transitoire en 2D.	49
2.26	Température à différents points de la structure macroscopique en fonction du temps.	50
2.27	La structure à l'échelle maroscopique pour le problème thermique en 3D.	50
2.28	Solution EF^2 du problème thermique 3D à $t = 4$ heures.	51

2.29	Température dans la structure à l'échelle macroscopique : (a) température suivant l'axe x pour différents temps; (b) température au centre de la structure avec et sans MCP.	52
2.30	Exemple d'étude thermo-mécanique en 3D : géométrie et conditions aux limites.	53
2.31	Champs thermiques : (a) température; (b) flux de chaleur.	53
2.32	Champs mécaniques : (a) déplacements; (b) contrainte de von Mises.	54
2.33	Température suivant l'axe x ($y = 2.5$ cm) pour différentes fractions volumiques de MCP à $t = 4$ heures.	54
2.34	Les effets de la fraction volumique de MCP : (a) température à ($x = 20$ cm, $y = 2.5$ cm) en fonction du temps. (b) Ecarts entre les températures de la structure sans MCP et des structures avec différentes fractions volumiques de MCP à ($x = 20$ cm, $y = 2.5$ cm) après 6 heures.	55
3.1	Echantillons cylindriques pour l'essai au microtomographe.	58
3.2	Microtomographe au rayons X du Laboratoire Navier.	60
3.3	Coupes transversales des échantillon de mortier de ciment contenant du Micronal DS 5039X obtenues par microtomographie aux rayons X. (a) Echantillon à 10% en volume de microcapsules de MCP et (b) Echantillon à 15% en volume de microcapsules de MCP.	61
3.4	Image du mortier de ciment contenant des microcapsules de MCP à l'aide du MEB.	62
3.5	Dispositif expérimental (Hot plate) [10].	64
3.6	Le Hot Disk : le dispositif expérimental.	66
3.7	La géométrie et les constituents du VER en 3D : (a) inclusions en MCP; (b) la membrane; (c) la matrice; (d) le VER : $1 \times 1 \times 1$ mm ³	67
3.8	(a) Températures et (b) flux thermiques en fonction du temps pour l'échantillon 1, pour $T_1 = 16$ °C et $T_2 = 20$ °C.	69
3.9	(a) Températures et (b) flux thermiques en fonction du temps pour l'échantillon 1, pour $T_1 = 30$ °C et $T_2 = 35$ °C.	69
3.10	Solution par la méthode des éléments finis du problème pour $\overline{\nabla T} = [1 \ 0 \ 0]^T$, (a) température et (b) composante X du flux de chaleur.	70
3.11	Variation de la conductivité thermique effective en fonction de la fraction volumique de MCP.	71
3.12	Conductivité thermique des échantillons contenant du MCP (a) à l'état solide et (b) à l'état liquide : HP = Hot guarded Plates, HD = Hot Disk, CH = homogénéisation numérique.	71
3.13	Résultats expérimentaux lors de la mesure de la chaleur spécifique de l'échantillon 1 avec le MCP à l'état liquide : (a) température et (b) flux de chaleur sur les deux faces de l'échantillon.	73

3.14	Résultats expérimentaux de la mesure de l'énergie totale stockée par l'échantillon 2 lorsque le MCP change de la phase solide à la phase liquide : (a) température and (b) flux de chaleur sur les deux faces de l'échantillon.	73
3.15	Energie totale stockée et chaleur latente des échantillons.	74
3.16	Température et flux de chaleur lors des cycles thermiques pour l'échantillon 1.	75
3.17	Température et flux de chaleur lors des cycles thermiques pour l'échantillon 2.	75
4.1	Représentation diffuse des fissures en une dimension : (a) fissure nette ; (b) fissure diffuse pour différentes valeur du paramètre l	80
4.2	Représentation diffuse des fissures en 2D : (a) fissure décrite par une surface ; (b) fissure diffuse.	80
4.3	Géométrie et conditions aux limites pour l'illustration de la propagation de fissures dans une microstructure contenant des particules de MCP.	86
4.4	Solution du problème : (a) la variable de champs de phase d décrivant les trajets de fissures (1=matériaux fissuré et 0=matériau sain) ; (b) le champs de déplacement suivant x et (c) le champ de déplacement suivant y	87
4.5	Eléments triangulaire P2 avec les numéros des nœuds.	88
4.6	Cas test 1 : Ecoulement autour d'un cylindre en 2D : géométrie et condisions aux limites.	90
4.7	Composante x de la vitesse.	90
4.8	Composante y de la vitesse.	91
4.9	Champ de pression.	91
4.10	Ecoulement dans une cavité : géométrie et conditions aux limites.	91
4.11	Solution du problème d'écoulement dans une cavité : (a) le champ de vitesse ; (b) les isovalues de la norme de la vitesse.	92
4.12	Résultats en traction dans le cas d'une matrice plus rigide que le MCP solide : champ de contrainte σ_{22} pour une inclusion (a) contenant du MCP à l'état solide et (b) contenant du MCP à l'état liquide.	94
4.13	Résultats en traction dans le cas d'une matrice plus rigide que le MCP solide : champ de contrainte σ_{22} pour une inclusion (a) vide, (b) contenant du MCP à l'état solide et (c) contenant du MCP à l'état liquide.	95
4.14	Résultats en cisaillement dans le cas d'une matrice plus rigide que le MCP solide : champ de contrainte σ_{12} pour une inclusion (a) contenant du MCP à l'état solide et (b) contenant du MCP à l'état liquide.	95
4.15	Résultats en cisaillement dans le cas d'une matrice moins rigide que le MCP solide : champ de contrainte σ_{12} pour une inclusion (a) contenant du MCP à l'état solide et (b) contenant du MCP à l'état liquide.	96
4.16	Erreur relative sur \overline{C}_{2222} avec le MCP à la phase solide et à la phase liquide pour différentes fractions volumiques : (a) 3%, (b) 7%, (c) 12% et (d) 19%.	97

4.17	Erreur relative sur \overline{C}_{1212} avec le MCP à la phase solide et à la phase liquide pour différentes fractions volumiques : (a) 3%, (b) 7%, (c) 12% et (d) 19%.	98
4.18	Evolution de \overline{C}_{1111} en fonction de la fraction volumique de MCP.	99
4.19	Exemples de VER avec des distributions aléatoires périodiques de microcapsules de MCP pour différente fraction volumique de MCP ; seul le maillage des microcapsules est affiché : (a) 10%, (b) 15% et (c) 20%.	100
4.20	Solutions par Eléments Finis (containtes de von Mises) pour les six chargements macroscopiques correspondants aux six composantes de $\overline{\epsilon}$ imposés indépendamment. Le VER contient 15% de MCP et a une taille de $L = 1,5$ mm. (a) $\overline{\epsilon}_{11} = 1\%$; (b) $\overline{\epsilon}_{22} = 1\%$; (c) $\overline{\epsilon}_{33} = 1\%$; (d) $2\overline{\epsilon}_{23} = 1\%$; (e) $2\overline{\epsilon}_{13} = 1\%$; (f) $2\overline{\epsilon}_{12} = 1\%$	101
4.21	Evolution des composantes de \overline{C} en fonction de la taille du VER.	102
4.22	Exemple d'une microstructure aléatoire contenant 7 microcapsules de MCP pour les simulations de l'endommagement par fissuration.	103
4.23	Trajets de fissures obtenus en traction pour les huit premières réalisations de microstructures contenant 10 microcapsules de MCP.	104
4.24	Essai de traction pour des microstructures contenant (a) 7, (b) 10, (c) 14 et (d) 19 microcapsules de MCP aléatoirement réparties : courbe de force-déplacement pour 20 réalisations (en bleu). La courbe rouge est la réponse moyenne.	105
4.25	Comparaison des courbes de réponse en traction pour 20 réalisations : (a) les courbes de réponse moyenne et (b) les forces maximales atteintes avant la rupture.	106
4.26	Schéma d'un milieu poreux contenant de l'air et un liquide [11].	107
4.27	Illustration d'un domaine variablement saturé : le domaine $\psi < 0$ correspond à la zone insaturée et $\psi > 0$ à la zone saturée.	109
4.28	Paramètres du modèle de Haverkamp en fonction de la hauteur de pression : (a) conductivité hydraulique; (b) teneur en liquide; (c) capacité capillaire.	112
4.29	Illustration des paramètres du modèle de Haverkamp adapté pour les zones saturées : (a) conductivité hydraulique; (b) teneur en liquide; (c) capacité capillaire.	113
4.30	Test de Haverkamp : géométrie et conditions aux limites.	115
4.31	Solution du problème de Haverkamp : Teneur en eau du milieu à (a) $t = 1$ s, (b) $t = 120$ s, (c) $t = 240$ s, (d) $t = 360$ s, (e) $t = 480$ s et (f) $t = 600$ s.	116
4.32	Solution par Eléments Finis du problème de Haverkamp; hauteur de pression en fonction de la cote z à chaque 120 s (comparaison avec la solution par différences finis de Vu Do [12]).	116
4.33	Le bilan de masse pour le problème de Haverkamp.	117
4.34	Géométrie et conditions aux limites pour la simulation de fuites de MCP liquide à travers les fissures. On impose des conditions de saturation dans les microcapsules et une pression de $\psi_D = -60$ cm aux bords extérieurs du domaine où $d = 1$	118
4.35	Diffusion du MCP liquide à court terme : saturation de la matrice poreuse à (a) $t = 0.5$ s, (b) $t = 1$ s, (c) $t = 2$ s et (d) $t = 10$ min.	119

4.36 Diffusion du MCP liquide à long terme : saturation de la matrice poreuse à (a)
 $t = 20$ min, (b) $t = 75$ min et (c) $t = 110$ min et (d) $t = 150$ min. 120

A.1 Le VER avec deux phases. 127

Liste des tableaux

1.1	Substances organiques avec des applications potentielles dans le bâtiment [13].	6
2.1	Propriétés thermo-physiques des différentes phases dans le VER.	29
2.2	Les propriétés mécaniques du VER.	39
3.1	Dimensions et densités des échantillons pour les essais thermiques.	62
3.2	Conductivités thermiques [$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$].	71
3.3	Chaleur spécifique et chaleur sensible des échantillons avec le MCP à l'état solide ou à l'état liquide.	74
3.4	Energie totale stockée et chaleur latentes des échantillons.	74

Introduction

Sommaire

1.1	Contexte et objectifs	1
1.1.1	Contexte de la thèse	1
1.1.2	Problématique	3
1.2	Les matériaux à changement de phase	4
1.2.1	Historique et classification	4
1.2.2	Principe de fonctionnement et caractéristiques physiques	6
1.2.3	Modélisation du comportement thermique avec changement de phase	8
1.2.4	Applications dans le bâtiment	9
1.2.5	L'encapsulation	10
1.3	Méthodes d'homogénéisation	12
1.3.1	Concept du VER	12
1.3.2	Méthodes d'homogénéisation analytiques	13
1.3.3	Méthodes d'homogénéisation numériques pour les problèmes linéaires	13
1.3.4	Méthodes d'homogénéisation numériques pour les problèmes non linéaires	13
1.4	Méthodes numériques pour modéliser les interactions entre fissuration et fluides	15
1.4.1	Méthodes numériques de modélisation de la fissuration	15
1.4.2	Interaction entre fissuration et présence d'un fluide	22
1.5	Plan de la thèse	23

1.1 Contexte et objectifs

1.1.1 Contexte de la thèse

L'utilisation des combustibles fossiles pour la production de l'électricité, le raffinage, le transport et le chauffage, ne fait qu'augmenter les émissions de gaz à effet de serre. Pour réduire la dépendance vis-à-vis des énergies fossiles, il faut se tourner vers les sources d'énergie propre. Ces principales raisons motivent l'utilisation effective des diverses sources d'énergie renouvelable, ce qui est indispensable écologiquement, possible technologiquement et rentable économiquement. A l'heure actuelle, en France, le recours à la biomasse et l'énergie hydraulique fournissent

la quasi-totalité de l'énergie d'origine renouvelable et la part des énergies renouvelables reste très faible par rapport aux besoins énergétiques. En plus des diverses sources d'énergies renouvelables, une voie prometteuse, et qui constituera l'objet de cette thèse, est la possibilité de réaliser un stockage de l'énergie thermique issue du chauffage naturel par l'utilisation de bétons incluant des matériaux à changement de phase.

Les MCP (Matériaux à Changement de Phase) tels que la paraffine encapsulée, ont suscité récemment un intérêt croissant dans cet objectif compte tenu de leur capacité importante de stockage de l'énergie par chaleur latente à des températures proches de la température ambiante [14]. Un moyen de stockage et d'utilisation effective de l'énergie thermique issue des rayonnements solaires est de réaliser des matériaux, notamment le béton, contenant directement de la paraffine encapsulée pour la construction des bâtiments. Ceci permettra d'assurer le conditionnement des bâtiments grâce à une exploitation directe du chauffage naturel, surtout dans les pays avec un été très chaud et un hiver très froid. La Fig. 1.1 illustre le principe de changement de phase lors des variations de température.

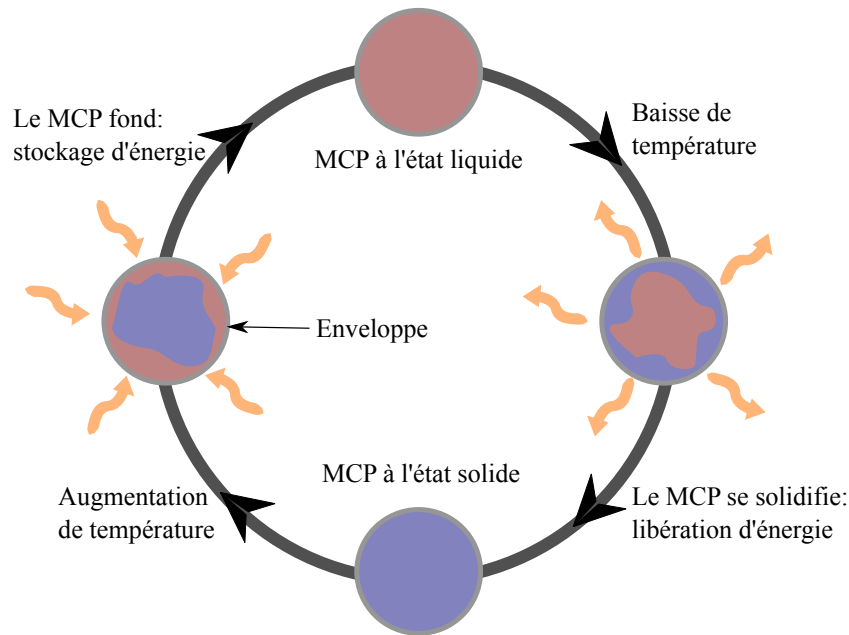


FIGURE 1.1: Microcapsule de MCP lors des variations de température.

Afin d'aboutir à une utilisation à grande échelle de cette technologie, il est nécessaire de résoudre de nombreux problèmes au niveau recherche et développement. En effet, plusieurs travaux expérimentaux et numériques portent sur l'élaboration de ces matériaux de stockage en microcapsules [15], la caractérisation et la simulation numérique des composites de MCP [16, 17]. L'étude de la compatibilité en corrosion avec les matériaux de construction permet d'assurer une bonne durabilité des systèmes de stockage d'énergie par chaleur latente, mais

les données sont encore très limitées sur ce sujet. Plusieurs travaux ont permis de stocker de l'énergie thermique dans des matériaux de construction [17, 18, 19, 20, 21].

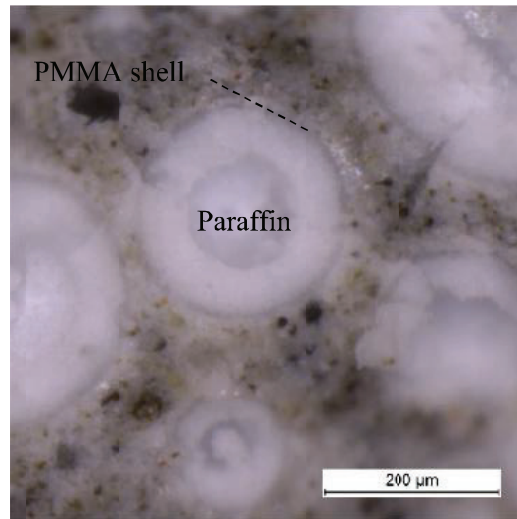


FIGURE 1.2: Microcapsules de MCP (Micronal DS 5040 X), enrobées dans une matrice en pâte de ciment au microscope électronique à balayage [1].

La Fig. 1.2 par exemple montre une des microcapsules de paraffine introduites dans une pâte de ciment. Il ressort des travaux cités ci-dessus que l'incorporation de ces micro-capsules affaiblit les propriétés mécaniques du matériau de construction et les cycles de fusion/solidification de certains MCP peuvent induire de la microfissuration conduisant à un endommagement de la structure. La prédiction des propriétés thermomécaniques et de l'endommagement de ces matériaux est donc extrêmement importante pour le dimensionnement des structures associées. Avec l'évolution considérable des moyens de calculs au cours de ces dernières années, des travaux récents ont permis d'une part de simuler le changement de phase de la paraffine [16] et de simuler l'initiation et la propagation de fissures dans des matériaux fortement hétérogènes [22]. Il s'agit ici d'utiliser ces méthodes numériques pour simuler le comportement thermomécanique et l'endommagement des matériaux hétérogènes contenant des microcapsules de MCP.

1.1.2 Problématique

Cette thèse a pour objectif de modéliser, à l'échelle microscopique, le comportement thermomécanique du béton contenant les micro-capsules de paraffine : le changement de phase solide/liquide, le comportement mécanique avec fissuration et les fuites de la paraffine liquide à travers les fissures créées. De plus, on s'intéresse à la prédiction du comportement thermomécanique effectif de ces composites par homogénéisation numérique, tout en prenant en compte les phénomènes se produisant à l'échelle microscopique.

L'utilisation des composites contenant des MCP dans la construction des bâtiments est toujours au stade expérimental. La mise en œuvre de ces matériaux requiert des méthodologies de simulation pour prédire leurs comportements et dimensionner ces nouvelles structures. Les principales limitations au développement de ces outils numériques sont :

- Le comportement thermique fortement non linéaire des MCP.
- La dépendance du comportement thermo-mécanique vis-à-vis de l'histoire du chargement.
- La nature multi-échelle de ces matériaux.

A cause du comportement non linéaire lié au changement de phase à l'échelle microscopique, les modèles thermiques classiques ne peuvent pas être utilisés à l'échelle macroscopique. Pour les mêmes raisons, le comportement effectif macroscopique ne peut être déterminé par les approches classiques d'homogénéisation (matériaux linéaires). De plus, il n'est pas envisageable de décrire explicitement toutes les hétérogénéités dans un modèle numérique non linéaire par la Méthode des Eléments Finis par exemple. En effet, la séparation d'échelle (grand rapport entre les dimensions caractéristiques des structures et celles des microcapsules de MCP) conduirait à la résolution de problèmes non linéaires de tailles exorbitantes.

Dans la suite de ce chapitre, nous présenterons les MCP, leurs caractéristiques physiques et leur principe de fonctionnement. Ensuite, nous ferons une brève description des diverses méthodes généralement utilisées pour la modélisation multi-échelle et les physiques qui interviennent dans notre étude.

1.2 Les matériaux à changement de phase

1.2.1 Historique et classification

On désigne généralement par MCP, des substances ayant une grande chaleur latente et qui ont une transition de phase solide/liquide dans une plage de température très restreinte. Ces matériaux ont la particularité de pouvoir stocker ou de restituer d'importantes quantités d'énergie thermique lors de ces changements de phase.

Depuis les crises énergétiques de 1973, plusieurs travaux de recherche ont été réalisés pour obtenir de nouvelles technologies pour le stockage d'énergie thermique. Ceci a conduit à l'étude du stockage de l'énergie solaire par chaleur latente. A. Abhat [2] ou Schröder et al [23] ont énuméré les caractéristiques désirées chez les matériaux à utiliser comme MCP destinés aux matériaux de construction. Ces MCP doivent respecter plusieurs critères :

- *Critères thermodynamiques* : un point de fusion dans les valeurs désirées, une grande chaleur latente de fusion par unité de masse de telle sorte que la moindre quantité du matériaux stocke une quantité d'énergie importante, une haute densité, une haute chaleur spécifique procurant un effet supplémentaire de stockage par chaleur sensible, une grande conductivité thermique de telle sorte que les gradients de température requis pour la charge et la décharge du matériau de stockage soient petits, une fusion convenable afin

d'avoir une composition identique des phases liquide et solide et éviter une ségrégation due aux différences de densités provenant de changements dans la composition chimique du matériau, de faibles changements de volume lors des transitions de phase pour qu'une simple géométrie des conteneurs et des échangeurs de chaleur puisse être utilisée.

- *Critères cinétiques* : le minimum possible de surfusion lors du refroidissement, le matériau fondu doit se cristalliser à son point de solidification thermodynamique. La surfusion peut être éliminée en introduisant un agent de nucléation ("cold finger") dans le matériau de stockage.
- *Critères chimiques* : stabilité chimique, pas de décomposition chimique pour assurer des systèmes de stockage d'énergie par chaleur latente à long terme, pas de réactions corrosives sur les matériaux de construction, le matériau ne doit être ni toxique, ni inflammable, ni explosif.
- *Critères économiques* : le matériau doit être disponible en grande quantité et à des coûts acceptables.

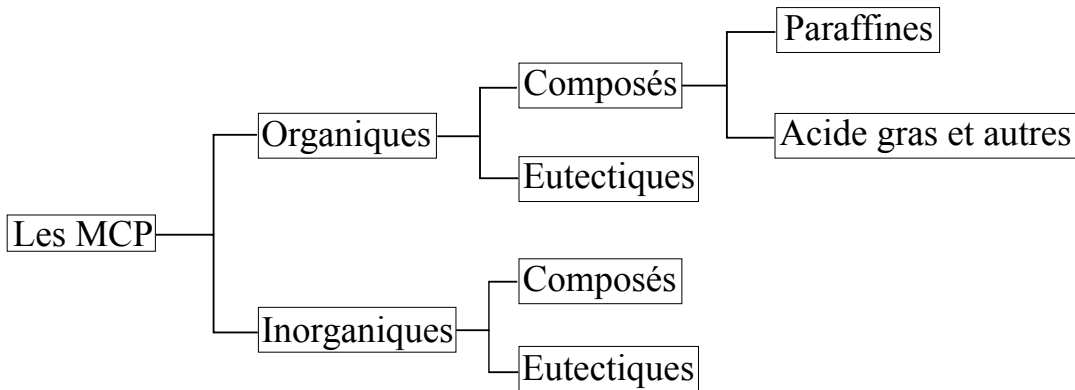


FIGURE 1.3: Les familles de MCP [2].

Sur une plage de température de 0 – 120 °C, les MCP sont classés en deux familles : les organiques et les inorganiques (voir Fig. 1.3). Parmi les MCP organiques, on distingue les *paraffines* qui sont constituées d'alcane linéaires (n-alcane) ou d'alcane à chaînes ramifiées. Les paraffines naturelles sont des mélanges d'alcane caractérisés par leur formule générale C_nH_{2n+2} dont la valeur de n varie entre 13 et 40. À part les paraffines, les autres composés organiques sont majoritairement des *acides gras*. Ces derniers sont caractérisés par leurs chaînes $CH_3(CH_2)_{2n}COOH$ avec des chaleurs latentes de fusion proches de celles des paraffines. La plus part des composés inorganiques de MCP sont des *sels hydratés* caractérisés par $Z.nH_2O$, où Z désigne un composé inorganique (voir par exemple [2] pour la liste de ces composés et leurs propriétés thermo-physiques).

Dans [24], on trouve des expériences sur des mélanges eutectiques à base d'acides gras, fournissant des données sur leurs propriétés thermiques et sur leurs cycles thermiques. Le Ta-

bleau 1.1 présente des composés organiques avec un potentiel pour des applications dans le bâtiment.

TABLEAU 1.1: Substances organiques avec des applications potentielles dans le bâtiment [13].

Compound	Melting point [°C]	Heat of fusion [kJ·kg ⁻¹]
Butyl stearate	19	140
Paraffin C ₁₄ -C ₁₈	20-22	152
Capric-Lauric acid	21	143
Dimethyl sabacate	21	120
Polyglycol E600	22	127.2
Paraffin C ₁₃ -C ₂₄	22-24	189
(34% Mistic + 66% Capric acid)	24	147.7
1-Dodecanol	26	200
Paraffin C ₁₈ (45 – 55%)	28	244
Vinyl stearate	27-29	122
Capric acid	32	152.7

Dans [13], les composés organiques et inorganiques utilisables pour des applications dans le bâtiment sont répertoriés, ainsi que les produits disponibles sur le marché international.

1.2.2 Principe de fonctionnement et caractéristiques physiques

Chaque matériau, quelque soit son état physique, possède des capacités à stocker ou à céder de l'énergie thermique. Ce transfert de chaleur s'effectue de deux façons : le transfert thermique par chaleur sensible et par chaleur latente. Dans le premier cas, le matériau échange de l'énergie sans changer d'état alors que sa température varie. Ceci permet de déduire que la quantité d'énergie échangée est directement liée à la variation de température. Cette capacité du matériau est caractérisée par la *Chaleur massique* C_p [J.kg⁻¹.K⁻¹]. Dans le deuxième cas, le matériau échange de l'énergie à température quasi-constante, en changeant de phase (solide/liquide par exemple). Ce comportement est caractérisé par la *Chaleur latente de changement de phase* du matériau noté L_f pour la fusion ou L_s pour la solidification, exprimée en J.kg⁻¹. Les MCP étudiés pour des applications dans la construction ont de hautes chaleurs latentes et sont destinés à fonctionner à températures ambiantes. La Fig.1.4 illustre la relation entre la température et l'énergie stockée lors de la fusion.

Étant donné que les écarts de températures sont restreints, les quantités d'énergie mises en jeu lors des changements de phase sont beaucoup plus importantes que les échanges d'énergie par chaleur sensible, comme le prouve les expérimentations et les travaux numériques qu'on trouve dans la littérature [15, 16, 17]. Le passage de la phase liquide à la phase solide (cristallisation ou

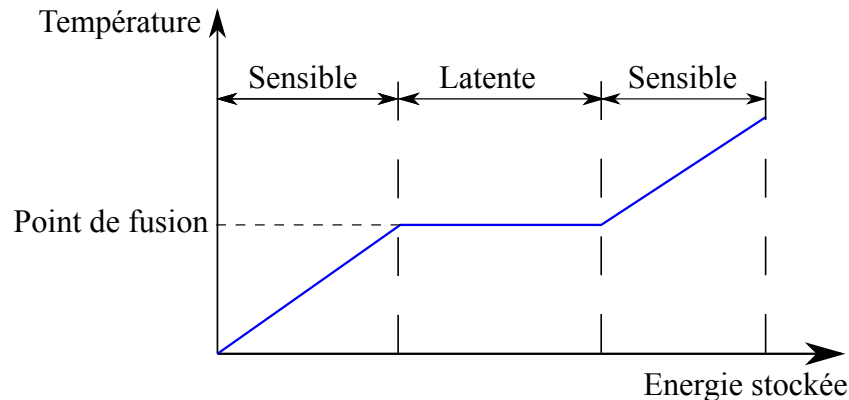


FIGURE 1.4: Principe de fonctionnement des MCP.

solidification) s'effectue grâce à deux phénomènes : la nucléation et la croissance. La nucléation (ou germination) désigne la création des germes solides de dimensions supérieures à un seuil caractéristique du matériau. Les germes de taille faible sont instables et se fondent aussitôt. Plusieurs théories ont été développées permettant de distinguer les germinations homogène et hétérogène [25]. Ensuite les germes solides commencent la croissance, entraînant un échange de matière de la phase liquide vers les cristaux en croissance. Cette deuxième étape de la cristallisation s'accompagne d'une libération d'énergie proportionnelle à la masse de matière échangée. Le coefficient de proportionnalité reliant l'énergie cédée dQ à la masse échangée dm est la chaleur latente de solidification L_s définie par la relation (1.1) :

$$dQ = L_s dm. \quad (1.1)$$

Un défaut de nucléation ou de croissance de cristaux conduit à la surfusion, permettant au matériau de rester en phase liquide alors que la température seuil a été franchie. La fusion est tout simplement le phénomène inverse de la cristallisation et permet de définir par analogie, la chaleur latente de fusion. Les paraffines commercialisées présentent un intérêt particulier pour des applications en stockage d'énergie thermique par chauffage naturel. Elles sont disponibles en grandes quantités et ont diverses utilisations. Elles ne présentent pas d'effet de surfusion lors du refroidissement et respectent les critères thermodynamiques pour être employées dans des applications aux bâtiments. Des études montrent que des capsules de paraffine gardent leurs formes géométriques et leur capacité de stockage d'énergie après 1000 cycles thermiques [26].

Les acides gras présentent des avantages similaires à ceux des paraffines. Avec des points de fusion variant entre 5 et 71 °C, et des chaleurs latentes comprises entre 45 et 210 kJ.kg⁻¹, ils n'ont pratiquement pas d'effet de surfusion. Plusieurs d'entre eux peuvent être utilisés comme MCP. Cependant, certains de leurs eutectiques possèdent des mauvaises odeurs et ne sont pas recommandés pour des applications.

Les MCP inorganiques ne sont pas assez étudiés comme les organiques. Ils sont ininflammables et présentent également des points de fusion aux environs des températures ambiantes

avec de hautes conductivités thermiques. On note plusieurs défauts pour leurs applications : les sels hydratés par exemple ont un grand effet de surfusion et ne sont pas stables au cours des cycles thermiques à cause de la déshydratation. De travaux restent encore à faire pour développer de nouveaux sels hydratés qui respecteront tous les critères favorables pour des applications.

Dans la littérature, on ne dispose pas encore des données thermo-physiques complètes sur les MCP, notamment les conductivités et diffusivités thermiques de chaque phase qui influencent directement le temps de stockage ou de libération d'énergie. D'autres travaux ont exploré la possibilité d'améliorer les capacités de transfert de chaleur des MCP [27, 28, 29, 30, 31, 32]. Les deux méthodes les plus intéressantes pour améliorer le transfert de chaleur dans les dispositifs de stockage d'énergie par chaleur latente sont : l'utilisation d'ailettes intégrées dans les MCP ou l'introduction des matrices constituées de matériaux à haute conductivité thermique. En ce sens, Ismail et al. [33] ont réalisé une étude numérique et expérimentale sur un tube isothermique avec des ailettes longitudinales, contenant un MCP. Velraj et al. [27] ont également mené des expériences et une modélisation numérique du refroidissement de la paraffine contenue dans ce type de tube avec des ailettes intérieures en croix et refroidi à l'extérieur. La même étude est faite dans [28] en recherchant la variation de la conductivité thermique effective lorsqu'on change les structures à haute conductivité thermique introduite dans la paraffine à l'intérieure du tube. Cabeza et al. [32] ont comparé 3 façons différentes d'amélioration des échanges thermiques du composite eau/glace utilisé comme MCP en ajoutant des tubes fins en acier inoxydable, des tubes fins en cuivre et en introduisant une matrice en graphite. Xiao et al. [34] ont fabriqué un MCP à base d'une paraffine (point de fusion de 56 – 58 °C) qui a un temps de solidification 4,5 fois plus faible que la paraffine pure. Tous ces travaux permettent d'améliorer la cinétique de changement de phase mais représente potentiellement des coûts supplémentaires et des complications dans la conception des dispositifs de stockage d'énergie.

1.2.3 Modélisation du comportement thermique avec changement de phase

En général, les modèles numériques se limitent au changement de phase des matériaux homogènes, ou alors à l'échelle microscopique avec des tailles de structure très réduites. Dans [35], un algorithme basé sur la Méthode des Volumes Finis a été utilisé pour simuler, en 2D, le changement de phase dans un métal poreux contenant des MCP, en combinant la dynamique des fluides et le transfert de chaleur. Dans [36], un modèle VOF (Volume Of Fluid) a été employé pour simuler les changements de phases thermiques. Dans [37], un modèle analytique basé sur la méthode de Mori-Tanaka [38] a été développé pour évaluer les performances thermiques des composites contenant des MCP, sans la prise en compte des effets de changements de phase. On remarque qu'il y a beaucoup moins de travaux de simulation numérique que de travaux expérimentaux sur les composites contenant des MCP. Les méthodes les plus utilisées pour la modélisation du changement de phase sont la méthode enthalpique et la méthode de capacité thermique équivalente. Une liste complète des autres méthodes et des travaux de simulation

des systèmes de stockage intégrés à l'enveloppe des bâtiments peuvent être trouvés dans [39] par exemple.

1.2.4 Applications dans le bâtiment

Pour améliorer l'inertie thermique des bâtiments et réduire la consommation d'énergie liée au chauffage et à la climatisation, plusieurs travaux ont prouvé l'efficacité énergétique des matériaux de construction contenant des MCP [17, 19, 18, 33, 21]. Dans [40] par exemple, des échantillons contenant différentes paraffines sont testés. Dans cette étude, la paraffine est reconnue comme le MCP le plus avantageux pour des applications dans le bâtiment. La paraffine convient aux applications dans le bâtiment, mais il faut choisir la meilleure façon de l'introduire dans les matériaux de construction. On distingue généralement trois principes : le mélange direct, l'imprégnation et l'encapsulation. Le mélange direct consiste à introduire le MCP liquide ou en poudre dans le matériau de construction pendant sa fabrication. C'est la technique la plus simple et la plus économique. Dans [41] et [42], il a été prouvé la possibilité de fabriquer des plaques de plâtre pour le stockage d'énergie par chaleur latente, en introduisant du MCP liquide lors du mélange servant à fabriquer les plâtres ordinaires. Cependant, cela peut influencer négativement le processus d'hydratation, la résistance mécanique du liant ou provoquer des réactions chimiques. Le mélange direct pose des problèmes de fuite et d'incompatibilité entre les matériaux [43, 44], ce qui ne permet pas d'avoir des constructions durables. Les expériences montrent que ce procédé est celui qui fait chuter le plus, la résistance mécanique des matériaux de construction [3].

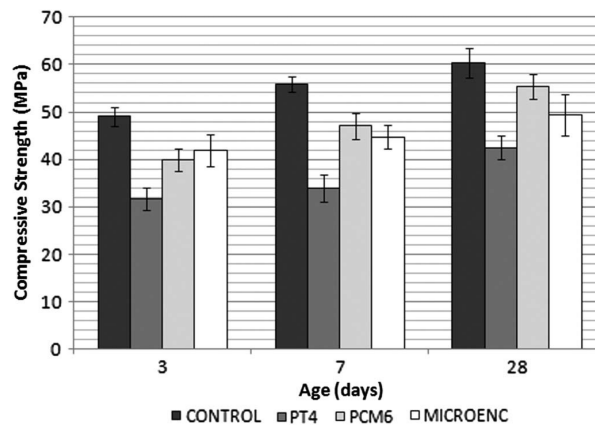


FIGURE 1.5: Résistance mécanique à la compression à 3, 7 et 28 jours de différents mortiers [3]. CONTROL : mortier de référence, PT4 : mortier contenant des agrégats légers imprégnés de MCP, PCM6 : mortier contenant des agrégats légers imprégnés de paraffine et MICROENC : mortier contenant des microcapsules de MCP.

L'imprégnation consiste à immerger le matériaux de construction dans du MCP liquide, ou

d'imprégner au préalable les agrégats servant à la fabrication du matériau de construction. Les expériences montrent que l'impregnation permet d'obtenir des propriétés mécaniques meilleures que le mélange direct [3, 45]. Mais ce procédé n'est pas adapté pour des constructions à long terme à cause des problèmes de fuite [43]. La Fig. 1.5 montre l'évolution de la résistance mécanique à la compression des mortiers contenant du MCP par imprégnation. Cette étude par exemple prouve la baisse des performance mécanique du matériau à cause du MCP.

1.2.5 L'encapsulation

La majorité des travaux récents sur les matériaux de construction contenant des MCP choisissent l'encapsulation. La matrice qui doit contenir les MCP peut être du béton, du plâtre ou des briques. Les applications de MCP dans le bâtiment sont confrontées aux problèmes de fuites, de détérioration des propriétés physiques de la matrice et d'évaporation du MCP (surtout les MCP inorganiques). Ceci impose l'utilisation des MCP encapsulés. Plusieurs travaux expérimentaux ont prouvé l'efficacité énergétique du béton ou de l'enveloppe de bâtiment par l'utilisation des microcapsules de MCP [46, 47, 48]. Les applications passives utilisant les MCP dans le bâtiment sont : les revêtements de mur, les murs, les planchers, les plafonds, les volets. D'après Sakulich et al. [3], la diminution des performances mécaniques à cause des microcapsules de MCP est due uniquement à des effets mécaniques : les capsules n'ont pas de rigidité et elles favorisent l'initiation des fissures. La synthèse de tous ces résultats expérimentaux permet de conclure que l'encapsulation constitue la meilleure méthode, à condition de bien choisir l'enveloppe, sa taille et d'assurer son étanchéité.

Les matériaux constitutifs des enveloppes de MCP doivent être compatibles avec le MCP lui-même et l'environnement immédiat de la capsule, avoir des épaisseurs fines pour éviter des ponts thermiques, de la souplesse et de la résistance mécaniques pour résister contre les changements de volumes et les diverses contraintes. Les métaux ont une bonne conductivité thermique, une bonne tenue mécanique et une bonne étanchéité, mais nécessitent des soudures, et peuvent poser des problèmes de corrosion et rendent la technologie complexe et trop chère. Les plastiques résistent bien au choc, à la perforation, et ont des prix faibles. Les polymères (polyéthylène de haute densité par exemple) sont utilisés pour assurer l'étanchéité ; cependant, ils ont une conductivité thermique moyenne et la fermeture des capsules n'est pas toujours fiable. Les polymères souples sont trop fragiles, et le verre n'a pas de souplesse.

On distingue 3 types d'encapsulation selon la taille des capsules : la macroencapsulation (taille supérieure à 1 mm), la microencapsulation (taille inférieure à 1 mm) et la nanoencapsulation (taille inférieure à 1 μm). La macroencapsulation pose des risques de changements de volume importants et de ralentissement de la cinétique de changement de phase. Les nanocapsules sont très difficiles à fabriquer et ils comportent des risques de surfusion puisque la cristallisation est retardée avec de très faibles quantités de MCP. Concernant la morphologie, les capsules sphériques sont les plus répandues et les plus faciles à fabriquer. De plus, elles assurent un échange de chaleur isotrope dans la structure.

Cabeza et al. [4] ont prouvé l'intérêt de l'incorporation des microcapsules de MCP dans l'enveloppe des bâtiments. L'étude expérimentale porte sur la mesure de la température sur la face intérieure des murs d'un bâtiment expérimental contenant 5% en masse de microcapsules de MCP (voir Fig. 1.6). Dans cette étude, lorsque la température extérieure varie, la face intérieure du mur contenant des microcapsules de MCP atteint des températures maximales plus faibles de 1°C par rapport au mur ne contenant pas de MCP. La température minimale aussi est de 2°C plus élevée que celle du mur sans MCP. De plus, les pics de température sur la face intérieure du mur avec MCP sont atteints avec un retard de 2 heures, ce qui prouve l'effet de l'augmentation de l'inertie thermique du mur contenant les microcapsules de MCP.

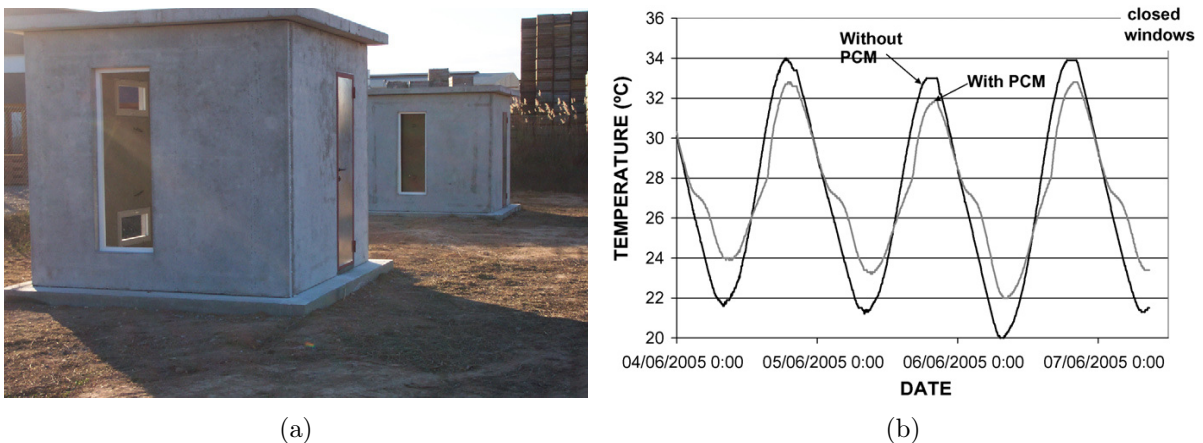


FIGURE 1.6: Température sur la face intérieure d'un bâtiment expérimental contenant des microcapsules de MCP [4]. (a) le bâtiment ; (b) l'évolution de la température sur la face intérieure du mur.

L'ajout de microcapsules de MCP n'a pas d'influence sur le retrait du mortier de ciment [49]. Pour les murs en béton, l'introduction des microcapsules de MCP permet d'obtenir des performances thermiques désirées et au-delà de 25 MPa de résistance à la compression, et 6 MPa pour la traction [50], ce qui est admissible à plusieurs structures.

La microencapsulation est la technologie la plus avancée et la plus intéressante pour l'utilisation des MCP dans les bâtiments. Parmi les méthodes de microencapsulation, la polymérisation in situ est la plus populaire et les capsules obtenues par ce procédé sont sphériques, uniformes, bien arrondies et ne présentent pas d'aspérités. On trouve dans [51] une étude portant sur l'influence de divers paramètres sur les caractéristiques et les performances de la paraffine microencapsulée en termes d'efficacité de la méthode d'encapsulation et des capacités de stockage/restitution d'énergie. D'après Hawlader et al. [51], l'efficacité de l'encapsulation diminue avec l'augmentation du rapport noyau/revêtement. Lorsque ce taux est trop élevé, on a un revêtement partiel du noyau. L'efficacité de l'encapsulation augmente avec le temps d'émulsification, mais elle décroît lorsqu'une durée seuil de 10 minutes est dépassée. Les capsules

obtenues par les procédés de séchage par atomisation ont des performances thermiques faibles par rapport à celle obtenues par coacervation complexe. Cette différence est plus importante pour des rapports noyau/revêtement faibles.

1.3 Méthodes d’homogénéisation

L’incorporation de microcapsules de MCP dans les matériaux de construction dans le but d’obtenir des performances thermiques meilleures conduit inévitablement à des matériaux composites. La description explicite de toutes les hétérogénéités de ces matériaux hétérogènes rend leurs modèles numériques complexes et coûteux en temps de calcul. L’homogénéisation consiste à chercher un milieu homogène équivalent dont les propriétés effectives (ou macroscopiques) peuvent être évaluées analytiquement ou numériquement. Pour réaliser des calculs de structure contenant des microcapsules de MCP à l’échelle de l’ingénierie, il est nécessaire de déterminer les propriétés thermomécaniques du matériau de notre étude par homogénéisation à partir d’un Volume Élémentaire Représentatif (VER). Les méthodes d’homogénéisation comportent des approches analytiques et numériques. Dans le deuxième cas, on se base sur des simulations numériques pour calculer les solutions locales à l’échelle microscopique ainsi que les propriétés effectives sont évaluées numériquement.

1.3.1 Concept du VER

Le concept du VER repose sur le principe de la séparation d’échelle. Ce principe consiste à considérer que la longueur l des fluctuations dans le domaine microscopique soit inférieure à la taille L du VER qui à son tour doit être largement inférieure à celle de la structure macroscopique \bar{L} :

$$l < L \ll \bar{L}. \quad (1.2)$$

Dans les matériaux composites, on peut avoir une disposition ordonnée des hétérogénéités ou une distribution aléatoire des phases. Dans le premier cas, on peut avoir une répétition périodique des hétérogénéités. La description du VER (les phases, leurs morphologies et leur disposition) est obtenue en considérant un sous domaine représentatif d’un motif du matériau. Certains volumes spécifiques sont identifiés comme étant des cellules unitaires de matériaux périodiques [52]. Dans le deuxième cas, la détermination des propriétés effectives est le plus souvent basée sur le calcul de la réponse de plusieurs microstructures générées aléatoirement. Une synthèse des différentes définitions du VER est proposée dans [53]. Le comportement non linéaire de certaines phases du composite constitue une difficulté supplémentaire. Dans [54] par exemple, la recherche du VER est basée sur la taille L et la convergence statistique par rapport au nombre de réalisations de microstructures aléatoires. Stroeven et al. [55] ont déterminé la taille du VER pour des microstructures hétérogènes non linéaires par une analyse statistique en se basant sur plusieurs facteurs : la taille des hétérogénéités, le chargement appliqué, l’énergie

dissipée et la concentration de déformation. Ces travaux ont prouvé que chacun de ces critères conduisent à une taille différente de VER [56]. Dans cette thèse, on se basera sur des VER de morphologies simples pour limiter les coûts de calcul, mais on proposera également des modèles d'homogénéisation basés sur des microstructures aléatoires pour fournir des comportements effectifs moyens utilisables dans les calculs de structure à l'échelle macroscopique.

1.3.2 Méthodes d'homogénéisation analytiques

Partant des travaux pionniers de Hill [57], plusieurs modèles analytiques ont été proposés afin d'obtenir un encadrement des propriétés effectives des matériaux hétérogènes non linéaires. Parmi ces modèles, on peut citer ceux proposés par Willis [58], Dvorak [59], Qiu et Weng [60], Hu [61], Milton et Serkov [62]. Pour aller plus loin que l'encadrement des propriétés effectives, d'autres travaux ont permis d'obtenir des résultats exacts ([63, 64, 65] par exemple) pour des microstructures de géométries simples soumises à des chargements particuliers. Ces résultats analytiques sont obtenus pour des hypothèses restrictives et ne nous permettent pas de réaliser des calculs de structures soumises à des chargements arbitraires avec la prise en compte de comportements non linéaires en 3D (notamment la thermique avec changement de phase).

1.3.3 Méthodes d'homogénéisation numériques pour les problèmes linéaires

Les premiers travaux sur l'homogénéisation numérique sont introduits par Adams et Doner [66] vers la fin des années 1960. Ensuite, Suquet [67] a formulé le problème d'homogénéisation dans le cadre de la Méthode des Eléments Finis. Dans le cas des matériaux avec un comportement linéaire, les calculs d'homogénéisation à la plus petite échelle sont découplés des calculs aux échelles supérieures. Ainsi les calculs sur le VER sont effectués une seule fois avant les calculs à l'échelle macroscopique. Même si tous les constituants du matériau ont des comportements linéaires, la topologie des hétérogénéités peut rendre les approches analytiques inapplicables. Dans le cadre de cette thèse, on emploiera l'homogénéisation numérique dans l'hypothèse de matériaux linéaires pour des cas spécifiques, par exemple pour déterminer des propriétés thermiques effectives à température constante. Pour des simulations à l'échelle macroscopique, les méthodes multi échelle concurrentes (comme EF² [68]) seront employées pour traiter les non linéarités matérielles.

1.3.4 Méthodes d'homogénéisation numériques pour les problèmes non linéaires

L'homogénéisation, développée initialement pour l'élasticité linéaire a été étendue ces dernières années à d'autres matériaux non linéaires : thermique et thermomécanique non linéaire [69, 70], les élastomères magnétorhéologiques [71] ou encore l'endommagement [72]. Le cas des matériaux prenant en compte à la fois les non linéarités matérielles et géométriques

son particulièrement complexes. D'importantes contributions pour ces matériaux sont citées dans [73].

Dans le cadre des méthodes concourantes, l'homogénéisation numérique des matériaux non linéaires est basée sur la résolution de deux problèmes (micro et macro) imbriqués : le problème à l'échelle microscopique qui utilise un VER avec une description explicite de la microstructure, et le problème à l'échelle macroscopique dans lequel le comportement homogénéisé est issu de l'homogénéisation à l'échelle microscopique (voir Fig. 1.7). Pour traiter la non linéarité des

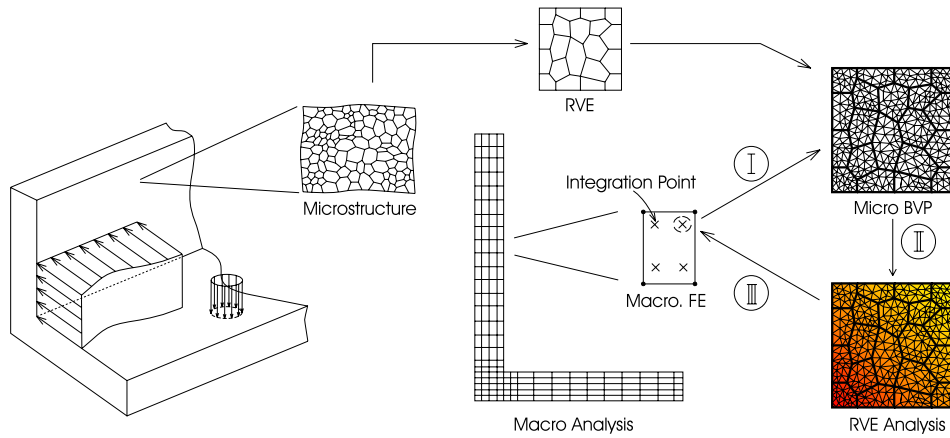


FIGURE 1.7: Illustration de l'homogénéisation numérique [5].

matériaux, plusieurs schémas ont été élaborés. Entre autres, nous pouvons citer les schémas d'homogénéisation du premier ordre et du second ordre. Les schémas du premier ordre ont été les premiers à être développés et sont largement utilisés [74, 75, 76, 77, 78]. En général, les schémas d'ordre élevé se basent sur le schéma du premier ordre, avec un enrichissement des relations permettant les transitions d'échelles, voir par exemple [70, 79, 80, 81, 82]. Dans ce contexte, plusieurs extensions ont été proposées, par exemple pour les plaques et coques [83], la thermomécanique [5, 69], les problèmes de contact et de friction [84, 85]. Dans le cas de la thermique non linéaire, un problème de transfert de chaleur en régime transitoire peut être considéré à l'échelle macroscopique sans une formulation explicite ni du flux de chaleur, ni de la conductivité thermique. Ces derniers sont déterminés par homogénéisation numérique à l'échelle microscopique. Dans les transitions d'échelles, la température et le gradient de température à l'échelle macroscopique sont tous les deux utilisés dans les problèmes à l'échelle microscopique. Le principe de séparation d'échelle permet de coupler un problème transitoire à l'échelle macroscopique avec des problèmes en régime permanent à l'échelle microscopique [86], mais l'utilisation du régime transitoire aux deux échelles est possible [87]. Pour plus de détails sur ces schémas d'homogénéisation et leurs classification, voir par exemple [86].

1.4 Méthodes numériques pour modéliser les interactions entre fissuration et fluides

Le matériau de notre étude contient des microcapsules de MCP qui peut être à l'état solide ou liquide. La présence de ces microcapsules favorise l'endommagement par fissuration de la matrice. Ceci s'explique par la faible rigidité des MCP par rapport aux matériaux cimentaires. Pour prédire les effets du MCP sur le comportement mécanique endommageable des bétons contenant des microcapsules de MCP, il faut des modèles adéquats pour simuler l'initiation et la propagation des fissures dans les matériaux hétérogènes. De plus, il est nécessaire de comprendre l'interaction de ce fluide incompressible avec le comportement mécanique de la matrice qui le contient. L'un des défis de ce travail est de déterminer par des simulations numériques, le rôle du MCP liquide dans le comportement mécanique effectif du matériaux ainsi que les interactions entre le MCP en phase liquide et les fissures.

1.4.1 Méthodes numériques de modélisation de la fissuration

La simulation de l'initiation et de la propagation des fissures a permis d'améliorer considérablement le dimensionnement et la résistance des structures. De nombreuses méthodes comme la méthode des éléments de frontières [88, 89] ou les méthodes sans maillage [90, 91, 92] peuvent être utilisées. Dans cette section, nous nous limiterons aux modèles basées sur la méthode des éléments finis. Ces derniers sont les plus utilisés et sont disponibles dans certains logiciels commerciaux. Une liste plus complète des différentes méthodes pour la modélisation des fissures est disponible dans [93] par exemple.

1.4.1.1 Techniques de remaillage

Cette approche est basée sur la théorie classique de la mécanique de la rupture, dans le cadre de la Méthode des Eléments Finis. En utilisant des algorithmes de remaillage complexes, la méthode permet de suivre directement les fronts de fissure (voir Fig. 1.8).

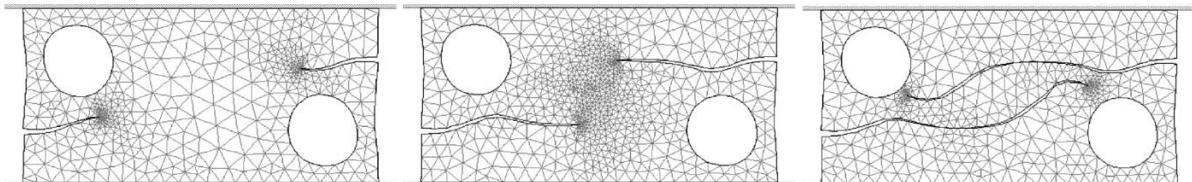


FIGURE 1.8: Fissuration par remaillage dans une éprouvette avec une fissure initiale [6].

Des exemples d'utilisation de cette méthode peuvent être trouvés dans [94, 95, 96]. Le suivi de plusieurs fronts de fissures et surtout en 3D est très compliqué et très couteux en moyens de calcul. Une synthèse de la modélisation de la fissuration par remaillage est donnée dans [97]. Pour éviter ces inconvénients, des modèles d'endommagement peuvent être adoptés.

1.4.1.2 Modèles d'endommagement

Dans ces modèles, l'endommagement est considérée comme une zone de localisation qui se propage dans un domaine et conduit à un adoucissement local du matériaux. Les fissures sont alors décrites comme une zone endommagée n'ayant plus ou peu de rigidité. Plusieurs lois permettent de modéliser cette détérioration progressive des matériaux. L'utilisation directe des lois de comportement adoucissant conduit à une forte dépendance de la solution Eléments Finis au maillage : il y a non convergence de la solution par rapport à la taille des éléments. Pour résoudre ce problème, des régularisations des lois de comportement adoucissants ont été proposées, notamment le "mesh-adapted softening" qui est basée sur la taille des éléments du maillage. La méthode tient compte de la présence de fissures dans la loi de comportement. La déformation est donc la somme d'une déformation élastique et d'une déformation de fissure :

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^c. \quad (1.3)$$

La loi de comportement du matériaux est donnée par deux relations différentes selon qu'on soit dans la zone endommagée (une fonction f^c permet d'exprimer la contrainte en fonction de la déformation de fissure) ou non (la loi de Hook classique par exemple). Cette approche est introduite dans [98] sous le nom de *crack band*, qui utilise une fonction f^w dépendant de l'ouverture de fissure pour exprimer la contrainte. La bande de localisation de la fissure est choisie avant le calcul ou pendant le calcul en tenant compte de l'orientation de la fissure. Dans ces modèles d'endommagement, les fissures évoluent parallèlement aux arêtes des éléments du maillage (*mesh bias* [99]). Deux méthodes ont permis de résoudre ce problème : le *crack tracking* [100, 101] et les *éléments finis mixtes stabilisés* [102, 103]. D'autres modèles d'endommagement dépendant du temps ont été développés (voir [104] par exemple). Dans ces modèles, un temps caractéristique τ_c est introduit pour limiter la progression de l'endommagement : dans un élément, la variable d'endommagement passe progressivement de 0 à 1 durant ce temps caractéristique.

Afin d'éviter la sensibilité de la solution au maillage durant la phase d'adoucissement, d'autres travaux ont adopté des techniques de régularisation, encore appelées limiteurs de localisation. Les plus connues sont : la méthode par approximation non locale de la déformation et les méthodes utilisant le gradient de l'endommagement. Le principe de ces méthodes consiste à enrichir la description mécanique du milieu de manière à pouvoir décrire des états non homogènes de déformation. La progression de l'endommagement n'est pas gouvernée par la déformation équivalente mais par la moyenne de la déformation équivalente $\bar{\varepsilon}_{eq}$ dans un voisinage décrit par un volume représentatif V_r . Ce dernier est défini par une longueur caractéristique l_c . La déformation équivalente en un point \mathbf{x} est de la forme [105]

$$\bar{\varepsilon}_{eq} = \frac{1}{V_r(\mathbf{x})} \int_{\Omega} \xi(\mathbf{y}; \mathbf{x}) \varepsilon_{eq}(\mathbf{y}) d\Omega, \quad (1.4)$$

où ξ est une fonction de pondération non locale et \mathbf{y} la position d'un élément de volume

infinitésimale $d\Omega$. Dans (1.4), V_r est défini au point \mathbf{x} par :

$$V_r(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \xi(\mathbf{y}; \mathbf{x}) d\Omega. \quad (1.5)$$

La fonction de pondération ξ est supposée homogène et isotrope, c'est-à-dire qu'elle dépend uniquement de la distance r qui sépare les points \mathbf{y} et \mathbf{x} [106]. Plusieurs fonctions de pondération sont utilisées dans la littérature mais la forme la plus répandue est la Gaussienne (voir Fig. 1.9) :

$$\xi(\mathbf{y}; \mathbf{x}) = \xi(r) = \frac{1}{2\pi^{3/2}l_c^3} \exp\left[-\frac{r^2}{2l_c^2}\right]. \quad (1.6)$$

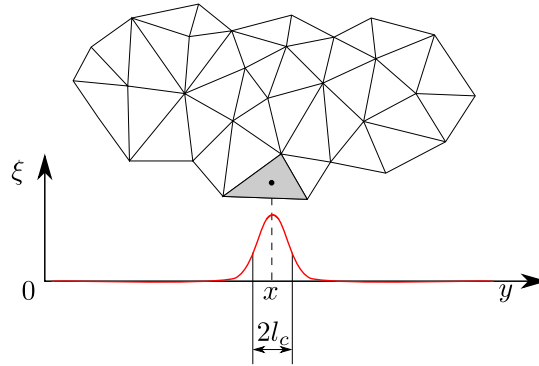


FIGURE 1.9: Illustration de la fonction de pondération ξ .

Pour une représentation diffuse du champ de la déformation équivalente $\bar{\epsilon}_{eq}$, l'équation (1.4) peut être réécrite en fonction du gradient de $\bar{\epsilon}_{eq}$ en développant $\epsilon_{eq}(\mathbf{y})$ en série de Taylor et en négligeant les termes d'ordre supérieur ou égal à 4 [107, 108] :

$$\bar{\epsilon}_{eq} = \epsilon_{eq} + c\Delta\epsilon_{eq}, \quad (1.7)$$

où $\Delta(\cdot)$ est l'opérateur Laplacien et c [m^2] un paramètre caractéristique du milieu hétérogène. La relation (1.7) correspond à la formulation explicite du problème. Les modèles basés sur cette formulation ont conduit à des instabilités mécaniques dans la phase d'écroutissage positive [109]. Une formulation implicite a été proposée [107] afin d'éviter ce problème :

$$\epsilon_{eq} = \bar{\epsilon}_{eq} - c\Delta\bar{\epsilon}_{eq}. \quad (1.8)$$

Dans la formulation implicite, la déformation non locale $\bar{\epsilon}_{eq}$ n'est pas donnée explicitement en fonction de la déformation équivalente ϵ_{eq} mais elle est solution de l'équation de Helmholtz (1.8) avec la condition aux limites suivante :

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}_{eq}}{\partial \mathbf{n}} \equiv n_i \frac{\partial \bar{\epsilon}_{eq}}{\partial x_i} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (1.9)$$

où \mathbf{n} le vecteur normal sortant sur $\partial\Omega$. Les modèles non locaux permettent de réaliser une modélisation cohérente de la rupture et du comportement adoucissant des matériaux quasi-fragiles, mais le coix de la longueur caractéristique l_c n'est pas aisé. De plus, ces modèles nécessitent des développements conséquents afin d'introduire des degrés de libertés supplémentaires pour le calcul de $\bar{\epsilon}_{eq}$.

1.4.1.3 CZM

Les modèles cohésifs (CZM pour Cohesive Zone Model) ont été introduits par Barenblatt [110] et Dugdale [111] pour décrire les champs de contraintes et de déformations en pointe de fissure dans les solides élastiques linéaires. Comme le montre la Fig. 1.10a, ces modèles considèrent une zone de fissuration en amont de la pointe de fissure où une force s'oppose à l'ouverture de la fissure.

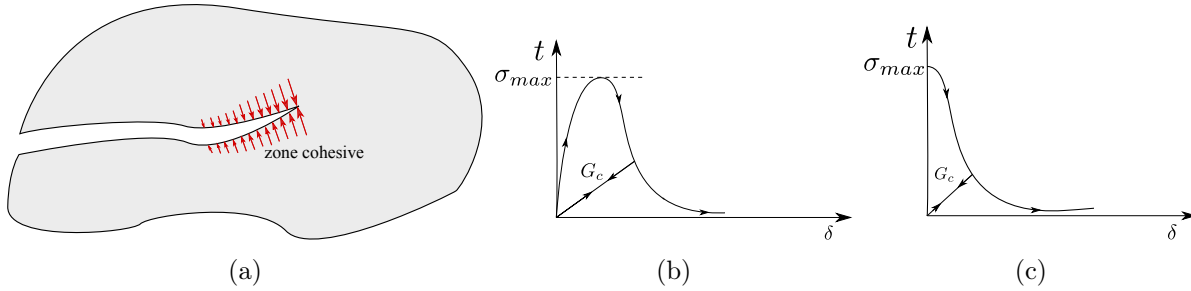


FIGURE 1.10: Illustration des modèles cohésifs pour la fissuration : (a) la zone cohésive ; (b) loi de comportement traction-ouverture intrinsèque ; (c) loi de comportement traction-ouverture extrinsèque.

Seule cette zone a un comportement non linéaire (le champs de déplacement peut admettre des discontinuités mais le matériaux présente toujours une résistance). Les premières lois cohésives introduites dans la méthode des éléments finis ont été proposées par Hillerborg [112]. Ces travaux ont conduit à l'utilisation des lois TSL (traction-separation law) qui permettent d'exprimer la force s'exerçant sur les lèvres d'une fissure en fonction de l'ouverture de fissure. On distingue en général deux types de loi TSL : les lois intrinsèques et extrinsèques (voir Figs. 1.10b et 1.10c). L'aire en dessous d'une courbe TSL correspond au taux de restitution d'énergie critique G_c . Les modèles de zone cohésive intrinsèques sont les plus utilisés dans les logiciels commerciaux en raison de leur implémentation facile en éléments finis. Le principe consiste à introduire des éléments cohésifs dans le trajet de la fissure en considérant une raideur initiale finie qui adoucit localement le matériaux. Les modèles cohésifs extrinsèques proposés par Camacho et Ortiz [113] consistent à dédoubler les noeuds et à introduire des éléments cohésifs sur le trajet de la fissure au fure et à mesure qu'elle se propage. La raideur initiale de ces éléments est choisie de telle sorte que le matériaux ne soit pas fragilisé localement. Dans [114], ce modèle a permis de simuler la propagation de fissures en 3D. Une liste des différents modèles

cohésifs souvent utilisés est proposé dans [115]. Dans tous les modèles cohésifs, le nombre de degré de libertés augmente au fur et à mesure que les fissures se propagent, et l'introduction des nouveaux éléments pendant le calcul devient un autre problème à gérer dans l'implémentation pour garder des codes de calcul parallélisables. La première méthode à être utilisée pour modéliser la propagation de fissure est le dédoublement des noeuds. La discontinuité qu'est la fissure est représentée en dédoublant les noeuds sur le trajet. La Fig. 1.11 illustre le principe pour un maillage constitué d'éléments 2D à 4 noeuds.

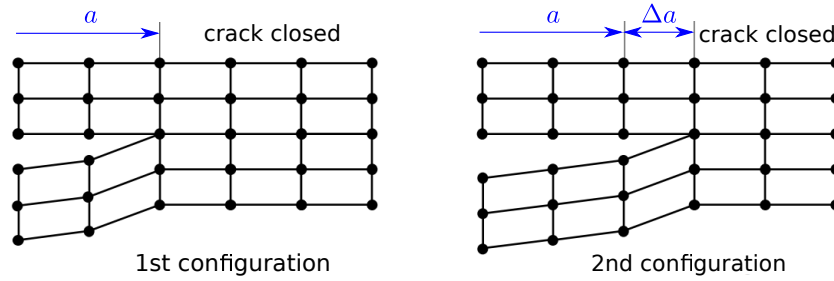


FIGURE 1.11: Stratégie de dédoublement de noeuds pour la propagation de fissures [7].

Cette stratégie a l'avantage d'être simple car ne nécessite pas le développement de lois de comportements complexes. Son inconvénient est sa forte sensibilité au maillage, c'est-à-dire que le trajet de fissure est très influencé par la topologie du maillage.

1.4.1.4 X-FEM et Tick Level Set

La méthode X-FEM est basée sur l'enrichissement local des discrétisations spatiales de la Méthode des éléments Finis [116, 117, 118]. Cette méthode permet d'approximer la solution en cas de discontinuités sans utiliser un maillage conforme. La méthode X-FEM introduite dans [116] a permis de modéliser la propagation de fissures en utilisant le principe de la partition de l'unité. Ce principe présenté dans [119] consiste à introduire dans l'approximation éléments finis, des fonctions analytiques discontinues associées à des inconnues nodales supplémentaires. Considérons $\Omega \subset \mathbb{R}^D$ un domaine ouvert de dimension D . Ω est discrétisé avec N^{el} éléments. L'approximation X-FEM est donnée par :

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I} N_i(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i + \sum_{j \in I^*} M_j(\mathbf{x}) \mathbf{a}_j \quad (1.10)$$

avec

I : L'ensemble des noeuds de Ω

I^* : L'ensemble des noeuds enrichis de Ω

N_i : Fonction de forme de l'approximation éléments finis standard au noeud i

M_j : Fonction d'enrichissement local au noeud j

u_i : Inconnu de l'approximation éléments finis standard au noeud i

\mathbf{a}_j : Inconnu nodale supplémentaire d'enrichissement au nœud j

La fonction d'enrichissement locale M est de la forme :

$$M_i(\mathbf{x}) = N_i^*(\mathbf{x})\chi(\mathbf{x}), \quad (1.11)$$

avec $\chi(\mathbf{x})$, la fonction d'enrichissement globale qui exprime la discontinuité dans un élément. La fonction $N^*(\mathbf{x})$ peut être identique à $N(\mathbf{x})$. En notant w_j le support du nœud j , l'ensemble I^* est défini par :

$$I^* = \{j \in I \mid w_j \cap \Gamma \neq \emptyset\}. \quad (1.12)$$

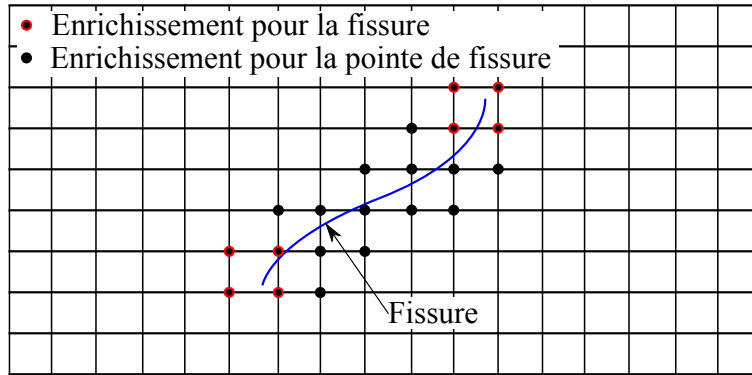


FIGURE 1.12: Nœuds d'enrichissement pour une fissure dans la méthode X-FEM.

Certains éléments de Ω n'ont pas la totalité de leurs nœuds qui appartiennent à I^* . Ces éléments mixtes sont partiellement enrichis et désignés sous le nom de "blending elements". Ils sont à l'origine de problèmes de convergence et posent des difficultés pour l'application des conditions aux limites lorsqu'ils se trouvent au bord de Ω [120, 121, 122]. La particularité de chaque approche X-FEM se situe au niveau du choix de I^* , de la fonction d'enrichissement global $\chi(\mathbf{x})$, et des fonctions de forme $N_i^*(\mathbf{x})$. Dans [123], l'utilisation de plusieurs fonctions level-set dans l'approximation X-FEM (μ -XFEM) a permis d'introduire plusieurs interfaces dans un même élément, ceci afin d'utiliser des maillages réguliers avec des structures contenant des inclusions très proches. D'autres travaux ont procédé par l'ajout d'un enrichissement en chaque pointe de fissure [124, 125]. Plus récemment, la méthode Tick Level Set (TLS) consiste à introduire une longueur critique l_c dans le sillage du front de fissure. Cette longueur est indépendante du maillage. La Fig. 1.13 montre un exemple de fissure décrite par cette méthode. La méthode utilise une loi d'évolution de la fissure qui dépend d'une fonction level-set [8, 124]. Les fissures étant considérées comme des interfaces ouvertes, une deuxième fonction level-set est utilisée pour suivre les pointes de fissure. Cette méthode est capable de prédire l'initiation des fissures et des trajets de fissures complexes avec des bifurcations. La fonction level-set a été utilisée au départ dans les méthodes numériques pour traiter des interfaces mobiles en 2D ou 3D [126]. Ensuite, elle sert très souvent à la description des discontinuités (dans le cadre de la méthode X-FEM par exemple).

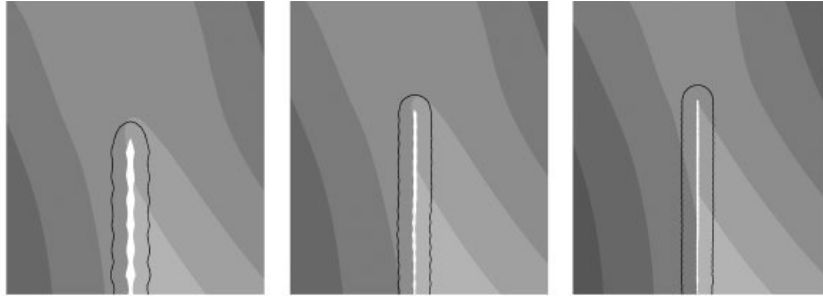


FIGURE 1.13: Résultat de simulation d'une fissure par la méthode TLS pour 3 maillages [8]. La zone blanche indique la surface endommagée et la courbe noire indique le front de fissure.

1.4.1.5 Méthode de champs de phase

Partant des travaux de Francfort and Marigo [127], la méthode de champs de phase pour la fissuration est basée sur la minimisation de l'énergie du solide sous forme variationnelle. La discontinuité que représente la fissure est décrite par une variable scalaire d qui permet de distinguer la partie endommagée de la partie saine. Cette méthode a l'avantage de prédire l'initiation et la propagation de multiples fissures avec des ramifications sans une description explicite de la géométrie des discontinuités. Dans ce travail, nous avons choisi cette méthode pour les raisons suivantes.

- Sa capacité à décrire la propagation de multiples fissures dans des géométries complexes,
- Sa capacité à prédire l'initiation.
- Son insensibilité au maillage.
- La solution obtenue est en accord avec celle obtenue par la théorie de Griffith, dans la limite d'une taille infiniment petite des éléments (Γ - convergence).
- La fissure étant remplacée par une interface diffuse, la méthode traite de façon robuste l'adoucissement du matériau.

La méthode de champs de phase est très utilisée pour suivre l'évolution de microstructures lors d'une simulation et son domaine d'application devient de plus en plus large avec l'évolution des moyens de calcul [128]. Parmi les domaines d'applications, on peut citer : la solidification [129], les transformations de phase à l'état solide [130], la croissance des grains [131], la dynamique des dislocations [132], des applications biologiques [133, 134], et récemment la propagation des fissures [22, 135].

Dans cette thèse, la méthode de champs de phase est adoptée et implémentée telle que proposée dans [22] pour la modélisation de l'endommagement par fissuration des composites contenant des microcapsules de MCP. Elle est présentée plus en détails dans la section 4.2 du chapitre 4.

1.4.2 Interaction entre fissuration et présence d'un fluide

Dans les composites contenant des microcapsules de MCP, la présence de fissures favorise les problèmes de fuites reportés dans les observations expérimentales. Cet écoulement du MCP liquide des microcapsules vers les fissures fait partie des phénomènes liés à l'endommagement de ces composites. On a donc besoin d'un modèle pour simuler cet écoulement dans le milieu fissuré. Les premiers travaux de simulation numérique de la fracturation hydraulique ont été mené par Boone et Ingraffea [136], qui ont combiné les éléments cohésifs et la méthode des différences finis. Plus tard, d'autres travaux ont porté sur des solutions analytiques de la fracturation hydraulique [137, 138, 139]. Il existe très peu de travaux sur les modèles d'interaction fluide-structure prenant en compte l'endommagement de la structure et l'écoulement incompressible du fluide dans la structure endommagée. Dans [9], l'interface fluide-structure est noyée dans le domaine (embedded interface method), c'est-à-dire que le maillage de tout le domaine ne tient pas compte de l'interface. Ce principe admet que la fissure est saturée par le fluide dès quelle évolue. Pour la fissuration, un simple modèle d'endommagement est utilisé, ce qui a permis de ne traiter que le cas de géométries simples contenant une fissure initiale. La Fig. 1.14 montre un exemple de solution obtenu par Yogaraj [9].

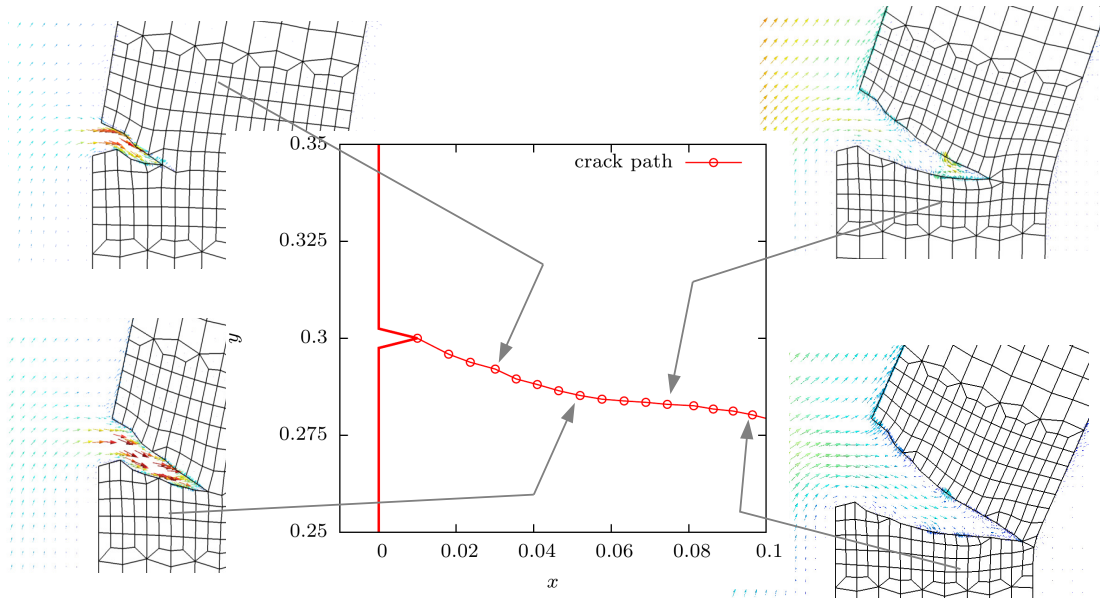


FIGURE 1.14: Fissuration avec interaction d'un fluide (embedded interface methods) [9].

Pour étudier le cas de multiples fissures avec des géométries complexes, un couplage entre la méthode de champs de phase et l'interaction fluide-structure est proposé dans [140] où la pression du fluide agit sur la propagation des fissures (en utilisant le modèle présenté dans [141]). Une extension de la méthode de champs de phase pour la fracturation hydraulique des milieux poreux saturés a été proposée par Xia et al. [142]. Ce modèle prend en compte l'endommage-

ment à l'interface entre la matrice et les hétérogénéités, sous l'effet de l'injection d'un fluide à haute pression dans le milieu poreux. D'autres approches pour la simulation de la propagation de fissures en présence d'un écoulement saturé de fluide ont été développées : techniques de remaillage [143, 144], les éléments discrets [145, 146] ou la méthode X-FEM [147, 148]. Dans notre travail, la méthode de champs de phase est le meilleur choix pour décrire les fissures mais une difficulté supplémentaire réside dans la simulation d'un écoulement insaturé dans la matrice fissurée.

1.5 Plan de la thèse

Dans le chapitre 2, nous proposons tout d'abord un modèle à deux échelles (méthode EF²) pour simuler le comportement thermomécanique des structures contenant des microcapsules de MCP. Le modèle de capacité thermique équivalente utilisé à l'échelle microscopique est exposé en détail avec des exemples pour illustrer le comportement thermique avec changement de phase. Ensuite, la stratégie multi échelle est présentée en détails, suivie de cas tests montrant le potentiel de l'outil développé à prédire le comportement thermomécanique des structures de génie civil contenant des microcapsules de MCP.

Dans le chapitre 3, des études expérimentales sont réalisées sur des mortiers de ciment contenant des microcapsules de MCP d'une part pour obtenir des images de la microstructure par diverses techniques : la microtomographie et la microscopie électronique à balayage (MEB). D'autre part, les mêmes matériaux sont étudiés par le Hot Disk et la plaque chaude gardée transitoire (Hot Plate) pour déterminer les caractéristiques thermiques effectives : conductivités thermiques, capacité de stockage et de restitution d'énergie thermique et tenue aux cycles thermiques. Les conductivités thermiques déterminées expérimentalement sont confrontées aux résultats obtenus par homogénéisation numérique.

Le chapitre 4 présente en détails la méthode de champ de phase. Ensuite, on s'est intéressé au comportement mécanique effectif du matériau lorsque le MCP se trouve en phase liquide. Le fluide est modélisé avec les équations de Navier-Stokes pour tenir compte de l'incompressibilité. Une étude paramétrique est menée afin de montrer l'influence de la présence du fluide incompressible sur le comportement mécanique effectif du matériau pour différentes combinaisons de paramètres matériaux et fractions volumiques de MCP. Puis, la fissuration dans les composites contenant des microcapsules de MCP est simulée. Le but étant d'étudier l'évolution du comportement mécanique des matériaux hétérogènes contenant les microcapsules de MCP : l'effet de l'affaiblissement des composites par le MCP (comportement élastique et endommagement par fissuration) et la diffusion du MCP liquide dans le composite. Cette fois-ci, on considère que le domaine solide est un milieu poreux initialement rempli d'air et qui sera progressivement envahi par le fluide. Pour cela, un modèle de diffusion non linéaire est développé pour simuler l'écoulement diphasique dans le squelette solide.

Modélisation multi échelle du comportement thermomécanique des bétons contenant des matériaux à changement de phase : une approche EF²

Sommaire

2.1 Introduction	26
2.2 Le modèle de changement de phase thermique à l'échelle microscopique 26	26
2.2.1 Equations décrivant le MCP	26
2.2.2 Un exemple 3D du modèle de changement de phase thermique	29
2.2.3 Illustration du comportement thermique du MCP en 2D	33
2.3 Homogénéisation des propriétés mécaniques pendant les changements de phase	37
2.3.1 Le problème d'homogénéisation	37
2.3.2 Résultats	39
2.4 Modélisation multi échelle (EF²) du comportement thermique transitoire avec changement de phase	40
2.4.1 Le problème à l'échelle microscopique	41
2.4.2 Le problème à l'échelle macroscopique	41
2.5 Résultats numériques	45
2.5.1 Transfert de chaleur en régime stationnaire	45
2.5.2 Conduction de chaleur transitoire en 2D	49
2.5.3 Conduction thermique transitoire en 3D	50
2.5.4 Exemple d'étude thermo-mécanique en 3D	52
2.5.5 Effets de la fraction volumique du MCP	54
2.6 Conclusion	55

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous proposons un modèle multi-échelle, non linéaire pour prédire le comportement thermomécanique des composites contenant des MCP en utilisant la méthode EF^2 (voir par exemple [68, 149, 150, 70], et une synthèse sur ces catégories de méthodes dans [151]). Dans la méthode EF^2 , on utilise une description explicite du VER à chaque point d'intégration du modèle élément fini de la structure macroscopique. La réponse non linéaire du VER est obtenue numériquement et transférée à la structure en utilisant des conditions aux limites et des opérations de moyennes adéquates.

Cette technique a été récemment employée pour étudier la conduction de chaleur non linéaire (sans changements de phase) dans [5, 152]. L'objectif de notre travail est d'étendre la méthode EF^2 aux VER contenant du MCP, où les équations locales combinent la dynamique des fluides et la conduction de chaleur avec une description des transitions de phases solide/liquide. La réponse effective de la structure peut donc être obtenue numériquement afin de prédire les effets du MCP sur la réponse de la structure.

Le plan de ce chapitre est le suivant : dans la section 2.2, les équations à l'échelle microscopique, décrivant le changement de phase solide-liquide sont présentées. Dans la section 2.3, le modèle mécanique macroscopique est décrit, et il y est prouvé que ses propriétés effectives peuvent être évaluées sans un couplage fort avec le comportement thermique. Ensuite, le couplage entre les propriétés thermiques non linéaires de l'échelle microscopique et de l'échelle macroscopique est présenté dans la section 2.4. Enfin, des résultats numériques 2D et 3D sont présentés dans la section 2.5 pour vérifier la méthode et pour étudier les effets du MCP sur la réponse effective de la structure. Le contenu de ce chapitre a été publié dans [153].

2.2 Le modèle de changement de phase thermique à l'échelle microscopique

Dans cette section, nous présentons les équations à résoudre dans le modèle à l'échelle microscopique. Nous considérons le VER décrit dans la Fig. 2.1. La matrice est considérée comme un matériau linéaire élastique. Le modèle thermique est supposé linéaire. La microcapsule est composée d'une membrane considérée aussi comme un solide élastique avec une épaisseur finie. A l'intérieur de la capsule, le MCP peut changer de solide en liquide en fonction de la température. Les équations qui décrivent ce modèle sont exposées dans la suite.

2.2.1 Equations décrivant le MCP

Pour modéliser le comportement thermique avec changement de phase dans le MCP, la méthode de capacité thermique équivalente est utilisée [16]. Dans sa phase liquide, le MCP est considéré comme un fluide Newtonien incompressible. Les interfaces sont supposées parfaites et la dissipation visqueuse est négligée. De plus, nous négligeons les changements de volumes

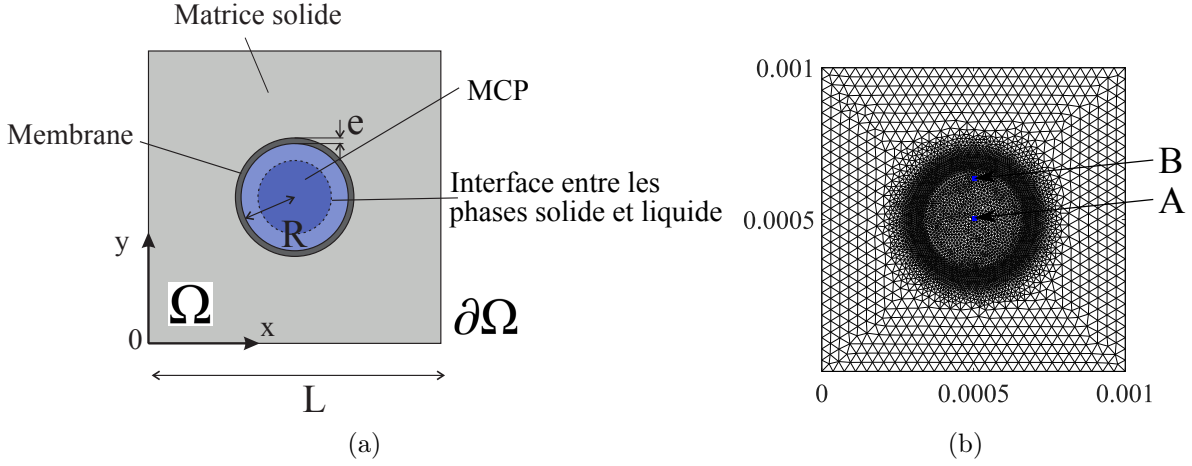


FIGURE 2.1: VER contenant une microcapsule de MCP : (a) géométrie ; (b) maillage Eléments Finis.

associés aux transitions de phase. Avec ces hypothèses, les équations du modèle sont les suivantes. Dans la matrice, la membrane et le MCP solide, la conservation d'énergie est donnée par :

$$\rho_s C_{ps} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{\lambda}_s \nabla T), \quad (2.1)$$

où $\nabla \cdot (\cdot)$ désigne l'opérateur de divergence, ρ_s est la densité, C_{ps} la chaleur spécifique, T la température, t le temps, $\boldsymbol{\lambda}_s$ le tenseur de conductivité thermique. La conduction est supposée isotrope, c'est-à-dire $\boldsymbol{\lambda}_s = \lambda_s \mathbf{1}$ avec $\mathbf{1}$ le tenseur identité du second ordre. La conservation de masse dans la phase liquide du MCP est exprimée par :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.2)$$

où \mathbf{v} est la vitesse du fluide. L'équation d'équilibre est :

$$\rho_\ell \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho_\ell (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) = \nabla \cdot [-p \mathbf{1} + \eta_a (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)] + \mathbf{F}_b, \quad (2.3)$$

où ρ_ℓ est la densité du MCP liquide, p est la pression, η_a est la viscosité dynamique apparente, $\nabla(\cdot)$ est l'opérateur gradient et \mathbf{F}_b est utilisée pour forcer une solution triviale de $\mathbf{v} = 0$ dans le MCP solide :

$$\mathbf{F}_b = -A_v(T) \mathbf{v}. \quad (2.4)$$

Selon le modèle de Darcy utilisé dans [154], $A_v(T)$ est donné par

$$A(T) = C \frac{(1 - f(T))^2}{(f(T))^3 + b}, \quad (2.5)$$

où $b = 10^{-3}$ est un paramètre numérique pour éviter des divisions par zéro, et C est un autre paramètre constant dont la valeur varie généralement entre 10^4 et 10^7 , et qui agit sur le front de fusion. Dans [155] par exemple, $C = 10^5$ est choisi. La fraction de liquide f dans le MCP est donnée par :

$$f(T) = \begin{cases} 0 & \text{si } T < T_s, \\ \frac{T - T_s}{T_\ell - T_s} & \text{si } T_s < T < T_\ell, \\ 1 & \text{si } T > T_\ell, \end{cases} \quad (2.6)$$

où T_s est la température de transformation de la phase solide à la phase liquide et T_ℓ est la température à laquelle la tranformation de la phase liquide à la phase solide commence. En dessous de T_s , le MCP est solide et au dessus de T_ℓ , le MCP est liquide. Entre T_s et T_ℓ , on a une description diffuse de la transition de phase où λ , η et C_p varient dans le MCP. Une fonction $\lambda_a(T)$ est utilisée pour prendre en compte les variations locales de la conductivité thermique dans le MCP :

$$\lambda_a(T) = \lambda_s + (\lambda_\ell - \lambda_s)f(T). \quad (2.7)$$

L'approximation suivante est utilisée pour la viscosité apparente :

$$\eta_a(T) = \eta_\ell(1 + A_v(T)). \quad (2.8)$$

Dans (2.8), $A_v(T)$ tend vers l'infini quand le MCP est solide et $\eta_a(T) = \eta_\ell$ quand le MCP est liquide. La chaleur latente de fusion L_F , liée au changement de phase est introduite dans la chaleur spécifique apparente C_{pa} :

$$C_{pa} = \begin{cases} C_{ps} & \text{si } T < T_s, \\ \frac{1}{2}(C_{ps} + C_{pl}) + \frac{L_F}{T_\ell - T_s} & \text{si } T_s < T < T_\ell, \\ C_{pl} & \text{si } T > T_\ell. \end{cases} \quad (2.9)$$

Dans (2.9), la capacité calorifique apparente montre un pic dans la plage de température $[T_s, T_\ell]$. Cette expression peut aussi être remplacée par des données expérimentales issues de la caractérisation par calorimétrie du MCP. Ce pic augmente avec L_F . Enfin, la conservation d'énergie dans l'inclusion en MCP est donnée par [16] :

$$\rho_\ell C_{pa} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_\ell C_{pa} \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda_a \nabla T). \quad (2.10)$$

Nous supposons que la vitesse du MCP liquide à l'interface Γ_{inc} sur la membrane est égale à zero :

$$\mathbf{v} = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Gamma_{inc}. \quad (2.11)$$

Les équations ci-dessus sont résolues par la méthode des éléments finis (voir [156, 157] pour plus de détails). Le maillage Eléments Finis pour la résolution est présenté dans la Fig. 2.1 (b).

2.2.2 Un exemple 3D du modèle de changement de phase thermique

Dans cet exemple, on considère un domaine biphasique, cubique de 1 mm de côté, contenant 3 billes en MCP de 0,2 mm de rayon, comme l'indique la Fig. 2.2.

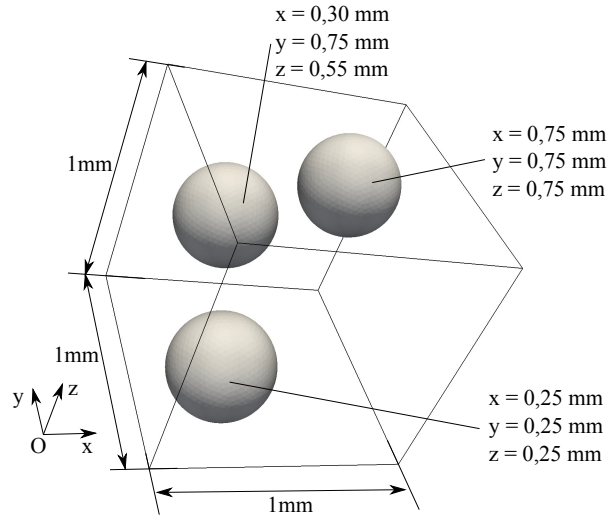


FIGURE 2.2: Géométrie du problème de changement de phase en 3D avec la position des billes de MCP dans le domaine.

Le MCP possède une température de fusion de 300,15 K et sa chaleur latente de fusion est de $L_F = 1,68 \times 10^5 \text{ J.kg}^{-1}$. La viscosité dynamique de la phase liquide est $\eta_\ell = 3,42 \times 10^{-3} \text{ Pa.s}$. Les propriétés thermo-physiques de chaque constituant sont données dans le Tableau 2.1.

TABLEAU 2.1: Propriétés thermo-physiques des différentes phases dans le VER.

	$\lambda \text{ [W. m}^{-1}. \text{K}^{-1}]$	$\rho \text{ [kg. m}^{-3}]$	$C_p \text{ [J. kg}^{-1}]$
Matrice	0,92	2300	880
Membrane	0,17	1200	1400
MCP solide	0,23	900	2400
MCP liquide	0,15	934	1800

Initialement, tout le domaine est à une température uniforme de 293,15 K. Le profil de température de la Fig. 2.3 est imposé sur la face $x = 0 \text{ mm}$ tandis que les autres faces sont

isolées. Le temps de la simulation est de 15 s.

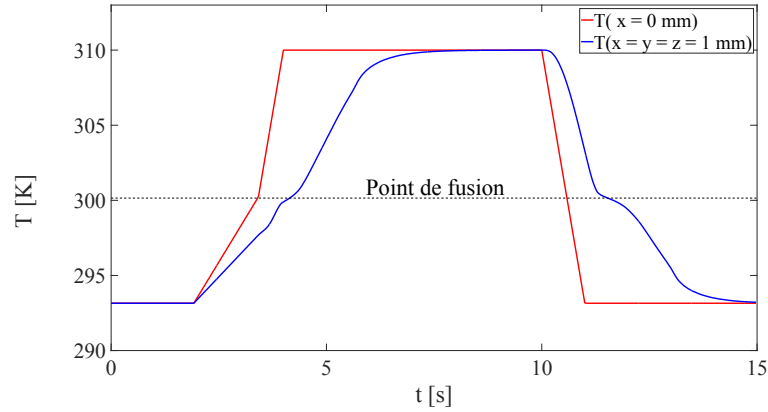


FIGURE 2.3: Profil de température imposée sur la face $x = 0$ mm et température au point $x = y = z = 1$ mm en fonction du temps.

La Fig. 2.3 montre l'évolution de la température en $x = y = z = 1$ mm en fonction du temps. Cette solution montre les effets du comportement non linéaire dans l'inclusion. Les Figs. 2.4 à 2.8 montrent les résultats de la simulation : les isosurfaces de la température et la fonction indicatrice de MCP liquide à différents temps.

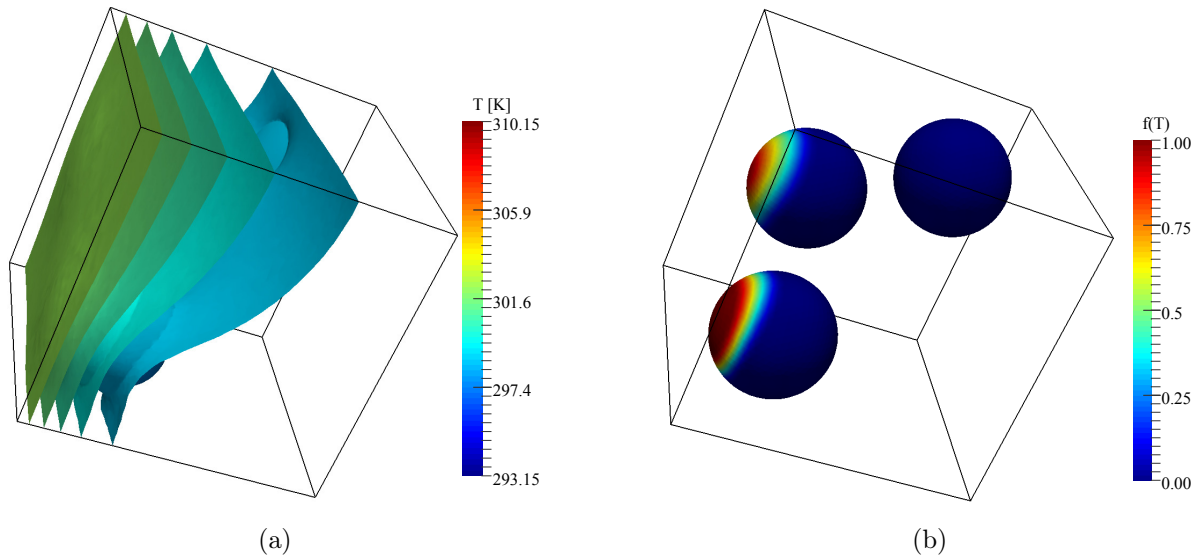


FIGURE 2.4: Solution du problème 3D au temps $t = 3, 6$ s ; (a) isosurfaces de température ; (b) indicateur de phase.

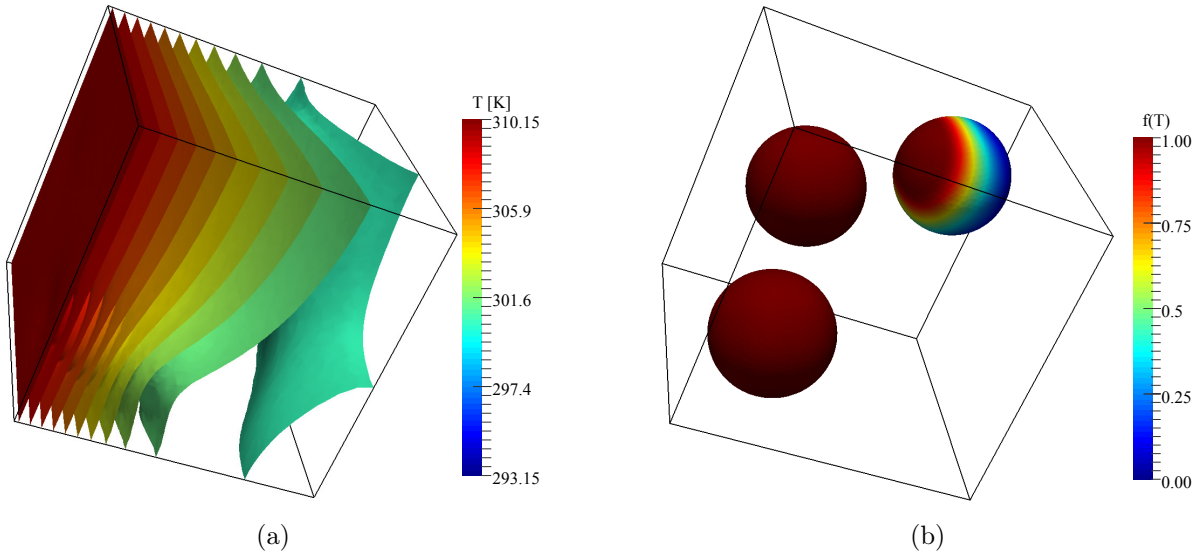


FIGURE 2.5: Solution du problème 3D au temps $t = 4$ s ; (a) isosurfaces de température ; (b) indicateur de phase.

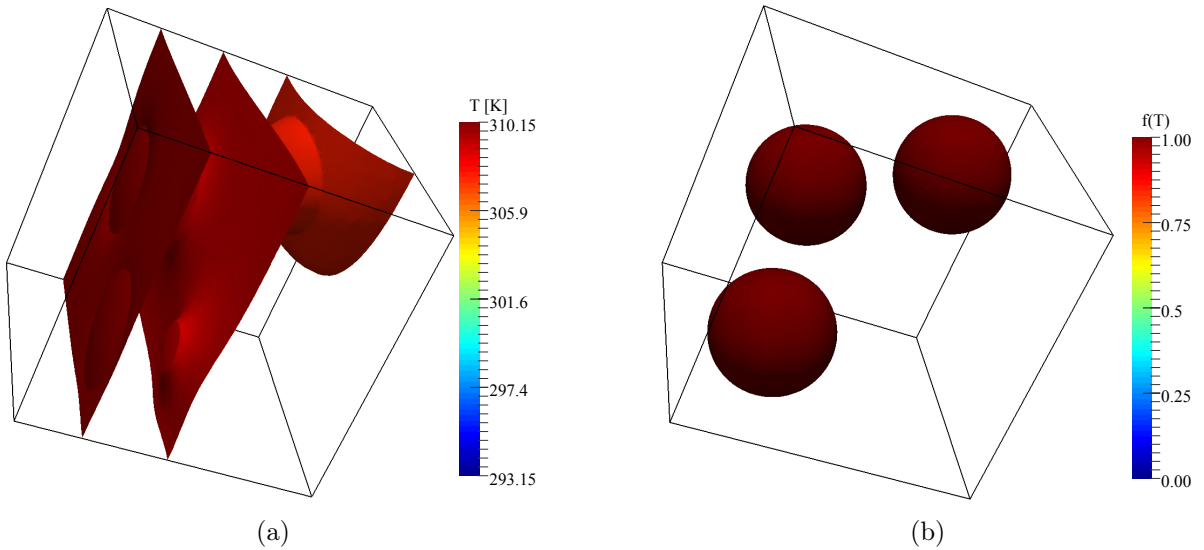


FIGURE 2.6: Solution du problème 3D au temps $t = 5, 5$ s ; (a) isosurfaces de température ; (b) indicateur de phase.

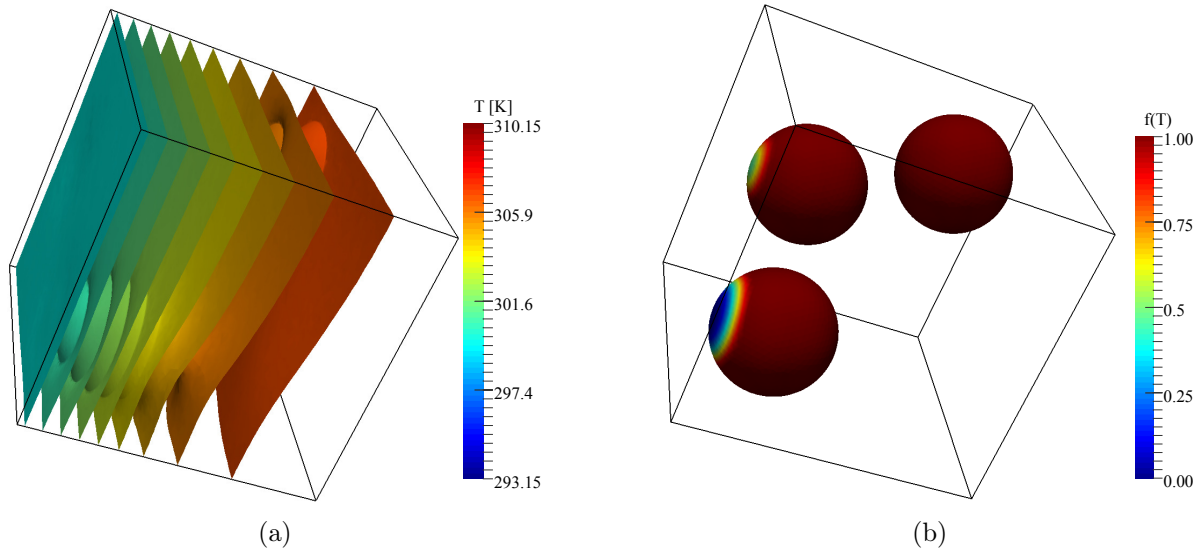


FIGURE 2.7: Solution du problème 3D au temps $t = 10,7$ s ; (a) isosurfaces de température ; (b) indicateur de phase.

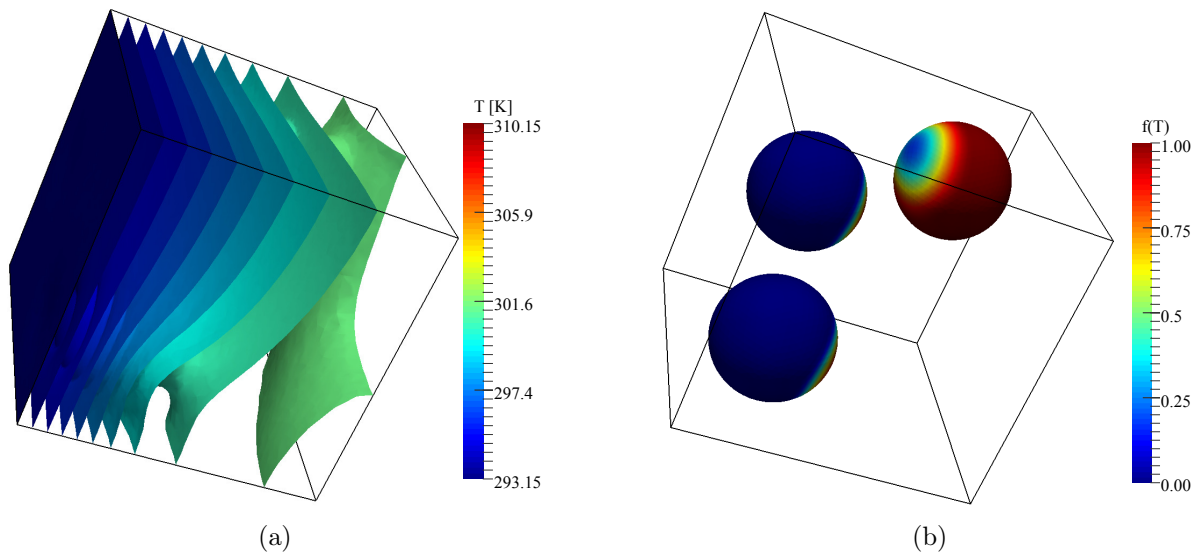


FIGURE 2.8: Solution du problème 3D au temps $t = 11,2$ s ; (a) isosurfaces de température ; (b) indicateur de phase.

Les résultats montrent bien l'effet de la présence du MCP sur la conduction thermique dans le domaine. On peut observer clairement que lors du changement de phase (fusion ou solidification), l'évolution de la température est ralentie. Ceci empêche les isosurfaces de température

d'être parallèle à la face $x = 0$ mm. Cette propriété est très intéressante dans la mesure où, le composite permettra, à l'échelle des structures de génie civil, de décaler dans le temps les pics de température. Dans le cas des fluctuations relativement rapides de la température appliquée, on peut avoir en plus du décalage, un lissage des pics de température. Avant d'étendre l'étude à des structures de grande taille, il est nécessaire d'étudier comment les propriétés thermo-mécaniques varient lors des changements de phase.

2.2.3 Illustration du comportement thermique du MCP en 2D

Dans ce second exemple, nous montrons les propriétés thermiques et les caractéristiques du transfert de chaleur lors du changement de phase. La taille du VER est $L = 1$ mm, le rayon du MCP est $R = 0.2$ mm et l'épaisseur de la membrane est $e = 0.015$ mm (voir Fig. 2.1). Pour obtenir des transitions de phase, le profil de température de la Fig. 2.9 est appliqué aux limites $y = 1$ mm et $y = 0$ mm, les autres frontières sont isolées. Les propriétés de chaque phase dans le VER restent les mêmes que dans l'exemple précédent. La température imposée est augmentée

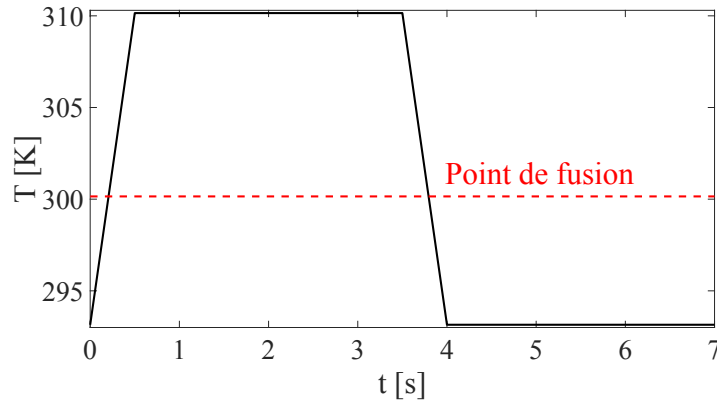


FIGURE 2.9: Température imposée aux bords du VER.

de 293.15 K à 310.15 K dans 3.5 s, et est baissée à 293.15 K en 3.5 s. Les transitions de phase sont montrées dans les Figs 2.10 et 2.11, où la fonction $f(T)$ indique la fraction locale de phase liquide (en rouge).

Dans un autre exemple, le processus de fusion et les propriétés thermo-physiques du MCP sont étudiés. En utilisant le même VER que précédemment, une température constante de 303.15 K est appliquée aux bords supérieur et inférieur ($y = 0$ et $y = L$), le flux de chaleur est nul aux autres frontières. Les profils de température sont tracés pour un point situé au bord $y = L$ et aux point A et B, où A est situé au centre du domaine et B à $x_B = 0.5$ mm, $y_B = 0.66$ mm (voir Fig. 2.1 (b)). Le changement de phase s'effectue à température quasi-constante ($T_\ell - T_s = 1$ K) comme le montre la Fig. 2.12. Les propriétés thermiques du MCP dépendent du champ de température (voir Fig. 2.13 et 2.14). Ceci conduit à la une variation dans le temps des propriétés thermo-physiques effectives du VER.

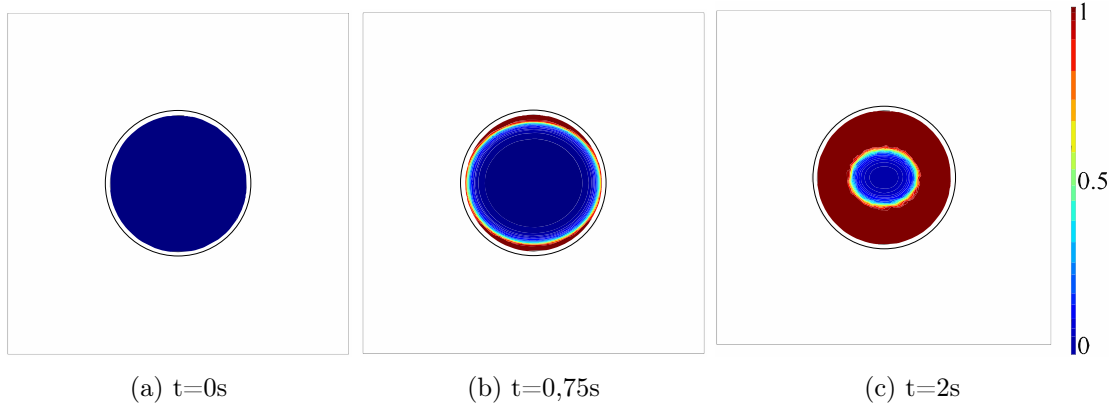


FIGURE 2.10: Evolution de $f(T)$ pendant la fusion ($0 s < t < 3.5 s$). La zone rouge indique la phase liquide, la zone bleue désigne la phase solide.

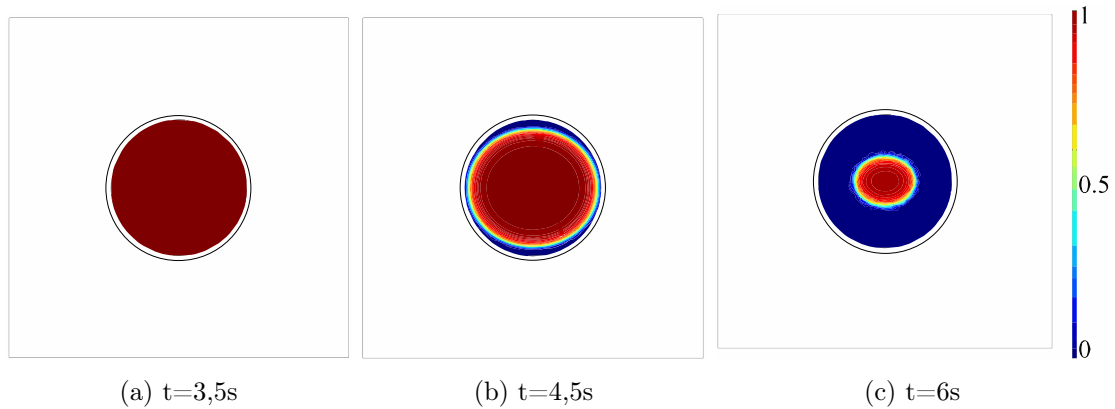


FIGURE 2.11: Evolution de $f(T)$ pendant la solidification ($3.5 s < t < 7 s$). La zone rouge indique la phase liquide, la zone bleue désigne la phase solide.

On observe un pic d'énergie stockée pendant la transition de phase (ici, de la phase solide à la phase liquide) grâce à la contribution de la chaleur latente. Cette propriété est nécessaire pour stocker ou restituer davantage d'énergie thermique dans le composite. La conductivité apparente à chaque position dans le MCP varie linéairement avec la fonction indicatrice de phase $f(T)$, exprimée par (2.6). Les paramètres macroscopiques (énergie, conductivité thermique et flux thermique) qui seront utilisés à l'échelle macroscopique doivent être calculés à chaque pas de temps (et à chaque itération) pour chaque point d'intégration. La variation de ces paramètres à l'échelle macroscopique sont à la source des non linéarités dans le modèle macroscopique. En supposant les dimensions du VER suffisamment petits par rapport à la structure (facteur de 10 minimum), les conditions permanentes peuvent être considérées dans le VER. Sous ces hypothèses, les équations (2.1), (2.3) et (2.10) peuvent être réduites à :

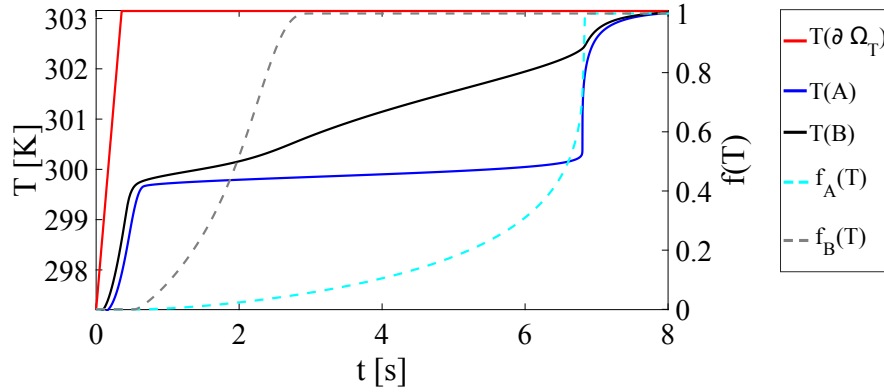


FIGURE 2.12: Température et la fonction indicatrice de phase $f(T)$ pendant la fusion.

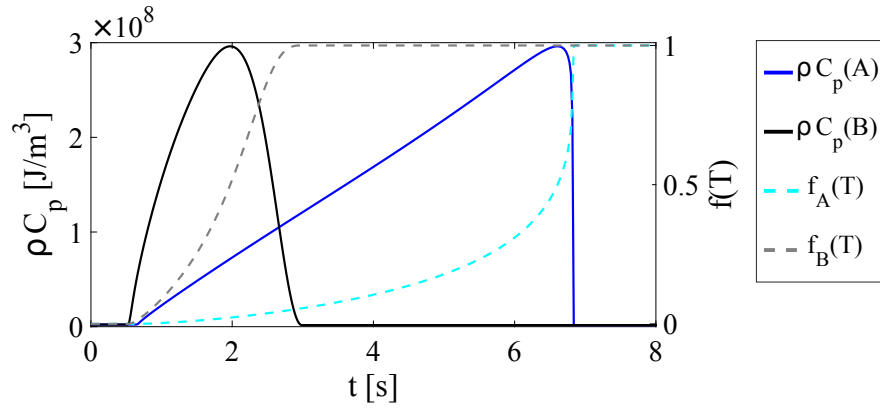


FIGURE 2.13: Variations de ρC_{pa} dans le MCP pendant la fusion.

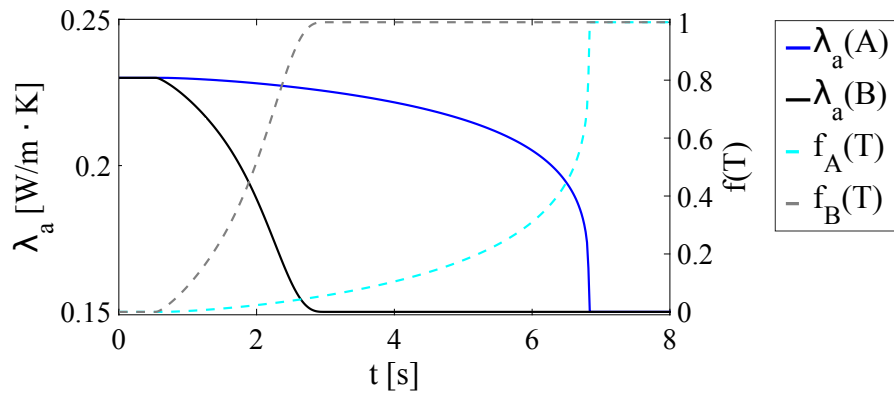


FIGURE 2.14: Variations de λ_a dans le MCP pendant la fusion.

$$\nabla \cdot (\lambda_s \nabla T) = 0, \quad (2.12)$$

$$\rho_l (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) = \nabla \cdot [-p \mathbf{1} + \eta_a (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)] + \mathbf{F}_b, \quad (2.13)$$

$$\rho_l C_{pa} \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda_a \nabla T). \quad (2.14)$$

Il est important de s'assurer que le domaine à l'échelle microscopique est suffisamment grand pour être représentatif. Pour cela, une étude sur la taille de VER est menée. La conductivité thermique effective d'un composite avec 20% de MCP est considéré. Différentes cellules unitaires contenant des particules de MCP aléatoirement distribuées sont étudiées en variant la taille L du domaine. Pour chaque taille L , 20 réalisations sont générées (voir Fig. 2.15). La conductivité thermique de la matrice est $1,6 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$. Le MCP est supposé être à la phase solide et sa conductivité thermique est de $0,23 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$. La Fig. 2.15 montre que le VER contenant une seule inclusion donne une conductivité thermique effective avec une erreur de 0,76% comparée à la valeur moyenne convergée. Dans la suite, le VER avec une seule inclusion en MCP sera considéré dans l'analyse multi échelle.

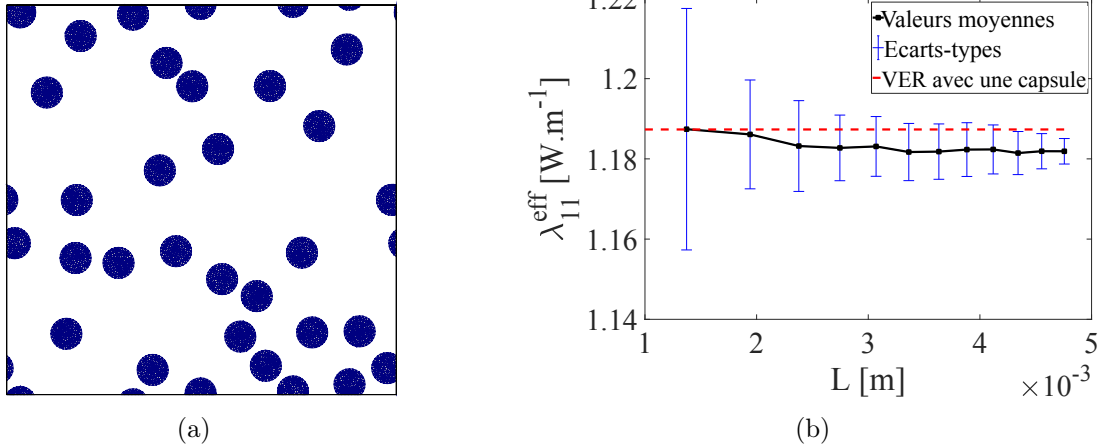


FIGURE 2.15: Taille du VER : variation de la conductivité thermique en fonction de la taille de la cellule unitaire pour 20% de fraction volumique de MCP : (a) exemple de microstructure périodique avec des particules de MCP aléatoirement réparties ($L = 5.013 \times 10^{-3}$ m, seul le maillage du domaine en MCP est affiché); (b) valeurs moyennes et écarts-types de la conductivité thermique effective (la courbe rouge désigne la réponse effective de la microstructure contenant une seule particule de MCP).

2.3 Homogénéisation des propriétés mécaniques pendant les changements de phase

2.3.1 Le problème d'homogénéisation

Dans cette section, nous étudions comment le changement de phase affecte les propriétés mécaniques effectives du VER. Comme le montre la Fig. 2.1, le VER est composé de trois matériaux : (a) la matrice, composée de la pâte de ciment solide ; (b) la membrane solide en PMMA ; (c) l'inclusion en paraffine, qui peut être à la phase solide ou liquide en fonction de la température. Le modèle numérique présenté à la Section 2.2 est utilisé pour modéliser le comportement thermique du VER. Le principe consiste à déterminer le comportement mécanique effectif (le tenseur d'élasticité $\bar{\mathbb{C}}$) à chaque pas de temps de la simulation du changement de phase par homogénéisation numérique. Il s'agit donc de calculer les propriétés mécaniques effectives du milieu homogène équivalent lorsque le MCP fond ou se solidifie. On considère que la matrice et la membrane ont des propriétés élastiques constantes, tandis que le MCP a deux phases décrites par la fonction indicatrice de phase $f(T)$. Le modèle de changement de phase donne une description diffuse de l'interface solide-liquide dans le MCP. Cette fonction passe de 0 à 1 au front de fusion (voir Fig. 2.12). Différentes propriétés mécaniques sont utilisées dans chaque phase du MCP. \mathbb{C} est le tenseur d'élasticité d'ordre 4 qui décrit la loi de comportement élastique locale dans la matrice, telle que $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$, avec $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes de Cauchy et $\boldsymbol{\varepsilon}$ le tenseur des déformations. Afin d'utiliser la fonction $f(T)$ pour décrire l'interface solide-liquide, la partie liquide du MCP est considérée comme un matériau linéaire élastique isotrope qui imite le comportement d'un liquide, avec un très faible coefficient de cisaillement et un coefficient de Poisson proche de 0,5. Le tenseur d'élasticité à chaque position dans le MCP est donné par :

$$\mathbb{C}_{PCM} = (1 - f(T))\mathbb{C}_{PCM}^S + f(T)\mathbb{C}_{PCM}^L, \quad (2.15)$$

où \mathbb{C}_{PCM}^S et \mathbb{C}_{PCM}^L désignent respectivement le tenseur d'élasticité de la phase solide et de la phase liquide du MCP. Dans l'hypothèse des petites déformations et en négligeant les forces de volumes (à cause de la petite taille des inclusions), le problème à résoudre sur le VER devient :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.16)$$

avec

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \quad (2.17)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \nabla^T \mathbf{u}(\mathbf{x})) \quad (2.18)$$

et

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} \, d\Omega = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (2.19)$$

Dans ces équations, \mathbf{u} est le champ de déplacement et $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ est la déformation macroscopique appliquée sur le VER. Différentes conditions aux limites peuvent être appliquées sur le VER : KUBC (Kinematic Uniform Boundary Conditions), SUBC (Static Uniform Boundary Conditions) ou les conditions aux limites périodiques. Dans ce travail, les conditions aux limites périodiques sont utilisées. Elles s'expriment par :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\mathbf{x} + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}), \quad (2.20)$$

où $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ est une fonction périodique sur Ω . La condition (2.20) peut être réécrite sous la forme :

$$\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-), \quad (2.21)$$

où \mathbf{u}^+ , \mathbf{u}^- et \mathbf{x}^+ , \mathbf{x}^- sont respectivement le déplacement et la position de chaque paire de nœuds opposés sur $\partial\Omega$ (voir Fig. 2.16). De telles conditions peuvent être prescrites en utilisant les multiplicateurs de Lagrange par exemple. Le problème étant linéaire, la solution \mathbf{u} dépend

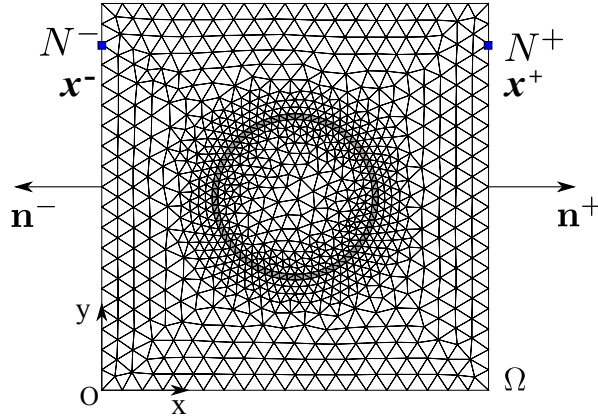


FIGURE 2.16: VER en 2D avec un maillage symétrique montrant les nœuds pour l'application des conditions aux limites.

des trois composantes indépendantes de $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ en 2D. En utilisant le principe de superposition, on peut écrire :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon^{11}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{11} + \varepsilon^{22}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{22} + 2\varepsilon^{12}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{12}, \quad (2.22)$$

où ε est la solution du problème (2.16)-(2.19) pour un tenseur de déformation macroscopique imposé

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{kl} = \frac{1}{2} (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l + \mathbf{e}_l \otimes \mathbf{e}_k), \quad (2.23)$$

et \mathbf{e}_i , $i = 1, 2$ en 2D sont les vecteurs de base. La relation précédente peut être réécrite comme

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (2.24)$$

où \mathbb{A} est le tenseur de localisation d'ordre 4 défini par :

$$\mathbb{A}_{ijkl} = \varepsilon_{ij}^{kl}. \quad (2.25)$$

En prenant la moyenne spatiale de (2.17) sur Ω , on obtient le tenseur d'élasticité effectif à chaque pas de temps du chargement thermique :

$$\bar{\mathbb{C}}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbb{C}(\mathbf{x}, t) : \mathbb{A}(\mathbf{x}, t) \, d\Omega. \quad (2.26)$$

2.3.2 Résultats

Les propriétés mécaniques de chaque constituant sont listées dans le Tableau 2.2. Quand le MCP est à la phase liquide, un modèle pseudo élastique avec un module de cisaillement très faible pris égal à 1 MPa (négligeable par rapport à la rigidité de la matrice) et un coefficient de Poisson de 0,49 sont utilisés.

TABLEAU 2.2: Les propriétés mécaniques du VER.

	Module de Young [MPa]	Coefficient de Poisson
Matrice	2×10^4	0,2
Membrane	$3,2 \times 10^3$	0,3
MCP solide	60	0,4

Le VER en 2D de la Fig. 2.20a est utilisé. Le profil de température de la Fig. 2.9 est appliqué à $y = 0$ et $y = 1$ mm tandis que les autres bords sont isolés. La Fig. 2.17 montre la variation des composantes de $\bar{\mathbb{C}}$ au cours du temps. Toutes les composantes de $\bar{\mathbb{C}}$ ont des évolutions similaires lors du chargement thermique. L'évolution asymétrique de ces valeurs s'explique par le fait que le MCP se trouve dans deux configurations différentes selon qu'on soit en phase de fusion ou de solidification. Lors de la fusion, le MCP solide est entouré par la phase liquide, le chargement macroscopique $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ appliqué sur $\partial\Omega$ n'est pas transmis à la partie solide de l'inclusion. Mais pendant la solidification, la partie solide du MCP est connectée à la membrane et à la matrice, donc la phase solide du MCP contribue à la réponse effective du VER. Comme prévu, la variation de chaque composante de $\bar{\mathbb{C}}$ reste très petit (ne dépasse pas 1.6% ici) lors des transitions de phase.

Ces résultats sont dus au grand rapport entre les modules élastiques de la matrice et ceux du MCP. Pour confirmer ces résultats, une analyse est menée dans la Section 4.4.3 du Chapitre 4

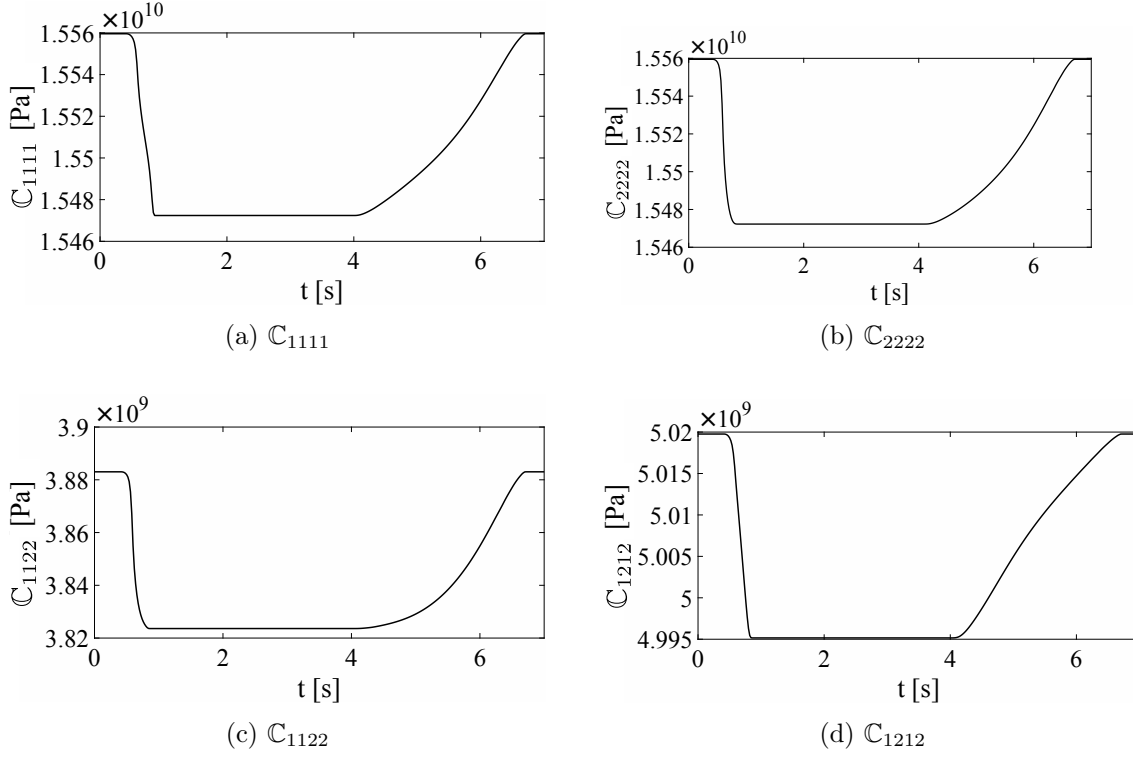


FIGURE 2.17: Variation des composantes de \mathbb{C} pendant les changements de phase.

afin d'évaluer les effets du MCP liquide en considérant le comportement d'un fluide incompressible. En conclusion, le tenseur d'élasticité effectif $\bar{\mathbb{C}}$ peut être supposé constant et peut être calculé avant le calcul thermique. Ce principe simplifie l'analyse multi échelle présentée dans la section suivante.

2.4 Modélisation multi échelle (EF²) du comportement thermique transitoire avec changement de phase

A cause du changement de phase dans les microcapsules de MCP, le comportement thermique effectif est fortement non linéaire et l'homogénéisation classique n'est plus applicable. Dans ce travail, la méthode EF² est employée et étendue au comportement thermique transitoire avec changement de phase. Cela permet d'obtenir à chaque point d'intégration du maillage à l'échelle macroscopique, le comportement thermique macroscopique via des calculs sur le VER. Le modèle de changement de phase présenté dans la Section 2.2 est utilisé pour le problème thermique à l'échelle microscopique. En considérant que la solution du problème thermique a un impact négligeable sur la réponse mécanique (voir Section 2.3), le tenseur d'élasticité effectif est calculé séparément avant l'analyse multi échelle. Dans la suite, la procédure EF² est

appliquée seulement pour les calculs thermiques non linéaires.

2.4.1 Le problème à l'échelle microscopique

Le problème à l'échelle microscopique sera résolu à chaque point d'intégration de la structure macroscopique (voir Fig. 2.18) pour obtenir le flux de chaleur macroscopique $\overline{\Phi}$, la conductivité thermique effective $\overline{\lambda}$ et la densité de chaleur spécifique effective $\overline{\rho C_p}$, étant donné la température macroscopique \overline{T} et son gradient $\nabla \overline{T}$. Nous supposons la séparation d'échelle, ce qui signifie que la taille caractéristique des inclusions est suffisamment petite devant celle de la structure macroscopique. En plus des équations locales non linéaires du problème thermique (voir Section 2.2), le VER est soumis à un gradient thermique homogène en utilisant la condition :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \nabla T d\Omega = \nabla \overline{T}. \quad (2.27)$$

Cette condition peut être satisfaite par les conditions aux limites :

$$T(\mathbf{x}) = \nabla \overline{T} \cdot \mathbf{x} \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (2.28)$$

ou

$$T(\mathbf{x}) = \nabla \overline{T} \cdot \mathbf{x} + \tilde{T}(\mathbf{x}) \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (2.29)$$

où $\tilde{T}(\mathbf{x})$ est une fonction périodique sur Ω . La condition (2.29) peut être réécrite sous la forme

$$T^+ - T^- = \nabla \overline{T} \cdot (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-), \quad (2.30)$$

où T^+ et T^- sont les températures à chaque paire de nœuds opposés (voir Fig. 2.16). Pour assurer une unique solution à l'échelle microscopique, la température à l'échelle macroscopique \overline{T} est utilisée pour appliquer une contrainte supplémentaire dans le problème à l'échelle microscopique telle que [5] :

$$\overline{\rho C_p T} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \rho C_p T d\Omega. \quad (2.31)$$

2.4.2 Le problème à l'échelle macroscopique

2.4.2.1 Les quantités homogénéisés

L'énergie macroscopique stockée à utiliser est définie comme sa moyenne spatiale sur le VER, comme proposé dans [5] :

$$\overline{\rho C_p} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \rho C_p d\Omega, \quad (2.32)$$

et :

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \phi d\Omega. \quad (2.33)$$

La matrice de conductivité tangente effective est définie par :

$$\bar{\lambda} = -\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \nabla \bar{T}}. \quad (2.34)$$

A chaque point d'intégration de la discrétisation macroscopique, $\bar{\lambda}$ peut être évaluée numériquement par une approximation aux différences finis autour du gradient de température macroscopique $\nabla \bar{T}$ par :

$$\bar{\lambda}_{ij} = -\frac{\bar{\Phi}_i(\nabla \bar{T}_j + \delta) - \bar{\Phi}_i(\nabla \bar{T}_j)}{\delta} \quad (2.35)$$

où δ est un petit paramètre numérique choisi pour être négligeable devant $\nabla \bar{T}_j$. En 2D, $\bar{\lambda}_{ij}$ requiert trois calculs Eléments Finis sur le VER (et quatre calculs Eléments Finis en 3D). Des détails sur les relations précédentes sont présentés dans l'Annexe A.

2.4.2.2 Les équations du modèle macroscopique

Le schéma multi échelle est présenté dans la Fig. 2.18. A l'échelle macroscopique, le modèle utilise les quantités effectives calculées numériquement sur le VER.

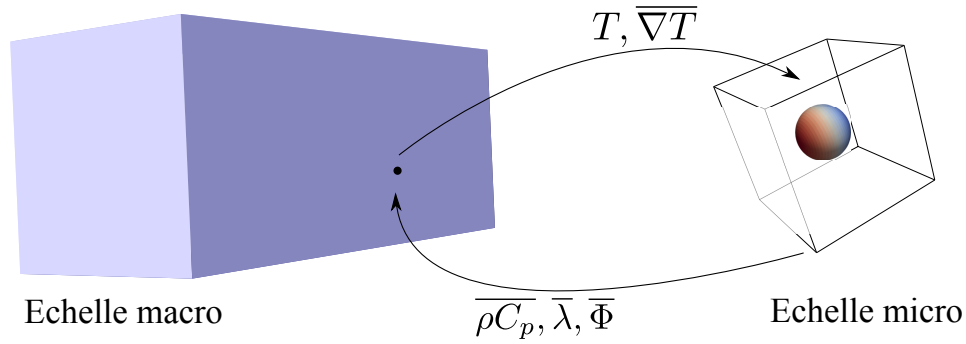


FIGURE 2.18: Schéma de la procédure FE².

Considérons un domaine $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^D$, où D est la dimension du domaine avec une frontière $\partial \bar{\Omega}$, le problème à résoudre à l'échelle macroscopique est donné par :

$$\begin{cases} \bar{\rho}C_p \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - \nabla \cdot \bar{\Phi} = 0 & \text{dans } \bar{\Omega} \\ \bar{\Phi} = h(\bar{T} - T_{\infty}) & \text{sur } \partial \bar{\Omega}_h \\ \bar{T} = T_D & \text{sur } \partial \bar{\Omega}_T \end{cases} \quad (2.36)$$

avec

$$\bar{\Phi} = -\bar{\lambda} \bar{\nabla} \bar{T} \quad (2.37)$$

où h est le coefficient de convection et T_∞ est la température du milieu en contact avec la frontière $\partial\bar{\Omega}_h$.

2.4.2.3 Discrétisation Eléments Finis et procédure de résolution

La forme faible correspondant à (2.36) est donnée par

$$\int_{\bar{\Omega}} \bar{\rho} \bar{C}_p \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \delta \bar{T} d\bar{\Omega} - \int_{\bar{\Omega}} \bar{\Phi} \cdot \nabla \delta \bar{T} d\bar{\Omega} + \int_{\partial\bar{\Omega}_h} h \bar{T} \delta \bar{T} d\Gamma_h - \int_{\partial\bar{\Omega}_h} h T_\infty \delta \bar{T} d\Gamma_h = 0 = R(\bar{T}) \quad (2.38)$$

où $\delta \bar{T}$ est une fonction test avec suffisamment régulière et satisfaisant $\delta \bar{T} = 0$ sur $\partial\Omega$. L'équation ci-dessus étant fortement non linéaire, une procédure de résolution basée sur la méthode de Newton est proposée. En utilisant un développement de Taylor de R autour d'une solution de température connue \bar{T}^k , on obtient au premier ordre :

$$\mathbf{R}(\bar{T}^k + \Delta \bar{T}) = \mathbf{R}(\bar{T}^k) + D_{\Delta \bar{T}} \mathbf{R}(\bar{T}^k) \Delta \bar{T} + O(\Delta \bar{T}^2) = 0 \quad (2.39)$$

où $D_{\Delta \bar{T}} \mathbf{R}(\bar{T}^k)$ est la dérivée directionnelle (Dérivée Gâteaux) définie par :

$$D_{\Delta \bar{T}} \mathbf{R}(\bar{T}^k) = \left[\frac{dR}{d\alpha} \left\{ \bar{T}^k + \alpha \Delta \bar{T} \right\} \right]_{\alpha=0}. \quad (2.40)$$

On a :

$$\begin{aligned} & D_{\Delta \bar{T}} \left(\int_{\bar{\Omega}} \bar{\Phi} \cdot \nabla \delta \bar{T} d\bar{\Omega} + \int_{\partial\bar{\Omega}_h} h \bar{T} \delta \bar{T} d\Gamma \right) \\ &= \int_{\bar{\Omega}} D_{\Delta \bar{T}} \{ \bar{\Phi} \cdot \nabla \delta \bar{T} \} d\bar{\Omega} + \int_{\partial\bar{\Omega}_h} h D_{\Delta \bar{T}} \{ \bar{T} \} \delta \bar{T} d\Gamma \\ &= \int_{\bar{\Omega}} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \nabla \bar{T}} D_{\Delta \bar{T}} (\nabla \bar{T}) \cdot \nabla \delta \bar{T} d\bar{\Omega} + \int_{\partial\bar{\Omega}_h} h \Delta \bar{T} \delta \bar{T} d\Gamma \\ &= - \int_{\bar{\Omega}} \bar{\lambda} \nabla (\Delta \bar{T}) \cdot \nabla \delta \bar{T} d\bar{\Omega} + \int_{\partial\bar{\Omega}_h} h \Delta \bar{T} \delta \bar{T} d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.41)$$

En introduisant l'approximation suivante de la dérivée temporelle :

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \simeq \frac{\bar{T}_{n+1} - \bar{T}_n}{\Delta t}, \quad (2.42)$$

on obtient

$$D_{\Delta\bar{T}} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \right) \simeq \frac{\Delta\bar{T}_{n+1}}{\Delta t} \equiv \frac{\Delta\bar{T}}{\Delta t}. \quad (2.43)$$

Puis :

$$D_{\Delta\bar{T}} \left\{ \int_{\Omega} \overline{\rho C_p} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \delta \bar{T} d\bar{\Omega} \right\} = \int_{\Omega} \overline{\rho C_p} \frac{\Delta\bar{T}}{\Delta t} \delta \bar{T} d\bar{\Omega}. \quad (2.44)$$

Enfin, le problème linéarisé est donné par :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \overline{\rho C_p} \frac{\Delta\bar{T}}{\Delta t} \delta \bar{T} d\bar{\Omega} + \int_{\Omega} \bar{\lambda} \nabla (\Delta\bar{T}) \cdot \nabla \delta \bar{T} d\bar{\Omega} + \int_{\partial\Omega_h} h \Delta\bar{T} \delta \bar{T} d\Gamma \\ &= \int_{\Omega} \overline{\rho C_p} \frac{[\bar{T}_{n+1}^k - \bar{T}_n]}{\Delta t} \delta \bar{T} d\bar{\Omega} - \int_{\Omega} \bar{\Phi}(\bar{T}_{n+1}^k) \cdot \nabla (\delta \bar{T}) d\bar{\Omega} + \int_{\partial\Omega_h} [\bar{T}_{n+1}^k - \bar{T}_{\infty}] \delta \bar{T} d\Gamma, \end{aligned} \quad (2.45)$$

qui est résolu pour obtenir $\Delta\bar{T}$. Ensuite, la température au temps t_{n+1} est corrigée jusqu'à la convergence de la norme du résidu :

$$\bar{T}_{n+1}^{k+1} = \bar{T}_{n+1}^k + \Delta\bar{T}. \quad (2.46)$$

La structure macroscopique est discrétisée en utilisant la méthode des Eléments Finis. Pour les exemples 2D, les triangles linéaires à trois nœuds sont utilisés. En 3D on a les tétraèdres à 4 nœuds ou les hexaèdres à 8 nœuds. Dans chaque élément, l'incrément de température et son gradient sont approximés par :

$$\Delta\bar{T} = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \Delta\bar{\mathbf{T}}^i, \quad \nabla(\Delta\bar{T}) = \mathbf{B}(\mathbf{x}) \Delta\bar{\mathbf{T}}^i \quad (2.47)$$

où $\Delta\bar{\mathbf{T}}^i$ désigne le vecteur des valeurs nodales de ΔT . La même discrétisation est utilisée pour la fonction test :

$$\delta\bar{T} = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \delta\bar{\mathbf{T}}^i, \quad \nabla(\delta\bar{T}) = \mathbf{B}(\mathbf{x}) \delta\bar{\mathbf{T}}^i, \quad (2.48)$$

où $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ sont respectivement les vecteurs et les matrices de fonctions de forme, et de dérivées de fonctions de forme. En introduisant cette discrétisation spatiale dans (2.45), on obtient le système linéaire d'équation sous la forme :

$$\left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} + \mathbf{K} \right) \Delta\bar{\mathbf{T}} = -\mathbf{R}, \quad (2.49)$$

où

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \overline{\rho C_p}(\bar{T}_{n+1}^k) \mathbf{N} d\bar{\Omega}, \quad (2.50)$$

$$\mathbf{K} = \int_{\bar{\Omega}} \mathbf{B}^T \bar{\boldsymbol{\lambda}}(\bar{T}_{n+1}^k) \mathbf{B} d\bar{\Omega} + \int_{\partial\bar{\Omega}_h} \mathbf{N}^T h \mathbf{N} d\Gamma \quad (2.51)$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{R} = & \int_{\bar{\Omega}} \mathbf{N}^T \overline{\rho C_p}(\bar{T}_{n+1}^k) \mathbf{N} \left(\left[\bar{\mathbf{T}}_{n+1}^k \right]^i - \bar{\mathbf{T}}_n^i \right) d\bar{\Omega} - \int_{\bar{\Omega}} \mathbf{B}^T \bar{\boldsymbol{\Phi}}(\bar{T}_{n+1}^k) d\bar{\Omega} \\ & + \int_{\partial\bar{\Omega}_h} h \mathbf{N}^T \left(\mathbf{N} \left[\bar{\mathbf{T}}_{n+1}^k \right]^i - T_\infty \right) d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Lorsque le régime non linéaire transitoire est considéré, l'algorithme général de résolution est décrit comme suit :

Algorithme 1 Procédure de résolution.

- 1: **Pour** chaque pas de temps $n + 1$:
 - 2: Etant données les conditions aux limites macroscopiques au temps t_{n+1}
 - 3: **Pour** chaque itération k :
 - 4: Calculer $\overline{\rho C_p}(\bar{T}_{n+1}^k)$, $\bar{\boldsymbol{\Phi}}(\bar{T}_{n+1}^k)$ et $\bar{\boldsymbol{\lambda}}(\bar{T}_{n+1}^k)$ par (2.32,2.33,2.35).
 - 5: Actualiser la solution : Calculer $\Delta \bar{\mathbf{T}}$ par (2.49).
 - 6: **Si** Convergence : $|\mathbf{R}_{n+1}^k| \leq \text{tolerance}$ **Alors**
 - 7: Nouveau pas de temps : $n \leftarrow n + 1$
 - 8: **Sinon**
 - 9: Nouvelle itération : $k \leftarrow k + 1$
 - 10: **Fin Si**
 - 11: **Fin Pour**
 - 12: **Fin Pour**
-

Lorsqu'on est en régime permanent pour le problème thermique, le système linéaire précédent se réduit à :

$$\mathbf{K} \Delta \bar{\mathbf{T}} = -\mathbf{R}', \quad (2.53)$$

avec

$$\mathbf{R}' = - \int_{\bar{\Omega}} \mathbf{B}^T \bar{\boldsymbol{\Phi}}(\bar{T}_{n+1}^k) d\bar{\Omega} + \int_{\partial\bar{\Omega}_h} h \mathbf{N}^T \left(\mathbf{N} \left[\bar{\mathbf{T}}_{n+1}^k \right]^i - T_\infty \right) d\Gamma. \quad (2.54)$$

2.5 Résultats numériques

2.5.1 Transfert de chaleur en régime stationnaire

Dans un premier temps, nous avons validé cette procédure en régime permanent à l'échelle macroscopique comme à l'échelle microscopique. La géométrie de la structure est présentée dans

la Fig. 2.19.

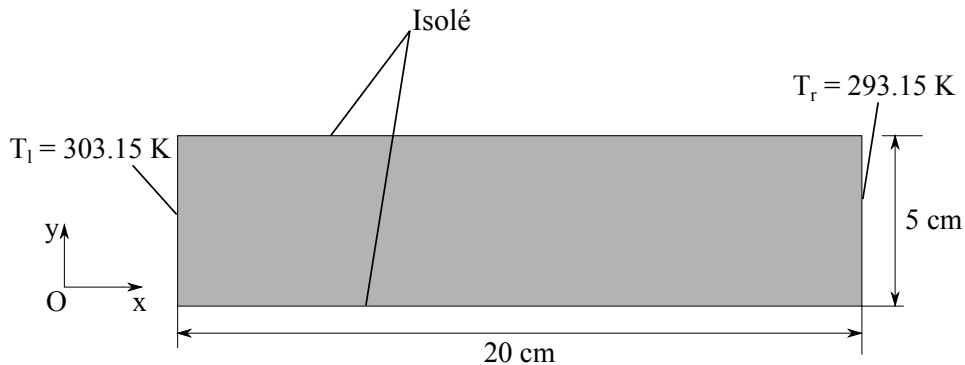


FIGURE 2.19: Problème 2D stationnaire : géométrie de la structure à l'échelle macroscopique.

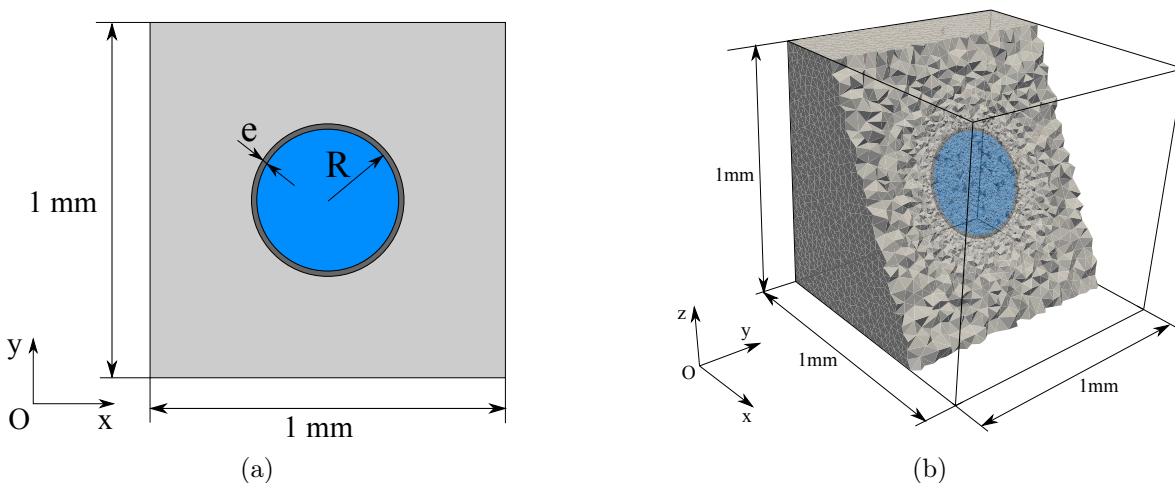
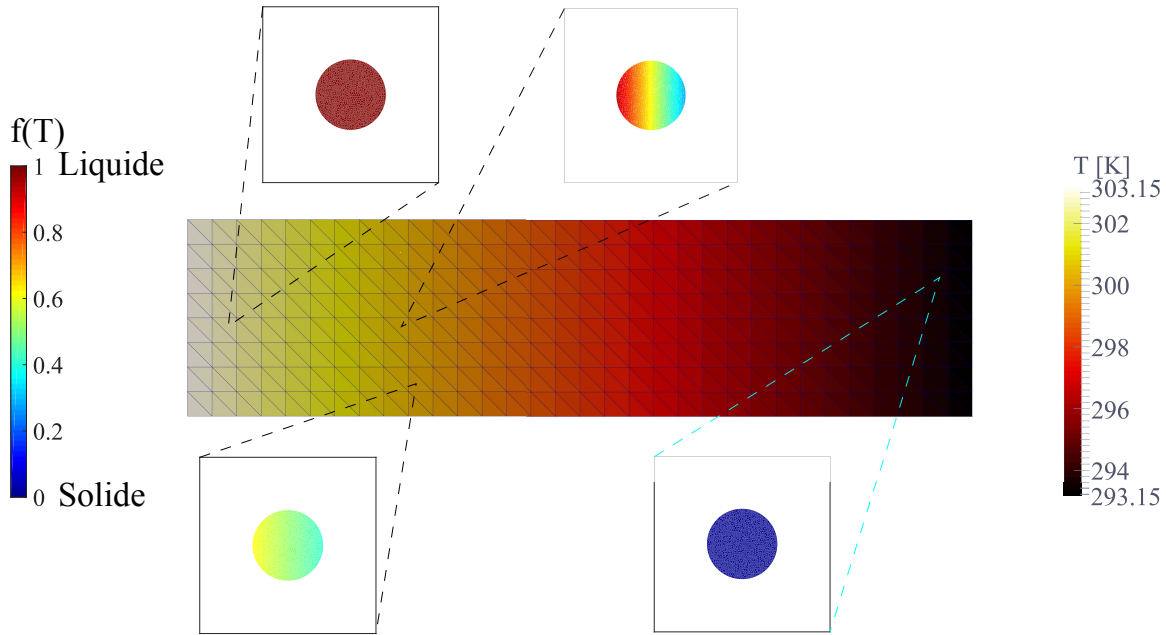


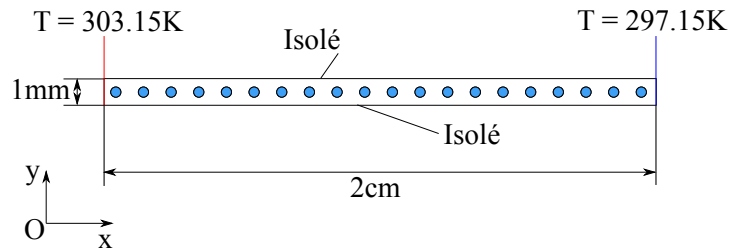
FIGURE 2.20: Le VER : la géométrie ; (a) VER en 2D ; (b) VER en 3D.

Les VER utilisés en 2D et en 3D sont présentés dans la Fig. 2.20. Le rayon des inclusions en MCP est pris égal à $R = 0,2$ mm et l'épaisseur de la membrane est $e = 0,015$ mm. Les propriétés thermo-physiques de la matrice, de la membrane et de chaque phase du MCP sont listées dans le Tableau 2.1. La chaleur latente de fusion du MCP est de $L_F = 1,68 \times 10^5$ J.kg⁻¹ avec un point de fusion à 300.15 K ($T_s = 299,65$ K et $T_\ell = 300,65$ K). La viscosité dynamique de la phase liquide est $\eta_\ell = 3,42 \times 10^{-3}$ Pa.s.

A l'échelle macroscopique, le maillage est composé de 512 éléments triangulaires. Le VER est discrétisé en 2518 triangles. Des températures constantes sont appliquées aux bords de la structure macroscopique : $T_l = 303,15$ K à $x = 0$ cm et $T_r = 293,15$ K à $x = 20$ cm (voir Fig. 2.19). Sur les autres bords, on a des conditions de flux nul.

FIGURE 2.21: Solution EF^2 en régime permanent de la structure 2D.

La Fig. 2.21 montre la solution en température à l'échelle macroscopique et la fonction indicatrice de la phase liquide $f(T)$ dans différents VER. La fonction $f(T)$ prend la valeur 0 pour la phase solide et 1 pour la phase liquide. Dans les régions de la structure macroscopique où le champ de température est proche du point de fusion du MCP, on peut remarquer des fusions incomplètes du MCP dans les VER correspondants. Pour valider le modèle EF^2 , une analyse complète par la méthode des Eléments Finis est réalisée où toutes les hétérogénéités sont explicitement décrites (voir Fig. 2.22). La structure hétérogène est composée d'une distribution périodique du même VER de la Fig. 2.20a. Dans ce test, des températures constantes de $T = 303,15$ K et $T = 297,15$ K sont appliquées aux extrémités gauche et droite de la structure. Le maillage macroscopique est composé de 40 triangles. Pour le calcul Eléments Finis, le maillage est composé de 406768 triangles.

FIGURE 2.22: Structure utilisée pour la validation de la procédure EF^2 .

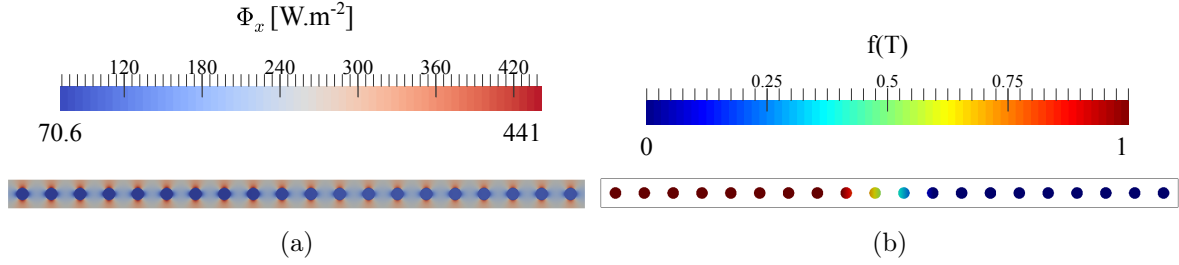


FIGURE 2.23: Analyse complète par la méthode des Eléments Finis : (a) composante x du flux de chaleur ; (b) fonction indicatrice de phase.

La Fig. 2.23 montre la composante x du flux de chaleur et l'indicateur de phase dans les inclusions en MCP obtenus par la méthode des Eléments Finis. La température à $y = 0.5$ mm est comparée à la solution EF² (voir Fig. 2.24). On remarque un bon accord entre les résultats, même si la solution EF² ne peut pas décrire les petites fluctuations dues aux particules de MCP. Pour comparer les flux de chaleur, on calcule la valeur moyenne de $\bar{\Phi}_x$ suivant l'axe y pour la solution obtenue par la méthode des Eléments Finis comme une fonction de x :

$$\bar{\Phi}_x(x) = \frac{1}{y_{\max} - y_{\min}} \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \phi_x dy. \quad (2.55)$$

Pour le modèle EF², la composante x du flux ne varie pas selon l'axe y . Dans la Fig. 2.24, la composante x du flux de chaleur obtenu par EF² est comparée à la valeur moyenne calculée par (2.55), montrant un bon accord des valeurs moyennes. Le gain en temps de calcul entre la

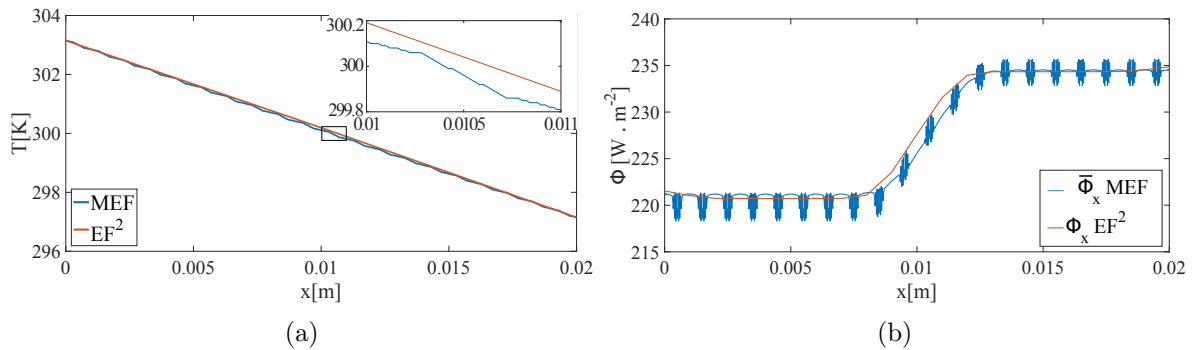


FIGURE 2.24: Comparaison entre les résultats obtenus par EF² et par la Méthode des Eléments Finis (MEF) suivant l'axe x : (a) champs de température ; (b) flux de chaleur.

résolution directe et la méthode EF² est de 54%. Cependant, le problème de référence de la Fig. 2.23 est suffisamment petit pour permettre sa résolution dans un temps raisonnable. Pour cette raison, les gains en coûts de calcul entre la résolution directe et la méthode EF² ne sont pas drastiques. Cependant, ces gains augmentent considérablement avec la taille du maillage,

particulièrement en 3D où la résolution directe n'est tout simplement pas envisageable (voir Section ??). Pour mieux montrer les effets de changement phase à l'échelle microscopique, le régime transitoire est étudié dans la suite.

2.5.2 Conduction de chaleur transitoire en 2D

Dans cet exemple, on considère la conduction de chaleur en régime transitoire à l'échelle macroscopique. En choisissant de grands pas de temps à l'échelle macroscopique, la séparation d'échelle conduit à des solutions en régime stationnaire à l'échelle microscopique. Pour cet analyse, nous considérons le cas de la Fig. 2.25. La conductivité thermique de la matrice est de $1.7 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Le pas de temps à l'échelle macroscopique est $\Delta t = 60 \text{ s}$. Des conditions aux limites transitoires sont prescrites à $x = 0 \text{ cm}$ par :

$$T_{(x=0)} = T_0 + \delta T \sin\left(\frac{2\pi t}{t_F}\right). \quad (2.56)$$

Un échange convectif est considéré à l'extrémité droite du domaine, avec $h = 10 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ et $T_\infty = 297,15 \text{ K}$. Les autres bords sont isolés. Dans (2.56), t est le temps, $T_0 = 300,15 \text{ K}$, $\delta T = 30 \text{ K}$ et t_F est le temps total de simulation fixé à 12 heures. $T_{(x=0)}$ est une fonction sinusoidale qui varie jusqu'à $\pm 15 \text{ K}$ autour de la température de fusion du MCP chaque 3 heures (voir Fig. 2.26). La température initiale est de $T_i = 300,15 \text{ K}$.

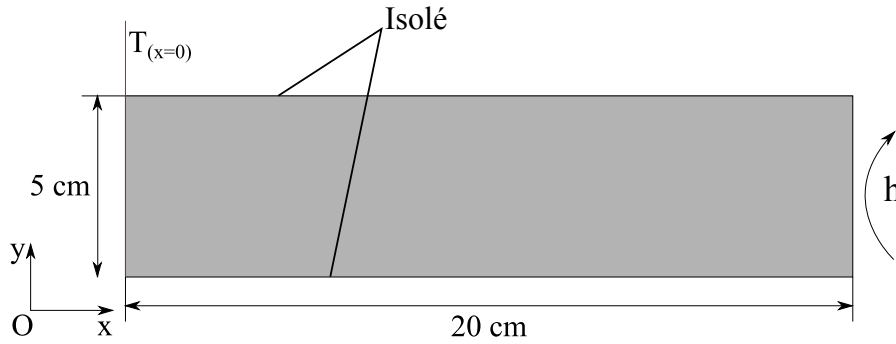


FIGURE 2.25: Géométrie et conditions aux limites pour le problème thermique transitoire en 2D.

La Fig. 2.26 montre la température appliquée à $x = 0 \text{ cm}$ et la température à différents endroits de la structure macroscopique avec ou sans MCP. Ces courbes montrent des écarts significatifs entre la température à l'intérieur de la structure contenant du MCP et celle sans MCP. Les pics de température sont beaucoup plus lissés dans la structure contenant du MCP. On a des écarts jusqu'à 4 K par rapport à la structure homogène. Ceci confirme les résultats de plusieurs travaux expérimentaux de la littérature [14], et prouve la capacité des microcapsules de MCP à réguler la température dans les structures des bâtiments.

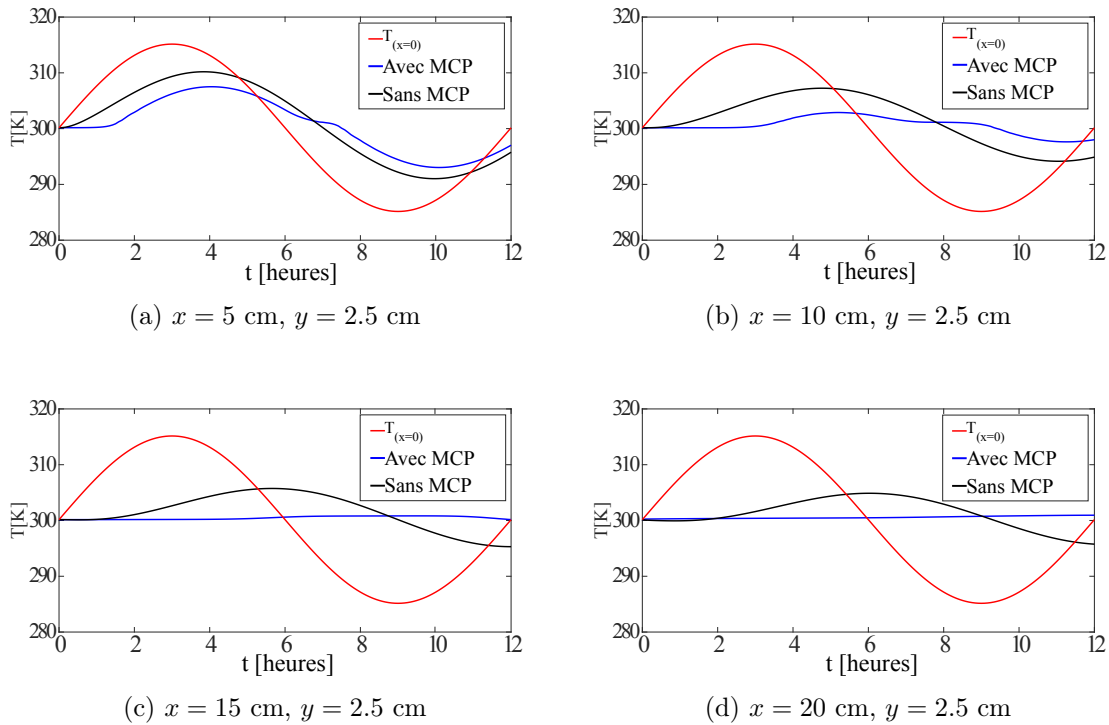


FIGURE 2.26: Température à différents points de la structure macroscopique en fonction du temps.

2.5.3 Conduction thermique transitoire en 3D

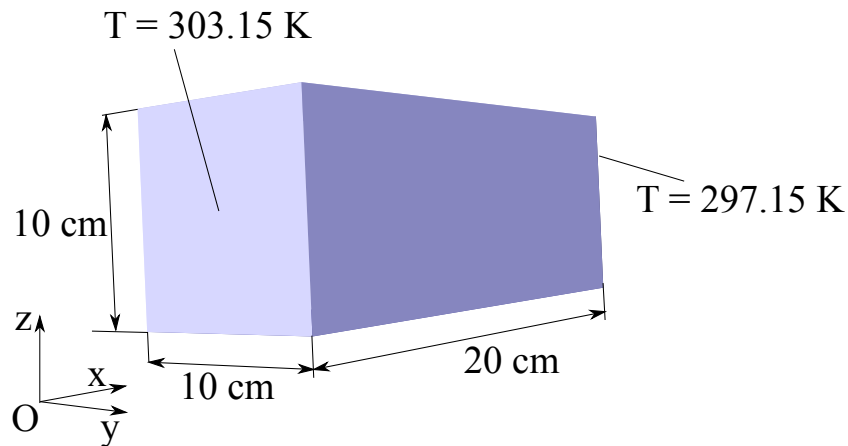


FIGURE 2.27: La structure à l'échelle macroscopique pour le problème thermique en 3D.

Nous considérons maintenant le cas 3D de la Fig. 2.27. Les propriétés thermo-physiques du

VER sont les mêmes que dans le Tableau 2.1. Le VER de la Fig. 2.20b est utilisé. Le rayon de la microcapsule de MCP est $R = 0,3$ mm (correspondant à une fraction volumique de 0,113). Initialement, toute la structure est à la température uniforme de $T_i = 297,15$ K. Une température constante de 303,15 K est appliquée à $x = 0$ cm et $T = 297,15$ K à $x = 20$ cm, les autres bords sont isolés. Le temps total de simulation est de 4 heures. Le pas de temps à l'échelle macroscopique est $\Delta t = 60$ s. La structure est discrétisée avec 6144 tétraèdres à quatre nœuds. La Fig. 2.28 montre la solution en température à l'échelle macroscopique et l'indicateur de phase pour quatre VER spécifiques à $t = 4$ heures.

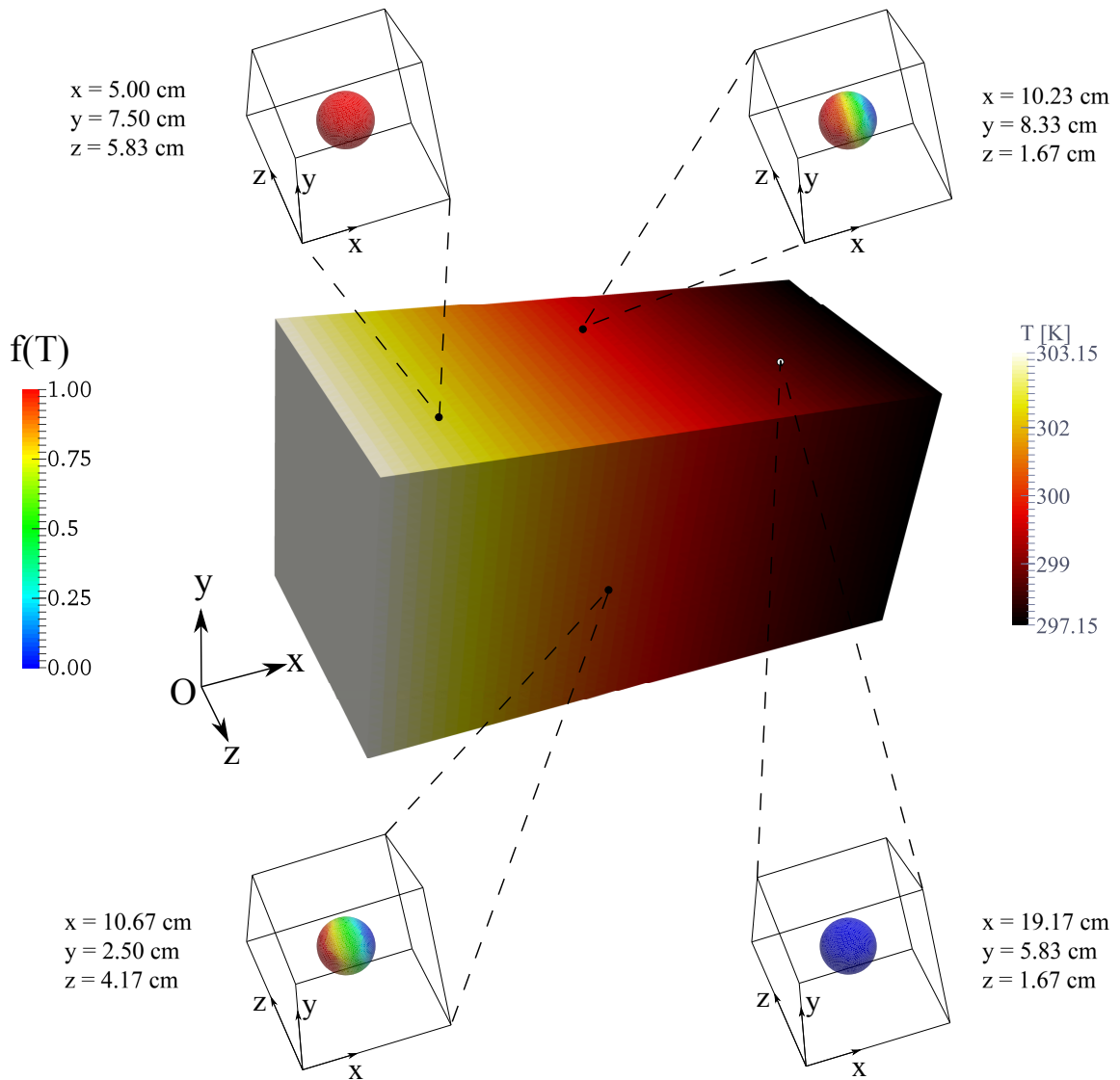


FIGURE 2.28: Solution EF^2 du problème thermique 3D à $t = 4$ heures.

Comme prévu, à $x = 5$ cm, comme la température à l'échelle macroscopique est supérieure au point de fusion du MCP, ce dernier est totalement à l'état liquide. De la même façon, le MCP dans le VER situé à $x = 19,17$ cm est complètement à l'état solide parce que la température à l'échelle macroscopique est en dessous du point de fusion du MCP. Par contre, on observe des fusions partielles aux endroits où la température à l'échelle macroscopique est proche du point de fusion du MCP. La Fig. 2.29 montre la température suivant l'axe central ($y = 5$ cm, $z = 5$ cm) pour différents temps, et l'évolution de la température au cours du temps à $x = 10$ cm, $y = 5$ cm, $z = 5$ cm, dans les structures avec et sans MCP.

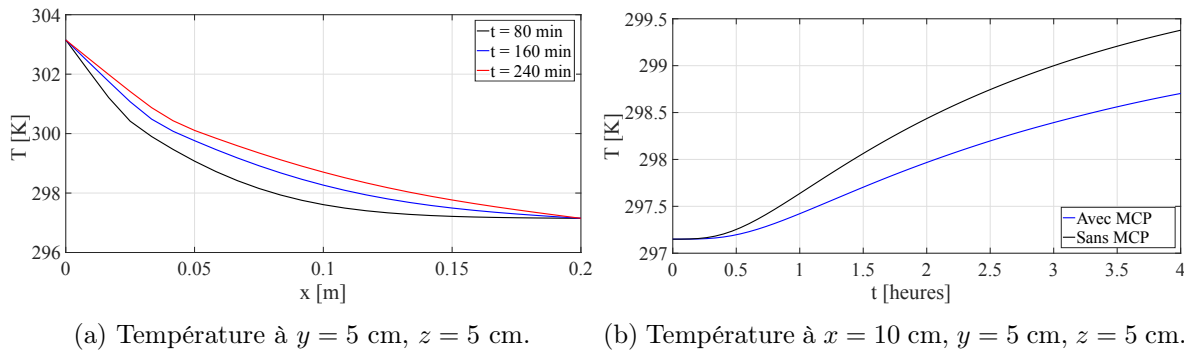


FIGURE 2.29: Température dans la structure à l'échelle macroscopique : (a) température suivant l'axe x pour différents temps ; (b) température au centre de la structure avec et sans MCP.

2.5.4 Exemple d'étude thermo-mécanique en 3D

Dans cet exemple, on applique la méthode en prenant en compte les effets thermomécaniques. Considérons la structure macroscopique de la Fig. 2.30. La géométrie est discrétisée avec 2795 hexaèdres à huit nœuds. Des températures constantes de 305,15 K, 299,15 K et 291,15 K sont respectivement appliquées sur les surfaces à $x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$. Un flux convectif est appliqué sur trois surface et les autres sont isolées, comme le montre la Fig. 2.30. Les chargements mécaniques sont les suivants : la base de la structure ($z = 0$) est encadrée et la composante z du déplacement à l'extrémité supérieure de la structure est fixée à $-0,15$ m. Les propriétés des matériaux sont consignées dans les Tableaux 2.2 et 2.1. La conductivité thermique de la matrice est de $1,7 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ et le rayon du MCP est $0,3$ mm. La figure Fig. 2.31 montre les champs thermiques dans la structure à l'échelle macroscopique. A la surface parallèle au plan $x = 0$, on remarque que le gradient de température est élevé, ce qui résulte en un flux thermique important, surtout à proximité de l'axe x . Vers le bas de la structure, le flux de chaleur est dirigé vers le bas et loin de cette zone, le tranfer de chaleur est quasi monodimensionnel.

La Fig. 2.32 montre les champs mécaniques : la norme du déplacement et la contrainte moyenne de von Mises. La solution à l'échelle macroscopique est obtenue en utilisant le tenseur

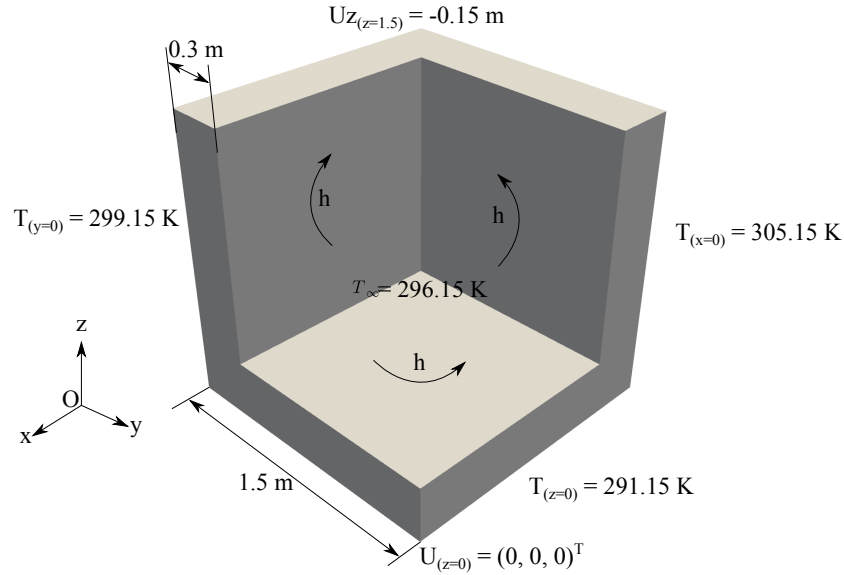


FIGURE 2.30: Exemple d'étude thermo-mécanique en 3D : géométrie et conditions aux limites.

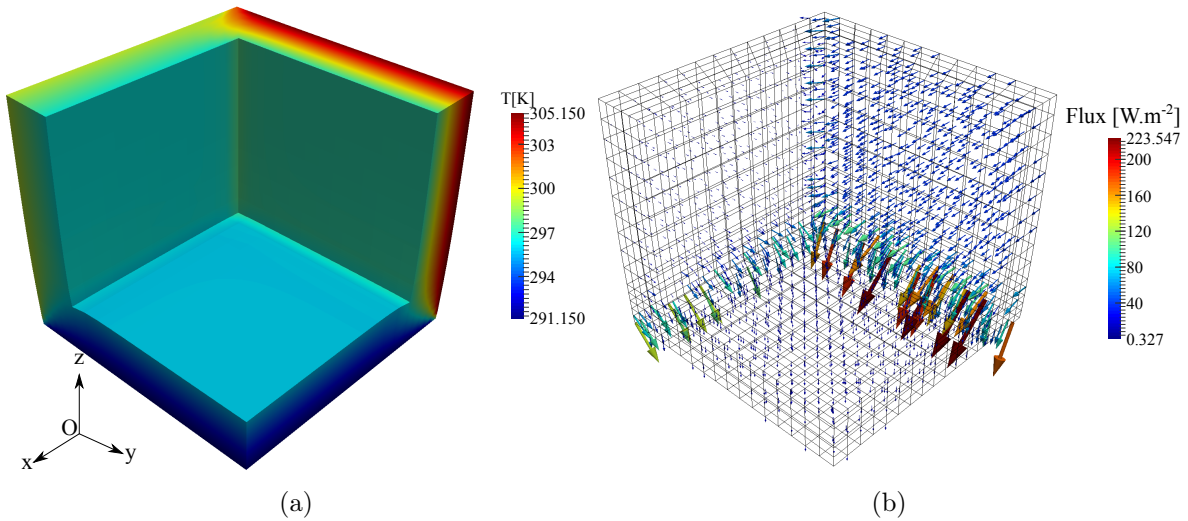


FIGURE 2.31: Champs thermiques : (a) température; (b) flux de chaleur.

d'élasticité effectif, en considérant le MCP à l'état solide, puisqu'il a été justifié dans la Section 2.3 que les changements de phases n'affectent pas significativement le comportement mécanique effectif lorsque la rigidité de la matrice est très élevée. Cet exemple montre le potentiel de l'outil développé à étudier des cas réalistes industriels de simulation thermomécaniques de structure de bâtiment contenant des microcapsules de MCP.

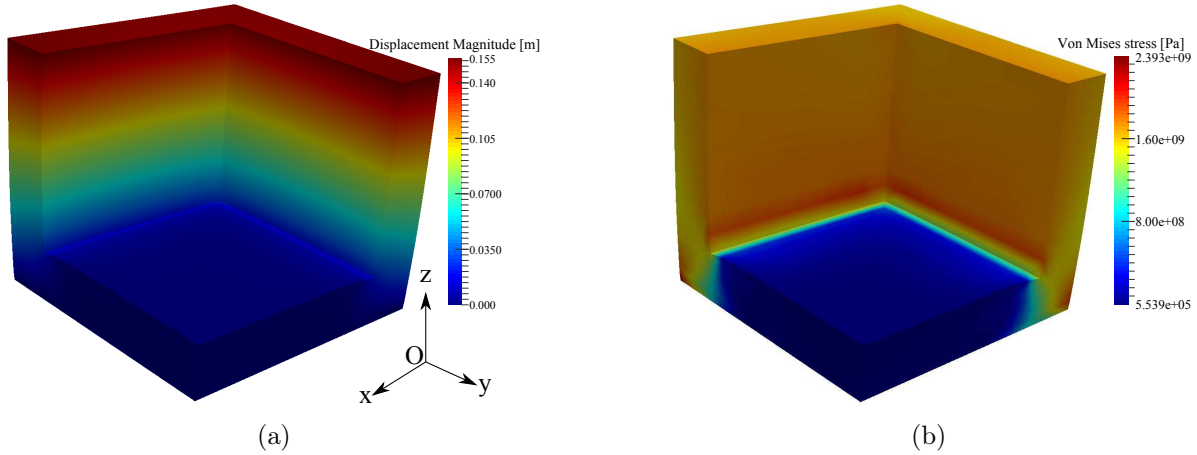
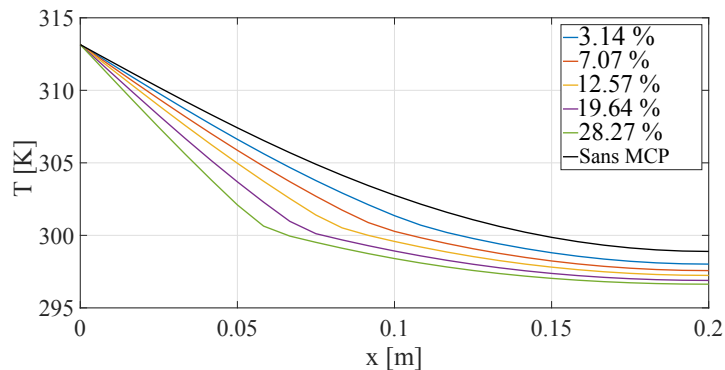


FIGURE 2.32: Champs mécaniques : (a) déplacements; (b) contrainte de von Mises.

2.5.5 Effets de la fraction volumique du MCP

Dans cette étude, la fraction volumique de MCP est variée afin d'étudier ses effets sur la conduction de chaleur à l'échelle macroscopique. Le cas présenté dans la Fig. 2.25 est considéré pour cinq valeurs de R : $100 \mu\text{m}$, $150 \mu\text{m}$, $200 \mu\text{m}$, $250 \mu\text{m}$ et $300 \mu\text{m}$. Une température constante de $T = 313.15 \text{ K}$ est appliquée à $x = 0 \text{ cm}$.

FIGURE 2.33: Température suivant l'axe x ($y = 2.5 \text{ cm}$) pour différentes fractions volumiques de MCP à $t = 4 \text{ heures}$.

Les résultats confirment que la fraction volumique de MCP dans le VER a un effet sur la conduction de chaleur à l'échelle macroscopique. Dans la Fig. 2.33, le profil de température dans la structure augmente quand le rayon de l'inclusion constitué de MCP diminue. On peut observer une cassure dans les courbes qui correspond à la position du front de fusion. A cause du changement de phase, on a deux différents comportements macroscopiques de chaque côté de la cassure. L'écart entre la zone avec du MCP à la phase liquide et celle avec du MCP à la phase

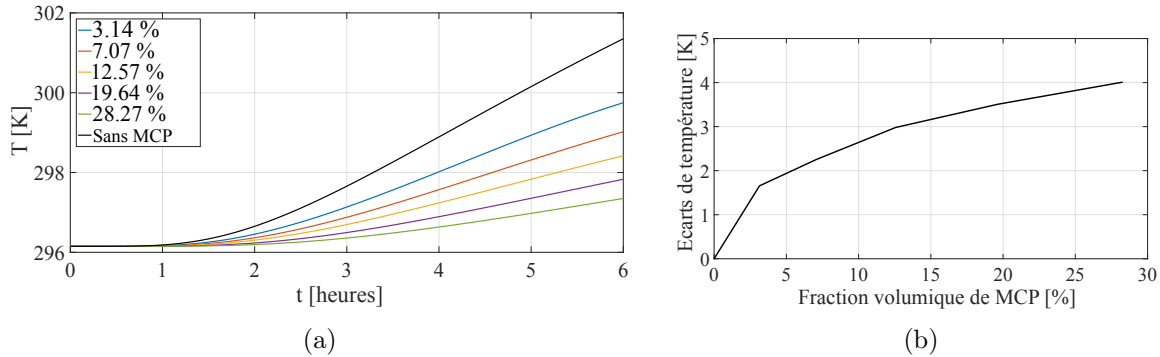


FIGURE 2.34: Les effets de la fraction volumique de MCP : (a) température à ($x = 20$ cm, $y = 2.5$ cm) en fonction du temps. (b) Ecart entre les températures de la structure sans MCP et des structures avec différentes fractions volumiques de MCP à ($x = 20$ cm, $y = 2.5$ cm) après 6 heures.

solide augmente avec la fraction volumique de MCP, ce qui explique pourquoi la cassure est plus prononcée pour 28,27% de MCP. Dans la Fig. 2.34b, on compare l'écart de température entre la structure homogène et celle contenant du MCP, en utilisant les données de la Fig. 2.34a : cet écart augmente lorsque le rayon du MCP augmente. Cette courbe montre l'efficacité du composite comparé à la matrice seule. Comme le flux de chaleur passe en grande partie par la matrice, ces résultats peuvent être améliorés en utilisant des MCP avec des conductivités thermiques plus élevées (voir [158] par exemple).

2.6 Conclusion

Dans cette étude, une méthode EF² a été développée pour étudier le transfert de chaleur et le comportement mécanique dans les structures à base de béton contenant des MCP microencapsulés en 2D et en 3D. La méthode de capacité thermique équivalente a été utilisée pour modéliser le changement de phase dans le MCP. L'outil numérique développé a permis d'étudier la forte non linéarité et la dépendance de l'histoire du chargement, de la réponse des structures contenant des MCP, ce qui n'est pas faisable si toutes les hétérogénéités sont explicitement maillées à cause de la séparation d'échelle entre la taille des structures et celle des microcapsules de MCP. L'étude a montré les avantages des MCP dans le comportement thermique effectif : les pics de température dans les structures sont lissés et décalés par rapport au matériau sans MCP. Nous avons prouvé que l'écart entre la température dans la structure et celle appliquée, augmente avec le rayon de la microcapsule dans le VER. Nous avons aussi vérifié que le problème thermique n'influence pas significativement le comportement mécanique effectif du composite à cause de la grande rigidité de la matrice par rapport au MCP. Les tendances obtenues dans ce travail sont en accord avec les observations expérimentales.

Etude expérimentale des propriétés physico-thermiques des bétons contenant des microcapsules de matériaux à changement de phase

Sommaire

3.1 Introduction	57
3.2 Imagerie du composite contenant des microcapsules de MCP	58
3.2.1 Les échantillons	58
3.2.2 Essai au microtomographe	59
3.2.3 Essai au microscope électronique à balayage (MEB)	60
3.3 Caractérisations thermophysiques	61
3.3.1 Préparation des échantillons	61
3.3.2 Hot Plate (HP)	63
3.3.3 Le Hot Disk (HD)	65
3.3.4 Conductivités thermiques effectives par homogénéisation numérique	67
3.4 Résultats et discussion	69
3.4.1 Conductivité thermique	69
3.4.2 Stockage d'énergie thermique	72
3.4.3 Effets des cycles thermiques	74
3.5 Conclusion	76

3.1 Introduction

Les méthodes multi échelles utilisent à l'échelle microscopique, une description explicite de la microstructure des matériaux hétérogènes. Il est indispensable dans notre étude de confirmer la morphologie sphérique des microcapsules au sein des composites. De plus, les performances thermiques recherchées (inertie thermique, stockage et déstockage d'énergie thermique, tenue

aux cycles thermiques) doivent être vérifiées expérimentalement. Au cours de ces essais, l'avantage de la microencapsulation est vérifié par la recherche de fuites de MCP en phase liquide. Dans ce chapitre, nous étudions dans un premier temps, des mortiers de ciment contenant des microcapsules de MCP en vue d'observer leurs microstructures : l'état des microcapsules et leur répartition, la porosité du matériau et la détection d'éventuelles fuites de MCP liquide. Pour cela, des échantillons sont scannés au microtomographe et au MEB (microscope électronique à balayage). Ensuite, des essais de caractérisation sont effectués sur les échantillons de mortier contenant différentes fractions volumiques de MCP pour déterminer : les conductivités thermiques, les chaleurs spécifiques et la capacité de stockage et déstockage d'énergie thermique lors des cycles de changement de phase solide/liquide dans les microcapsules.

3.2 Imagerie du composite contenant des microcapsules de MCP

3.2.1 Les échantillons

Les échantillons ont été fournis par Siyimane Mohaine avec l'aide du Pr. Frederic Grondin (Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique - GeM, Nantes, France). Le matériau est un mortier de ciment, chargé de microcapsules de paraffine (Micronal DS 5039X fourni par BASF) et d'agrégats dont la granulométrie n'excède pas 3mm. Ces microcapsules ont une taille de 1 à 5 μm avec une enveloppe d'épaisseur inférieure à 1,5 μm et contiennent de la paraffine avec un point de fusion à 23 ± 1 °C et une chaleur latente de fusion de 142 kJ. kg⁻¹. Les conductivités thermiques des phases solide et liquide de cette paraffine sont respectivement de 0,24 et 0,15 W. m⁻¹. K⁻¹. La Fig. 3.1 montre les échantillons utilisés pour l'essai au microtomographe.

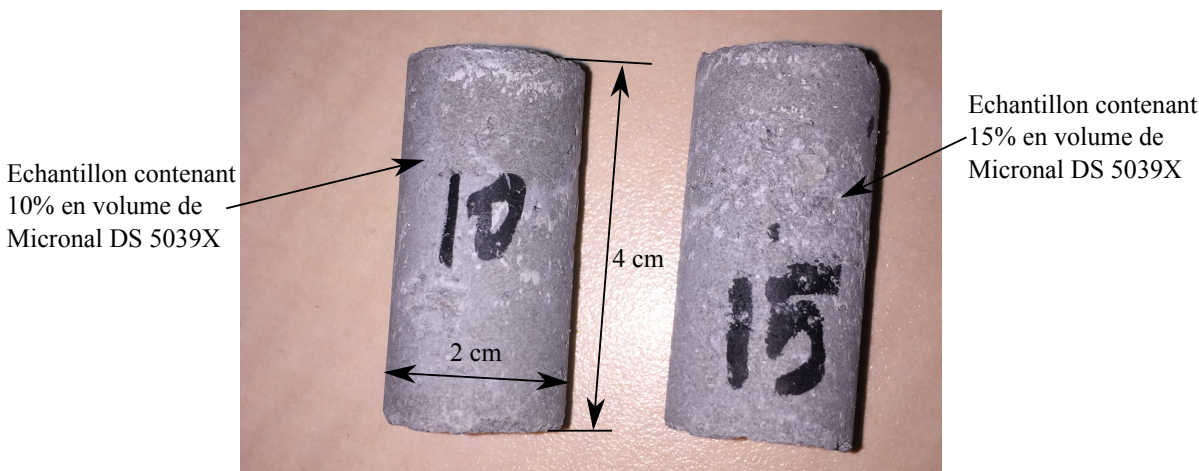


FIGURE 3.1: Echantillons cylindriques pour l'essai au microtomographe.

3.2.2 Essai au microtomographe

3.2.2.1 La tomographie

La tomographie est une technique d'imagerie non destructive, très utilisée dans l'imagerie médicale, en géophysique, en astrophysique et de plus en plus en mécanique des matériaux. Elle permet de reconstruire l'image 3D d'un objet à partir d'une série de mesures effectuées par tranche depuis l'extérieur de cet objet. La tomographie est basée sur la radiographie aux rayons X. Un rayon incident est envoyé à travers l'objet et le rayon émergent est enregistré sur un détecteur. D'après la loi de Beer-Lambert, la relation entre le nombre de photons incident et transmis est donnée par

$$I = I_0 \exp(-\mu x), \quad (3.1)$$

où I_0 et I sont respectivement les intensités de rayon X initiale et mesurée après avoir traversé l'objet. x est la longueur du parcours du rayon X à travers l'objet et μ est le coefficient d'atténuation linéaire. Cette atténuation due à l'absorption des rayons X dépend de la nature des atomes constituant l'objet, leur nombre ainsi que de l'énergie des rayons X. L'objet étant en rotation, un scintillateur (qui convertit les rayons X émergents en lumière visible) et un détecteur CCD (charge-coupled device) permettent d'obtenir des projections sous différents angles de l'objet. Ces projections sont utilisées par un logiciel de reconstruction pour obtenir la répartition en 3D de μ qui est en même temps l'image en volume de l'objet.

Dans notre travail, nous avons utilisé le microtomographe du Laboratoire Navier (Champs-sur-Marne, France), Ultratom de RX-Solutions (voir Fig. 3.2) avec une aide précieuse de Patrick Aïmedieu. Les images de microtomographie sont reconstruites à l'aide du logiciel XAct développé par RX-Solutions. Des filtres disponibles dans le logiciel permettent de corriger des artefacts, notamment les artefacts en anneau ("ring artefacts").

3.2.2.2 Résultats et discussion

Pour scanner les échantillons, le voltage est de 120 kV et le courant est de 125 μ A. La résolution des images obtenues est de 12 μ m par voxel. Chaque échantillon entier est constitué de $1738 \times 1738 \times 3475$ voxel³ obtenus avec 7200 projections avec un scan de 8,5 heures. La résolution est insuffisante pour observer en détail les microcapsules avec leurs enveloppes, mais ces images donnent des informations sur la microstructure à une échelle au dessus des microcapsules. Comme reporté dans [159], pour des microcapsules plus grandes, le coefficient d'absorption des rayons X par les microcapsules de MCP sont tellement faibles qu'ils se confondent aux vides contenu dans les échantillons. La seule façon de détecter la présence du MCP dans les composites à base de mortier de ciment, c'est d'identifier dans les zones correspondant aux vides, des formes sphériques ou des formes similaires à l'agglomération de microcapsules. Dans la Fig. 3.3, on montre des coupes transversales des échantillons en utilisant un logiciel de traitement d'images (Fiji [160]).

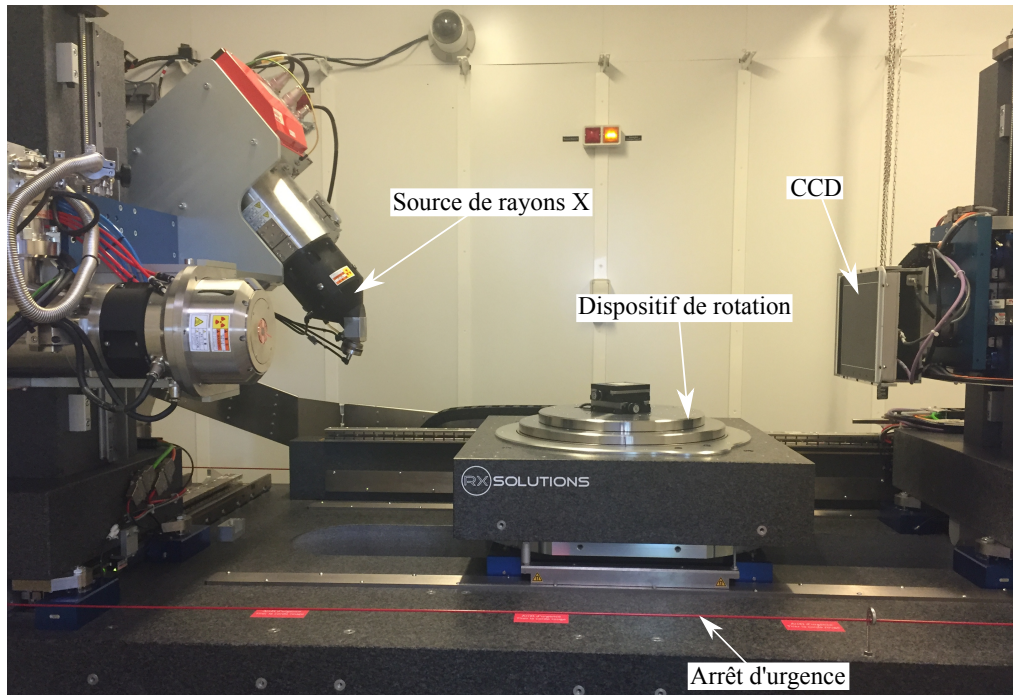


FIGURE 3.2: Microtomographe au rayons X du Laboratoire Navier.

Sur ces images, les zones les plus sombres correspondent à un taux d'absorption très faible, c'est à dire aux pores et aux microcapsules de MCP. Les zones les plus claires correspondent donc à la pâte de ciment et aux agrégats. De ces images, il est impossible d'observer les microcapsules de MCP pour les raisons évoquées précédemment : elles sont trop petites pour la résolution des images et elles se confondent aux vides. Mais on peut remarquer que pour une même échelle de nuances de gris, l'échantillon contenant 15% de microcapsules de MCP est plus sombre, ce qui est cohérent puisque l'augmentation des microcapsules de MCP fait baisser globalement le taux d'absorption des rayons X de l'échantillon. Pour observer directement les microcapsules, une autre technique d'imagerie est utilisée : la microscopie électronique à balayage.

3.2.3 Essai au microscope électronique à balayage (MEB)

La microscopie électronique à balayage (ou SEM - Scanning Electron Microscopy) est une technique de microscopie utilisant le principe des interactions électrons-matière pour produire des images de hautes résolutions de la surface des objets. Les nouveaux appareils ont des résolutions situées entre 0,4 et 20 nanomètres. Le principe consiste à envoyer un faisceau d'électrons qui balayent la surface de l'échantillon à analyser. Certaines particules sont réémises lors de cet impact. Ensuite, différents détecteurs permettent d'analyser ces particules afin de construire une image de la surface.

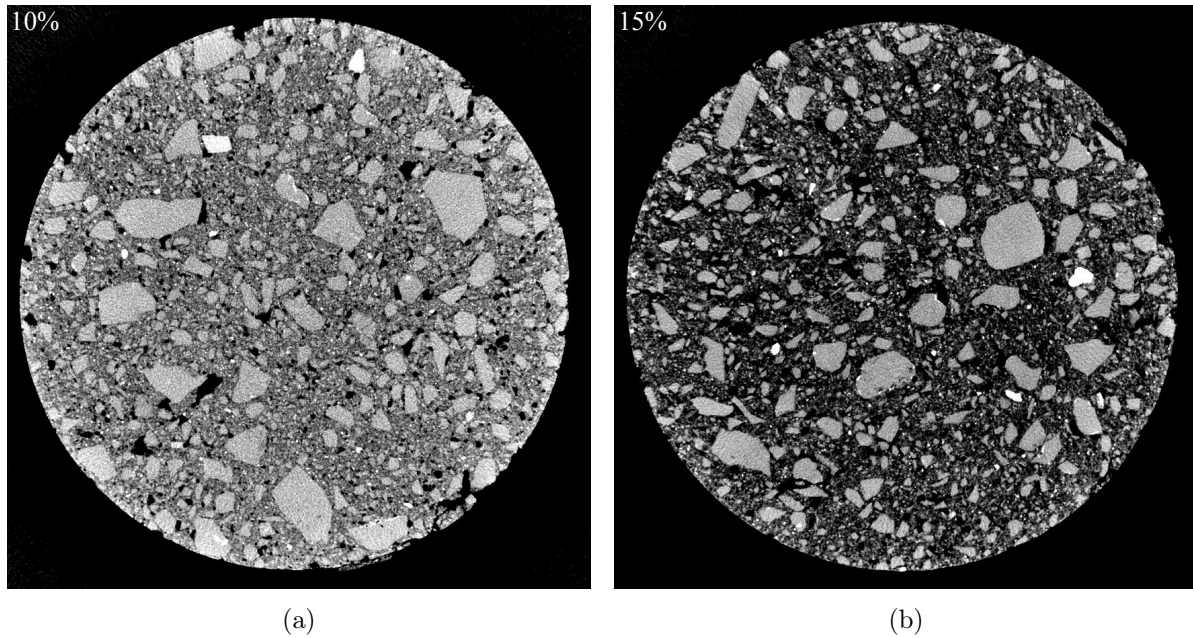


FIGURE 3.3: Coupes transversales des échantillon de mortier de ciment contenant du Micronal DS 5039X obtenues par microtomographie aux rayons X. (a) Échantillon à 10% en volume de microcapsules de MCP et (b) Échantillon à 15% en volume de microcapsules de MCP.

Contrairement à la microtomographie, le microscope électronique à balayage utilise des échantillons de petites tailles. Pour cela, l'échantillon cylindrique contenant 15% de MCP qui a été utilisé à la microtomographie est cassé afin de ne récupérer qu'un fragment de moins de 5 mm de taille. Ce fragment est scanné avec le MEB JEOL 6301F du Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA - Créteil, France). La Fig. 3.4 montre le résultat obtenu. On peut distinguer clairement les microcapsules de MCP (certains sont indiquées sur la Fig. 3.4) qui ont gardé leurs formes sphériques. Ce résultats nous permet de considérer dans les modèles numériques, les microcapsules comme des sphères au sein du matériau. Aucune fuite de paraffine liquide n'a été détectée.

3.3 Caractérisations thermophysiques

3.3.1 Préparation des échantillons

Pour les caractéristiques thermiques, on a utilisé trois échantillons : un échantillon de référence (Ech. 0) constitué uniquement de mortier de ciment, un échantillon de mortier de ciment contenant 10% en volume de microcapsules de MCP (Ech. 1) et un troisième échantillon contenant 15% de microcapsules de MCP (Ech. 2). Les deux derniers échantillons sont faits avec les mêmes matériaux que ceux utilisés dans les essais d'imagerie. Avant les mesures, ils sont

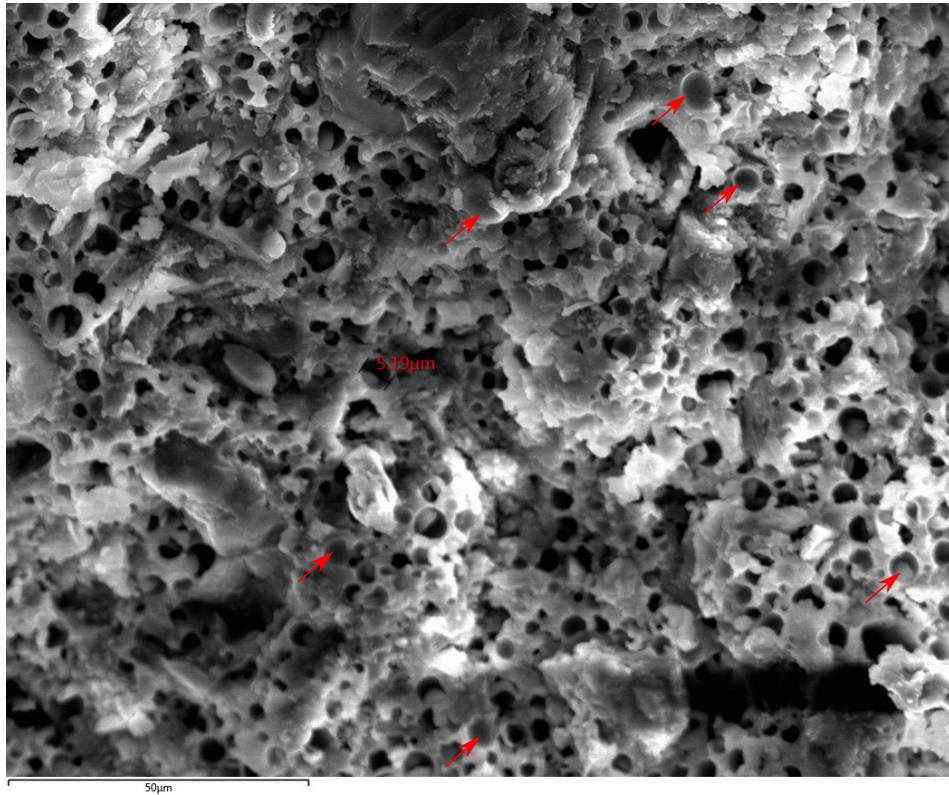


FIGURE 3.4: Image du mortier de ciment contenant des microcapsules de MCP à l'aide du MEB.

disposés dans un four chauffé à 60 °C pendant 14 heures afin d'éliminer l'humidité résiduelle. Leurs dimensions et densités sont renseignées dans le Tableau 3.1. Ces échantillons sont étudiés par deux dispositifs expérimentaux : le Hot Plate, ensuite le Hot Disk.

TABLEAU 3.1: Dimensions et densités des échantillons pour les essais thermiques.

Echantillons	%vol. MCP	Dimensions	Masse	Densité
		[mm]	[kg]	[kg.m ⁻³]
Ech. 0	0	150×150×18,5	0,957	2426,92
Ech. 1	10	150×150×18,0	0,857	2173,73
Ech. 2	15	150×150×18,5	0,786	1946,24

3.3.2 Hot Plate (HP)

Pusieurs méthodes expérimentales permettent de déterminer la chaleur spécifique et la chaleur latente des matériaux, entre autres le DTA (Differential Thermal Analysis) ou le DSC (Differential Scanning Calorimetry). Ces méthodes sont très souvent utilisées mais utilisent des échantillons de petites tailles. Pour des matériaux cimentaires comme le mortier pouvant contenir des pores de plusieurs millimètres de tailles, il faut travailler sur des échantillons de tailles plus grandes. Pour cela, nous avons utilisé le Hot Plate, encore appelé "plaque chaude gardée transitoire", un dispositif expérimental développé au Centre d'Études et de Recherche en Thermique, Environnement et Systèmes (CERTES (Créteil, France) permettant de mesurer les caractéristiques thermophysiques des matériaux solides. Il se compose de plaques échangeuses isothermes, de résistances chauffantes, de fluxmètres et de thermocouples de type K reliés à un système d'acquisition de données (un programme LabVIEW). Le capteur permettant de mesurer le flux thermique est fourni par Captec. Le dispositif permet de mesurer les variations de température et de flux de chaleur à la surface de l'échantillon étudié. On place l'échantillon de forme parallélépipédique entre deux plaques échangeuses. A l'intérieur de chaque plaque échangeuse circule de l'huile H10 dont la température est régulée par un bain thermostaté avec une précision de $\pm 0,1^\circ\text{C}$. Les bains peuvent être programmés pour assurer une variation prédéfinie de la température de l'huile en fonction du temps. Afin de mesurer le flux de chaleur qui traverse l'échantillon, deux fluxmètres sont placés sur les faces supérieure et inférieure de l'échantillon. Les mesures sont enregistrées à chaque pas de temps (choisi au préalable) par un dispositif d'acquisition de données et sauvegardées dans un ordinateur. Les faces latérales de l'échantillon sont isolées par une plaque de mousse en polystyrene expansé, ce qui réduit le transfert de chaleur au sein de l'échantillon en un problème 1D. L'ensemble disposé entre les deux plaques échangeuses est maintenu légèrement serré par le biais d'un vérin (voir Fig. 3.5).

Le principe consiste à imposer un gradient de température par les deux plaques échangeuses et de mesurer le flux thermique et la température sur les deux faces des échantillons (ϕ_1, ϕ_2 et T_1, T_2 respectivement). Pour cela, un gradient de température est imposé sur les deux faces de l'échantillon jusqu'à l'état isothermique (flux de chaleur constant). Pour déterminer la conductivité thermique de l'échantillon contenant le MCP à l'état solide, on maintient la température des deux échangeuses à $T_1 = T_2 = 16^\circ\text{C}$ (en dessous du point de fusion du MCP) jusqu'à l'obtention d'une densité de flux constante sur les deux faces de l'échantillon. Ensuite, on règle la température de l'échangeur inférieur à 20°C jusqu'à l'obtention d'un flux de chaleur constant. Les températures imposées (16 et 20°C) sont tous les deux inférieures à la température de fusion du MCP contenu dans l'échantillon. On peut déterminer la valeur de la conductivité thermique de l'échantillon par la relation :

$$\lambda = \frac{e \sum \phi}{2\Delta T}. \quad (3.2)$$

avec $\Delta T = |T_1 - T_2|$ et $\phi = |\phi_1 - \phi_2|$. Pour la conductivité thermique des échantillons avec le MCP à l'état liquide, la procédure est similaire au cas précédent avec des températures au

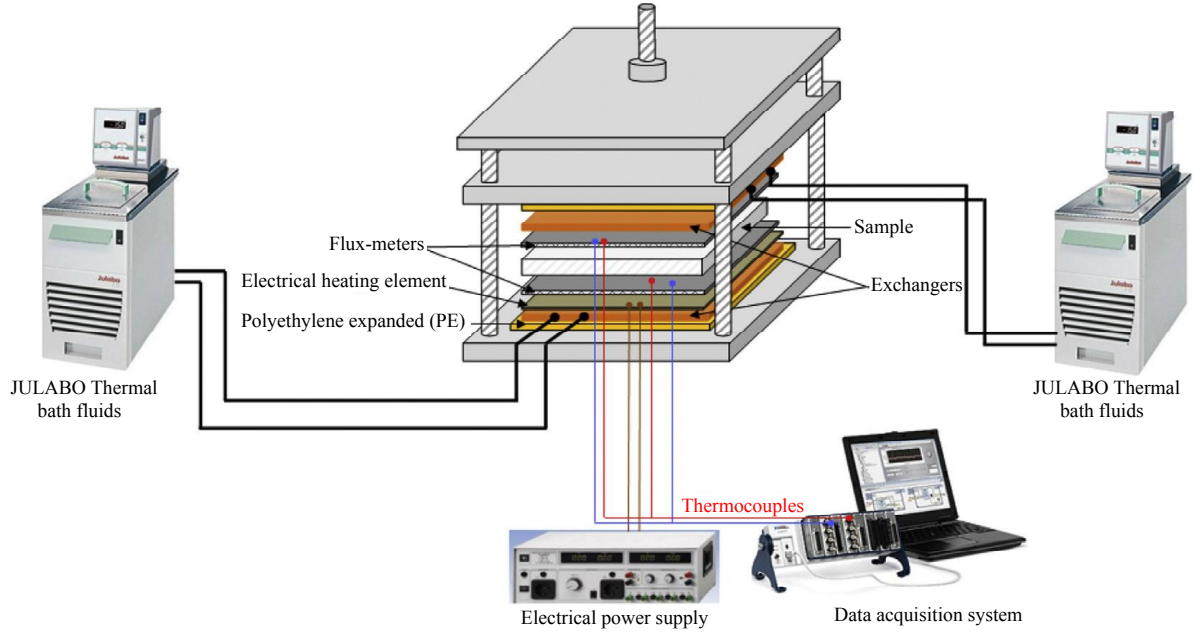


FIGURE 3.5: Dispositif expérimental (Hot plate) [10].

dessus du point de fusion du MCP : $T_1 = T_2 = 30\text{ }^\circ\text{C}$ puis $T_2 = 34\text{ }^\circ\text{C}$.

Pour étudier l'inertie thermique et les capacités de stockage d'énergie thermique des échantillons, on se sert également des flux thermiques mesurés à la surface des échantillons. On impose une température initiale T_I sur les deux faces de l'échantillon jusqu'à obtenir un état d'équilibre thermique (échantillon isotherme). Ensuite, on impose brusquement une variation de température dans les plaques échangeuses jusqu'à l'apparition d'un nouvel état d'équilibre à une température finale T_F . Les températures au centre des faces des échantillons sont mesurées au cours de l'essai. Pour déterminer la chaleur sensible des échantillons contenant la paraffine à l'état solide, on impose une variation de température de $T_I = 15\text{ }^\circ\text{C}$ à $T_F = 20\text{ }^\circ\text{C}$ et pour la chaleur sensible des échantillons contenant la paraffine à l'état liquide, on impose une variation de température de $T_I = 30\text{ }^\circ\text{C}$ à $T_F = 40\text{ }^\circ\text{C}$. Pendant ce processus, l'échantillon stocke une quantité d'énergie donnée par :

$$Q_{sens} = \frac{1}{\rho e} \int_{t_i}^{t_f} (\phi_1 - \phi_2) dt = C_m (T_F - T_I), \quad (3.3)$$

où ρ est la densité de l'échantillon et e son épaisseur. t_i et t_f désignent respectivement le temps initial et le temps de fin de mesure. C_m est la chaleur massique exprimé en $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$. La relation précédente permet de déduire la chaleur massique C_m et la capacité calorifique C_p des échantillons en fonction de l'état du PCM.

Pour déterminer la chaleur latente de fusion, on impose une variation de température de

$T_I = 15^\circ\text{C}$ à $T_F = 40^\circ\text{C}$ pour s'assurer des changements de phases complètes dans les microcapsules présentes dans les échantillons. La méthode utilisée consiste à calculer la quantité de chaleur totale stockée entre deux états thermiques stables. Dans le processus de changement de phase, le matériau stocke de la chaleur sensible et de la chaleur latente. On peut évaluer la quantité de la chaleur latente L_F en faisant la différence entre chaleur totale stockée et la chaleur sensible. La chaleur totale stockée est estimée en calculant la somme de flux enregistrés entre chaque pas de temps :

$$Q_{tot} = Q_{sens} + L_F. \quad (3.4)$$

Connaissant les chaleurs spécifiques C_{ps} et C_{pl} des échantillons lorsque le MCP est respectivement à l'état solide et à l'état liquide, la relation (3.4) peut être réécrite comme :

$$Q_{tot} = C_{ps}\Delta T_s + C_{pl}\Delta T_l + L_F, \quad (3.5)$$

ce qui permet de déduire L_F . Dans la relation précédente, ΔT_s et ΔT_l sont les variations de température lorsque le MCP se trouve respectivement à l'état solide et à l'état liquide.

3.3.3 Le Hot Disk (HD)

L'analyseur Hot Disk (fourni par ThermoConcept) est un appareil de mesure de la conductivité thermique, de la diffusivité thermique et de la capacité thermique des matériaux solides ou liquides. Utilisant la méthode TPS (Transient Plane Source), il permet de mesurer des conductivités thermiques de 5×10^{-3} à $1,8 \times 10^3 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Les autres caractéristiques du dispositif sont disponibles sur le site web du fournisseur [161]. Gustafsson et Long [162, 163] ont présenté en détail toute la théorie sur la méthode TPS. Le principe de la méthode TPS consiste à appliquer à l'échantillon en étude, une puissance constante pendant un temps donné et à mesurer par la même occasion, l'élévation de température (de quelques degrés) de l'échantillon via une sonde. La Fig. 3.6 montre le dispositif expérimental. Le Hot Disk est relié à un ordinateur qui permet d'acquérir les données et de faire le post-traitement. La procédure consiste à placer la sonde du dispositif sur une surface lisse de l'échantillon. Le capteur est maintenu en contact avec l'échantillon tout au long de la mesure. Les propriétés thermiques sont déterminées à température constante. Les mêmes échantillons parallélopipédiques utilisés pour le Hot Plate sont installés dans un four qui permet de maintenir la température de l'échantillon à une valeur constante.

Le dispositif expérimental utilisé est composé de 4 unités : le Hot Disk, un switch multi-sondes, un ordinateur et un four ventilé. Une sonde Kapton est reliée au switch multi-sonde qui à son tour est relié au Hot Disk. La sonde Kapton joue deux rôles : elle permet de transmettre la puissance fournie à l'échantillon et de mesurer l'élévation de température de l'échantillon grâce à l'enregistrement de la variation de la résistance électrique via un pont de Wheastone. Le Hot Disk est relié à un ordinateur sur lequel est installé un logiciel qui permet d'acquérir les données de mesure, de faire le post-traitement pour obtenir directement les caractéristiques thermiques

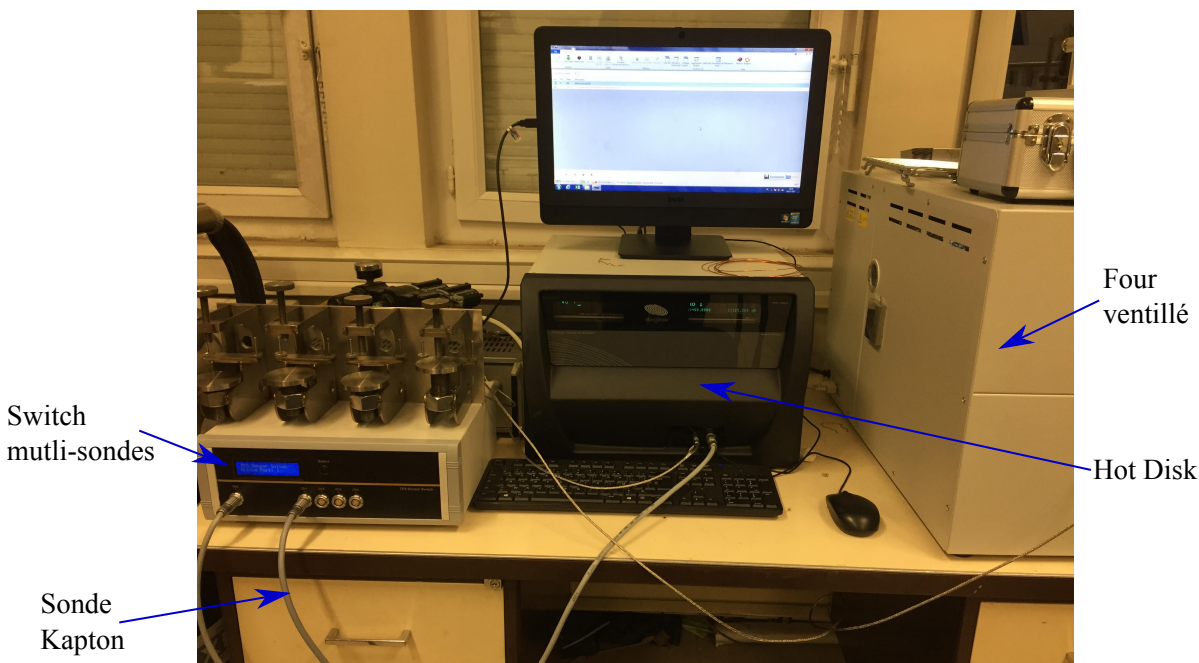


FIGURE 3.6: Le Hot Disk : le dispositif expérimental.

recherchées. Une deuxième sonde muni d'un capteur de température disposé à proximité de l'échantillon permet de suivre la température ambiante à laquelle se déroule l'essai. Le switch multi-sondes permet d'utiliser plusieurs sondes différentes sans refaire les connexions. A cause des changements de phase dans le MCP qui influencent les résultats, il faut que chaque mesure se déroule à température constante choisie au préalable et que l'échantillon ait une température uniforme. Pour cela, nous avons utilisé le four ventilé pour contrôler la température ambiante et la température interne de l'échantillon.

Pour les mesures avec le MCP à l'état solide et à l'état liquide, les mesures sont faites respectivement à 17 °C et à 35 °C. La procédure suivie est composée de 3 étapes. Premièrement, l'échantillon est disposé dans le four réglé à la température souhaitée le temps que tout l'échantillon soit à la température requise. Le capteur de la sonde est posé à la surface la plus lisse de l'échantillon et immobilisé par un poids (configuration assymétrique). La configuration symétrique correspond au cas où le capteur est disposé entre deux échantillons du même matériau. La deuxième étape concerne le choix des paramètres de mesures dans le logiciel : la configuration (symétrique ou assymétrique), la référence de la sonde, la profondeur de pénétration, la puissance et le temps de chauffe. La profondeur de pénétration étant la plus petite distance qui sépare le centre du capteur du bord de l'échantillon. Le choix des autres paramètres est fait à l'aide d'un fichier Excel conçu par le fournisseur. La troisième et dernière étape consiste à lancer la mesure et à traiter les résultats depuis le logiciel. Ce dernier permet de programmer plusieurs séries de mesures. Une pause de 30 minutes est respectée entre deux mesures consécutives pour

s'assurer que la température de l'échantillon est de nouveau uniforme.

3.3.4 Conductivités thermiques effectives par homogénéisation numérique

Dans cette section, nous détaillons le principe utilisé pour évaluer le tenseur de conductivité thermique effective des matériaux de l'essai par homogénéisation numérique. Ici, le MCP contenu dans les microcapsules est considéré homogène à chaque fois : soit à l'état solide, soit à l'état liquide. Pour cela, nous considérons le VER de la Fig. 3.7, associé au domaine $\Omega \in \mathbb{R}^3$. Il est composé de 3 phases : la matrice (dont la conductivité thermique est donnée par les résultats du Hot Plate sur l'Echantillon 0), l'enveloppe et le MCP (dans lequel la conductivité thermique est constante). La fraction volumique de microcapsules de MCP sera contrôlée par le rayon R .

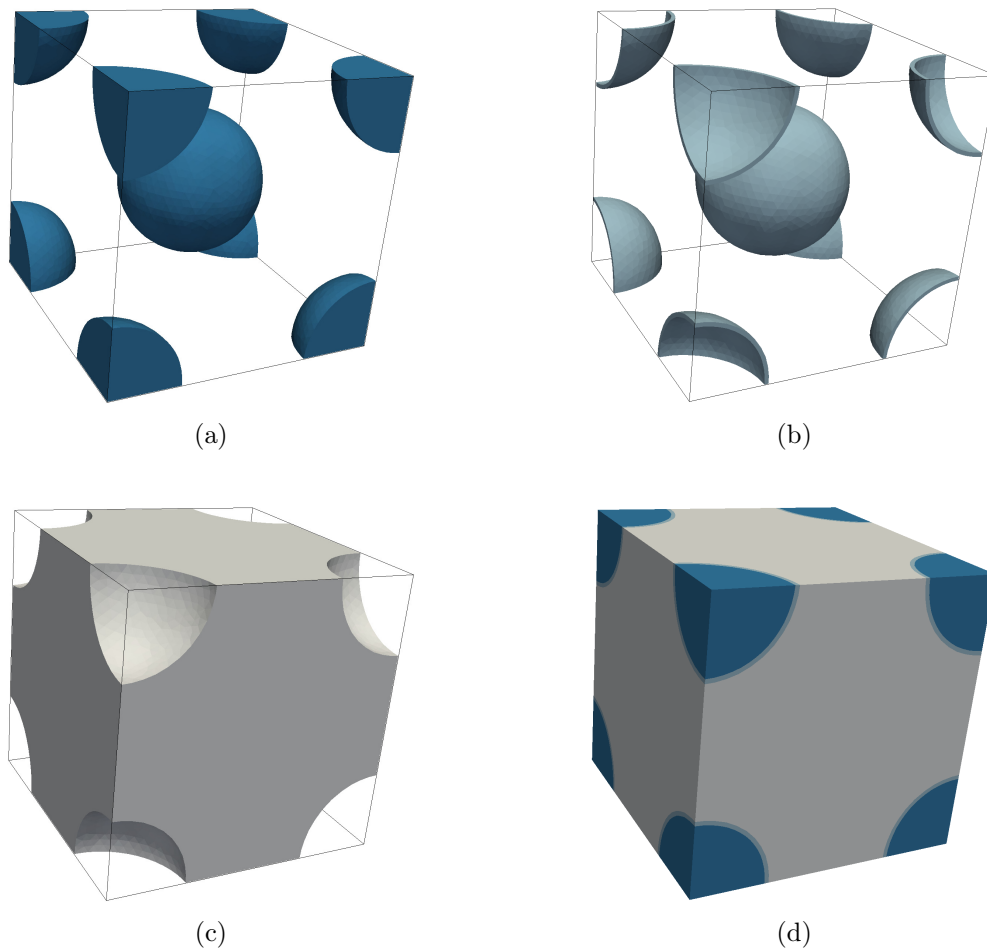


FIGURE 3.7: La géométrie et les constituants du VER en 3D : (a) inclusions en MCP ; (b) la membrane ; (c) la matrice ; (d) le VER : $1 \times 1 \times 1 \text{ mm}^3$.

Les interfaces entre les différentes phases sont supposées parfaites. L'objectif est de déterminer le tenseur de conductivité thermique effective $\boldsymbol{\lambda}^{\text{eff}}$ du milieu homogène équivalent d'une structure composée d'une répétition du VER considéré, dans l'hypothèse de la séparation d'échelles. Le problème de localisation résolu sur Ω est défini comme suit. Etant donné un gradient de température macroscopique $\overline{\nabla T}$, trouver le champ de température $T(\mathbf{x})$ dans Ω tel que :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = 0 \text{ dans } \Omega \quad (3.6)$$

avec

$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = -\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x})\nabla T(\mathbf{x}) \quad (3.7)$$

et vérifiant

$$\int_{\Omega} \nabla T(\mathbf{x}) d\Omega = \overline{\nabla T}, \quad (3.8)$$

où $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x})$ est le tenseur de conductivité thermique donné pour chaque phase. Pour les matériaux isotropes, $\lambda_{ij} = \lambda\delta_{ij}$. Les équations (3.6) à (3.8) doivent être complétés par des conditions aux limites. Trois types de conditions aux limites peuvent être utilisées [164] : Gradient de température uniforme (UGT-Uniform Gradient of temperature), flux de chaleur uniforme (UHF - Uniform Heat Flux) ou les conditions aux limites périodiques (PER). Dans ce travail, nous utilisons les conditions aux limites périodiques exprimées par :

$$T(\mathbf{x}) = \overline{\nabla T} \cdot \mathbf{x} + \tilde{T}(\mathbf{x}) \quad (3.9)$$

où \tilde{T} est périodique sur $\partial\Omega$. Le problème défini par les équations (3.6) à (3.9) est résolu par la méthode des Eléments Finis [165]. Grâce aux relations de moyenne, le tenseur de conductivité thermique effective est donné par

$$\bar{\boldsymbol{\lambda}} = \frac{1}{|\Omega|} \int \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x}) \mathbf{A}(\mathbf{x}) d\Omega \quad (3.10)$$

$\mathbf{A}(\mathbf{x})$ est le tenseur de localisation pour les gradients de température tel que

$$\nabla T(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \overline{\nabla T}. \quad (3.11)$$

En supposant que chaque phase dans le VER a une conductivité thermique constante, le tenseur de localisation \mathbf{A} est construit en utilisant le principe de superposition, c'est-à-dire que l'équation 3.9 est considérée avec 3 différentes valeurs de $\overline{\nabla T}$:

$$\overline{\nabla T} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

3.4 Résultats et discussion

3.4.1 Conductivité thermique

Dans cette partie, les conductivités thermiques obtenues par les 3 méthodes sont présentés. Pour le Hot Plate, le pas de temps est de 6s. Les Figs. 3.8 et 3.9 par exemple montrent les résultats obtenus avec l'échantillon 1 lorsque des consignes de température sont données via le programme d'acquisition de données.

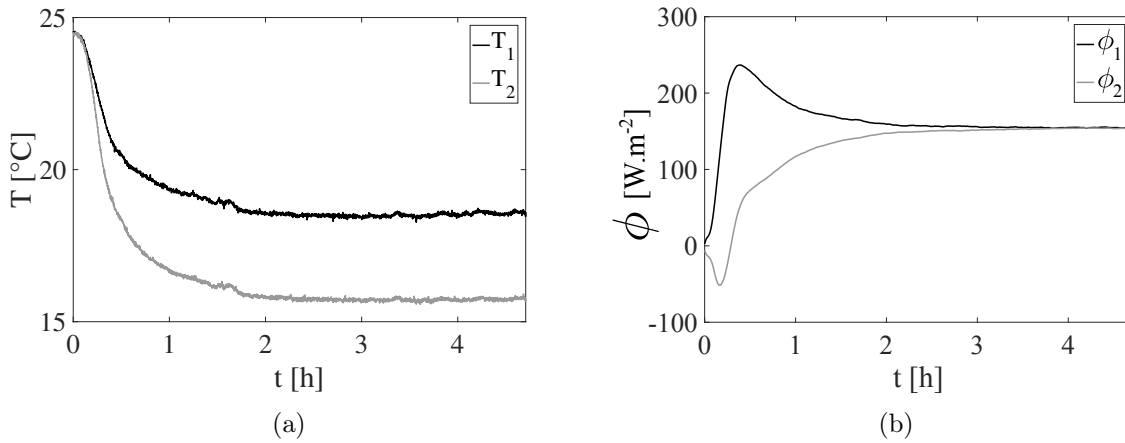


FIGURE 3.8: (a) Températures et (b) flux thermiques en fonction du temps pour l'échantillon 1, pour $T_1 = 16$ $^{\circ}\text{C}$ et $T_2 = 20$ $^{\circ}\text{C}$.

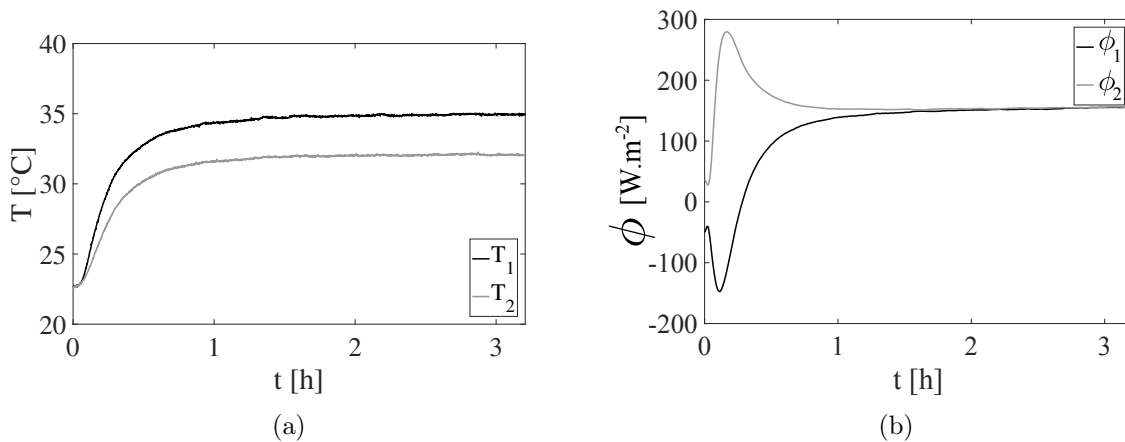


FIGURE 3.9: (a) Températures et (b) flux thermiques en fonction du temps pour l'échantillon 1, pour $T_1 = 30$ $^{\circ}\text{C}$ et $T_2 = 35$ $^{\circ}\text{C}$.

Initialement, les échantillons se trouvent à la température ambiante. Dans la Fig. 3.8, les températures imposées sont de $T_1 = 16$ °C et $T_2 = 20$ °C. Dans le cas de la 3.9, $T_1 = 30$ °C et $T_2 = 35$ °C. De manière générale, les températures évoluent de manière asymptotique vers la valeur de consigne, on remarque également que les flux évoluent très rapidement lors du régime transitoire en début d'enregistrement, puis convergent vers une valeur constante qui correspond à un régime permanent obtenu en fin d'enregistrement. En appliquant le protocole expérimental exposé au 3.3.2, les conductivités thermiques sont évaluées par l'équation (3.2). L'homogénéisation numérique (voir 3.3.4) a permis aussi de déterminer les conductivité thermiques effectives des échantillons contenant 10 et 15% de microcapsules de MCP en utilisant le VER de la Fig. 3.7. On montre dans la Fig. 3.10 par exemple, la solution par la méthode des Eléments Finis du problème de localisation avec $\overline{\nabla T} = [1 \ 0 \ 0]^T$. L'avantage de l'outil numé-

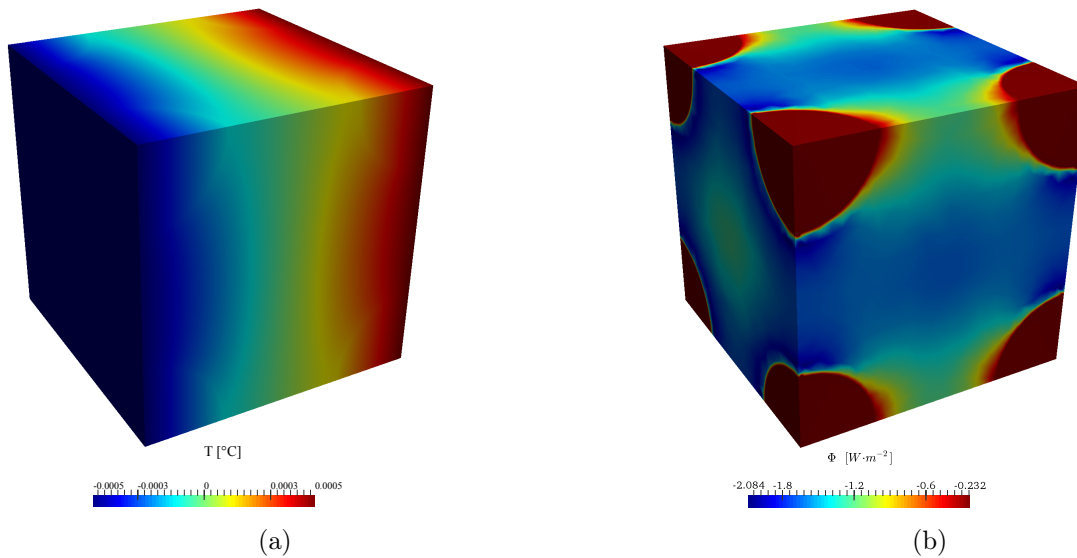


FIGURE 3.10: Solution par la méthode des éléments finis du problème pour $\overline{\nabla T} = [1 \ 0 \ 0]^T$, (a) température et (b) composante X du flux de chaleur.

rique est de pouvoir déterminer le tenseur de conductivité thermique effectif du composite pour n'importe quelle fraction volumique de MCP en variant juste le rayon de la microcapsule. La Fig. 3.11 montre la variation de $\overline{\lambda}_{11}$ en fonction de la fraction volumique de MCP. Les résultats obtenus par homogénéisation numérique sont comparés aux résultats des essais expérimentaux (Hot Plate et Hot Disk). On peut voir sur la Fig. 3.12 que les résultats correspondent bien aux valeurs attendus. Les valeurs numériques sont consignées dans le Tableau 3.2.

On note néanmoins des écarts allant jusqu'à 6 % entre les résultats du Hot Plate et du Hot Disk. Ces écarts s'expliquent par le fait que les résultats du Hot Plate sont issus des flux thermiques à travers tout l'échantillon tandis que le Hot Disk applique à l'échantillon, un flux de chaleur qui se diffuse radialement et qui ne dépasse pas la profondeur de pénétration. Le

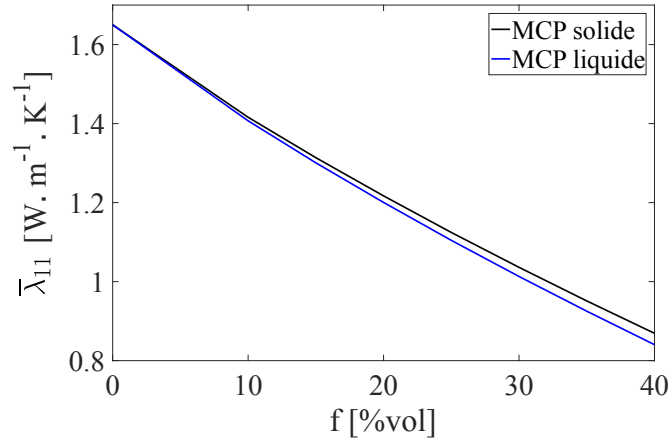


FIGURE 3.11: Variation de la conductivité thermique effective en fonction de la fraction volumique de MCP.

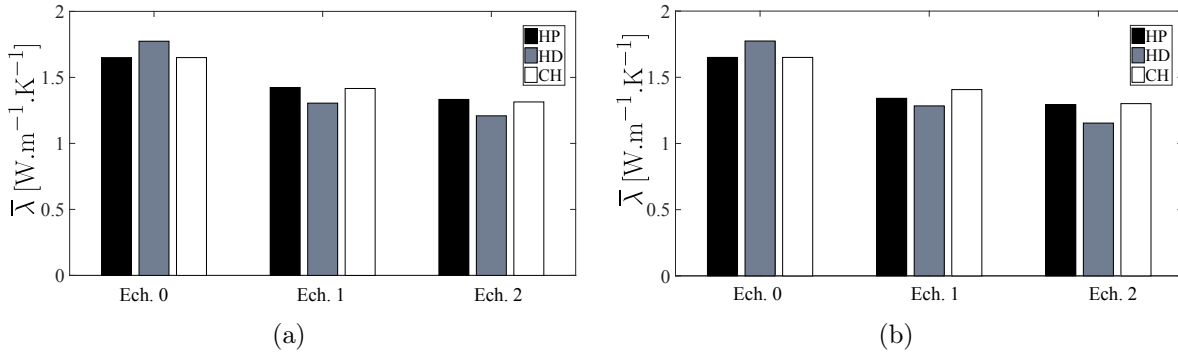


FIGURE 3.12: Conductivité thermique des échantillons contenant du MCP (a) à l'état solide et (b) à l'état liquide : HP = Hot guarded Plates, HD = Hot Disk, CH = homogénéisation numérique.

TABLEAU 3.2: Conductivités thermiques [$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$].

Méthodes	Ech. 0	Ech. 1		Ech. 2	
		Solide	Liquide	Solide	Liquide
Hot Plate	1.650	1.423	1.341	1.333	1.292
Hot Disk	1.674	1.305	1.294	1.209	1.154
Hom.	1.650	1.416	1.407	1.314	1.301

caractère fortement hétérogène du matériaux et sa porosité peuvent influencer les résultats du Hot Disk. Pour les résultats numériques, des écarts aussi sont observés. On peut les expliquer par les hypothèses faites dans le modèle numérique : les interfaces parfaites et la matrice qui est considérée homogène. En tenant compte aussi des erreurs de mesures, on peut conclure que les résultats expérimentaux sont en accord avec les résultats numériques.

Comme prévu, pour toutes les méthodes utilisées, la conductivité thermique effective diminue en fonction de la fraction volumique de MCP en raison de la faible conductivité thermique de la paraffine par rapport au mortier de ciment. On a la même tendance pour la densité du matériau composite (voir Tableau 3.1).

3.4.2 Stockage d'énergie thermique

Pour tester les performances thermiques des échantillons, en particulier leur capacité à stocker l'énergie thermique, on a imposé un profil de température en créneau sur les deux faces de chaque échantillon. Ces mesures ont pour but de déterminer la chaleur spécifique et la chaleur latente des échantillons. Cet essai a été effectué avec les conditions aux limites suivantes.

- Etape 1 : la température est maintenue sur les deux faces de l'échantillon à une valeur initiale T_I jusqu'à l'obtention d'un flux de chaleur nul sur les deux faces de l'échantillon (conditions isothermes) : pour les mesures avec le MCP à l'état solide, $T_I = 12$ °C (respectivement 30 °C pour le MCP à l'état liquide).
- Etape 2 : on applique une température T_F sur les deux faces de l'échantillon jusqu'à l'obtention d'un flux de chaleur nul sur les deux faces. $T_F = 20$ °C (respectivement 30 °C pour le MCP à l'état liquide).

La Fig. 3.13 par exemple montre l'évolution de la température et du flux de chaleur aux surfaces de l'échantillon 1 lors de la mesure de sa chaleur spécifique avec le MCP à l'état liquide.

Pour l'étude du stockage et destockage, la procédure est identique sauf les températures de consigne qui sont choisies de part et d'autre du point de fusion du MCP : $T_I = 15$ °C et $T_F = 40$ °C (voir Fig. 3.14 par exemple). Ce profil de température permet d'assurer la fusion dans toutes les microcapsules de MCP contenues dans les échantillons. En utilisant l'équation 3.4, on déduit la chaleur latente de fusion L_F des échantillons contenant des microcapsules de MCP en faisant la différence entre la densité d'énergie thermique totale stockée et la densité de chaleur sensible stockée par l'échantillon de référence [16].

Les résultats de mesure de la chaleur spécifique des échantillons sont consignés dans le Tableau 3.3. Dans ce tableau, on a les valeurs de la chaleur spécifique et de la chaleur sensible stockée par les échantillons lors des variations de température. On observe que l'énergie thermique stockée et la chaleur spécifique des échantillons augmentent avec la fraction volumique de MCP. Ces résultats sont cohérents avec les données du fournisseur : la chaleur spécifique des échantillons avec du MCP en phase solide est supérieure à celle des mêmes échantillons contenant du MCP en phase liquide.

Les résultats de mesure de la chaleur latente de fusion sont présentés dans la Fig. 3.15 et

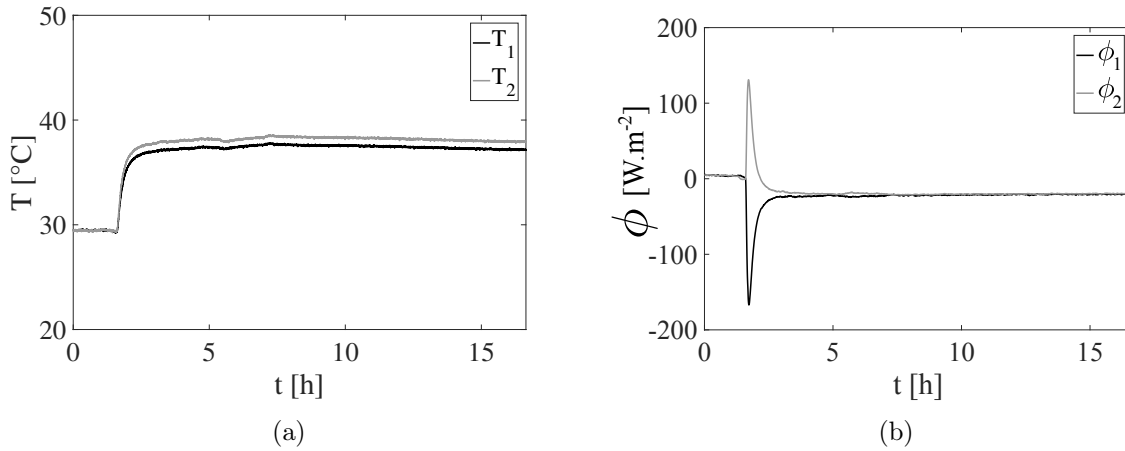


FIGURE 3.13: Résultats expérimentaux lors de la mesure de la chaleur spécifique de l'échantillon 1 avec le MCP à l'état liquide : (a) température et (b) flux de chaleur sur les deux faces de l'échantillon.

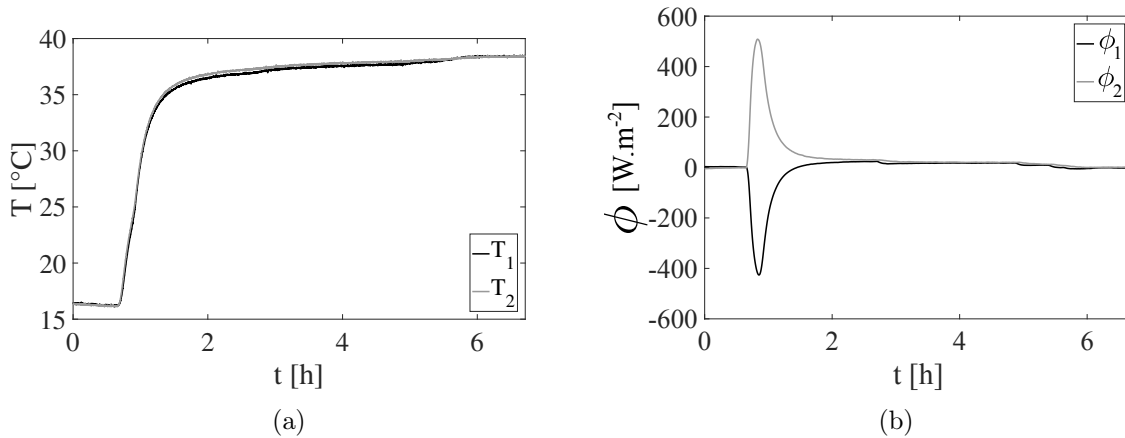


FIGURE 3.14: Résultats expérimentaux de la mesure de l'énergie totale stockée par l'échantillon 2 lorsque le MCP change de la phase solide à la phase liquide : (a) température and (b) flux de chaleur sur les deux faces de l'échantillon.

toutes les valeurs numériques sont disponibles dans le Tableau 3.4. Les résultats sont : la densité d'énergie sensible stockée par l'échantillon de référence, la densité d'énergie totale (sensible et latente) et la chaleur latente de fusion des échantillons contenant du MCP.

Ces résultats prouvent que l'incorporation des microcapsules de MCP confère au mortier l'aptitude de stocker de l'énergie thermique par chaleur latente. On observe aussi que la densité de chaleur stockée augmente avec la fraction volumique de MCP. Il est évident que la restitution

TABLEAU 3.3: Chaleur spécifique et chaleur sensible des échantillons avec le MCP à l'état solide ou à l'état liquide.

	Ech. 0	Ech. 1		Ech. 2	
		Solide	Liquide	Solide	Liquide
C_p [kJ. kg ⁻¹ . °C ⁻¹]	1.010	2.042	1.442	2.167	1.509
Q_{sen} [kJ. kg ⁻¹]	8.234	11.823	10.834	16.338	12.075

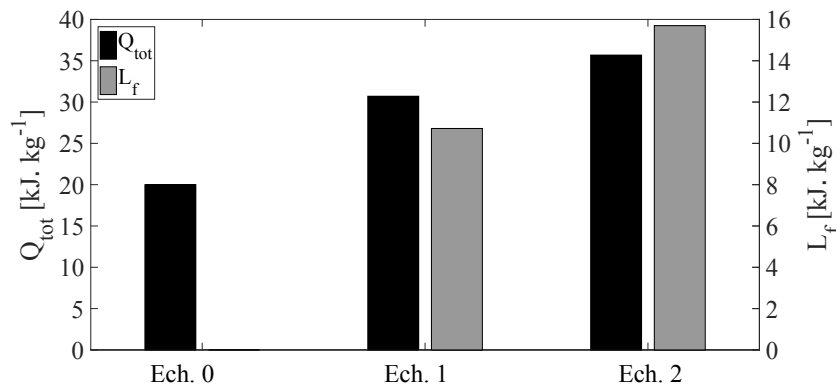


FIGURE 3.15: Energie totale stockée et chaleur latente des échantillons.

d'énergie thermique a la même tendance, ce qui est confirmé par les résultats de la section suivante.

TABLEAU 3.4: Energie totale stockée et chaleur latentes des échantillons.

	Ech. 0	Ech. 1	Ech. 2
Q_{tot} [kJ. kg ⁻¹]	19.983	30.704	35.682
L_f [kJ. kg ⁻¹]	0	10.721	15.699

3.4.3 Effets des cycles thermiques

Pour étudier la stabilité thermochimique des échantillons de notre étude, des cycles de chargement thermiques sont imposés sur les échantillons à 10% et à 15% en volume de microcapsules de MCP. Cet essai vise à vérifier que les performances thermiques (stockage et destockage d'énergie thermique) sont stables lors des cycles de fusion et solidification du MCP

conenu dans les microcapsules. Pour cela, nous avons utilisé le Hot Plate afin de s'assurer que les échantillons atteignent à chaque fois un état isotherme entre deux cycles thermiques consécutifs. Pour chaque échantillon initialement à la température ambiante, on impose un créneau de température qui va de 20 à 40 °C. Les Figs. 3.16 et 3.17 montrent les résultats obtenus respectivement pour l'échantillon 1 et 2.

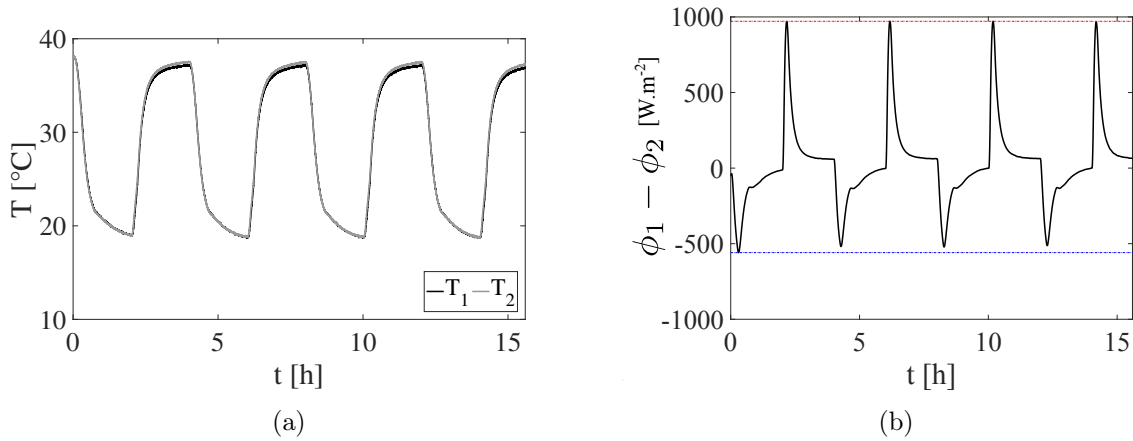


FIGURE 3.16: Température et flux de chaleur lors des cycles thermiques pour l'échantillon 1.

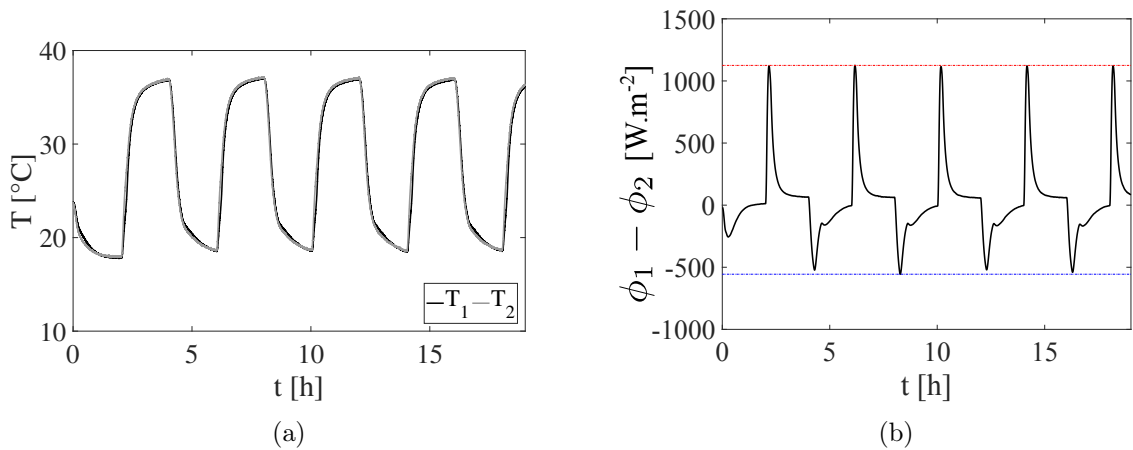


FIGURE 3.17: Température et flux de chaleur lors des cycles thermiques pour l'échantillon 2.

Dans les Figs. 3.16 et 3.17 on montre un exemple d'une expérience comprenant quatre cycles de fusion/solidification durant 20 heures. Dans chaque cycle thermique, on a des variations brusques du flux thermique, ce qui correspond au transfert de chaleur en régime transitoire dans l'échantillon, période au cours de laquelle les changements de phase s'effectuent dans les microcapsules. La différence des flux sur les faces de l'échantillon reviennent bien à zéro avant

le cycle thermique suivant. Ces résultats prouvent aussi la répétabilité des essais effectués avec le Hot Plate : pour chaque échantillon, on a toujours les mêmes valeurs de flux tout au long des cycles, ce qui prouve aussi la stabilité de ces composites. Ces résultats confirment qu'il n'y a pas d'aléas dans les mesures. En analysant les échantillons, aucune fuite de paraffine liquide n'a été détectée. On peut déduire que les fuites sont principalement causés par des fissurations dues aux chargements mécaniques.

3.5 Conclusion

Ce travail a montré les effets des microcapsules de MCP sur les propriétés thermiques du mortier de ciment. Les conductivités thermiques des échantillons sont déterminées à l'aide du Hot Disk et du Hot Plate. Les résultats expérimentaux correspondent bien aux valeurs attendues et sont proches des valeurs prédites par homogénéisation numérique. Comme prévu, la densité et les conductivités thermiques diminuent, tandis que l'inertie thermique augmente avec avec la fraction volumique de microcapsules de MCP. Dans cette étude expérimentale, des méthodes de mesures des propriétés thermiques en régime stationnaire sont utilisées. Pour étudier la cinétique des changements de phase et leurs effets sur les performances des échantillons en régime transitoire, d'autres techniques plus adaptées (Transient Hot Strip Method par exemple) doivent être utilisées.

Modélisation du comportement mécanique effectif et de la fissuration des composites incluant des microcapsules de matériaux à changement de phase

Sommaire

4.1 Introduction	78
4.2 La méthode de champs de phase pour la simulation de l'initiation et la propagation des fissures	79
4.2.1 Représentation diffuse de la fissure	79
4.2.2 Problème de champs de phase	82
4.2.3 Formulation variationnelle et discrétisation du problème de champs de phase	83
4.2.4 Formulation variationnelle et discrétisation du problème mécanique	84
4.3 Fissuration d'une microstructure hétérogène contenant des microcapsules de MCP solide	85
4.3.1 Exemple en 2D	86
4.3.2 Résultats numériques	86
4.4 Interaction fluide-structure	87
4.4.1 Le mouvement du fluide	87
4.4.2 Le couplage avec la structure et procédure de résolution	92
4.4.3 Effets de l'incompressibilité du fluide sur un matériau élastique	93
4.5 Effets de l'affaiblissement par les microcapsules de MCP	97
4.5.1 Evolution des propriétés élastiques en fonction de la fraction volumique de MCP	98
4.5.2 Taille du VER et distribution aléatoire des microcapsules de MCP	99
4.6 Effets des microcapsules de MCP sur la fissuration	101
4.6.1 Fissuration de microstructures aléatoires	103
4.6.2 Résultats numériques	104
4.7 Diffusion du MCP liquide dans la matrice fissurée	105

4.7.1	Modélisation de l'écoulement non saturé du fluide dans le milieu poreux fissuré	106
4.7.2	Formulation Eléments Finis	113
4.7.3	Exemples numériques	114
4.8	Conclusion	118

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, on s'intéresse aux effets d'incompressibilité du MCP liquide sur le comportement mécanique du composite. Le couplage fluide-structure nécessite des algorithmes de résolution robustes et la combinaison de certains paramètres matériaux de la structure et du fluide peuvent conduire à des instabilités [166]. Dans la plupart des modèles d'interaction fluide-structure, l'effet du fluide est très important dans le cas des structures de faible rigidité ou de faible épaisseur subissant de grandes déformations. Le matériau de notre étude comporte une matrice cimentaire avec une grande résistance mécanique (module de Young autour de 2 GPa au moins) et le MCP liquide dont la densité est inférieure à 10^3 kg.m^3 . De plus, on suppose que le fluide occupe des domaines non connectés et entourés par la matrice dense et résistante. Cette configuration justifie l'hypothèse selon laquelle la présence du fluide n'a pas d'influence sur la réponse mécanique du composite. Cependant, il est nécessaire de définir les plages de valeurs dans lesquelles cette hypothèse est valable. L'objectif est d'étudier le comportement mécanique avec fissuration du matériau composite contenant du MCP. Il s'agit d'évaluer les effets de la présence du MCP liquide sur le comportement mécanique à l'échelle des microcapsules de MCP en faisant varier les propriétés élastiques de la matrice. Cette dernière étant un matériau cimentaire avec un comportement quasi-fragile, nous nous limiterons aux petites déformations dans le solide. La propagation des fissures peut déclencher la fuite du MCP lorsque ce dernier se trouve en phase liquide. Les matériaux cimentaires étant eux-mêmes poreux, la fissuration pourrait augmenter localement la conductivité hydraulique du milieu et favoriser la diffusion du MCP liquide dans tout le réseau poreux. L'écoulement dans un milieu poreux est un phénomène rencontré dans plusieurs domaines (la géologie, l'hydrologie et la chimie par exemple). Dans ces problèmes, le milieu poreux est occupé par plusieurs fluides immiscibles (dans notre cas c'est le MCP liquide et l'air). Chaque phase doit être traitée individuellement dans le milieu poreux, ce qui constitue un vrai défi surtout dans des géométries complexes comme les fissures.

Dans la suite de ce chapitre, nous présentons dans un premier temps, la méthode de champs de phase. Un exemple en 2D est présenté dans la Section 4.3 pour illustrer les capacités de la méthode à simuler l'initiation et la propagation de fissures dans notre matériau d'étude. Dans la section 4.4.2, on présentera l'approche fluide-structure employée avec des détails sur la modélisation du fluide incompressible et la sensibilité des résultats par rapport aux modules élastiques du solide. Une étude paramétrique considérant des structures de diverses rigidités permettra de

déterminer d'une part, dans quelles conditions elles sont sensibles aux interactions avec le fluide et d'autre part, de déterminer l'effet de la fraction volumique de MCP sur le comportement mécanique effectif du composite. Les Sections 4.5 et 4.6 portent sur l'effet d'affaiblissement du MCP sur le comportement mécanique du composite. Enfin, nous présentons dans la Section 4.7, un modèle de diffusion non linéaire pour simuler l'écoulement variablement saturé du MCP liquide dans la matrice fissurée.

4.2 La méthode de champs de phase pour la simulation de l'initiation et la propagation des fissures

La simulation numérique de l'initiation et de la propagation des fissures dans les matériaux hétérogènes est un problème complexe. Une revue des différentes approches souvent utilisées est présentée dans la Section 1.4.1.5 du Chapitre 1 avec un choix justifié de la méthode de champs de phase pour notre travail. Dans cette section, nous présentons la méthode et les formulations variationnelles pour les simulations par la méthode des éléments finis.

4.2.1 Représentation diffuse de la fissure

Récemment, la méthode de champs de phase a été adaptée à la description de la propagation des fissures. Partant des travaux pionniers de Francfort and Marigo [127], les difficultés rencontrées dans la mécanique de la rupture classique peuvent être surmontées par une approche de minimisation d'énergie utilisant la théorie de la rupture des matériaux fragiles [167, 168, 169, 170]. La méthode est basée sur une représentation diffuse des discontinuités liées aux fronts de fissures : la surface de la fissure est remplacée par une fonction lissée, en utilisant une fonctionnelle de Mumford–Shah [171], qui a été remplacée par la suite par une approximation de Ambrosio–Tortorelli [172, 173]. Il a été montré que la solution associée au problème variationnel converge vers la solution utilisant une description surfacique des fissures, au sens de la Γ -convergence [174, 175, 176].

Notons $\Omega \in \mathbb{R}^D$, (avec $D = 2, 3$ la dimension de l'espace) un domaine dont le bord extérieur est noté $\partial\Omega$, contenant des fissures notées collectivement Γ (de dimension $D - 1$). La géométrie des fissures est approximée par une variable scalaire $d(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Omega$. La variable de champs de phase d prend la valeur 1 sur Γ et s'annule ailleurs (voir Fig. 4.2). Une fonction vérifiant ces conditions peut être obtenue en résolvant le problème suivant [177, 178] :

$$\begin{cases} d(x) - l^2 \Delta d(x) = 0 & \text{dans } \Omega \\ d(x) = 1 & \text{sur } \Gamma \\ \nabla d \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.1)$$

où l est un paramètre de régularisation qui représente la largeur de la fissure et Δ l'opérateur Laplacien. La Fig. 4.1 montre la variable d en une dimension pour $x \in [0, L]$, $L = 1$ et pour différentes valeurs de l .

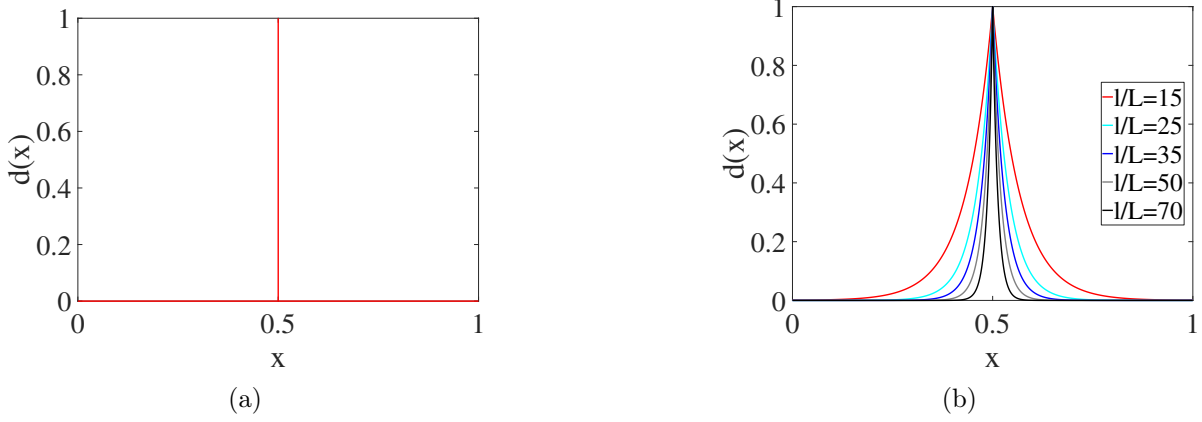


FIGURE 4.1: Représentation diffuse des fissures en une dimension : (a) fissure nette ; (b) fissure diffuse pour différentes valeur du paramètre l .

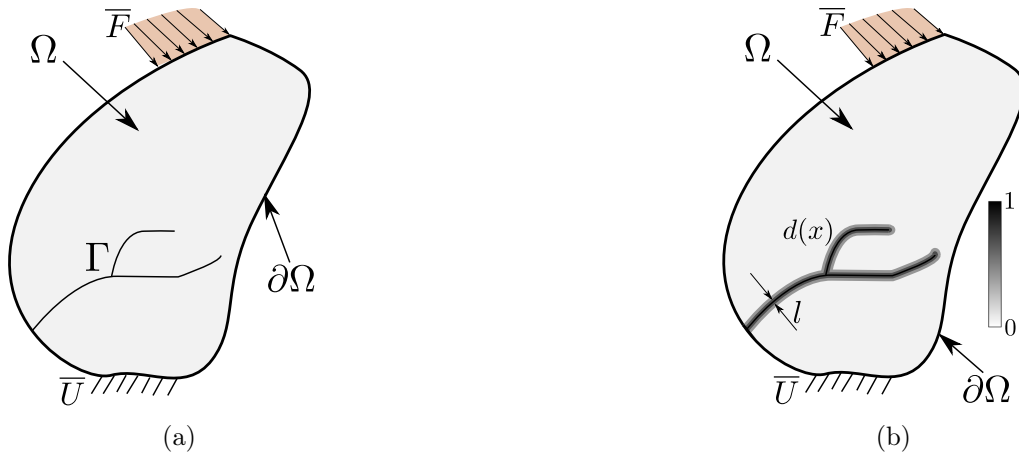


FIGURE 4.2: Représentation diffuse des fissures en 2D : (a) fissure décrite par une surface ; (b) fissure diffuse.

L'énergie totale du système est donnée par [127] :

$$\mathcal{E}(\mathbf{u}, d) = \int_{\Omega} \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, d) d\Omega + G_c \int_{\Gamma} d\Gamma \quad (4.2)$$

où Ψ est la densité de déformation élastique, G_c est le taux de restitution d'énergie critique au sens de Griffith, \mathbf{u} est champ de déplacement et $\boldsymbol{\varepsilon}$ le tenseur des déformations. La régularisation de la discontinuité Γ donne :

$$\tilde{\mathcal{E}}(\mathbf{u}, d) = \int_{\Omega} \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, d) d\Omega + G_c \int_{\Omega} \gamma(d, \nabla d) d\Omega, \quad (4.3)$$

où γ est la densité de fissures et

$$\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, d) = g(d)\tilde{\Psi}^+(\boldsymbol{\varepsilon}^+) + \tilde{\Psi}^-(\boldsymbol{\varepsilon}^-). \quad (4.4)$$

Dans (4.4), $g(d)$ est la fonction de dégradation telle que $g(0) = 1$, $g(1) = 0$ et $g'(1) = 0$. $\tilde{\Psi}^+(\boldsymbol{\varepsilon}^+)$ et $\tilde{\Psi}^-(\boldsymbol{\varepsilon}^-)$ désignent respectivement les densités de déformation liées aux parties extensive et compressive du tenseur de déformation [177]. Comme proposé dans [179] et repris dans [22], le tenseur de déformation élastiques est décomposé en ses parties extensive et compressive par le calcul numérique de ses valeurs propres :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^+ + \boldsymbol{\varepsilon}^-. \quad (4.5)$$

Les densités de déformations associées à la traction et à la compression sont données respectivement par :

$$\tilde{\Psi}^+(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\lambda}{2} (\langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+)^2 + \mu Tr \{(\boldsymbol{\varepsilon}^+)^2\} \quad (4.6)$$

et

$$\tilde{\Psi}^-(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\lambda}{2} (\langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_-)^2 + \mu Tr \{(\boldsymbol{\varepsilon}^-)^2\}, \quad (4.7)$$

où

$$\boldsymbol{\varepsilon}^+ = \sum_{n=1}^D \langle \varepsilon^i \rangle_+ \mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^- = \sum_{n=1}^D \langle \varepsilon^i \rangle_- \mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i. \quad (4.8)$$

Ci-dessus, $\langle x \rangle_{\pm} = (x \pm |x|)/2$, ε^i et \mathbf{n}^i sont les valeurs propres et vecteurs propres de $\boldsymbol{\varepsilon}$. Nous adoptons l'approche variationnelle développée par Francfort et Marigo [127] qui implique la minimisation de l'énergie totale $\tilde{\mathcal{E}}$ par rapport au champ de déplacement \mathbf{u} et par rapport à la variable de champs de phase d . La seconde minimisation est soumise à une contrainte supplémentaire $\dot{d} \geq 0$ qui rend la propagation de fissure un processus irréversible. Le problème de minimisation est résolu de façon incrémentale. A chaque pas de temps t^{n+1} , le problème revient à trouver le champ de déplacement \mathbf{u}^{n+1} et la variable de champs de phase d^{n+1} tels que

$$\mathbf{u}^{n+1}, d^{n+1} = Arg \left\{ \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{S}_u} \tilde{\mathcal{E}} \right\}, \quad (4.9)$$

où \mathcal{S}_u est l'ensemble des champs cinématiquement admissibles. Une façon classique de résoudre ce problème est d'utiliser un algorithme séquentiel pour les deux problèmes de minimisation définis par :

$$D_{\delta \mathbf{u}} \mathcal{L} = 0 \quad (4.10)$$

$$D_{\delta d} \mathcal{L} = 0, \quad 0 \leq d^n \leq d^{n+1} \leq 1 \quad (4.11)$$

où $D_{\delta a}f(\mathbf{u})$ est la dérivée Gâteaux. On obtient deux problèmes couplés : le problème mécanique donné par (4.10) et le problème de champs de phase donné par (4.11).

4.2.2 Problème de champs de phase

L'équation dans (4.11) peut être développée comme

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \Psi}{\partial d}(\boldsymbol{\varepsilon}, d) : \delta d d \Omega + G_c \int_{\Omega} D_{\delta d} \gamma(d, \nabla d) d \Omega = 0 \quad (4.12)$$

En choisissant

$$\gamma(d, \nabla d) = \frac{1}{2l} d^2 + \frac{l}{2} \nabla d \cdot \nabla d, \quad (4.13)$$

on obtient

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \Psi}{\partial d} + \frac{G_c}{l} (d \delta d + l \nabla d \cdot \nabla(\delta d)) \right\} d \Omega = 0 \quad (4.14)$$

ou

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(\frac{\partial \Psi}{\partial d} + \frac{G_c}{l} d \right) \delta d + l G_c \nabla d \cdot \nabla(\delta d) \right\} d \Omega = 0, \quad (4.15)$$

ou encore

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(g'(d) [\tilde{\Psi}^+] + \frac{G_c}{l} d \right) \delta d + l G_c \nabla d \cdot \nabla(\delta d) \right\} d \Omega = 0. \quad (4.16)$$

La fonction de dégradation est de la forme $g(d) = (1 - d)^2$. On obtient

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(2(d - 1) [\tilde{\Psi}^+] + \frac{G_c}{l} d \right) \delta d + l G_c \nabla d \cdot \nabla(\delta d) \right\} d \Omega = 0, \quad (4.17)$$

ou

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(2 [\tilde{\Psi}^+] + \frac{G_c}{l} \right) d \delta d + l G_c \nabla d \cdot \nabla(\delta d) \right\} d \Omega = 2 \int_{\Omega} [\tilde{\Psi}^+] \delta d d \Omega. \quad (4.18)$$

En utilisant l'égalité

$$\nabla d \cdot (\delta d) = \nabla \cdot (\delta d \nabla d) - \Delta d \delta d, \quad (4.19)$$

on a

$$\int_{\Omega} l G_c \nabla \cdot (\delta d) d \Omega = \int_{\Omega} \{ l G_c \nabla \cdot (\delta d \nabla d) - l G_c \Delta d \delta d \} d \Omega \quad (4.20)$$

et en utilisant le théorème de la divergence :

$$\int_{\Omega} lG_c \nabla \cdot (\delta d) d\Omega = \int_{\partial\Omega} lG_c \nabla \delta d \nabla d \cdot \mathbf{n} d\Gamma - \int_{\Omega} lG_c \Delta d \delta d d\Omega. \quad (4.21)$$

Le problème de champs de phase s'écrit :

$$\begin{cases} \left(2 [\tilde{\Psi}^+] - \frac{G_c}{l} \right) d - lG_c \Delta d = 2 [\tilde{\Psi}^+] & \text{dans } \Omega \\ \nabla d \mathbf{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega_G \\ d = 1 & \text{sur } \Gamma \end{cases} \quad (4.22)$$

La condition d'irréversibilité est respectée en imposant $d = 1$ aux nœuds où la variable de champs de phase d a atteint la valeur de 1. En adoptant la formulation de Miehe [177] qui introduit la fonction histoire \mathcal{H} définie par

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) = \max_{\tau \in [0, t]} [\tilde{\Psi}^+(\mathbf{x}, \tau)], \quad (4.23)$$

On peut réécrire (4.22) comme :

$$\begin{cases} \left(2\mathcal{H} - \frac{G_c}{l} \right) d - lG_c \Delta d = 2\mathcal{H} & \text{dans } \Omega \\ \nabla d \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega_G \\ d = 1 & \text{sur } \Gamma \end{cases} \quad (4.24)$$

Dans (4.24), la fonction histoire \mathcal{H} se substitue à $\tilde{\Psi}$ afin de prendre en compte l'histoire du chargement. Il est démontré dans [22] que le problème (4.22) peut être obtenu par une formulation thermodynamique.

4.2.3 Formulation variationnelle et discrétisation du problème de champs de phase

En utilisant (4.18), la forme variationnelle correspondant à (4.24)₁ est :

$$\int_{\Omega} \left(2\mathcal{H} + \frac{G_c}{l} \right) d \delta d d\Omega + \int_{\Omega} lG_c \nabla d \cdot \nabla (\delta d) d\Omega = 2 \int_{\Omega} \mathcal{H} \delta d d\Omega. \quad (4.25)$$

Dans la procédure incrémentale, le problème à résoudre au pas de chargement $n + 1$ est de trouver $d(\mathbf{x}) \in \mathcal{S}_d$ tel que :

$$\int_{\Omega} \left(2\mathcal{H}_n + \frac{G_c}{l} \right) d_{n+1} \delta d d\Omega + \int_{\Omega} lG_c \nabla d_{n+1} \cdot \nabla (\delta d) d\Omega = 2 \int_{\Omega} \mathcal{H}_n \delta d d\Omega \quad \forall \delta d(\mathbf{x}) \in H_0^1(\Omega). \quad (4.26)$$

Dans (4.26), \mathcal{H}_n est évalué au pas de chargement précédent en utilisant le champs de déplacement \mathbf{u}_n . La variable de champs de phase d et son gradient ∇d sont approximés dans un élément par :

$$d(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_d(\mathbf{x})\mathbf{d}_i, \quad \nabla d(\mathbf{x}) = \mathbf{B}_d(\mathbf{x})\mathbf{d}_i \quad (4.27)$$

où d_i sont les valeurs nodales de d_{n+1} . La même discrétisation pour la fonction test :

$$\delta d(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_d(\mathbf{x})\delta\mathbf{d}_i, \quad \nabla\delta d(\mathbf{x}) = \mathbf{B}_d(\mathbf{x})\delta\mathbf{d}_i \quad (4.28)$$

où $\mathbf{N}_d(\mathbf{x})$ et $\mathbf{B}_d(\mathbf{x})$ sont respectivement les vecteurs et matrice de fonctions de forme et de dérivées de fonctions de forme. La forme discrétisé du problème de champs de phase est :

$$\int_{\Omega} \left(2\mathcal{H}_n + \frac{G_c}{l} \right) \mathbf{N}_d^T \mathbf{N}_d d\Omega + \int_{\Omega} lG_c \mathbf{B}_d^T \mathbf{B}_d d\Omega = 2 \int_{\Omega} \mathbf{N}_d^T \mathcal{H}_n d\Omega. \quad (4.29)$$

Dans (4.29), \mathcal{H}_n est évalué aux points de Gauss en utilisant (4.23) :

$$\mathcal{H}_{n+1}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \Psi_{n+1}^+(\mathbf{x}) & \text{si } \Psi_{n+1}^+(\mathbf{x}) > \Psi_n^+(\mathbf{x}) \\ \Psi_n^+(\mathbf{x}) & \text{si } \Psi_{n+1}^+(\mathbf{x}) \leq \Psi_n^+(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (4.30)$$

4.2.4 Formulation variationnelle et discrétisation du problème mécanique

La minimisation de l'énergie totale par rapport au champ de déplacement conduit à

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\varepsilon}, d) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega = 0 \quad (4.31)$$

où

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\varepsilon}, d). \quad (4.32)$$

Le problème mécanique s'écrit :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 & \text{dans } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \mathbf{t} & \text{sur } \partial\Omega_N \\ \mathbf{u} = u_D & \text{sur } \partial\Omega_D \end{cases} \quad (4.33)$$

La forme variationnelle du problème mécanique est donnée par

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega + \int_{\partial\Omega_F} \overline{\mathbf{F}} \cdot \delta \mathbf{u} dS \quad \forall \mathbf{u} \in H_0^1(\Omega) \quad (4.34)$$

où \mathbf{f} et $\overline{\mathbf{F}}$ sont respectivement les forces de volumes et les forces extérieures. La contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ est définie par :

$$\boldsymbol{\sigma} = (g(d) + \kappa)\boldsymbol{\sigma}^+ + \boldsymbol{\sigma}^- \quad (4.35)$$

avec $\kappa \ll 1$ un paramètre pour éviter la singularité de la matrice de rigidité du système dans les zones complètement endommagées et

$$\boldsymbol{\sigma}^\pm = \lambda \langle \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_\pm \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}^\pm. \quad (4.36)$$

En utilisant les opérateurs \mathcal{R}^\pm et \mathbf{P}^\pm qui permettent de décomposer le tenseur de déformation en sa partie extensive et compressive (voir [22] par exemple), la loi de comportement correspondant à la définition de la contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ peut être exprimée comme :

$$\mathbb{C}_d = (g(d) + \kappa) (\lambda \mathcal{R}^+[\mathbf{1}][\mathbf{1}]^T + 2\mu \mathbf{P}^+) + (\lambda \mathcal{R}^-[\mathbf{1}][\mathbf{1}]^T + 2\mu \mathbf{P}^-). \quad (4.37)$$

En 2D, on utilise la notation de Voigt pour une représentation vectorielle des déformation et des contraintes : $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_{11} \ \varepsilon_{22} \ 2\varepsilon_{12}]$. On introduit les discrétisations spatiales suivantes :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_u(\mathbf{x})\mathbf{u}_i, \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \mathbf{B}_u(\mathbf{x})\mathbf{u}_i \quad (4.38)$$

et

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_u(\mathbf{x})\delta \mathbf{u}_i, \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) = \mathbf{B}_u(\mathbf{x})\delta \mathbf{u}_i \quad (4.39)$$

avec \mathbf{u}_i les déplacements nodaux au pas de chargement $n + 1$. Le problème en déplacement sous forme matricielle correspondant à la forme variationnelle (4.34) au pas de chargement $n + 1$ est :

$$\mathbf{K}_u(d_{n+1}, \mathbf{u}_n) \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} \quad (4.40)$$

avec

$$\mathbf{K}_u(d_{n+1}, \mathbf{u}_n) = \int_{\Omega} \mathbf{B}_u^T \mathbb{C}_d \mathbf{B}_u d\Omega, \quad (4.41)$$

et

$$\mathbf{F}_{n+1} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_u^T \mathbf{f} d\Omega + \int_{\partial\Omega_F} \mathbf{N}_u^T \bar{\mathbf{F}} dS. \quad (4.42)$$

La méthode de champs de phase décrite ici sera utilisée pour modéliser le comportement mécanique de la matrice du composite dans la suite de ce chapitre et dans le chapitre ???. Dans la section suivante, nous présentons une illustration de la méthode dans le cas d'un composite contenant des microcapsules de MCP à l'état solide.

4.3 Fissuration d'une microstructure hétérogène contenant des microcapsules de MCP solide

Dans cette section, on présente une illustration de la méthode de champs de phase appliquée à une microstructure hétérogène. L'objectif est de modéliser l'initiation et la propagation de fissures dans un milieu contenant des microcapsules de MCP.

4.3.1 Exemple en 2D

Pour illustrer le modèle de champs de phase, on considère la microstructure de la Fig. 4.3. Il s'agit d'un domaine rectangulaire de dimensions $3 \times 6 \text{ mm}^2$ contenant 7 microcapsules de MCP solide (de rayon $R = 0.2 \text{ mm}$) aléatoirement disposés.

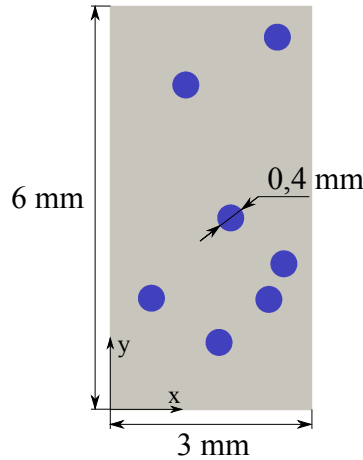


FIGURE 4.3: Géométrie et conditions aux limites pour l'illustration de la propagation de fissures dans une microstructure contenant des particules de MCP.

Le MCP est considéré comme un matériau élastique linéaire qui ne se fissure pas ($d = 0$ dans le MCP). Les propriétés élastiques des matériaux sont identiques à ceux du Tableau 2.2. Le paramètre de régularisation l est égal à 0.075 mm et $G_c = 1 \text{ N.m}^{-1}$. On impose à $y = 6 \text{ mm}$ un déplacement de $u_d = 10^{-5} \text{ m}$ dans la direction y . Ce chargement est appliquée en 200 incréments. Le maillage est composé de 208152 triangles linéaires.

4.3.2 Résultats numériques

La Fig. 4.4 montre les résultats obtenus : la variable de champs de phase d , le champ de déplacement suivant x et y .

On remarque que les fissures s'initient toujours aux voisinages des microcapsules de MCP. Ce résultat est cohérent avec les observations expérimentales selon laquelle les microcapsules constituent des zones de faiblesse du matériaux et favorisent l'endommagement du matériau. De plus, à cause de la répartition aléatoire des microcapsules de MCP, les fissures sont localisées dans les zones où il y a le plus de microcapsules. On a aussi une orientation horizontale des fissures à cause du chargement en traction suivant y . Le champ de déplacement montre clairement des discontinuités qui correspondent à la présence de fissures. Dans les microcapsules de MCP où $d = 0$, on n'y a pas de sauts de déplacement. Ces résultats prouvent les capacités de la méthode de champs de phase à prédire la fissuration dans ces genre de composites avec une gestion efficace de l'adoucissement du comportement mécanique. Une étude paramétrique

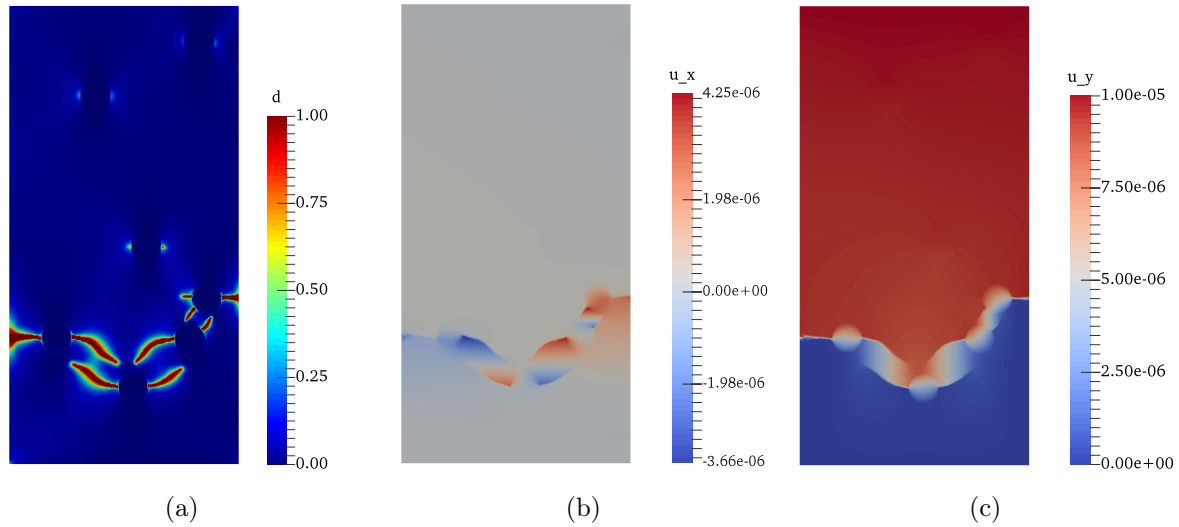


FIGURE 4.4: Solution du problème : (a) la variable de champs de phase d décrivant les trajets de fissures (1=matériaux fissuré et 0=matériau sain); (b) le champs de déplacement suivant x et (c) le champ de déplacement suivant y .

est effectuée dans la suite de ce chapitre pour déterminer l'influence de la fraction volumique de MCP sur le comportement endommageable du matériau.

4.4 Interaction fluide-structure

Dans cette section, nous présentons l'approche d'interaction fluide-structure utilisée pour modéliser le comportement mécanique du béton contenant des capsule de MCP à l'état liquide. Nous nous limitons au cas quasi-statique avec la prise en compte de la condition d'incompressibilité du fluide. Des tests numériques sont réalisés pour évaluer l'influence du MCP liquide sur le comportement mécanique effectif du composite lorsqu'on considère la matrice comme un matériau linéaire élastique.

4.4.1 Le mouvement du fluide

4.4.1.1 Equations de Navier-Stokes

Le mouvement du fluide est modélisé par les équations de Navier-Stokes. Dans le modèle d'interaction fluide-structure proposé, il s'agit du couplage Dirichlet-Neumann à l'interface : le déplacement du solide à l'interface est traduit en vitesse au domaine fluide comme conditions aux limites, ensuite la réaction du fluide (générée par la pression et la vitesse) est appliquée au solide. Dans cette partie, nous présentons les équations qui régissent le mouvement du

MCP liquide en conditions statiques. Les équations de Navier-Stokes incompressible en régime stationnaire dans un domaine Ω^f s'écrivent :

$$\begin{cases} -\nu\Delta\mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} + \nabla p = \mathbf{b} & \text{dans } \Omega^f \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 & \text{dans } \Omega^f \\ \mathbf{v} = \mathbf{v}_D & \text{sur } \Gamma_D \\ -p\mathbf{n} + \nu(\mathbf{n} \cdot \nabla)\mathbf{v} = \mathbf{t} & \text{sur } \Gamma_N \end{cases} \quad (4.43)$$

Dans l'équation (4.43), \mathbf{v} est le champ de vitesse, \mathbf{b} est une force volumique, \mathbf{n} est la normale unitaire sortante à l'interface Γ_D , ν est la viscosité cinématique supposée constante dans Ω^f et p désigne le quotient de la pression du fluide p^f par la densité du fluide ρ^f :

$$p = \frac{p^f}{\rho^f}. \quad (4.44)$$

En 2D, le domaine Ω^f est discrétisé avec des triangles P2-P1 (voir Fig. 4.5). Le maillage éléments finis est composé de triangles à 6 nœuds. La vitesse \mathbf{v} est interpolée avec des polynômes de degré 2 en utilisant les valeurs aux 6 nœuds de chaque élément. La pression p est représentée par les valeurs aux 3 sommets de chaque élément et est interpolée en utilisant des fonctions de formes linéaires. Pour le post-traitement, une interpolation linéaire permet d'affecter la pression à tous les nœuds du domaine.

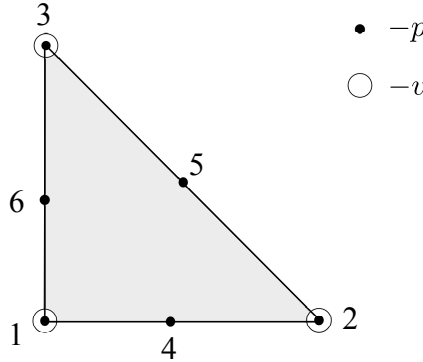


FIGURE 4.5: Éléments triangulaire P2 avec les numéros des nœuds.

Cet élément permet d'obtenir des solutions continues de la vitesse et de la pression et satisfait la condition *inf-sup* [180, 181, 182]. La forme variationnelle du problème (4.43) est :

Etant donné \mathbf{b} , \mathbf{t} et \mathbf{v}_D , trouver $\mathbf{v}(\mathbf{x}) \in \mathcal{S}_v$ et $p(\mathbf{x}) \in \mathcal{Q}_p$ tels que pour tout $(\mathbf{w}, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q}$:

$$\begin{cases} a(\mathbf{w}, \mathbf{v}) + c(\mathbf{v}; \mathbf{w}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{w}, p) = (\mathbf{w}, \mathbf{b}) + (\mathbf{w}, \mathbf{t})_{\partial\Omega_N} \\ b(\mathbf{v}, q) = 0 \end{cases} \quad (4.45)$$

Où \mathcal{V} et \mathcal{Q} sont respectivement les espaces de fonctions test pour l'équation du moment et l'équation de l'incompressibilité. Dans la formulation variationnelle (4.45),

$$a(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \nu \int_{\Omega^f} \nabla \mathbf{w} : \nabla \mathbf{v} d\Omega, \quad (4.46)$$

$$b(\mathbf{w}, p) = - \int_{\Omega^f} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (4.47)$$

et

$$c(\mathbf{v}; \mathbf{w}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega^f} \mathbf{w} \cdot (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} d\Omega, \quad (4.48)$$

où \mathbf{w} est une fonction test. Le terme convectif $c(\mathbf{v}; \mathbf{w}, \mathbf{v})$ est non linéaire. Pour le linéariser, les techniques classiques sont les itérations de Picard (voir [183] par exemple) ou la méthode de Newton. Ici, nous adoptons la méthode de Newton :

$$\mathbf{v}^{k+1} \cdot \nabla \mathbf{v}^{k+1} \simeq \mathbf{v}^{k+1} \cdot \nabla \mathbf{v}^k + \mathbf{v}^k \cdot \nabla \mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{v}^k \cdot \nabla \mathbf{v}^k \quad (4.49)$$

où $k + 1$ désigne la nouvelle itération et k l'itération précédente. On commence la procédure itérative par une prédiction initiale obtenue par la résolution du problème de Stokes (c'est-à-dire le problème (4.45) sans le terme convectif). En introduisant la linéarisation (4.49) dans la forme variationnelle (4.45), on obtient le système de la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{V} \\ \mathbf{P} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}, \quad (4.50)$$

où \mathbf{G} et \mathbf{f} correspondent respectivement à l'assemblage de (4.47) et à la contribution de la force volumique \mathbf{b} . Les valeurs nodales de la vitesse et de la pression sont regroupées dans les vecteurs \mathbf{V} et \mathbf{P} , respectivement. La matrice \mathbf{A} correspond à l'assemblage du terme de diffusion (4.46) et de la forme linéarisée du terme convectif. Le système (4.50) correspond à un problème de point-selle (*saddle-point*) en raison de la présence d'une grande matrice nulle (*zero-block*) dans la diagonale. Même en absence du terme convectif, la matrice globale n'est pas définie positive. Cette matrice nulle est due au fait que la pression p n'est pas présente dans l'équation de continuité. En général, les solveurs itératives standards peinent à résoudre le système (4.50) (soit une convergence très lente, soit ils ne convergent pas du tout selon le régime d'écoulement). Pour éviter le *zero-block*, nous adoptons la méthode de pénalité qui consiste à perturber l'équation de continuité avec le champ de pression :

$$\varepsilon p + \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (4.51)$$

où ε est un petit paramètre choisi généralement entre 10^{-5} et 10^{-9} . La solution perturbée est une approximation de la solution exacte lorsque le paramètre ε est suffisamment petite [184]. Le *zero-block* est alors évité en utilisant à sa place la matrice masse \mathbf{M} de la pression multiplié par ε . Pour plus de détails sur les formulations variationnelles des équations de Navier-Stokes incompressibles, voir par exemple [182]. Nous proposons dans la suite quelques tests en 2D largement utilisés dans la bibliographie.

4.4.1.2 Ecoulement autour d'un cylindre

Les simulations présentées dans ce manuscrit ont été réalisées dans un code développé spécifiquement au cours de la thèse. Afin de le valider, nous présentons par la suite quelques exemples dont les solutions peuvent être trouvées dans la littérature. Dans ce premier exemple, nous reprenons le cas test de la Fig. 4.6. La viscosité du fluide est de $\nu=10^{-3}$ m²/s. A $x = 0$, on impose une vitesse horizontale donnée par :

$$f(y) = 0.3 \times 4y(H - y)/H^2. \quad (4.52)$$

où H est la hauteur du domaine (voir Fig. 4.6).

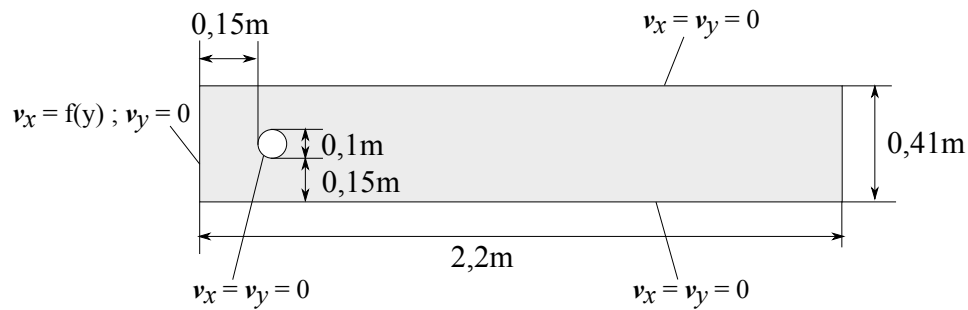


FIGURE 4.6: Cas test 1 : Ecoulement autour d'un cylindre en 2D : géométrie et conditions aux limites.

Le domaine est discrétisé avec 41101 triangles à 6 nœuds (correspondant à 163008 degrés de liberté pour la vitesse et 20998 pour la pression). Les Figs. 4.9-4.8 montrent respectivement la composante x de la vitesse, la composante y de la vitesse et le champ de pression.

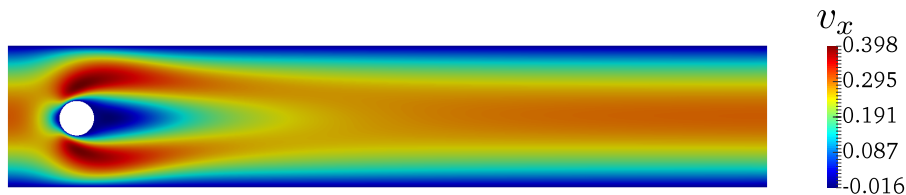


FIGURE 4.7: Composante x de la vitesse.

Ces résultats correspondent bien aux valeurs de référence [185]. Le cylindre agit comme un obstacle en provoquant une accélération du fluide dans l'espace qui le sépare des bords latéraux du domaine. Les solutions obtenues ne montrent aucune oscillation, ce qui justifie la stabilité de l'outil développé.

FIGURE 4.8: Composante y de la vitesse.

FIGURE 4.9: Champ de pression.

4.4.1.3 Écoulement dans une cavité

Dans ce deuxième exemple, on considère un domaine carré de $1 \times 1 \text{ m}^2$. La vitesse est nulle aux bords sauf sur le bord supérieur où est imposé $\mathbf{v}_D^{top} = (1, 0)^T \text{ m/s}$ (voir Fig. 4.10). La viscosité du fluide est $\nu = 1 \text{ m}^2/\text{s}$. Le maillage est composé de 10806 triangles P2.

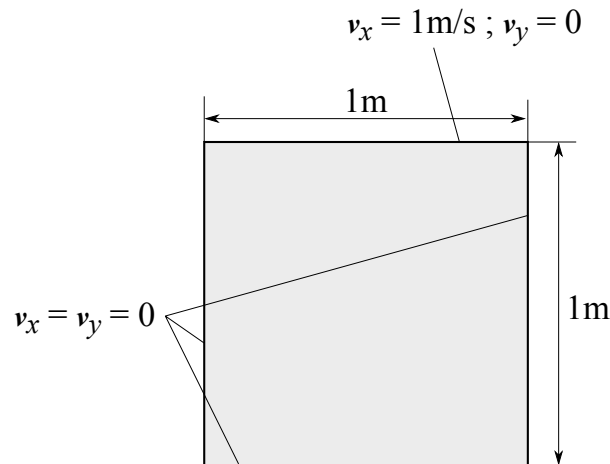


FIGURE 4.10: Écoulement dans une cavité : géométrie et conditions aux limites.

La Fig. 4.11 montre les résultats de la simulation : le champ de vitesse et les isovaleurs de la norme de la vitesse. Les résultats correspondent bien aux valeurs de référence disponibles dans [182] par exemple.

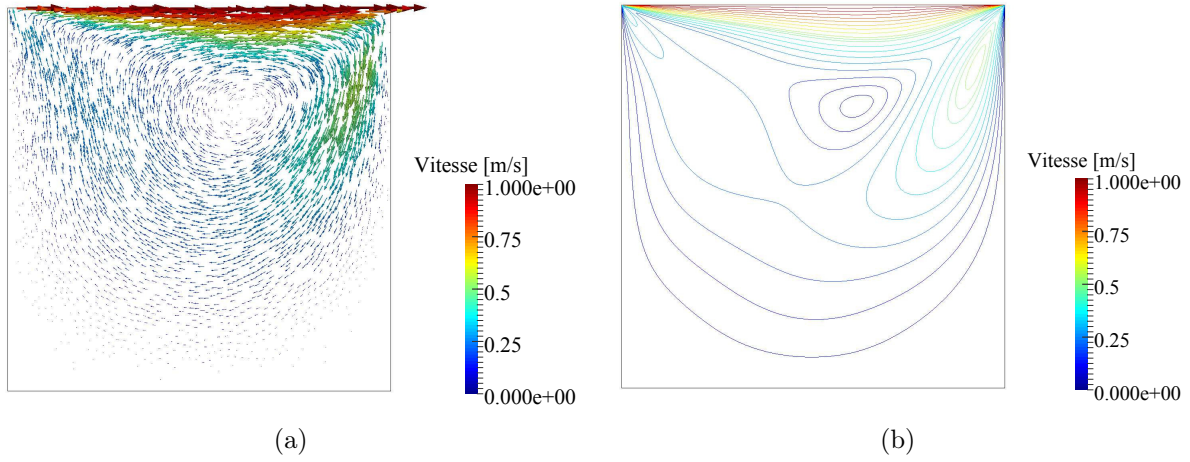


FIGURE 4.11: Solution du problème d'écoulement dans une cavité : (a) le champ de vitesse ; (b) les isovalues de la norme de la vitesse.

4.4.2 Le couplage avec la structure et procédure de résolution

Pour le couplage fluide-structure, nous adoptons une approche séquentielle (partitioned fluid-structure interaction [186, 187]) : à chaque pas de chargement, on résout le problème du solide et du fluide séparément dans une boucle itérative. Le critère de convergence à l'itération n est basé sur la stabilité du déplacement à l'interface Γ^f :

$$R_{fsi} = \|u^n - u^{n-1}\|_{\Gamma^f} < \varepsilon \quad (4.53)$$

Le couplage de type Dirichlet-Neumann se fait à l'interface Γ^f : la vitesse de l'interface est appliquée comme conditions aux limites pour le mouvement du fluide par la relation (4.54), et la réaction du fluide est appliquée sur Γ^f pour le problème du solide en utilisant (4.55).

$$\frac{\Delta \mathbf{u}^s}{\Delta t} = \mathbf{v}_D \text{ sur } \Gamma^f, \quad (4.54)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^s \cdot \mathbf{n}^s = \boldsymbol{\sigma}^f \cdot \mathbf{n}^f \text{ sur } \Gamma^f \quad (4.55)$$

avec

$$\boldsymbol{\sigma}^f = -p^f \mathbf{1} + \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \quad (4.56)$$

Les équations (4.54) et (4.55) expriment respectivement la continuité du champ de vitesse et la continuité du champ de contrainte dans le domaine. Dans la suite de cette section, nous étudions l'influence de la réaction du fluide sur un matériau solide en élasticité linéaire, ce qui permet de considérer que la matrice de rigidité du problème solide ne change pas lors des incréments de chargement.

Dans les approches FSI classiques, on résout en plus de tout ce qui précède, un problème lié au mouvement de l'interface fluide-structure. Les nœuds du maillages sont déplacés de façon à utiliser la même position de l'interface dans le problème du solide et dans le problème du fluide. Pour cela obtenir le déplacement du maillage \mathbf{u}^m , le déplacement de l'interface est utilisé comme conditions aux limites pour résoudre un problème de type [188]

$$\mathbf{K}_{II}\mathbf{u}_I^m = -\mathbf{K}_{I\Gamma}\mathbf{u}_I^m. \quad (4.57)$$

Dans le problème lié au maillage, l'ensemble des nœuds du domaine est réparti en deux groupes : les nœuds à l'interface fluide-structure Γ^f où est imposée le déplacement du solide (désigné avec l'indice Γ) et tous les nœuds du domaine (désignés avec l'indice I). Ainsi, le problème fluide est résolu dans la nouvelle configuration du domaine occupée par le fluide. Cependant, le déplacement de la structure n'est pas actualisé par le mouvement du maillage : seules les positions des nœuds à l'interfaces coïncident. Dans notre travail, on admet l'hypothèse des petites perturbations, ce qui nous permet de se passer du problème du maillage. La procédure de résolution est présentée dans l'algorithme 2.

Algorithme 2 : Interaction fluide-structure dans le cas d'un solide en élasticité linéaire.

- 1: Evaluer la matrice de rigidité du problème mécanique
 - 2: **Pour** chaque pas de chargement k au temps t^k :
 - 3: Estimer une première position de l'interface en résolvant le problème en déplacement avec l'incrément de chargement imposé
 - 4: **Pour** chaque itération n :
 - 5: Calculer la vitesse de l'interface en utilisant (4.54)
 - 6: Résoudre l'équation de Navier-Stokes dans le domaine Ω^f
 - 7: Evaluer les réactions F^f du fluide à l'interface avec (4.55)
 - 8: Résoudre le problème de structure avec F^f comme conditions aux limites sur Γ^f
 - 9: **Si** Convergence : $R_{fsi} < \varepsilon$ **Alors**
 - 10: Nouveau pas de chargement : $k \leftarrow k + 1$
 - 11: **Sinon**
 - 12: Nouvelle itération : $n \leftarrow n + 1$
 - 13: **Fin Si**
 - 14: **Fin Pour**
 - 15: **Fin Pour**
-

4.4.3 Effets de l'incompressibilité du fluide sur un matériau élastique

Dans cette étude, on considère un composite contenant des microcapsules de MCP se trouvant à l'état liquide. L'objectif de cette étude est d'évaluer l'influence de la réaction du liquide sur la structure. Pour cela, le fluide sera modélisé avec les équations de Navier-Stokes en utilisant des propriétés matériaux du MCP à l'état liquide : la densité est de 934 kg.m^3 et la

viscosité dynamique est $\eta = 3,42 \times 10^{-3}$ Pa.s. Pour le solide, nous considérons un matériau homogène élastique isotrope avec un coefficient de Poisson de 0.2 et un module de Young qui sera varié jusqu'à la limite de stabilité du modèle présenté dans la section 4.4.2 de ce chapitre. Pour cela, on considère un VER en 2D de $1 \times 1 \text{ mm}^2$ contenant une inclusion remplie de MCP liquide. Le rayon R de l'inclusion est varié de façon à obtenir des résultats pour les fractions volumiques de 3%, 7%, 12% et 19%. Pour chaque fraction volumique, on fait varier également le rapport entre le module de Young de la matrice E_m et celui du MCP solide afin de déterminer à partir de quand on peut considérer que l'incompressibilité du fluide n'a pas d'effets sur le comportement effectif de la microstructure. La Fig. 4.12 montre le champs de contrainte dans la microstructure soumise à une déformation macroscopique de $\bar{\varepsilon} = 10^{-2} \times [0 \ 2 \ 0]^T$ en considérant les conditions aux limites périodiques pour $E_m/E_{MCP} = 10^6$ et le rayon du MCP est $R = 1.5 \times 10^{-4}$ m.

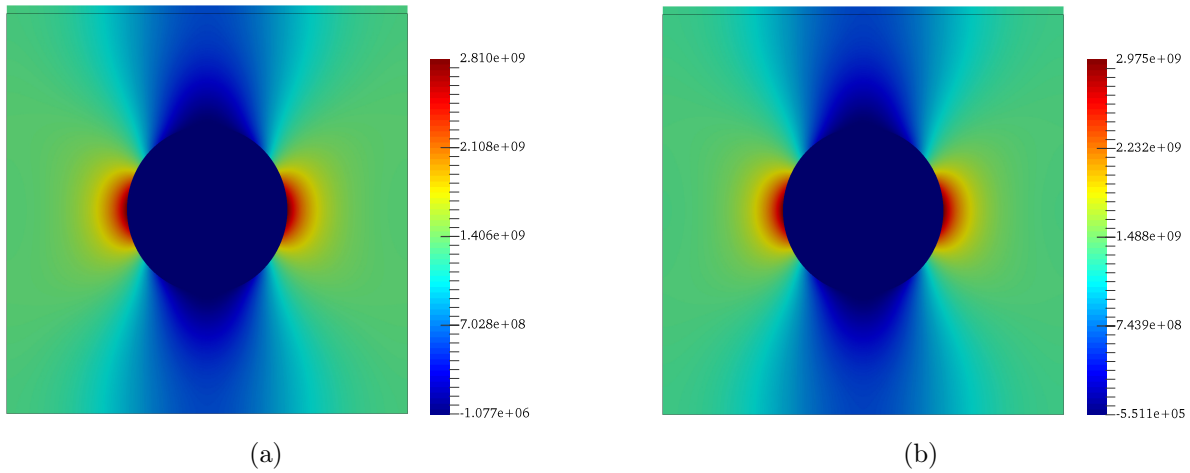


FIGURE 4.12: Résultats en traction dans le cas d'une matrice plus rigide que le MCP solide : champ de contrainte σ_{22} pour une inclusion (a) contenant du MCP à l'état solide et (b) contenant du MCP à l'état liquide.

Le comportement mécanique effectif est calculé : (a) en considérant le MCP à l'état solide, et (b) en considérant le MCP à l'état liquide. Dans le deuxième cas, le modèle d'interaction fluide-structure est utilisé pour prendre en compte le comportement réel du fluide incompressible. Pour une matrice largement plus rigide que le MCP solide (dont le module de Young est fixé à 60 MPa), les résultats sont identiques (Fig. 4.12). Par contre, pour le même chargement en considérant un rapport $E_m/E_{MCP} = 10^{-2}$ (c'est-à-dire que la matrice est moins rigide que le MCP solide), les résultats diffèrent (voir Fig. 4.13).

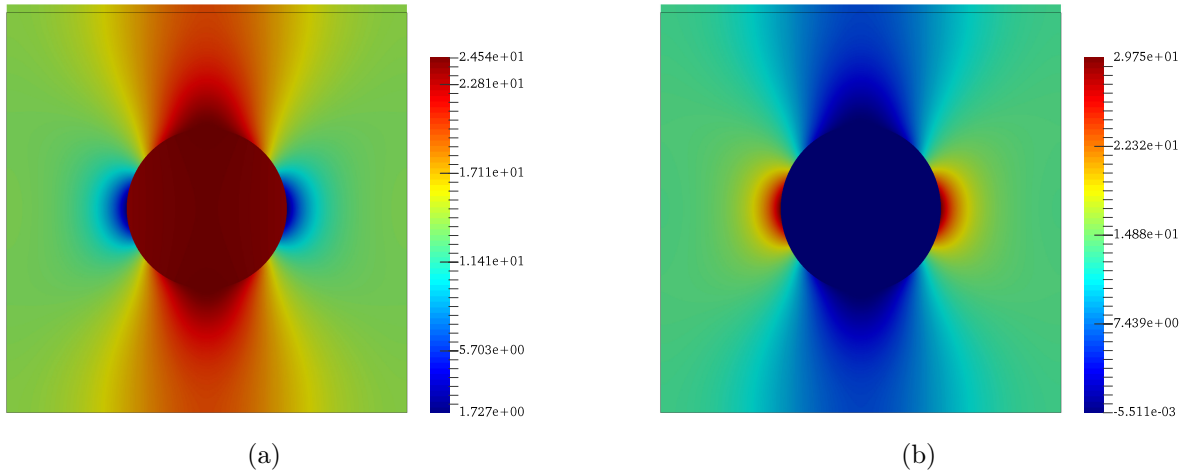


FIGURE 4.13: Résultats en traction dans le cas d'une matrice plus rigide que le MCP solide : champ de contrainte σ_{22} pour une inclusion (a) vide, (b) contenant du MCP à l'état solide et (c) contenant du MCP à l'état liquide.

Les Figs. 4.14 et 4.15 montrent le même constat en cisaillement. Ces résultats prouvent que le comportement mécanique des bétons contenant du MCP peut être supposé constant et identique à celui obtenu en considérant le MCP solide pour un rapport E_m/E_{MCP} élevé.

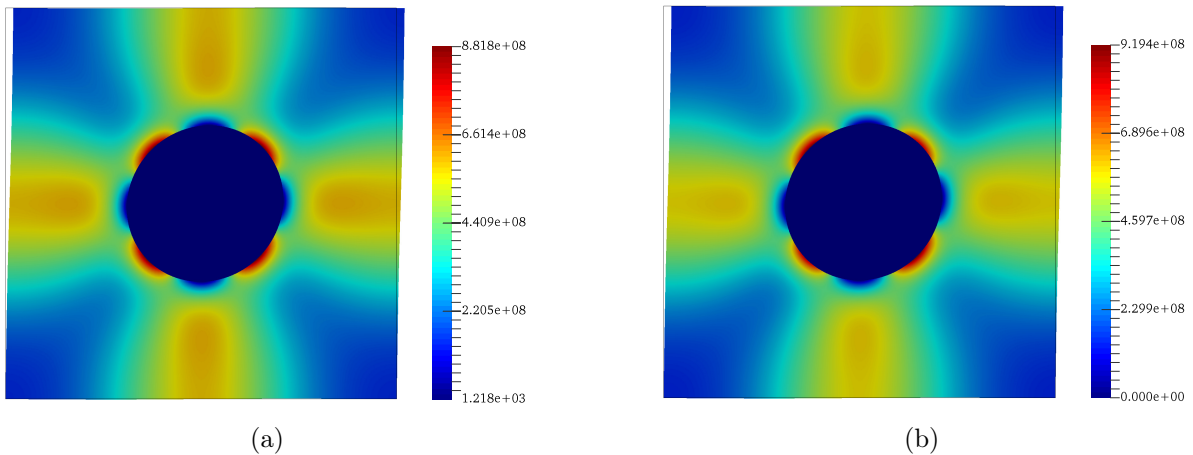


FIGURE 4.14: Résultats en cisaillement dans le cas d'une matrice plus rigide que le MCP solide : champ de contrainte σ_{12} pour une inclusion (a) contenant du MCP à l'état solide et (b) contenant du MCP à l'état liquide.

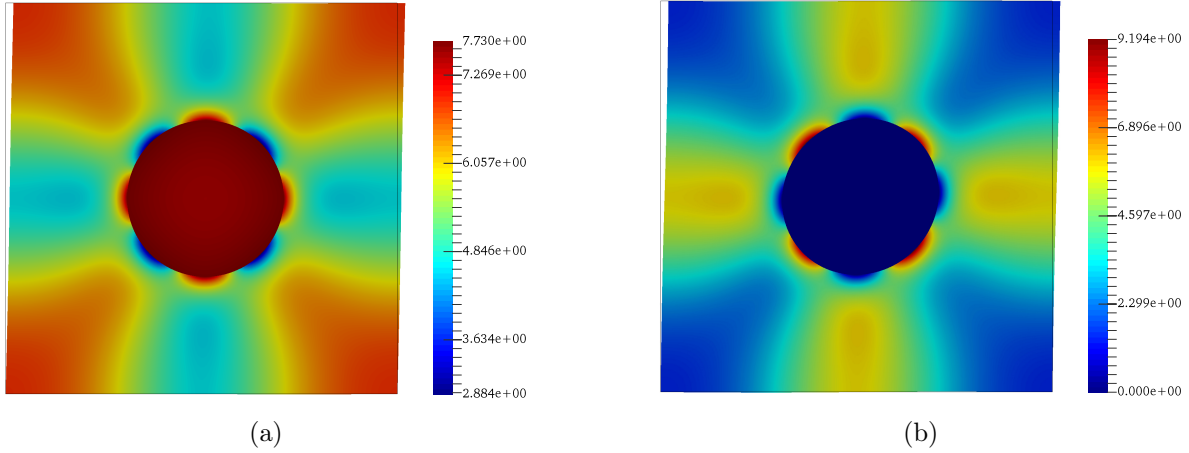


FIGURE 4.15: Résultats en cisaillement dans le cas d'une matrice moins rigide que le MCP solide : champ de contrainte σ_{12} pour une inclusion (a) contenant du MCP à l'état solide et (b) contenant du MCP à l'état liquide.

Pour évaluer l'influence des combinaisons de paramètres (matrice et MCP solide), le comportement effectif de la microstructure est calculé pour chaque phase du MCP pour plusieurs fractions volumiques. On évalue ensuite l'erreur relative entre les deux par :

$$Er = \frac{\bar{\mathcal{C}}^S - \bar{\mathcal{C}}^\ell}{\bar{\mathcal{C}}^\ell} \quad (4.58)$$

où $\bar{\mathcal{C}}^S$ et $\bar{\mathcal{C}}^\ell$ sont respectivement les tenseurs d'élasticité effectifs obtenus pour la phase solide et liquide du MCP. Comme exemple, les Figs. 4.16 et 4.17 montrent les résultats sur les composantes $\bar{\mathcal{C}}_{2222}$ et $\bar{\mathcal{C}}_{1212}$.

Les résultats montrent que pour toutes les fractions volumiques considérées, la réponse mécanique effective du matériau peut être supposé constant lors des changements de phase dès que le rapport E_m/E_{MCP} dépasse 100. En dessous de cette valeur, l'erreur les écarts entre la réponse effective du composite contenant du MCP à la phase liquide et à la phase solide devient important et dépend de la fraction volumique. Ces résultats justifient l'hypothèse faite dans la Section 2.3.2 du Chapitre 2 : le comportement élastique effectif du composite peut être supposé constant malgré les changements de phase dans les microcapsules pour des matrices rigides. Ceci permet de simplifier le comportement mécanique du composite pour les matrices cimentaire dont le rapport E_m/E_{MCP} est généralement supérieur élevé et de considérer les hypothèses suivantes dans ce cas :

- on peut se passer du modèle d'interaction fluide-structure, ce qui permet de réduire les coûts de calculs ;
- on peut considérer un découplage entre le changement de phase thermique et la réponse mécanique effective du matériaux.

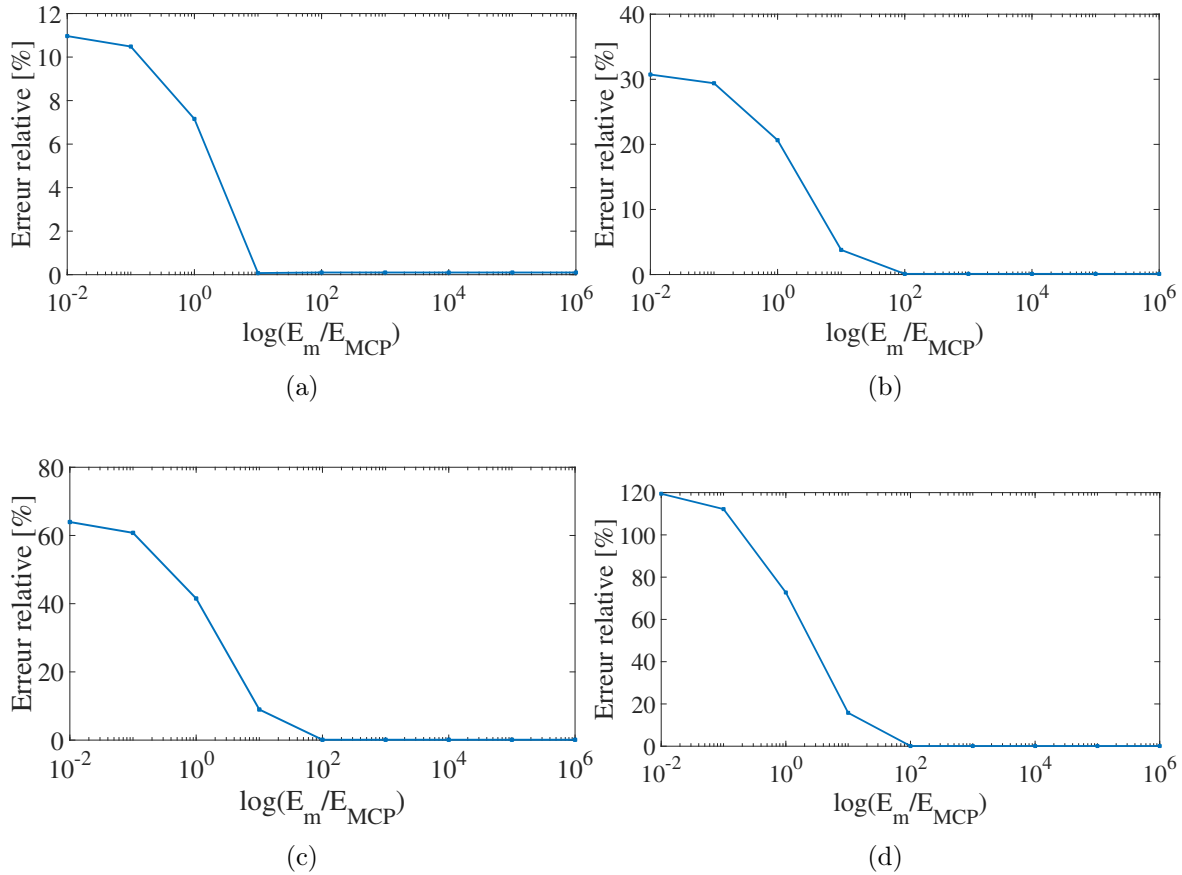


FIGURE 4.16: Erreur relative sur \bar{C}_{2222} avec le MCP à la phase solide et à la phase liquide pour différentes fractions volumiques : (a) 3%, (b) 7%, (c) 12% et (d) 19%.

Finalement, l'endommagement des composites contenant des microcapsules de MCP comporte deux aspects. Premièrement, le MCP possède une rigidité très faible par rapport aux matériaux cimentaires, et les microcapsules constituent des zones de faiblesse qui favorisent l'initiation des fissures. Deuxièmement, les fissures qui rencontrent les microcapsules de MCP peuvent occasionner les fuites de MCP lorsque ce dernier se trouve en phase liquide. La modélisation de l'écoulement variablement saturé dans la matrice fissurée sera abordé dans le chapitre suivant.

4.5 Effets de l'affaiblissement par les microcapsules de MCP

Les microcapsules de MCP ont des rigidités négligeables par rapport au béton. Dans ces nouveaux matériaux de construction contenant ces microcapsules, la fraction volumique de MCP doit être limitée afin de permettre leur utilisation pour des constructions durables. Pour

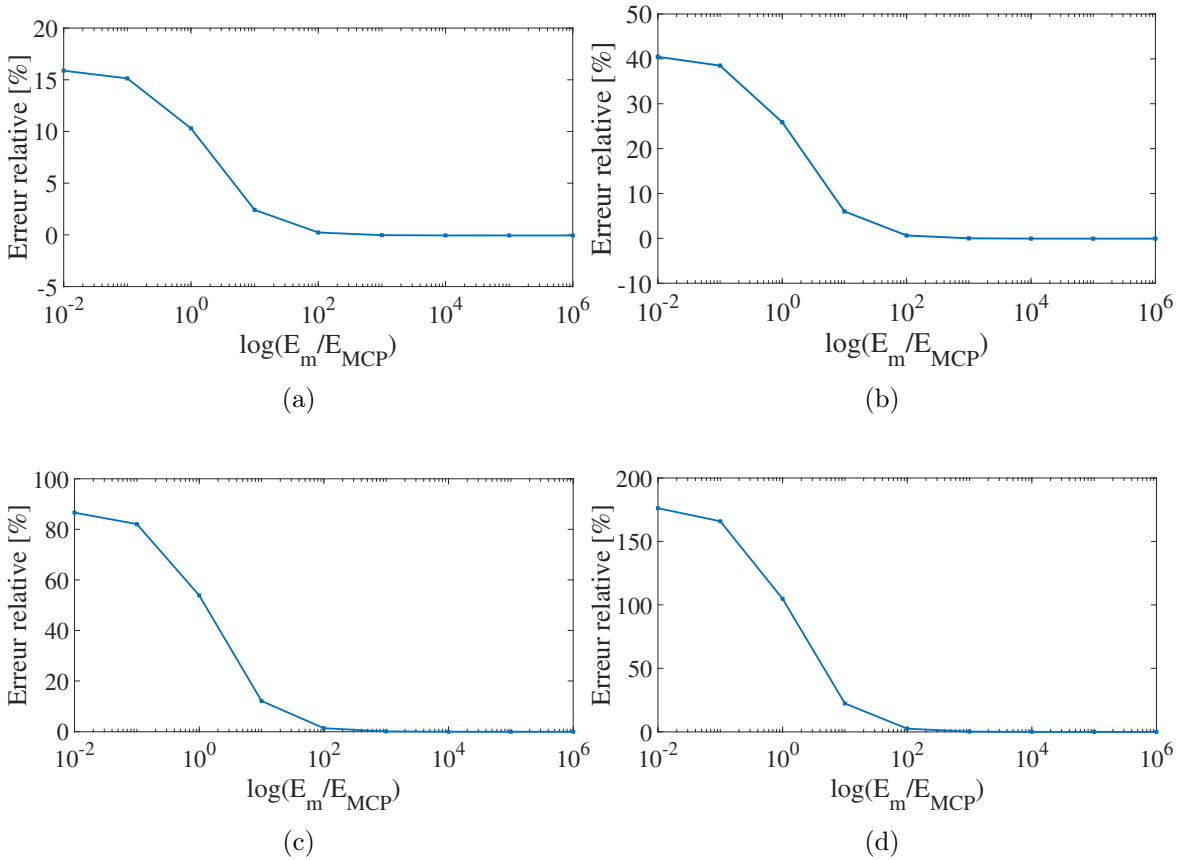


FIGURE 4.17: Erreur relative sur $\overline{\mathbb{C}}_{1212}$ avec le MCP à la phase solide et à la phase liquide pour différentes fractions volumiques : (a) 3%, (b) 7%, (c) 12% et (d) 19%.

les mêmes raisons, ces matériaux présentent des zones de faiblesse d'où s'initieront les fissures. Il est nécessaire de modéliser l'effet de la présence de microcapsules de MCP dans ces matériaux et d'étudier leurs influences sur la réponse mécanique endommageable du composite.

Dans cette section, on montre les effets des microcapsules de MCP sur les propriétés élastiques effectives et le comportement endommageable du VER. Les propriétés élastiques de chaque phase du composite sont identiques à celles du Tableau 2.2.

4.5.1 Evolution des propriétés élastiques en fonction de la fraction volumique de MCP

L'objectif est d'obtenir le tenseur d'élasticité effectif du VER de la Fig. 3.7 en fonction de la fraction volumique de MCP par homogénéisation numérique. Pour cela, on reprend le problème exposé au 2.3.1 en 3D avec les conditions aux limites périodiques. On suppose que le MCP est à l'état solide car nous avons déjà prouvé que le comportement mécanique effectif ne varie pas

significativement lors des changements de phase. En adoptant la notation de Voigt en 3D, le tenseur d'élasticité effectif $\bar{\mathbb{C}}$ du milieu homogène équivalent au VER considéré permet de relier le tenseur de déformation macroscopique $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et le tenseur des contraintes macroscopiques $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ sous la forme matricielle par :

$$\begin{Bmatrix} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \\ \bar{\sigma}_{33} \\ \bar{\sigma}_{23} \\ \bar{\sigma}_{13} \\ \bar{\sigma}_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbb{C}}_{1111} & \bar{\mathbb{C}}_{1122} & \bar{\mathbb{C}}_{1133} & \bar{\mathbb{C}}_{1123} & \bar{\mathbb{C}}_{1113} & \bar{\mathbb{C}}_{1112} \\ & \bar{\mathbb{C}}_{2222} & \bar{\mathbb{C}}_{2233} & \bar{\mathbb{C}}_{2223} & \bar{\mathbb{C}}_{2213} & \bar{\mathbb{C}}_{2212} \\ & & \bar{\mathbb{C}}_{3333} & \bar{\mathbb{C}}_{3323} & \bar{\mathbb{C}}_{3313} & \bar{\mathbb{C}}_{3312} \\ & & & \bar{\mathbb{C}}_{3323} & \bar{\mathbb{C}}_{3313} & \bar{\mathbb{C}}_{3312} \\ & & & & \bar{\mathbb{C}}_{3313} & \bar{\mathbb{C}}_{3312} \\ & & & & & \bar{\mathbb{C}}_{3312} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} \\ \bar{\varepsilon}_{22} \\ \bar{\varepsilon}_{33} \\ 2\bar{\varepsilon}_{23} \\ 2\bar{\varepsilon}_{13} \\ 2\bar{\varepsilon}_{12} \end{Bmatrix}. \quad (4.59)$$

La Fig. 4.18 montre par exemple l'évolution de $\bar{\mathbb{C}}_{1111}$ en fonction de la fraction volumique de MCP. Ce résultat permet d'estimer à quel point la résistance mécanique du composite est dégradée en fonction de la quantité de microcapsules de MCP introduite : pour une fraction volumique de 20%, on a une chute de 50% des composantes du tenseur d'élasticité effectif. Pour obtenir un composite utilisable pour des constructions durables, il faut limiter la fraction volumique de MCP en tenant compte de cette tendance : on a une chute de 30% dès 10% en volume de MCP.

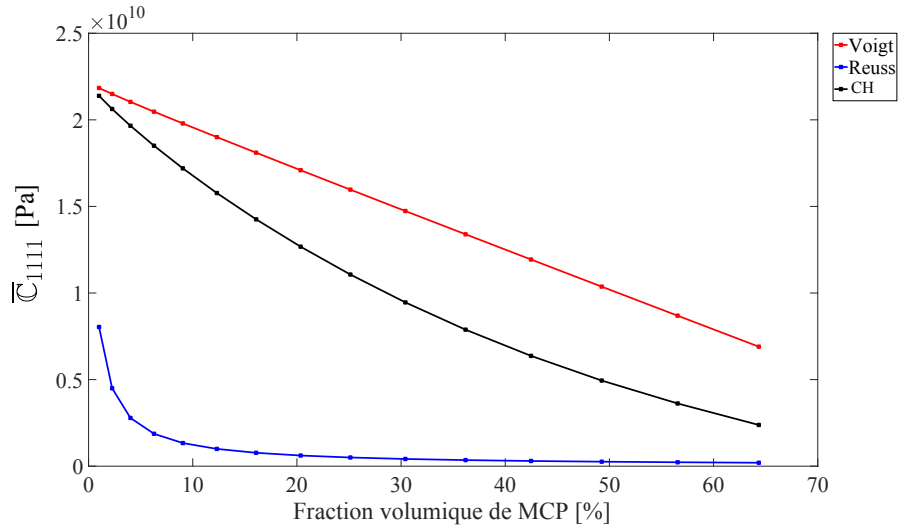


FIGURE 4.18: Evolution de $\bar{\mathbb{C}}_{1111}$ en fonction de la fraction volumique de MCP.

4.5.2 Taille du VER et distribution aléatoire des microcapsules de MCP

Pour étudier l'effet de la taille du VER sur le comportement mécanique effectif du composite, on étudie ici la convergence des composantes du tenseur d'élasticité effectif en fonction de la

taille du VER. Pour chaque taille du domaine cubique représentant le VER, on génère de manière aléatoire 30 microstructures périodiques contenant la même fraction volumique de MCP (15% en volume). La Fig. 4.19 montre des exemples de microstructures aléatoires périodiques pour des fractions volumiques différentes.

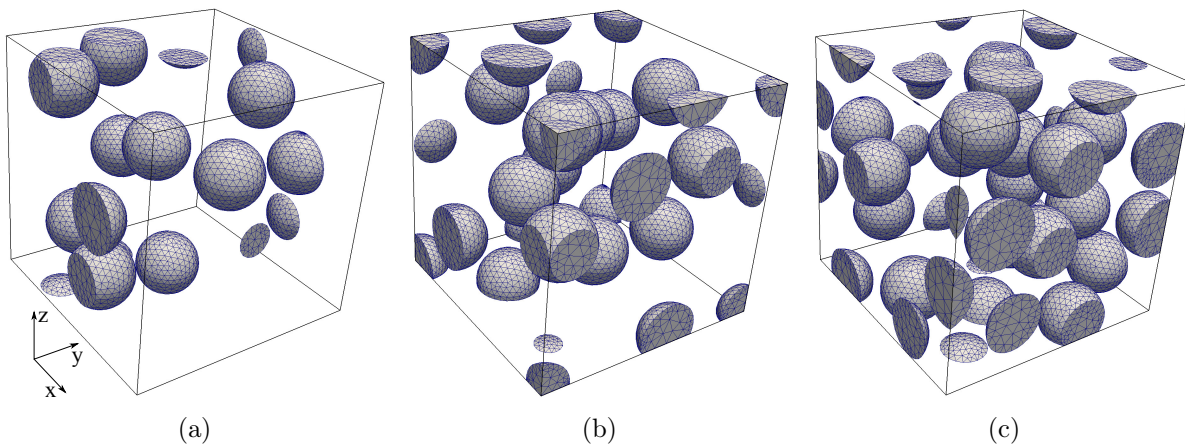


FIGURE 4.19: Exemples de VER avec des distributions aléatoires périodiques de microcapsules de MCP pour différente fraction volumique de MCP ; seul le maillage des microcapsules est affiché : (a) 10%, (b) 15% et (c) 20%.

Pour chaque réalisation, le tenseur d'élasticité effectif est déterminé par homogénéisation numérique classique en utilisant des conditions aux limites périodiques (voir par exemple [189]). La taille des VER va de 0,75 mm à 1,5 mm avec le rayon des microcapsules fixé à 20 μm . Par le principe de superposition, on a appliqué chaque fois des déformations macroscopiques de 1%. La Fig. 4.20 montre les solutions obtenues par la méthode des Eléments Finis sur un VER donné, en appliquant les 6 chargements macroscopiques.

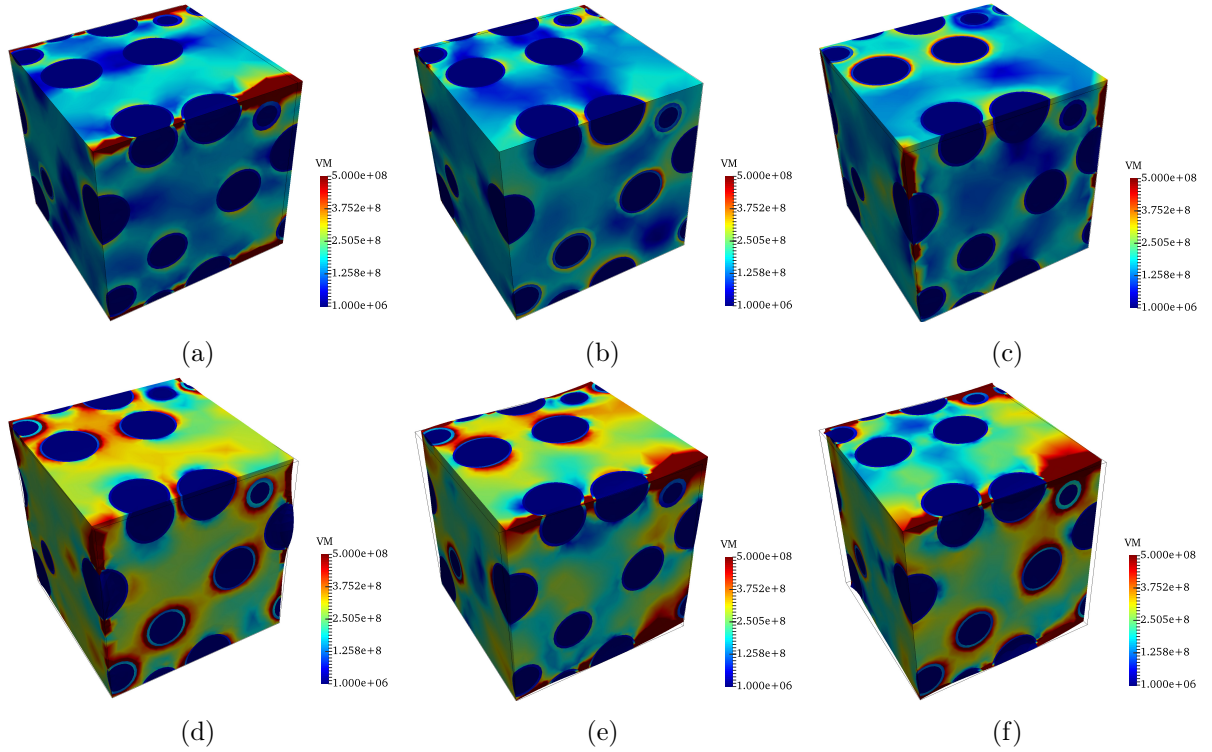


FIGURE 4.20: Solutions par Eléments Finis (containtes de von Mises) pour les six chargements macroscopiques correspondants aux six composantes de $\bar{\varepsilon}$ imposés indépendamment. Le VER contient 15% de MCP et a une taille de $L = 1,5$ mm. (a) $\bar{\varepsilon}_{11} = 1\%$; (b) $\bar{\varepsilon}_{22} = 1\%$; (c) $\bar{\varepsilon}_{33} = 1\%$; (d) $2\bar{\varepsilon}_{23} = 1\%$; (e) $2\bar{\varepsilon}_{13} = 1\%$; (f) $2\bar{\varepsilon}_{12} = 1\%$.

La Fig. 4.21 montre les composantes \bar{C}_{1111} , \bar{C}_{2222} , \bar{C}_{3333} , \bar{C}_{2323} , \bar{C}_{1313} et \bar{C}_{1212} en fonction de la taille L du VER. Les résultats montrent que les composantes de \bar{C} convergent pour de grandes tailles de VER. Les écarts-types diminuent en fonction de de la taille du VER, et pour $L > 1$ mm, on peut supposer que les variations des composantes du tenseur d'élasticité effectif sont négligeables.

4.6 Effets des microcapsules de MCP sur la fissuration

Dans la section précédente, les résultats d'homogénéisation ont confirmé la baisse des modules élastiques effectifs du matériaux avec la fraction volumique de MCP. Dans cette section, l'objectif est de rechercher la force maximale atteinte par le composite avant la rupture. Contrairement à l'homogénéisation classique, la recherche du VER pour la prédiction du comportement endommageable des matériaux hétérogène est un sujet complexe. Dans notre travail, nous proposons une méthodologie basée sur la réponse moyenne d'un nombre choisi de microstructures contenant des microcapsules de MCP réparties aléatoirement.

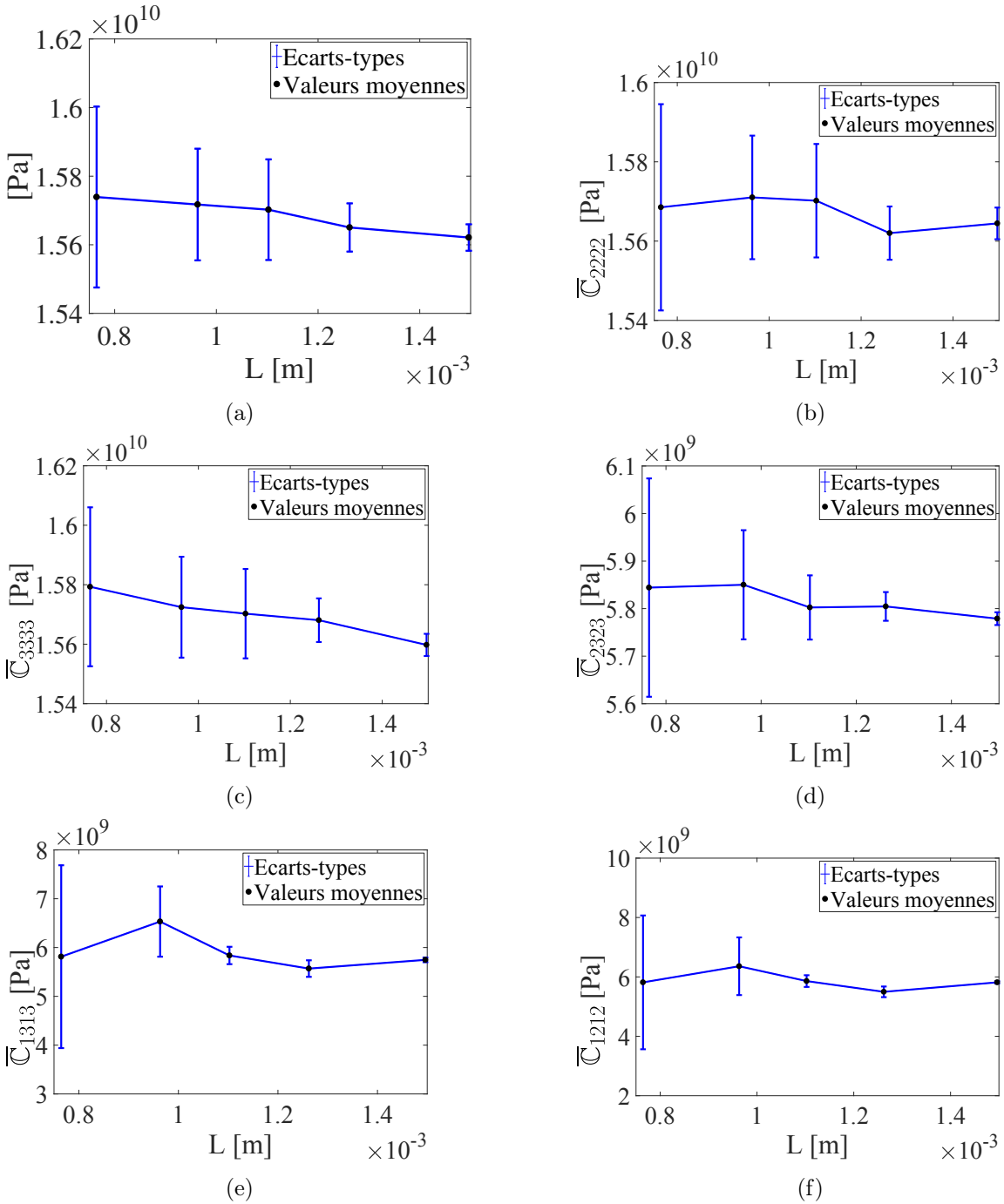


FIGURE 4.21: Evolution des composantes de $\bar{\mathbb{C}}$ en fonction de la taille du VER.

4.6.1 Fissuration de microstructures aléatoires

L'incorporation des microcapsules de MCP fait baisser significativement les modules élastiques effectifs du composite. Le but de cette étude est de montrer l'impact du MCP sur l'initiation et la propagation des fissures pour différentes fractions volumiques. Étant donné que le MCP n'a quasiment pas de rigidité par rapport au mortier de ciment, la présence de microcapsules favorise l'initiation des fissures. Pour prendre en compte la répartition aléatoire des microcapsules de MCP, les simulations par la méthode de champs de phase sont réalisées sur des microstructures générés aléatoirement. Pour une fraction volumique donnée, les microcapsules (dont le rayon est fixé à 0.2 mm) sont distribuées aléatoirement dans un domaine rectangulaire de dimensions 3×6 mm (voir Fig. 4.22).

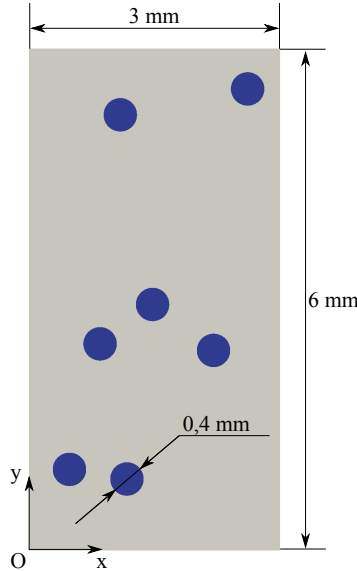


FIGURE 4.22: Exemple d'une microstructure aléatoire contenant 7 microcapsules de MCP pour les simulations de l'endommagement par fissuration.

On considère des domaines rectangulaires de dimensions 3×6 mm² contenant respectivement 4,89%, 6,98%, 9,77% et 13,26% en volume de MCP, soumis à un essai de traction dans la direction y . Pour chaque fraction volumique de MCP, on obtient plusieurs réponses Force-Déplacement qui correspondent au nombre de réalisations. À partir de ces réponses, on obtient la force maximale moyenne atteinte avant la rupture et l'écart-type de celle-ci. Les réponses obtenues pour les fractions volumiques choisies permettent d'obtenir une tendance de la résistance mécanique avec endommagement du composite en fonction de la fraction volumique de MCP.

4.6.2 Résultats numériques

On suppose que le MCP est un matériau élastique linéaire qui ne peut se fissurer ($d = 0$ dans le MCP) et la matrice est homogène avec un module de Young de $E = 20$ GPa, un coefficient de Poisson de $\nu = 0,2$ et $G_c = 2,7 \times 10^{-3}$ kN.mm⁻¹. Pour chaque fraction volumique, on a 20 réalisations. Par exemple, La Fig. 4.23 montre des trajets de fissures obtenu pour les microstructures contenant 10 microcapsules de MCP.

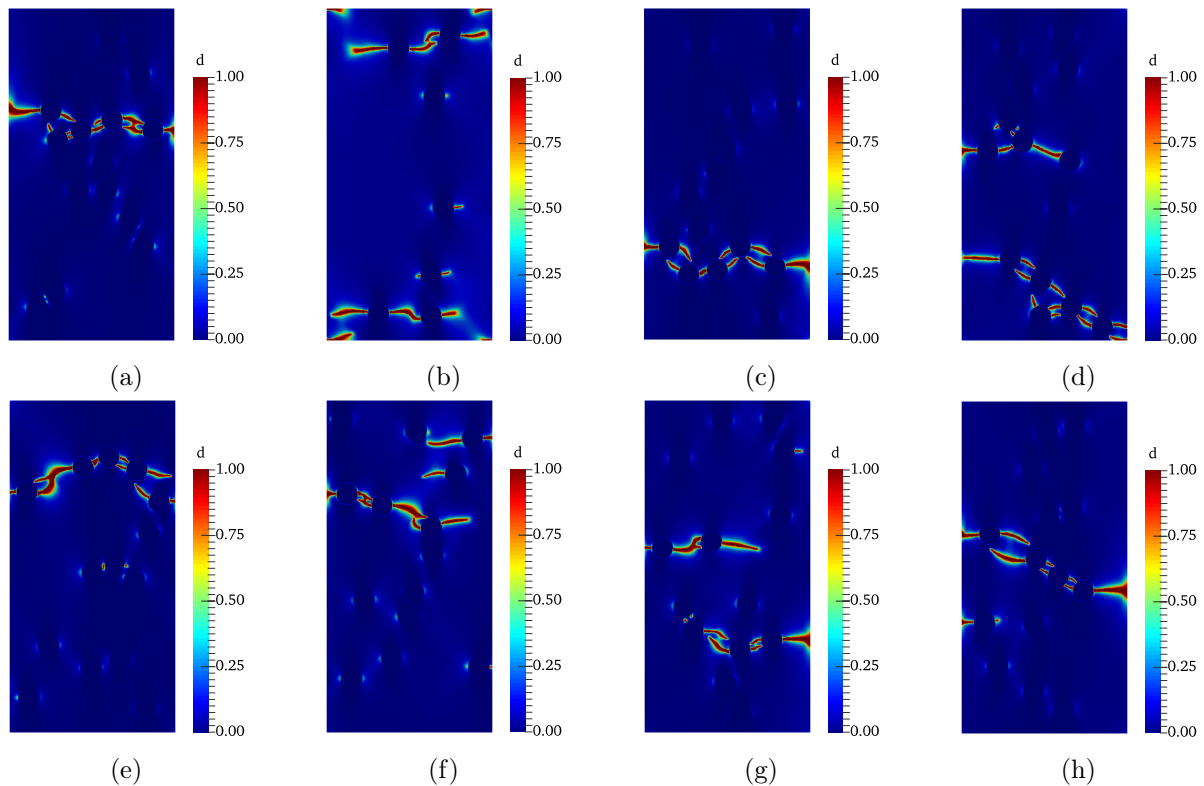


FIGURE 4.23: Trajets de fissures obtenus en traction pour les huit premières réalisations de microstructures contenant 10 microcapsules de MCP.

Les résultats montrent que la réponse en traction dépend fortement de la disposition des microcapsules. La force maximale atteinte est plus élevée lorsqu'il n'y a pas de microcapsules alignés suivant x et lorsque qu'ils ne sont pas proches des bords du domaine. La faible résistance mécanique du MCP fait que les fissures partent toujours du voisinage des microcapsules. La Fig. 4.24 montre les forces critiques atteintes pour chaque fraction volumique. La courbe en rouge représente la réponse moyenne sur la base des 20 réalisations. La Fig. 4.25 montre les réponses moyennes et les écarts-types des forces maximales en fonction de la fraction volumique de MCP.

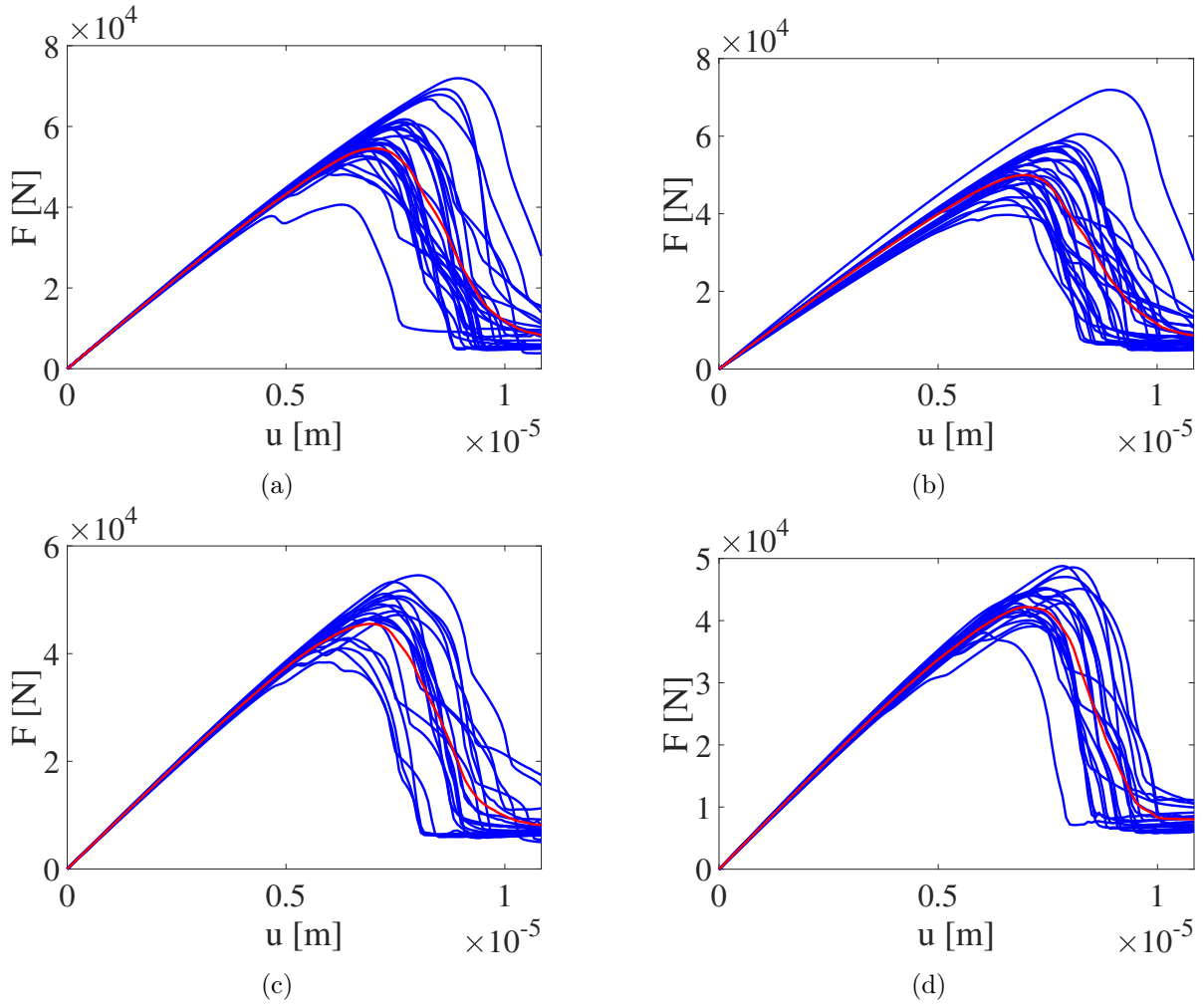


FIGURE 4.24: Essai de traction pour des microstructures contenant (a) 7, (b) 10, (c) 14 et (d) 19 microcapsules de MCP aléatoirement réparties : courbe de force-déplacement pour 20 réalisations (en bleu). La courbe rouge est la réponse moyenne.

4.7 Diffusion du MCP liquide dans la matrice fissurée

Ici, nous proposons un modèle de diffusion non linéaire pour prédire la fuite du MCP liquide à travers les fissures. Ce scénario correspond au cas où des microfissures sont présentes dans le matériau sous l'effet des chargements mécaniques, ensuite l'augmentation de la température fait fondre le MCP qui s'échappe. La matrice est considérée comme un matériau poreux contenant un réseau de fissures décrites par la variable de champs de phase d .

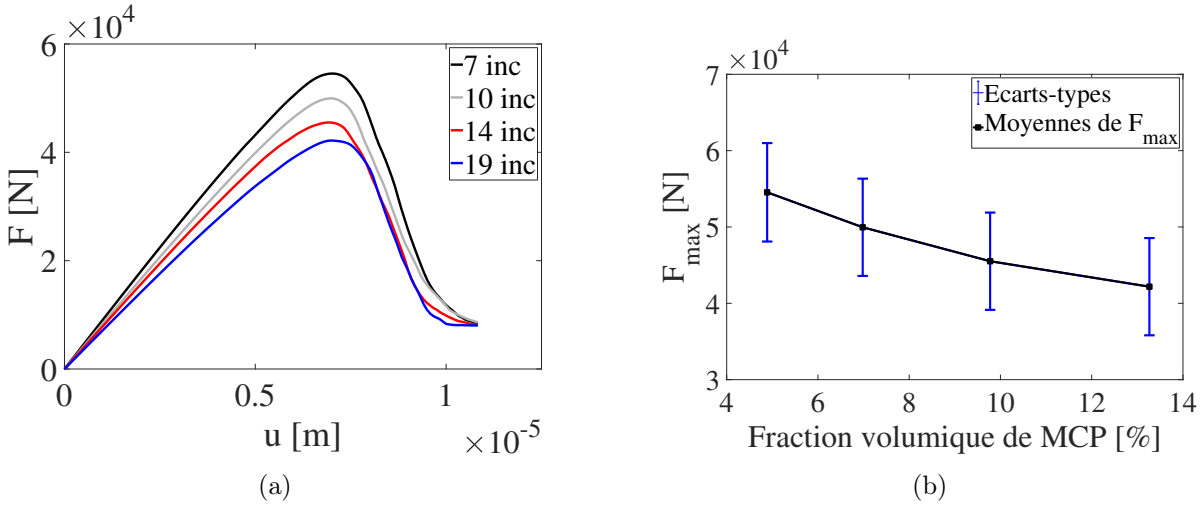


FIGURE 4.25: Comparaison des courbes de réponse en traction pour 20 réalisations : (a) les courbes de réponse moyenne et (b) les forces maximales atteintes avant la rupture.

4.7.1 Modélisation de l'écoulement non saturé du fluide dans le milieu poreux fissuré

L'objectif de ce travail est de construire un modèle numérique d'écoulement diphasique (air et MCP liquide) pour modéliser les fuites de MCP liquide dans le matériau endommagé. Dans cette section, nous présenterons les hypothèses de notre travail et les équations du modèle choisi. Ici, on admet que la propagation de fissures et l'écoulement du MCP liquide sont découplés. Ceci permet de modéliser dans un premier temps la propagation de fissures par la méthode de champs de phase, ensuite dans un deuxième temps, la diffusion du MCP liquide dans le solide fissuré.

4.7.1.1 Ecoulements diphasiques et équations de Richards

On souhaite simuler la fuite de la paraffine liquide à travers des fissures décrites par la méthode de champs de phase. Pour cela, on considère les équations régissant l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux partiellement saturé. On présente ici les équations régissant l'écoulement de deux fluides non miscibles dans un milieu poreux et les hypothèses simplificatrices adoptées. Dans ce travail, le milieu poreux partiellement saturé est composé d'un squelette solide avec son réseau poreux. Ce dernier est rempli par endroit de liquide ou d'air comme le montre la Fig. 4.26.

Dans les modèles d'écoulements diphasiques, le milieu poreux est caractérisé par :

- la porosité n_s [m^3/m^3] : c'est le rapport entre le volume des pores (et fissures) et le volume total du domaine,

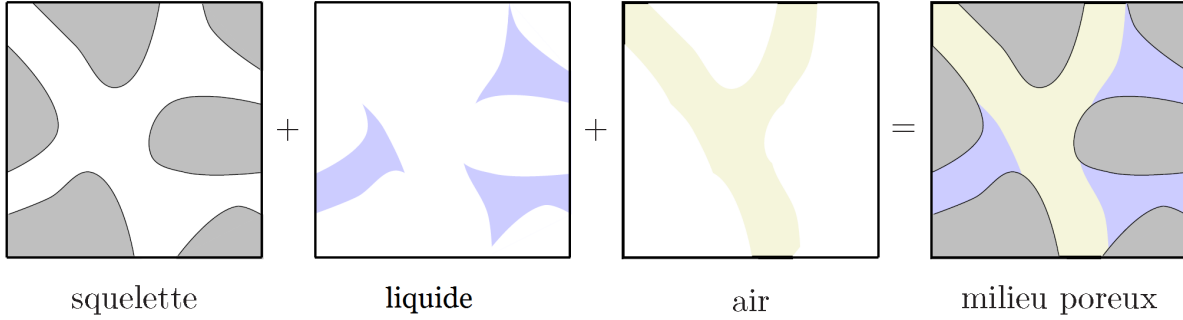


FIGURE 4.26: Schéma d'un milieu poreux contenant de l'air et un liquide [11].

- la perméabilité intrinsèque k_d : l'aptitude du milieu à être traversé par un fluide. Elle dépend de la géométrie des fissures et est évalué par une loi cubique [190].
- La saturation s [m^3/m^3] d'un fluide : rapport entre le volume du fluide et le volume des pores.

Tout le réseau poreux est occupé soit par le liquide soit par l'air, ce qui permet d'écrire

$$s_\ell + s_a = 1, \quad (4.60)$$

où s_ℓ, s_a sont respectivement les saturations en liquide et en air. Les équations gouvernant les écoulements diphasiques sont les équations de continuité des deux fluides. Elles traduisent la conservation de masse :

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_s \rho_i s_i) + \nabla \cdot \rho_i \mathbf{v}_i = 0 \quad i \in \{\ell, a\}, \quad (4.61)$$

avec ρ_i la densité et \mathbf{v} la vitesse des fluides. Les vitesses de chaque phase sont données par la loi de Darcy généralisée [191] :

$$\mathbf{v}_i = -k_d \frac{k_r(p_i)}{\mu_i} (\nabla p_i - \rho_i \mathbf{g}z) \quad i \in \{\ell, a\}, \quad (4.62)$$

où p_i désigne les pressions de chaque fluide,

k_r , la perméabilité relative qui dépend de la pression,

μ_i les viscosités dynamiques et \mathbf{g} l'accélération de la pesanteur.

La pression capillaire p_c qui s'exerce à l'interface entre les deux fluides est définie par :

$$p_c = p_\ell - p_a \quad (4.63)$$

L'équation (4.63) constitue un couplage entre les équations de chaque phase de fluide. Les équations diphasiques sont complexes et peu de travaux utilisent ces équations telle quelles pour des géométries complexes, notamment pour les milieux poreux fissurés. De plus, la méthode de champs de phase fournit une description diffuse des fissures, ce qui rend encore plus complexe la discrétisation des équations d'écoulement phasiques. Pour simplifier le système d'équations non linéaires gouvernant les écoulements diphasiques, nous considérons les hypothèses suivantes :

- le squelette est supposé indéformable (porosité constante)
- le liquide est supposé incompressible (masse volumique constante)
- l'air circule librement dans le milieu poreux (on néglige les effets de l'écoulement de l'air en le supposant statique, à la pression atmosphérique $p_a(\mathbf{x}, t) = p_{\text{atm}}$). On se focalise sur l'écoulement du liquide seul sous l'effet de la gravité et de la pression capillaire.

Dans notre cas, on admet que les chargements mécaniques ne changent pas, ce qui justifie l'hypothèse du squelette solide indéformable. La paraffine liquide étant supposé un fluide incompressible et en admettant que l'air du milieu poreux circule librement et est relié à l'atmosphère, on aboutit aux équations de Richards [192]. Dans ce modèle, on désigne par ψ [m] la hauteur de pression définie par :

$$\psi = \frac{p_\ell - p_{\text{atm}}}{\rho_i g}. \quad (4.64)$$

La teneur en liquide θ étant une fonction de la hauteur de pression ψ (courbes de pression capillaire), les équations (4.61) et (4.62) donnent la forme mixte de l'équation de Richards :

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta - \nabla \cdot (K(\psi) \nabla (\psi + z)) = 0. \quad (4.65)$$

Cette équation peut être écrite sous deux autres formes [193]. En introduisant la capacité capillaire C [m^{-1}] qui est la dérivée de θ par rapport à ψ , la forme en pression ψ s'écrit :

$$C(\psi) \frac{\partial}{\partial t} \psi - \nabla \cdot (\mathbf{K}(\psi) \nabla (\psi + z)) = 0, \quad (4.66)$$

où z est la cote. Avec \mathbf{D} la diffusivité [$m^2 \cdot s^{-1}$], la forme en θ s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta - \nabla \cdot (\mathbf{D}(\theta) \nabla \theta) - \nabla \cdot (\mathbf{K}(\theta) \nabla z) = 0. \quad (4.67)$$

Chaque forme de l'équation de Richards possède ses avantages et ses inconvénients. Les formes en ψ et θ ont tous les deux l'avantage de réduire le problème à la résolution d'une équation différentielle avec une seule inconnue. Cependant, la forme en ψ n'est généralement pas conservative, mais l'utilisation de maillages fins et de pas de temps très petits permet de limiter les pertes de masse. La forme en θ ne permet pas de suivre l'évolution de la pression dans les zones saturées. La forme mixte permet d'éviter les inconvénients des deux autres formes mais elle nécessite des schémas numériques bien adaptés [194]. Dans notre travail, nous utilisons la forme en ψ des équations de Richards tout en vérifiant que la perte de masse n'est pas trop importante.

Les relations $\psi \mapsto \theta(\psi)$ et $\psi \mapsto K(\psi)$ sont nécessaires pour mettre en œuvre les équations de Richards. Des travaux expérimentaux sur des sables ont permis de construire des modèles empiriques. Ces relations sont à la base des fortes non linéarités dans les équations de Richards. Dans chaque modèle, l'expression de la capacité capillaire est la dérivée de la capacité de rétention θ par rapport à ψ :

$$C(\psi) = \frac{\partial}{\partial \psi} (\theta(\psi)). \quad (4.68)$$

Dans l'équation (4.66), en posant $r = -\nabla \mathbf{K} \cdot \nabla z$, la forme en ψ devient :

$$C(\psi) \frac{\partial(\psi)}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K}(\psi) \cdot \nabla \psi) = r(\psi) \quad (4.69)$$

qui a beaucoup de similitudes avec la conduction de chaleur non linéaire dans les solides avec un terme source r . Le modèle proposé présente plusieurs avantages :

- la simplification générale des équations régissant les écoulements diphasiques ;
- la résolution d'une seule équation aux dérivées partielles non linéaire ;
- la possibilité de couplage avec la méthode de champs de phase sans une description explicite du réseau poreux avec les fissures (comme il a été proposé dans [195] par exemple).

Les équations de Richards sont en général critiquées pour la surestimation de la pression capillaire [196]. Les relations entre la conductivité hydraulique K , la teneur en liquide θ et la hauteur de pression ψ sont empiriques. Par conséquent, l'équation différentielle à résoudre devient fortement non linéaire et très coûteuses en temps de calcul [197].

L'écoulement non saturé est décrite par une équation de diffusion non linéaire dont le principe fondamental est illustré par la Fig. 4.27. On admet que cette diffusion est conditionnée par la pression capillaire et la gravité sous la contrainte des conditions aux limites. On distingue deux

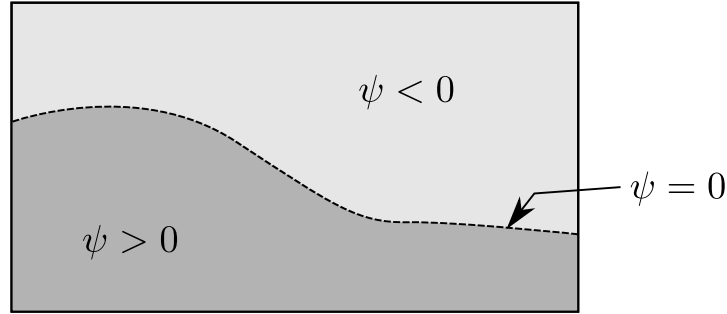


FIGURE 4.27: Illustration d'un domaine variablement saturé : le domaine $\psi < 0$ correspond à la zone insaturée et $\psi > 0$ à la zone saturée.

zones en fonction desquelles les coefficients de l'équation (4.69) diffèrent. Dans la zone saturée, on a une diffusion de type Darcy, c'est-à-dire que C et K ne dépendent plus de ψ ; θ atteint alors sa valeur maximale. La vitesse \mathbf{v} du liquide est donnée par :

$$\mathbf{v}_w = -\bar{\mathbf{k}}(\nabla p + \rho \mathbf{g}), \quad (4.70)$$

où $\bar{\mathbf{k}}$ est la conductivité hydraulique à saturation donnée par l'équation (4.71) et K_w le module de compressibilité du fluide. \mathbf{k}_d étant la perméabilité hydraulique liée à l'ouverture des fissures (voir la section 4.7.1.2) la perméabilité hydraulique est définie à chaque point du domaine par :

$$\bar{\mathbf{k}} = \mathbf{k}_0 + d^e \mathbf{k}_d. \quad (4.71)$$

où \mathbf{k}_0 est la perméabilité de la zone non endommagée. Dans cette relation, $\varepsilon = 1$ est un paramètre qui permet de contrôler l'augmentation locale de perméabilité hydraulique induite par les fissures.

4.7.1.2 Propriétés hydrauliques de la matrice poreuse

Avec la prise en compte d'éventuelles fissures dans la matrice, il est indispensable de décrire le comportement hydraulique du solide. La méthode de champs de phase fournit une description diffuse des fissures qui peuvent avoir des géométries complexes. Dans ce travail, on considère que tout le domaine solide possède une conductivité hydraulique qui sera augmentée localement par la présence d'une fissure. Sous l'effet des chargements mécaniques sur le solide, on a l'initiation et la propagation des fissures dans le solide, le fluide présent dans les capsules peut donc s'écouler dès qu'une fissure arrive sur l'interface fluide-structure. Pour évaluer la perméabilité hydraulique des fissures noté ici \mathbf{k}_d , on suit les travaux de Xia et al. [142] :

$$\mathbf{k}_d = \left(\frac{(w^n)^2}{12\eta} - k_r \right) \left(\mathbf{1} - \mathbf{n}^d \otimes \mathbf{n}^d \right) \quad (4.72)$$

où k_r est la perméabilité intrinsèque du solide, η la viscosité dynamique et \mathbf{n}^d est la normale unitaire à la fissure donnée par :

$$\mathbf{n}^d = \frac{\nabla d(\mathbf{x})}{\|\nabla d(\mathbf{x})\|}. \quad (4.73)$$

Dans (4.72), w^n est le saut le déplacement normal qui correspond aussi à l'ouverture de la fissure. Elle est approximée par :

$$w^n = \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}^d \quad (4.74)$$

avec

$$\mathbf{w} = h \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}^d \quad (4.75)$$

où h est un petit paramètre pris ici égal à l (le paramètre de régularisation dans le problème de champs de phase). Pour plus de détails sur l'évaluation du saut de déplacement et de la perméabilité hydraulique dans une microstructure fissurée et décrite par la variable de champs de phase, voir [142, 198] par exemple.

4.7.1.3 Courbes de rétention

Les essais permettant de caractériser les écoulements diphasiques dans les milieux poreux on permis d'identifier des lois décrivant la relation liant la hauteur de pression et l'humidité du milieu poreux. La plupart des travaux numériques utilisant les équations de Richards identifient le comportement hydraulique du milieu poreux par rapport à ces modèles. Entre autres, on peut citer les modèles de Brooks et Corey [199], de Warrick [200], de Haverkamp [201] et de

van Genuchten [202] qui portent le nom de leurs créateurs respectifs.

Modèle de Brooks et Corey [199]

Dans ce modèle, la teneur en liquide et la conductivité hydrauliques sont données par :

$$\theta(\psi) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left(\frac{|\psi|}{\psi_e} \right)^{-\lambda} \quad (4.76)$$

et

$$K(\psi) = k_s \left(\frac{|\psi|}{\psi_e} \right)^{-n}. \quad (4.77)$$

ψ_e est la pression d'entrée d'air et $n = \lambda(2 + l) + 2$. l est un paramètre traduisant la connectivité des pores et λ est inversement proportionnel à leur taille moyenne. Ce modèle est le premier à être proposé, et sur lequel d'autres plus récents se sont basés.

Modèle de Warrick [200]

Ce modèle a été proposé pour trouver des solutions analytiques en une dimension aux équations de Richards. La teneur en liquide et la conductivité hydrauliques sont données par :

$$\theta(\psi) = \begin{cases} 0,6829 - 0,09524 \ln |\psi| & \text{si } \psi \leq -29,48 \text{ cm} \\ 0,4531 - 0,02752 \ln |\psi| & \text{si } \psi > -29,48 \text{ cm} \end{cases} \quad (4.78)$$

et

$$K(\psi) = \begin{cases} 1343,0 \ln |\psi|^{-3,4095} & \text{cm/heure si } \psi \leq -29,48 \text{ cm} \\ 0,3549 \ln |\psi|^{-0,9741} & \text{cm/heure si } \psi > -29,48 \text{ cm} \end{cases} \quad (4.79)$$

Ce modèle n'est pas très utilisé car ne permet pas d'adapter facilement les paramètres à différents milieux poreux.

Modèle de Haverkamp [201]

C'est le modèle le plus souvent utilisé à cause de sa simplicité et sa capacité à s'adapter à plusieurs types de milieu poreux. Dans ce modèle, la courbe de rétention est donnée par :

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |\psi|^\beta}. \quad (4.80)$$

Dans la relation (4.80), θ_r et θ_s désignent respectivement la teneur en liquide résiduelle et la teneur en liquide à saturation. Pour tout matériau, θ_r est strictement positif, ce qui signifie que le milieu contient toujours une humidité résiduelle lorsqu'il n'y a plus de liquide. De la même manière, θ_s est toujours inférieure à la porosité n du milieu poreux car des bulles de gaz

sont toujours piégées dans le réseau poreux à saturation. β est le paramètre de tortuosité du milieu poreux. La conductivité hydraulique, fonction de la hauteur de pression est donnée par :

$$K(\psi) = K_s \frac{A}{A + |\psi|^\gamma} \quad (4.81)$$

K_s est la conductivité hydraulique à saturation du milieu (34 cm/heure environ pour le sable). Dans (4.80) et (4.81), α , γ et A sont des paramètres de forme. Des exemples de paramètres pour un sable sont : $\theta_s = 0,287$; $\theta_r = 0,075$; $\alpha = 1,611 \times 10^6$; $\beta = 3,96$; $\gamma = 4,74$ et $A = 1,175 \times 10^6$. Les expressions contiennent des valeurs absolues et des puissances qui sont à la base des fortes non linéarités du modèle. La Fig. 4.28 montre l'évolution de la conductivité hydraulique, de la teneur en liquide et de la capacité capillaire en fonction de la hauteur en pression ψ pour ces paramètres.

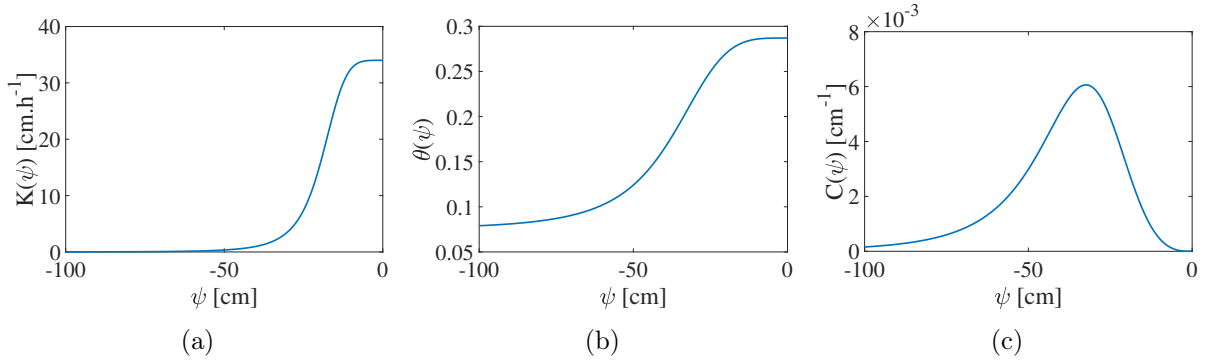


FIGURE 4.28: Paramètres du modèle de Haverkamp en fonction de la hauteur de pression : (a) conductivité hydraulique; (b) teneur en liquide; (c) capacité capillaire.

Nous adoptons le modèle de Haverkamp pour modéliser la diffusion de la paraffine dans les matériaux cimentaires. Les paramètres de Haverkamp ne sont valables que dans les zones non saturées. On ne dispose donc pas de la conductivité hydraulique, de la teneur en liquide et de la capacité capillaire en zone saturée. La façon la plus courante de remédier à ce problème est de prolonger par continuité ces lois à saturation par leurs valeurs optimales respectives [203] :

$$\mathbf{K}(\psi) = \begin{cases} \mathbf{K}(\psi) & \text{si } \psi < 0 \\ \bar{\mathbf{k}} & \text{si } \psi > 0 \end{cases} ; \quad \theta(\psi) = \begin{cases} \theta(\psi) & \text{si } \psi < 0 \\ \theta_s & \text{si } \psi > 0 \end{cases} \quad (4.82)$$

et la valeur de $C(\psi)$ est minorée par $\frac{1}{K_w}$ où K_w est le module d'incompressibilité du liquide. La Fig. 4.29 illustre l'évolution des paramètres en zone saturée et insaturée.

Modèle de van Genuchten [202]

Dans ce modèle, on a :

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + |\psi|^n]^m}; \quad (4.83)$$

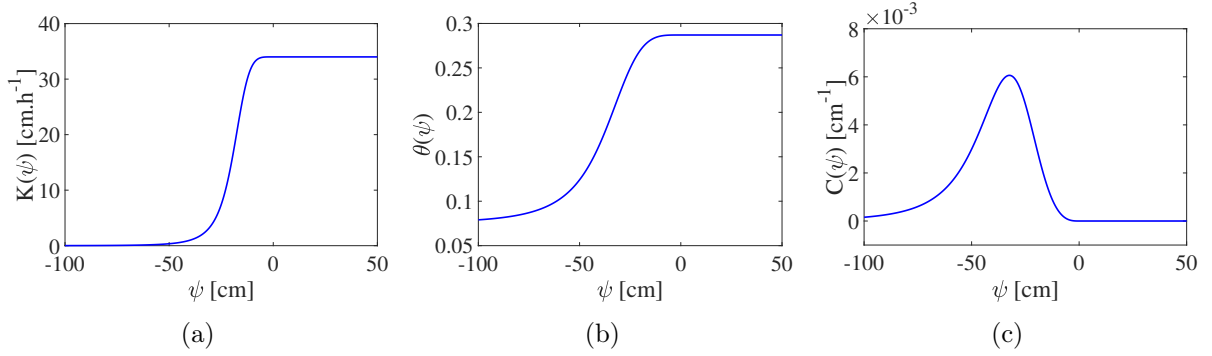


FIGURE 4.29: Illustration des paramètres du modèle de Haveramp adapté pour les zones saturées : (a) conductivité hydraulique ; (b) teneur en liquide ; (c) capacité capillaire.

et

$$K(\psi) = K_s \frac{\{1 - (\alpha |\psi|)^{n-1} [1 + (\alpha |\psi|)^n]^{-m}\}^2}{[1 + (\alpha |\psi|)^n]^{m/2}} \quad (4.84)$$

Ce modèle a été proposé pour améliorer l'adaptation à différents types de sols. Par exemple, pour un sable du Nouveau Mexique [204] : $K_s = 33,19$ cm/heure ; $\theta_r = 0,1020$; $\theta_s = 0,3681$; $\alpha = 0,03353$; $n=1,98$ et $m = 1 - 1/n$. Cajuhi et al. [195] ont adopté ce modèle pour modéliser la fissuration dans un milieu variablement saturé.

4.7.2 Formulation Eléments Finis

Dans un domaine fissuré Ω , on considère l'équation de Richards donnée par (4.66). A cause des fortes non linéarités de l'équation de diffusion non saturée, les schémas de discrétisation temporelle explicite sont privilégiés [195]. Tous les paramètres qui dépendent de ψ sont évalués au pas de temps précédent. La forme faible correspondant à l'équation (4.66) est :

$$\int_{\Omega} \left(C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K}(\psi) \nabla(\psi + z)) \right) \zeta d\Omega = 0 \quad (4.85)$$

où ζ est une fonction test suffisamment régulière et satisfaisant $\zeta = 0$ sur $\partial\Omega$. En utilisant le théorème de la divergence, (4.85) devient :

$$\int_{\Omega} \zeta C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \zeta \mathbf{K}(\psi) \nabla \psi d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \zeta \mathbf{K}(\psi) \nabla z d\Omega = 0 \quad (4.86)$$

Nous utilisons la même discrétisation que la variable d'endommagement afin d'évaluer avec précision \mathbf{K} partout dans le domaine :

$$\psi = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\psi}^i \quad \text{et} \quad \nabla \psi = \mathbf{B}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\psi}^i \quad (4.87)$$

où $\boldsymbol{\psi}^i$ est le vecteur contenant les valeurs nodales de ψ , $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ sont respectivement les vecteurs et matrices de fonctions de forme et dérivées de fonctions de forme. La même discrétisation est utilisée pour la fonction test ζ :

$$\zeta = \mathbf{N}(\mathbf{x})\boldsymbol{\zeta}^i \quad \text{et} \quad \nabla\zeta = \mathbf{B}(\mathbf{x})\boldsymbol{\zeta}^i. \quad (4.88)$$

La discrétisation temporelle s'écrit :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta t}. \quad (4.89)$$

avec Δt le pas de temps. En utilisant cette discrétisation, on obtient le système d'équation à résoudre dans le domaine saturé à chaque pas de temps $n + 1$:

$$\left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C}_{n+1}^w + \mathbf{K}_{n+1}^w \right) \Delta\boldsymbol{\psi} = \mathbf{Q}_d \quad (4.90)$$

$$\boldsymbol{\psi}_{n+1} = \boldsymbol{\psi}_n + \Delta\boldsymbol{\psi} \quad (4.91)$$

avec

$$\mathbf{C}_{n+1}^w = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{C}(\psi_n) \mathbf{N} d\Omega, \quad (4.92)$$

$$\mathbf{K}^w = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{K}(\psi_n) \mathbf{B} d\Omega \quad (4.93)$$

et

$$\mathbf{Q}_d = - \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{K}(\psi_n) \mathbf{B} \mathbf{z} d\Omega \quad (4.94)$$

où \mathbf{z} est un vecteur contenant les valeurs nodales de la cote z .

4.7.3 Exemples numériques

Dans ces exemples numériques, nous proposons dans un premier temps un test pour valider le modèle de Haverkamp en comparant les résultats avec ceux de la littérature. Dans un deuxième exemple, le modèle est appliqué à une microstructure contenant des capsules remplies de MCP à l'état liquide.

4.7.3.1 Test de Haverkamp

Dans cette partie, nous reprenons le cas test standard pour illustrer le modèle de diffusion adopté par la méthode des Eléments Finis. On considère le problème de la Fig. 4.30. Il s'agit d'une colonne de largeur $L = 8$ cm et de hauteur $H = 40$ cm. On applique sur les bords

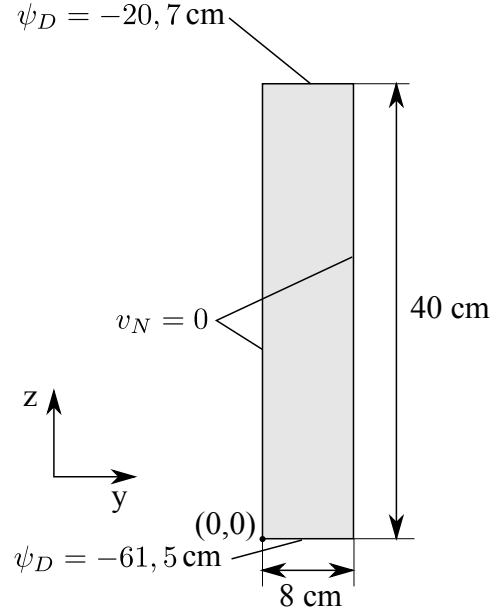


FIGURE 4.30: Test de Haverkamp : géométrie et conditions aux limites.

supérieure et inférieure des hauteurs de pression de $-20,7$ cm et $-61,5$ cm respectivement. On considère des conditions d'étanchéité sur les deux bords latéraux. Les caractéristiques hydrauliques du réseau poreux sont les mêmes que ceux données à titre d'exemple dans la présentation du modèle de Haverkamp au 4.7.1.3. La Fig. 4.31 montre la teneur en eau du domaine à différents temps. Au temps $t = 0$ s, on a une hauteur de pression uniforme de $\psi_0 = -61.5$ cm dans tout le domaine. Les critères de stabilité du schéma explicite imposent le choix des pas de temps très petits, ici nous choisissons $\Delta t = 0,5$ s. Le domaine est maillé avec 5760 triangles à trois nœuds. Dans cet exemple, l'humidité présente dans la partie supérieure se diffuse uniformément vers le bas. Pour comparer la solution obtenue avec celles disponibles dans la bibliographie et vérifier la convergence vis-à-vis de la finesse du maillage et du pas de temps choisi, on trace la hauteur de pression ψ à chaque 120 s. La Fig. 4.32 montre les résultats obtenus.

On observe une parfaite correspondance avec les résultats par la méthode des différences finis disponibles dans [12]. Le bilan de masse est conservé si la relation suivante est satisfaite à chaque pas de temps $n + 1$:

$$\int_{\Omega} (\theta^{n+1} - \theta^n) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{v} dt \right) \cdot \mathbf{n} dS \quad (4.95)$$

où \mathbf{n} est la normale unitaire à la frontière $\partial\Omega$ du domaine. La sommation de chaque membre l'égalité (4.95) sur tous les pas de temps permet de définir le bilan de masse au pas de temps

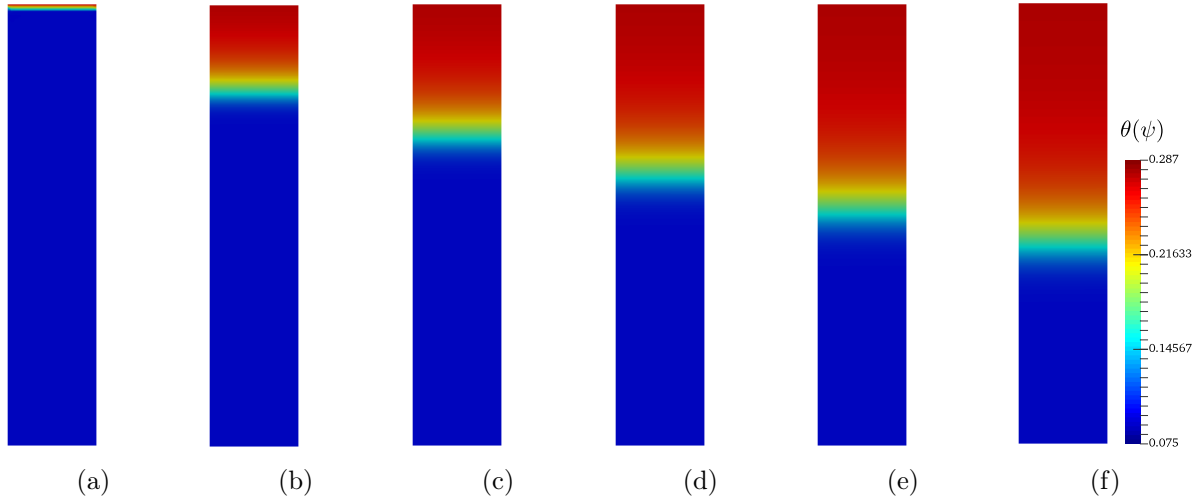


FIGURE 4.31: Solution du problème de Haverkamp : Teneur en eau du milieu à (a) $t = 1$ s, (b) $t = 120$ s, (c) $t = 240$ s, (d) $t = 360$ s, (e) $t = 480$ s et (f) $t = 600$ s.

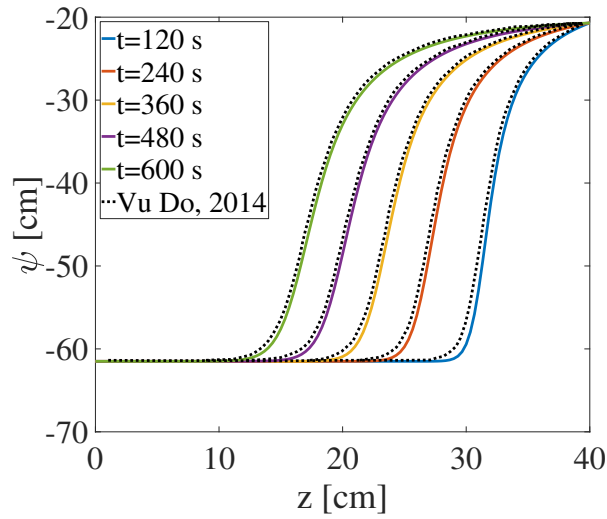


FIGURE 4.32: Solution par Eléments Finis du problème de Haverkamp ; hauteur de pression en fonction de la cote z à chaque 120 s (comparaison avec la solution par différences finis de Vu Do [12]).

n :

$$MB = \frac{\int_{\Omega} (\theta(t^n) - \theta(t^0)) d\Omega}{\int_{t^0}^{t^n} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS} \quad (4.96)$$

Les résultats montrent une légère perte de masse (voir Fig. 4.33) mais qui reste en dessous de 3%. Cela est dû à l'utilisation de la formulation en ψ des équations de Richards. Comme

reporté dans [194], la forme en ψ n'est pas conservative, mais la perte de masse peut être limitée par l'utilisation de discrétisations spatiales et temporelles très fines. Les maillages utilisés pour simuler la propagation de fissure étant relativement fins, nous conservons la forme en ψ des équations de Richards pour modéliser l'écoulement variablement saturé du MCP liquide dans les fissures.

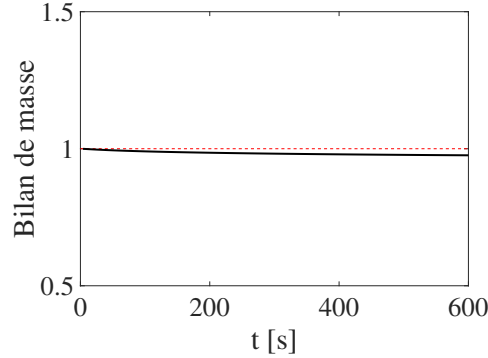


FIGURE 4.33: Le bilan de masse pour le problème de Haverkamp.

4.7.3.2 Microstructure contenant des fissures décrites par la méthode de champs de phase

Dans cet exemple, on considère un domaine 2D contenant 4 microcapsules de MCP comme l'indique la Fig. 4.34. Sous l'effet des chargements mécaniques, on obtient une microstructure endommagée. La méthode de champs de phase a permis de modéliser la propagation de fissures dans le domaine. En admettant que le MCP passe à la phase liquide, on se propose de modéliser la diffusion du MCP liquide à travers les fissures. Dans les microcapsules, on a une condition de saturation $\psi = 0$ et les bords extérieurs du domaine sont étanches sauf aux endroits où on a une rupture complète de la matrice ($\psi_D = -60$ cm sur $\partial\Omega_{|d=1}$). On reprend les paramètres hydrauliques du modèle de Haverkamp à part la perméabilité qui est donnée par la relation (4.71) avec $\bar{\mathbf{k}}_0 = k_r \mathbf{1}$ et $k_r = 10^{-16}$ m². La porosité est de $n = 0,287$. En raison du fort contraste de la conductivité hydraulique entre les zones endommagées ($d = 1$) et non endommagées ($d = 0$ et $\bar{\mathbf{k}} = \bar{\mathbf{k}}_0$) on remarque une diffusion en deux temps : une diffusion rapide qui entraîne la saturation des fissures qui sont reliées aux microcapsules et une diffusion à long terme dans le reste de la matrice. On utilise un pas de temps adaptatif pour prendre en compte ces deux régimes d'écoulement : $\Delta t = 0,1$ s pour les 10 premières minutes (où les fissures sont saturées de MCP liquide) et $\Delta t = 1$ min pour la suite.

La Fig. 4.35 montre l'écoulement variablement saturé du MCP liquide à travers les fissures. A cause de la haute conductivité hydraulique des fissures, ces dernières se saturent très vite tandis que dans le reste de la matrice, la teneur en liquide est à sa valeur résiduelle θ_r . Pour des temps d'observation plus longs, on obtient les résultats de la Fig. 4.36.

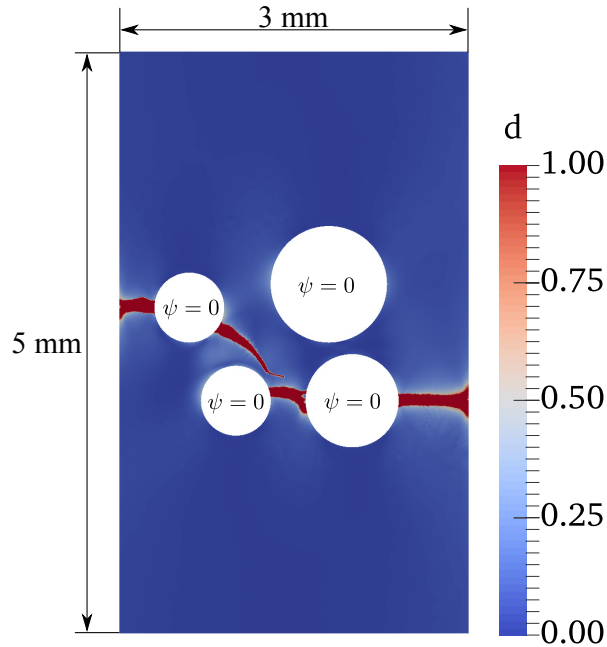


FIGURE 4.34: Géométrie et conditions aux limites pour la simulation de fuites de MCP liquide à travers les fissures. On impose des conditions de saturation dans les microcapsules et une pression de $\psi_D = -60$ cm aux bords extérieur du domaine où $d = 1$.

La diffusion à long terme montre un mouvement du MCP liquide des fissures vers le reste de la matrice. Ces résultats montrent la capacité du modèle proposé à modéliser l'écoulement non saturé dans un milieu poreux comportant des fissures décrites de manière diffuse par la méthode de champs de phase. Ce modèle peut être adapté au béton ou à n'importe quel matériaux contenant des microcapsules de MCP, mais des travaux expérimentaux sont nécessaires afin d'identifier les paramètres de la courbe de rétention (en se basant sur le modèle de Haverhamp par exemple). Le MCP liquide n'étant pas sous haute pression, son écoulement ne peut faire évoluer les fissures dans la matrice. Cependant, cette diffusion peut à son tour fragiliser le matériau en général, facilitant la progression des fissures existantes lorsque des chargements mécaniques sont de nouveau appliqués. Pour enrichir notre modèle et prendre en compte cette possibilité, il faut l'identification d'une loi d'endommagement de la matrice qui dépendra de la teneur local en MCP liquide, mais des données expérimentales manquent à ce sujet.

4.8 Conclusion

Dans ce chapitre, la méthode de champs de phase a été exposée avec sa discrétisation par la méthode des éléments finis. Un exemple 2D a permis d'illustrer les capacités de la méthode à simuler l'initiation et la propagation de multiples fissures dans des microstructures hétérogènes.

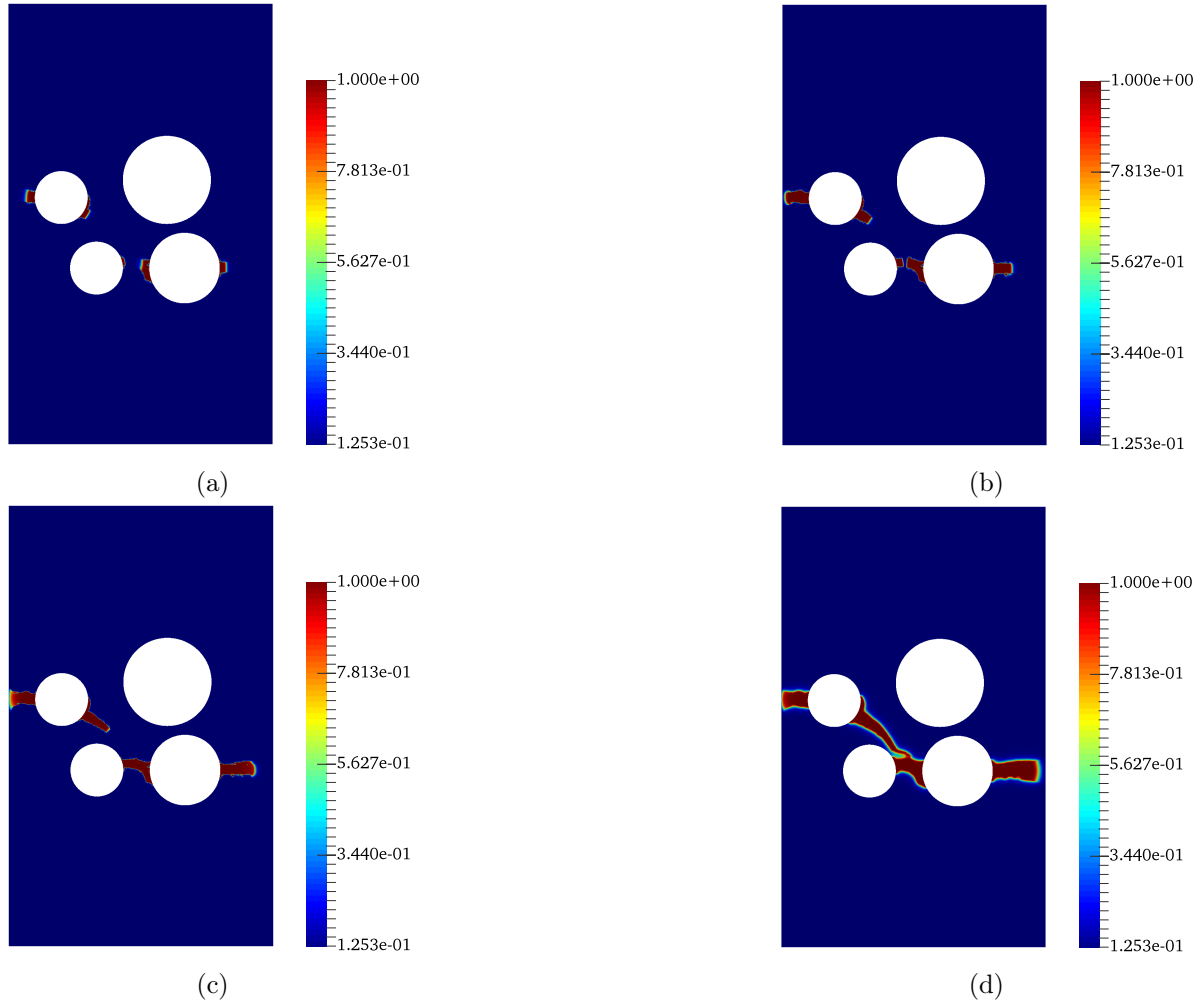


FIGURE 4.35: Diffusion du MCP liquide à court terme : saturation de la matrice poreuse à (a) $t = 0.5$ s, (b) $t = 1$ s, (c) $t = 2$ s et (d) $t = 10$ min.

Ensuite, une approche d'interaction fluide-structure en statique a permis d'étudier l'influence du MCP liquide sur le comportement élastique du composite. Ces résultats ont montré que la forte résistance mécanique et la morphologie des matériaux cimentaires rendent négligeable l'influence de l'incompressibilité des capsules sur le comportement mécanique effectif du composite. En conclusion, le comportement mécanique du béton contenant des microcapsules de MCP peut être étudié en considérant tout simplement le MCP comme un solide élastique linéaire. Le comportement thermomécanique de ces types de composites peuvent être étudié en considérant un découplage entre les changements de phase thermiques et la réponse mécanique effective du matériau, même pour des fractions volumiques élevées de MCP. Ensuite, une première tentative

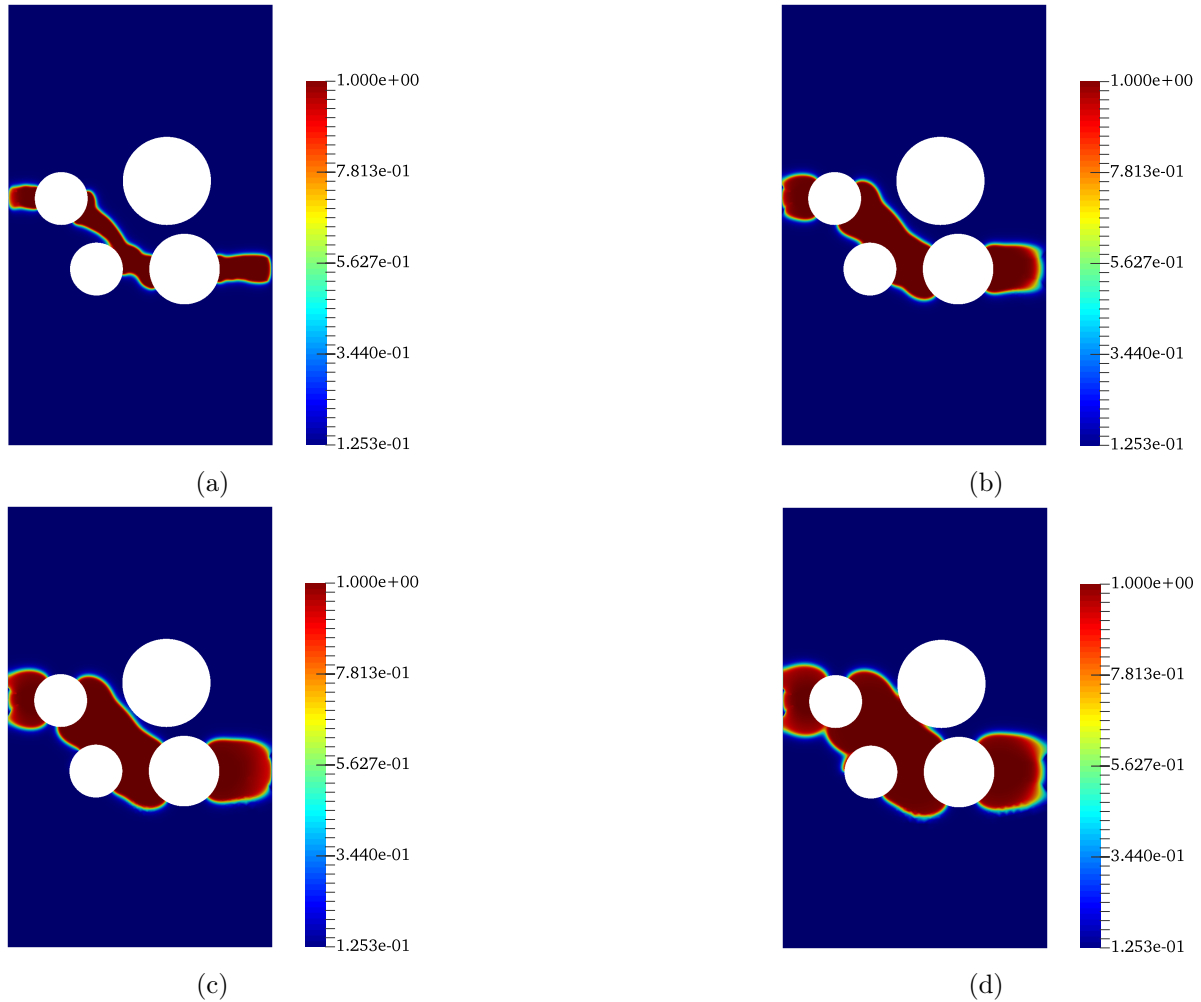


FIGURE 4.36: Diffusion du MCP liquide à long terme : saturation de la matrice poreuse à (a) $t = 20$ min, (b) $t = 75$ min et (c) $t = 110$ min et (d) $t = 150$ min.

pour étudier le comportement mécanique endommageable des microstructures contenant des microcapsules de MCP a été proposée. L'homogénéisation numérique a permis d'obtenir l'évolution des propriétés élastiques du matériau en fonction de la fraction volumique de MCP. Les résultats ont permis de conclure que la fraction volumique de MCP doit rester en dessous de 20% pour limiter la chute de la résistance mécanique du composite. La méthode de champs de phase a permis de modéliser l'endommagement de ce matériaux avec du MCP à la phase solide. En utilisant des microstructures contenant une répartition aléatoire de microcapsules de MCP, nous avons obtenu une tendance de la force critique atteinte à la rupture par le matériau en fonction de la fraction volumique de MCP. La prédiction des propriétés élastiques effectives et

de l'évolution de la force maximale à la rupture constituent des résultats très importants dans le choix de la fraction volumique de MCP à utiliser pour les diverses structures des bâtiments. Enfin, une combinaison de la méthode de champs de phase et des équations de Richards a permis de modéliser l'écoulement insaturé du MCP liquide à travers les fissures. Ce dernier outil numérique pourra servir à l'avenir à prédire les fuites du MCP liquide reportées dans plusieurs travaux expérimentaux.

Conclusions générales et perspectives

Dans cette thèse, nous avons étudié le comportement thermomécanique des bétons contenant des microcapsules de MCP (matériaux à changement de phase). Grâce à leur grande chaleur latente de fusion, les MCP représentent une alternative intéressante pour l'amélioration de l'inertie thermique des bâtiments et la baisse de la consommation d'énergie liée à l'air conditionné. Lors des changements de phase, les MCP stockent ou restituent d'importantes quantités d'énergie thermique, ce qui permet de diminuer les fluctuations de température dans les bâtiments. Cependant, leur utilisation pose un problème majeur : la dégradation des propriétés mécaniques des matériaux de construction. Ainsi, il est nécessaire de développer des méthodologies permettant d'étudier le comportement thermomécanique et la fissuration de ces nouveaux matériaux composites afin d'aboutir à un compromis entre les performances thermiques désirées et les résistances structurelles qui s'imposent.

Durant ces dernières décennies, les applications de MCP dans le bâtiment ont suscité un grand intérêt. Plusieurs travaux expérimentaux ont été menés afin de caractériser les MCP ou pour prouver l'efficacité de les introduire dans les matériaux de génie civil. Des modèles numériques ont également été développés pour simuler le comportement des MCP ou des composites contenant du MCP. La plupart de ces travaux sont basés sur les approches numériques classiques de type éléments finis ou volumes finis par exemple. Ces travaux sont très souvent limités à l'échelle des hétérogénéités pour démontrer l'intérêt de l'utilisation des MCP. La séparation d'échelle représente une réelle limitation pour ces méthodes car la discrétisation de structure de grandes tailles n'est pas envisageable en décrivant toutes les hétérogénéités au vu des grands rapports entre diamètres des micro capsules et tailles des bâtiments. A cette difficulté s'ajoute la complexité du comportement thermique avec changement de phase.

L'objectif de cette thèse était de proposer des méthodologies de modélisation pour prédire le comportement thermomécanique des bétons contenant des microcapsules de MCP à l'échelle des structures de génie civil en tenant compte des phénomènes qui interviennent à l'échelle microscopique. De plus, il était question de modéliser l'endommagement par microfissuration de ces nouveaux matériaux et d'expliquer le rôle des microcapsules dans leur comportement mécanique effectif.

Dans un premier temps, une étude bibliographique a porté sur les matériaux à changement de phase et les possibilités d'utilisation dans le bâtiment. Dans ce travail, nous avons recensé les diverses applications les plus étudiées avec leurs avantages et inconvénients. La synthèse de ces résultats nous ont permis de conclure que la microencapsulation est la meilleure option pour l'incorporation des MCP dans les matériaux de construction. Une revue des différentes mé-

thodes d'homogénéisation a permis de distinguer les avantages et limites des diverses approches existantes. Pour la modélisation de la fissuration, nous avons présenté une liste des méthodes les plus utilisées. Nous avons retenu la méthode de champs de phase pour ses capacités à prédire l'initiation et la propagation de multiples fissures dans les milieux hétérogènes.

A l'échelle des microcapsules, nous avons utilisé la méthode de capacité thermique équivalente pour modéliser le comportement thermique non linéaire des MCP. Ensuite, une stratégie basée sur la méthode EF^2 a permis de modéliser le comportement thermomécanique des matériaux hétérogènes contenant des microcapsules de MCP à l'échelle des structures de génie civil. Nous avons montré que le comportement mécanique effectif des composites avec une matrice cimentaire peut être supposé constant lors des changements de phase dans le MCP, ce qui a permis de simplifier l'approche EF^2 adoptée : le comportement mécanique effectif est calculé une seule fois avant l'analyse multi échelle. Les résultats correspondent bien aux observations expérimentales. L'incorporation des microcapsules de MCP permet d'améliorer l'inertie thermique des matériaux de construction avec un lissage et un décalage dans le temps des pics de températures dans les structures composites.

Des échantillons de mortier de ciment contenant des microcapsules de MCP ont été analysés pour obtenir d'une part des images décrivant la microstructure et pour obtenir des paramètres physico-thermiques d'autre part. Les images ont été obtenues par deux techniques : la microtomographie par rayons X et la microscopie électronique à balayage (MEB). Le taux d'absorption de rayons X du MCP étant très faible, les images obtenues par microtomographie n'ont pas permis de distinguer les microcapsules contenues dans les échantillons. L'analyse des mêmes échantillons au MEB a permis d'observer la microstructure des composites. Ces résultats ont permis de confirmer que les microcapsules de MCP ont conservé leurs formes sphériques. Nous avons donc conservé la morphologie sphérique des microcapsules dans les modèles numériques développés. Ensuite, les caractéristiques thermiques des échantillons ont été déterminées par deux dispositifs expérimentaux : le Hot Plate (plaque chaude gardée transitoire) et le Hot Disk. Ces dispositifs ont permis d'obtenir les conductivités thermiques effectives des échantillons, résultats qui sont en accord avec les approximations par homogénéisation numérique. Le Hot Disk a permis également d'étudier les capacités des composites à stocker ou à restituer de l'énergie thermique. On note une grande contribution d'échange d'énergie thermique par chaleur latente dans les composites contenant des microcapsules de MCP.

La méthode de champs de phase a été utilisée pour la simulation de la fissuration des composites contenant des particules de MCP. Pour évaluer l'effet de l'incompressibilité du MCP en phase liquide sur le comportement effectif du matériau, un algorithme d'interaction fluide-structure a été développé. Dans ce travail, le comportement du fluide a été modélisé par les équations de Navier-Stokes, ce qui a permis d'évaluer les effets du champ de pression et de la vitesse dans le MCP. Les résultats montrent que l'effet du MCP liquide devient négligeable dans le calcul du comportement mécanique effectif du composite dès que le rapport entre les modules de Young de la matrice et du MCP solide dépasse 100. Nous avons montré par ailleurs que ce résultat n'est pas significativement influencé par la fraction volumique de MCP. Les matériaux

de construction à base de ciment étant largement plus résistante mécaniquement que le MCP solide, le comportement mécanique de ces composites peut être étudié en considérant tout simplement le MCP comme un solide élastique.

Enfin, on s'est intéressé au comportement mécanique endommageable du composite contenant des microcapsules de MCP à la phase solide. L'ajout de MCP permet d'avoir des performances thermiques meilleures mais en contrepartie on obtient une dégradation des performances mécaniques du matériau. A l'aide de l'homogénéisation numérique, le comportement élastique effectif de ce nouveau matériau a été évalué en fonction de la fraction volumique de MCP. Les résultats montrent que les modules élastiques effectifs baissent de 50% dès que la fraction volumique de MCP atteint 20%. Afin de limiter cet effet d'affaiblissement, on pourrait envisager le cas des structures multi-couches. En se basant sur des simulations de fissures dans des microstructures contenant des particules de MCP aléatoirement disposées, on remarque que la résistance maximale du matériau avant la rupture baisse aussi considérablement avec l'augmentation de la fraction volumique de MCP. Ces résultats permettent de trouver pour chaque application visée, un compromis entre les performances thermiques désirées et les performances mécaniques admissibles. On s'est finalement intéressé à la fuite du MCP liquide à travers les fissures. Pour cela, nous avons proposé une adaptation des équations de Richards pour modéliser l'écoulement variablement saturé dans une microstructure comportant des fissures décrites par la variable de champs de phase. Les résultats montrent le potentiel du modèle numérique à prédire la diffusion du MCP liquide dans les matrices cimentaires poreuses fissurées.

Ce travail de thèse constitue un premier pas vers la modélisation du comportement thermomécanique des matériaux cimentaires contenant des microcapsules de MCP en se basant sur l'échelle microscopique. A notre connaissance, cette étude est l'une des premières de ce type. Nous pensons que les résultats préliminaires obtenus ici ouvrent de nouvelles pistes, dont certaines sont listées ci-dessous.

Une première amélioration de notre travail pourrait porter sur un modèle thermomécanique utilisable quel que soit les combinaisons de paramètres matériaux de la matrice et du MCP solide. Pour cela, il faut prendre en compte la fissuration de la matrice sous l'influence du comportement réel du MCP liquide incompressible. Ceci impliquera une variation du comportement mécanique du composite en fonction de la température. De plus, la stratégie de changement d'échelle doit être adaptée pour ce cas général pour prendre en compte ce couplage.

A l'échelle des microcapsules de MCP, les interfaces MCP/enveloppe et enveloppe/matrice sont supposées parfaites dans les modèles mécaniques et thermiques développés. Il faudrait donc introduire des modèles d'interfaces imparfaites dans les simulations sur le VER afin d'évaluer leur influence sur le transfert de chaleur et la fissuration dans ces composites. Une analyse plus poussée serait nécessaire afin de déterminer le rôle de ces interfaces dans la cinétique de changement de phase dans les microcapsules et les échanges d'énergie thermique du composite.

Dans notre travail, les outils développés visent des applications dans le bâtiment, ce qui a poussé au choix des MCP les plus compatibles (voir Chapitre 1). Pour une extension aux

applications utilisant d'autres types de MCP dont les changements de volumes ne sont pas négligeables lors des changements de phase, il faut introduire un nouveau couplage thermomécanique lié aux déformations thermiques. Ces changements de volumes importants et récurrents peuvent causer de l'endommagement par fatigue dans la matrice du composite. Un modèle thermomécanique permettrait de simuler ce nouveau mécanisme d'endommagement dû aux cycles thermiques.

En raison de la séparation d'échelle, il est indispensable de mettre en place des stratégies multi échelles permettant de mener des calculs à l'échelle des applications réelles sans toutefois perdre trop d'informations à l'échelle des microcapsules de MCP. Cependant, les méthodes multi échelles concurrentes comme celles proposées au Chapitre 2 représentent un coût de calcul important pour chaque simulation à l'échelle macroscopique. Une alternative intéressante permettant d'éviter les aller-retours entre échelles serait d'évaluer la possible utilisation de stratégies multi échelles basées sur les sciences des données ("machine learning") [205, 206, 207].

Enfin des résultats expérimentaux pourraient être menés, combinant essais mécaniques in-situ, microtomographie et simulations pour valider les modèles d'endommagement par fissuration. Des essais expérimentaux pourraient également être menés pour évaluer les fuites de PCM liquide lors d'essais de compression de ces matériaux. Enfin, il serait crucial d'évaluer expérimentalement si les effets de la diffusion à long terme des PCM liquides dans les micro pores ont un effet sur les propriétés de résistance du matériau.

Les transitions d'échelles

A.1 Moyenne du gradient temperature

Considérons un VER en 2D composé de deux phases (voir Fig. A.1). Les deux phases occupent respectivement deux domaines Ω^1 et Ω^2 qui sont séparés par une interface Γ .

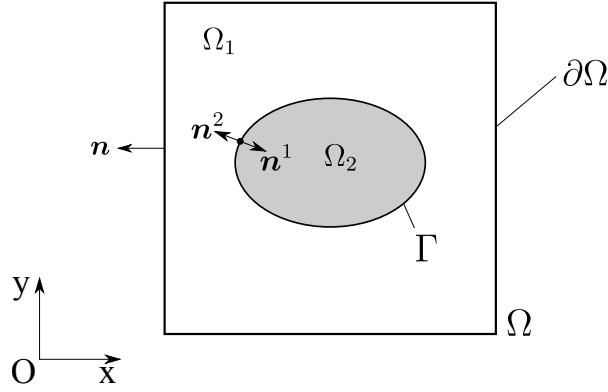


FIGURE A.1: Le VER avec deux phases.

\mathbf{n} est la normale sortante de la frontière. Les champs de température dans chaque domaine sont respectivement notés T^1 et T^2 . En utilisant le théorème de la divergence, la moyenne spatiale du gradient de température dans le domaine $\Omega = \Omega^1 \cup \Omega^2$ est donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \nabla T d\Omega &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} T^1 \mathbf{n} d\Gamma + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma} T^1 \mathbf{n}^1 d\Gamma + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma} T^2 \mathbf{n}^2 d\Gamma \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} T^1 \mathbf{n} d\Gamma + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma} (T^1 - T^2) \mathbf{n}^1 d\Gamma. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

En supposant des interfaces parfaites, $T^1 = T^2$ à travers Γ . EN utilisant la relation (2.28), on a :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \nabla T d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} T^1 \mathbf{n} d\Gamma = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \overline{\nabla T} \mathbf{x} \cdot \mathbf{n} d\Gamma. \quad (\text{A.2})$$

En appliquant le théorème de la divergence encore sur le dernier terme de (A.2) et en notant que $\nabla \mathbf{x} = \mathbf{1}$, on obtient finalement

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \nabla T d\Omega = \left(\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{1} d\Omega_m \right) \overline{\nabla T} = \overline{\nabla T}. \quad (\text{A.3})$$

A.2 Moyenne du flux de chaleur

Dans cette section, nous donnons la preuve de (2.33) qui exprime l'équivalence entre la moyenne spatiale du flux de chaleur dans le VER et le flux de chaleur à l'échelle macroscopique. Sachant que $\phi_{i,i} = 0$, on a :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\phi_i x_j) = (\phi_i x_j)_{,i} = \phi_{i,i} x_j + \phi_i (x_j)_{,i} = \phi_i \delta_{ij} = \phi_j. \quad (\text{A.4})$$

En utilisant (A.4) et le théorème de la divergence,

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \phi_j d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\phi_i x_j)_{,i} d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \phi_i n_i x_j d\Gamma. \quad (\text{A.5})$$

Considérons le VER de la Fig. A.1. ϕ^1 et ϕ^2 désignent respectivement le flux de chaleur dans Ω^1 et Ω^2 . On a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \phi_j d\Omega &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega^1} \phi_j^1 d\Omega + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega^2} \phi_j^2 d\Omega \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \phi_i^1 n_i x_j d\Gamma + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma} \phi_i^1 n_i^1 x_j d\Gamma - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma} \phi_i^2 n_i^2 x_j d\Gamma \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

En supposant les interfaces parfaites, $\phi^1 = \phi^2$ à travers Γ . (A.6) devient

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \phi_j d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \phi_i^1 n_i x_j d\Gamma. \quad (\text{A.7})$$

En utilisant les conditions aux limites de flux homogène exprimées par

$$\overline{\Phi} \cdot \mathbf{n} = \phi \cdot \mathbf{n} \quad \text{on } \partial\Omega, \quad (\text{A.8})$$

on a :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \phi_j d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \overline{\Phi}_i n_i x_j d\Gamma = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\overline{\Phi}_i x_j)_{,i} d\Omega = \overline{\Phi}_j. \quad (\text{A.9})$$

A.3 Lemme de Hill Mandel

Considérons un domaine Ω avec un champ de température T et un flux de chaleur ϕ . La condition de macro-homogénéité de Hill [208] s'écrit :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \nabla T \cdot \phi d\Omega = \overline{\nabla T} \cdot \overline{\Phi}. \quad (\text{A.10})$$

Bibliographie

- [1] D. Snoeck, B. Priem, P. Dubruel, and N. De Belie. Encapsulated phase-change materials as additives in cementitious materials to promote thermal comfort in concrete constructions. *Materials and Structures*, 49(1) :225–239, 2016. (Cit  en pages ix et 3.)
- [2] A. Abhat. Low temperature latent heat thermal energy storage : Heat storage materials. *Solar Energy*, 30(4) :313–332, 1983. (Cit  en pages ix, 4 et 5.)
- [3] R. Aaron, A. R. Sakulich, and D. P. Bentz. Increasing the service life of bridge decks by incorporating phase-change materials to reduce freeze-thaw cycles. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 24(8) :1034–1042, 2012. (Cit  en pages ix, 9 et 10.)
- [4] L. F. Cabeza, C. Castell n, M. Nogu s, M. Medrano, R. Leppers, and O. Zubillaga. Use of microencapsulated PCM in concrete walls for energy savings. *Energy and Buildings*, 39(2) :113 – 119, 2007. (Cit  en pages ix et 11.)
- [5] I.  zdemir, W. A. M. Brekelmans, and M. G. D. Geers. Computational homogenization for heat conduction in heterogeneous solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 73(2) :185–204, 2008. (Cit  en pages ix, 14, 26 et 41.)
- [6] P.-O. Bouchard, F. Bay, and Y. Chastel. Numerical modelling of crack propagation : automatic remeshing and comparison of different criteria. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 192(35-36) :3887–3908, 2003. (Cit  en pages ix et 15.)
- [7] R. Krueger. Virtual crack closure technique : history, approach, and applications. *Applied Mechanics Reviews*, 57(2) :109–143, 2004. (Cit  en pages ix et 19.)
- [8] N. Mo s, C. Stolz, P.-E. Bernard, and N. Chevaugeon. A level set based model for damage growth : The thick level set approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 86(3) :358–380, 2011. (Cit  en pages ix, 20 et 21.)
- [9] S. Yogaraj. *An embedded interface finite element method for fluid-structure-fracture interaction*. PhD thesis, Technische Universit t M nchen, 2015. (Cit  en pages ix et 22.)
- [10] A. Trigui, M. Karkri, C. Boudaya, Y. Candau, L. Ibos, and M. Fois. Experimental investigation of a composite phase change material : Thermal-energy storage and release. *Journal of Composite Materials*, 48(1) :49–62, 2014. (Cit  en pages xi et 64.)
- [11] P. Sochala. *M thodes num riques pour les  coulements souterrains et couplage avec le ruissellement*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chauss es, 2008. (Cit  en pages xiii et 107.)
- [12] H. C. Vu Do. *Numerical methods for flow and transport in porous media*. PhD thesis, Universit  Paris Sud-Paris XI, 2014. (Cit  en pages xiii, 115 et 116.)
- [13] V. V. Tyagi and D. Buddhi. PCM thermal storage in buildings : A state of art. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 11(6) :1146 – 1166, 2007. (Cit  en pages xv et 6.)

- [14] M. Kenisarin and K. Mahkamov. Solar energy storage using phase change materials. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 11(9) :1913–1965, 2007. (Cité en pages 2 et 49.)
- [15] M. Karkri, M. Lachheb, Z. Nógellová, B. Boh, B. Sumiga, M.A. AlMaadeed, A. Fethi, and I. Krupa. Thermal properties of phase-change materials based on high-density polyethylene filled with micro-encapsulated paraffin wax for thermal energy storage. *Energy and Buildings*, 88 :144–152, 2015. (Cité en pages 2 et 6.)
- [16] M. Aadmi, Mu. Karkri, and M. El Hammouti. Heat transfer characteristics of thermal energy storage of a composite phase change materials : Numerical and experimental investigations. *Energy*, 72 :381 – 392, 2014. (Cité en pages 2, 3, 6, 26, 28 et 72.)
- [17] M. Karkri, M. Lachheb, F. Albouchi, S. B. Nasrallah , and I. Krupa. Thermal properties of smart microencapsulated paraffin/plaster composites for the thermal regulation of buildings. *Energy and Buildings*, 88 :183–192, 2015. (Cité en pages 2, 3, 6 et 9.)
- [18] D.W. Hawes and D. Feldman. Special issue on heat storage materials absorption of phase change materials in concrete. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 27(2) :91 – 101, 1992. (Cité en pages 3 et 9.)
- [19] D.W. Hawes, D. Banu, and D. Feldman. The stability of phase change materials in concrete. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 27(2) :103 – 118, 1992. Special Issue on Heat Storage Materials. (Cité en pages 3 et 9.)
- [20] K. A. R. Ismail and J. N. C. Castro. PCM thermal insulation in buildings. *International Journal of Energy Research*, 21(14) :1281–1296, 1997. (Cité en page 3.)
- [21] X. Wang, Y. Zhang, W. Xiao, R. Zeng, Q. Zhang, and H. Di. Review on thermal performance of phase change energy storage building envelope. *Chinese Science Bulletin*, 54(6) :920–928, 2009. (Cité en pages 3 et 9.)
- [22] T.T. Nguyen, J. Yvonnet, Q.-Z. Zhu, M. Bornert, and C. Chateau. A phase field method to simulate crack nucleation and propagation in strongly heterogeneous materials from direct imaging of their microstructure. *Engineering Fracture Mechanics*, 139 :18–39, 2015. (Cité en pages 3, 21, 81, 83 et 85.)
- [23] J. Schroder and K. Gawron. Latent heat storage. *Energy Res*, 5 :103–9, 1981. (Cité en page 4.)
- [24] J. Huang, S. Lu, X. Kong, S. Liu, and Y. Li. Form-stable phase change materials based on eutectic mixture of tetradecanol and fatty acids for building energy storage : Preparation and performance analysis. *Materials*, 6 :4758–4775, 2013. (Cité en page 5.)
- [25] A. Abhat. Short term thermal energy storage. *Revue Physique appliquée*, 5 :477–501, 1980. (Cité en page 7.)
- [26] Amar M. Khudhair and Mohammed M. Farid. A review on energy conservation in building applications with thermal storage by latent heat using phase change materials. *Energy Conversion and Management*, 45(2) :263 – 275, 2004. (Cité en page 7.)

- [27] R. Velraj, R.V. Seeniraj, B. Hafner, C. Faber, and K. Schwarzer. Experimental analysis and numerical modelling of inward solidification on a finned vertical tube for a latent heat storage unit. *Solar Energy*, 60(5) :281 – 290, 1997. (Cité en page 8.)
- [28] R. V. Seeniraj, R. Velraj, and N. Lakshmi Narasimhan. Thermal analysis of a finned-tube lhts module for a solar dynamic power system. *Heat and Mass Transfer*, 38(4-5) :409–417, 2002. (Cité en page 8.)
- [29] Z. Li and Z.-G. Wu. Analysis of htfs, PCMs and fins effects on the thermal performance of shell–tube thermal energy storage units. *Solar Energy*, 122 :382 – 395, 2015. (Cité en page 8.)
- [30] J. Eftekhari, A. Haji-Sheikh, and D. Y. S. Lou. Heat transfer enhancement in a paraffin wax thermal storage system. *Journal of Solar Energy Engineering*, 106(3) :299–306, 1984. (Cité en page 8.)
- [31] A. M. Tayeb. Use of some industrial wastes as energy storage media. *Energy Conversion and Management*, 37(2) :127 – 133, 1996. (Cité en page 8.)
- [32] L.F. Cabeza, H. Mehling, S. Hiebler, and F. Ziegler. Heat transfer enhancement in water when used as PCM in thermal energy storage. *Applied Thermal Engineering*, 22(10) :1141 – 1151, 2002. (Cité en page 8.)
- [33] K.A.R Ismail, C.L.F Alves, and M.S. Modesto. Numerical and experimental study on the solidification of PCM around a vertical axially finned isothermal cylinder. *Applied Thermal Engineering*, 21(1) :53 – 77, 2001. (Cité en pages 8 et 9.)
- [34] M. Xiao, B. Feng, and K. Gong. Thermal performance of a high conductive shape-stabilized thermal storage material. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 69(3) :293 – 296, 2001. (Cité en page 8.)
- [35] Y. Tian and C.Y. Zhao. A numerical investigation of heat transfer in phase change materials (PCMs) embedded in porous metals. *Energy*, 36(9) :5539–5546, 2011. (Cité en page 8.)
- [36] S. F. Hosseinzadeh, A. A. Rabienataj Darzi, and F.L. Tan. Numerical investigations of unconstrained melting of nano-enhanced phase change material (PCM) inside a spherical container. *International Journal of Thermal Sciences*, 51 :77–83, 2012. (Cité en page 8.)
- [37] M. Aguayo, S. Das, C. Castro, N. Kabay, G. Sant, and N. Neithalath. Porous inclusions as hosts for phase change materials in cementitious composites : Characterization, thermal performance, and analytical models. *Construction and Building Materials*, 134 :574 – 584, 2017. (Cité en page 8.)
- [38] T. Mori and K. Tanaka. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21(5) :571 – 574, 1973. (Cité en page 8.)
- [39] S. N. AL-Saadi and Z. Zhai. Modeling phase change materials embedded in building enclosure : A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 21 :659 – 673, 2013. (Cité en page 9.)

- [40] I. O. Salyer and A. K. Sircar. Phase change materials for heating and cooling of residential buildings and other applications. *Proceedings of the 25th Intersociety Energy Conversion Engineering Conference*, 4(4) :236–243, 1990. (Cité en page 9.)
- [41] D. Feldman, D. Banu, and D. Hawes. Low chain esters of stearic acid as phase change materials for thermal energy storage in buildings. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 36(3) :311 – 322, 1995. (Cité en page 9.)
- [42] D. Feldman and D. Banu. DSC analysis for the evaluation of an energy storing wallboard. *Thermochimica Acta*, 272 :243 – 251, 1996. *Advances in International Thermal Sciences : Environment, Polymers, Energy and Techniques*. (Cité en page 9.)
- [43] D. Zhou, C.Y. Zhao, and Y. Tian. Review on thermal energy storage with phase change materials (PCMs) in building applications. *Applied Energy*, 92 :593–605, 2012. (Cité en pages 9 et 10.)
- [44] R. Baetens, B. P. Jelle, and A. Gustavsen. Phase change materials for building applications : A state-of-the-art review. *Energy and Buildings*, 42(9) :1361–1368, 2010. (Cité en page 9.)
- [45] D. P. Bentz and R. Turpin. Potential applications of phase change materials in concrete technology. *Cement and Concrete Composites*, 29(7) :527–532, 2007. (Cité en page 10.)
- [46] C. Castellón. *Use of microencapsulated phase change materials in building applications*. PhD thesis, University of Lleida, Spain, 2007. (Cité en page 10.)
- [47] C. Castellón, M. Medrano, J. Roca, L. F. Cabeza, M. E. Navarro, A. I. Fernández, A. Lázaro, and B. Zalba. Effect of microencapsulated phase change material in sandwich panels. *Renewable Energy*, 35(10) :2370–2374, 2010. (Cité en page 10.)
- [48] M. Fenollera, J. L. Míguez, I. Goicoechea, J. Lorenzo, and M. Á. Álvarez. The influence of phase change materials on the properties of self-compacting concrete. *Materials*, 6(8) :3530–3546, 2013. (Cité en page 10.)
- [49] M. Delgado, A. Lázaro, J. Mazo, J. M. Marín, and B. Zalba. Experimental analysis of a microencapsulated PCM slurry as thermal storage system and as heat transfer fluid in laminar flow. *Applied Thermal Engineering*, 36 :370–377, 2012. (Cité en page 11.)
- [50] R. Leppers. Development of smart microencapsulated organic phase-change-materials for enhancing heat storage capacities of concrete, wp4 : design and construction of concrete (concrete compositions). *Intron report R20040092*, 2005. (Cité en page 11.)
- [51] M.N.A. Hawlader, M.S. Uddin, and M. M. Khin. Microencapsulated PCM thermal-energy storage system. *Applied Energy*, 74(1) :195 – 202, 2003. (Cité en page 11.)
- [52] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids : Some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(5) :357 – 372, 1963. (Cité en page 12.)
- [53] I. M. Gitman, H. Askes, and L. J. Sluys. Representative volume : existence and size determination. *Engineering fracture mechanics*, 74(16) :2518–2534, 2007. (Cité en page 12.)

- [54] T. H. Hoang, M. Guerich, and J. Yvonnet. Determining the size of rve for nonlinear random composites in an incremental computational homogenization framework. *Journal of Engineering Mechanics*, 142(5) :04016018, 2016. (Cité en page 12.)
- [55] M. Stroeven, H. Askes, and L. J. Sluys. Numerical determination of representative volumes for granular materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(30-32) :3221–3238, 2004. (Cité en page 12.)
- [56] M. Thomas, N. Boyard, L. Perez, Y. Jarny, and D. Delaunay. Representative volume element of anisotropic unidirectional carbon–epoxy composite with high-fibre volume fraction. *Composites Science and Technology*, 68(15-16) :3184–3192, 2008. (Cité en page 13.)
- [57] R. Hill. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(2) :89–101, 1965. (Cité en page 13.)
- [58] J. R. Willis. The overall elastic response of composite materials. *Journal of applied mechanics*, 50(4b) :1202–1209, 1983. (Cité en page 13.)
- [59] G. J. Dvorak. Transformation field analysis of inelastic composite materials. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 437(1900) :311–327, 1992. (Cité en page 13.)
- [60] Y. P. Qiu and G. J. Weng. A theory of plasticity for porous materials and particle-reinforced composites. *Journal of Applied Mechanics*, 59(2) :261–268, 1992. (Cité en page 13.)
- [61] G. Hu. A method of plasticity for general aligned spheroidal void or fiber-reinforced composites. *International Journal of Plasticity*, 12(4) :439–449, 1996. (Cité en page 13.)
- [62] G. W. Milton and S. K. Serkov. Bounding the current in nonlinear conducting composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(6-7) :1295–1324, 2000. (Cité en page 13.)
- [63] Q-C. He. Uniform strain fields and microstructure-independent relations in nonlinear elastic fibrous composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47(8) :1781–1793, 1999. (Cité en page 13.)
- [64] Q-C. He and B. Bary. Exact relations for the effective properties of nonlinearly elastic inhomogeneous materials. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2(1), 2004. (Cité en page 13.)
- [65] Q-C. He, H. Le Quang, and Z-Q. Feng. Exact results for the homogenization of elastic fiber-reinforced solids at finite strain. *Journal of Elasticity*, 83(2) :153–177, 2006. (Cité en page 13.)
- [66] D. F. Adams and D. R. Doner . Transverse normal loading of a unidirectional composite. *Journal of composite Materials*, 1(2) :152–164, 1967. (Cité en page 13.)
- [67] P. Suquet. Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. e. sanchez-palencia et a. zaoui, éditeurs, homogenization techniques for composite media, volume 272 de lecture notes in physics, 193–278, 1985. (Cité en page 13.)

- [68] F. Feyel. Multiscale FE^2 elastoviscoplastic analysis of composite structure. *Comput. Mater. Sci.*, 16(1-4) :433–454, 1999. (Cité en pages 13 et 26.)
- [69] I. Ozdemir, W. A. M. Brekelmans, and M. G. D. Geers. computational homogenization for the thermo-mechanical analysis of heterogeneous solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(3–4) :602 – 613, 2008. (Cité en pages 13 et 14.)
- [70] V. Kouznetsova, M. G. D. Geers, and W. A. M. Brekelmans. Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 54(8) :1235–1260, 2002. (Cité en pages 13, 14 et 26.)
- [71] P. Ponte Castañeda and E. Galipeau. Homogenization-based constitutive models for magnetorheological elastomers at finite strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(2) :194 – 215, 2011. (Cité en page 13.)
- [72] X. Markenscoff and C. Dascalu. Asymptotic homogenization analysis for damage amplification due to singular interaction of micro-cracks. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 60(8) :1478 – 1485, 2012. (Cité en page 13.)
- [73] I. Doghri and C. Friebel. Effective elasto-plastic properties of inclusion-reinforced composites. study of shape, orientation and cyclic response. *Mechanics of Materials*, 37(1) :45 – 68, 2005. (Cité en page 14.)
- [74] S. Ghosh, K. Lee, and S. Moorthy. Two scale analysis of heterogeneous elastic-plastic materials with asymptotic homogenization and voronoi cell finite element model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 132(1) :63 – 116, 1996. (Cité en page 14.)
- [75] R.J.M. Smit, W.A.M. Brekelmans, and H.E.H. Meijer. Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155(1) :181 – 192, 1998. (Cité en page 14.)
- [76] Kenjiro Terada, Muneo Hori, Takashi Kyoya, and Noboru Kikuchi. Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches. *International Journal of Solids and Structures*, 37(16) :2285 – 2311, 2000. (Cité en page 14.)
- [77] V. Kouznetsova, W. A. M. Brekelmans, and F. P. T. Baaijens. An approach to micro-macro modeling of heterogeneous materials. *Computational Mechanics*, 27(1) :37–48, Jan 2001. (Cité en page 14.)
- [78] C. Miehe and A. Koch. Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures undergoing small strains. *Archive of Applied Mechanics*, 72(4) :300–317, Jul 2002. (Cité en page 14.)
- [79] M.G.D. Geers, V.G. Kouznetsova, and W.A.M. Brekelmans. Gradient-enhanced computational homogenization for the micro-macro scale transition. *Journal de Physique IV, Colloque*, 11(5) :145–152, 2001. (Cité en page 14.)

- [80] Ł. Kaczmarczyk, C. J. Pearce, and N. Bićanić. Scale transition and enforcement of rve boundary conditions in second-order computational homogenization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 74(3) :506–522, 2008. (Cité en page 14.)
- [81] Andrea Bacigalupo and Luigi Gambarotta. Non-local computational homogenization of periodic masonry. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 9(5) :565–578, 2011. (Cité en page 14.)
- [82] Łukasz Kaczmarczyk, Chris J. Pearce, and Nenad Bićanić. Studies of microstructural size effect and higher-order deformation in second-order computational homogenization. *Computers & Structures*, 88(23) :1383 – 1390, 2010. (Cité en page 14.)
- [83] Y. Cong, S. Nezamabadi, H. Zahrouni, and J. Yvonnet. Multiscale computational homogenization of heterogeneous shells at small strains with extensions to finite displacements and buckling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 104(4) :235–259, 2015. (Cité en page 14.)
- [84] L. De Lorenzis and P. Wriggers. Computational homogenization of rubber friction on rough rigid surfaces. *Computational Materials Science*, 77 :264 – 280, 2013. (Cité en page 14.)
- [85] Í Temizer. Multiscale thermomechanical contact : Computational homogenization with isogeometric analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 97(8) :582–607, 2013. (Cité en page 14.)
- [86] M. G. D. Geers, V. G. Kouznetsova, and W. A. M. Brekelmans. Multi-scale computational homogenization : Trends and challenges. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 234(7) :2175 – 2182, 2010. (Cité en page 14.)
- [87] H.W. Zhang, S. Zhang, J.Y. Bi, and B.A. Schrefler. Thermo-mechanical analysis of periodic multiphase materials by a multiscale asymptotic homogenization approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69(1) :87–113, 2007. (Cité en page 14.)
- [88] M. H. Aliabadi. A new generation of boundary element methods in fracture mechanics. *International Journal of Fracture*, 86(1-2) :91–125, 1997. (Cité en page 15.)
- [89] T. A. Cruse. *Boundary element analysis in computational fracture mechanics*, volume 1. Springer Science & Business Media, 2012. (Cité en page 15.)
- [90] T. Belytschko, L. Gu, and Y. Y. Lu. Fracture and crack growth by element free galerkin methods. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2(3A) :519, 1994. (Cité en page 15.)
- [91] M. R. Tabbara and C. M. Stone. A computational method for quasi-static fracture. *Computational Mechanics*, 22(2) :203–210, 1998. (Cité en page 15.)
- [92] Y. Chen, A. Eskandarian, M. Oskard, and J. D. Lee. Meshless analysis of plasticity with application to crack growth problems. *theoretical and Applied fracture Mechanics*, 41(1-3) :83–94, 2004. (Cité en page 15.)

- [93] T. Rabczuk. Computational methods for fracture in brittle and quasi-brittle solids : state-of-the-art review and future perspectives. *ISRN Applied Mathematics*, 2013, 2013. (Cité en page 15.)
- [94] Houman Borouchaki, Abdelhakim Cherouat, Patrick Laug, and Khemais Saanouni. Adaptive remeshing for ductile fracture prediction in metal forming. *Comptes Rendus Mécanique*, 330(10) :709 – 716, 2002. (Cité en page 15.)
- [95] H. Azadi and A. R. Khoei. Numerical simulation of multiple crack growth in brittle materials with adaptive remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 85(8) :1017–1048, 2011. (Cité en page 15.)
- [96] C. Koenke, R. Harte, W.B. Krätzig, and O. Rosenstein. On adaptive remeshing techniques for crack simulation problems. *Engineering Computations*, 15(1) :74–88, 1998. (Cité en page 15.)
- [97] R. Branco, F.V. Antunes, and J.D. Costa. A review on 3D-FE adaptive remeshing techniques for crack growth modelling. *Engineering Fracture Mechanics*, 141 :170 – 195, 2015. (Cité en page 15.)
- [98] Z. P. Bažant and B. H. Oh. Crack band theory for fracture of concrete. *Matériaux et construction*, 16(3) :155–177, 1983. (Cité en page 16.)
- [99] M. Jirasek and P. Grassl. Evaluation of directional mesh bias in concrete fracture simulations using continuum damage models. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(8) :1921–1943, 2008. (Cité en page 16.)
- [100] M. Cervera and M. Chiumenti. Mesh objective tensile cracking via a local continuum damage model and a crack tracking technique. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(1-3) :304–320, 2006. (Cité en page 16.)
- [101] M. Cervera and M. Chiumenti. Smearred crack approach : back to the original track. *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics*, 30(12) :1173–1199, 2006. (Cité en page 16.)
- [102] Paul Steinmann and Kaspar Willam. Performance of enhanced finite element formulations in localized failure computations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 90(1-3) :845–867, 1991. (Cité en page 16.)
- [103] M Cervera, M Chiumenti, and R Codina. Mixed stabilized finite element methods in nonlinear solid mechanics : Part ii : Strain localization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(37-40) :2571–2589, 2010. (Cité en page 16.)
- [104] O. Allix and J-F. Deü. Delayed-damage modelling for fracture prediction of laminated composites under dynamic loading. *Engineering transactions*, 45(1) :29–46, 1997. (Cité en page 16.)
- [105] G. Pijaudier-Cabot and Z. P. Bažant. Nonlocal damage theory. *Journal of engineering mechanics*, 113(10) :1512–1533, 1987. (Cité en page 16.)

- [106] R. H. J. Peerlings. *Enhanced damage modelling for fracture and fatigue*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 1999. (Cité en page 17.)
- [107] R. H. J. Peerlings, R. De Borst, W. A. M. Brekelmans, and J.H.P. De Vree. Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials. *International Journal for numerical methods in engineering*, 39(19) :3391–3403, 1996. (Cité en page 17.)
- [108] David Lasry and Ted Belytschko. Localization limiters in transient problems. *International Journal of Solids and Structures*, 24(6) :581–597, 1988. (Cité en page 17.)
- [109] H. Askes and L. J. Sluys. Explicit and implicit gradient series in damage mechanics. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 21(3) :379–390, 2002. (Cité en page 17.)
- [110] G. I. Barenblatt. The formation of equilibrium cracks during brittle fracture. general ideas and hypotheses. axially-symmetric cracks. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 23(3) :622 – 636, 1959. (Cité en page 18.)
- [111] D. S. Dugdale. Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8(2) :100 – 104, 1960. (Cité en page 18.)
- [112] A. Hillerborg, M. Modéer, and P.-E. Petersson. Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. *Cement and Concrete Research*, 6(6) :773 – 781, 1976. (Cité en page 18.)
- [113] G. T. Camacho and M. Ortiz. Computational modelling of impact damage in brittle materials. *International Journal of Solids and Structures*, 33(20) :2899 – 2938, 1996. (Cité en page 18.)
- [114] M. Ortiz and A. Pandolfi. Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(9) :1267–1282, 1999. (Cité en page 18.)
- [115] N. Chandra, H. Li, C. Shet, and H. Ghonem. Some issues in the application of cohesive zone models for metal–ceramic interfaces. *International Journal of Solids and Structures*, 39(10) :2827 – 2855, 2002. (Cité en page 19.)
- [116] N. Moës, J. Dolbow, and T. Belytschko. A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46(1) :131–150, 1999. (Cité en page 19.)
- [117] T. Belytschko and T. Black. Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(5) :601–620, 1999. (Cité en page 19.)
- [118] T.-P.Fries and T. Belytschko. The extended/generalized finite element method : An overview of the method and its applications. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84(3) :253–304, 2010. (Cité en page 19.)
- [119] I. Babuška and J. M. Melenk. The partition of unity method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40(4) :727–758, 1997. (Cité en page 19.)

- [120] N. Moës, M. Cloirec, P. Cartraud, and J.-F. Remacle. A computational approach to handle complex microstructure geometries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28–30) :3163 – 3177, 2003. Multiscale Computational Mechanics for Materials and Structures. (Cité en page 20.)
- [121] T.-P.Fries. A corrected xfem approximation without problems in blending elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 75(5) :503–532, 2008. (Cité en page 20.)
- [122] K. Shibanuma and T. Utsunomiya. Reformulation of XFEM based on PUFEM for solving problem caused by blending elements. *Finite Elements in Analysis and Design*, 45(11) :806 – 816, 2009. (Cité en page 20.)
- [123] A. B. Tran. *Développement de méthodes numériques multi échelle pour le calcul des structures constituées de matériaux fortement hétérogènes élastiques et viscoélastiques*. PhD thesis, Université Paris-Est, 2011. (Cité en page 20.)
- [124] B.L. Karihaloo and Q.Z. Xiao. Modelling of stationary and growing cracks in FE framework without remeshing : a state-of-the-art review. *Computers and Structures*, 81(3) :119–129, 2003. (Cité en page 20.)
- [125] C. Daux, N. Moës, J Dolbow, N. Sukumar, and T. Belytschko. Arbitrary branched and intersecting cracks with the extended finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48(12) :1741–1760, 2000. (Cité en page 20.)
- [126] S. Osher and R. P. Fedkiw. Level set methods : An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :463–502, 2001. (Cité en page 20.)
- [127] G. A. Francfort and J.-J. Marigo. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(8) :1319 – 1342, 1998. (Cité en pages 21, 79, 80 et 81.)
- [128] Moelans, Bart Blanpain, and Patrick Wollants. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution. *Calphad*, 32(2) :268–294, 2008. (Cité en page 21.)
- [129] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, and A. Karma. Phase field simulation of solidification. *Annual Review of Materials Research*, 32(1) :163–194, 2002. (Cité en page 21.)
- [130] L.-Q. Chen. Phase-field models for microstructure evolution. *Annual Review of Materials Research*, 32(1) :113–140, 2002. (Cité en page 21.)
- [131] Long Qing Chen and Wei Yang. Computer simulation of the domain dynamics of a quenched system with a large number of nonconserved order parameters : The grain-growth kinetics. *Physical Review B*, 50(21) :15752–15756, 1994. (Cité en page 21.)
- [132] Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitino, and A. G. Khachaturyan. Phase field microelasticity theory and modeling of multiple dislocation dynamics. *Applied Physics Letters*, 78(16) :2324–2326, 2001. (Cité en page 21.)

- [133] Q. Du, C. Liu, and X. Wang. A phase field approach in the numerical study of the elastic bending energy for vesicle membranes. *Journal of Computational Physics*, 198(2) :450–468, 2004. (Cité en page 21.)
- [134] T. Biben, K. Kassner, and C. Misbah. Phase-field approach to three-dimensional vesicle dynamics. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 72(4) :1–15, 2005. (Cité en page 21.)
- [135] Hervé Henry and Herbert Levine. Dynamic instabilities of fracture under biaxial strain using a phase field model. *Physical Review Letters*, 93(10) :3–6, 2004. (Cité en page 21.)
- [136] T. J. Boone and A. R. Ingraffea. A numerical procedure for simulation of hydraulically-driven fracture propagation in poroelastic media. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 14(1) :27–47, 1990. (Cité en page 22.)
- [137] D. Garagash and E. Detournay. The tip region of a fluid-driven fracture in an elastic medium. *Journal of applied mechanics*, 67(1) :183–192, 2000. (Cité en page 22.)
- [138] E. Detournay. Propagation regimes of fluid-driven fractures in impermeable rocks. *International Journal of Geomechanics*, 4(1) :35–45, 2004. (Cité en page 22.)
- [139] B. Lecampion and E. Detournay. An implicit algorithm for the propagation of a hydraulic fracture with a fluid lag. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(49-52) :4863–4880, 2007. (Cité en page 22.)
- [140] Thomas Wick. Coupling fluid–structure interaction with phase-field fracture. *Journal of Computational Physics*, 327 :67 – 96, 2016. (Cité en page 22.)
- [141] A. Mikelić, M. F. Wheeler, and T. Wick. Phase-field modeling of a fluid-driven fracture in a poroelastic medium. *Computational Geosciences*, 19(6) :1171–1195, Dec 2015. (Cité en page 22.)
- [142] L. Xia, J. Yvonnet, and S. Ghabezloo. Phase field modeling of hydraulic fracturing with interfacial damage in highly heterogeneous fluid-saturated porous media. *Engineering Fracture Mechanics*, 186 :158–180, 2017. (Cité en pages 22 et 110.)
- [143] B. A. Schrefler, S. Secchi, and L. Simoni. On adaptive refinement techniques in multi-field problems including cohesive fracture. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 195(4-6) :444–461, 2006. (Cité en page 23.)
- [144] S. Secchi and B. A. Schrefler. A method for 3-d hydraulic fracturing simulation. *International journal of fracture*, 178(1-2) :245–258, 2012. (Cité en page 23.)
- [145] B. Damjanac, C. Detournay, and P. A. Cundall. Application of particle and lattice codes to simulation of hydraulic fracturing. *Computational Particle Mechanics*, 3(2) :249–261, 2016. (Cité en page 23.)
- [146] M. Nikolic, A. Ibrahimbegovic, and P. Miscevic. Discrete element model for the analysis of fluid-saturated fractured poro-plastic medium based on sharp crack representation with embedded strong discontinuities. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 298 :407–427, 2016. (Cité en page 23.)

- [147] R. De Borst, J. Réthoré, and M.-A. Abellan. A numerical approach for arbitrary cracks in a fluid-saturated medium. *Archive of Applied Mechanics*, 75(10-12) :595–606, 2006. (Cité en page 23.)
- [148] F. Irzal, J. J. C. Remmers, J. M. Huyghe, and R. De Borst. A large deformation formulation for fluid flow in a progressively fracturing porous material. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 256 :29–37, 2013. (Cité en page 23.)
- [149] J. Renard and M.F. Marmonier. Etude de l’initiation de l’endommagement dans la matrice d’un matériau composite par une méthode d’homogénéisation. *Aerospace Science and Technology*, 9 :36–51, 1987. (Cité en page 26.)
- [150] K. Terada and N. Kikuchi. A class of general algorithms for multi-scale analysis of heterogeneous media. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 190 :5427–5464, 2001. (Cité en page 26.)
- [151] M.G.D. Geers and J. Yvonnet. Multiscale modeling of microstructure-property relations. *MRS Bull.*, 41(08) :610–616, 2016. (Cité en page 26.)
- [152] M.R. Kabir, L. Chernova, and M. Bartsch. Numerical investigation of room-temperature deformation behavior of a duplex type γ tial alloy using a multi-scale modeling approach. *Acta Materialia*, 58(17) :5834 – 5847, 2010. (Cité en page 26.)
- [153] K.-M. Kodjo, J. Yvonnet, M. Karkri, and K. Sab. Multiscale modeling of the thermomechanical behavior in heterogeneous media embedding phase change materials particles. *Journal of Computational Physics*, 378 :303 – 323, 2019. (Cité en page 26.)
- [154] A. Joulin, Z. Younsi, L. Zalewski, S. Lassue, D. R. Rousse, and J.-P. Cavrot. Experimental and numerical investigation of a phase change material : Thermal energy storage and release. *Applied Energy*, 88(7) :2454 – 2462, 2011. (Cité en page 27.)
- [155] R. Viswanath and Y. Jaluria. A comparison of different solution methodologies for melting and solidification problems in enclosures. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 24(1) :77–105, 1993. (Cité en page 28.)
- [156] B. Rubinsky and E. G. Cravahlo. A finite element method for the solution of one-dimensional phase change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24(12) :1987 – 1989, 1981. (Cité en page 29.)
- [157] Y. Ding, J. A. Gear, and K. N. Tran. A finite element modeling of thermal conductivity of fabrics embedded with phase change material. In *Proceedings of the 8th Biennial Engineering Mathematics and Applications Conference, EMAC-2007*, volume 49 of *ANZIAM J.*, pages C439–C456, 2008. (Cité en page 29.)
- [158] Y. Zhong, Q. Guo, S. Li, J. Shi, and L. Liu. Heat transfer enhancement of paraffin wax using graphite foam for thermal energy storage. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(6) :1011 – 1014, 2010. (Cité en page 55.)
- [159] S. Pilehvar, V. D. Cao, A. M. Szczotok, L. Valentini, D. Salvioni, M. Magistri, R. Pamiés, and A.-L. Kjøniksen. Mechanical properties and microscale changes of geopolymer

- concrete and portland cement concrete containing micro-encapsulated phase change materials. *Cement and Concrete Research*, 100 :341 – 349, 2017. (Cité en page 59.)
- [160] Fiji. <http://www.fiji.sc/Fiji>. (Cité en page 59.)
- [161] Thermoconcept. HOT DISK TPS appareil de mesure de la conductivité thermique des matériaux solides, liquides, pulvérulents et pâteux. <https://www.thermoconcept-sarl.com/conductivite-thermique/hot-disk-appareil-de-mesure-de-la-conductivite-thermique>, 2018. (Cité en page 65.)
- [162] S.E. Gustafsson. Transient plane source (TPS) technique for thermal conductivity and thermal diffusivity measurements of solid materials. *Review of Scientific Instruments*, 62(3) :797–804, 1991. (Cité en page 65.)
- [163] S.E. Gustafsson and T. Long. Transient plane source (TPS) technique for measuring thermal properties of building materials. *Fire and Material*, 19 :43–49, 1995. (Cité en page 65.)
- [164] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40(13-14) :3647–3679, 2003. (Cité en page 68.)
- [165] J. Fish and T. Belytschko. *Finite Element Formulation for Multidimensional Scalar Field Problems*, chapter 8, pages 189–213. Wiley-Blackwell, 2007. (Cité en page 68.)
- [166] P. Causin, J. F. Gerbeau, and F. Nobile. Added-mass effect in the design of partitioned algorithms for fluid-structure problems. *Applied Mechanics and Engineering*, 194(42-44) :4506–4527, 2005. (Cité en page 78.)
- [167] M. Buliga. Energy minimizing brittle crack propagation. *Journal of Elasticity*, 52(3) :201, 1998. (Cité en page 79.)
- [168] B. Bourdin, G. A. Francfort, and J.-J. Marigo. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(4) :797–826, 2000. (Cité en page 79.)
- [169] B. Bourdin, G. A. Francfort, and J.-J. Marigo. The variational approach to fracture. *Journal of elasticity*, 91(1-3) :5–148, 2008. (Cité en page 79.)
- [170] H. Amor, J.-J. Marigo, and C. Maurini. Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact : Numerical experiments. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(8) :1209–1229, 2009. (Cité en page 79.)
- [171] D. Mumford and J. Shah. Optimal approximations by piecewise smooth functions and associated variational problems. *Communications on pure and applied mathematics*, 42(5) :577–685, 1989. (Cité en page 79.)

- [172] L. Ambrosio and V. M. Tortorelli. Approximation of functional depending on jumps by elliptic functional via t -convergence. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 43(8) :999–1036, 1990. (Cité en page 79.)
- [173] L. Ambrosio and V. M. Tortorelli. On the approximation of free discontinuity problems. *Bollettino dell'unione matematica italiana. B*, 6(1) :105–123, 1992. (Cité en page 79.)
- [174] A. Braides. *Approximation of free-discontinuity problems*. Number 1694. Springer Science & Business Media, 1998. (Cité en page 79.)
- [175] A. Braides. *Gamma-convergence for Beginners*, volume 22. Clarendon Press, 2002. (Cité en page 79.)
- [176] G. Dal Maso. *An introduction to Γ -convergence*, volume 8. Springer Science & Business Media, 2012. (Cité en page 79.)
- [177] C. Miehe, M. Hofacker, and F. Welschinger. A phase field model for rate-independent crack propagation : Robust algorithmic implementation based on operator splits. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(45-48) :2765–2778, 2010. (Cité en pages 79, 81 et 83.)
- [178] C. Miehe, L.-M. Schaezel, and H. Ulmer. Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. part i. balance of crack surface and failure criteria for brittle crack propagation in thermo-elastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 294 :449–485, 2015. (Cité en page 79.)
- [179] C. Miehe and M. Lambrecht. Algorithms for computation of stresses and elasticity moduli in terms of seth–hill’s family of generalized strain tensors. *Communications in numerical methods in engineering*, 17(5) :337–353, 2001. (Cité en page 81.)
- [180] Franco Brezzi and Michel Fortin. *Mixed and hybrid finite element methods*, volume 15. Springer Science & Business Media, 2012. (Cité en page 88.)
- [181] Daniele Boffi. Stability of higher order triangular hood-taylor methods for the stationary stokes equations. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 4(02) :223–235, 1994. (Cité en page 88.)
- [182] J. Donea and A. Huerta. *Finite Element Methods for flow problems*. John Wiley & Sons, Ltd., 2003. (Cité en pages 88, 89 et 91.)
- [183] W. Layton and W. Lenferink. Two-level picard and modified picard methods for the navier-stokes equations. *Applied Mathematics and Computation*, 69(2-3) :263–274, 1995. (Cité en page 89.)
- [184] C. Cuvelier, A. Segal, G. Segal, A. A. van Steenhoven, and A. van Steenhoven. *Finite element methods and Navier-Stokes equations*, volume 22. Springer Science & Business Media, 1986. (Cité en page 89.)
- [185] M. Schäfer and S. Turek. Benchmark computations of laminar flow around a cylinder. *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, 52 :547–566, 1996. (Cité en page 90.)

- [186] H.-J. Bungartz, J. Benk, B. Gatzhammer, M. Mehl, and T. Neckel. Partitioned simulation of fluid-structure interaction on cartesian grids. In *Fluid Structure Interaction II*, pages 255–284. Springer, 2011. (Cité en page 92.)
- [187] Joris Degroote. Partitioned simulation of fluid-structure interaction. *Archives of computational methods in engineering*, 20(3) :185–238, 2013. (Cité en page 92.)
- [188] U. Küttler and W. A. Wall. Fixed-point fluid–structure interaction solvers with dynamic relaxation. *Comput Mech*, 43 :61–72, 2008. (Cité en page 93.)
- [189] J.-C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 172(1-4) :109–143, 1999. (Cité en page 100.)
- [190] T. Mohammadnejad and A.R. Khoei. An extended finite element method for hydraulic fracture propagation in deformable porous media with the cohesive crack model. *Finite Elements in Analysis and Design*, 73 :77–95, 2013. (Cité en page 107.)
- [191] Henry Darcy. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon : exposition et application...* Victor Dalmont, 1856. (Cité en page 107.)
- [192] L. A. Richards. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, 1(5) :318–333, 1931. (Cité en page 108.)
- [193] M. A. Celia, E. T. Bouloutas, and R. L. Zarba. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research*, 26(7) :1483–1496, 1990. (Cité en page 108.)
- [194] P.C.D. Milly. A mass-conservative procedure for time-stepping in models of unsaturated flow. In *Finite elements in water resources*, pages 103–112. Springer, 1984. (Cité en pages 108 et 117.)
- [195] T. Cajuhi, L. Sanavia, and L. De Lorenzis. Phase-field modeling of fracture in variably saturated porous media. *Computational Mechanics*, 61(3) :299–318, Mar 2018. (Cité en pages 109 et 113.)
- [196] J. R. Nimmo. Theory for source-responsive and free-surface film modeling of unsaturated flow. *Vadose Zone Journal*, 9 :295–306, 2010. (Cité en page 109.)
- [197] D.Short, W. R. Dawes, and I. White. The practicability of using richards’ equation for general purpose soil-water dynamics models. *Environment International*, 21(5) :723–730, 1995. (Cité en page 109.)
- [198] Thanh-Tung Nguyen, Julien Yvonnet, Q-Z Zhu, Michel Bornert, and Camille Chateau. A phase-field method for computational modeling of interfacial damage interacting with crack propagation in realistic microstructures obtained by microtomography. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312 :567–595, 2016. (Cité en page 110.)
- [199] A. T. Corey R. H. Brooks. Hydraulicpropertiesofporousmedia. *Colorado State University, Hydro Paper*, 3 :27, 1964. (Cité en pages 110 et 111.)

-
- [200] A. W. Warrick and D. O. Lomen. Time-dependent linearized infiltration : III. strip and disc sources. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 40(5) :639–643, 1976. (Cité en pages 110 et 111.)
- [201] R. Haverkamp, M. Vauclin, J. Touma, P.J. Wierenga, and G. Vachaud. A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 41(2) :285–294, 1977. (Cité en pages 110 et 111.)
- [202] M.T. van Genuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44 :892–898, 1980. (Cité en pages 111 et 112.)
- [203] V. Baron. *Méthodes numériques pour les écoulements en milieu poreux : estimations a posteriori et stratégie d'adaptation*. PhD thesis, LMJL-Laboratoire de Mathématiques Jean Leray, 2015. (Cité en page 112.)
- [204] E. T. Bouloutas. *Improved numerical methods for modeling flow and transport processes in partially saturated porous media*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1989. (Cité en page 113.)
- [205] Simon Haykin and Neural Network. A comprehensive foundation. *Neural networks*, 2(2004) :41, 2004. (Cité en page 126.)
- [206] B.A. Le, J. Yvonnet, and Q.-C. He. Computational homogenization of nonlinear elastic materials using neural networks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 104(12) :1061–1084, 2015. (Cité en page 126.)
- [207] Z. Liu, C. T. Wu, and M. Koishi. A deep material network for multiscale topology learning and accelerated nonlinear modeling of heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018. (Cité en page 126.)
- [208] R. Hill. The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 15(2) :79–95, 1967. (Cité en page 128.)