



Homogénéisation numérique par Transformée de Fourier Rapide des composites avec discontinuité d'interface et des effets de couche limite en milieux multiporeux

Ludovic Taut

► To cite this version:

Ludovic Taut. Homogénéisation numérique par Transformée de Fourier Rapide des composites avec discontinuité d'interface et des effets de couche limite en milieux multiporeux. Mécanique [physics.med-ph]. Université Gustave Eiffel, 2022. Français. NNT : 2022UEFL2017 . tel-03687199

HAL Id: tel-03687199

<https://theses.hal.science/tel-03687199>

Submitted on 3 Jun 2022

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.

UNIVERSITÉ GUSTAVE EIFFEL

THÈSE DE DOCTORAT

Discipline : Mécanique

Présentée par :

Ludovic TAUT

sujet :

Homogénéisation numérique par Transformée de
Fourier Rapide des composites avec discontinuité
d'interface et des effets de couche limite en
milieux multiporeux

Soutenue le 4 février ,
devant le jury composé de :

L. GELEBART	Ingénieur de recherche - HDR, CEA Saclay	Rapporteur
F. WILLOT	Maître de recherche - HDR, Mines Paristech	Rapporteur
R. BRENNER	Dir. de recherche - HDR, Institut d'Alembert	Examineur
D. KONDO	Professeur - HDR, Sorbonne Université	Examineur
K. SAB	Professeur - HDR, ENPC	Examineur
V. MONCHIET	Maître de conférences - HDR, Univ. Eiffel	Directeur de thèse

Table des matières

Introduction générale	5
1 État de l'art	9
1.1 Homogénéisation par TFR des composites élastiques	9
1.1.1 Problèmes posés sur la cellule de élémentaire	9
1.1.2 Quelques définitions utiles	11
1.1.3 Les schémas de résolution	13
1.1.4 L'approche variationnelle	19
1.1.5 Discrétisation en séries de Fourier	21
1.2 Calcul des propriétés de transport en milieux poreux	24
1.2.1 Le problème d'écoulement de Stokes	25
1.2.2 Le problème de composite équivalent	26
1.2.3 Méthode de résolution par TFR	27
1.2.4 Mise en œuvre de la méthode	28
1.3 Conclusion	33
2 Calcul par TFR des propriétés de conductivité des composites avec discontinuité d'interface	35
2.1 Introduction	35
2.2 Numerical homogenization by FFT for composite with interface resistance	36
2.2.1 Homogenization problem	36
2.2.2 Discretization	37
2.2.3 Minimization	38
2.2.4 Resolution with iterative schemes	40
2.3 Unit cells and interpolation functions	41
2.3.1 Composite with rectangular inclusions	41
2.3.2 Composite with spherical inclusions	42
2.4 Convergence	43
2.5 Validation with finite element solutions	45
2.5.1 Comparisons FFT/FEM	47
2.6 Comparison with analytical estimates	53
2.7 Conclusion	54
3 Homogénéisation numérique par FFT des composites élastiques avec interfaces adhésives	57
3.1 Introduction	57
3.2 Homogenization problem	59
3.3 Mathematical background for Fourier methods	61

3.4	Discretization of the problem	62
3.5	Discretization for circular and spherical inclusion	64
3.6	Convergence analysis	66
3.7	Comparisons with analytical estimates	68
3.7.1	Estimation for composites with fibers	68
3.7.2	Analytic model for spherical particles	73
3.7.3	Mori-Tanaka scheme	76
3.7.4	Comparison with FFT solutions	76
3.8	Conclusion	79
4	Modélisation des phénomènes de couche limite en milieux biporeux	81
4.1	Positionnement du problème	81
4.1.1	Principes d'homogénéisation de milieux biporeux	81
4.1.2	Le problème couplé Darcy/Stokes	82
4.1.3	Le modèle d'interface de Beavers-Joseph	83
4.1.4	Modélisation avec l'équation de Brinkman	84
4.1.5	Problématique	85
4.2	Etude pour un milieu bi-couches	85
4.2.1	Calcul de la perméabilité macroscopique avec l'équation de Brinkman	85
4.2.2	Calcul de la perméabilité macroscopique avec les modèles BJ et BJS	89
4.3	Calcul numérique direct	93
4.4	Milieu microporeux anisotrope	99
4.4.1	Solution analytique avec le modèle de Brinkman	99
4.4.2	Solutions avec les modèles BJ et BJS	106
4.4.3	Identification avec le calcul numérique direct	109
4.5	Conclusion	112
	Conclusion générale	113
	Annexe A : fonctions d'interpolation	127
4.6	Rectangular inclusion	127
4.7	Spherical inclusion	129

Introduction générale

Les méthodes d'homogénéisation numérique basées sur la Transformée de Fourier Rapide TFR ont connu un développement important ces dernières années. Cette technique de résolution a été introduite par Moulinec et Suquet [84] pour calculer les propriétés homogénéisées de composites périodiques. Ces approches sont basées sur la résolution de l'équation de Lippmann-Schwinger [62, 122] à l'aide d'un schéma itératif. Si les idées de base de la méthode de résolution ont été proposées auparavant dans les travaux de Brown [27] et Kroener [62], son implémentation numérique a été pour la première fois proposée par Moulinec et Suquet [84, 85] en utilisant la TFR. Car c'est bien l'utilisation de la TFR qui rend réellement l'approche efficace. L'équation de Lippmann-Schwinger fait intervenir le tenseur de Green du milieu périodique et un produit de convolution. La fonction de Green étant explicite dans le domaine de Fourier, le calcul du produit de convolution peut être alors effectué de manière rapide avec l'algorithme de la TFR.

Cette approche a été appliquée aux composites élastiques [118, 117] et à d'autres phénomènes physiques comme la piézoélectricité [20, 21]. La mise en œuvre de ces méthodes pour les composites non linéaires a fait l'objet de nombreux travaux, en outre Moulinec et Suquet [84, 85], Michel et al. [75], Bilger et al. [16, 17] ont appliqué la méthode par TFR pour les composites et des milieux poreux avec des comportements régis par la plasticité. D'autres classes de comportements non linéaires ont été étudiées avec la méthode TFR, on peut par exemple citer les travaux de Idiart et al. [60, 59] pour la viscoplasticité ou encore ceux de Spahn et al [107], Zhu et Yvonnet [125], Chen et al. [32] pour l'endommagement. Une revue exhaustive des travaux portant sur l'homogénéisation numérique par TFR des problèmes non linéaires a été récemment proposée par Schneider [104].

Comme déjà mentionnée, la méthode de calcul par TFR repose sur l'équation de Lippman-Schwinger qui est résolue à l'aide d'un schéma itératif. Pour les phénomènes linéaires tels que l'élasticité ou le problème de conduction thermique, il existe deux manières d'interpréter la méthode initialement introduite par Brown [27] et Kroener [62], la première repose sur le développement en série de Neumann, la seconde sur l'utilisation d'une méthode de point fixe. De nombreux travaux ont contribué à formuler de nouveaux schémas visant à améliorer la vitesse de convergence. Ainsi, Eyre et Milton [44, 76] ont proposé un schéma accéléré qui permet d'améliorer significativement la convergence dans les domaines de forts contrastes de propriétés élastiques ou thermiques. Une forme plus générale des schémas accélérés a été proposée par Monchiet et Bonnet [79, 80], elle est exprimée avec la polarisation et englobe le schéma de Eyre et Milton [44] mais aussi les schémas lagrangiens proposés par Michel et al. [75]. Comme montré par Monchiet [77], tous ces schémas de résolution peuvent s'interpréter comme la résolution du système discrétisé par séries de Fourier combiné avec l'approche variationnelle

de Hashin-Shtrikman [56]. D'autres approches utilisent la méthode du gradient conjugué [123, 24, 49] ou les méthodes de descente de Nesterov [103, 43] (dites également "Fast Gradient Methods") .

Un autre volet de développement des méthodes d'homogénéisation numérique par TFR a concerné les propriétés de transport dans les milieux poreux. Ainsi Monchiet et al. [81] ont proposé un algorithme de résolution de l'équation de Stokes pour résoudre le problème d'écoulement d'un fluide à travers un squelette rigide et ainsi déterminer la perméabilité macroscopique. Une méthode alternative a été proposée par Bignonnet et Dormieux [15] puis Bignonnet [14]. Toujours sur la problématique des propriétés de transport, Nguyen et al. [89] ont étendu l'approche de Monchiet et al. [81] au calcul de la perméabilité dynamique tandis que To et al. [110] ont étudié le couplage avec la thermique. Plus récemment, Mezhoud et al. [74] ont développé une approche par TFR pour le calcul des propriétés de transport dans les milieux à deux échelles de porosité.

Même si l'ensemble de ces travaux portant sur les méthodes TFR ont réussi successivement à traiter un large spectre de problématiques et de phénomènes physiques, il reste encore de nombreux problèmes ouverts. Notamment, celui des discontinuités d'interface a été peu étudié dans le contexte des méthodes d'homogénéisation par TFR. L'objectif principal de mes travaux de thèse est de contribuer au développement des méthodes basées sur la TFR dans le contexte des matériaux composites et des propriétés de transport dans les milieux poreux sur la problématique des discontinuités d'interface et des effets de couche limite.

La détermination des propriétés effectives des composites avec interface imparfaite a fait déjà l'objet de nombreux travaux dans le domaine des méthodes d'homogénéisation, on peut citer par exemple les travaux de Hashin [55], Sharma et Ganti [105], Duan et al. [37], Chen et al. [31], Lequang and He [93], Brisard et al. [25] pour les composites élastiques et, dans le contexte de la conduction thermique, les travaux de Benveniste [10], Dunn and Taya [41], Torquato et Rintoul [111], Hashin [54], Lequang et al. [94]. Qu'est-ce qu'une interface imparfaite ? En élasticité, on distingue généralement deux types d'interfaces : avec discontinuité du champ de déplacement ou avec discontinuité du vecteur contrainte. Pour le premier type d'interface, dite "adhésive" ou "ressort", le saut du déplacement à la traversée de l'interface est proportionnel au vecteur contrainte agissant sur cette surface. Le second type, dite "cohésive" correspond à un saut du vecteur contrainte. Ce saut est alors donné par la loi de Gurtin et Murdoch [48] qui s'écrit sous la forme d'une équation d'équilibre des tensions surfaciques. Les interfaces imparfaites adhésives sont généralement attribuées à une zone de transition autour des interfaces qui se caractérise par la présence d'une troisième phase (liant) ou de la présence d'un endommagement localisé. Les interfaces cohésives ont été utilisées pour modéliser les effets de taille des particules dans les nanocomposites.

Le travail proposé dans cette thèse fait suite à une première contribution [78] sur le thème des interfaces imparfaites. L'approche développée par Monchiet [78] consiste à introduire de nouveaux champs discontinus dans le cadre des formulations variationnelles des méthodes TFR introduites par Monchiet [77]. Cette approche variationnelle permet de replacer les techniques de calcul par TFR en utilisant les approches variationnelles usuelles basées sur des potentiels en déformation ou en contrainte (et celle de Hashin-Shtrikman [56] pour l'approche en polarisation) et une discrétisation avec des séries de Fourier. Toujours dans ce cadre variationnel, les discontinuités d'interface sont alors prises en compte avec un enrichissement de l'espace de discrétisation, en utilisant des champs dis-

continus. Il s'agit là de l'idée de base qui a été proposée pour des composites conducteurs de la chaleur et renforcés par des fibres de section circulaire. L'objectif de ce travail est de poursuivre le développement de cette méthode pour traiter d'autres géométries de microstructure et pour des composites élastiques avec des interfaces adhésives.

Un second volet de recherche concerne la modélisation des effets d'interface/couche limite dans les milieux à deux échelles de porosité. Le calcul de la perméabilité dans le cadre de l'homogénéisation périodique a été formalisé par Ene et Sanchez-Palencia [42], Auriault et Sanchez-Palencia [7], Levy [70], Sanchez-Palencia [100] puis étendu pour des milieux biporeux par Auriault et Boutin [4, 5, 6], Royer et al. [97], Boutin et al. [19], Olny et Boutin [90].

Lorsque le milieu présente un seul niveau de porosité, on détermine la perméabilité macroscopique en résolvant les équations de Stokes sur une cellule élémentaire du milieu poreux. Il a été démontré par les méthodes asymptotiques que la description macroscopique de l'écoulement est donnée par l'équation de Darcy et fait intervenir la perméabilité qui dépend de la géométrie du milieu poreux considéré. Lorsque le milieu poreux présente deux niveaux de porosité, la perméabilité macroscopique est alors obtenue par une technique de double changement d'échelle. Une première homogénéisation permet d'identifier la perméabilité associée au réseau de micropores. Pour la seconde étape d'homogénéisation, les macropores sont alors plongés dans une matrice microporeuse d'écrite par l'équation de Darcy et l'écoulement dans les macropores est décrit par les équations de Stokes.

Dès lors, il se pose un problème méthodologique lié à la formulation des conditions à l'interface des deux milieux, régis par les équations de Stokes et de Darcy. Pour l'équations de Darcy, ce sont des conditions en pression et en vitesse normale qui sont imposées au bord du domaine. Pour l'équation de Stokes ce sont des conditions en vitesse et pour le vecteur contrainte.

La première approche consiste à utiliser la condition d'interface de Beavers-Joseph [9] dans laquelle la vitesse est discontinue. Cette approche a été considéré dans le contexte de l'homogénéisation de milieux biporeux par Arbogast et Brunson [2], Markov et al. [72], Rasoulzadeh et Kuchuk [95], Monchiet et al [82].

Une deuxième approche consiste à remplacer l'équation de Darcy par l'équation de Brinkman [22, 23] pour décrire l'écoulement dans la matrice contenant les micropores. L'équation de Brinkman a été initialement introduite pour inclure les efforts de cisaillement. Elle permet alors de décrire les effets de couche limite à la paroi avec un fluide. L'équation de Brinkman a été également utilisée dans le contexte de l'homogénéisation de milieux biporeux par Griebel [47], Silva et Ginzburg [106], Rohan et al. [96], Mezhoud et al. [74].

Une comparaison de ces deux approches a été proposée par Golfier et al. [46].

Il reste toutefois une question essentielle et qui au cœur du travail présenté dans le dernier chapitre de cette thèse. Cette question concerne les paramètres de ces modèles qui sont introduits de manière ad-hoc. Des mesures expérimentales ont été fournies par Beavers et Joseph [9]. Mais ici la question repose plutôt sur l'identification des coefficients de ces modèles en lien avec la microstructure poreuse dans un cadre micromécanique. Les techniques d'homogénéisation permettent de décrire la solution à cœur du matériau, or il s'agit ici de décrire un phénomène qui a lieu à l'interface de deux milieux : une phase fluide et un milieu poreux.

L'objectif de la thèse concerne donc avant tout la modélisation par homogénéisation de phénomènes aux interfaces. Le document est rédigé en quatre parties :

- Le premier chapitre, intitulé état de l'art, se concentre essentiellement sur les méthodes d'homogénéisation numérique par Transformée de Fourier Rapide. On présente un certain nombre de contributions au contexte de la modélisation des composites et des milieux poreux en se focalisant avant tout sur les outils utilisés dans le cadre de cette thèse. Il ne s'agit donc pas d'une revue exhaustive des méthodes par TFR.
- Au second chapitre, on présente l'extension de la méthode TFR pour modéliser les discontinuités d'interface dans les composites conducteurs de la chaleur. Le modèle d'interface adopté est celui de Kapitza [61] qui correspond à une résistance d'interface générant une discontinuité de la température.
- Au troisième chapitre, on prolonge ces résultats au contexte de l'élasticité avec des interfaces adhésives (discontinuité du champ de déplacement).
- Au quatrième chapitre, on étudie les phénomènes d'interface/couche limite dans les milieux biporeux avec pour objectif d'identifier les paramètres des modèles de Brinkman et de Beavers-Joseph en fonction des paramètres de la microstructure.

Enfin, j'apporterai une conclusion et des perspectives à ces travaux.

Chapitre 1

État de l'art

Dans ce chapitre, on rappelle les méthodes de calcul par homogénéisation numérique basées sur la Transformée de Fourier Rapide (TFR). Nous présentons essentiellement les approches qui ont été développées au laboratoire MSME ces dix dernières années et qui seront utilisées ou améliorées en vue de prendre en compte des phénomènes physiques supplémentaires tels que les discontinuités d'interface. La première partie de ce chapitre se concentre sur les méthodes TFR appliquées aux composites élastiques et conducteurs de la chaleur. On présente les deux schémas basiques, formulés avec la déformation ou la contrainte et on discute aussi des schémas accélérés qui ont été introduits dans le but d'améliorer la convergence dans les situations de forts contrastes des propriétés élastiques (inclusions très souples ou très rigides).

Dans la seconde partie, on présente les extensions de ces méthodes pour traiter les problèmes d'écoulement en milieux poreux. Le problème est résolu avec le schéma itératif formulé en contrainte proposé par Monchiet et al. [81]. Nous en détaillerons certaines spécificités, notamment la détermination des forces de traînées avec l'approche proposée dans la thèse de T.K. Nguyen [88].

1.1 Homogénéisation par TFR des composites élastiques

1.1.1 Problèmes posés sur la cellule de élémentaire

1.1.1.1 Le problème d'élasticité

Les propriétés effectives des composites périodiques sont obtenues en résolvant un problème d'élasticité sur la cellule de base du milieu périodique. Ce problème est défini par les équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon(\mathbf{x}) = \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x}), \\ \sigma(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \varepsilon(\mathbf{x}), \\ \operatorname{div}(\sigma(\mathbf{x})) = 0 \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} \text{ périodique, } \langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = 0 \\ \sigma(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \text{ antipériodique} \end{array} \right. \quad (1.1)$$

Où $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ est le champ de déplacement, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ désigne le tenseur des déformations et $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ le champ de contrainte. Dans (1.1), $\langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \rangle_V$ désigne la moyenne du champ de déplacement sur le volume de la cellule élémentaire V . La condition $\langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega = 0$ est introduite afin d'obtenir l'unicité de la solution pour $\mathbf{u}(\mathbf{x})$. Au bord de la cellule élémentaire, ce sont les conditions de périodicité usuelles qui sont utilisées : la périodicité du champ de déplacement et l'antipériodicité du vecteur contrainte.

Dans l'équation (1.1), $\mathbb{C}(\mathbf{x})$ représente le tenseur de rigidité du composite et on note $\mathbb{S}(\mathbf{x})$ le tenseur de souplesse, tous deux définis par :

$$\mathbb{C}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \mathbb{C}_{\alpha} I_{\alpha}(\mathbf{x}), \quad \mathbb{S}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \mathbb{S}_{\alpha} I_{\alpha}(\mathbf{x}) \quad (1.2)$$

avec $\mathbb{S}_{\alpha} = (\mathbb{C}_{\alpha})^{-1}$ et où $I_{\alpha}(\mathbf{x})$ sont les fonctions caractéristiques des phases α de rigidité $\mathbb{C}_{\alpha}$ et ayant pour volume $||\Omega_{\alpha}||$. On note $c_{\alpha} = \frac{||\Omega_{\alpha}||}{||\Omega||}$ la fraction volumique de la phase α .

On peut soumettre à la cellule élémentaire la déformation macroscopique $\langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega = \mathbf{E}$ ou une contrainte macroscopique $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega = \boldsymbol{\Sigma}$. Dans le premier cas, le champ de déformation et le champ de contrainte sont définis par la loi de localisation :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \mathbf{E} \quad (1.3)$$

On détermine ensuite le tenseur d'élasticité homogénéisé par la relation de moyenne :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E}, \quad \mathbb{C}^{hom} = \langle \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \mathbb{A}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega \quad (1.4)$$

Si c'est la contrainte qui est imposée, on a pour la loi de localisation :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{B}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\Sigma}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{S}(\mathbf{x}) : \mathbb{B}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\Sigma} \quad (1.5)$$

On détermine le tenseur de souplesse homogénéisé par la relation de moyenne :

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega = \mathbb{S}^{hom} : \boldsymbol{\Sigma}, \quad \mathbb{S}^{hom} = \langle \mathbb{S}(\mathbf{x}) : \mathbb{B}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega \quad (1.6)$$

1.1.1.2 Le problème de thermique

Les équations du problème de conductivité sont analogues à l'élasticité pour lesquelles on fait baisser l'ordre de tensorialité de un. On a donc :

$$\begin{cases} \varepsilon(\mathbf{x}) = \nabla u(\mathbf{x}), \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}(\mathbf{x}).\varepsilon(\mathbf{x}), \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = 0 \\ u(\mathbf{x}) - \mathbf{E}.\mathbf{x} \text{ périodique, } \langle u(\mathbf{x}) \rangle_V = 0 \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}).\mathbf{n} \text{ antipériodique} \end{cases} \quad (1.7)$$

ici, $u(\mathbf{x})$ est un scalaire (le champ de température), $\varepsilon(\mathbf{x})$ et $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ sont des vecteurs. $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ est le tenseur d'ordre deux de conductivité et on notera $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ son inverse, le tenseur de résistivité. On peut ainsi reprendre les équations du paragraphe précédent en remplaçant $\mathbb{C}(\mathbf{x})$ par $\mathbf{K}(\mathbf{x})$, $\mathbb{S}(\mathbf{x})$ par $\mathbf{H}(\mathbf{x})$, $\mathbb{C}^{hom}$ par $\mathbf{K}^{hom}$, etc. Et on adapte évidemment les produits à l'ordre de tensorialité, ainsi le produit doublement contracté est remplacé par un produit simplement contracté.

1.1.2 Quelques définitions utiles

1.1.2.1 La transformée de Fourier

Les conditions de périodicité qui sont imposées sur les faces opposées de la cellule élémentaire suggèrent de rechercher la solution du problème à l'aide de séries de Fourier. On définit, pour toute fonction $f(\mathbf{x})$ Ω -périodique, sa transformée notée $\hat{f}(\boldsymbol{\xi})$ par la relation :

$$\hat{f}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \exp(-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}) dV \quad (1.8)$$

où $|\Omega|$ désigne le volume de la cellule, i est le nombre complexe tel que $i^2 = -1$ et $\boldsymbol{\xi}$ est le vecteur d'onde. On note en particulier que pour $\boldsymbol{\xi} = 0$, la transformée de Fourier devient la moyenne de la quantité f sur Ω . On a donc : $\hat{\varepsilon}(0) = \mathbf{E}$ et $\hat{\sigma}(0) = \Sigma$.

La transformée de Fourier de la fonction $f(\mathbf{x}) = 1$ est la fonction notée $Y(\boldsymbol{\xi})$ qui a pour définition :

$$Y(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} 0 & \forall \boldsymbol{\xi} \neq 0 \\ 1 & \text{if } \boldsymbol{\xi} = 0 \end{cases} \quad (1.9)$$

1.1.2.2 Projecteurs pour la thermique

Nous allons maintenant introduire des projecteurs qui permettent d'exprimer les conditions de compatibilité et d'équilibre lorsqu'elles sont exprimées dans le domaine de Fourier. Ces projecteurs permettent, en outre, de formuler les critères de convergence des schémas itératifs.

Considérons d'abord le problème de conductivité. Le formalisme qui suit a été introduit par Milton [76].

Introduisons les tenseurs d'ordre deux $\mathbf{P}(\boldsymbol{\xi})$, $\mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi})$ et $\mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi})$ qui sont définis par :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) &= \begin{cases} \frac{1}{\|\boldsymbol{\xi}\|^2} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} & \forall \boldsymbol{\xi} \neq 0 \\ 0 & \text{if } \boldsymbol{\xi} = 0 \end{cases} \\ \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) &= \begin{cases} \mathbf{I} - \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) & \forall \boldsymbol{\xi} \neq 0 \\ 0 & \text{if } \boldsymbol{\xi} = 0 \end{cases} \\ \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) &= \begin{cases} 0 & \forall \boldsymbol{\xi} \neq 0 \\ \mathbf{I} & \text{if } \boldsymbol{\xi} = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (1.10)$$

où $\mathbf{I}$ est l'identité d'ordre deux.

Les tenseurs d'ordre deux $\mathbf{P}(\boldsymbol{\xi})$, $\mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi})$ et $\mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi})$ sont des projecteurs puisqu'ils satisfont aux relations :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) \\ \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) \\ \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) \\ \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) = 0 \\ \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) = 0 \\ \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) = 0 \\ \mathbf{P}(\boldsymbol{\xi}) + \mathbf{Q}(\boldsymbol{\xi}) + \mathbf{Y}(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{I} \end{aligned} \quad (1.11)$$

pour tout ξ . Un champ $\varepsilon(\mathbf{x})$ dérive d'un champ de température, c'est à dire $\varepsilon(\mathbf{x}) = \nabla u(\mathbf{x})$, si il est à rotationnel nul. Dans le domaine de Fourier cette condition est satisfaite si il vérifie l'une des deux relations :

$$\mathbf{P}(\xi).\widehat{\varepsilon}(\xi) = \widehat{\varepsilon}(\xi) \quad \text{ou} \quad \mathbf{Q}(\xi).\widehat{\varepsilon}(\xi) = 0 \quad \forall \xi \neq 0 \quad (1.12)$$

Par ailleurs, tout flux σ est à divergence nulle si il vérifie l'une des deux relations :

$$\mathbf{P}(\xi).\widehat{\sigma}(\xi) = 0 \quad \text{ou} \quad \mathbf{Q}(\xi).\widehat{\sigma}(\xi) = \widehat{\sigma}(\xi) \quad \forall \xi \neq 0 \quad (1.13)$$

Dans les relation (1.12) et (1.13) les deux conditions sont équivalentes puisque $\mathbf{P}(\xi)$ et $\mathbf{Q}(\xi)$ sont des projecteurs. On peut également noter que les champs $\widehat{\varepsilon}(\xi)$ et $\widehat{\sigma}(\xi)$ sont orthogonaux pour tout $\xi \neq 0$.

1.1.2.3 Projecteurs pour l'élasticité

Le formalisme de Milton a été étendu au cas de l'élasticité par Monchiet et Bonnet [79]. On note $\mathbb{P}(\xi)$, $\mathbb{Q}(\xi)$ et $\mathbb{Y}(\xi)$ les tenseurs d'ordre quatre définis par :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\xi) &= \begin{cases} \mathbb{E}_2(\xi) + \mathbb{E}_4(\xi) & \forall \xi \neq 0 \\ 0 & \text{if } \xi = 0 \end{cases} \\ \mathbb{Q}(\xi) &= \begin{cases} \mathbb{E}_1(\xi) + \mathbb{E}_3(\xi) & \forall \xi \neq 0 \\ 0 & \text{if } \xi = 0 \end{cases} \\ \mathbb{Y}(\xi) &= \begin{cases} 0 & \forall \xi \neq 0 \\ \mathbb{I} & \text{if } \xi = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

où les tenseurs d'ordre quatre $\mathbb{E}_n(\xi)$ pour $n = 1..4$ sont les quatres premiers tenseurs de la base de Walpole [114]. On rappelle ci-dessous les expressions des six tenseurs de la base de Walpole :

$$\begin{cases} \mathbb{E}_1(\xi) = \frac{1}{2}\mathbf{Q}(\xi) \otimes \mathbf{Q}(\xi), & \mathbb{E}_2(\xi) = \mathbf{P}(\xi) \otimes \mathbf{P}(\xi) \\ \mathbb{E}_3(\xi) = \mathbf{Q}(\xi) \underline{\otimes} \mathbf{Q}(\xi) - \mathbb{E}_1(\xi), & \mathbb{E}_4(\xi) = \mathbf{Q}(\xi) \underline{\otimes} \mathbf{P}(\xi) + \mathbf{P}(\xi) \underline{\otimes} \mathbf{Q}(\xi) \\ \mathbb{E}_5(\xi) = \mathbf{P}(\xi) \otimes \mathbf{Q}(\xi), & \mathbb{E}_6(\xi) = \mathbf{Q}(\xi) \otimes \mathbf{P}(\xi) \end{cases} \quad (1.14)$$

A nouveau, $\mathbb{P}(\xi)$, $\mathbb{Q}(\xi)$ et $\mathbb{Y}(\xi)$ sont des projecteurs, qui satisfont aux même relations que les tenseurs d'ordre deux $\mathbf{P}(\xi)$, $\mathbf{Q}(\xi)$ et $\mathbf{Y}(\xi)$ (voir equation (1.11)). Les tenseurs de Walpole ont été introduits pour décrire l'élasticité isotrope transverse. Lorsque le matériau présente ce type de symétrie matérielle, la loi élastique est invariante par toute rotation autour d'un axe privilégié défini par la direction du vecteur unitaire $\mathbf{n}$. Dans les équations (1.14), on a remplacé cette direction $\mathbf{n}$ par $\xi/\|\xi\|$ où $\|\xi\|$ désigne la norme du vecteur d'onde ξ .

Tout champ de déformation $\varepsilon(\mathbf{x})$ dérive d'un déplacement $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, c'est à dire $\varepsilon(\mathbf{x}) = \nabla_s \mathbf{u}(\mathbf{x})$, si :

$$\mathbb{P}(\xi) : \varepsilon(\xi) = \varepsilon(\xi) \quad \text{ou} \quad \mathbb{Q}(\xi) : \varepsilon(\xi) = 0 \quad (1.15)$$

De même, tout champ de contrainte est à divergence nulle si :

$$\mathbb{P}(\xi) : \sigma(\xi) = 0 \quad \text{ou} \quad \mathbb{Q}(\xi) : \sigma(\xi) = \sigma(\xi) \quad (1.16)$$

1.1.2.4 Transformée de Fourier discrète et TFR

Pour l'intégration numérique des méthodes de Fourier on va remplacer la transformée de Fourier continue par une transformée de Fourier discrète. Pour cela, on discrétise le vecteur d'onde $\boldsymbol{\xi}$ sur N nombres d'ondes :

$$\boldsymbol{\xi} = \left(\frac{2\pi n_1}{L_1}, \frac{2\pi n_2}{L_2}, \frac{2\pi n_3}{L_3} \right) \quad (1.17)$$

où n_1, n_2 et n_3 sont les nombres d'onde, ce sont des entiers relatifs variant de $-N$ à $N - 1$. Pour les problèmes tridimensionnels, on discrétise donc à l'aide $(2N)^3$ vecteurs d'ondes.

On note $\boldsymbol{\xi}_n$ les vecteurs d'ondes discrets définis par l'équation (1.17). Ainsi, avec un léger abus de langage, mais pour des raisons de simplicité d'écriture, on utilise un seul indice n bien qu'il corresponde à deux indices n_1, n_2 pour les problèmes bidimensionnels et trois indices n_1, n_2, n_3 pour le cas 3D. On note aussi pour tout champ $f(\mathbf{x})$ sa transformée de Fourier discrète par :

$$\widehat{f}_n = \widehat{f}(\boldsymbol{\xi}_n) \quad (1.18)$$

La transformée de Fourier discrète inverse d'un ensemble de valeurs $\{\widehat{f}_n\}$ avec $n = -N..N - 1$ est notée $\{f_n\}$ et elle est obtenue avec l'algorithme de transformée de Fourier rapide :

$$\{f_n\} = TFR^{-1}(\{\widehat{f}_n\}) \quad (1.19)$$

Et inversement, on a :

$$\{\widehat{f}_n\} = TFR(\{f_n\}) \quad (1.20)$$

Les calculs sont réalisés à l'aide de Matlab où la TFR est une fonction déjà programmée. Dans le domaine réel, les valeurs f_n sont les valeurs du champ $f(\mathbf{x})$ aux noeuds d'une grille régulière contenant $2N$ points suivant chaque direction de l'espace.

1.1.3 Les schémas de résolution

1.1.3.1 Le schéma en déformation

Le schéma de résolution formulé en déformation a été proposé par Moulinec et Suquet [84, 85]. Le point de départ de la méthode de résolution est l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{E} - \boldsymbol{\Gamma}^0(\mathbf{x}) * [(\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})] \quad (1.21)$$

que l'on résout pour une déformation macroscopique imposée $\mathbf{E}$. Le tenseur d'ordre quatre $\mathbb{C}^0$ est le tenseur d'élasticité d'un milieu de référence et $\boldsymbol{\Gamma}^0(\mathbf{x})$ est la fonction de Green qui lui est associée. Dans le domaine de Fourier, l'expression de la fonction de Green peut s'exprimer avec les tenseurs de la base de Walpole :

$$\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0 = \frac{1}{\lambda_0 + 2\mu_0} \mathbb{E}_2(\boldsymbol{\xi}_n) + \frac{1}{2\mu_0} \mathbb{E}_4(\boldsymbol{\xi}_n) \quad (1.22)$$

où λ_0 et μ_0 sont les coefficients de Lamé du milieu de référence. Il s'agit d'une équation linéaire mais dont la résolution "directe" est rendue difficile de par la présence du produit de convolution " $*$ ". Une méthode astucieuse consiste à résoudre le problème en utilisant un développement en série de Neumann. Il s'agit d'une idée déjà exprimée dans un article de Brown [27] puis plus tard par Kroener [62]. Chaque terme de la série de Neumann est alors calculé à l'aide d'un schéma itératif. L'apport de Moulinec et Suquet à cette démarche de calcul est d'utiliser la TFR pour réaliser le produit de convolution avec la fonction de Green. Ce qui est particulièrement intéressant avec le problème d'homogénéisation, c'est que la fonction de Green est explicite dans le domaine de Fourier. Une autre interprétation de cette méthode est donnée par Monchiet [77], la méthode de résolution TFR peut être vue comme une méthode de résolution par point fixe de l'équation de Lippman-Schwinger

Le schéma de résolution en déformation est résumé dans le tableau ci-dessous :

initialisation :	$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^0 = \mathbf{Y}_n \cdot \mathbf{E}$
itération i :	$\{\boldsymbol{\varepsilon}_n^i\} = TFR^{-1}(\{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^i\})$ $\boldsymbol{\sigma}_n^i = \mathbb{C}(\mathbf{x}_n) : \boldsymbol{\varepsilon}_n^i, \forall n \in \mathbb{Z},$ $\{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i\} = TFR(\{\boldsymbol{\sigma}_n^i\})$ critère de convergence $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^{i+1} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^i - \hat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0 : \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i, \forall n \in \mathbb{Z}$

TABLE 1.1 – Algorithme de résolution du schéma de base formulé en déformation.

Ce qui est le plus remarquable dans cette technique de résolution, c'est sa simplicité de mise en œuvre en comparaison avec d'autres techniques tel que les éléments finis. La méthode TFR requiert uniquement de définir $\mathbb{C}(\mathbf{x}_n)$ et $\hat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0$. Le tenseur d'élasticité $\mathbb{C}(\mathbf{x}_n)$ est calculé sur une grille régulière dont les noeuds ont pour coordonnées $\mathbf{x}_n$. On assigne à $\mathbb{C}(\mathbf{x}_n)$ la valeur $\mathbb{C}_\alpha$ lorsque $\mathbf{x}_n$ se trouve dans la phase α . Ce tenseur est calculé préalablement, il est stocké pour être ensuite utilisé au cours du processus itératif.

Le tenseur de Green $\hat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0$ a une forme explicite dans le domaine de Fourier il est déterminé par la formule (1.22) pour la valeur discrète $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}_n$. Les tenseurs $\hat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0$ pour $n = -N..N - 1$ sont aussi calculés préalablement puis stockés.

Deuxième fait remarquable, est que la méthode TFR est peu coûteuse en mémoire. Tous les objets ont des dimensions $(2N)^3$ en $3D$ alors que pour la méthode des éléments finis, l'ordre de grandeur de la matrice de rigidité est $(2N)^6$, c'est à dire le nombre de noeuds élevé au carré.

Enfin, ce qui rend la méthode véritablement très performante, c'est l'utilisation de la TFR pour effectuer les allers-retours entre l'espace réel et l'espace de Fourier.

Dans ce schéma la déformation est initialisée avec la déformation macroscopique imposée $\mathbf{E}$. A chaque étape du processus itératif, la déformation est compatible, c'est à dire qu'elle dérive d'un champ de déplacement et reste à moyenne égale à $\mathbf{E}$. Ceci est la conséquence des propriétés suivantes de l'opérateur de Green :

$$\mathbb{Q}_n : \hat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0 = 0, \quad \mathbb{Y}_n : \hat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0 = 0 \quad (1.23)$$

Enfin, à convergence du schéma, c'est à dire lorsque $\hat{\epsilon}_n^{i+1} = \hat{\epsilon}_n^i$, le champ de contrainte $\hat{\sigma}_n^i$ est à l'équilibre (à divergence nulle) ceci est le résultat d'une troisième propriété de l'opérateur de Green :

$$\hat{\Gamma}_n^0 : \hat{\sigma}_n = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbb{P}_n : \hat{\sigma}_n = 0 \quad (1.24)$$

On utilise le critère de convergence suivant pour stopper le processus itératif :

$$\frac{\|\mathbb{P}_n : \sigma_n^i\|_N}{\|\sigma_n^i\|_N} < \epsilon \quad (1.25)$$

avec la définition suivante pour la norme $\|\hat{a}_n\|_N$:

$$\|\hat{a}_n\|_N = \sqrt{\sum_{n=-N}^{N-1} \|\hat{a}_n\|^2} \quad (1.26)$$

où ici $\|\bullet\|$ désigne la norme pour un tenseur d'ordre deux. Dans les illustrations de ce chapitre nous utilisons la valeur $\epsilon = 10^{-3}$.

Le milieu de référence doit être choisi de manière à assurer la convergence des schémas itératifs. Les conditions de convergence sont obtenues en examinant les valeurs propres de l'opérateur linéaire qui intervient dans la relation de récurrence donnée dans le tableau (1.1). Les conditions de convergence ont été étudiées par Milton [76] pour le problème de la conduction thermique et par Michel et al. [75] dans le contexte de l'élasticité. Dans le cas particulier où les constituants et le milieu de référence sont isotropes, la condition de convergence s'écrit :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega : 2k_0 > k(\mathbf{x}) > 0, \quad 2\mu_0 > \mu(\mathbf{x}) > 0 \quad (1.27)$$

où k_0 est le module de compressibilité :

$$k_0 = \lambda_0 + \frac{2\mu_0}{3} \quad (1.28)$$

Le milieu de référence optimal est celui qui minimise le nombre d'itérations à convergence. Dans les mêmes travaux, il a été démontré que ce milieu de référence optimal a pour coefficients d'élasticité :

$$k_0 = \frac{1}{2} \left[\max_{\mathbf{x} \in \Omega} (k(\mathbf{x})) + \min_{\mathbf{x} \in \Omega} (k(\mathbf{x})) \right], \quad \mu_0 = \frac{1}{2} \left[\max_{\mathbf{x} \in \Omega} (\mu(\mathbf{x})) + \min_{\mathbf{x} \in \Omega} (\mu(\mathbf{x})) \right] \quad (1.29)$$

Pour le problème de conduction thermique, on remplace $\mathbb{C}(\mathbf{x}_n)$ par $\mathbf{K}(\mathbf{x}_n)$ et on utilise la fonction de Green définie par :

$$\hat{\Gamma}^0(\xi) = \frac{1}{k_0} \mathbf{P}(\xi) \quad (1.30)$$

où k_0 est la conductivité du milieu de référence isotrope. Un critère de convergence est alors formulé avec le projecteur $\mathbf{P}$:

$$\frac{\|\mathbf{P}_n \cdot \sigma_n^i\|_N}{\|\sigma_n^i\|_N} < \epsilon \quad (1.31)$$

1.1.3.2 Le schéma formulé en contrainte

De manière duale, il est possible de formuler un schéma itératif en contrainte. Ce schéma s'écrit [13, 18] :

initialisation :	$\hat{\sigma}_n^0 = \mathbf{Y}_n \cdot \Sigma$
itération i :	$\{\hat{\sigma}_n^i\} = TFR^{-1}(\{\hat{\sigma}_n^i\})$ $\varepsilon_n^i = \mathbb{S}(\mathbf{x}_n) : \sigma_n^i, \quad \forall n \in \mathbb{Z},$ $\{\hat{\varepsilon}_n^i\} = TFR(\{\varepsilon_n^i\})$ critère de convergence $\hat{\sigma}_n^{i+1} = \hat{\sigma}_n^i - \hat{\Delta}_n^0 : \hat{\varepsilon}_n^i, \quad \forall n \in \mathbb{Z}$

Dans ce schéma, c'est la contrainte macroscopique qui est imposée à la cellule élémentaire et le processus itératif est initialisé avec cette contrainte Σ . Les propriétés homogénéisées sont donc déterminées en calculant la déformation macroscopique. Le tenseur d'ordre quatre $\Delta^0(\xi)$ est le tenseur de Green pour les contraintes, il est défini par :

$$\hat{\Delta}_n^0 = \frac{2\mu_0(3\lambda_0 + 2\mu_0)}{\lambda_0 + 2\mu_0} \mathbb{E}_1(\xi_n) + 2\mu_0 \mathbb{E}_3(\xi_n) \quad (1.32)$$

Dans ce schéma de résolution, le champ de contrainte $\sigma^i(\xi)$ est à l'équilibre à chaque itération, il est également à moyenne égale à Σ . Ceci résulte des propriétés suivantes pour ce second tenseur de Green :

$$\mathbb{P}_n : \hat{\Delta}_n^0 = 0, \quad \mathbb{Y}_n : \hat{\Delta}_n^0 = 0 \quad (1.33)$$

Lorsque la convergence est atteinte, c'est à dire lorsque $\hat{\sigma}_n^{i+1} = \hat{\sigma}_n^i$, le champ de contrainte $\hat{\varepsilon}_n^i$ est compatible, résultant de la troisième propriété de l'opérateur de Green dual :

$$\hat{\Delta}_n^0 : \hat{\varepsilon}_n = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbb{Q}_n : \hat{\varepsilon}_n = 0 \quad (1.34)$$

On utilise donc le critère de convergence suivant pour stopper le processus itératif :

$$\frac{\|\mathbb{Q}_n : \varepsilon_n^i\|_N}{\|\varepsilon_n^i\|_N} < \epsilon \quad (1.35)$$

Dans le cas de l'isotropie la convergence du schéma itératif est assurée si :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega : \frac{2}{k_0} > \frac{1}{k(\mathbf{x})} > 0, \quad \frac{2}{\mu_0} > \frac{1}{\mu(\mathbf{x})} > 0 \quad (1.36)$$

Le milieu de référence optimal est donné par :

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_0} &= \frac{1}{2} \left[\max_{\mathbf{x} \in \Omega} \left(\frac{1}{k(\mathbf{x})} \right) + \min_{\mathbf{x} \in \Omega} \left(\frac{1}{k(\mathbf{x})} \right) \right], \\ \frac{1}{\mu_0} &= \frac{1}{2} \left[\max_{\mathbf{x} \in \Omega} \left(\frac{1}{\mu(\mathbf{x})} \right) + \min_{\mathbf{x} \in \Omega} \left(\frac{1}{\mu(\mathbf{x})} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.37)$$

Pour le problème de conduction thermique, on remplace $\mathbb{S}(\mathbf{x}_n)$ par la résistivité $\mathbf{H}(\mathbf{x}_n)$ et on utilise la fonction de Green définie par :

$$\hat{\Delta}^0(\xi) = k_0 \mathbf{Q}(\xi) \quad (1.38)$$

où k_0 est la conductivité du milieu de référence isotrope. Un critère de convergence est alors formulé avec le projecteur $\mathbf{Q}$:

$$\frac{\|\mathbf{Q}_n \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^i(\xi_n)\|_N}{\|\boldsymbol{\varepsilon}^i(\xi_n)\|_N} < \epsilon \quad (1.39)$$

1.1.3.3 Le schéma en polarisation

Afin d'améliorer la convergence des schémas de base, un troisième schéma a été proposé par Monchiet et Bonnet [79]. Il est exprimé avec la polarisation $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})$ classiquement définie par :

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) = (\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \quad (1.40)$$

ou encore, par inversion :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = (\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0)^{-1} : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \quad (1.41)$$

Le champ de contrainte est alors défini par :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) + \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \\ &= \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) + \mathbb{C}^0 : (\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0)^{-1} : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \\ &= \mathbb{C}(\mathbf{x}) : (\mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^0)^{-1} : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (1.42)$$

Le schéma itératif est décrit ci-dessous :

initialisation :	$\hat{\boldsymbol{\tau}}_n^0 = 0$
itération i :	$\{\boldsymbol{\tau}_n^i\} = TFR^{-1}(\{\hat{\boldsymbol{\tau}}_n^i\})$ $\boldsymbol{\varepsilon}_n^i = (\mathbb{C}(\mathbf{x}_n) - \mathbb{C}^0)^{-1} : \boldsymbol{\tau}_n^i, \quad \forall n \in \mathbb{Z}$ $\{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^i\} = TFR(\{\boldsymbol{\varepsilon}_n^i\})$ $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i = \hat{\boldsymbol{\tau}}_n^i + \mathbb{C}^0 : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^i, \quad \forall n \in \mathbb{Z}$ critère de convergence $\boldsymbol{\tau}_n^{i+1} = \boldsymbol{\tau}_n^i - \alpha \mathbb{C}^0 : \hat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0 : \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i - \beta \hat{\boldsymbol{\Delta}}_n^0 : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^i$ $- \gamma \mathbb{Y}_n : \mathbb{C}_0 : (\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0^i - \mathbf{E}), \quad \forall n \in \mathbb{Z}$

Dans ce nouveau schéma, la déformation n'est pas compatible, la contrainte n'est pas à l'équilibre. Ces propriétés sont atteintes à convergence du processus itératif. La convergence est atteinte lorsque $\boldsymbol{\tau}_n^{i+1} = \boldsymbol{\tau}_n^i$ ce qui implique :

$$\alpha \mathbb{C}^0 : \hat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0 : \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i + \beta \hat{\boldsymbol{\Delta}}_n^0 : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^i + \gamma \mathbb{Y}_n : (\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0^i - \mathbf{E}) = 0 \quad (1.43)$$

On montre que cette équation est satisfaite lorsque :

$$\begin{aligned}\mathbb{C}^0 : \hat{\Gamma}_n^0 : \hat{\sigma}_n^i &= 0 \Leftrightarrow \mathbb{P}_n : \hat{\sigma}_n^i = 0 \\ \hat{\Delta}_n^0 : \hat{\varepsilon}_n^i &\Leftrightarrow \mathbb{Q}_n : \hat{\varepsilon}_n^i = 0 \\ \mathbb{Y}_n : (\hat{\varepsilon}_0^i - \mathbf{E}) &= 0 \Leftrightarrow \hat{\varepsilon}_0^i = \mathbf{E}\end{aligned}\tag{1.44}$$

La première condition exprime l'équilibre du champ de contrainte, la seconde, la compatibilité du champ de déformation et la dernière, la relation de moyenne $\langle \varepsilon(\mathbf{x}) \rangle_\Omega = \mathbf{E}$. On pourrait imposer la contrainte macroscopique Σ à la cellule élémentaire en remplaçant le terme $\mathbb{C}_0 : (\hat{\varepsilon}_0^i - \mathbf{E})$ par $\hat{\sigma}_0^i - \Sigma$

Le critère de convergence est formulé avec trois condition :

$$\begin{aligned}\frac{\|\mathbb{P}_n : \sigma_n^i\|_N}{\|\sigma_n^i\|_N} &< \epsilon, \\ \frac{\|\mathbb{Q}_n : \varepsilon_n^i\|_N}{\|\varepsilon_n^i\|_N} &< \epsilon, \\ \|\hat{\varepsilon}_0^i - \mathbf{E}\| &< \epsilon\end{aligned}\tag{1.45}$$

Le schéma en polarisation fait intervenir un plus grand nombre de paramètres dits "préconditionneurs" : λ_0 (ou k_0), μ_0 , α , β , γ .

Il est démontré que la convergence est assurée si :

$$\begin{aligned}0 &< \alpha < 2, \\ -2 &< \beta < 0, \\ -2 &< \gamma < 0, \\ -\infty &< \mu_0 < 0, \\ -\infty &< k_0 < 0\end{aligned}\tag{1.46}$$

En pratique, on choisit $\alpha = -\beta = -\gamma$. On trouve une bonne convergence lorsque $\alpha \in [1, 2]$, même si pour la valeur $\alpha = 2$ la convergence n'est pas assurée, en pratique, le schéma converge. Néanmoins pour des valeurs $\alpha > 2$ le schéma n'est pas convergent. Lorsque $0 < \alpha < 1$, il y a convergence, mais le taux de convergence est plus faible.

S'agissant des valeurs de k_0 et μ_0 , on les détermine numériquement. Pour un composite avec inclusions, on montre que le choix $k_0 = -k_1$ et $\mu_0 = -\mu_1$ où k_1 et μ_1 sont les coefficients élastiques de la matrice, alors on obtient un taux de convergence tout à fait satisfaisant.

Il existe d'autres schémas de résolution pour améliorer le taux de convergence. Par exemple, le schéma lagrangien de Michel et al. [75] ou encore le schéma accéléré de Eyre et Milton [44]. En fait ces deux schémas sont des cas particuliers du schéma en polarisation. Le schéma lagrangien est retrouvé en donnant à α la valeur 1 tandis que le schéma accéléré de Eyre et Milton [44] correspond à $\alpha = 2$.

D'autres auteurs, Brisard et Dormieux [24] ou Zeman et al. [123] utilisent la méthode du gradient conjugué. Nous avons mis en œuvre cette méthode aux deux chapitres suivants.

1.1.3.4 Comparaison des schémas

La vitesse de convergence des schémas itératifs est définie par le nombre d'itérations nécessaire pour obtenir la précision voulue ϵ . Le temps nécessaire pour réaliser une itération du schéma en déformation, en contrainte et en polarisation est

relativement équivalent puisqu'une TFR et une TFR inverse sont nécessaires pour ces trois schémas. La vitesse de convergence dépend principalement du contraste entre les phases et de la morphologie de la cellule. On propose d'étudier la convergence des schémas avec la valeur du contraste entre les phases dans le cas d'un composite à fibres. Les résultats de convergence présentés dans cette section n'ont de validité que pour la microstructure étudiée, il serait rigoureusement faux d'extrapoler ces résultats à tous types de morphologies.

La cellule étudiée est donc définie par un carré contenant un cercle de rayon R centré à l'origine. Les calculs sont menés en considérant $R = 0.4$, le côté de la cellule élémentaire étant égal à 1. Les propriétés élastiques de la matrice sont $\lambda_1 = \mu_1 = 1$. On fait varier les propriétés élastiques de l'inclusion, avec $\lambda_2 = \mu_2$, de 10^{-4} à 10^4 et on relève le nombre d'itérations à convergence en fonction de la valeur du contraste (ici $\lambda_2 = \mu_2$ puisque les propriétés de la matrice sont choisies égales à 1). La cellule est soumise au chargement $E_{12} = 1$ pour l'approche en déformation et en polarisation, au chargement Σ_{12} pour l'approche en contrainte. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 1.1. On observe une meilleure vitesse de convergence pour les inclusions très souples avec la méthode en déformation et en polarisation (contraste égal à 10^{-4}). L'approche en contrainte et en polarisation possède un meilleur taux de convergence pour les inclusions très rigides (contraste égal à 10^4).

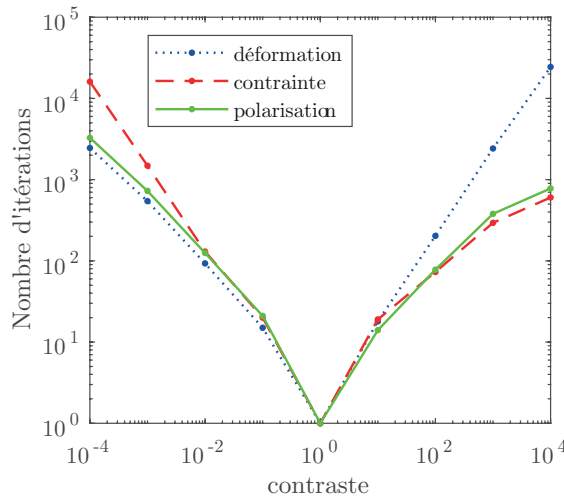


FIGURE 1.1 – Nombre d'itérations à convergence des trois schémas de résolution par TFR.

1.1.4 L'approche variationnelle

Une formulation des méthodes par TFR dans un cadre variationnel a été proposée par Monchiet [77]. Les schémas présentés dans la section précédente, formulés en déformation, contrainte ou en polarisation, peuvent être reconduits en utilisant des principes variationnels usuels. Pour les approches en déformation et en contrainte, ils sont obtenus par minimisation du potentiel des déformations et du potentiel complémentaire formulé avec la contrainte. Pour l'approche en polari-

sation, c'est le cadre variationnel d'Hashin-Shtrikman qui est utilisé.

L'intérêt d'utiliser ces approches variationnelles est d'aboutir à des bornes rigoureuses pour les propriétés homogénéisées du composite. Ainsi, avec l'approche en déformation (resp. en contrainte), on détermine une borne supérieure (resp. inférieure) du tenseur d'élasticité macroscopique. Au prix de quelle modification des schémas présentés dans la section précédente, peut-on obtenir ces bornes ? En fait, la minimisation des potentiels montrent que le statut de borne est assuré si on utilise une description exacte de la géométrie de la microstructure à l'aide des coefficients de forme. Nous reviendrons plus tard sur la définition : coefficients de forme. Dans l'intégration numérique proposée par Moulinec et Suquet [84], la microstructure réelle est remplacée par une image pixélisée. Ceci introduit donc une approximation "non contrôlée" pour laquelle le statut de borne est perdu.

Nous présentons ici ces approches variationnelles, car elles constituent un cadre méthodologique qui permet en outre d'introduire des discontinuités d'interface, nous aborderons cette problématique dans les chapitres 2 et 3. On présente uniquement les approches en déformation et en contrainte puisque nous n'avons pas abordé le calcul des propriétés des composites avec interfaces imparfaites dans le contexte de l'approche par polarisation.

1.1.4.1 Principes variationnels

Introduisons le potentiel en déformation $W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}))$ et son potentiel complémentaire $W^*(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}))$ définis par :

$$\begin{aligned} W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) &= \frac{1}{2} < \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) : \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) >_{\Omega}, \\ W^*(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) &= \frac{1}{2} < \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \mathbb{S}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) >_{\Omega} \end{aligned} \quad (1.47)$$

On rappelle ci-dessous les principes de minimum pour ces deux potentiels (voir par exemple [29]) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} &\leq \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathbb{C}_N^{\varepsilon} : \mathbf{E} = \min_{\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathcal{E}_N} W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) \\ \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma} : \mathbb{S}^{hom} : \boldsymbol{\Sigma} &\leq \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma} : \mathbb{S}_N^{\sigma} : \boldsymbol{\Sigma} = \min_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}_N} W^*(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \end{aligned} \quad (1.48)$$

Dans ces relations, les tenseurs $\mathbb{C}_N^{\varepsilon}$ et $\mathbb{S}_N^{\sigma}$ sont deux estimations des tenseurs d'élasticité homogénéisés $\mathbb{C}^{hom} = (\mathbb{S}^{hom})^{-1}$. L'indice N fait référence à la taille de l'espace de discrétisation utilisé pour obtenir ces bornes. Dans notre cas, il représente le nombre de termes retenus dans la série de Fourier. On peut ainsi encadrer la solution exacte de la manière suivante :

$$\mathbb{C}_N^{\sigma} \leq (\mathbb{S}^{hom})^{-1} = \mathbb{C}^{hom} \leq \mathbb{C}_N^{\varepsilon} \quad (1.49)$$

avec la notation $\mathbb{C}_N^{\sigma} = (\mathbb{S}_N^{\sigma})^{-1}$.

La minimisation est effectuée en considérant des champs admissibles. Pour la déformation, le sous-espace $\mathcal{E}_N$, est constitué des champs de déformation, périodiques, compatibles (qui dérivent d'un champ de déplacement continu à l'interface) et qui sont à moyenne égale à $\mathbf{E}$ sur la cellule Ω . Le sous-espace $\mathcal{S}_N$ est

constitué du champ de contrainte périodique, à divergence nulle, qui assurent la continuité du vecteur contrainte à l'interface, et qui sont à moyenne égale à Σ sur la cellule Ω .

1.1.5 Discrétisation en séries de Fourier

Dans le cadre des méthodes TFR, nous allons choisir pour espace de discrétisation des séries de Fourier tronquées. Pour le champ de déformation, on considère pour champs admissibles :

$$\mathcal{E}_N = \left\{ \varepsilon(\mathbf{x}) = \sum_{n=-N}^{N-1} \widehat{\varepsilon}_n \exp(i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}), \widehat{\varepsilon}_n = \mathbb{Y}_n : \mathbf{E}, \mathbb{Q}_n : \widehat{\varepsilon}_n = 0 \right\} \quad (1.50)$$

En introduisant ce champ dans le potentiel W et en utilisant l'égalité de Parseval, on obtient :

$$W = \frac{1}{2} \sum_{n=-N}^{N-1} \sum_{m=-N}^{N-1} \overline{\widehat{\varepsilon}_n} : \widehat{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) : \widehat{\varepsilon}_m, \quad (1.51)$$

où $\overline{\widehat{\varepsilon}_n}$ représente le conjugué de la quantité $\widehat{\varepsilon}_n$. $\widehat{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\xi})$ est la transformée de Fourier du tenseur d'élasticité. Pour un composite constitué de M phases on peut écrire :

$$\widehat{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\alpha=1}^M \mathbb{C}_\alpha \widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi}) \quad (1.52)$$

où $\widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi})$ est la transformée de Fourier de la fonction caractéristique $I_\alpha(\mathbf{x})$. Les fonctions $\widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi})$ sont appelées coefficients de forme. Ils ont été introduits par Nemat-Nasser [86] pour obtenir des estimations des propriétés de composites élastiques et ont été utilisés par Bonnet [18] dans le cadre des méthodes TFR pour améliorer les estimations des propriétés élastiques.

On recherche le point stationnaire de la fonctionnelle W en minimisant par rapport aux coefficients de Fourier $\widehat{\varepsilon}_m$. Quelques précautions sont à prendre pour effectuer cette minimisation en respectant deux contraintes, la compatibilité $\mathbb{Q}_n : \widehat{\varepsilon}_n = 0$ et la condition de moyenne imposée $\widehat{\varepsilon}_0 = \mathbf{E}$. La minimisation conduit au système linéaire :

$$\begin{cases} \mathbb{Q}_n : \widehat{\varepsilon}_n = 0, \\ \mathbb{P}_n : \left[\sum_{\alpha=1}^M \mathbb{C}^\alpha : \left(\sum_{m=-N}^{N-1} \widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) \widehat{\varepsilon}_m^i \right) \right] = 0, \\ \widehat{\varepsilon}_0 = \mathbf{E} \end{cases} \quad (1.53)$$

Ce système linéaire est résolu avec le schéma itératif suivant :

$$(\widehat{\varepsilon}_n)^{i+1} = (\widehat{\varepsilon}_n)^i - \widehat{\Gamma}_n^0 : \left[\sum_{\alpha=1}^M \mathbb{C}^\alpha : \left(\sum_{m=-N}^{N-1} \widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) \widehat{\varepsilon}_m^i \right) \right] \quad (1.54)$$

et qui est initialisé avec la déformation $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n = \mathbb{Y}_n : \mathbf{E}$. A convergence du schéma ci-dessus, on obtient la solution du système linéaire (1.53) et ceci en vertu des propriétés du tenseur de Green déjà évoquées dans les équations (1.23) et (1.24). Le schéma de résolution (1.54) peut s'interpréter comme une méthode de résolution par point fixe du système linéaire (1.53) et l'opérateur de Green comme un preconditionneur pour obtenir la convergence du schéma.

Quelle est la différence avec le schéma de Moulinec et Suquet [84] ? Elle repose uniquement sur l'utilisation des fonctions de forme. Au lieu d'intégrer la loi élastique dans le domaine réel avec le tenseur $\mathbb{C}(\mathbf{x}_n)$, on doit réaliser un produit de convolution entre les coefficients de Fourier $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_m^i$ et les coefficients de forme $\widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m)$. Les coefficients de formes sont calculés puis stockés pour être utilisés à chaque itération. Le produit de convolution est réalisé avec la TFR.

De manière duale, le schéma de résolution en contrainte s'écrit :

$$(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n)^{i+1} = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n)^i - \widehat{\boldsymbol{\Delta}}_n^0 : \left[\sum_{\alpha=1}^M \mathbb{S}^\alpha : \left(\sum_{m=-N}^{N-1} \widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_m^i \right) \right] \quad (1.55)$$

La clé essentielle dans le calcul de bornes repose donc sur l'utilisation des coefficients de forme. Dans la section qui suit, on donne quelques propriétés de ces coefficients et on donne des expressions pour diverses géométries.

1.1.5.1 Les coefficients de forme

Le coefficient de forme associé à la phase Ω_α est donc défini par :

$$\widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_\alpha} \exp(-i\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\xi}) dV \quad (1.56)$$

Notons tout d'abord que pour $\boldsymbol{\xi} = 0$ on a :

$$\widehat{I}_\alpha(0) = \frac{|\Omega_\alpha|}{|\Omega|} = c_\alpha \quad (1.57)$$

où c_α est la fraction volumique de la phase α .

Par ailleurs, les fonctions caractéristiques des phases satisfont à l'équation :

$$\sum_{\alpha=1}^M I_\alpha(\mathbf{x}) = 1 \quad (1.58)$$

Dans le domaine de Fourier cette équation devient :

$$\sum_{\alpha=1}^M \widehat{I}_\alpha(\boldsymbol{\xi}) = Y(\boldsymbol{\xi}) \quad (1.59)$$

Ainsi pour un composite à deux phase, par exemple avec une matrice et une phase inclusionnaire, le coefficient de forme de la matrice (indice " $\alpha = 1$ ") est déterminé à partir du coefficient de forme des inclusions (indice " $\alpha = 2$ ") puisque $\widehat{I}_1(\boldsymbol{\xi}) = Y(\boldsymbol{\xi}) - \widehat{I}_2(\boldsymbol{\xi})$.

Pour une cellule élémentaire avec une inclusion circulaire, le coefficient de forme de l'inclusion a pour expression :

$$I_2(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} 2c_2 \frac{J_1(\eta)}{\eta} & \forall \boldsymbol{\xi} \neq 0 \\ c_2 & \text{si } \boldsymbol{\xi} = 0 \end{cases}, \quad \eta = R\|\boldsymbol{\xi}\|, \quad c_2 = \frac{\pi R^2}{|\Omega|} \quad (1.60)$$

Pour une forme elliptique, on prendra :

$$\eta = \sqrt{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\xi}}, \quad c_2 = \frac{\pi a_1 a_2}{|\Omega|} \quad (1.61)$$

où $\mathbf{a}$ est le tenseur d'ordre deux qui a pour valeur principales a_1^2 et a_2^2 où a_1, a_2 sont les demi-axes de l'ellipse.

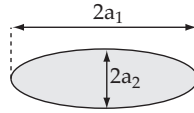


FIGURE 1.2 – Inclusion elliptique.

Pour une inclusion ellipsoïdale, le coefficient de forme a pour expression :

$$I_2(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} 3c_2 \frac{\sin(\eta) - \eta \cos(\eta)}{\eta^3} & \forall \boldsymbol{\xi} \neq 0 \\ c_2 & \text{si } \boldsymbol{\xi} = 0 \end{cases}, \quad \eta = \sqrt{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\xi}}, \quad c_2 = \frac{4\pi a_1 a_2 a_3}{3|\Omega|} \quad (1.62)$$

où $\mathbf{a}$ a pour valeurs principales a_1^2, a_2^2 et a_3^2 où a_1, a_2, a_3 sont les demi-axes de l'ellipsoïde.

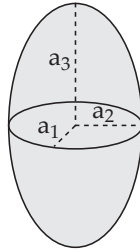


FIGURE 1.3 – Inclusion ellipsoïdale.

Il existe encore d'autres expressions analytiques, par exemple pour des inclusions polygonales (en 2D) ou polyédrique (en 3D) quelconques, on peut trouver les expressions exactes dans l'article de Wuttke [119]. Elles ont été mises en œuvre numériquement pour le calcul par TFR des propriétés élastiques de milieux hétérogènes par Nguyen et al. [87].

On peut aussi traiter aisément des cellules avec une population d'inclusions. Si on

note $\chi(\boldsymbol{\xi})$ le coefficient de forme d'une inclusion centrée à l'origine, pour une population d'inclusions de formes identiques et centrées en $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{X}_k$ pour $i = 1..K$, on a :

$$I_2(\boldsymbol{\xi}) = \chi(\boldsymbol{\xi}) \sum_{k=1}^K \exp(i\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{X}_k) \quad (1.63)$$

ce qui se démontre facilement en utilisant la propriété de translation de la transformée de Fourier.

1.1.5.2 Illustrations

En plus de fournir des bornes exactes des propriétés homogénéisées, l'intégration numérique avec les coefficients de forme améliore aussi la convergence des schémas itératifs. A titre d'illustration, on reprend l'exemple de la section 1.1.3.4 avec les mêmes valeurs pour le rayon de l'inclusion et les propriétés élastiques des phases. On représente sur la figure 1.4 le nombre d'itérations à convergence des schémas itératifs formulés avec les coefficients de forme. On présente également les résultats obtenus avec la méthode en polarisation basée sur la formulation variationnelle de Hashin-Shtrikman mais qui n'a pas été décrite dans ce chapitre. On observe une nette diminution du nombre d'itérations à convergence avec l'intégration numérique par coefficients de forme et ce particulièrement dans les situations de fort contraste.

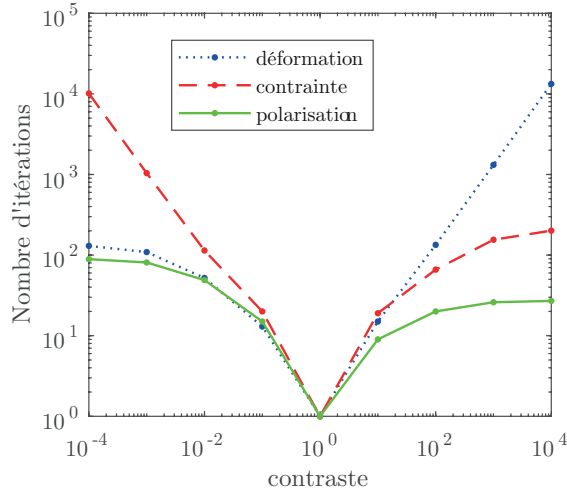


FIGURE 1.4 – Nombre d'itérations à convergence des trois schéma de résolution par TFR basés sur l'utilisation des coefficients de forme.

1.2 Calcul des propriétés de transport en milieux poreux

Un autre volet de mes activités de recherche menées dans ce travail de thèse a concerné le calcul des propriétés de transport de milieux poreux. La propriété

homogénéisée recherchée est le tenseur de perméabilité macroscopique à partir de la géométrie de la microstructure poreuse. Dans le cadre de ces travaux, j'ai été amené à utiliser deux méthodes par TFR pour traiter les milieux poreux à une et à deux échelles de porosité. Dans cette seconde partie du chapitre, on rappelle le phénomène étudié, les équations mises en jeu pour décrire l'écoulement du fluide dans le réseau de pores puis on présente le schéma itératif qui est utilisé.

1.2.1 Le problème d'écoulement de Stokes

On considère un milieu poreux périodique saturé par une fluide visqueux de viscosité dynamique μ . La cellule élémentaire parallélépipédique, de volume Ω , contient un fluide occupant le sous domaine Ω_f et le squelette rigide, le sous domaine Ω_s . On note Γ la surface de contact entre la phase fluide et la phase solide. La cellule étudiée est schématisée sur la figure 1.5.

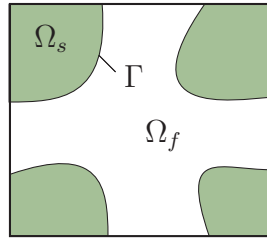


FIGURE 1.5 – Cellule élémentaire du milieu poreux.

On se place dans le cadre classique de l'homogénéisation périodique formalisé par Ene et Sanchez-Palencia [42], Auriault et Sanchez-Palencia [7], Levy [70], Sanchez-Palencia [100]. A l'échelle locale, les équations du problème sont constituées (i) de l'équation de Stokes, (ii) avec la condition d'incompressibilité et (iii) la condition d'adhérence à la paroi :

$$\begin{cases} \text{(i)} & \mu \Delta \mathbf{v}(\mathbf{x}) - \nabla p(\mathbf{x}) = \mathbf{J} & \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ \text{(ii)} & \operatorname{div}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) = 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ \text{(iii)} & \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0 & \forall \mathbf{x} \in \Gamma \end{cases} \quad (1.64)$$

où $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ et $p(\mathbf{x})$ désignent respectivement le champ de vitesse et la pression locale périodique. L'écoulement est généré en imposant un gradient de pression $\mathbf{J}$ uniforme dans la phase fluide. Le champ de vitesse $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ est un champ périodique de moyenne égale à $\mathbf{V}$ sur la cellule élémentaire.

Par homogénéisation, la loi d'écoulement à l'échelle macroscopique est décrite par la loi de Darcy :

$$\mathbf{V} = \langle \mathbf{v}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = -\frac{1}{\mu} \mathbf{K}^{hom} \cdot \mathbf{J} \quad (1.65)$$

où $\mathbf{K}^{hom}$ est le tenseur de perméabilité que l'on cherche à déterminer à partir de la géométrie du réseau poreux.

1.2.2 Le problème de composite équivalent

Ce problème présente une grande similitude avec le problème d'homogénéisation des composites élastiques. En assimilant le champ de vitesse au champ des déplacements, la phase fluide à une phase élastique incompressible et le squelette à une phase élastique infiniment rigide, les équations de Stokes (1.64) peuvent s'écrire sous la forme équivalente :

$$\begin{cases} \mathbf{d}(\mathbf{x}) = \nabla_s \mathbf{v}(\mathbf{x}) & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \mathbf{d}(\mathbf{x}) = \mathbb{S}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} & \text{antipériodique} \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}) & \text{périodique} \end{cases} \quad (1.66)$$

Le tenseur de souplesse est défini par :

$$\mathbb{S}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\mu(\mathbf{x})} \mathbb{K} \quad \text{avec : } \mu(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mu & \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ +\infty & \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \end{cases} \quad (1.67)$$

$\mathbf{d}(\mathbf{x})$ est le taux de déformation et $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ est la contrainte qui est définie par :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 2\mu \mathbf{d}(\mathbf{x}) - p \mathbf{I}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \quad (1.68)$$

L'expression de la force de volume, $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, est :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{J} & \forall \mathbf{x} \in V_f \\ ? & \forall \mathbf{x} \in V_s \end{cases} \quad (1.69)$$

Précisons bien qu'ici nous avons effectué en prolongement par continuité dans la phase solide du problème de Stokes qui était initialement défini dans la phase fluide Ω_f . Ceci est nécessaire pour une résolution du problème avec des séries de Fourier sur la cellule Ω .

Dès lors on peut reconduire les méthodes par TFR utilisées pour les composites élastiques, on utilisera plutôt une approche en contrainte qui utilise la souplesse. Toutefois une spécificité concerne la force de volume. Celle-ci est connue uniquement dans la phase fluide où elle est égale au gradient de pression imposé $\mathbf{J}$. Dans la phase solide, elle est a priori indéterminée, elle décrit les forces de traînée qui dépendent des actions du fluide sur la paroi et donc de la solution du problème. L'introduction de ces forces de traînée est inhérent à l'utilisation des méthode basées sur la TFR. Effectivement, lorsque l'on résoud les équations de Stokes par la méthode des éléments finis, seule la phase fluide est considérée et la condition d'adhérence apparaît comme une condition de Dirichlet pour le champ de vitesse. Il n'y a donc pas nécessité à décrire ces forces de traînées.

Précisons un peu plus la nature de $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ dans la phase solide. On admet que la cellule élémentaire contient K solides non interconnectés. Dans les structures poreuses réelles la matrice solide est constituée d'un seul solide interconnecté. Toutefois, en vue des applications proposées au chapitre 4, nous serons amenés à considérer des solides non connectés. Pour des problèmes bidimensionnels, tel que les écoulements dans les réseaux de cylindres, les solides sont également non

interconnectés. On définit pour Ω les domaines occupés par les particules ω_k avec $k = 1..K$ et tels que $\Omega_s = \omega_1 \cup \omega_2 \cup \dots \cup \omega_K$. Dans ces solides, si le taux de déformation est nul, la vitesse de déplacement est défini à un mouvement de corps rigide près :

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{V}^k + \mathbf{\Theta}^k \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{X}^k), \quad \forall \mathbf{x} \in \omega_k \quad (1.70)$$

Où $\mathbf{X}^k$ est le centre géométrique du solide ω_k . Ici $\mathbf{V}^k$ et $\mathbf{\Theta}^k$ désignent respectivement la vitesse de déplacement par translation et la vitesse de rotation du solide "k". La condition d'adhérence pour le composite équivalent se traduit par des mouvements de corps rigides nuls. On doit donc imposer les conditions $\mathbf{V}^k = \mathbf{\Theta}^k = 0$ pour $k = 1..K$. Pour bloquer ces mouvement de corp rigides, on impose dans chaque solide solide k une force de volume de la forme :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}^k + \mathbf{C}^k \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{X}^k), \quad \forall \mathbf{x} \in \omega_k \quad (1.71)$$

où $\mathbf{F}^k$ et $\mathbf{C}^k$ sont respectivement associé à une force et un couple. L'équilibre de la cellule se traduit par :

$$\int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} dS + \int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}) dV = 0 \quad (1.72)$$

Le vecteur $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}$ étant antipériodique, la première intégrale est nulle et, en divisant par $|\Omega|$, la relation ci-dessus se réduit à :

$$\langle \mathbf{f}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = c_f \mathbf{J} + \sum_{k=1}^{k=M} c_k \mathbf{F}^{(k)} = 0 \quad (1.73)$$

où $c_f = |\Omega_f|/|\Omega|$ est la fraction volumique de pores (la porosité) et $c_k = |\omega_k|/|\Omega|$ pour $k = 1..K$ est la fraction volumique de la particule k . A ce stade on dispose d'une seul équation vectorielle, ce qui est insuffisant pour identifier l'ensemble des forces de traînées. Avant d'expliquer la manière dont sont identifiées les forces de traînées, nous allons d'abord décrire le schéma de résolution par TFR. Nous considérons ensuite un problème trivial avec une seule inclusion circulaire pour lequel les forces de traînées peuvent être préalablement déterminées. Nous verrons ensuite comment on peut traiter une situation avec une population de particules distribuées de manière aléatoire.

1.2.3 Méthode de résolution par TFR

Rappelons que c'est en schéma en contrainte qui est utilisé pour résoudre le problème d'écoulement. C'est une schéma analogue à celui déjà présenté pour les composites élastiques. En présence de forces de volume, on peut trouver l'extension de l'équation de Lippmann-Schwinger dans [68]. Le schéma utilisé est celui proposé par Monchiet et al. [81] et décrit ci-dessous :

initialisation :	$\hat{\sigma}_n^0 = \Upsilon_n \cdot \hat{\mathbf{f}}_n$
iteration i :	$\{\hat{\sigma}_n^i\} = TFR^{-1}(\{\hat{\sigma}_n^i\})$ $\mathbf{d}_n^i = \mathbb{S}(\mathbf{x}_n) : \sigma_n^i, \quad \forall n \in \mathbb{Z},$ $\{\hat{\mathbf{d}}_n^i\} = TFR(\{\mathbf{d}_n^i\})$ critère de convergence $\hat{\sigma}_n^{i+1} = \hat{\sigma}_n^i - \hat{\Delta}_n^0 : \hat{\epsilon}_n^i, \quad \forall n \in \mathbb{Z}$

On a remplacé la déformation ϵ par le taux de déformation $\mathbf{d}$. Outre cette modification mineure, la différence avec le composite élastique repose essentiellement sur l'initialisation du champ de contrainte qui, ici, est donné par $\Upsilon_n \cdot \hat{\mathbf{f}}_n$ où $\hat{\mathbf{f}}_n$ sont les coefficients de Fourier de la force de volume $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ et Υ_n sont les valeurs discrètes de l'opérateur $\Upsilon(\xi)$ dont les composantes ont pour expression :

$$\Upsilon_{ijk}(\xi) = \frac{i}{\|\xi\|^2} \left[\frac{\xi_i \xi_j \xi_k}{\|\xi\|^2} - \delta_{ik} \xi_j - \delta_{jk} \xi_i \right] \quad (1.74)$$

A convergence du schéma, le taux de déformation est intégré dans le domaine de Fourier pour calculer le champ de vitesse :

$$\hat{v}_n = \begin{cases} -\frac{2i}{\|\xi_n\|^2} \hat{\mathbf{d}}_n \cdot \xi_n & \forall n \in \mathbb{Z}^* \\ \mathbf{V} & \text{si } n = 0 \end{cases} \quad (1.75)$$

Il reste encore à clarifier certains points de cette méthode de résolution. D'abord le schéma est initialisé avec une contrainte en équilibre avec la force de volume $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ qui est inconnue puisqu'elle fait intervenir des forces de traînées dont nous ne connaissons pas les valeurs. Ensuite, l'intégration du champ de vitesse dans l'équation (1.75) nécessite le champ de vitesse macroscopique $\mathbf{V}$ qui n'est pas connu non plus, c'est notamment la grandeur recherchée pour déterminer la perméabilité macroscopique.

1.2.4 Mise en œuvre de la méthode

1.2.4.1 Écoulement autour d'un cylindre

Les écoulements à travers des réseaux périodiques de cylindres ont déjà été largement étudiés dans la littérature [108, 8, 101, 36, 65, 66, 116], ces résultats ont permis de valider la méthode numérique présentée ici. On considère un réseau périodique de cylindres. La cellule élémentaire est représentée sur la figure 1.6. Elle est définie par un carré contenant une inclusion circulaire de rayon R . En résolvant le problème plan et anti-plan, on peut déterminer toutes les composantes du tenseur de perméabilité.

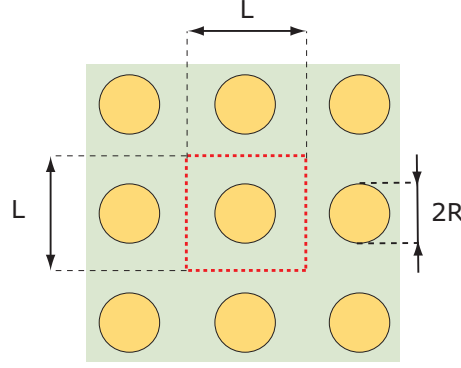


FIGURE 1.6 – Réseau tétragonal de cylindres de section circulaire.

Compte tenu de la symétrie du problème étudié, les forces de traînées sont connues. Pour le problème plan, on simule l'écoulement dans la direction x_1 en imposant le gradient de pression J_1 et on pose $J_2 = 0$ et $J_3 = 0$. Il n'y a pas de rotation de la particule, donc pas de couple à imposer. A partir de la relation d'équilibre (1.73), on trouve pour la force de traînée dans la direction x_1 :

$$F_1 = -\frac{1 - \pi R^2}{\pi R^2} J_1 \quad (1.76)$$

La force de traînée dans la direction verticale, F_2 , est nulle toujours pour les mêmes raisons de symétrie.

Pour le problème antiplan, on impose un gradient de pression J_3 dans la direction x_3 et la force de traînée vaut :

$$F_3 = -\frac{1 - \pi R^2}{\pi R^2} G_3 \quad (1.77)$$

A convergence du schéma itératif, on calcule la vitesse locale par l'équation (1.75). La vitesse macroscopique étant une inconnue, on la détermine avec la condition $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0$ en considérant un point $\mathbf{x}$ situé dans l'inclusion.

Sur la figure 1.7 on donne les résultats obtenus par [81] pour la perméabilité transverse (K_{11}) et longitudinale (K_{33}) en fonction du rayon de l'inclusion. Les résultats obtenus par la TFR sont comparés à ceux de Sparrow and Loeffler [108], Sangani and Acrivos [101] et Wang [116]. Les calculs sont réalisés sur une cellule élémentaire normalisée, c'est à dire de dimension 1 dans chaque direction de l'espace. Les perméabilités affichées sont donc des perméabilités adimensionnées K_{ij}/S avec $S = L^2$ où L définit la taille de la cellule.

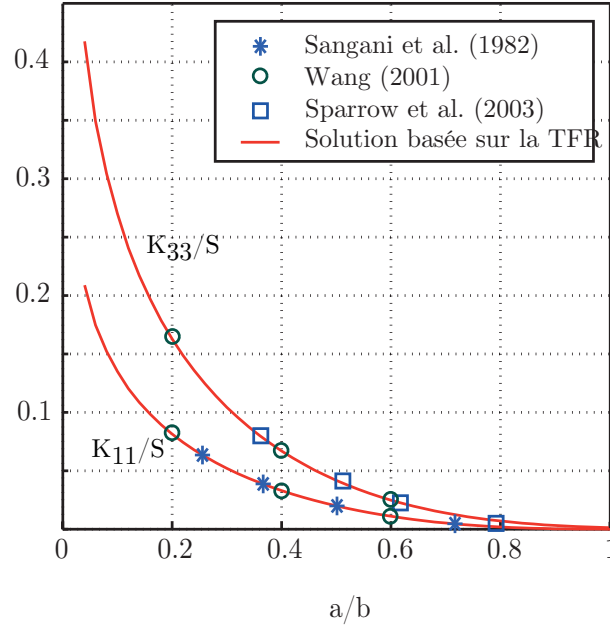


FIGURE 1.7 – Perméabilité longitudinale (K_{11}/L^2) et transverse (K_{33}/L^2) en fonction du rapport $2R/L$ pour un écoulement à travers un réseau de cylindres de rayon R .

1.2.4.2 Problèmes à plusieurs particules

On considère maintenant une cellule avec plusieurs particules. Les forces de traînées sont indéterminées. Pour un problème 3D avec K particules on a K forces avec $3K$ composantes, on a aussi K couples avec $3K$ composantes, soit au total $6K$ composantes. L'équation d'équilibre (1.73) est une équation vectorielle qui fournit 3 conditions. Il reste donc après vérification de l'équilibre $3K - 3$ inconnues. Il faut ajouter à ces inconnues les composantes de la vitesse macroscopique. Nous aboutissons donc à $3K$ inconnues au total. Par ailleurs, il faut fixer chaque particule. Chaque particule ayant 6 degrés de liberté, on a donc $6K$ conditions à satisfaire.

Introduisons un vecteur $\mathbf{U}$ dans lequel on range les vitesses et rotations des particules et dans un second vecteur $\mathbf{T}$ nous allons ranger toutes les inconnues :

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{V}_K \\ \boldsymbol{\Theta}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\Theta}_K \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{V} \\ \mathbf{F}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_K \\ \mathbf{C}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{C}_K \end{pmatrix} \quad (1.78)$$

On exclut $\mathbf{F}_1$ qui peut-être déduit de l'équation d'équilibre (1.73) lorsque toutes les autres forces et le gradient de pression $\mathbf{J}$ sont imposées au système.

La linéarité des équations du problème suggère qu'il existe une relation linéaire qui lie les vitesses $\mathbf{U}$ aux inconnues $\mathbf{T}$ et au gradient de pression $\mathbf{J}$:

$$\mathbf{U} = \mathbf{A}.\mathbf{T} + \mathbf{B}.\mathbf{J} \quad (1.79)$$

Les vitesses étant nulles dans les particules, on doit vérifier que $\mathbf{U} = 0$, on en déduit que :

$$\mathbf{T} = -\mathbf{A}^{-1}.\mathbf{B}.\mathbf{J} \quad (1.80)$$

De cette relation, on obtient les valeurs des forces de traînée et de la vitesse macroscopique en fonction du gradient de pression. En outre, on détermine la perméabilité avec les valeurs de la vitesse macroscopique.

La méthodologie de résolution est la suivante :

- On pose $\mathbf{T} = 0$ et on impose successivement les gradients de pression unitaires $J_1 = 1$, puis $J_2 = 1$, et enfin $J_3 = 1$. Pour chacun de ces problèmes élémentaires on relève les vitesses et rotations des particules et on déduit les composantes de $\mathbf{B}$.
- On pose ensuite $\mathbf{J} = 0$ et on impose successivement des valeurs unitaires aux composantes du vecteur $\mathbf{T}$ pour déduire les composantes de $\mathbf{A}$.
- La solution pour $\mathbf{T}$ du problème d'écoulement de Stokes est alors obtenue avec la relation (1.80).

Avec cette approche, on obtient les valeurs de forces de traînées mais surtout les valeurs de la vitesse macroscopique conduisant à l'identification de la perméabilité macroscopique.

La méthode de résolution réside donc en une décomposition en sous problèmes élémentaires que l'on superpose afin de satisfaire la conditions $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0$ dans chaque particule. A titre d'exemple, considérons un problème avec trois particules. Le problème est plan et, dans chaque particule, les forces sont F_1^k, F_2^k et les couples sont C_3^k avec $k = 1, 2, 3$. On a représenté ces efforts sur la figure 1.8.

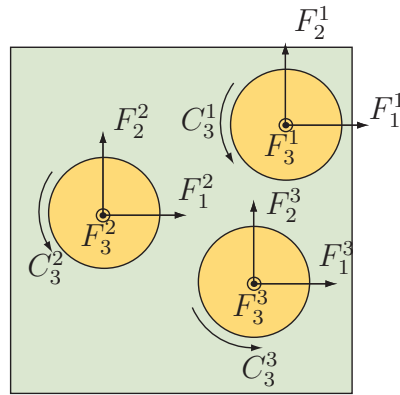


FIGURE 1.8 – Cellule élémentaire constituée de trois cylindres de rayons R .

Sur la figure 1.9 on représente les distributions de la composante $v_1(\mathbf{x})$ du champ de vitesse pour chaque sous problème élémentaire lorsque l'on impose successivement les efforts unitaires $J_1 = 1, J_2 = 1, F_1^1 = 1, \dots$ Pour chacun de ces sous

problèmes la vitesse et la rotation des particules sont non nuls. C'est par superposition de ces champs, que l'on identifie la solution du problèmes d'écoulement avec des particules fixes.

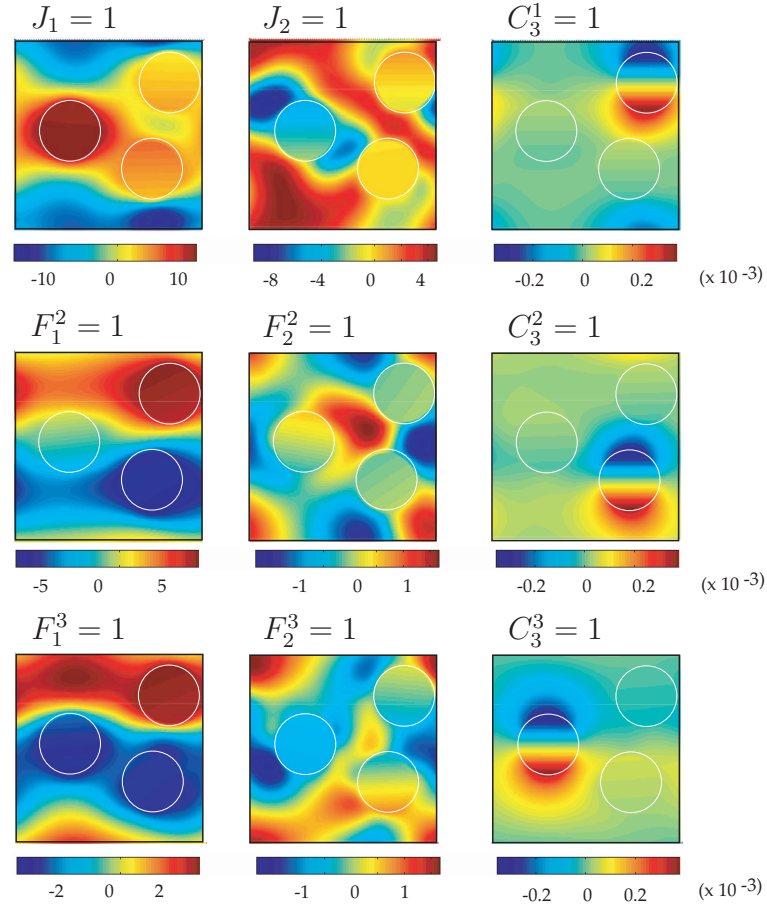


FIGURE 1.9 – Distributions du champ $v_1(x)$ correspondant au neuf sous problèmes élémentaires.

Dans la table (1.2), on donne les valeurs des composantes adimensionnées du tenseur de la perméabilité K_{ij}/S ($S = L^2$ étant la surface de la cellule élémentaire) pour diverses valeurs de la résolution (nombre de vecteurs d'onde utilisés). On y distingue la valeur K_{21} , obtenue en calculant la vitesse V_2 due à $J_1 = 1$, de la valeur K_{12} , calculée à partir de la vitesse V_1 due à $J_2 = 1$. En toute rigueur, on a $K_{12} = K_{21}$. Les différences observées permettent donc d'évaluer la précision du résultat obtenu.

résolution	K_{11}^{hom}/S (10^{-3})	K_{12}^{hom}/S (10^{-3})	K_{21}^{hom}/S (10^{-3})	K_{22}^{hom}/S (10^{-3})	K_{33}/S (10^{-3})
32×32	5.4131	-0.5865	-0.5769	5.2917	17.0761
64×64	5.2551	-0.5842	-0.5785	5.1646	16.9039
128×128	5.2733	-0.5810	-0.5791	5.1849	16.9367
256×256	5.2722	-0.5794	-0.5773	5.1845	16.9415

TABLE 1.2 – Valeurs des composantes de la perméabilité pour diverses valeurs de la résolution.

1.3 Conclusion

Ce premier chapitre a présenté les méthodes d’homogénéisation numérique par Transformée de Fourier Rapide avec deux applications principales : le calcul des propriétés élastiques de composites et les propriétés de transport en milieux poreux. Pour chacune des problématiques, nous avons présenté les principales méthodes de calcul, sans être totalement exhaustifs sur les différents schémas et raffinements qui ont été proposés dans la littérature. Essentiellement nous nous sommes concentré sur les outils qui sont à la base des travaux qui ont été développés dans mon travail.

Pour les composites élastiques, nous avons explicités les trois schémas principaux pour l’identification des propriétés homogénéisées : le schéma en déformation, en contrainte et en polarisation. La différence majeure entre ces trois schémas réside dans leur taux de convergence avec le contraste des propriétés élastiques locales. Le schéma en polarisation reste le meilleur schéma de résolution pour toutes les situations de contraste. Dans un second temps, nous avons présenté l’approche variationnelle des méthodes par TFR qui permet d’aboutir à des bornes exactes des propriétés macroscopiques selon le choix du schéma : borne supérieure avec l’approche en déformation, une borne inférieure avec l’approche en contrainte. L’approche variationnelle conduit à une intégration numérique de la loi locale différente de celle proposée par Moulinec et Suquet [84] et qui introduit les coefficients de forme qui décrivent la microstructures à partir des coefficients de Fourier des fonctions caractéristiques des phases. Comme nous le verrons dans la suite de ce mémoire, ce cadre variationnel, en plus de fournir des bornes, offre un cadre plus large permettant d’aborder le problème des interfaces imparfaites.

Dans la seconde partie de ce chapitre nous avons présentés les schémas de résolution par TFR pour calculer les propriétés de transport de milieux poreux. On résout plus précisément le problème d’écoulement de Stokes à travers un squelette rigide. Bien que le problème présente de grandes similitudes avec le problème d’élasticité, il réside néanmoins une spécificité liée au calcul des forces de traînées que nous avons illustré au travers de deux exemples numériques.

Chapitre 2

Calcul par TFR des propriétés de conductivité des composites avec discontinuité d'interface

Résumé :

The thermal properties of composites are strongly affected by the thermal resistance at the interface between the matrix and the inclusions. This interface resistance is generally described by the Kapitza model which involves the discontinuity of the temperature. The numerical treatment of the jump requires the use of discontinuous fields. In the present paper, we solve the local problem by mean of an extended FFT method combined with a conjugate gradient solver. In the case of local fields discontinuous, the conjugate gradient method is shown to be more robust than the fixed point method, often considered for the resolution of the Lippmann-Schwinger equation applied to homogenization problems. The method is illustrated in 2D case for a composite with rectangular inclusions and in the 3D case considering spherical inclusions. The accuracy of the FFT solutions is studied by its comparison with Finite Element solutions. A comparison with the Mori-Tanaka scheme is provided in the case of unit cells with a population of spherical inclusions.

2.1 Introduction

Interface resistance between two solids can affect significantly the overall properties of composites. The interface resistance is described by the Kapitza model [61] which involves the jump of the temperature across the interface that is proportional to the heat flux acting on the considered interface. The phenomenon of interface resistance has been evidenced experimentally [30, 109, 28] and numerically by atomistic simulations for a solid-solid interface between two diamond-structured materials [91] and Si grain boundaries [71, 102].

Recently, a FFT method has been provided to determine the effective properties of fiber composite materials [78]. The method uses standard variational principles with a discretization with two kinds of admissible temperature fields : (i) continuous fields considering Fourier series and (ii) discontinuous fields considering polynomials in the inclusions. It is shown that the minimization involves the resolution of the Lippmann-Schwinger equation with the periodic Green tensor.

Particularly, in the case of a perfect interface, the method has been found to be equivalent to that of Bonnet [18] who performs the FFT method of Moulinec and Suquet [84, 85] with the shape coefficients.

We develop the extended FFT method to arbitrary inclusion shapes. In order to improve the convergence in the case of discontinuous fields, the Lippmann-Schwinger equation is solved by means of the Conjugate Gradient solver. The relevance of the numerical method is first investigated in the case of rectangular and spherical inclusions.

2.2 Numerical homogenization by FFT for composite with interface resistance

2.2.1 Homogenization problem

Consider a periodic composite defined by the irreducible unit cell Ω (the period) and we denote by $|\Omega|$ its volume. The composite is assumed to be consisted of two phases, the matrix occupying the domain Ω_1 with the conductivity $\mathbf{K}_1$ and the inclusions which have the conductivity $\mathbf{K}_2$ and occupy the volume Ω_2 . The interface between the inclusions and the matrix is denoted $\Gamma_{(12)}$ and the outward normal unit vector is denoted $\mathbf{n}$. The boundary of the unit cell is denoted $\partial\Omega$. We adopt the Fourier law in the inclusions and in the matrix. The steady heat flux $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ and the temperature $T(\mathbf{x})$ are determined by solving the following set of equations :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \nabla T(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = 0, & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ T(\mathbf{x}) - \mathbf{E} \cdot \mathbf{x}, & \text{periodic, } \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}, & \text{antiperiodic, } \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{cases} \quad (2.1)$$

In these equations, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ is the temperature gradient, $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ is the second order conductivity tensor which takes the value $\mathbf{K}_1$ in the matrix and $\mathbf{K}_2$ in the inclusions. In the present study, we assume that both phases are isotropic, as a consequence, we can write $\mathbf{K}(\mathbf{x}) = k(\mathbf{x})\mathbf{I}$ where $\mathbf{I}$ is the two order identity tensor and $k(\mathbf{x})$ is the scalar conductivity which takes the values k_1 and k_2 in the matrix and the inclusions respectively. In Eq. (2.1), $\mathbf{E}$ is the macroscopic temperature gradient that is prescribed to the unit cell. Due to the periodicity conditions at the boundary of the unit cell, we have the property :

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) dV + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_{(12)}} [T(\mathbf{x})] \overset{s}{\otimes} \mathbf{n} dS \quad (2.2)$$

The integral over $\Gamma_{(12)}$ accounts for the temperature jump that is described by the Kapitza model [61]. In this model, the normal component of the heat flux is continuous across $\Gamma_{(12)}$:

$$\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\sigma}^{(2)} \cdot \mathbf{n} \quad (2.3)$$

where $\boldsymbol{\sigma}^{(i)}$ for $i = 1, 2$ represents the value of the flux in the matrix and the inclusion respectively. At the same time, the temperature is discontinuous and

its jump across $\Gamma_{(12)}$ is related to the normal component of the heat flux by the relation :

$$[T(\mathbf{x})] = T^{(2)}(\mathbf{x}) - T^{(1)}(\mathbf{x}) = h_s \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{(12)} \quad (2.4)$$

where h_s is the thermal resistance coefficient.

We determine the macroscopic properties of the composite following the classic average rule :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) dV = \mathbf{K}^{hom} \cdot \mathbf{E} \quad (2.5)$$

where $\mathbf{K}^{hom}$ is the two-order homogenized conductivity tensor.

The weak form of the boundary value problem (2.1) with the interface condition (2.4) has been provided by Yvonnet et al. [120] for instance and reads :

$$\boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{E} = \min_{T \in \mathcal{U}} W(T) \quad (2.6)$$

with :

$$W(T) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(T(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(T(\mathbf{x})) dV + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_{(12)}} \frac{[T(\mathbf{x})]^2}{h_s} dS \quad (2.7)$$

and where $\mathcal{U}$ is the set of admissible temperature fields which are periodic, continuous and differentiable in the matrix and the inclusions, and which satisfy to the average relation (2.2).

2.2.2 Discretization

The problem is discretized with Fourier series and additional functions which are null outside the inclusion (in the matrix). The introduction of these additional functions allows to describe the jump of the temperature across $\Gamma_{(12)}$. The temperature in the unit cell is given by :

$$T(\mathbf{x}) = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} + \sum_{n=-N}^{N-1} \hat{T}_n \exp(i \boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}) + \sum_{\beta=1}^Q \tau^\beta(\mathbf{x}) \quad (2.8)$$

In the above equation, $\hat{T}_n$ are the Fourier coefficients associated with the continuous functions $\exp(i \boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x})$ where $\boldsymbol{\xi}_n$ are the wave vectors and i is the complex number such that $i^2 = -1$. Moreover, in Eq. (2.8), $\tau^\beta(\mathbf{x})$ are the discontinuous functions which are null outside of the inclusions. These functions are chosen into the form :

$$\tau^\beta(\mathbf{x}) = \chi^\beta(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{\mathcal{P}} \lambda_i^\beta w_i^\beta(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.9)$$

where λ_i^β are the unknown coefficients, $\chi^\beta(\mathbf{x})$ are the characteristic functions associated with the inclusion β and $w_i^\beta(\mathbf{x})$ for $i = 1.. \mathcal{P}$ are the interpolation functions of the β^{th} inclusion.

The frontier of the β^{th} inclusion is denoted by Γ_β and its volume is denoted Ω_β .

Since each terms of the Fourier series are continuous, the jump of the temperature across the interface Γ_β is :

$$[T(\mathbf{x})]_{\Gamma_\beta} = -\tau^\beta(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x} \in \Gamma_\beta} \quad (2.10)$$

By derivation, we have for any $\mathbf{x} \in \Omega - \Gamma_\beta$:

$$\varepsilon(T(\mathbf{x})) = \sum_{n=-N}^{N-1} \widehat{\varepsilon}_n \exp(i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}) + \sum_{\beta=1}^Q \varepsilon(\tau^\beta(\mathbf{x})) \quad (2.11)$$

where $\widehat{\varepsilon}_n$ is defined, $\forall n \neq 0$, by :

$$\widehat{\varepsilon}_n = i\widehat{T}_n \boldsymbol{\xi}_n \quad (2.12)$$

and for $n = 0$:

$$\widehat{\varepsilon}_0 = \mathbf{E} \quad (2.13)$$

The unknowns $\widehat{\varepsilon}_n$ could be substituted to $\widehat{u}_n$ by accounting for the compatibility condition (2.12).

The temperature field must also comply with (2.2) in order to be admissible. Owing to relation (2.10) we deduce that :

$$\mathbf{E} = \widehat{\varepsilon}_0 + \sum_{\beta=1}^Q \left[\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_\beta} \varepsilon(\tau^\beta(\mathbf{x})) dV - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_\beta} \tau^\beta(\mathbf{x}) \mathbf{n} dS \right] \quad (2.14)$$

It is readily observed that the last two integrals in the above equation vanish when using the gradient theorem to transform the volume integral over Ω_β into an integral over the surface Γ_β . And, owing to Eq. (2.13), we deduce that the condition (2.2) is fulfilled by the considered trial field.

2.2.3 Minimization

Introducing the temperature (2.8) in (2.7), we obtain :

$$\begin{aligned} W(T) = & \sum_{n=-N}^{N-1} \sum_{m=-N}^{N-1} \widehat{\varepsilon}_n \cdot \widehat{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) \cdot \widehat{\varepsilon}_m \\ & + 2 \sum_{n=-N}^{N-1} \sum_{\beta=1}^Q \sum_{i=1}^{\mathcal{P}} \lambda_i^\beta \widehat{\varepsilon}_n \cdot \boldsymbol{\Pi}_i^\beta(\boldsymbol{\xi}_n) \\ & + \sum_{\beta=1}^Q \sum_{i=1}^{\mathcal{P}} \sum_{j=1}^{\mathcal{P}} \lambda_i^\beta \mathcal{A}_{ij}^\beta \lambda_j^\beta \end{aligned} \quad (2.15)$$

$\mathcal{A}_{ij}^\beta$ is given by :

$$\mathcal{A}_{ij}^\beta = \frac{1}{|\Omega|} \left\{ \int_{\Omega_\beta} \varepsilon(w_i^\beta(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{K}_2 \cdot \varepsilon(w_j^\beta(\mathbf{x})) dV + \int_{\Gamma_\beta} \frac{w_i^\beta(\mathbf{x}) w_j^\beta(\mathbf{x})}{h_s} dS \right\} \quad (2.16)$$

The vector $\mathbf{\Pi}_i^\beta(\xi_n)$ is defined by :

$$\mathbf{\Pi}_i^\beta(\xi_n) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_\beta} \mathbf{K}_2 \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(w_i^\beta(\mathbf{x})) \exp(-i\xi_n \cdot \mathbf{x}) dV \quad (2.17)$$

The stationarity point of $W(T)$ given by Eq. (2.15) is computed by minimizing with respect to $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ for $n = -N..N-1$ and λ_i^β for $\beta = 1..Q$ and $i = 1..\mathcal{P}$. Note that we have substituted to the true unknowns $\widehat{u}_n$ the Fourier coefficients $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ of the temperature gradient, so, when doing the minimization, the comparability equation (3.23) must be accounted for.

The compatibility condition can be also written by considering two projectors $\mathbf{P}_n$ and $\mathbf{Q}_n$ already introduced by Milton [76]. The use of these projectors is essential for the minimization procedure and also for the derivation of the iterative scheme which leads to the computation of the solution at the stationarity point. These two projectors have been introduced in the first chapter (see section 1.1.2.2).

The minimum of (2.15) with respect to $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ is :

$$\mathbf{P}_n \cdot \left[\sum_{m=-N}^{N-1} \widehat{\mathbf{K}}(\xi_n - \xi_m) \cdot \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_m + \sum_{\beta=1}^Q \sum_{i=1}^{\mathcal{P}} \lambda_i^\beta \mathbf{\Pi}_i^\beta(\xi_n) \right] = 0 \quad (2.18)$$

The minimum with respect to λ_i^β is :

$$\sum_{n=-N}^{N-1} \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \cdot \mathbf{\Pi}_i^\beta(\xi_n) + \sum_{j=1}^{\mathcal{P}} \mathcal{A}_{ij}^\beta \lambda_j^\beta = 0 \quad \text{for } \beta = 1..Q, i = 1..\mathcal{P} \quad (2.19)$$

Introducing the inverse of $\mathcal{A}_{ij}^\beta$ by $\mathcal{R}_{ij}^\beta$, we can eliminate the unknowns λ_i^β for $\beta = 1..Q$ and for $i = 1..\mathcal{P}$ from Eqs (2.18) and (2.19). The values at the minimum for $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ with $n = -N..N-1$ satisfy to :

$$\mathbf{P}_n \cdot \sum_{m=-N}^{N-1} \mathbf{L}_{nm} \cdot \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_m = 0 \quad (2.20)$$

for $n = -N..N-1$ excepted for $n = 0$ for which $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 = \mathbf{E}$ and where the fourth order tensor $\mathbf{L}_{n,m}$ is given by :

$$\mathbf{L}_{nm} = \widehat{\mathbf{K}}(\xi_n - \xi_m) - \sum_{\beta=1}^Q \sum_{i=1}^{\mathcal{P}} \sum_{j=1}^{\mathcal{P}} \mathcal{R}_{ij}^\beta \mathbf{\Pi}_i^\beta(\xi_n) \otimes \overline{\mathbf{\Pi}}_j^\beta(\xi_m) \quad (2.21)$$

Introducing :

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n = \sum_{m=-N}^{N-1} \mathbf{L}_{nm} \cdot \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_m, \quad (2.22)$$

we deduce that the value of $W(T)$ at the stationarity point is :

$$W(T(\mathbf{x})) = \sum_{n=-N}^{N-1} \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n \cdot \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \quad (2.23)$$

Moreover, $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n$ complies with Eq. (1.13) and $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ complies with Eq. (1.12), consequently, $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n$ and $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ are orthogonal $\forall n \neq 0$. In the sum for $n = -N..N-1$ between $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n$ and $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$, it then only remains the term corresponding to $n = 0$:

$$W(T) = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_0 \cdot \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_0 \cdot \mathbf{E} \quad (2.24)$$

$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_0$ represents the macroscopic flux which satisfies to $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_0 = \mathbf{K}^{hom} \cdot \mathbf{E}$ where $\mathbf{K}^{hom}$ is the homogenized or effective conductivity of the composite. The effective conductivity is then determined by considering $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_0$ at convergence of the iterative scheme. The expression of the fourth order tensor $\mathbf{L}_{nm}$ contains two parts :

- (i) a classic one $\widehat{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m)$ that accounts for the thermal response of the matrix and the inclusions respectively. The constitutive law is $\mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ in the real space that is non local in the Fourier space. As a consequence, in Eq. (2.20), it involves the discrete convolution product between $\widehat{\mathbf{K}}(\boldsymbol{\xi}_n)$ and the Fourier coefficients $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$. The numerical computation of the convolution product is made with the FFT algorithm and is depicted in [18, 77] considering the shape coefficients.
- (ii) an extra-term involving the triple sum over i, j and β and which accounts for the thermal resistance of the interfaces Γ_β . The summation over β is associated with the number of inclusions in the unit cell. The sum over i and j corresponds to the number of interpolation functions used in each inclusion β .

The expressions of $\mathcal{A}_{ij}^\beta$ and $\boldsymbol{\Pi}_i^\beta(\boldsymbol{\xi}_n)$ are easily computed considering polynomials for the interpolation functions $w_i(\mathbf{x})$. Particularly, when considering simple inclusions shapes such a rectangle or sphere, close-form analytic expressions are derived (they are given in the appendix A).

2.2.4 Resolution with iterative schemes

Following Moulinec and Suquet [84, 85], the linear equation (2.20) can be solved by means of a Fixed Point Method (FPM). It consists to use the following iterative scheme (iteration over k) :

$$\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^{k+1} = \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^k - \widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_n^0 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^k, \quad \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^k = \sum_{m=-N}^{N-1} \mathbf{L}_{nm} \cdot \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_m^k \quad (2.25)$$

which is initialized with :

$$\begin{cases} \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^0 = 0 & \forall n \neq 0 \\ \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^0 = \mathbf{E}, & n = 0 \end{cases} \quad (2.26)$$

The iteration process is stopped when the equilibrium condition for the stress is fulfilled up to a given error ϵ :

$$\frac{\|\mathbf{P}_n \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^k\|_N}{\|\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^k\|_N} \leq \epsilon \quad (2.27)$$

where the definition of the norm $\|\bullet\|_N$ has been already provided in chapter 1 (see Eq. (1.26)).

Alternatively, the linear system (2.20) can be solved with the Conjugate Gradient Method (CGM) :

$$\begin{aligned}
1. \quad \mathbf{q}_n^k &= \begin{cases} \langle \mathbf{p}_n^k \rangle_\Omega + \hat{\Gamma}_n^0 \cdot \left[\sum_{m=-N}^{N+1} \mathbf{L}_{nm} \cdot \mathbf{p}_m^k \right], & \forall n \neq 0 \\ 0, & n = 0 \end{cases} \\
2. \quad \alpha^k &= \frac{\|\mathbf{r}_n^k\|_N^2}{\sum_n \mathbf{p}_n^k \cdot \mathbf{q}_n^k} \\
3. \quad \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n^{k+1} &= \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n^k + \alpha_k \mathbf{p}_n^k \\
4. \quad \mathbf{r}_n^{k+1} &= \mathbf{r}_n^k + \alpha_k \mathbf{q}_n^k \\
5. \quad \beta^k &= \frac{\|\mathbf{r}_n^{k+1}\|_N^2}{\|\mathbf{r}_n^k\|_N^2} \\
6. \quad \mathbf{p}_n^{k+1} &= -\mathbf{r}_n^{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_n^k
\end{aligned} \tag{2.28}$$

The iterative scheme is initialized with (2.26) for $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n^0$ and with :

$$\mathbf{p}_n^0 = -\mathbf{r}_n^0 = \begin{cases} \hat{\Gamma}_n^0 \cdot \left[\sum_{m=-N}^{N+1} \mathbf{L}_{nm} \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_m^0 \right] & \forall n \neq 0 \\ \mathbf{E}, & n = 0 \end{cases} \tag{2.29}$$

2.3 Unit cells and interpolation functions

2.3.1 Composite with rectangular inclusions

In [78], it has been found that the use of cubic polynomials for the interpolation function $w_i(\mathbf{x})$ was sufficient to obtain a good convergence of the solution. However, this study has been performed for fibers which has a smooth interface. We propose to test the accuracy of the method by considering the case of a rectangular inclusion shape for which the corners gives to a more complex distribution of the temperature jump at the interface that requires higher degrees for the considered polynomial interpolation functions to reach the convergence.

The problem is two dimensional and the unit cell is depicted in Fig. 2.1. Each phase is assumed to be isotropic with the local conductivities $k_1 = 1$ and $k_2 = 10$ in the matrix and in the inclusion respectively. The dimensions of the inclusion are denoted by a and b along the space directions x_1 and x_2 . We choose 2D Legendre polynomials for the interpolation functions. Denoting by $P_i(x)$ the 1D Legendre polynomials over the interval $[-1, 1]$, the 2D Legendre polynomials on $[-a/2, a/2] \times [-b/2, b/2]$ are given by :

$$P_{ij}(x_1, x_2) = P_i\left(\frac{2x_1}{a}\right) P_j\left(\frac{2x_2}{b}\right) \tag{2.30}$$

Polynomials of degree 1 are obtained by giving the values $i, j = 1, 0$ and $i, j = 0, 1$ in the above expression. Thereby, we obtain the first two interpolation functions

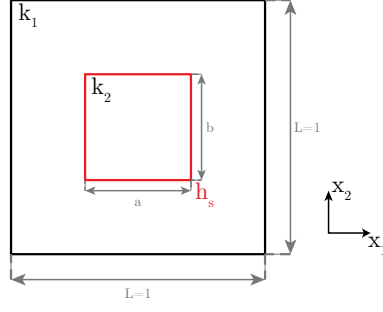


FIGURE 2.1 – Unit cell of the composite with a rectangular inclusion.

$w_1(\mathbf{x})$ and $w_2(\mathbf{x})$. Due to the symmetry of the problem, the solution for the temperature is an odd function with respect to the coordinates x_1 and x_2 . As a consequence, polynomials of degree 2 must be discarded. The polynomials of degree 3 are obtained by giving to indices (i, j) the values $(3, 0)$, $(2, 1)$, $(1, 2)$ and $(0, 3)$ in Eq. (2.30). By doing so, we obtain the interpolation functions $w_i(\mathbf{x})$ for $i = 3, 4, 5, 6$. Their expressions (including also the polynomials of degree 5) are provided in appendix A. Note that there is two linear interpolation functions, a third order interpolation uses a total number of 6 polynomials, the 5th order interpolation uses 12 polynomials, the 7th order uses 20 polynomials...

Exact Fourier transform of the conductivity $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ is needed in the definition of tensor $\mathbf{L}$ in Eq. (2.21). It is determined by the shape coefficients, they are the expressions of the Fourier transform of the characteristic functions of the phases. Consider the particular case of the unit cell given in Fig. 2.1, we denote by $I_1(\mathbf{x})$ and $I_2(\mathbf{x})$ the characteristic functions of the matrix and the inclusion respectively. The shape coefficient of the rectangular inclusion is :

$$\forall \boldsymbol{\xi} \neq 0 : \hat{I}_2(\boldsymbol{\xi}) = ab \sin_c(a\xi_1) \sin_c(b\xi_2), \quad \hat{I}_2(0) = ab \quad (2.31)$$

where $\sin_c$ denotes the cardinal sine. Expressions of vectors $\boldsymbol{\Pi}_i$ are computed in term of the derivative of the shape coefficient and are given in the appendix (4.6).

2.3.2 Composite with spherical inclusions

3D computations are performed on unit cells with spherical inclusions. Two examples are considered, a cubic unit cell with one centered spherical inclusion and unit cells with randomly distributed spherical inclusions. Two unit cells are provided in Fig. 2.2. For the random distribution, 30 inclusions with the same radius $\bar{R} = 0.1$ are used. Here, $\bar{R}$ represents the non dimensional radius defined by R/L , L being the size of the RVE. The computations are performed for the non dimensional problem for which the unit cell has the dimension 1 along each space direction.

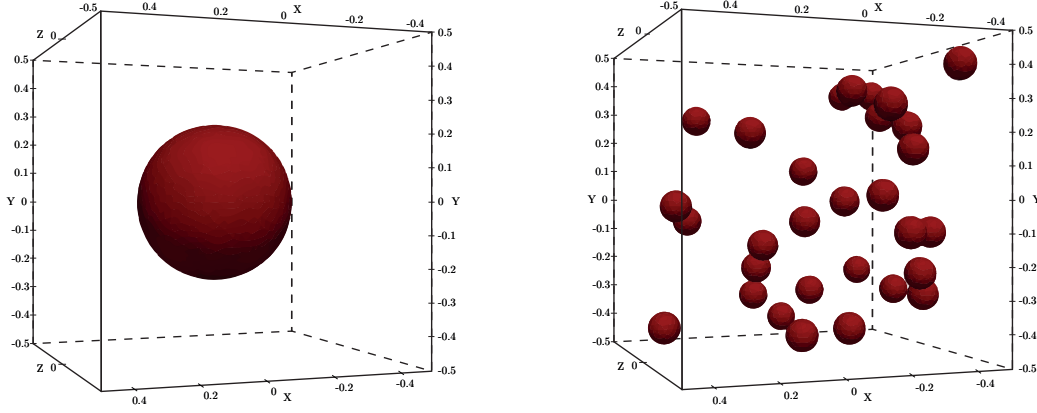


FIGURE 2.2 – RVE with a single centered inclusion (at right) and random distribution whit 30 inclusion of radius equal 0.1 (at the left).

In the spherical inclusions, we use harmonic polynomials for the interpolation functions $\mathbf{w}_i(\mathbf{x})$. The harmonic polynomials are :

$$\Phi_{nm} = r^n P_n^m(\cos \varphi) [A_{nm} \cos(m\theta) + B_{nm} \sin(m\theta)] \quad (2.32)$$

with $m = 0..n$ and $n = 0.. + \infty$. Coefficients A_{nm} , B_{nm} have to be determined and $P_n^m(x)$ are the associated Legendre polynomials. In the present work, we only use polynomials of odd number and of order 1 and 3 that corresponding to $n = 1$ and $n = 3$ in Eq. (2.32). The expressions of the polynomials are detailed in appendix 4.7. Concerning the shape coefficients, their expressions have been provided in chapter 1. The components of matrix $\mathcal{A}_{ij}$ and vectors $\mathbf{\Pi}_i$ are detailed in appendix A.

2.4 Convergence

One important point of the FFT method lies in the choice of the reference material. The rate of convergence of the FFT iterative schemes strongly depends on the choice of this parameter, it has been well documented in [44, 75, 83]. The choice of k_0 has been studied in [78] in the case of a composite with fibers and it has been found that the value :

$$k_0 = \frac{k_1 + k_2}{2} \quad (2.33)$$

is satisfactory whatever the value of the thermal resistance coefficient h_s .

The same study is now provided for the rectangular inclusion. For instance, in Fig. 2.3 (at the left), we provide the number of iterations as function of k_0 for the FPM. The computations are performed for $h_s = 1.5$, $a = b = 0.5$ and by considering polynomials of order 1, 3 and 5 successively. k_0 varies in the range $[5, 7.5]$. For $k_0 < 5$ the convergence of the FPM is not achieved. For $k_0 > 7.5$ the number of iterations still increases linearly with the value of k_0 . It is observed that the number of iterations depends on the number of polynomials. Particularly, the number of iterations is more important when polynomials of degree 5 are used.

Owing to that results it can be conclude that the conductivity given by Eq. (2.33) is optimal for the rectangular inclusion. It must be noted that the FPM method does not converge when polynomials of degree 7 are used. In Fig. 2.3 (at the right), we display the same results with the CGM. It is observed that the number of iterations does not depend on the choice of k_0 in the range $[5, 7.5]$. We also observe that the convergence is reached with a polynomial of degree 7. The number of iterations still depends on the degree of the polynomials but the number of iterations is strongly reduced comparatively to the FPM. The results show that the CGM is more efficient for the resolution of the linear system.

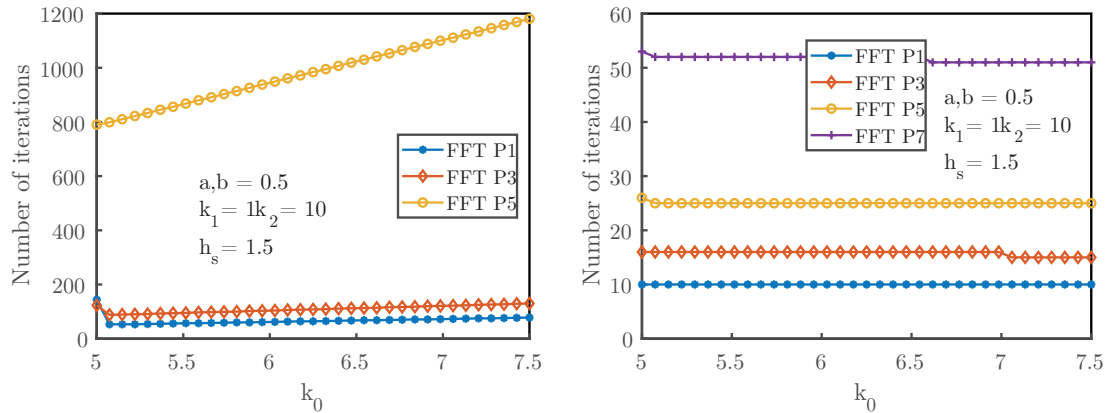


FIGURE 2.3 – Number of iterations at convergence as function of k_0 for the FPM (at the left) and the CGM (at the right).

The results for a unit cell containing a single centered spherical inclusion are provided in Fig. 2.4. The radius of the sphere is $\bar{R} = 0.25$ and the interface coefficient is $h_s = 1$. The computations are performed by considering polynomials of degrees 1 or 3. The results are quite similar to that already observed for the rectangular inclusion. First, a better rate of convergence is still noted with the CGM. Also, the number of iterations at convergence with the CGM is almost independent of the choice of k_0 but increases with k_0 when the FPM is used. Since the CGM is more efficient for both examples, only the results computed with this method are presented in the next of the paper.

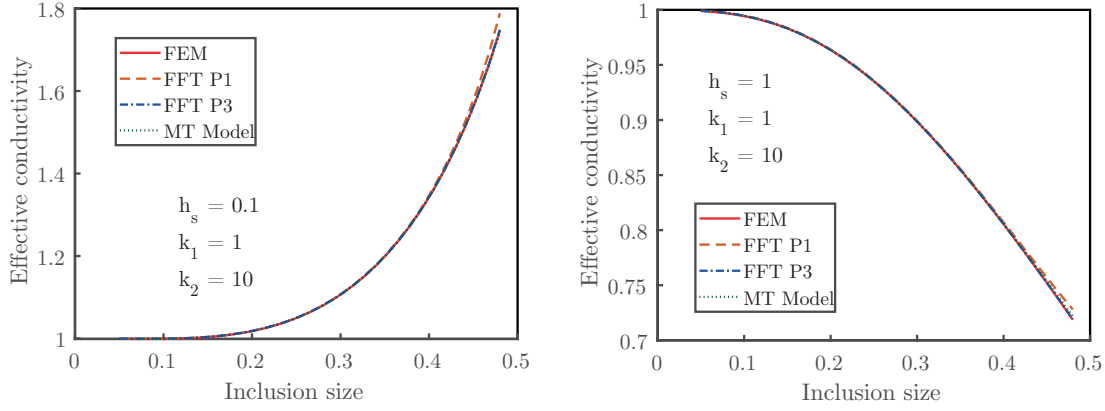


FIGURE 2.4 – Effective conductivity as function of the radius for the spherical inclusion with $h_s = 0.1$ (at the left) and $h_s = 1$ (at the right).

The convergence of the CGM with the value of the thermal resistance is shown in Fig. 2.5 for the rectangular inclusion (at the left) and the spherical inclusion (at the right). The results are restricted to the range $[0, 4]$ for the rectangular inclusion and to the range $[0, 2]$ for the spherical inclusion. For higher values of the coefficient h_s , the curves saturate and the number of iteration becomes independent of h_s . We observe that the convergence is achieved whatever the value of the interface resistance.

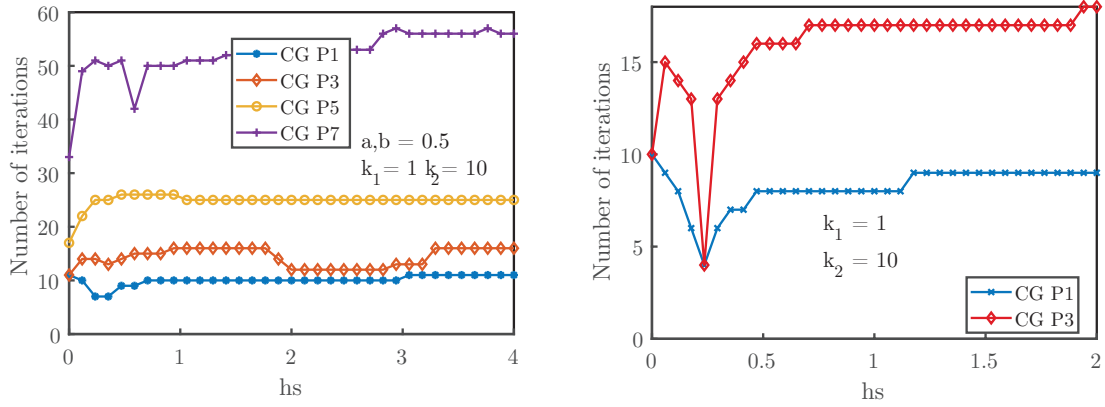


FIGURE 2.5 – Number of iterations as function of h_s with the CGM for the rectangular inclusion (at the left) and the spherical one (at the right).

2.5 Validation with finite element solutions

In order to validate the results obtained with the extended FFT method, calculations are carried out with the FEM. Before that, we first investigate the convergence of the FE solutions.

2.5.0.1 Convergence of the FE solution

In the case of a rectangular inclusion, the precision of the FE solutions is investigated by comparing the solution computed with N_e elements and $N_{e_{max}} = 1\,200\,000$ elements following the formula :

$$\text{error} = \frac{||k_{\text{hom}}(N_e) - k_{\text{hom}}(N_{e_{max}})||}{||k_{\text{hom}}(N_{e_{max}})||} \quad (2.34)$$

The computations are performed by considering three values of the interface resistance and the results are given in Fig. 2.6. We still use the values $a = b = 0.5$ and the local conductivities $k_1 = 1$ and $k_2 = 10$. It is observed that the solution which used at least 4000 elements leads to an error inferior to 0.1%. In the next, we use 4000 elements for the comparisons with the FFT solutions.

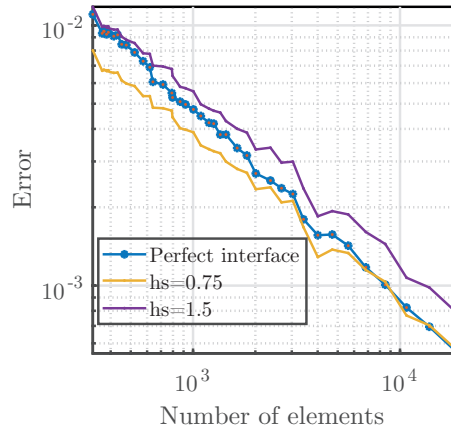


FIGURE 2.6 – Relative error as function of the number of elements for the rectangular inclusion.

The FE solution for spherical inclusions is assessed with an exact one following a method proposed by Yvonnet et al. [121]. The exact solution used for these comparisons corresponds to a composite sphere subjected to a uniform gradient of temperature at its boundary. The composite sphere is constituted of a matrix occupying the domain $R_{int} < r < R_{ext}$, and an inclusion occupying the domain $r < R_{int}$. The coating and the inclusion are separated by an imperfect interface obeying to the Kapitza model. The close form solution of this problem is provided in [121]. A cubic cell is cut out from the composite sphere and the exact temperature field is prescribed on the external boundary of this cubic cell (see Fig. 2.7). The comparisons with the FEM solution are provided for $k_1 = 1$, $k_2 = 10$, $R_{int}/R_{ext} = 0.25$ and the dimension of the cube is $L = R_{ext}/2$.

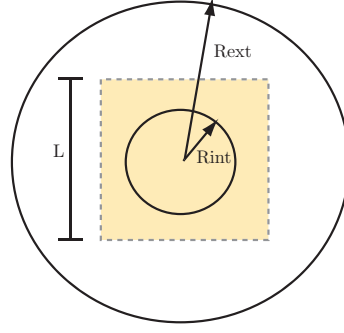


FIGURE 2.7 – Composite sphere with external radius R_{ext} and internal radius R_{int} and cube of dimension L cut out of the sphere.

The error between the FE solution and the analytic one is provided in Fig. 2.8 for three meshes. It is observed that the error is strictly inferior to 10^{-3} with the meshes containing 2.2×10^5 and 5×10^5 elements. For the mesh with 6.7×10^4 elements, the error is inferior to 10^{-3} excepted for low values of h_s for which the error is slightly higher than 10^{-3} . In the next of the paper we use 10^5 elements for the problem of a unit cell with a single inclusion.

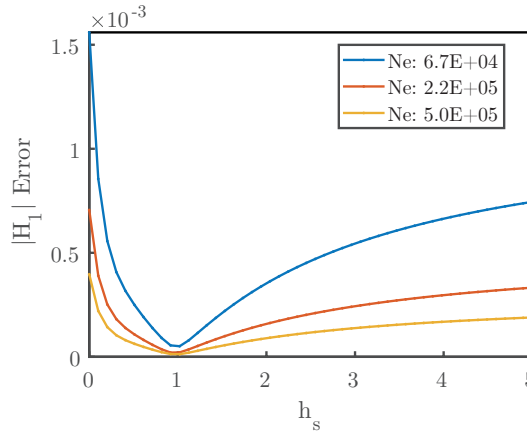


FIGURE 2.8 – Convergence analysis of the FE solution as function of the interface resistance

2.5.1 Comparisons FFT/FEM

We now compare the solutions obtained with the FFT method and the FEM. We first consider the case of a rectangular inclusion. The conductivities of the phases are still given by $k_1 = 1$ and $k_2 = 10$. Two values of the thermal resistance are used : $h_s = 0.1$ and $h_s = 1$. In Fig. 2.9 (at the left), we represent the variations of the effective conductivity for a squared inclusion as function of its dimension $a = b$. When $a = b = 0$ the unit cell is constituted of a homogeneous solid with the conductivity $k_1 = 1$. When $a = b = 1$ the material is not homogeneous but is constituted of a pavement of homogeneous rectangular squared cells of conductivity k_2 separated by an imperfect Kapitza interface that's why, when $a = b = 1$,

the results leads to an effective conductivity different of k_2 . In that limit case, the effective conductivity is only equal to k_2 when the thermal resistance is null. The FFT solution is computed by considering, in the inclusion, polynomials of degree 1, 3, 5 and 7; the results are compared with the FE solutions. Differences are observed between the FFT P1 and other solutions. However, the solutions with P3, P5 and P7 are very close to the FE one.

Depending on the value of the interface resistance coefficient h_s , it is observed that the curve can increase or decrease with the dimension of the inclusion. This can be interpreted as a competition of two effects : (i) first, by increasing the dimension of the inclusion, that is more conductive than the matrix, it increases the effective conductivity, (ii) second, by increasing the dimension of the inclusion we also increase the interface dimensions which can be seen as a less resistive third phase inserted between the matrix and the inclusion. The correspondance existing between a thin interphase and an interface model has been well documented in the literature, the reader can refer for instance to Sanchez-Palencia [99], Pham Huy and Sanchez-Palencia [58] for thermal conduction problem or Hashin [55], Benveniste et al. [12, 11] in the case of elasticity. In order to evaluate the discrepancy between the FFT and FE solution, the relative errors are provided in Fig. 2.9 (at the right) as function of the dimension of the inclusion. It is observed that the FFT solution with linear polynomials (FFT P1) is not accurate. The solutions with higher order polynomials leads to converged solutions. Particularly, when the the size of the inclusion is small ($a < 0.2$) the error with the FE solution is inferior to 0.1%.

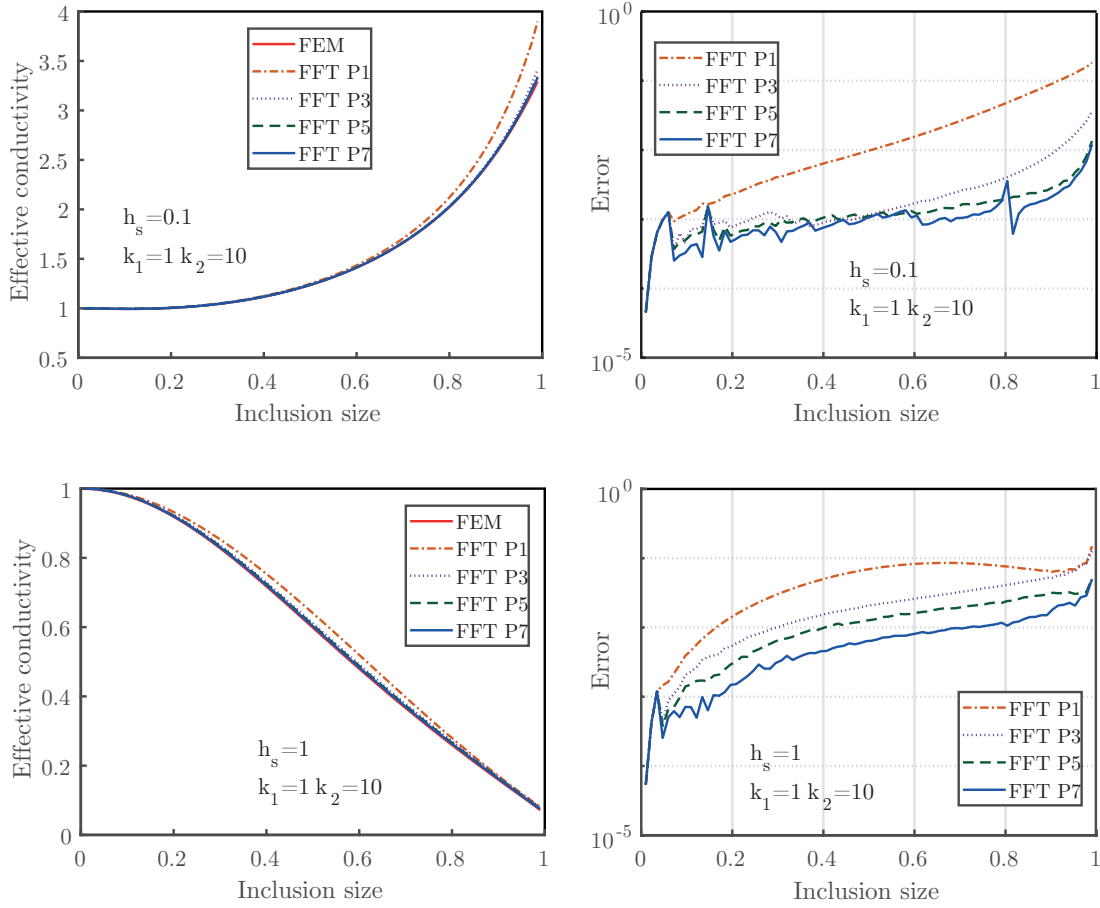


FIGURE 2.9 – Variations of the effective conductivity with the dimension of the inclusion for the rectangular inclusion (at the left). Relative error between the FFT and FE solutions (at the right).

In Fig. 2.10 (at the left) we represent the variations of the effective conductivity with the thermal resistance coefficient h_s in the range $[0, 1]$. The conductivities of the phase are still given by $k_1 = 1$ and $k_2 = 10$. Two dimensions of the inclusion are considered : $a = b = 0.2$ and $a = b = 0.8$. By increasing the interface resistance, we decrease the effective conductivity of the composite. The FFT results with polynomials of degree 1,3,5 and 7 are compared with the FE solution. Again, we still observe in each case small discrepancies between the FFT P1 with other solutions. The solutions with polynomials of degree 3 and higher order polynomials are very close to the FEM solution. The relative error between the FFT solutions and the FE one are provided in Fig. 2.10 (at the right) as function of the thermal resistance coefficient h_s . It is observed that the error increases with the interface resistance. The relative error between the FFT and FE solutions remains inferior to 1% whatever the value of h_s for the solution with P7 approximation.

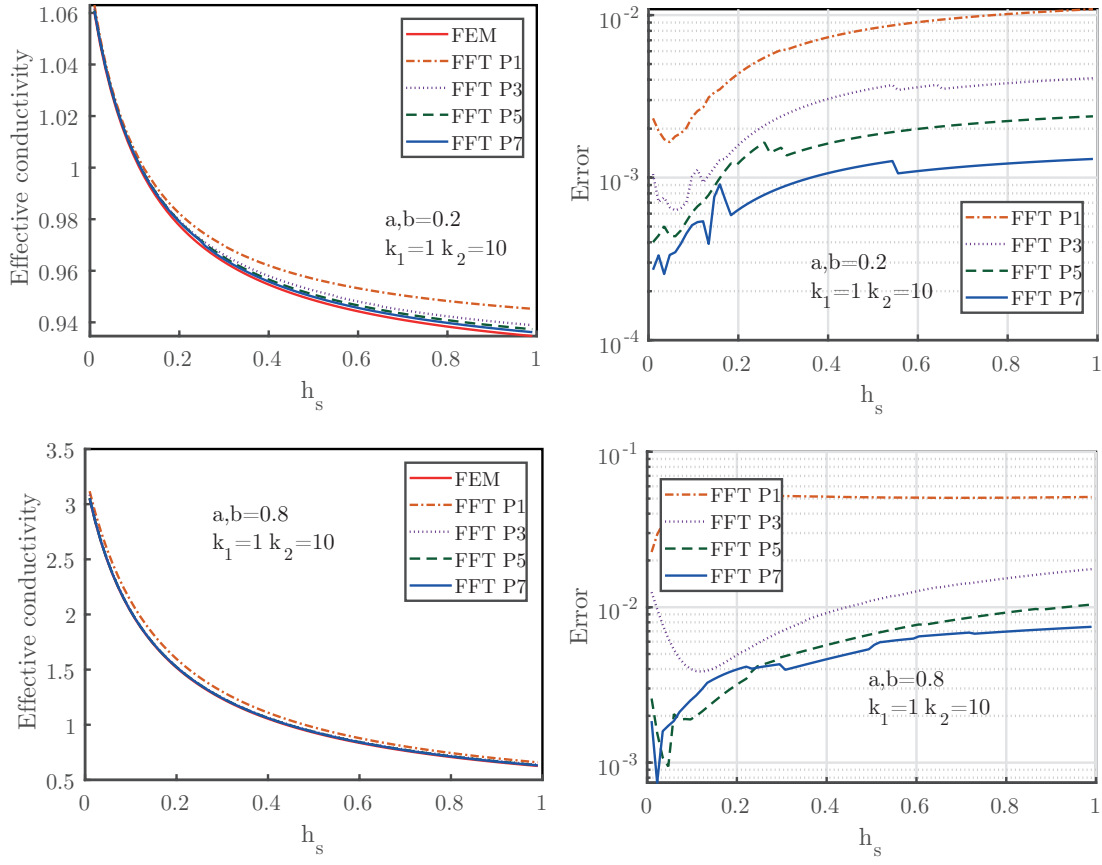


FIGURE 2.10 – Variations of the effective conductivity with the thermal resistance coefficient for the rectangular inclusion (at the left). Relative error between the FFT and FE solutions (at the right).

In Fig. 2.11 and 2.12 we display the same results in the case of a 3d cubic unit cell containing a spherical inclusion. We represent the effective conductivity (at the left) and the relative error with the FEM solution as function of the size of the inclusion (the relative radius $\bar{R}$). The FFT solution is computed with polynomials of degree 1 and 3 and are compared with the FE solutions. It is observed a good agreement between the three solutions. In the case of a spherical inclusion, the approximation with polynomials of degree 1 is more accurate than in the case of a rectangular inclusion. Note also that the exact solution for the sphere embedded in an infinite body with an imperfect interface has been already provided in [93]. It has been shown that the temperature field inside the inclusion is a polynomials of degree 3 (in the case of a perfect interface the solution is linear with the vector position). When the radius of the spherical inclusion is small compared to the dimensions of the unit cells, it is then expected that the solution in an infinite body gives a good approximation of the solution. For instance in the case $\bar{R} = 0.2$ a good agreement with the FE solution is observed. It is observed that the error between the FE solution and the FFT P3 is inferior to 0.1% whatever the value of the inclusion size and the value of the interface resistance.

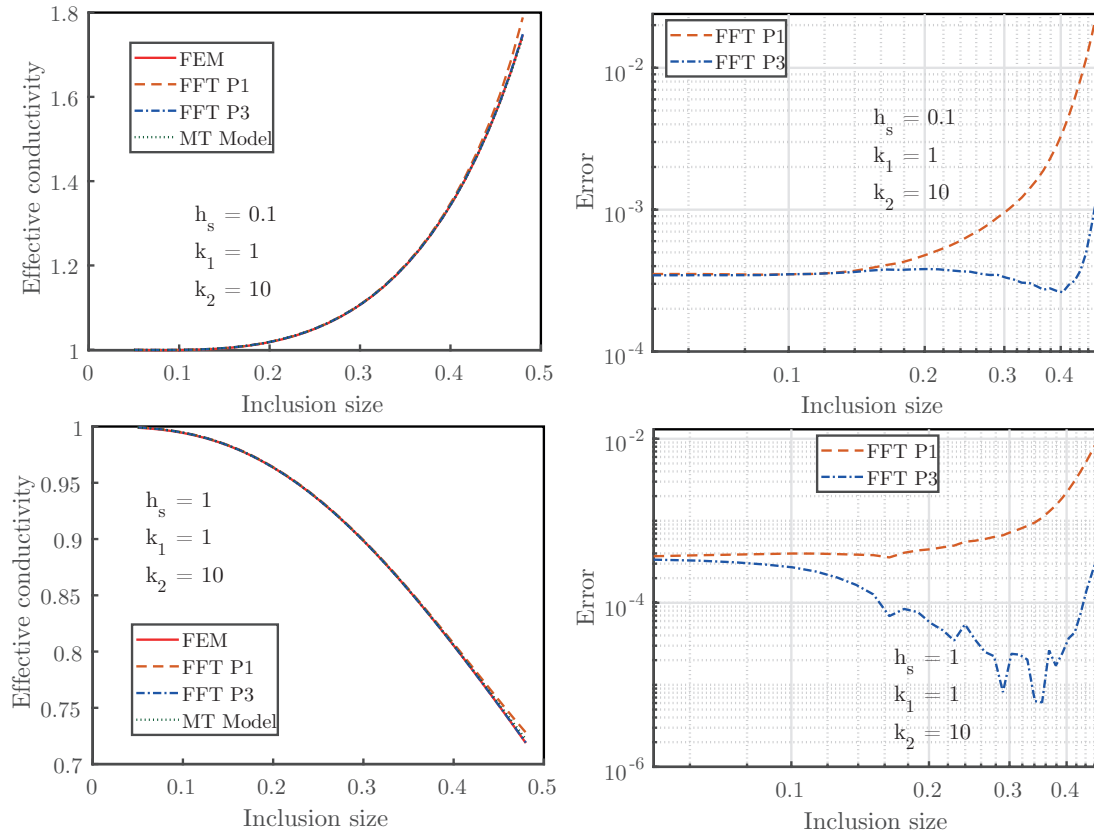


FIGURE 2.11 – Variations of the effective conductivity with the dimension of the inclusion for the spherical inclusion (at the left). Relative error between the FFT and FE solutions (at the right).

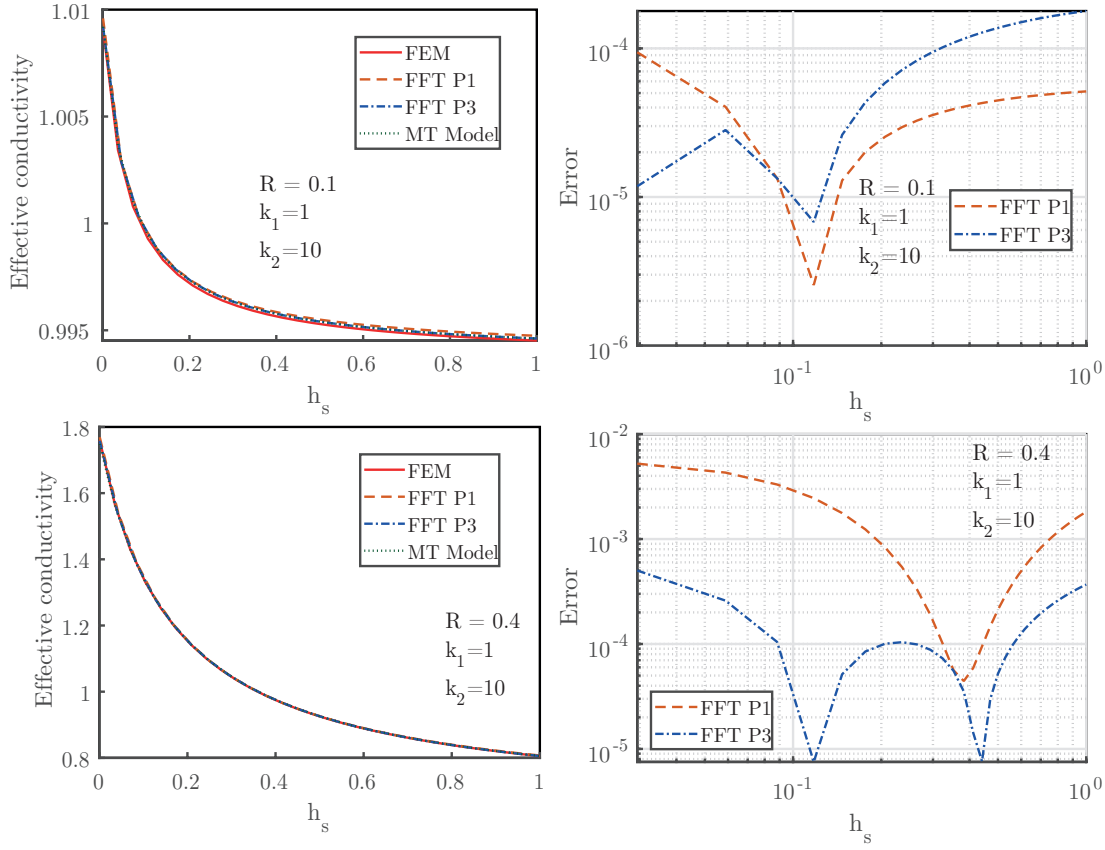


FIGURE 2.12 – Variations of the effective conductivity with the thermal resistance coefficient for the spherical inclusion (at the left). Relative error between the FFT and FE solutions (at the right).

2.5.1.1 Temperature field at the interface

Now we propose to compare the jump of temperature across the interface of the rectangular inclusion obtained with the FFT and the FEM for $k_1 = 1$, $k_2 = 10$, $h_s = 1$ and $a = b = 0.5$. The results are compared in Fig. 2.13 and in Fig. 2.14. In Fig. 2.13 we provide the variations of the temperature jump across the edge at $x_1 = a/2 = 0.25$ as function of $x_2 = -b/2..b/2 = -0.25..0.25$ (see Fig. 2.1 for the definition of x_1 and x_2). In Fig. 2.14, we display the same results at the edge $x_2 = b/2$ as function of $x_1 = -a/2..a/2 = -0.25..0.25$. We observe a good agreement between the FE and the FFT solutions obtained with the P5 and P7 polynomials.

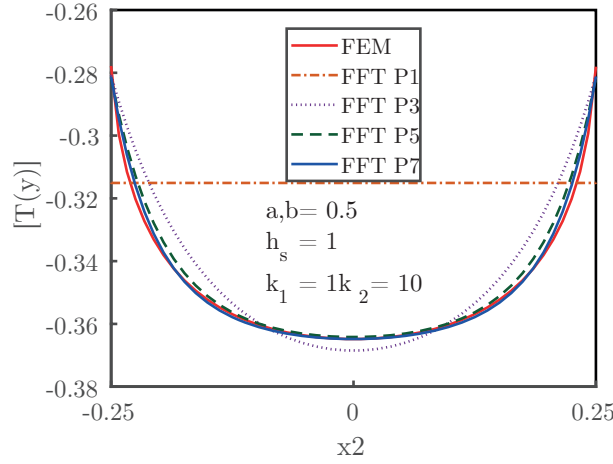


FIGURE 2.13 – Temperature jump at the interface of the squared inclusion as function of the position.

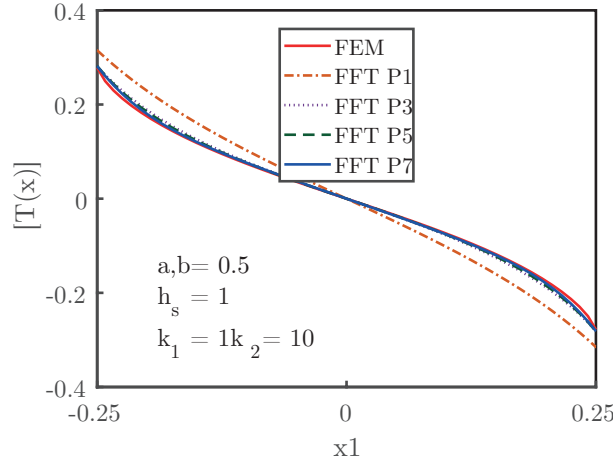


FIGURE 2.14 – Temperature jump at the interface of the squared inclusion as function of the position.

2.6 Comparison with analytical estimates

In this section, the computations are performed on the 3D unit cell containing a population of spherical inclusions of radius R . The values of the conductivities are $k_1 = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ and $k_2 = 10 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, the thermal resistance of the interface is $h_s = 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ K/W}$ (here we use the values considered in [93]). In this example the effect of the inclusion size on the effective conductivity is investigated. The calculations are performed on a dimensionless problem, i.e. on a unit cell of dimension 1 along each space direction and with a matrix of conductivity equal to 1. By making this substitution it has been shown in [78] that the apparent

thermal resistance coefficient of the dimensionless problem is given by :

$$h_s^* = \frac{h_s \bar{R}}{k_1 R} \quad (2.35)$$

where $\bar{R}$ is still given by R/L . Then, by decreasing the size of the inclusions, the radius R , we increase the apparent thermal resistance coefficient in our numerical computations. The calculations are performed for various occurrences and the effective conductivity is provided in Fig. 2.15 (at the left) for the inclusion radius $R = 4\mu m$. It could be noted that the convergence of the cumulated average conductivity is rapidly achieved. In that example, we determine the effective conductivity for 30 occurrences. The computations are performed for different values of the spherical radius and are reported in Fig. 2.15 (at the right). In this figure, we represent the effective conductivity as function of the radius of the inclusions. It is observed that the conductivity increases with the radius of the sphere. Indeed, by increasing R , the volume fraction being constant, the total surface between the matrix and the inclusions then decreases, reducing the thermal resistance effects on the macroscopic conductivity. The FFT results are compared with the Mori-Tanaka scheme derived in [93]. A good accuracy between the analytic estimates and the numerical solutions is observed.

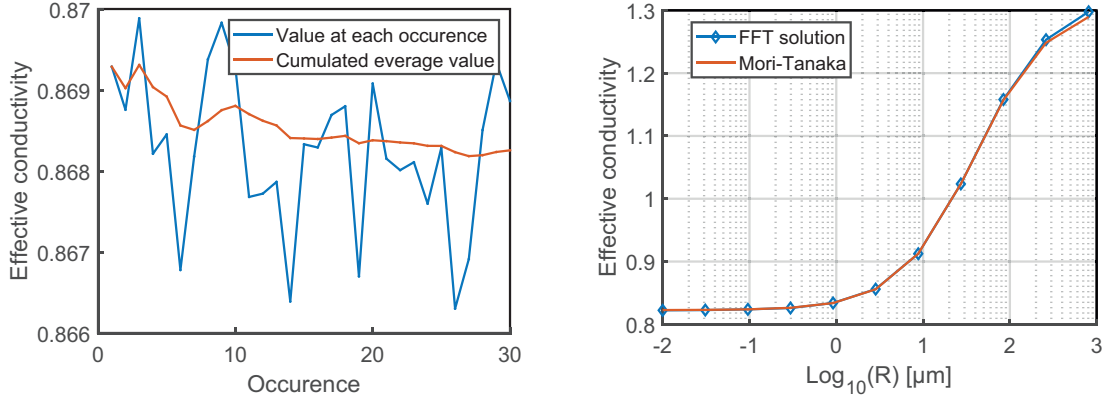


FIGURE 2.15 – Effective conductivity at each occurrence and cumulated average conductivity for a population of 30 spherical inclusions with radius $R = 4\mu m$ (at the left). Variation of the effective conductivity with the inclusion radius (at the right).

2.7 Conclusion

The extended FFT method has been employed to derive the effective conductivity of composites with Kapitza interface resistance. The principle of the approach is based on a variational procedure by considering discontinuous fields across the interface. The accuracy and robustness of the method is investigated in the case of a composite with rectangular and spherical inclusions and has been evidenced through comparisons with FE solutions. It has been shown that the extended FFT method is able to provide an accurate solution for the effective conductivity

as well as for the local fields in the RVE, to this end the comparison of the temperature jump is studied for the rectangular inclusion. The comparison of the FFT solutions with the Mori-Tanaka model has been also provided in the case of a population of spherical inclusions with a very good agreement.

Chapitre 3

Homogénéisation numérique par FFT des composites élastiques avec interfaces adhésives

Résumé :

FFT based numerical methods are efficient for computing the effective properties of heterogeneous media and have encountered a great popularity in the scientific community of the homogenization theory. One particular challenging development concerns the extension of the approach to composite with imperfect interfaces and, in particular, adhesive interface. From a practical point of view, such interface generally represents a thin interphase with very soft local elastic properties or interfacial damage. In this work, we provide an efficient three-dimensional numerical FFT based approach to account for displacement jump across the spring-layer curved imperfect interfaces. The principle of the approach lie on three main ingredient : (i) a classic variational principle, (ii) the discretization with truncated Fourier series plus an enrichment with discontinuous functions, (iii) the use of shape coefficients to describe rigorously the microstructure geometry. The accuracy and convergence rate of this numerical approach is assessed by comparison with Finite Element solutions and analytical models in the case of composites with long fibers and spherical inclusions.

3.1 Introduction

This chapter is concerned with the determination of the homogenized elastic properties of composite materials with imperfect interfaces. Interface discontinuities can occur in some specific problems such that nanocomposites (Sharma and Ganti [105], Duan et al. [37], Kushch et al. [64]) or adhesive interfaces (Benveniste [10], Achenbach and Zhu [1], Hashin [51, 52, 53], Qu [92], Hashin [55], Duan et al. [38], [63]). In the present paper, we only deal with adhesive interfaces in composites with the spring model which evolves the discontinuity of the displacement. This jump is related to the traction acting on the interface that remains continuous and this relation involves two surface parameters. An adhesive interface can be interpreted as a thin soft elastic interphase located between the relative stiffer matrix and inclusions [53, 12, 11]. The homogenization problem with interphase model (also called three-phases model) consists of two perfect bonding interfaces

and has been first studied by Walpole [113]. Other many works have studied the three-phases-problem to determine the effective properties of composites, see for instance Herve and Zaoui [57], Cherkaoui et al. [33], Asp et al. [3], Christensen and Lo [34]. The equivalence between a very thin soft or stiff interphase and interface models has been rigorously demonstrated by Benveniste and Miloh [12] in the two dimensional case and later by Benveniste [11] in the three dimensional case. Particularly, a thin compliant interphase, relatively to the surrounding elastic phases, is equivalent to a linear spring interface model. Hence, the commonly used interface models appears to be two limit case of the interphase model. Advantageously, the effect of the thin interphase is conveniently expressed in term of an imperfect interphase, and by doing, only two phases remain in the problem. Many studies have been conducted in order to determine the effective properties of the elastic composites with adhesive interface/thin interphase. For example, in Benveniste [10], the energy-based generalized self-consistent scheme (GSCS) of Christensen and Lo [34], is employed to determined the effective shear modulus of composites with spherical inclusion. In this work, Only the tangential component of the displacement is discontinuous across the interface, but it is assumed to be perfectly bonded in the normal direction. Later, Achenbach and Zhu [1] consider discontinuities in both normal and tangential directions for fibrous composites. Hashin [51] determine the effective properties of composites with imperfect adhesive interface/thin interphase for composites with fibers and spherical particles. It is generally attributed to this work the idea of the replacement of an interphase by an equivalent imperfect interphase that has been later generalized to arbitrary 3D and anisotropic context by Benveniste [11]. Qu [92] generalizes the Mori-Tanaka estimate for composites with spring-interface in the context of ellipsoidal inclusions and provides analytic expressions for the spherical shape. Note also that the Mori-Tanaka scheme has been more recently extended to the case of ellipsoidal shape by [35]. Alternatively, the effective properties of composites with fibers have been derived by Hashin [55] considering the Composite Cylinder Assemblage (CCA) and the Generalized Self-Consistent Scheme (GSCS) of Christensen and Lo [34].

In the present work, we determine the effective properties of composites by considering an extended-FFT method. The numerical homogenization methods based on FFT algorithm has been proposed in the nineties by Moulinec and Suquet [84, 85] and has been employed in numerous works to determine the effective properties of composites with perfect interfaces, see for instance [118, 80, 45, 115], and composites with interphases [79]. FFT methods can be seen as mesh free numerical approach based on Fourier series discretization [77] and uses exact expressions of the Green function for elasticity. The method has been successfully extended to a wide range of physical problem including piezoelectricity [20], transport properties in porous media [81, 69], granular materials [117], damage [125], diffusivity in porous solids [110], permeability of biporous media [74] among many others. An exhaustive overview of the works about FFT method scattered throughout the literature has been collected by [104]. However, all these works deal with problems in which the fields are continuous across the interfaces. Recently, a FFT method has been developed to handle the problem of composite conductors with Kapitza model which evolves a temperature jump across the interface between inclusions and matrix [78]. We propose to extend this method to elastic composites with adhesive interface.

The chapter is organized as follows. In section 3.2, we recall the homogenization

problem of composites with imperfect adhesive interfaces. In section 3.3 we deliver some mathematical elements of the Fourier method considered in section 3.4 devoted to the derivation of the FFT method for adhesive interface. In this section, we provide the general variational principle, its discretization with truncated Fourier series and the enrichment with discontinuous interpolations function to account for the displacement jump. The discretization of the problem for circular and spherical inclusions with the shape functions is more precisely depicted in section 3.5. The convergence of the FFT algorithm is analyzed in section 3.6 and the solutions are compared with FE ones. The FFT solutions are subsequently compared with analytic estimates in section 3.7.

3.2 Homogenization problem

The problem under consideration concerns a composite made up of two distinct elastic phases denoted Ω_1 (the matrix) and Ω_2 (the inclusions). Both elastic phases are assumed to be isotropic and we denote by $\mathbb{C}_1$ and $\mathbb{C}_2$ the elastic fourth-order tensors in Ω_1 and Ω_2 respectively. Also, we denote by λ_1, μ_1 and λ_2, μ_2 the associated Lamé coefficients. The smooth interface between Ω_1 and Ω_2 is denoted $\Gamma_{(12)}$ and we denote by $\mathbf{n}$ the outward normal unit vector taken on this surface.

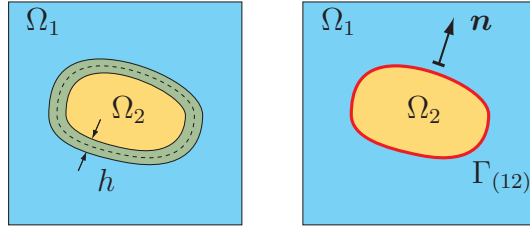


FIGURE 3.1 – Unit cell problems with coated inclusion (at the left) and adhesive interface (at the right).

In both phases Ω^1 and Ω^2 , the elastic elastic law is used and the periodic conditions are applied on the boundary $\partial\Omega$:

$$\begin{cases} \varepsilon(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \nabla^t \mathbf{u}(\mathbf{x})), & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \varepsilon(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = \mathbf{0}, & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} \text{ periodic}, & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \\ \mathbf{t}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \text{ antiperiodic} & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.1)$$

The elastic tensor $\mathbb{C}(\mathbf{x})$ is equal to $\mathbb{C}_1$ in the matrix and $\mathbb{C}_2$ in the inclusions. We assume that the mechanical behavior at the interface is described by the spring model. The displacement is discontinuous across the interface and the jump is denoted :

$$[\mathbf{u}(\mathbf{x})] = \mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{(12)} \quad (3.2)$$

in which $\mathbf{u}^{(i)}$ represents the displacement field over the phase Ω_i . Obviously, the case of a perfect interface corresponds to $\mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{x})$.

Alternatively, the traction acting on the interface $\Gamma_{(12)}$ remains continuous :

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}) = \mathbf{t}^{(1)}(\mathbf{x}) = \mathbf{t}^{(2)}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{(12)} \quad (3.3)$$

Finally, the jump of displacement is proportional to $\mathbf{t}(\mathbf{x})$:

$$[\mathbf{u}(\mathbf{x})] = \mathbf{H}.\mathbf{t}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{(12)} \quad (3.4)$$

where $\mathbf{H}$ is a second-order elastic tensor that characterize the compliance of the imperfect interface. This tensor has the following general expression :

$$\mathbf{H} = S_n \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + S_t (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \quad (3.5)$$

where S_n and S_t are two parameters of the spring interface model. For instance, in [53], the author use three coefficients which are the principal values of the two order tensor $\mathbf{H}$. In fact, only two elastic coefficients are needed when the interface is associated with a thin isotropic elastic interphase (see for instance [11]). By denoting h the thickness of the equivalent interphase, its Lamé coefficients are $h\lambda_s$ and $h\mu_s$ and they are related to the interface coefficients by the relation :

$$S_n = \frac{1}{\lambda_s + 2\mu_s}, \quad S_t = \frac{1}{\mu_s} \quad (3.6)$$

Note that Eq. (3.4) can be also read :

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}.[\mathbf{u}(\mathbf{x})], \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{(12)} \quad (3.7)$$

where $\mathbf{K}$ is the inverse of $\mathbf{H}$ that reads :

$$\mathbf{K} = \mathbf{H}^{-1} = \frac{1}{S_n} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \frac{1}{S_t} (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \quad (3.8)$$

The unit cell is loaded with the macroscopic strain $\mathbf{E}$ following the average condition :

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})(\mathbf{x}) \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})(\mathbf{x}) dV + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_{(12)}} [\mathbf{u}(\mathbf{x})] \otimes_s \mathbf{n} dS \quad (3.9)$$

where $\otimes_s$ represent the symmetrized outer tensorial product.

Now, the solution of the problem, defined by the set of Eqs. (3.1), (3.2), (3.3) and (3.4), can be formulated as a minimum principal involving the potential W defined by (see for instance [124]) :

$$W(\mathbf{u}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) : \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) dV + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_{(12)}} \frac{1}{2} [\mathbf{u}(\mathbf{x})].\mathbf{H}.[\mathbf{u}(\mathbf{x})] dS \quad (3.10)$$

Let us define by $\mathcal{E}$ the set of admissible displacement field which satisfy to the following properties :

- continuous and derivable in Ω_1 and Ω_2 ,
- periodic,
- satisfy to the average condition (3.9).

The solution of the problem can be read :

$$W(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} = \min_{\tilde{\mathbf{u}} \in \mathcal{E}} W(\tilde{\mathbf{u}}) \quad (3.11)$$

An upper bound for the homogenized elastic fourth-order tensor $\mathbb{C}^{hom}$ is then derived by the minimization of W .

3.3 Mathematical background for Fourier methods

Let us provide in this section some mathematical definitions used in this work. For any Ω -periodic function $f(\mathbf{x})$, we denote by $\hat{f}(\boldsymbol{\xi})$ its Fourier transform :

$$\hat{f}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \exp(-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}) dV \quad (3.12)$$

and we denote by $\boldsymbol{\xi}_n$ the discrete wave vectors by :

$$\boldsymbol{\xi}_n = 2\pi(n_1, n_2, n_3) \quad (3.13)$$

where (n_1, n_2, n_3) are the wave numbers along each space directions $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$. The Fourier series of f is $S(f(\mathbf{x}))$ defined by :

$$S(f(\mathbf{x})) = \sum_n \hat{f}_n \exp(i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}), \quad \hat{f}_n = \hat{f}(\boldsymbol{\xi}_n) \quad (3.14)$$

Let us introduce two orthogonal and complementary fourth-order projectors, namely $\mathbb{P}_n$ and $\mathbb{Q}_n$, by :

$$\mathbb{Q}_n = \mathbb{E}_1(\boldsymbol{\xi}_n) + \mathbb{E}_3(\boldsymbol{\xi}_n), \quad \mathbb{P}_n = \mathbb{E}_2(\boldsymbol{\xi}_n) + \mathbb{E}_4(\boldsymbol{\xi}_n)$$

in which the fourth-order $\mathbb{E}_i(\boldsymbol{\xi})$ for $i = 1..4$ are the first four tensors of the Walpole basis [114] which are given defined :

$$\begin{cases} \mathbb{E}_1(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2} \mathbf{Q}_n \otimes \mathbf{Q}_n & , \quad \mathbb{E}_2(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{P}_n \otimes \mathbf{P}_n \\ \mathbb{E}_3(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{Q}_n \underline{\otimes} \mathbf{Q}_n - \mathbb{E}_1 & , \quad \mathbb{E}_4(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{Q}_n \underline{\otimes} \mathbf{P}_n + \mathbf{P}_n \underline{\otimes} \mathbf{Q}_n \\ \mathbb{E}_5(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{P}_n \otimes \mathbf{Q}_n & , \quad \mathbb{E}_6(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{Q}_n \otimes \mathbf{P}_n \end{cases} \quad (3.15)$$

where the two order tensors $\mathbf{P}_n$ and $\mathbf{Q}_n$ are given by :

$$\mathbf{P}_n = \frac{1}{\|\boldsymbol{\xi}_n\|^2} \boldsymbol{\xi}_n \otimes \boldsymbol{\xi}_n, \quad \mathbf{Q}_n = \mathbf{I} - \mathbf{P}_n \quad (3.16)$$

Note that $\mathbf{P}_n$ and $\mathbf{Q}_n$ are the two-order projectors considered by Milton [76] for the conduction problem.

Any two-order tensor $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ satisfy to the compatibility equation $\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla_s \mathbf{u}$ if its Fourier coefficients have the property :

$$\forall n \neq 0 : \quad \mathbb{P}_n : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n, \quad \text{or} \quad \mathbb{Q}_n : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n = 0 \quad (3.17)$$

The two relations are equivalent since $\forall n \neq 0, \mathbb{P}_n + \mathbb{Q}_n = \mathbb{I}$ where $\mathbb{I}$ is the fourth-order identity tensor.

Alternatively, a stress tensor $\boldsymbol{\sigma}$ is divergence free if its Fourier coefficients satisfy to :

$$\forall n \neq 0 : \quad \mathbb{P}_n : \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n = 0, \quad \text{or} \quad \mathbb{Q}_n : \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n = \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n \quad (3.18)$$

The Fourier components of the Green function for the strain can be also represented along the Walpole basis :

$$\boldsymbol{\Gamma}_n^0 = \frac{1}{\lambda_0 + 2\mu_0} \mathbb{E}_2(\boldsymbol{\xi}_n) + \frac{1}{2\mu_0} \mathbb{E}_4(\boldsymbol{\xi}_n)$$

3.4 Discretization of the problem

The general principle of the method consists to represent the solution as the sum of three kind of displacement fields : (i) the displacement $\mathbf{E} \cdot \mathbf{x}$ that is compatible with the applied macroscopic strain $\mathbf{E}$, (ii) continuous periodic displacement fields, (iii) periodic displacements which are discontinuous across $\Gamma_{(12)}$. For the continuous fields, we use a truncated Fourier series which advantageously leads to a discretized problem formulated with the Green tensor which can be solved with the FFT algorithm. For simplicity, we assume that the unit cell contain only one inclusion. Once the linear system is formulated with one inclusion, the generalization to multiple inclusions is straightforward. The total displacement is then taken into the following general form :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} + \sum_{n=-N, n \neq 0}^{N-1} \hat{\mathbf{u}}_n \exp(i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}) + \chi(\mathbf{x}) \sum_{j=1}^{\mathcal{P}} \lambda_j \mathbf{w}_j(\mathbf{x}) \quad (3.19)$$

In the sum over n the displacement corresponding to $n = 0$ can be omitted since it is constant in Ω . In Eq. (3.19), $\mathbf{w}_j(\mathbf{x})$ for $j = 1..\mathcal{P}$ are discontinuous fields and λ_j for $j = 1..\mathcal{P}$ are undetermined parameters which must be determined by the minimization procedure. Also, in Eq. (3.19), $\chi(\mathbf{x})$ is defined by :

$$\chi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_1 \\ 1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_2 \end{cases} \quad (3.20)$$

Interestingly, with that choice, the jump of displacement across $\Gamma_{(12)}$ is given by :

$$[\mathbf{u}(\mathbf{x})] = - \sum_{j=1}^{\mathcal{P}} \lambda_j \mathbf{w}_j(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{(12)} \quad (3.21)$$

The associated strain field can be read :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x})) = \sum_{n=-N}^{N-1} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \exp(i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}) + \chi(\mathbf{x}) \sum_{j=1}^{\mathcal{P}} \lambda_j \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}_j(\mathbf{x})) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_1, \Omega_2 \quad (3.22)$$

where the following definition is used for $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$:

$$\forall n \in \mathbb{Z}^* : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n = i\hat{\mathbf{u}}_n \otimes_s \boldsymbol{\xi}_n, \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 = \mathbf{E} \quad (3.23)$$

Introducing the strain field (3.22) and the jump of displacement field (3.21) into the expression of W (see Eq. (3.11)), we obtain :

$$\begin{aligned} W = & \frac{1}{2} \sum_{n=-N}^{N-1} \sum_{m=-N}^{N-1} \overline{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n} : \hat{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_m + \sum_{n=-N}^{N-1} \sum_{i=1}^{\mathcal{P}} \lambda_i \overline{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n} : \mathbf{T}_i(\boldsymbol{\xi}_n) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\mathcal{P}} \sum_{j=1}^{\mathcal{P}} \mathcal{A}_{ij} \lambda_i \lambda_j \end{aligned} \quad (3.24)$$

in which $\widehat{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\xi})$ is the Fourier transform of $\mathbb{C}(\mathbf{x})$, $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ is the conjugate of $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ and $\mathcal{A}_{ij}$ is defined by :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ij} = & \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}_i(\mathbf{x})) : \mathbb{C}_2 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}_j(\mathbf{x})) dV \\ & + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma_{(12)}} \mathbf{w}_i(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{H} \cdot \mathbf{w}_j(\mathbf{x}) dS \end{aligned} \quad (3.25)$$

In Eq. (3.24), the two order tensor $\mathbf{T}_i(\boldsymbol{\xi}_n)$ for $i = 1..\mathcal{P}$ are defined by :

$$\mathbf{T}_i(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_2} \mathbb{C}_2 : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}_i(\mathbf{x})) \exp(-i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.26)$$

The stationarity point of the functional W is reached by the minimization with respect to the unknowns $\widehat{\mathbf{u}}_n$ for $n = -N..N-1$ with $n \neq 0$ and with respect to λ_j for $j = 1..\mathcal{P}$. For the minimization procedure, it is convenient to substitute the unknowns $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ to $\widehat{\mathbf{u}}_n$. However, all the components of $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ are not independent since they must satisfy to the compatibility equations given by Eq. (3.23). Owing to Eq. (3.17), the variations of W with respect to $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ in the sub-space of compatible two order tensors involves the projection onto $\mathbb{P}_n$. It follows that the stationarity is reached for :

$$\mathbb{P}_n : \sum_{m=-N}^{N-1} \mathbb{L}(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) : \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_m = 0, \quad \forall n \in \mathbb{Z}^* \quad (3.27)$$

with :

$$\mathbb{L}(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) = \widehat{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) - \sum_{j=1}^{\mathcal{P}} \sum_{k=1}^{\mathcal{P}} R_{jk} \mathbf{T}_j(\boldsymbol{\xi}_n) \otimes \overline{\mathbf{T}}_k(\boldsymbol{\xi}_m) \quad (3.28)$$

Under the constraint :

$$\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 = \mathbf{E} \quad (3.29)$$

Here, the macroscopic strain $\mathbf{E}$ is the right hand side of the linear system. Let us denote, in Eq. (3.27), the stress Fourier components :

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n = \sum_{m=-N}^{N-1} \mathbb{L}(\boldsymbol{\xi}_n - \boldsymbol{\xi}_m) : \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_m \quad (3.30)$$

The stationarity point delivers an upper bound from the variational principle :

$$\mathbf{E} : \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} \leq \mathbf{E} : \mathbb{C}_{UB}^{hom}(N, \mathcal{P}) : \mathbf{E} = \sum_{n=-N}^{N-1} \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n : \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \quad (3.31)$$

in which "UB" in $\mathbb{C}_{UB}^{hom}(N, \mathcal{P})$ makes reference to an "Upper Bound" computed with a discretization with N wave numbers and $\mathcal{P}$ interpolation functions.

We recognize in Eq. (3.27) the equilibrium condition (3.18) for the stress components (3.30). The solution of the linear system (3.27) gives the Fourier coefficients of the stress, $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n$, which satisfy to the equilibrium condition (3.18). Since the strain coefficients $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ satisfy to the compatibility condition (3.17), we deduce that $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n$ and $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ are orthogonal $\forall n \neq 0$. Hence, the product $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n : \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_n$ is null $\forall n \neq 0$ and is

equal to $\sigma_0 : \mathbf{E}$ for $n = 0$. So, the upper bound can be equivalently computed from :

$$\mathbf{E} : \mathbb{C}_{UB}^{hom}(N, \mathcal{P}) : \mathbf{E} = \hat{\sigma}_0 : \hat{\epsilon}_0 = \hat{\sigma}_0 : \mathbf{E} \quad (3.32)$$

Hence the homogenized elastic tensor can be computed with $\hat{\sigma}_0$.

The linear system is solved with an iterative scheme (3.27). In the present paper, we use a conjugate gradient method for its resolution. At any step of the iteration process, the strain components satisfy to the compatibility condition (3.17) and the average condition $\hat{\epsilon}_0 = \mathbf{E}$. However, the iterative scheme is stopped when the norm of the residue of the linear system is inferior to a given precision ϵ . As a consequence, the stress coefficients (3.30) computed at convergence of the iterative scheme does not comply exactly with the equilibrium but :

$$\forall n \neq 0 : \mathbb{P}_n : \hat{\sigma}_n = \epsilon \mathbf{r}_n, \quad \sqrt{\sum_{n=-N}^{N-1} \|\mathbf{r}_n\|^2} = 1 \quad (3.33)$$

in which $\mathbf{r}_n$ satisfy to $\mathbb{Q}_n : \mathbf{r}_n = 0$.

Rigorously, the upper bound must be computed with formula (3.31) since the Fourier coefficients σ_n are not rigorously orthogonal to $\hat{\epsilon}_n$ when the iterative process is stopped at a given precision.

3.5 Discretization for circular and spherical inclusion

In the case of a circular inclusion the Fourier transform of the characteristic function $\chi(\mathbf{x})$ is explicitly known and can be found in the book of Nemat-Nasser [86] or in Bonnet [18]. This Fourier transform is called "shape function" or "shape coefficient" in the literature. Interestingly, It is possible to derive the exact expression for $\hat{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\xi})$ and $\mathbf{T}(\boldsymbol{\xi})$ which are involved in the resolution of the linear system (3.27). Obviously, a regular mesh in the real space could be used to represent the elastic tensor and consists to replace the real shape of the inclusion by pixels. This has been largely discussed in the literature, the reader can refer to [77] or [104] for more details. Moreover, such numerical integration method introduces an uncontrolled approximation and the bound statue of the FFT solution is lost with that method.

The Fourier transform of the elastic tensor is given by (see [18]) :

$$\forall \boldsymbol{\xi} \neq 0 : \hat{\mathbb{C}}(\boldsymbol{\xi}) = \hat{\chi}(\boldsymbol{\xi})(\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1), \quad \hat{\mathbb{C}}(0) = c_1 \mathbb{C}_1 + c_2 \mathbb{C}_2 \quad (3.34)$$

with :

$$\hat{\chi}(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} 2c_2 \frac{J_1(\eta)}{\eta} & \text{(circle)} \\ 3c_2 \frac{\sin(\eta) - \eta \cos(\eta)}{\eta^3} & \text{(sphere)} \end{cases}, \quad \eta = R\|\boldsymbol{\xi}\| \quad (3.35)$$

$$c_2 = \begin{cases} \frac{\pi R^2}{|\Omega|} & \text{(circle)} \\ \frac{4\pi R^3}{3|\Omega|} & \text{(sphere)} \end{cases} \quad (3.36)$$

When $\boldsymbol{\xi} = 0$, $\widehat{\chi}(\boldsymbol{\xi}) = c_2$. In the above equation, J_1 is the Bessel function of the first kind.

We use polynomials for the interpolation functions $\mathbf{w}_i$ following Monchiet [78]. Owing to the geometry of the unit cell and the loading, only the polynomials of odd number are kept for the discretization of the discontinuous fields. Moreover, for the circular inclusion, some polynomials can be omitted since they are null at the interface. These functions are proportional to " $x_1^2 + x_2^2 - R^2$ ". Considering the polynomials of degrees $d \leq 5$, the interpolation functions considered for the present problem are :

$$\begin{aligned} d = 1 : & \begin{cases} \mathbf{w}_1 = x_1 \mathbf{e}_1, & \mathbf{w}_2 = x_1 \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{w}_3 = x_2 \mathbf{e}_1, & \mathbf{w}_4 = x_2 \mathbf{e}_2 \end{cases} \\ d = 3 : & \begin{cases} \mathbf{w}_5 = x_1(x_1^2 - 3x_2^2) \mathbf{e}_1, & \mathbf{w}_6 = x_1(x_1^2 - 3x_2^2) \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{w}_7 = x_2(3x_1^2 - x_2^2) \mathbf{e}_1, & \mathbf{w}_8 = x_2(3x_1^2 - x_2^2) \mathbf{e}_2 \end{cases} \\ d = 5 : & \begin{cases} \mathbf{w}_9 = x_1(x_1^4 - 10x_1^2x_2^2 + 5x_2^4) \mathbf{e}_1, & \mathbf{w}_{10} = x_1(x_1^4 - 10x_1^2x_2^2 + 5x_2^4) \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{w}_{11} = x_2(5x_1^4 - 10x_2^2x_1^2 + x_2^4) \mathbf{e}_1, & \mathbf{w}_{12} = x_2(5x_1^4 - 10x_2^2x_1^2 + x_2^4) \mathbf{e}_2 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.37)$$

An approximation with polynomials of first degree (P1) use 4 interpolation functions. For third degree polynomial (P3), it requires 8 interpolation functions and 12 functions for P5 approximation.

In the case of spherical inclusion, the interpolation functions are constructed with the scalar polynomial functions :

$$\begin{aligned} \phi_1 &= x_1, & \phi_2 &= x_2, & \phi_3 &= x_3 \\ \phi_4 &= \frac{1}{2}x_1(2x_1^2 - 3x_2^2 - 3x_3^2), & \phi_5 &= \frac{1}{2}x_2(2x_2^2 - 3x_1^2 - 3x_3^2) \\ \phi_6 &= \frac{1}{2}x_3(2x_3^2 - 3x_1^2 - 3x_2^2), & \phi_7 &= \frac{1}{2}x_1(x_2^2 - x_3^2) \\ \phi_8 &= \frac{1}{2}x_2(x_3^2 - x_1^2), & \phi_9 &= \frac{1}{2}x_3(x_1^2 - x_2^2), & \phi_{10} &= x_1x_2x_3 \end{aligned} \quad (3.38)$$

Polynomial vector functions of first degree are obtained by multiplying ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 by $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ that leading to 9 vector functions. For third degree, the multiplication of $\phi_4, \dots, \phi_{10}$ by $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ gives 21 vector functions.

The stain field computed with the interpolation functions $\mathbf{w}_j$, $\mathbf{w}_j$ is then a polynomial two-order tensor that can be written into the general form

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}_j) = \mathbf{B}_{p..q}^j x_{p..} x_q \quad (3.39)$$

Considering the following property of the shape coefficient :

$$\frac{\partial \widehat{\chi}}{\partial \boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi}) = -i \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{x} \chi(\mathbf{x}) \exp(-i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}) dV \quad (3.40)$$

As a consequence, the analytic expressions of the two order tensor $\mathbf{T}_j(\boldsymbol{\xi})$ can be derived by the following formula :

$$\mathbf{T}_j(\boldsymbol{\xi}) = (i)^n \mathbb{C}_2 : \mathbf{B}_{p..q}^j \frac{\partial^n \widehat{\chi}}{\partial \xi_p \dots \partial \xi_q}(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.41)$$

3.6 Convergence analysis

The rate of convergence of the FFT method depend on the choice of the Lamé coefficients λ_0 and μ_0 of the reference material. These two coefficients enter into the expression of the Green tensor $\mathbf{\Gamma}^0$. The rate of convergence of the method is very sensitive to the choice of this reference material [75]. In the present problem, the determination of the optimal reference material is more complicated since it involves two interface coefficients S_n and S_t . In the absence of any theoretical arguments yielding the optimum values of λ_0 and μ_0 , it has to be determined numerically. In Fig. 3.2, we represent the number of iterations as function of the value of the choice of the reference material's elastic coefficients. In that example, we put $\lambda_1 = \mu_1 = 1$ and $\lambda_2 = \mu_2 = 10$, the inclusion radius is $R = 0.25$ (the dimension of the unit cell is 1 along each space direction). The figure at the left corresponds to a cylindrical inclusions while, at the right, it is associated to a spherical inclusion. We use $S_n = S_t = 0.7$ for the interface coefficients. Also we give the number of iteration for the solutions obtained with different polynomial interpolation. A good rate convergence of the CGM method is observed, the number of iterations is approximatively twice with third and fifth degree polynomial interpolations comparatively to the first degree. More importantly, we observe that the convergence is almost independent of the choice of the reference material.

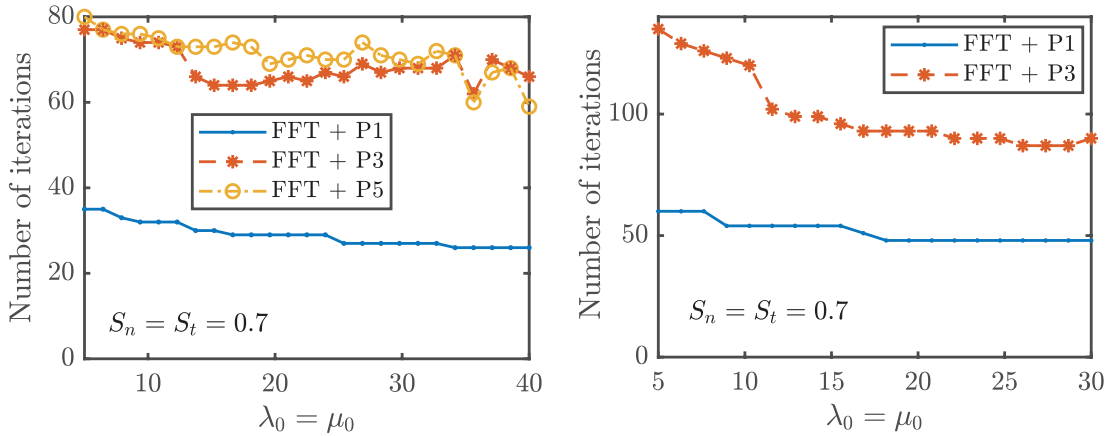


FIGURE 3.2 – Number of iterations as function of $\lambda_0 = \mu_0$. Case of circular inclusion (at the left), case of spherical inclusion (at the right).

In Fig. 3.3 we investigate the convergence of the iterative scheme with the interface coefficients S_n, S_t . The same values of $\lambda_1, \mu_1, \lambda_2, \mu_2$ and the inclusion radius are considered. It is observed that the number of iterations needed to reach the convergence first increases with the value of $S_n = S_t$ and rapidly attain a plateau. The number of iterations for large values of S_n and S_t is approximatively twice the value required for the problem with perfect interface.

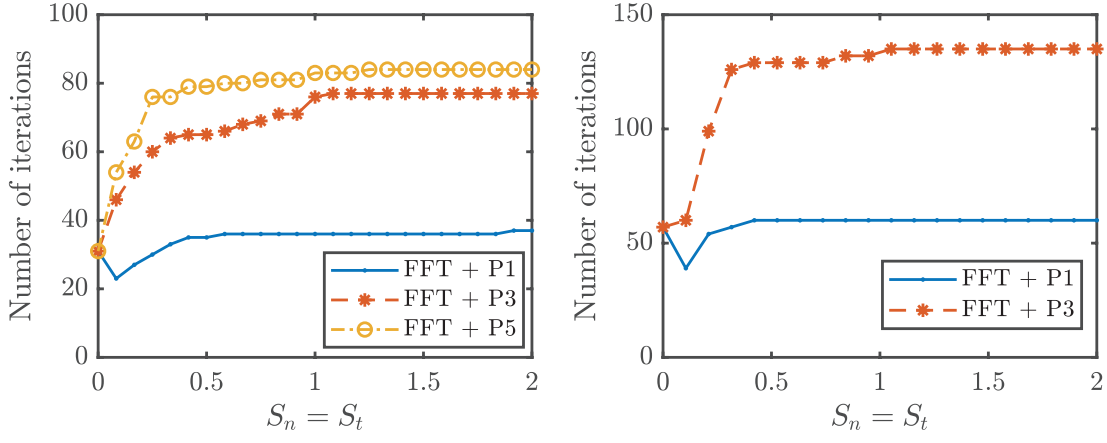


FIGURE 3.3 – Number of iterations as function of the interface coefficients S_n, S_t for circular inclusion (at the left) and spherical inclusion (at the right)

As a validation purpose, the solutions are now compared to a reference solution computed by the FEM. For the latter, the unit cell is meshed with 23260 triangular elements for the circular inclusion problem and with 210437 tetrahedral elements for the spherical one. The relative error between the FFT and FEM solutions is plotted versus the number of wave vectors used for the FFT method. The results show a good convergence of the FFT method. In the case of a circular inclusion, the relative error is approximatively 1% with 128 wave vectors and the P1 approximation. The error value falls below 0.1% with the P3 approximation and about at 0.01% for the P5 interpolations. For the spherical shape, a P1 interpolation leads to yields to 0.1% relative error with 128 wave numbers.

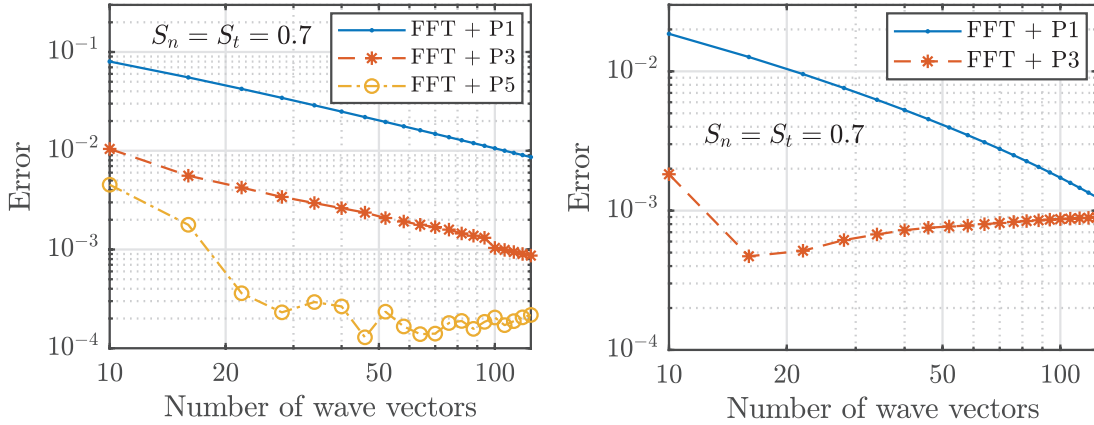


FIGURE 3.4 – Error between FFT and FEM_{ref} solution as function of the number of wave vectors. Case of circular inclusion (at the left), case of spherical inclusion (at the right)

3.7 Comparisons with analytical estimates

In the present section, we propose to compare the FFT solutions with analytic models. Some expressions of the homogenized elastic coefficients are available in the literature and have been mentioned in the introduction. Three estimates of the homogenized elastic properties of the composite with adhesive interface is considered for the comparisons. The first estimate is given by the generalized Mori-Tanaka model to adhesive interface and has been derived by Qu [92] in the case of a spherical inclusion. The case of cylindrical inclusion is missing. Two other estimates are derived considering the Composite Cylinder/Sphere Assemblage (CCA/CSA) of Hashin [50] with (?) homogeneous share or strain at the boundary . It is based on the concept of neutral inclusion that represents a subregion of the all composite. The case of CCA with applied macroscopic strain has been considered for instance by Hashin [55]. In the present section we provide the three estimates for the cylindrical and spherical inclusions respectively. The comparison with the FFT solutions is then provided.

3.7.1 Estimation for composites with fibers

3.7.1.1 Solution procedure

We turn our attention to the general solution of the composite cylinder model subjected to different loading. A cylindrical inclusion of radius R_1 and Lamé coefficients λ_2, μ_2 is surrounded by a cylindrical coating of radius R_2 and Lamé coefficients λ_1, μ_1 (see figure 3.5). Let us also introduce the cylindrical coordinate system (r, θ, z) and the associated basis $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_z)$.

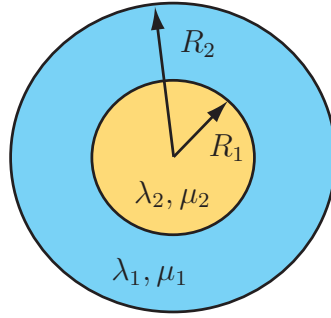


FIGURE 3.5 – Composite cylinder model.

The general solutions in the core and in the coating are given by [34]. Let us recall briefly these solutions. The displacement reads :

$$\begin{aligned} u_r &= \Lambda_1 F_1(r) + \Lambda_2 F_2(r) \cos(2\theta) \\ u_\theta &= \Lambda_2 F_3(r) \sin(2\theta) \\ u_z &= 0 \end{aligned} \tag{3.42}$$

in which Λ_1, Λ_2 are the loading parameters which are specified in the next. As shown later, this form is consistent with a cylinder loaded along the principal

axis. Functions $F_i(r)$ for $i = 1, 2, 3$ are given by :

$$\begin{aligned}
F_1(r) &= \begin{cases} A_1 r & \text{in } \Omega_2 \\ B_1 r + \frac{B_2}{r} & \text{in } \Omega_1 \end{cases} \\
F_2(r) &= \begin{cases} A_2 r^3 + A_3 r & \text{in } \Omega_2 \\ B_3 r^3 + B_4 r + \frac{B_5}{r} + \frac{B_6}{r^3} & \text{in } \Omega_1 \end{cases} \\
F_3(r) &= \begin{cases} -\frac{2\lambda_2 + 3\mu_2}{\lambda_2} A_2 r^3 - A_3 r & \text{in } \Omega_2 \\ -\frac{2\lambda_1 + 3\mu_1}{\lambda_1} B_3 r^3 - B_4 r - \frac{\mu_1}{\lambda_1 + 2\mu_1} \frac{B_5}{r} + \frac{B_6}{r^3} & \text{in } \Omega_1 \end{cases}
\end{aligned} \tag{3.43}$$

The traction on a cylinder of radius r is :

$$\begin{aligned}
t_r &= \Lambda_1 G_1(r) + \Lambda_2 G_2(r) \cos(2\theta) \\
t_\theta &= \Lambda_2 G_3(r) \sin(2\theta) \\
t_z &= 0
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Functions $G_i(r)$ for $i = 1, 2, 3$ are given by :

$$\begin{aligned}
G_1(r) &= \begin{cases} 2(\lambda_2 + \mu_2) A_1 & \text{in } \Omega_2 \\ 2(\lambda_1 + \mu_1) B_1 - 2\mu_1 \frac{B_2}{r^2} & \text{in } \Omega_1 \end{cases} \\
G_2(r) &= \begin{cases} 2\mu_1 A_3 & \text{in } \Omega_2 \\ 2\mu_1 B_4 - \frac{4\mu_1(\lambda_1 + \mu_1)}{\lambda_1 + 2\mu_1} \frac{B_5}{r^2} - 6\mu_1 \frac{B_6}{r^4} & \text{in } \Omega_1 \end{cases} \\
G_3(r) &= \begin{cases} -\frac{6\mu_2(\lambda_2 + \mu_2)}{\lambda_2} A_2 r^2 - 2\mu_2 A_3 & \text{in } \Omega_2 \\ -\frac{6\mu_1(\lambda_1 + \mu_1)}{\lambda_1} B_3 r^2 - 2\mu_1 B_4 - \frac{2\mu_1(\lambda_1 + \mu_1)}{\lambda_1 + 2\mu_1} \frac{B_5}{r^2} - 6\mu_1 \frac{B_6}{r^4} & \text{in } \Omega_1 \end{cases}
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Coefficients A_i and B_i are constants to be determined from the interface and boundary conditions. To this end, we first consider the discontinuity of the displacement at $r = R_1$:

$$\begin{aligned}
F_i(R_1^+) - F_i(R_1^-) &= S_n G_i(R_1), \quad i = 1, 2 \\
F_3(R_1^+) - F_3(R_1^-) &= S_t G_3(R_1)
\end{aligned} \tag{3.46}$$

where $F_i(R_1^+)$ represents the value of $F_i(r)$ at $r = R_1$ in the matrix while $F_i(R_1^-)$ is the value of $F_i(r)$ at $r = R_1$ in the inclusion.

The continuity of the traction at $r = R_1$ is :

$$G_i(R_1^+) = G_i(R_1^-), \quad i = 1, 2, 3 \tag{3.47}$$

To complete the set of equations for the identification of the unknown coefficients, the boundary conditions must now be specified.

3.7.1.2 Cylinder subjected to a uniform macroscopic strain

The cylinder is subjected to the macroscopic strain $\mathbf{E}$ on its boundary following the classical condition $\mathbf{u} = \mathbf{E}\mathbf{x}$. The macroscopic strain is chosen into the form :

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_1 + E_2 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 - E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

where E_1 is associated to an isotropic loading, in the plane of cross section, while E_2 is associated to a deviatoric loading. The boundary conditions read :

$$\begin{aligned} u_r(r = R_2) &= R_2 E_1 + R_2 E_2 \cos(2\theta) \\ u_\theta(r = R_2) &= -R_2 E_2 \sin(2\theta) \\ u_z(r = R_2) &= 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

We put $\Lambda_1 = E_1$ and $\Lambda_2 = E_2$ in Eqs. (3.42) and (3.44). Comparing (3.49) with (3.42), it leads to :

$$F_1(R_2) = R_2, \quad F_2(R_2) = R_2, \quad F_3(R_2) = -R_2 \quad (3.50)$$

The macroscopic stress is defined by :

$$\mathbf{\Sigma} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \mathbf{t}(R_2) \otimes \mathbf{x} dS \quad (3.51)$$

where $|\Omega| = \pi R_2^2$. On the boundary $\partial\Omega$, we have $\mathbf{x} = R_2 \mathbf{e}_r$. The macroscopic stress can be put into the form :

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 + \Sigma_2 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_1 - \Sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

with :

$$\begin{aligned} \Sigma_{11} &= \frac{1}{\pi} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} t_1(R_2) \cos(\theta) d\theta \\ \Sigma_{22} &= \frac{1}{\pi} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} t_2(R_2) \sin(\theta) d\theta \end{aligned} \quad (3.53)$$

Moreover :

$$\begin{aligned} t_1(R_2) &= [G_1(R_2)E_1 + G_2(R_2)E_2 \cos(2\theta)] \cos(\theta) - 2G_3(R_2)E_2 \sin(2\theta) \sin(\theta) \\ t_2(R_2) &= [G_1(R_2)E_1 + G_2(R_2)E_2 \cos(2\theta)] \sin(\theta) + 2G_3(R_2)E_2 \sin(2\theta) \cos(\theta) \end{aligned} \quad (3.54)$$

This leading to :

$$\begin{aligned} \Sigma_{11} &= G_1(R_2)E_1 + \frac{G_2(R_2) - G_3(R_2)}{2} E_2 \\ \Sigma_{22} &= G_1(R_2)E_1 - \frac{G_2(R_2) - G_3(R_2)}{2} E_2 \end{aligned} \quad (3.55)$$

The macroscopic law is :

$$\Sigma_1 = 2\kappa^{hom} E_1, \quad \Sigma_2 = 2\mu^{hom} E_2 \quad (3.56)$$

with the following expressions of the homogenized (in plane) bulk and shear modulus :

$$\boxed{\kappa^{hom} = \frac{G_1(R_2)}{2}, \quad \mu^{hom} = \frac{G_2(R_2) - G_3(R_2)}{4}} \quad (3.57)$$

3.7.1.3 Cylinder subjected to a uniform stress

The cylinder is subjected to the macroscopic stress Σ following the classical boundary relation $\sigma \cdot n = \Sigma \cdot n$. The macroscopic stress is chosen into the form given by Eq. (3.52). We put $\Lambda_1 = \Sigma_1$ and $\Lambda_2 = \Sigma_2$ in Eqs. (3.42) and (3.44). The boundary condition reads :

$$\begin{aligned} t_r(r = R_2) &= \Sigma_1 + \Sigma_2 \cos(2\theta) \\ t_\theta(r = R_2) &= -\Sigma_2 \sin(2\theta) \\ t_z(r = R_2) &= 0 \end{aligned} \quad (3.58)$$

Owing to Eq. (3.44), we deduce that :

$$G_1(R_2) = 1, \quad G_2(R_2) = 1, \quad G_3(R_2) = -1 \quad (3.59)$$

The macroscopic strain is on the form given by Eq. (3.48), in which :

$$E_1 = \frac{F_1(R_2)}{R_2} \Sigma_1 \quad (3.60)$$

This leading to :

$$\boxed{k^{hom} = \frac{R_2}{2F_1(R_2)}} \quad (3.61)$$

Moreover :

$$E_2 = \frac{1}{2} \frac{F_2(R_2) - F_3(R_2)}{R_2} \Sigma_2 \quad (3.62)$$

It follows that the homogenized shear modulus is :

$$\boxed{\mu^{hom} = \frac{R_2}{F_2(R_2) - F_3(R_2)}} \quad (3.63)$$

3.7.1.4 Mori-Tanaka scheme

In order to determine the Mori-Tanaka estimate, the solution is now derived in the case of an infinite solid ($R_2 = +\infty$) subjected to the remote strain ϵ^∞ given by :

$$\epsilon^\infty = \begin{pmatrix} \epsilon_1^\infty + \epsilon_2^\infty & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1^\infty - \epsilon_2^\infty & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.64)$$

We put $\Lambda_1 = \varepsilon_1^\infty$ and $\Lambda_2 = \varepsilon_2^\infty$ in Eqs. (3.42) and (3.44). The verification of the conditions at infinity gives :

$$B_1 = 1, \quad B_3 = 0, \quad B_4 = 1 \quad (3.65)$$

The solution for an infinite solid is now used to obtain a Mori-Tanaka estimate of the homogenized elastic coefficients. Then, consider a Representative Volume Element (RVE) of a composite material containing a population of cylindrical inclusions with the same radius R_1 . The macroscopic strain is given by the average rule (3.9), that reads for the two-phase composite :

$$\mathbf{E} = c_1 \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(1)} + c_2 \left[\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(2)} + \frac{1}{|\Omega_2|} \int_{\Gamma} [\mathbf{u}] \otimes_s \mathbf{n} dS \right] \quad (3.66)$$

where c_1 and c_2 denote the volume fraction of the matrix and the inclusion respectively and in which the following notation has been used :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(i)} = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \boldsymbol{\varepsilon} dV \quad (3.67)$$

Making use of the gradient theorem, we can write the above equation into the following equivalent form :

$$\mathbf{E} = c_1 \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(1)} + c_2 \left[\frac{1}{|\Omega_2|} \int_{\Gamma} \mathbf{u}(R_1^+) \otimes_s \mathbf{n} dS \right] \quad (3.68)$$

which involves the displacement $\mathbf{u}(R_1^+)$.

The macroscopic stress is :

$$\boldsymbol{\Sigma} = c_1 \mathbb{C}_1 : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(1)} + c_2 \mathbb{C}_2 : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(2)} \quad (3.69)$$

Considering again the gradient theorem, we have :

$$\boldsymbol{\Sigma} = c_1 \mathbb{C}_1 : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(1)} + c_2 \mathbb{C}_2 : \left[\frac{1}{\Omega_2} \int_{\Gamma} \mathbf{u}(R_1^-) \otimes_s \mathbf{n} dS \right] \quad (3.70)$$

which involves the displacement $\mathbf{u}(R_1^-)$.

Following the methodology of Mori-Tanaka, we use the solution for an infinite solid with $\boldsymbol{\varepsilon}^\infty = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(1)}$ in order to estimate the displacement fields at each side of the interface in Eqs. (3.68) and (3.70).

Because $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1$ is on the form :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1 = \begin{pmatrix} \varepsilon_1^{(1)} + \varepsilon_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1^{(1)} - \varepsilon_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.71)$$

Eq. (3.68) reads :

$$E_1 = c_1 \bar{\varepsilon}_1^{(1)} + c_2 \frac{F_1(R_1^+)}{R_1} \bar{\varepsilon}_1^{(1)}, \quad E_2 = c_1 \bar{\varepsilon}_2^{(1)} + c_2 \frac{F_2(R_1^+) - F_3(R_1^+)}{2R_1} \bar{\varepsilon}_2^{(1)} \quad (3.72)$$

and Eq. (3.70) reads :

$$\begin{aligned}\Sigma_1 &= 2 \left[c_1 k_1 + c_2 k_2 \frac{F_1(R_1^-)}{R_1} \right] \bar{\varepsilon}_1^{(1)}, \\ \Sigma_2 &= 2 \left[c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 \frac{F_2(R_1^-) - F_3(R_1^-)}{2R_1} \right] \bar{\varepsilon}_2^{(1)}\end{aligned}\quad (3.73)$$

and leads to the following expression for the homogenized elastic coefficients :

$$\boxed{\kappa^{hom} = \frac{c_1 \kappa_1 + c_2 \kappa_2 \frac{F_1(R_1^-)}{R_1}}{c_1 + c_2 \frac{F_1(R_1^+)}{R_1}}, \quad \mu^{hom} = \frac{c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 \frac{F_2(R_1^-) - F_3(R_1^-)}{2R_1}}{c_1 + c_2 \frac{F_2(R_1^+) - F_3(R_1^+)}{2R_1}}} \quad (3.74)$$

3.7.2 Analytic model for spherical particles

The methodology of resolution for the spherical shape is very similar to the case of the cylinder. As a consequence, only intermediate results are provided.

3.7.2.1 Solution procedure

The composite sphere is constituted of a spherical inclusion of radius R_1 and Lamé coefficients λ_2, μ_2 surrounded by a spherical coating of radius R_2 and Lamé coefficients λ_1, μ_1 . Let us also introduce the spherical coordinate system (r, θ, φ) and the associated basis $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$.

The solution has the following general form :

$$\begin{aligned}u_r &= \Lambda_1 F_1(r) + \Lambda_2 F_2(r)(1 - 3 \cos^2(\varphi)) \\ u_\varphi &= \Lambda_2 F_3(r) \sin(2\varphi) \\ u_\theta &= 0\end{aligned}\quad (3.75)$$

in which the functions $F_i(r)$ for $i = 1, 2, 3$ are given by :

$$\begin{aligned}F_1(r) &= \begin{cases} A_1 r & \text{in } \Omega_2 \\ B_1 r + \frac{B_2}{r^2} & \text{in } \Omega_1 \end{cases} \\ F_2(r) &= \begin{cases} A_2 r^3 + A_3 r & \text{in } \Omega_2 \\ B_3 r^3 + B_4 r + \frac{B_5}{r^2} + \frac{B_6}{r^4} & \text{in } \Omega_1 \end{cases} \\ F_3(r) &= \begin{cases} -\frac{5\lambda_2 + 7\mu_2}{2\lambda_2} A_2 r^3 - \frac{3}{2} A_3 r & \text{in } \Omega_2 \\ -\frac{5\lambda_1 + 7\mu_1}{2\lambda_1} B_3 r^3 - \frac{3}{2} B_4 r - \frac{3\mu_1}{5\mu_1 + 3\lambda_1} \frac{B_5}{r^2} + \frac{B_6}{r^4} & \text{in } \Omega_1 \end{cases}\end{aligned}\quad (3.76)$$

The traction on a sphere of radius r is :

$$\begin{aligned}t_r &= E_1 G_1(r) + E_2 G_2(r)(1 - 3 \cos^2(\varphi)) \\ t_\varphi &= E_2 G_3(r) \sin(2\varphi) \\ t_\theta &= 0\end{aligned}\quad (3.77)$$

in which the functions $G_i(r)$ for $i = 1, 2, 3$ are given by :

$$\begin{aligned}
G_1(r) &= \begin{cases} (3\lambda_2 + 2\mu_2)A_1 & \text{in } \Omega_2 \\ (3\lambda_1 + 2\mu_1)B_1 - 4\mu_1 \frac{B_2}{r^3} & \text{in } \Omega_1 \end{cases} \\
G_2(r) &= \begin{cases} -\mu_2 A_2 r^2 + 2\mu_2 A_3 & \text{in } \Omega_2 \\ -\mu_1 B_3 r^2 + 2\mu_1 B_4 - 2 \frac{\mu_1(10\mu_1 + 9\lambda_1)}{5\mu_1 + 3\lambda_1} \frac{B_5}{r^3} - 8\mu_1 \frac{B_6}{r^5} & \text{in } \Omega_1 \end{cases} \quad (3.78) \\
G_3(r) &= \begin{cases} -\frac{\mu_2(8\lambda_2 + 7\mu_2)}{\lambda_2} A_2 r^2 - 3\mu_2 A_3 & \text{in } \Omega_2 \\ -\frac{\mu_1(8\lambda_1 + 7\mu_1)}{\lambda_1} B_3 r^2 - 3\mu_1 B_4 - \frac{3\mu_1(3\lambda_1 + 2\mu_1)}{5\mu_1 + 3\lambda_1} \frac{B_5}{r^3} - 8\mu_1 \frac{B_6}{r^5} & \text{in } \Omega_1 \end{cases}
\end{aligned}$$

The discontinuity of the displacement at $r = R_1$ reads :

$$\begin{aligned}
F_i(R_1^+) - F_i(R_1^-) &= S_n G_i(R_1), \quad i = 1, 2 \\
F_3(R_1^+) - F_3(R_1^-) &= S_t G_3(R_1)
\end{aligned} \quad (3.79)$$

The continuity of the traction at $r = R_1$ is :

$$G_i(R_1^+) = G_i(R_1^-), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.80)$$

3.7.2.2 Sphere subjected to macroscopic strain

An axisymmetric macroscopic strain is applied at the boundary of the sphere :

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_1 + E_2 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 + E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_1 - 2E_2 \end{pmatrix} \quad (3.81)$$

The boundary conditions reads :

$$\begin{aligned}
u_r(r = R_2) &= R_2 E_1 + R_2 E_2 (1 - 3 \cos^2(\varphi)) \\
u_\varphi(r = R_2) &= -\frac{3R_2}{2} E_2 \sin(2\varphi) \\
u_\theta(r = R_2) &= 0
\end{aligned} \quad (3.82)$$

We put $\Lambda_1 = E_1$ and $\Lambda_2 = E_2$ in Eqs. (3.75) and (3.77). The boundary conditions are satisfied for :

$$F_1(R_2) = R_2, \quad F_2(R_2) = R_2, \quad F_3(R_2) = -\frac{3R_2}{2} \quad (3.83)$$

The macroscopic stress can be read :

$$\mathbf{\Sigma} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \mathbf{t}(R_2) \otimes \mathbf{x} dS \quad (3.84)$$

where $|\Omega| = \frac{4\pi}{3}R_2^3$. On the boundary $\partial\Omega$, we have $\mathbf{x} = R_2\mathbf{e}_r$. The macroscopic stress is also axisymmetric :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 + \Sigma_2 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_1 + \Sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_1 - 2\Sigma_2 \end{pmatrix} \quad (3.85)$$

In which Σ_1 and Σ_2 are given by :

$$\Sigma_1 = E_1 G_1(R_2), \quad \Sigma_2 = \frac{2}{5} E_2 (G_2(R_2) - G_3(R_2)) \quad (3.86)$$

The homogenized bulk and shear modulus are :

$$\boxed{k^{hom} = \frac{G_1(R_2)}{3}, \quad \mu^{hom} = \frac{2}{5}(G_2(R_2) - G_3(R_2))} \quad (3.87)$$

3.7.2.3 Sphere subjected to a uniform stress

The sphere is subjected to an axisymmetric macroscopic stress (3.85) and we put $\Lambda_1 = \Sigma_1$ and $\Lambda_2 = \Sigma_2$ in Eqs. (3.75) and (3.77). The boundary conditions read :

$$\begin{aligned} t_r(r = R_2) &= \Sigma_1 + \Sigma_2(1 - 3\cos^2(\varphi)) \\ t_\varphi(r = R_2) &= -\frac{3}{2}\Sigma_2 \sin(2\varphi) \\ t_\theta(r = R_2) &= 0 \end{aligned} \quad (3.88)$$

That leading to :

$$G_1(R_2) = 1, \quad G_2(R_2) = 1, \quad G_3(R_2) = -\frac{3}{2} \quad (3.89)$$

The macroscopic strain is given by :

$$\mathbf{E} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \mathbf{u}(R_2) \otimes_s \mathbf{n} dS \quad (3.90)$$

The computation of E_1 and E_2 gives :

$$E_1 = \frac{F_1(R_2)}{R_2} \Sigma_1, \quad E_2 = \frac{2}{5R_2} (F_2(R_2) - F_3(R_2)) \Sigma_2 \quad (3.91)$$

The homogenized elastic coefficients are :

$$\boxed{k^{hom} = \frac{R_2}{3F_1(R_2)}, \quad \mu^{hom} = \frac{5R_2}{4(F_2(R_2) - F_3(R_2))}} \quad (3.92)$$

3.7.3 Mori-Tanaka scheme

The infinite solid ($R_2 = +\infty$) is subjected to the axisymmetric remote strain $\boldsymbol{\varepsilon}^\infty$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^\infty = \begin{pmatrix} \varepsilon_1^\infty + \varepsilon_2^\infty & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1^\infty + \varepsilon_2^\infty & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1^\infty - 2\varepsilon_2^\infty \end{pmatrix} \quad (3.93)$$

The solution is given by (3.75) and (3.77) with $\Lambda_1 = \varepsilon_1^\infty$ and $\Lambda_2 = \varepsilon_2^\infty$. The conditions at infinity are :

$$B_1 = 1, \quad B_3 = 0, \quad B_4 = 1 \quad (3.94)$$

The macroscopic strain and stress are still given by Eqs. (3.68) and (3.70). The components of the macroscopic strain are :

$$\begin{aligned} E_1 &= c_1 E_1^0 + c_2 \frac{F_1(R_1^+)}{R_1} \bar{\varepsilon}_1^{(1)}, \\ E_2 &= c_1 E_2^0 + c_2 \frac{2(F_2(R_1^+) - F_3(R_1^+))}{5R_1} \bar{\varepsilon}_2^{(1)} \end{aligned} \quad (3.95)$$

And for the stress, we have :

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &= 3 \left[c_1 k_1 + c_2 k_2 \frac{F_1(R_1^-)}{R_1} \right] \bar{\varepsilon}_1^{(1)}, \\ \Sigma_2 &= 2 \left[c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 \frac{2}{5R_1} (F_2(R_1^-) - F_3(R_1^-)) \right] \bar{\varepsilon}_2^{(1)} \end{aligned} \quad (3.96)$$

Eliminating $\bar{\varepsilon}_1^{(1)}$ and $\bar{\varepsilon}_2^{(1)}$ in these relations, we deduce that :

$$\boxed{k^{hom} = \frac{c_1 k_1 + c_2 k_2 \frac{F_1(R_1^-)}{R_1}}{c_1 + c_2 \frac{F_1(R_1^+)}{R_1}}, \quad \mu^{hom} = \frac{c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 \frac{2(F_2(R_1^-) - F_3(R_1^-))}{5R_1}}{c_1 + c_2 \frac{2(F_2(R_1^+) - F_3(R_1^+))}{5R_1}}} \quad (3.97)$$

3.7.4 Comparison with FFT solutions

Note that for the sake of simplicity, we adopt the following terminology : CCA-E and CCA- Σ for the Composites Cylinder Assemblage model with prescribed macroscopic strain and stress respectively at the boundary. We do the same for the spherical Composites Sphere Assemblage : CSA-E and CSA- Σ . It must be noticed that the resulting effective elastic properties of the composite depend on the choice of the boundary conditions excepted for the bulk modulus. The homogenized bulk modulus for the sphere (transverse bulk modulus for the cylinder) is the same for the three estimates. However, three different expressions are obtained for the shear modulus (transverse shear modulus for the cylinder). Due to the symmetry of this simplified microstructures used for the analytic calculations, the resulting homogenized elastic tensor is isotropic while numerical simulations conducting on square/cubic unit cells provides anisotropic elastic properties that

are represented by three coefficients k^{hom} , μ_1^{hom} , μ_2^{hom} . In the case of a unit cell with circular inclusion, a deviatoric macroscopic loading $E_{11} = -E_{22}$ is used to determine the effective shear modulus μ_1^{hom} and the component E_{12} is applied for the identification of the effective shear modulus μ_2^{hom} . For the spherical inclusion, we compute the shear modulus μ_1^{hom} with an axisymmetric macroscopic loading $E_{11} = E_{22} = -E_{33}/2$ while μ_2^{hom} is computed by applying the macroscopic component E_{12} .

In our numerical calculations, we use 128 wave vectors along each space directions. The elastic properties of the phase are $\lambda_1 = \mu_1 = 1$ and $\lambda_2 = \mu_2 = 10$. In figure 3.6 (at the left), we represent the variations of the homogenized elastic coefficients as function of the radius of the circular inclusion with the interface parameters $S_n = S_t = 0.5$. In order to assess the accuracy of the different estimates, we provide (at the right) the error with the FFT solution. In figure 3.7, we display the same results in the case of a spherical inclusion. In any cases, it is observed that the effective properties decrease with the inclusion radius that show the dominant effects of the spring interface over the elastic stiffer rigidity of the inclusion. The analytic estimate of the bulk modulus are very close to the FFT solution. We also observe a good accuracy of the different solutions for the shear modulus but only at small values of the inclusion radius. Significant differences are however observed at larger values for the shear moduli for which the nature of the boundary are significant. Particularly, in the case of fibers, the FFT solution for μ_1^{hom} is close to the CCA model with prescribed macroscopic strain while, for μ_2^{hom} , a better accuracy is observed with the CCA model with prescribed macroscopic stress.

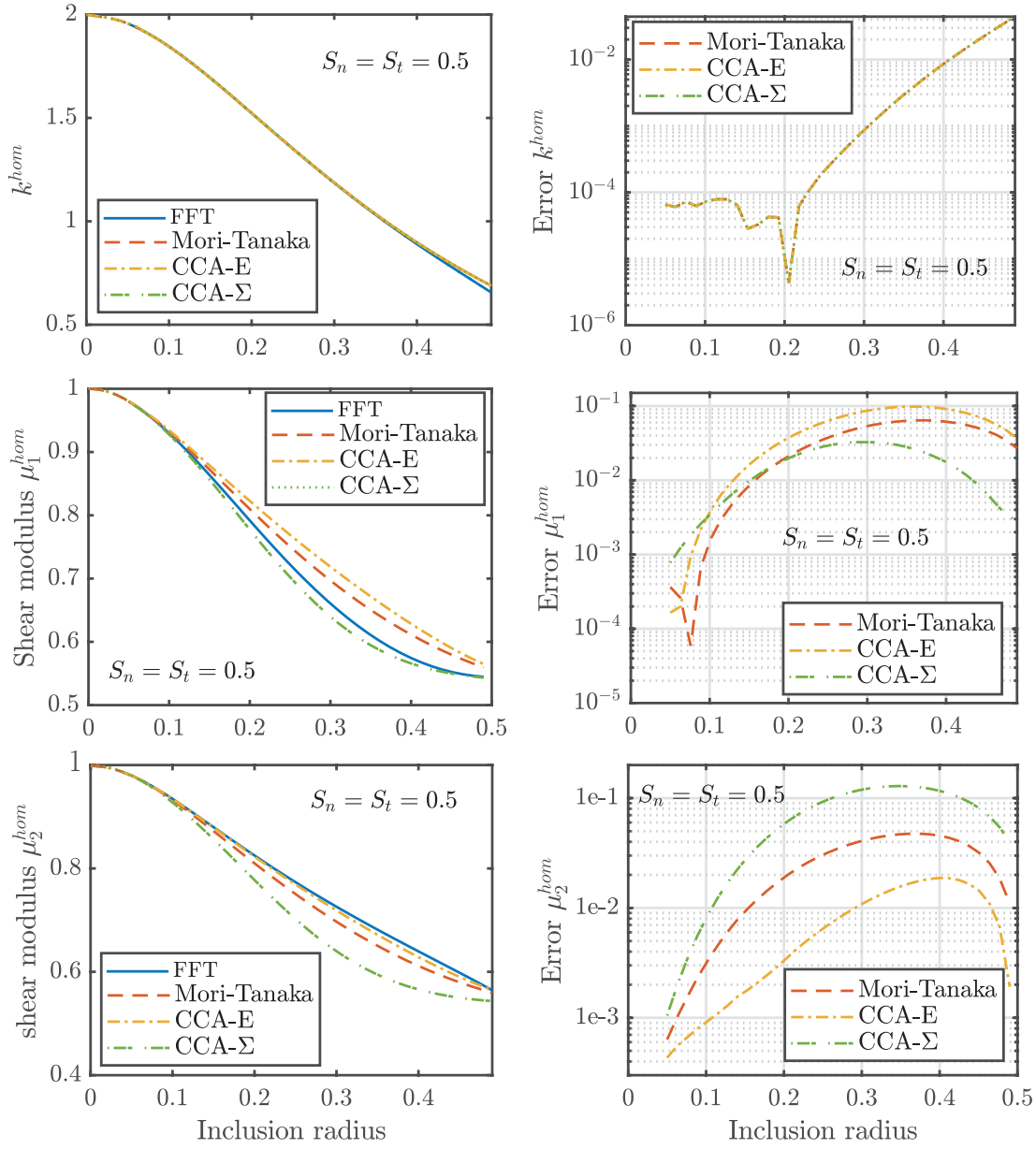


FIGURE 3.6 – Homogenized elastic coefficients (at the left) and respective relative error with the FFT solution error (at the right) for the cylindrical inclusion.

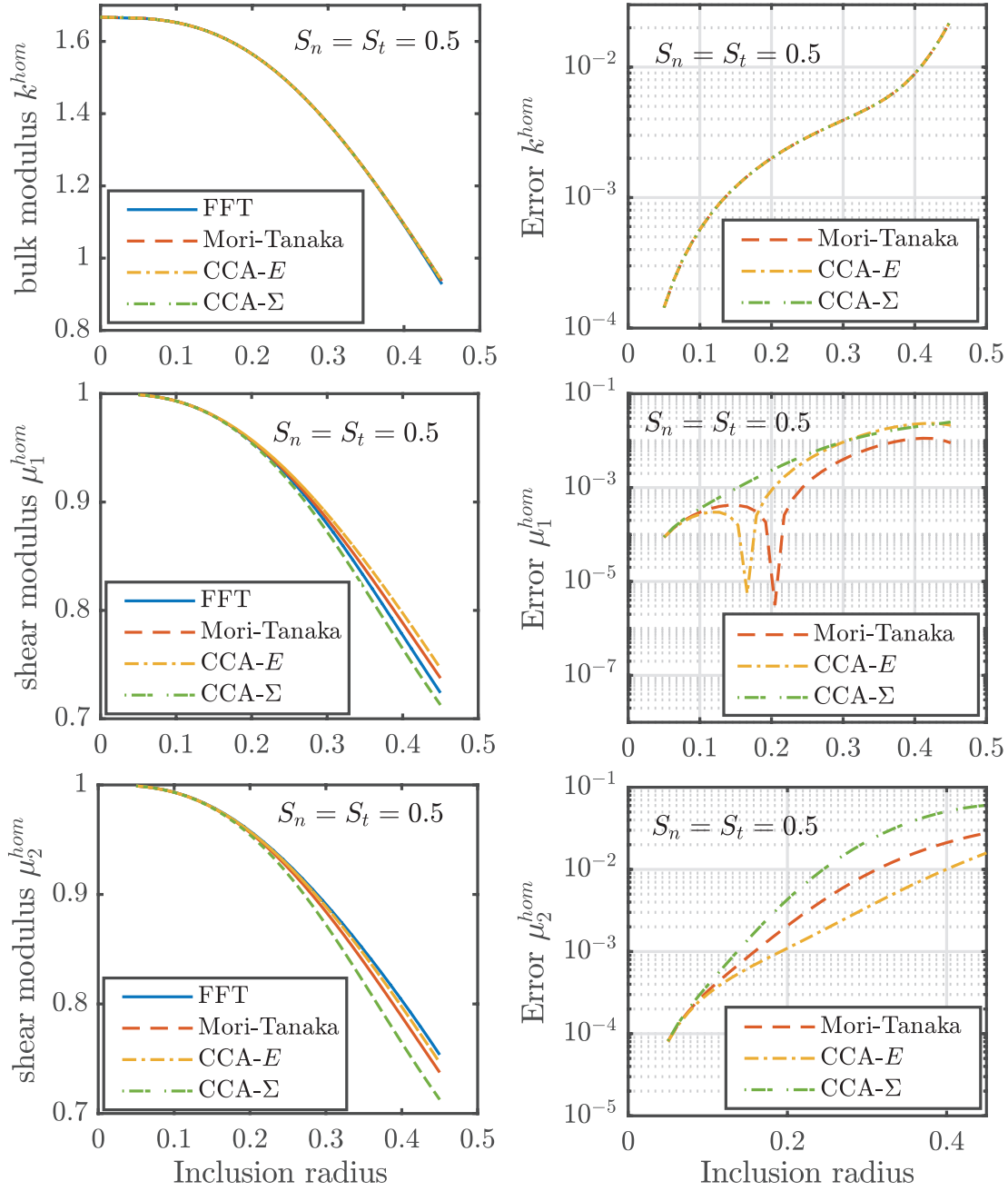


FIGURE 3.7 – Homogenized elastic coefficients (at the left) and respective relative error with the FFT solution error (at the right) for the spherical inclusion.

3.8 Conclusion

The FFT method has been extended in the case of elastic composites with adhesive interface. In that problem, the displacement is discontinuous while the traction remains continuous across the interface between the inclusions and the matrix. The problem is applied to composites with cylindrical and spherical in-

clusions. In order to account for the displacement jump, polynomial type interpolation functions of degree 1, 3 and 5 have been considered. The discretized problem is solved by means of the conjugate gradient method. The accuracy of the approach has been investigated by the comparison with FE solutions. It has been observed that the interpolation with third degree polynomials leads accurate results. Analytical estimates of the elastic properties have been determined considering the Mori-Tanaka approach and the composite cylinder/sphere assemblage of Hashin. The comparison with the FFT solutions shows a good approximation of the analytic estimates at small volume fraction of inclusions.

Chapitre 4

Modélisation des phénomènes de couche limite en milieux biporeux

L'objectif de ce chapitre est d'identifier les coefficients du modèle de Brinkman et de Beavers-Joseph (BJ) pour la modélisation des écoulements dans les milieux à double échelle de porosité dans le cadre d'une démarche par changement d'échelle. On propose d'abord de rappeler le cadre d'homogénéisation puis la problématique liée à l'identification des paramètres.

4.1 Positionnement du problème

4.1.1 Principes d'homogénéisation de milieux biporeux

Le milieu poreux étudié est constitué de deux type de pores : des micropores et des macropores, chaque échelle de porosité est caractérisée par une longueur : l (pour les micropores), et L (pour les macropores). Une illustration d'un milieu à deux échelles de porosité est donnée sur la figure 4.1. Ce milieu est obtenu à l'aide d'un pavage périodique de cellules carrées de côté l contenant un solide circulaire. On a retiré les solides dans plusieurs cellules afin d'obtenir un macropore de forme circulaire. Cette cellule étant reproduite par périodicité dans les deux directions de l'espace, les macropores forment un nouveau périodique de période L .

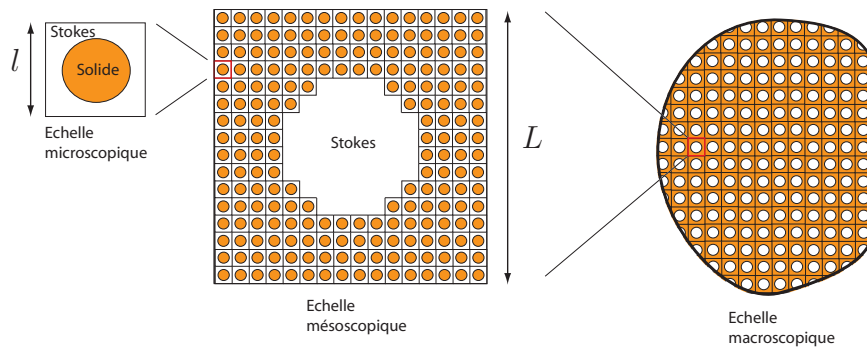


FIGURE 4.1 – Exemple d'illustration d'une cellule élémentaire d'un milieu biporeux.

Lorsque la taille des macropores est suffisamment grande devant celle des micropores, $l \ll L$ alors on peut calculer la perméabilité macroscopique par une technique de double homogénéisation. Cette démarche d'homogénéisation est décrite sur la figure 4.2. Le processus de double homogénéisation a été étudié par Auriault et Boutin [4, 5, 6], Royer et al. [97], Boutin et al. [19], Olny et Boutin [90], nous en rappelons ici les étapes.

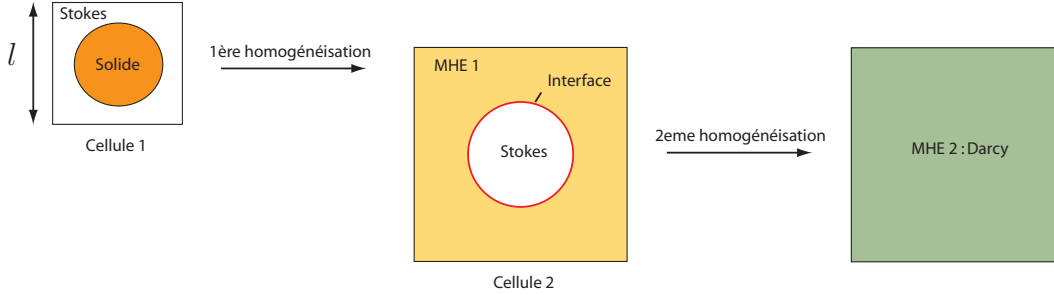


FIGURE 4.2 – Schématisation du processus de double homogénéisation d'un milieu biporeux.

La première étape d'homogénéisation consiste à calculer le tenseur de perméabilité associé au réseau de micropores. On considère donc une cellule élémentaire représentative du milieu poreux contenant les micropores seuls (cellule 1) dans laquelle l'écoulement est décrit par les équations de Stokes. On déduit alors la perméabilité du milieu poreux contenant uniquement des micropores. Cette première étape d'homogénéisation peut-être réalisée avec la méthode FFT présentée au chapitre 1. On détermine ainsi le Milieu Homogène Equivalent (MHE1) qui est donné par l'équation de Darcy et qui remplace le réseau de cylindres par une matrice poreuse ayant pour perméabilité $\mathbf{k}$. Cette perméabilité est appelée microporperméabilité dans la suite de ce chapitre puisqu'elle décrit uniquement les propriétés de filtration à travers le réseau de micropores.

La seconde étape d'homogénéisation consiste à calculer la perméabilité du milieu biporeux à partir d'une cellule élémentaire contenant à la fois la matrice poreuse et les macropores (cellule 2). Il s'agit d'un problème dans lequel nous devons coupler l'équation de Darcy et de Stokes.

4.1.2 Le problème couplé Darcy/Stokes

À l'échelle intermédiaire, la matrice poreuse contenant les plus petits pores est donc remplacée par un milieu homogène équivalent de Darcy de perméabilité $\mathbf{k}$. On admet, par simplicité, que la porosité est isotrope et on pose $\mathbf{k} = k\mathbf{I}$. Nous la distinguerons de la perméabilité macroscopique ou homogénéisée en notant cette dernière $\mathbf{K}^{hom}$. La vitesse d'écoulement dans la matrice poreuse est donc solution des équations suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(\mathbf{x}) &= -\frac{1}{\mu} \mathbf{k} \cdot (\nabla p(\mathbf{x}) + \mathbf{J}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \\ \text{div}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) &= 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \end{aligned} \tag{4.1}$$

où μ est la viscosité dynamique du fluide, Ω_s désigne le domaine occupé par la matrice poreuse, $p(\mathbf{x})$ est la pression périodique, $\mathbf{J}$ est le gradient de pression imposé.

Dans les macropores, la vitesse satisfait aux équations de Stokes :

$$\begin{aligned} \mu \Delta \mathbf{v}(\mathbf{x}) - \nabla p(\mathbf{x}) &= \mathbf{J} & \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ \operatorname{div}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) &= 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \end{aligned} \quad (4.2)$$

Dans ces équations Ω_f est le domaine occupé par les macropores. Au bord de la cellule, on considère des conditions de périodicité pour $p(\mathbf{x})$ est d'antipériodicité pour $\mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}$:

$$p(\mathbf{x}) \text{ périodique, } \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \text{ antipériodique} \quad (4.3)$$

Dés lors ce type de modélisation est incomplète comme cela a déjà été souligné dans les travaux d'Auriault et Boutin [4, 5, 6]. L'écriture des conditions à l'interface entre les deux milieux se pose pour fermer le problème. La cellule est constituée de deux milieux où la vitesse et la pression satisfont à des équations de nature différente. Pour un milieu de Darcy, les conditions à la frontière sont des conditions en pression $p(\mathbf{x})$ et/ou en vitesse normale $\mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}$ imposés. Pour un milieu de Stokes, les conditions à la frontière sont des conditions pour la vitesse $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ et pour le vecteur contrainte $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}$, la contrainte étant définie par :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 2\mu \mathbf{d}(\mathbf{x}) - p(\mathbf{x}) \mathbf{I}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \quad (4.4)$$

où $\mathbf{d}(\mathbf{x})$ est le taux de déformation qui est défini par :

$$\mathbf{d}(\mathbf{x}) = \nabla_s \mathbf{v}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \quad (4.5)$$

Deux approches sont usuellement employées pour décrire les phénomènes d'écoulement à la jonction des deux milieux :

- La première consiste à utiliser le modèle d'interface de Beavers-Joseph [9] qui génère une discontinuité de la composante tangentielle du champ de vitesse.
- La seconde, consiste à remplacer le modèle de Darcy pour la matrice avec les micropores par le modèle de Brinkman [22, 23].

Nous décrivons ces deux modèles dans les sections suivantes.

4.1.3 Le modèle d'interface de Beavers-Joseph

La première approche consiste à utiliser le modèle d'interface de Beavers-Joseph [9] qui génère une discontinuité de la composante tangentielle du champ de vitesse. Les conditions à l'interface de ce modèle (noté BJ dans la suite) sont données ci-dessous :

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma : \begin{cases} \mathbf{v}^s(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} = \mathbf{v}^f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} \\ \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\sigma}^f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\tau} = 2\mu \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{d}^f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\tau} = \lambda (\mathbf{v}^s(\mathbf{x}) - \mathbf{v}^f(\mathbf{x})) \cdot \boldsymbol{\tau} \\ \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\sigma}^f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} = 2\mu \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{d}^f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} - p^f(\mathbf{x}) = -p^s(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (4.6)$$

Dans ces équations, les exposants "s" et "f" font référence à la quantité prise dans la phase microporeuse Ω_s et dans les macropores Ω_f respectivement. Les

vecteurs $\boldsymbol{\nu}$ et $\boldsymbol{\tau}$ sont respectivement le vecteur normal et tangentiel à l'interface Γ . La première équation résulte de la conservation de la masse qui se traduit par la continuité de la vitesse normale. La seconde équation donne le saut du vecteur tangent à l'interface qui est proportionnel à la composante tangentielle du vecteur contrainte. Dans cette équation λ est un paramètre du modèle de Beavers-Joseph. La dernière équation est la continuité de la composante normale du vecteur contrainte. Dans la région de Darcy, le tenseur des contraintes est sphérique, il vaut $-p^s \mathbf{I}$, il n'y a donc pas de cisaillement. Le paramètre λ est généralement choisi sous la forme :

$$\lambda = \frac{\mu}{\sqrt{k}} \delta \quad (4.7)$$

où k est la perméabilité (scalaire) de la matrice microporeuse et δ est appelé coefficient de glissement (sans dimension). L'introduction du facteur $\sqrt{k}$ au dénominateur permet de tenir compte de la géométrie de la matrice microporeuse. Pour un milieu poreux très perméable, k est grand, le coefficient λ est donc petit et le saut du champ de vitesse est important. Inversement, si le milieu est peu perméable, k est petit, λ est donc grand, le saut est faible. Dans le cas limite où le milieu est imperméable, $k = 0$ alors $\lambda = +\infty$, la vitesse dans la région poreuse $\mathbf{v}^s(\mathbf{x})$ est nulle et on retrouve alors la condition d'adhérence à la paroi, $\mathbf{v}^f(\mathbf{x}) = 0$, $\forall \mathbf{x} \in \Gamma$.

Le coefficient de glissement a été déterminé expérimentalement par Beavers et Joseph [9] pour une mousse métallique de Nickel et ont identifié des valeurs égales à 0.78, 1.45 and 4.0 pour des microstructures avec des tailles de pores moyens de 0.016, 0.034 and 0.045 inches respectivement. Pour l'Aloxite c'est une valeur de 0.1 qui a été déterminée pour des pores de taille moyenne égale 0.013 et 0.027 inches. D'autres travaux, basés sur des simulations numériques pour obtenir le coefficient de glissement, ainsi Sahraoui et Kaviani [98] ont obtenu un coefficient de glissement de l'ordre de 2 pour un réseau poreux périodique de cylindres.

Une variante du modèle BJ est le modèle de Beavers-Joseph-Saffman (BJS). Dans ce modèle, la vitesse dans la région microporeuse est négligée si bien que la condition d'interface pour la composante tangentielle s'écrit :

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\sigma}^f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\tau} = 2\mu \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{d}^f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\tau} = -\lambda \mathbf{v}^f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (4.8)$$

4.1.4 Modélisation avec l'équation de Brinkman

Une approche alternative consiste à remplacer l'équation de Darcy par l'équation de Brinkman [22, 23]. Elle est obtenue en ajoutant, à l'équation de Darcy, un terme diffusif :

$$\mu_e \Delta \mathbf{v}(\mathbf{x}) - \frac{\mu}{k} \mathbf{v}(\mathbf{x}) - \nabla p(\mathbf{x}) = \mathbf{J} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \quad (4.9)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \quad (4.10)$$

Le terme diffusif est accompagné d'un coefficient de viscosité dynamique équivalent μ_e dont la valeur est différente de μ . On pose $\mu_e = \mu \alpha$ où α est un coefficient (sans dimension) à ajuster pour tenir compte des effets de couche limite à la paroi entre la matrice poreuse et les macropores.

Les conditions d'interface entre les deux milieux s'écrivent :

$$\mathbf{v}^{(s)}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^{(f)}(\mathbf{x}), \quad \boldsymbol{\sigma}^{(s)}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{\sigma}^{(f)}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma \quad (4.11)$$

qui représentent la continuité du champ de vitesse et du vecteur contrainte à la traversée de l'interface. La contrainte dans la matrice microporeuse est donnée par :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 2\mu_e \mathbf{d}(\mathbf{x}) - p(\mathbf{x})\mathbf{I}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \quad (4.12)$$

où $\mathbf{d}(\mathbf{x})$ est le taux de déformation calculé avec la vitesse dans la matrice microporeuse.

Au bord de la cellule, on considère des conditions de périodicité pour $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ est d'antipériodicité de $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}$:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) \text{ périodique, } \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \text{ antipériodique} \quad (4.13)$$

4.1.5 Problématique

Les modèles de Beavers-Joseph et de Brinkman font apparaître des coefficients supplémentaires qui ne sont pas obtenus par une démarche d'homogénéisation puisqu'ils décrivent des phénomènes non pas à coeur du matériau microporeux mais à l'interface. Seule la perméabilité associée au réseau de micropores, $\mathbf{k}$, peut être obtenue par homogénéisation. On peut noter que ces questions relatives aux conditions de bord ont été abordées par Dumontet [39, 40] dans le contexte des composites élastiques. La démarche proposée ici est différente. L'objectif est de procéder à une identification des paramètres des modèles de Brinkman ou BJ en effectuant un calcul complet simulant l'écoulement aux deux échelles simultanément. Cela nécessite évidemment des calculs de grande taille, c'est pourquoi l'étude proposée ici se restreint à des situation bidimensionnelles. Nous allons considérer des microstructures simples, organisées en couches, pour lesquelles des solutions analytiques peuvent être également calculées.

4.2 Etude pour un milieu bi-couches

4.2.1 Calcul de la perméabilité macroscopique avec l'équation de Brinkman

On considère un milieu poreux bi-couches schématisé sur la figure ci dessous. La cellule élémentaire est constituée d'un fluide, dont l'écoulement est régi par l'équation de Stokes, entre deux parois en contact avec un milieu poreux. Dans la phase microporeuse, l'écoulement est régi par l'équation de Brinkman. On applique un gradient de pression dans la direction x_1 . On pose donc $J_2 = 0$. Le problème est invariant dans la direction x_1 , les variables locales sont donc fonction de x_2 uniquement.

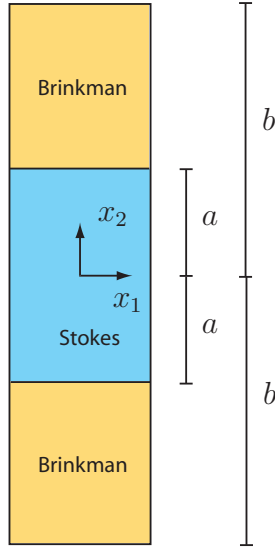


FIGURE 4.3 – Ecoulement dans un milieu bi-couche constitué d'un milieu microporeux (Brinkman) et d'un macropore (Stokes).

Dans le milieu microporeux, Ω_s , l'équation de Brinkman devient :

$$\begin{aligned} \mu_e \frac{dv_1^s}{dx_2^2}(x_2) - \frac{\mu}{k} v_1^s(x_2) &= J_1 \\ \mu_e \frac{dv_2^s}{dx_2^2}(x_2) - \frac{\mu}{k} v_2^s(x_2) - \frac{dp^s}{dx_2}(x_2) &= 0 \\ \frac{dv_2^s}{dx_2}(x_2) &= 0 \end{aligned} \quad (4.14)$$

La symétrie du problème suggère que $v_2^s(x_2) = 0$, alors la pression $p^s(x_2)$ est une constante. Le problème étant défini à une pression de référence près, on peut poser $p^s(x_2) = 0$. Dans la matrice poreuse, la solution des équations de Brinkman sont :

$$\begin{aligned} v_1^s &= \begin{cases} -\frac{k}{\mu} J_1 + B_1 \exp(\omega x_2) + B_2 \exp(-\omega x_2) & x_2 \in [-b, -a[\\ -\frac{\mu}{k} J_1 + C_1 \exp(\omega x_2) + C_2 \exp(-\omega x_2) & x_2 \in]a, b] \end{cases} \\ v_2^s &= 0, \quad p^s = 0 \end{aligned} \quad (4.15)$$

où l'on a posé :

$$\omega = \sqrt{\frac{\mu}{\mu_e k}} \quad (4.16)$$

Compte tenu de la géométrie de la cellule, la vitesse v_1^s est une fonction paire de la coordonnée x_2 , il vient donc $B_1 = C_2$ et $B_2 = C_1$.

Les conditions de périodicité sont : (i) la périodicité du champ de vitesse et (ii) l'antipériodicité du vecteur contrainte. La condition (i) est automatiquement vérifiée avec les conditions de parité mentionnées ci-dessus.

Les contraintes ont pour expression :

$$\sigma_{12}^s = \mu_e \frac{dv_1^s}{dx_2}, \quad \sigma_{22}^s = 0 \quad (4.17)$$

La condition (ii) est donc vérifiée si :

$$\frac{dv_1^s}{dx_2}(-b) = \frac{dv_1^s}{dx_2}(b) \quad (4.18)$$

ce qui conduit à :

$$C_2 = C_1 \exp(2\omega b) \quad (4.19)$$

On pose donc dans la suite :

$$C_1 = \frac{1}{2}C' \exp(-\omega b), \quad C_2 = \frac{1}{2}C' \exp(\omega b) \quad (4.20)$$

qui permet ainsi de vérifier la condition dans (4.19). Il vient alors pour v_1^s :

$$v_1^s = \begin{cases} -\frac{k}{\mu}J_1 + C' \cosh(\omega(x_2 + b)) & x_2 \in [-b, -a[\\ -\frac{k}{\mu}J_1 + C' \cosh(\omega(x_2 - b)) & x_2 \in]a, b] \end{cases} \quad (4.21)$$

Dans la région de Stokes, Ω_f , les équations deviennent :

$$\begin{aligned} \mu \frac{dv_1^f}{dx_2^2}(x_2) &= J_1 \\ \mu \frac{dv_2^f}{dx_2^2}(x_2) - \frac{dp^f}{dx_2}(x_2) &= 0 \\ \frac{dv_2^f}{dx_2} &= 0 \end{aligned} \quad (4.22)$$

v_2^f et p^f sont tous deux nuls et la vitesse v_1^f vaut :

$$v_1^f = \frac{J_1}{2\mu}(x_2^2 - a^2) + A_1, \quad x_2 \in [-a, a] \quad (4.23)$$

où A_1 est une constante d'intégration qui représente le glissement à la paroi ($v_1^f = A_1$ en $x_2 = \pm a$).

À l'interface, on assure la continuité du champ de vitesse et du vecteur contrainte :

$$v_1^f(\pm a) = v_1^s(\pm a) \quad (4.24)$$

$$\sigma_{12}^f(\pm a) = \sigma_{12}^s(\pm a) \quad (4.25)$$

La continuité de la composante v_1 en $x_2 = \pm a$ s'écrit :

$$-\frac{k}{\mu}J_1 + C' \cosh(\omega(b - a)) = A_1 \quad (4.26)$$

La continuité du cisaillement en $x_2 = \pm a$ s'écrit alors :

$$-\mu_e \omega C' \sinh(\omega(b - a)) = J_1 a \quad (4.27)$$

Il vient donc pour les deux constantes A_1 et C' :

$$C' = -\frac{J_1 a}{\mu_e \omega \sinh(\omega(b-a))}; \quad A_1 = -\frac{k}{\mu} J_1 - \frac{J_1 a}{\mu_e \omega} \coth(\omega(b-a)) \quad (4.28)$$

Pour résumer, on a donc :

$$v_1^s = \begin{cases} -\frac{k}{\mu} J_1 - \frac{J_1 a \cosh(\omega(x_2 + b))}{\mu_e \omega \sinh(\omega(b-a))}, & x_2 \in [-b, -a[\\ -\frac{k}{\mu} J_1 - \frac{J_1 a \cosh(\omega(x_2 - b))}{\mu_e \omega \sinh(\omega(b-a))}, & x_2 \in]a, b] \end{cases} \quad (4.29)$$

$$v_1^f = \frac{J_1}{2\mu}(x_2^2 - a^2) - \frac{k}{\mu} J_1 - \frac{J_1 a}{\mu_e \omega} \coth(\omega(b-a)), \quad x_2 \in [-a, a]$$

Examinons d'abord la solution locale du problème, nous verrons dans un second temps la solution pour la perméabilité macroscopique. Nous utilisons les valeurs suivantes :

$$a = 0.1, \quad b = 0.5, \quad k = 0.01, \quad \mu = 1 \quad (4.30)$$

Ici nous utilisons des valeurs sans dimension pour une simple étude qualitative de la solution. Des comparaisons quantitatives seront effectuées par la suite avec des calculs numériques.

On représente sur la figure 4.4 les variations de la vitesse v_1 en fonction de la position x_2 pour trois valeurs du coefficient α . On observe une nette influence de ce paramètre sur le profil de vitesse dans la matrice microporeuse et dans la couche fluide.

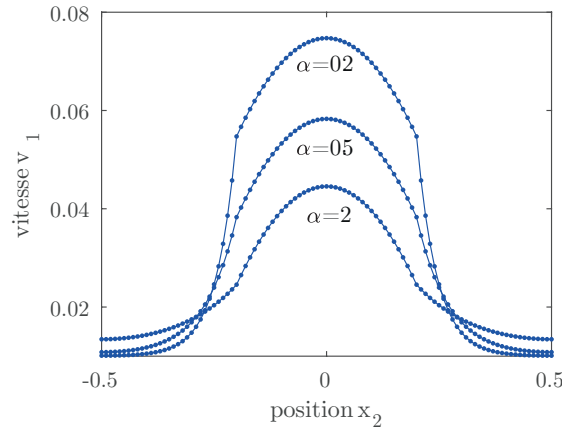


FIGURE 4.4 – Champ de vitesse v_1 en fonction de la position x_2 pour différentes valeurs du coefficient adimensionné α du modèle de Brinkman.

Le champ de vitesse dans la couche fluide est parabolique et atteint un pic en $x_2 = 0$. La valeur de ce pic est d'autant plus grande que α est petit. On note également que la longueur de la couche limite dans la partie poreuse dépend aussi

de la valeur de α . Lorsque $\alpha = 0.2$ la longueur de la couche limite est faible et augmente ensuite avec les valeurs $\alpha = 0.5$ et $\alpha = 2$. En diminuant progressivement la valeur de α , le profil de vitesse tend vers une discontinuité à la paroi. La valeur maximale du champ de vitesse (en $x_2 = 0$) vaut :

$$v_{max} = -\frac{J_1 a^2}{2\mu} - \frac{k}{\mu} J_1 - \frac{J_1 a}{\mu_e \omega} \coth(\omega(b-a)) \quad (4.31)$$

Intéressons nous maintenant au calcul de la perméabilité macroscopique. Celle-ci est déterminée avec le calcul de la moyenne du champ de vitesse sur la cellule élémentaire qui, dans le cas présent, se ramène à une intégrale simple pour la coordonnée x_2 . On peut considérer deux contributions dans la vitesse macroscopique en effectuant l'intégrale sur le domaine microporeux Ω_s , on la note V_1^s , et une seconde intégrale sur Ω_f que l'on note V_1^f :

$$V_1 = V_1^s + V_1^f \quad (4.32)$$

Le calcul donne :

$$\begin{aligned} V_1^s &= \frac{1}{b} \int_{x_2=a}^{x_2=b} v_1^s dx_2 = -\frac{b-a}{b} \frac{k}{\mu} J_1 - \frac{C'}{\omega b} \sinh(\omega(b-a)) \\ V_1^f &= \frac{1}{b} \int_{x_2=0}^{x_2=a} v_1^f dx_2 = -\frac{J_1 a^3}{3b\mu} + \frac{A_1 a}{b} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Il vient donc :

$$\begin{aligned} V_1 &= -\frac{b-a}{b} \frac{k}{\mu} J_1 + \frac{C'}{\omega b} \sinh(\omega(b-a)) - \frac{J_1 a^3}{3b\mu} + \frac{A_1 a}{b} \\ &= -\frac{k J_1}{\mu} - \frac{J_1 a^3}{3b\mu} + \frac{J_1 a^2}{\mu_e b \omega^2} (1 - \omega a) \coth(\omega(b-a)) \end{aligned} \quad (4.34)$$

D'où l'expression de la perméabilité :

$$K_{11}^{hom} = k \frac{b+a}{b} + \frac{a^3}{3b} + k \frac{\omega a^2}{b} \coth(\omega(b-a)) \quad (4.35)$$

Il s'agit ici de la perméabilité K_{11}^{hom} puisqu'elle est obtenue en calculant la vitesse V_1 due au gradient de pression J_1 . Il est possible de calculer la composante K_{22}^{hom} en imposant le gradient de pression J_2 et en calculant la vitesse macroscopique V_2 . Ce calcul, moins intéressant pour la suite de nos développements, n'a pas été réalisé dans ce travail.

4.2.2 Calcul de la perméabilité macroscopique avec les modèles BJ et BJS

On reprend le calcul en remplaçant le modèle de Brinkman par l'équation de Darcy pour la matrice contenant les micropores et on utilise soit le modèle d'interface de Beavers-Joseph (BJ) soit le modèle de Beavers-Joseph-Saffman (BJS) aux interfaces situées en $x_2 = \pm a$.

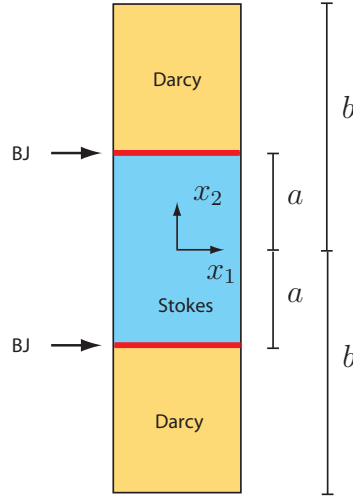


FIGURE 4.5 – Cellule du milieu bi-couches avec les modèles Stokes-Darcy-BJ

On applique toujours un gradient dans la direction x_1 . La composante v_2 est nulle et le champ v_1 est fonction de la coordonnée x_2 .

Dans la région de Stokes, la solution est toujours de la forme :

$$v_1^f = \frac{J_1}{2\mu}(x_2^2 - a^2) + A_1, \quad x_2 \in [-a, a] \quad (4.36)$$

où A_1 est une constante dont l'expression est différente de celle obtenue avec l'équation de Brinkman.

Dans la matrice poreuse, la résolution de l'équation de Darcy est triviale et donne :

$$\begin{aligned} v_1^s &= -\frac{k}{\mu}J_1, \quad x_2 \in [-b, -a[\\ v_1^s &= -\frac{k}{\mu}J_1, \quad x_2 \in]a, b] \end{aligned} \quad (4.37)$$

La vitesse est donc constante dans la matrice poreuse, les conditions de périodicité sont ainsi automatiquement vérifiées. La pression locale est constante, définie à une pression de référence près, que l'on peut choisir égale à zéro. Vérifions maintenant les conditions à l'interface.

La condition sur le saut de la vitesse tangentielle s'écrit :

$$\mu \frac{dv_1^f}{dx_2}(x_2 = \pm a) = \lambda \left(v_1^s(x_2 = \pm a) - v_1^f(x_2 = \pm a) \right) \quad (4.38)$$

En utilisant les expressions de v_1^s et de v_1^f donnés par les formules (4.37) et (4.36) on obtient pour la constante A_1 :

$$A_1 = -\frac{J_1 a}{\lambda} - \frac{k}{\mu}J_1 \quad (4.39)$$

Il vient donc pour la vitesse dans la région décrite par l'équation de Stokes :

$$v_1^f = \frac{J_1}{2\mu}(x_2^2 - a^2) - \frac{J_1 a}{\lambda} - \frac{k}{\mu}J_1, \quad x_2 \in [-a, a] \quad (4.40)$$

Nous allons faire une étude qualitative de la solution obtenue en reprenant les valeurs des coefficients donnés par l'Eq. (4.30). On trace sur la figure 4.6 le profil de vitesse en fonction de la coordonnée x_2 pour trois valeurs du coefficient δ . On rappelle que le coefficient λ proposé par le modèle BJ est de la forme :

$$\lambda = \frac{\mu\delta}{\sqrt{k}} \quad (4.41)$$

où k est la perméabilité de la matrice microporeuse et δ un coefficient sans dimension. Sur la figure 4.6, on observe que la solution dans Ω_s est indépendante du coefficient δ . Dans Ω_f la solution est parabolique. La discontinuité à l'interface augmente lorsque l'on diminue celle de δ .

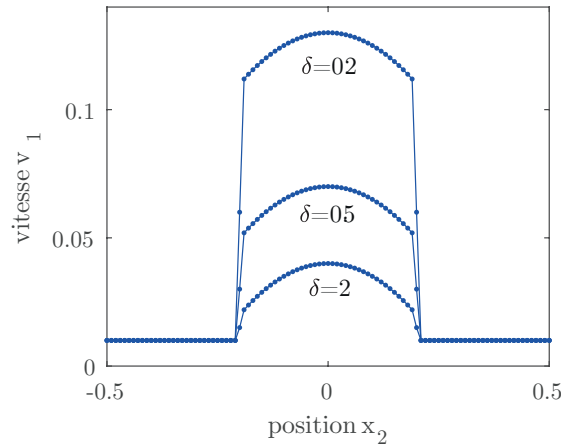


FIGURE 4.6 – Champ de vitesse v_1 en fonction de la position x_2 pour différentes valeurs du coefficient adimensionné δ du modèle de Beavers-Joseph.

La vitesse maximale a pour expression :

$$v_{max} = -\frac{J_1 a^2}{2\mu} - \frac{J_1 a}{\lambda} - \frac{k}{\mu} J_1 \quad (4.42)$$

Celle-ci est obtenue en posant $x_2 = 0$ dans l'Eq. (4.40).

Calculons la perméabilité macroscopique. On utilise toujours la décomposition (4.32) dans laquelle V_1^s et V_1^f ont maintenant pour expressions :

$$\begin{aligned} V_1^s &= \frac{1}{b} \int_{x_2=a}^{x_2=b} v_1^s dx_2 = -\frac{k}{\mu} \frac{b-a}{b} J_1 \\ V_1^f &= \frac{1}{b} \int_{x_2=0}^{x_2=a} v_1^f dx_2 = -\frac{J_1}{3\mu} \frac{a^3}{b} - \frac{J_1 a}{\lambda} \frac{a}{b} - \frac{k}{\mu} J_1 \frac{a}{b} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Il vient donc :

$$V_1 = -\frac{J_1}{3\mu} \frac{a^3}{b} - \frac{J_1 a}{\lambda} \frac{a}{b} - \frac{k}{\mu} J_1 \quad (4.44)$$

D'où l'expression de la perméabilité :

$$K_{11}^{hom} = k + \frac{a^3}{3b} + \frac{\mu a^2}{\lambda b} \quad (4.45)$$

Lorsque l'on utilise le modèle de Beavers-Joseph-Saffman (BJS), la condition de saut du champs de vitesse devient :

$$\mu \frac{dv_1^f}{dx_2}(x_2 = \pm a) = -\lambda v_1^f(x_2 = \pm a) \quad (4.46)$$

Avec cette nouvelle condition, l'identification de la constante A_1 donne :

$$A_1 = -\frac{J_1 a}{\lambda} \quad (4.47)$$

La vitesse maximale a pour expression :

$$v_{max} = -\frac{J_1 a^2}{2\mu} - \frac{J_1 a}{\lambda} \quad (4.48)$$

Et la perméabilité macroscopique vaut :

$$K_{11}^{hom} = k \frac{b-a}{b} + \frac{a^3}{3b} + \frac{\mu a^2}{\lambda b} \quad (4.49)$$

Sur la figure 4.7 en compare le profil de vitesse pour les modèles BJ et BJS. L'amplitude de la discontinuité est plus importante avec le modèle BJ.

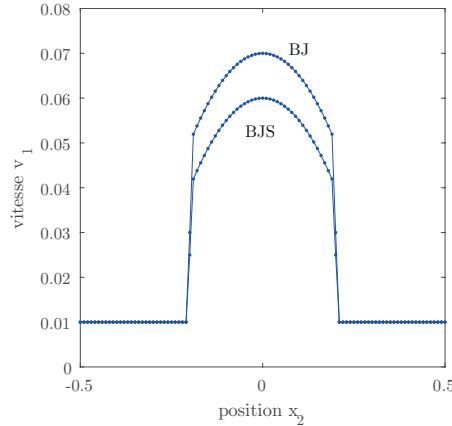


FIGURE 4.7 – Champ de vitesse v_1 en fonction de la position x_2 obtenu avec le modèle BJ et BJS avec $\delta = 0.5$.

Notons toutefois que cette comparaison est effectuée avec la même valeur de λ . Il est possible d'identifier des valeurs de λ qui conduiraient au même profil de vitesse.

4.3 Calcul numérique direct

On propose maintenant de procéder à l'identification des coefficients des modèles en réalisant des comparaisons avec la simulation de l'écoulement aux deux échelles. Les calculs sont réalisés avec la méthode par TFR. La cellule élémentaire du milieu bi-poreux pour réaliser nos calculs est illustrée sur la figure 4.8 (cellule 2). Elle diffère de celle utilisée pour les calculs analytiques pour lesquels on a centré la couche de Stokes autour de l'origine pour des raisons de simplicité des calculs. Toutefois on peut comparer les champs obtenus en effectuant une simple translation puisque la solution du problème est périodique.

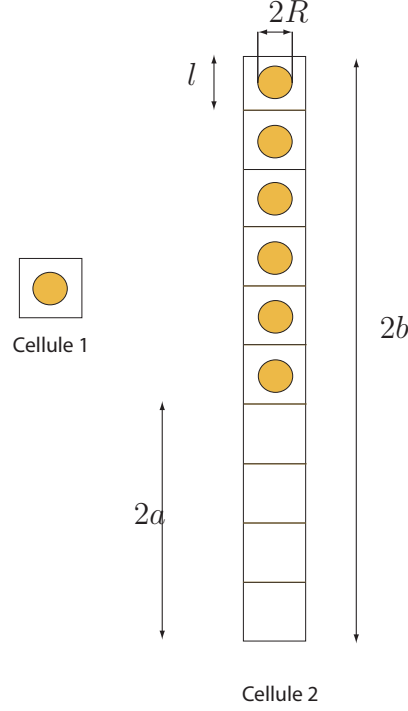


FIGURE 4.8 – Cellule élémentaire du milieu biporeux.

La cellule est définie par 10 cellules carrées, de côté l , alignées dans la direction Ox_2 . Ces cellules peuvent contenir des inclusions circulaires de rayon R ou être vides. En reprenant les notations introduites dans les sections précédentes, la longueur totale de la cellule dans la direction Ox_2 est $L = 2b = 10l$, dans la direction Ox_1 la cellule a pour dimension l . On note n_{inc} le nombre d'inclusion, si bien que $2(b - a) = n_{inc} \times l$. Les calculs numériques sont réalisés avec des valeurs normalisées du gradient de pression et de la viscosité dynamique : $J_1 = -1$ et $\mu = 1$. Le gradient de pression étant négatif, l'écoulement de fluide s'effectue de la gauche vers la droite.

Le problème géométrique est entièrement défini par deux paramètres qui sont : le rayon des inclusions R et le nombre d'inclusions n_{inc} . Nous utiliserons plutôt des grandeurs sans dimension. Ainsi, on note $\bar{R} = R/l$ qui varie dans l'intervalle $[0, 0.5]$. Les calculs sont réalisés en faisant varier le rayon des inclusions jusqu'à la valeur $\bar{R}_{max} = 0.4$, au delà de cette valeur, la perméabilité associée au réseau

de micropores devient très faible et par conséquent les effets de couches limites aussi. Les calculs numériques sont donc restreints aux cas $0 < \bar{R} < \bar{R}_{max}$.

La solution obtenue est bidimensionnelle, c'est à dire que le champ de vitesse dépend des coordonnées x_1 et x_2 . Afin de comparer les résultats obtenus avec les solutions analytiques, nous calculons un champ "moyen" selon la direction x_1 qui obtenu par la relation de moyenne :

$$\langle v_1 \rangle_{x_1}(x_2) = \frac{1}{l} \int_0^l v_1(x_1, x_2) dx_1 \quad (4.50)$$

Le champ moyen ainsi obtenu dépend uniquement de la coordonnée x_2 . Les comparaisons avec les solutions analytiques sont réalisées en remplaçant les cellules contenant des inclusions par une matrice microporeuse et les cellules vides par une couche fluide où les équation de Stokes régissent l'écoulement. Cela nécessite une identification des paramètres des modèles de Brinkman ou des modèles d'interface BJ et BJS. La perméabilité de la matrice microporeuse, k , est déterminée par un calcul d'homogénéisation sur une cellule contenant une inclusion circulaire (cellule 1). Ce calcul a déjà été illustré au chapitre 1 de la thèse, la perméabilité obtenue est représentée sur la figure 1.7. Les paramètres des modèles de Brinkman, α , et des modèles d'interface BJ et BJS, δ , sont identifiés avec la solution complète (calcul sur la cellule 2). Deux types d'identification sont proposés : la première avec la valeur maximale de la vitesse dans la région de Stokes v_{max} , la seconde avec la perméabilité macroscopique K_{11}^{hom} . Les formules donnant le champ de vitesse maximal sont données par les formules (4.31), (4.42) et (4.48) pour les modèles de Brinkman, BJ et BJS respectivement. Les formules donnant la perméabilité macroscopique sont données par les formules (4.35), (4.45) et (4.49). Les variations du champ moyen (4.50) sont représentées sur la figure 4.9 pour des inclusions de rayon $\bar{R} = 0.1$ et pour une cellule contenant 2 et 9 inclusions respectivement. Ces solutions sont comparées avec les solutions analytiques. Dans ces illustrations, les paramètres des modèles sont identifiés avec la vitesse maximale.

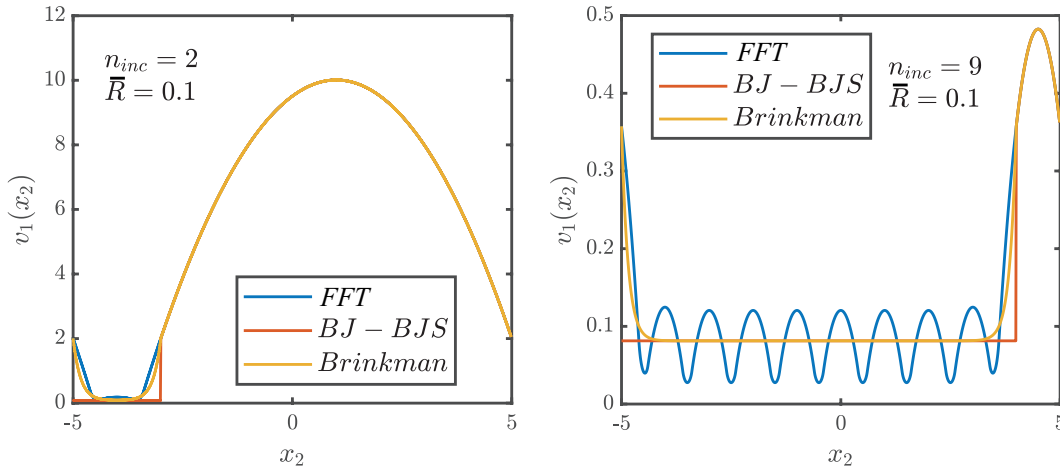


FIGURE 4.9 – Comparaison de la solution par le calcul complet obtenue par TFR avec les solutions analytiques.

On peut observer que la solution numérique est quasiment périodique dans les cellules à coeur de la matrice poreuse, c'est à dire pour les cellules qui ne sont pas en contact avec la couche de Stokes. Dans les deux cellules en contact avec cette couche, la solution fait clairement apparaître une perte de périodicité. Les effets de couche limite sont contenus dans ces deux cellules. Lorsque la matrice microporeuse est constituée de 2 inclusions, on ne peut évidemment pas discerner de solution périodique. Dans la couche de Stokes, la solution coïncide parfaitement avec les différentes solutions analytiques.

L'identification des paramètres des modèles est réalisée en faisant varier les paramètres microstructuraux : le nombre d'inclusions n_{inc} et le rayon des inclusions $\bar{R}$. Les résultats sont donnés sur les figures 4.10 et 4.11.

Sur la figure 4.10 de gauche, on représente le coefficient α du modèle de Brinkman en fonction nombre d'inclusions. A droite on représente la valeur du coefficient δ des modèles de BJ et BJS en fonction du nombre d'inclusions. On rappelle que les coefficients α et δ sont des paramètres sans dimensions qui sont définis tels que :

$$\mu_e = \mu\alpha, \quad \lambda = \frac{\mu\delta}{\sqrt{k}} \quad (4.51)$$

Les résultats montrent que ces deux coefficients dépendent sensiblement du nombre d'inclusions, donc de la hauteur de la couche poreuse ou encore de la hauteur de la couche de fluide.

Sur la figure 4.11 on examine la dépendance de ces deux coefficients avec la taille des inclusions $\bar{R}$ pour une couche constituée de 7 inclusions. On observe que α et δ dépendent fortement de R . Il apparaît donc que l'expression choisie pour λ (cf. Eq. (4.51)) ne permet pas de définir un coefficient adimensionné δ qui soit indépendant de R malgré l'introduction de la perméabilité k qui dépend elle-même du rayon des inclusions.

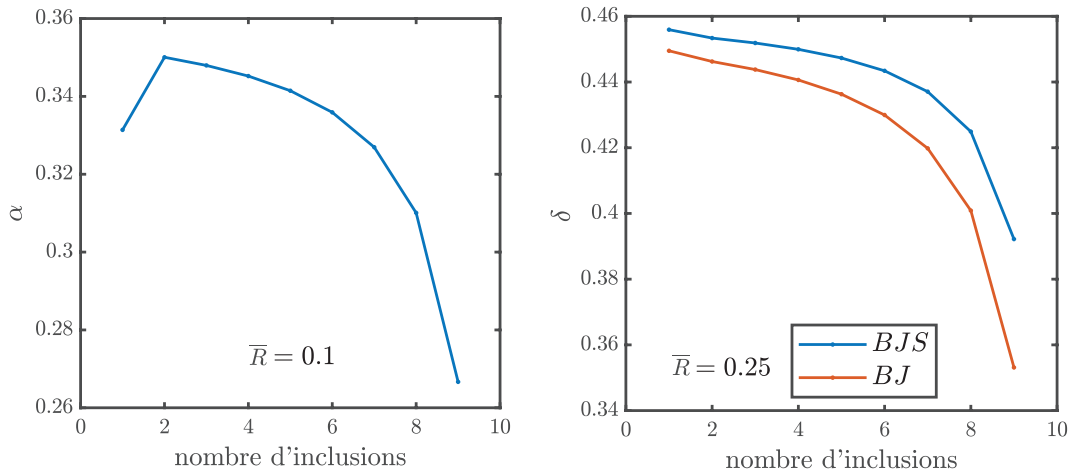


FIGURE 4.10 – Variations des coefficients α et δ avec le nombre d'inclusions n_{inc} .

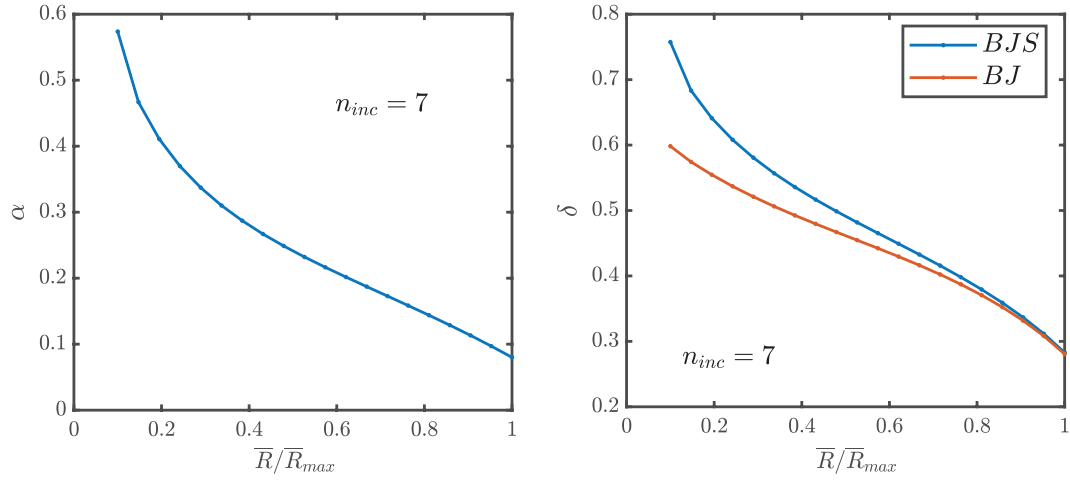


FIGURE 4.11 – Variations des coefficients α et δ avec le rayon des inclusions.

On représente sur la figure 4.12 la valeur de la perméabilité macroscopique en fonction de la taille des inclusions pour une couche constituée de 7 inclusions. Quatre valeurs de la perméabilité macroscopique sont représentées sur cette figure. La perméabilité obtenue par le calcul direct (solution numérique obtenue par TFR) et les solutions obtenues avec les formules analytiques (4.35), (4.45), (4.49) pour lesquelles les coefficients α et δ ont été identifiés avec la valeur maximale de la vitesse. On observe une assez bonne concordance entre la solution obtenue par TFR avec le modèle de Brinkman. Les résultats obtenus avec les modèles de BJ et BJS conduisent à des valeurs plus éloignées de la solution exacte (obtenue par TFR).

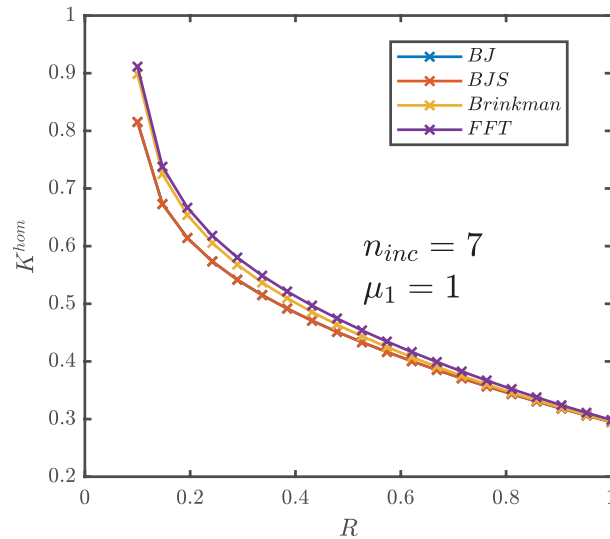


FIGURE 4.12 – Variations des coefficients α et δ avec le nombre d'inclusions.

Manifestement, les expressions choisies pour μ_e et λ (cf. Eq. (4.51)) ne permettent pas d'identifier des paramètres α et δ qui soient indépendants des paramètres microstructuraux. Nous allons donc rechercher d'autres expressions plus en accord avec les résultats de nos simulations numériques. Rappelons que les paramètres microstructuraux sont : le nombre d'inclusion n_{inc} et le rayon des inclusions $\bar{R}$. Nous allons plutôt utiliser les grandeurs suivantes :

$$\bar{l} = \frac{l}{2a}, \quad \bar{k} = \frac{k}{l^2} \quad (4.52)$$

$\bar{k}$ est la perméabilité relative qui est une fonction de $\bar{R}$. $\bar{l}$ est obtenu en divisant la taille des cellules du réseau de micropores par la hauteur de la couche de Stokes. Puisque $2a = L - n_{inc}l$ avec $L = 10l$, il vient alors $\bar{l} = 1/(10 - n_{inc})$. On choisit pour les expressions de λ et μ_e :

$$\lambda = \frac{\mu}{l} F(\bar{l}, \bar{k}), \quad \mu_e = \mu G(\bar{l}, \bar{k}) \quad (4.53)$$

Sur les figures 4.13, 4.14 et 4.15 on représente les valeurs des coefficients λ et μ_e en fonction de la perméabilité relative $\bar{k}$ pour diverses valeurs du nombre d'inclusions.

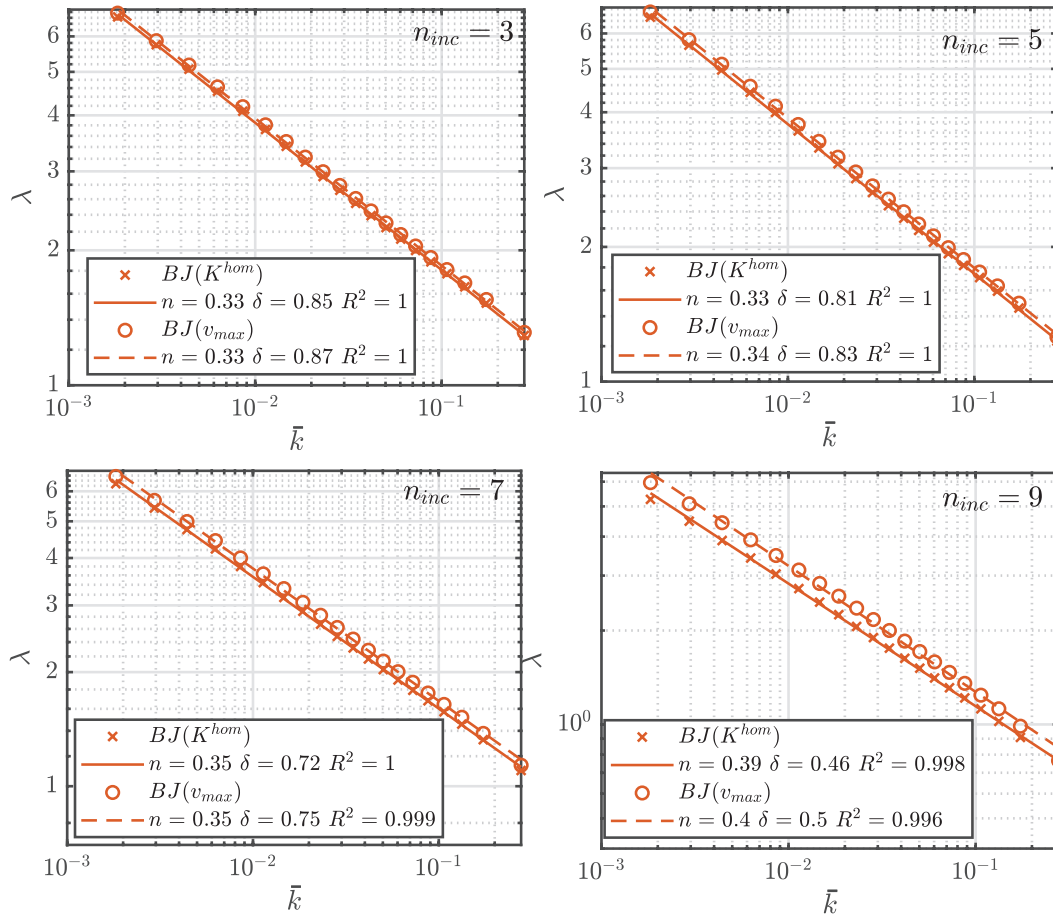


FIGURE 4.13 – Variations du coefficient λ avec la perméabilité relative $\bar{k}$ pour le modèle d'interface BJ.

Sur ces figures, on a choisi d'évaluer les valeurs de ces coefficients par identification soit avec la vitesse maximale, soit avec la perméabilité macroscopique. Les représentations graphiques sont effectuées en utilisant une échelle logarithmique. On observe que la dépendance des coefficients avec $\bar{k}$ est quasiment linéaire. Une régression linéaire a été réalisée pour chaque courbe. La dépendance linéaire suggère que les coefficients μ_e et λ ont plutôt la forme suivante :

$$\mu_e = \mu \alpha(\bar{l}) \bar{k}^{n(\bar{l})}, \quad \lambda = \frac{\mu}{l} \frac{\delta(\bar{l})}{\bar{k}^{n(\bar{l})}} \quad (4.54)$$

où $\alpha(\bar{l})$, $\delta(\bar{l})$ et l'exposant $n(\bar{l})$ sont des fonctions du paramètre adimensionné $\bar{l}$. Ainsi, pour chaque nombre d'inclusions, on a identifié les valeurs des coefficients $\alpha(\bar{l})$, $\delta(\bar{l})$ et $n(\bar{l})$ par regression linéaire. Les valeurs obtenues sont données sur les graphiques.

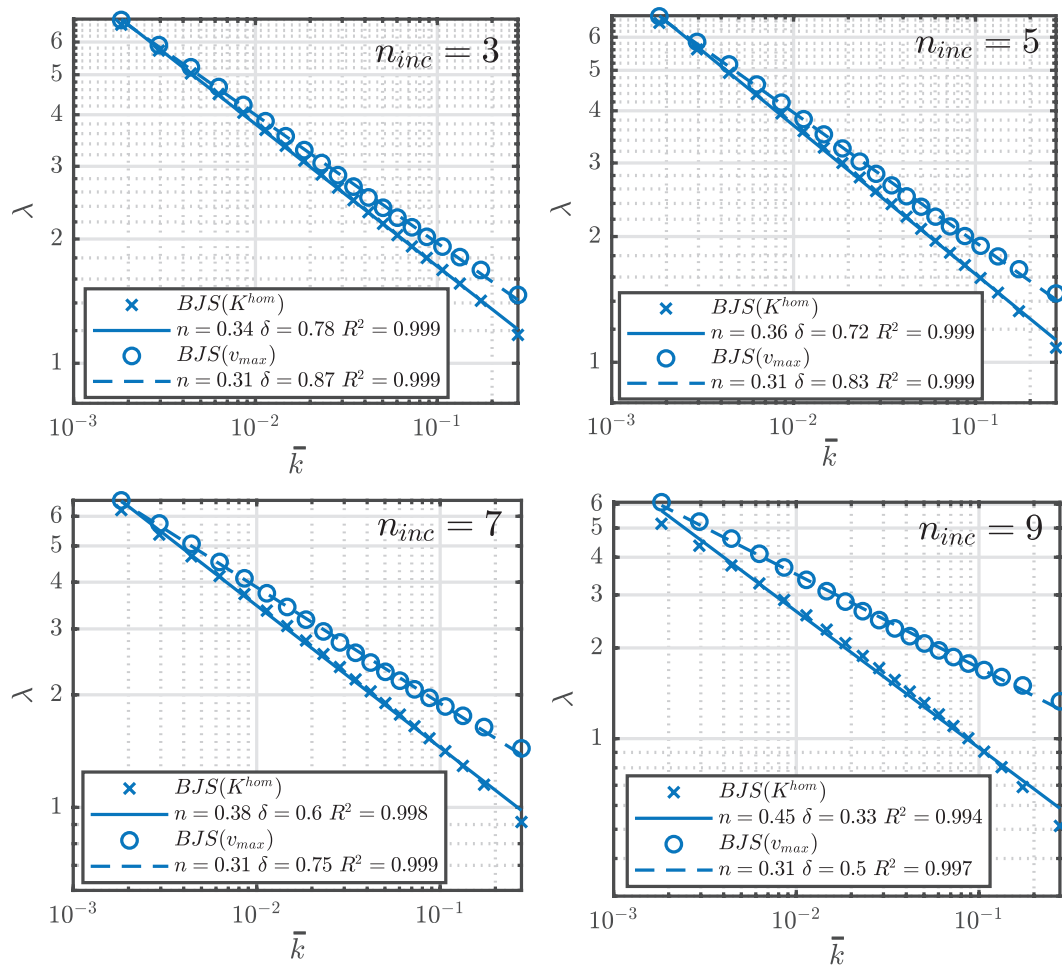


FIGURE 4.14 – Variations du coefficient λ avec la perméabilité relative $\bar{k}$ pour le modèle d'interface BJS.

On peut observer que l'identification avec le modèle BJS conduit à des courbes et donc des coefficients δ et n différents selon que l'on effectue l'identification avec la

vitesse maximale ou la perméabilité macroscopique. Avec le modèle BJ, les différences sont peu notables, sauf pour la configuration avec 9 inclusions. Toutefois, les valeurs de n et δ obtenues avec 3,5,7 ou 9 inclusions diffèrent notablement avec le modèle BJS.

Les résultats obtenus avec le modèle de Brinkman (cf. figure 4.15) conduisent à une valeur de l'exposant n quasiment indépendant du nombre d'inclusions et donc du paramètre $\bar{l}$. L'exposant arrondi à deux chiffres significatifs est $n = 0.38$ pour toutes les valeurs du nombre d'inclusions.

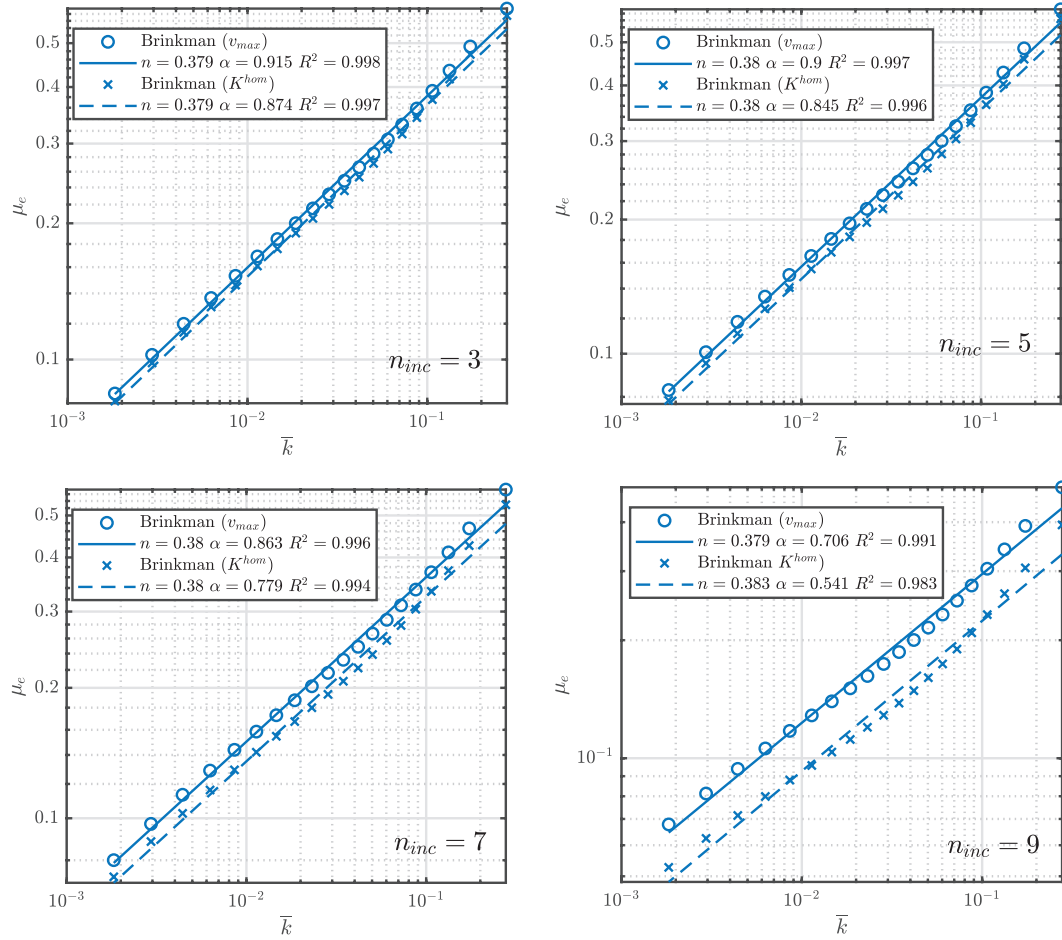


FIGURE 4.15 – Variations du coefficient μ_e avec la perméabilité relative $\bar{k}$ pour le modèle de Brinkman.

4.4 Milieu microporeux anisotrope

4.4.1 Solution analytique avec le modèle de Brinkman

On reprend l'exemple de la figure 4.3. L'écoulement reste décrit par l'équation de Stokes et dans la phase microporeuse on considère l'équation de Brinkman anisotrope. On se propose ici de donner la solution analytique à ce problème lorsque l'écoulement est généré par un gradient de pression dans la direction x_1 .

La composante v_2 n'est plus égale à zéro du fait de l'anisotropie de la matrice poreuse.

4.4.1.1 Solution dans le domaine de Stokes

Dans le domaine de Stokes, le champ de vitesse v_1^f a toujours la même expression générale calculée pour le cas isotrope :

$$v_1^f = \frac{J_1}{2\mu}(x_2^2 - a^2) + A_1 \quad (4.55)$$

La vitesse v_2^f est non nulle, elle est néanmoins constante et on pose :

$$v_2^f = A_2 \quad (4.56)$$

De même la pression est constante :

$$p^f = A_3 \quad (4.57)$$

Puisque la pression est définie à une constante près, nous posons $A_3 = 0$. La contrainte σ_{22}^f vaut :

$$\sigma_{22}^f = 2\mu v_{2,2}^f(x_2) = 0 \quad (4.58)$$

La contrainte $\sigma_{12}^f(x_2)$ vaut :

$$\sigma_{12}^f = \mu v_{1,2}^f(x_2) = J_1 x_2 \quad (4.59)$$

4.4.1.2 Solution dans le domaine de Brinkman

Pour un milieu microporeux anisotrope l'équation de Brinkman a pour forme générale :

$$\text{div}(\mathbf{s}(\mathbf{x})) - \mu \mathbf{k}^{-1} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) - \nabla p(\mathbf{x}) = \mathbf{J} \quad (4.60)$$

Dans cette équation, on a remplacé la perméabilité scalaire k par le tenseur d'ordre deux $\mathbf{k}$. Le tenseur d'ordre deux $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ est le déviateur des contraintes qui est défini par :

$$\mathbf{s}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + p(\mathbf{x})\mathbf{I} \quad (4.61)$$

où $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ est le tenseur des contraintes. La relation entre le déviateur des contraintes et le tenseur du taux des déformations $\mathbf{d}(\mathbf{x})$ fait intervenir un tenseur d'ordre quatre que l'on note $\mathbb{C}$:

$$\mathbf{s}(\mathbf{x}) = \mathbb{C} : \mathbf{d}(\mathbf{x}) \quad (4.62)$$

Le tenseur d'ordre quatre $\mathbb{C}$ relie deux tenseurs de nature déviatorique. Il doit donc satisfaire aux relations suivantes :

$$\mathbb{C} : \mathbb{J} = \mathbb{J} : \mathbb{C} = 0, \quad \mathbb{C} : \mathbb{K} = \mathbb{K} : \mathbb{C} = \mathbb{C} \quad (4.63)$$

où $\mathbb{J}$ et $\mathbb{K}$ sont les projecteurs d'ordre quatre définis par :

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3}\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}, \quad \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J} \quad (4.64)$$

et $\mathbb{I}$ est le tenseur identité d'ordre quatre.

Nous allons utiliser la notations matricielle de Kelvin pour les tenseurs d'ordre deux. On considère les notations suivantes pour le tenseur des taux de déformation :

$$d_1 = d_{11}, \quad d_2 = d_{22}, \quad d_3 = d_{33}, \quad d_4 = \sqrt{2}d_{23}, \quad d_5 = \sqrt{2}d_{13}, \quad d_6 = \sqrt{2}d_{12} \quad (4.65)$$

On fait de même avec le déviateur des contraintes. La relation liant le déviateur des contraintes au taux de déformation peut alors s'écrire sous la forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ s_4 \\ s_5 \\ s_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ d_5 \\ d_6 \end{pmatrix} \quad (4.66)$$

La condition (4.63) se traduit par :

$$C_{11} + C_{12} + C_{13} = 0 \quad (4.67)$$

$$C_{12} + C_{22} + C_{23} = 0 \quad (4.68)$$

$$C_{13} + C_{23} + C_{33} = 0 \quad (4.69)$$

$$C_{14} + C_{24} + C_{34} = 0 \quad (4.70)$$

$$C_{15} + C_{25} + C_{35} = 0 \quad (4.71)$$

$$C_{16} + C_{26} + C_{36} = 0 \quad (4.72)$$

$$(4.73)$$

Le tenseur d'ordre quatre est donc défini par $21 - 6 = 15$ coefficients indépendants sous sa forme la plus générale, c'est à dire en l'absence de toute symétrie matérielle.

Revenons au problème du milieu à deux couches. Les composantes du taux de déformation ont pour expressions :

$$d_1 = 0, \quad d_2 = v_{2,2}(x_2), \quad d_3 = 0, \quad d_4 = 0, \quad d_5 = 0, \quad d_6 = \frac{1}{\sqrt{2}}v_{1,2}(x_2) \quad (4.74)$$

Il vient alors pour les composantes du déviateur des contraintes :

$$s_1 = C_{12}v_{2,2}(x_2) + \frac{C_{16}}{\sqrt{2}}v_{1,2}(x_2) \quad (4.75)$$

$$s_2 = C_{22}v_{2,2}(x_2) + \frac{C_{26}}{\sqrt{2}}v_{1,2}(x_2) \quad (4.76)$$

$$s_3 = C_{23}v_{2,2}(x_2) + \frac{C_{36}}{\sqrt{2}}v_{1,2}(x_2) \quad (4.77)$$

$$s_4 = C_{24}v_{2,2}(x_2) + \frac{C_{46}}{\sqrt{2}}v_{1,2}(x_2) \quad (4.78)$$

$$s_5 = C_{25}v_{2,2}(x_2) + \frac{C_{56}}{\sqrt{2}}v_{1,2}(x_2) \quad (4.79)$$

$$s_6 = C_{26}v_{2,2}(x_2) + \frac{C_{66}}{\sqrt{2}}v_{1,2}(x_2) \quad (4.80)$$

Par ailleurs, la condition d'incompressibilité $\text{div}(\mathbf{v}) = 0$ se traduit par $v_{2,2}(x_2) = 0$. Il résulte que v_2 est égal à une constante dans la phase microporeuse, on pose alors :

$$\begin{aligned} v_2^s &= B_1 & x_2 &\in [-b, -a[\\ v_2^s &= C_1 & x_2 &\in]a, b] \end{aligned} \quad (4.81)$$

où B_1 et C_1 sont des constantes. La périodicité impose que $B_1 = C_1$. L'équation de Brinkman s'écrit :

$$-\mu h_{11}v_1^s(x_2) - \mu h_{12}B_1 + \frac{C_{66}}{2}v_{1,22}^s(x_2) = J_1 \quad (4.82)$$

$$-\mu h_{12}v_1^s(x_2) - \mu h_{22}B_1 + \frac{C_{26}}{\sqrt{2}}v_{1,22}^s(x_2) - p_{,2}^s(x_2) = 0 \quad (4.83)$$

où l'on a noté h_{ij} les composantes du tenseur $\mathbf{h} = \mathbf{k}^{-1}$.

La solution de l'équation (4.82) s'écrit :

$$\begin{aligned} v_1^s(x_2) &= -\frac{J_1}{\mu h_{11}} - \frac{h_{12}}{h_{11}}B_1 + B_2 \exp(\omega x_2) + B_3 \exp(-\omega x_2) & x_2 &\in [-b, -a[\\ v_1^s(x_2) &= -\frac{J_1}{\mu h_{11}} - \frac{h_{12}}{h_{11}}B_1 + C_2 \exp(\omega x_2) + C_3 \exp(-\omega x_2) & x_2 &\in]a, b] \end{aligned} \quad (4.84)$$

avec :

$$\omega = \sqrt{\frac{2\mu h_{11}}{C_{66}}} \quad (4.85)$$

Comme pour le cas isotrope, la solution pour v_1^s doit être une fonction paire de la coordonnée x_2 . Il vient donc $B_2 = C_3$ et $B_3 = C_2$. La périodicité de v_1^s est alors automatiquement vérifiée. Considérons la condition d'antipériodicité du vecteur contrainte. Elle implique, en particulier, que la composante σ_{12}^s prend des valeurs identiques sur les bords opposés de la cellule. La contrainte σ_{12}^s étant égale à s_{12}^s et donc $s_6^s\sqrt{2}$, la composante s_6^s doit donc prendre des valeurs identiques sur

les bords opposés de la cellule élémentaire. La composante s_6^s est donnée par l'équation (4.80) dans laquelle on rappelle que $v_{2,2}^s(x_2)$ est nulle puisque v_2^s est égale à une constante. Tous calculs faits, on aboutit aux expressions suivantes pour la composante $\sigma_{12}^s(x_2)$:

$$\begin{aligned}\sigma_{12}^s(x_2) &= \frac{\omega C_{66}}{2} [B_2 \exp(\omega x_2) - C_2 \exp(-\omega x_2)] \quad x_2 \in [-b, -a[\\ \sigma_{12}^s(x_2) &= \frac{\omega C_{66}}{2} [C_2 \exp(\omega x_2) - B_2 \exp(-\omega x_2)] \quad x_2 \in]a, b]\end{aligned}\quad (4.86)$$

$\sigma_{12}^s(x_2)$ doit prendre les mêmes valeurs en $x_2 = \pm b$. Cette vérification est tout à fait analogue à celle effectuée dans le cas isotrope et on peut poser :

$$C_2 = \frac{1}{2} C' \exp(-\omega b); \quad B_2 = \frac{1}{2} C' \exp(\omega b) \quad (4.87)$$

où C' est une constante.

Si bien que $\sigma_{12}^s(x_2)$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\sigma_{12}^s(x_2) &= \frac{\omega C_{66}}{2} C' \sinh(\omega(x_2 + b)) \quad x_2 \in [-b, -a[\\ \sigma_{12}^s(x_2) &= \frac{\omega C_{66}}{2} C' \sinh(\omega(x_2 - b)) \quad x_2 \in]a, b]\end{aligned}\quad (4.88)$$

Tandis que $v_1(x_2)$ a pour expression :

$$\begin{aligned}v_1^s(x_2) &= -\frac{J_1}{\mu h_{11}} - \frac{h_{12}}{h_{11}} B_1 + C' \cosh(\omega(x_2 + b)) \quad x_2 \in [-b, -a[\\ v_1^s(x_2) &= -\frac{J_1}{\mu h_{11}} - \frac{h_{12}}{h_{11}} B_1 + C' \cosh(\omega(x_2 - b)) \quad x_2 \in]a, b]\end{aligned}\quad (4.89)$$

Le champ de pression p^s qui est solution de l'équation (4.83) s'écrit :

$$\begin{aligned}p^s(x_2) &= \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] x_2 \\ &\quad + \left(\frac{\omega C_{26}}{\sqrt{2}} - \frac{\mu h_{12}}{\omega} \right) C' \sinh(\omega(x_2 + b)) + B_4 \quad x_2 \in [-b, -a[\\ p^s(x_2) &= \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] x_2 \\ &\quad + \left(\frac{\omega C_{26}}{\sqrt{2}} - \frac{\mu h_{12}}{\omega} \right) C' \sinh(\omega(x_2 - b)) + C_4 \quad x_2 \in]a, b]\end{aligned}\quad (4.90)$$

Il reste maintenant à vérifier que la contrainte σ_{22}^s prend des valeurs identiques sur les bords opposés de la cellule élémentaire. Cette composante a pour expression :

$$\sigma_{22}^s(x_2) = s_2^s(x_2) - p^s(x_2) \quad (4.91)$$

où $s_2^s(x_2)$ est donné par l'équation (4.76). On obtient alors :

$$\begin{aligned}
\sigma_{22}^s(x_2) = & - \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] x_2 & x_2 \in [-b, -a[\\
& + \frac{\mu h_{12}}{\omega} C' \sinh(\omega(x_2 + b)) - B_4 \\
\sigma_{22}^s(x_2) = & - \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] x_2 & x_2 \in]a, b] \\
& + \frac{\mu h_{12}}{\omega} C' \sinh(\omega(x_2 - b)) - C_4
\end{aligned} \tag{4.92}$$

La condition $\sigma_{22}^s(-b) = \sigma_{22}^s(b)$ donne :

$$C_4 = B_4 - 2b \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] \tag{4.93}$$

On pose :

$$\begin{aligned}
B_4 &= b \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] - C'' \\
C_4 &= -b \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] - C''
\end{aligned} \tag{4.94}$$

Il vient donc pour la contrainte $\sigma_{22}^s(x_2)$:

$$\begin{aligned}
\sigma_{22}^s(x_2) = & - \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] (x_2 + b) & x_2 \in [-b, -a[\\
& + \frac{\mu h_{12}}{\omega} C' \sinh(\omega(x_2 + b)) + C'' \\
\sigma_{22}^s(x_2) = & - \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] (x_2 - b) & x_2 \in]a, b] \\
& + \frac{\mu h_{12}}{\omega} C' \sinh(\omega(x_2 - b)) + C''
\end{aligned} \tag{4.95}$$

4.4.1.3 Vérification des conditions de continuité aux interfaces

Rappelons qu'aux interfaces en $x_2 = \pm a$ nous devons assurer la continuité du champ de vitesse et du vecteur contrainte. Faisons un rapide bilan des inconnues qui restent à déterminer : A_1 et A_2 pour le champ dans la région de Stokes, B_1 , C' et C'' dans la région de Brinkman. La continuité du champ de vitesse v_1 donne :

$$A_1 = -\frac{J_1}{\mu h_{11}} - \frac{h_{12}}{h_{11}} B_1 + C' \cosh(\omega(b - a)) \tag{4.96}$$

La continuité de la composante v_2 donne :

$$A_2 = B_1 \tag{4.97}$$

La continuité de σ_{12} conduit à :

$$C' = -\frac{2J_1 a}{\omega C_{66} \sinh(\omega(b-a))} \quad (4.98)$$

Il reste maintenant à vérifier la continuité de la composante σ_{22} . Cette contrainte étant nulle dans le domaine de Stokes, on doit vérifier que σ_{22}^s est nulle en $x_2 = \pm a$. Les expressions des constantes B_1 et C''' sont :

$$B_1 = \frac{h_{12} J_1}{\mu (h_{11} h_{22} - h_{12}^2)} \frac{b}{b-a}, \quad C''' = 0 \quad (4.99)$$

La constante A_1 a alors pour expression :

$$A_1 = -\frac{J_1}{\mu h_{11}} \frac{h_{11} h_{22} (b-a) + h_{12}^2 a}{(h_{11} h_{22} - h_{12}^2)(b-a)} - \frac{2J_1 a}{\omega C_{66}} \coth(\omega(b-a)) \quad (4.100)$$

4.4.1.4 Synthèse des résultats

En résumé, on donne ci-dessous la solution générale du problème :

Dans Stokes : $v_1^f(x_2) = \frac{J_1}{2\mu}(x_2^2 - a^2) - \frac{J_1}{\mu h_{11}} \left[1 + \frac{h_{12}^2}{h_{11} h_{22} - h_{12}^2} \frac{b}{b-a} \right] - \frac{2J_1 a}{\omega C_{66}} \coth(\omega(b-a)),$ $v_2^f(x_2) = -\frac{h_{12} J_1}{\mu (h_{11} h_{22} - h_{12}^2)}$ $p^f(x_2) = 0, \quad \sigma_{22}^f = 0, \quad \sigma_{12}^f = J_1 x_2$ Dans Brinkman : $v_1^s(x_2) = -\frac{J_1}{\mu h_{11}} \left[1 + \frac{h_{12}^2}{h_{11} h_{22} - h_{12}^2} \frac{b}{b-a} \right] - \frac{2J_1 a \cosh(\omega(x_2 + b))}{\omega C_{66} \sinh(\omega(b-a))} \quad x_2 \in [-b, -a[$ $v_1^s(x_2) = -\frac{J_1}{\mu h_{11}} \left[1 + \frac{h_{12}^2}{h_{11} h_{22} - h_{12}^2} \frac{b}{b-a} \right] - \frac{2J_1 a \cosh(\omega(x_2 - b))}{\omega C_{66} \sinh(\omega(b-a))} \quad x_2 \in]a, b]$ $v_2^s(x_2) = -\frac{h_{12} J_1}{\mu (h_{11} h_{22} - h_{12}^2)}$ $\sigma_{12}^s(x_2) = -\frac{J_1 a \sinh(\omega(x_2 + b))}{\sinh(\omega(b-a))} \quad x_2 \in [-b, -a[$ $\sigma_{12}^s(x_2) = -\frac{J_1 a \sinh(\omega(x_2 - b))}{\sinh(\omega(b-a))} \quad x_2 \in]a, b]$ $\sigma_{22}^s(x_2) = \frac{h_{22} a J_1}{h_{11}} \left[\frac{x_2 + b}{b-a} - \frac{\sinh(\omega(x_2 + b))}{\sinh(\omega(b-a))} \right] \quad x_2 \in [-b, -a[$ $\sigma_{22}^s(x_2) = \frac{h_{22} a J_1}{h_{11}} \left[\frac{x_2 - b}{b-a} - \frac{\sinh(\omega(x_2 - b))}{\sinh(\omega(b-a))} \right] \quad x_2 \in]a, b]$	
--	--

(4.101)

La vitesse maximale (en $x_2 = 0$) s'écrit :

$$v_{max} = -\frac{J_1 a^2}{2\mu} - \frac{J_1}{\mu h_{11}} \left[1 + \frac{h_{12}^2}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} \frac{b}{b-a} \right] - \frac{2J_1 a}{\omega C_{66}} \coth(\omega(b-a)) \quad (4.102)$$

En effectuant les opérations de moyennes sur le champ de vitesse, on peut déduire la perméabilité K_{11}^{hom} et K_{12}^{hom} . Il s'agit d'un calcul analogue à celui déjà réalisé dans le cas isotrope dont on ne donne pas le détail ici. Les expressions obtenues sont données ci-dessous :

$$\begin{aligned} K_{11}^{hom} &= \frac{1}{h_{11}} \left[\frac{a+b}{b} + \frac{h_{12}^2}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} \frac{b}{b-a} \right] + \frac{a^3}{3b} + \frac{\omega a^2}{h_{11}b} \coth(\omega(b-a)) \\ K_{12}^{hom} &= \frac{h_{12}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} = k_{12} \end{aligned} \quad (4.103)$$

On peut d'abord noter que la perméabilité homogénéisée K_{12}^{hom} est égale à la perméabilité de la matrice microporeuse, k_{12} . Evidemment lorsque l'on pose $h_{11} = h_{22} = 1/k$ et $h_{12} = 0$ dans l'expression de K_{11}^{hom} on retrouve le résultat déjà obtenu pour le cas isotrope. Il est également à noter que la solution du problème fait intervenir uniquement le coefficient C_{66} parmi l'ensemble des coefficients du tenseur de viscosité $\mathbb{C}$.

Revenons sur le premier exemple traité dans ce chapitre, correspondant à l'arrangement de cellules avec des inclusions circulaires et que l'on a étudié avec le modèle de Brinkman isotrope. Pour un arrangement tétragonal de cylindres, la perméabilité microscopique $\mathbf{k}$ est effectivement isotrope. Mais le tenseur $\mathbb{C}$ n'est pas anisotrope. Il possède des symétries : l'invariance par réflexion par rapport aux trois plans de l'espace Ox_1x_2 , Ox_2x_3 et Ox_1x_3 ainsi que l'invariance par rotation d'un angle $\pi/2$ autour de l'axe Ox_3 . Un tel tenseur a pour représentation matricielle (cf. Walpole 1981) :

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \quad (4.104)$$

Toutefois comme seul le coefficient C_{66} intervient dans la solution du problème bicouches, la solution est identique à la solution obtenue avec le modèle isotrope en posant $C_{66} = 2\mu_e$ ce qui justifie les calculs réalisés dans cette partie.

Pour étudier les effets d'anisotropie, il convient donc de considérer une micro-structure pour laquelle le tenseur $\mathbf{k}$ est anisotrope. Un tel exemple est étudié dans la suite de ce travail. Avant cela, nous allons d'abord établir la solution du problème avec le modèle BJ.

4.4.2 Solutions avec les modèles BJ et BJS

On détermine ici la solution pour un milieu anisotrope avec le modèle d'interface de Beavers-Joseph. La cellule étudiée est celle donnée par la figure 4.5. Dans

le domaine de Stokes, la solution a toujours la forme générale donnée dans la section (4.4.1.1) dans laquelle nous allons devoir calculer les nouvelles expressions des constantes A_1 et A_2 . Dans le domaine de Darcy, la solution est obtenue en résolvant les équations de Darcy pour un milieu anisotrope :

$$-\mu h_{11} v_1^s(x_2) - \mu h_{12} v_2^s(x_2) = J_1 \quad (4.105)$$

$$-\mu h_{12} v_1^s(x_2) - \mu h_{22} v_2^s(x_2) - p_2^s(x_2) = 0 \quad (4.106)$$

De la condition d'incompressibilité $\text{div}(\mathbf{v}^s(x_2)) = 0$ et de la condition de périodicité, on déduit que $v_2^s(x_2)$ est constante :

$$\begin{aligned} v_2^s(x_2) &= B_1 & x_2 &\in [-b, -a[\\ v_2^s(x_2) &= B_1 & x_2 &\in]a, b] \end{aligned} \quad (4.107)$$

En reportant ce résultat dans les équations (4.105) et (4.106), on déduit les expressions de v_1^s :

$$\begin{aligned} v_1^s(x_2) &= -\frac{J_1}{\mu h_{11}} - \frac{h_{12}}{h_{11}} B_1, & x_2 &\in [-b, -a[\\ v_1^s(x_2) &= -\frac{J_1}{\mu h_{11}} - \frac{h_{12}}{h_{11}} B_1, & x_2 &\in]a, b] \end{aligned} \quad (4.108)$$

puis de p^s (en vérifiant la périodicité de p^s) :

$$\begin{aligned} p^s(x_2) &= \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] (x_2 + b) + B_2 & x_2 &\in [-b, -a[\\ p^s(x_2) &= \left[\frac{h_{12}}{h_{11}} J_1 - \mu \left(h_{22} - \frac{h_{12}^2}{h_{11}} \right) B_1 \right] (x_2 - b) + B_2 & x_2 &\in]a, b] \end{aligned} \quad (4.109)$$

Il reste à calculer les constantes A_1 , A_2 (dans le domaine de Stokes) et les constantes B_1 et B_2 (pour le domaine de Darcy) en utilisant les conditions de BJ aux deux interfaces en $x_2 = \pm a$. Lorsqu'un milieu de Stokes est en contact avec un milieu poreux anisotrope, la condition de BJ reste inchangée. La première condition est la continuité de la vitesse normale, $v_2^s(\pm a) = v_2^f(\pm a)$, ce qui conduit à :

$$A_2 = B_1 \quad (4.110)$$

La seconde condition est le saut du champ de vitesse tangentiel v_1 (qui pour un milieu à deux couches est déjà explicitée par la formule (4.38)) qui donne :

$$J_1 a = \lambda \left[-\frac{J_1}{\mu h_{11}} - \frac{h_{12}}{h_{11}} B_1 - A_1 \right] \quad (4.111)$$

Et enfin, il reste à vérifier la continuité de la composante normale du vecteur contrainte. La contrainte σ_{22}^f est nulle dans la région de Stokes. Dans la région de Darcy cette contrainte est égale à $-p^s$, nous devons vérifier que la pression dans le domaine de Darcy est nulle en $x_2 = \pm a$. En fait, cela conduit à pression nulle partout dans la cellule et les valeurs de B_1 et B_2 sont :

$$B_1 = \frac{h_{12}}{\mu(h_{11}h_{22} - h_{12}^2)} J_1, \quad B_2 = 0 \quad (4.112)$$

Il résulte donc pour A_1 :

$$A_1 = -\frac{J_1}{\mu} \frac{h_{22}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} - \frac{J_1 a}{\lambda} \quad (4.113)$$

Pour résumer, on donne ci-dessous la solution :

Dans Stokes :

$$v_1^f(x_2) = \frac{J_1}{2\mu}(x_2^2 - a^2) - \frac{J_1}{\mu} \frac{h_{22}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} - \frac{J_1 a}{\lambda},$$

$$v_2^f(x_2) = \frac{J_1}{\mu} \frac{h_{12}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2}$$

$$p^f(x_2) = 0, \quad \sigma_{22}^f = 0, \quad \sigma_{12}^f = J_1 x_2$$

Dans Darcy :

$$v_1^s(x_2) = -\frac{J_1}{\mu} \frac{h_{22}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2}$$

$$v_2^s(x_2) = \frac{J_1}{\mu} \frac{h_{12}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2}$$

(4.114)

La vitesse maximale vaut :

$$v_{max} = -\frac{J_1 a^2}{2\mu} - \frac{J_1 k_{11}}{\mu} - \frac{J_1 a}{\lambda} \quad (4.115)$$

Les composantes de la perméabilité homogénéisée sont :

$$K_{11}^{hom} = \frac{h_{22}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} + \frac{a^3}{3b} + \frac{\mu a^2}{\lambda b} = k_{11} \frac{b-a}{b} + \frac{a^3}{3b} + \frac{\mu a^2}{\lambda b}$$

$$K_{12}^{hom} = \frac{h_{12}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} = k_{12}$$
(4.116)

Avec le modèle BJS alors on obtient pour la constante A_1 :

$$A_1 = -\frac{J_1 a}{\lambda} \quad (4.117)$$

La solution du problème avec le modèle BJS s'écrit donc :

Dans Stokes :

$$v_1^f(x_2) = \frac{J_1}{2\mu}(x_2^2 - a^2) - \frac{J_1 a}{\lambda},$$

$$v_2^f(x_2) = \frac{J_1}{\mu} \frac{h_{12}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2}$$

$$p^f(x_2) = 0, \quad \sigma_{22}^f = 0, \quad \sigma_{12}^f = J_1 x_2$$

Dans Darcy :

$$v_1^s(x_2) = -\frac{J_1}{\mu} \frac{h_{22}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2}$$

$$v_2^s(x_2) = \frac{J_1}{\mu} \frac{h_{12}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2}$$

(4.118)

La vitesse maximale vaut :

$$v_{max} = -\frac{J_1 a^2}{2\mu} - \frac{J_1 a}{\lambda} \quad (4.119)$$

Les composantes de la perméabilité homogénéisée sont :

$$\begin{aligned} K_{11}^{hom} &= \frac{h_{22}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} \frac{b-a}{b} + \frac{a^3}{3b} + \frac{\mu a^2}{\lambda b} = k_{11} \frac{b-a}{b} + \frac{a^3}{3b} + \frac{\mu a^2}{\lambda b} \\ K_{12}^{hom} &= \frac{h_{12}}{h_{11}h_{22} - h_{12}^2} = k_{12} \end{aligned} \quad (4.120)$$

4.4.3 Identification avec le calcul numérique direct

On considère un milieu bi-couches pour lequel les inclusions circulaires ont été remplacées par des inclusions rectangulaires. Les dimensions des côtés du rectangle sont $c = 0.8 \times l$ et $d = 0.1 \times l$. Le rectangle est orienté d'un angle θ par rapport à l'axe Ox_1 . On peut donc faire varier deux paramètres de la microstructure, l'angle θ et le nombre d'inclusions n_{inc} .

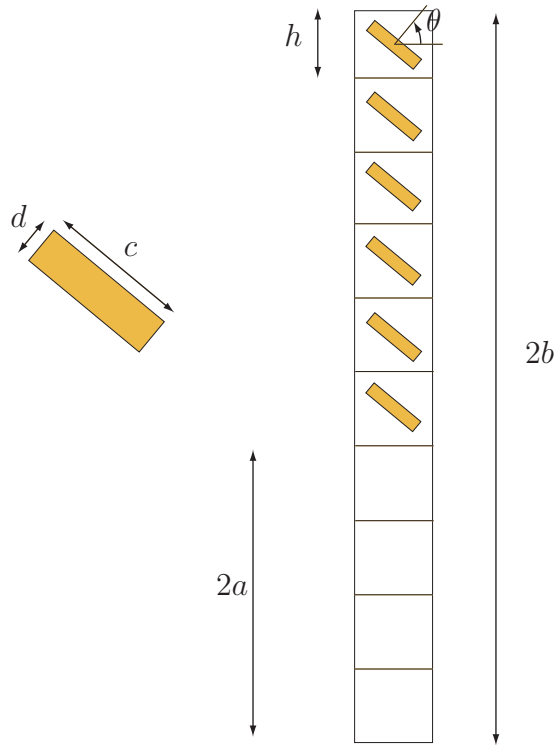


FIGURE 4.16 – Cellule élémentaire du milieu biporeux.

Les composantes du tenseur de perméabilité $\overline{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/l^2$ sont données sur la figure 4.17 en fonction de l'angle θ qui varie dans l'intervalle $[0, \pi/2]$.

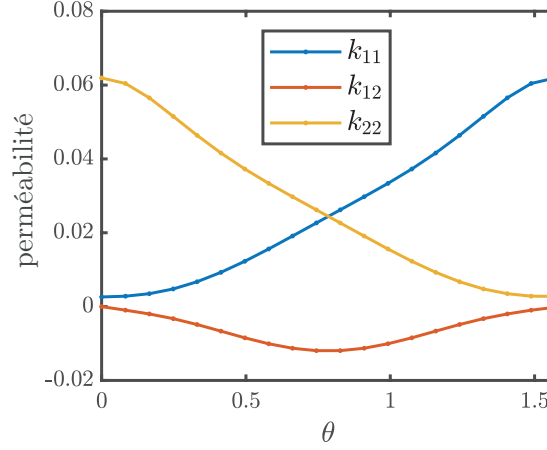


FIGURE 4.17 – Composantes du tenseur de perméabilité de la matrice microporeuse

On détermine ensuite les valeurs des coefficients λ et μ_e en suivant la même méthodologie que pour les inclusions circulaires, soit par identification avec la vitesse maximale v_{max} ou avec la perméabilité macroscopique K^{hom} . Les expressions de v_{max} et de K^{hom} sont données par les équations (4.102) et (4.103) pour le modèle de Brinkman, par les équations (4.115) et (4.116) pour le modèle de Beavers-Joseph (BJ) et enfin par les équations (4.119) et (4.120) pour le modèle de Beavers-Joseph-Saffman (BJS). Les résultats obtenus sont illustrés sur la 4.18 dans laquelle on fait varier l'angle θ des inclusions et pour une microstructure avec 7 inclusions.

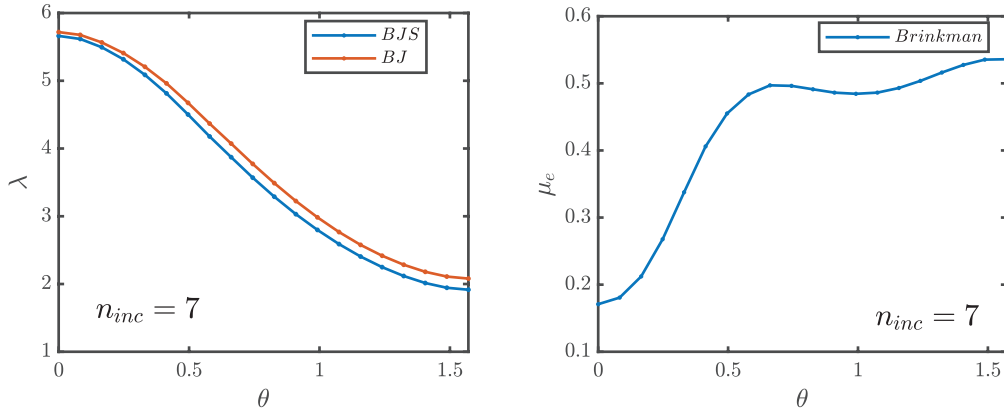


FIGURE 4.18 – Variation des coefficients λ et μ_e en fonction de l'angle

Dans le cas des inclusions circulaires, nous avons établi une dépendance avec une loi en puissance de la perméabilité relative $\bar{k}$. Comment peut-on traduire cette dépendance pour un milieu anisotrope ? Car ici nous disposons de trois composantes : $\bar{k}_{11}$, $\bar{k}_{22}$ et $\bar{k}_{12}$ dont les variations avec l'angle θ ont été illustrées

sur la figure 4.17. Lorsque le milieu est anisotrope, de nombreux auteurs suggèrent de choisir le coefficient λ sous la forme (voir par exemple Layton et al. [67]) :

$$\lambda = \frac{\mu\delta}{\sqrt{\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\nu}}} \quad (4.121)$$

où $\boldsymbol{\nu}$ est la normale unitaire à l'interface. Dans notre exemple $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{e}_2$ et le coefficient λ dépend uniquement de la composante k_{22} . Nous avons donc représenté les variations de λ avec la composante $\bar{k}_{22}$ sur la figure (4.19) (à gauche). Nous avons également représenté les variations de μ_e avec $\bar{k}_{22}$ sur la même figure à droite. Sur ces figures nous avons identifié les coefficients λ et μ_e en effectuant l'identification soit avec la perméabilité homogénéisée soit avec la vitesse maximale. Les résultats sont présentés avec une échelle logarithmique. Les résultats obtenus sont peu concluants puisque l'on ne retrouve pas la dépendance affine avec la perméabilité $\bar{k}_{22}$.

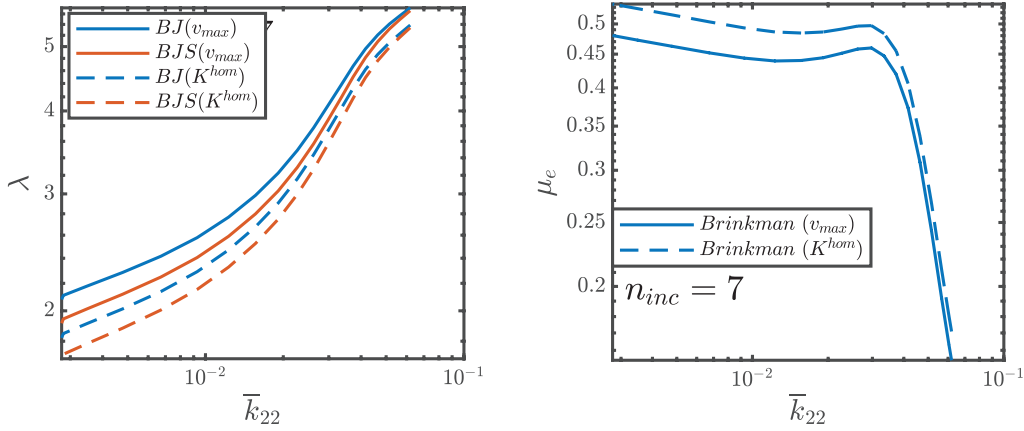


FIGURE 4.19 – Variations des coefficients λ et μ_e avec $\bar{k}_{22}$.

Sur la figure 4.20 on représente les variations des coefficients λ et μ_e avec le nombre d'inclusions en fixant l'orientation des inclusions à 45° . Comme pour l'exemple avec les inclusions circulaires, on a choisit d'utiliser le paramètre adimensionné $\bar{l} = l/(2a)$ qui est aussi égal à $1/(N - n_{inc})$ ou N est le nombre total de cellules égal à 10 dans notre exemple. Ici, on observe une dépendance affine avec ce paramètre.

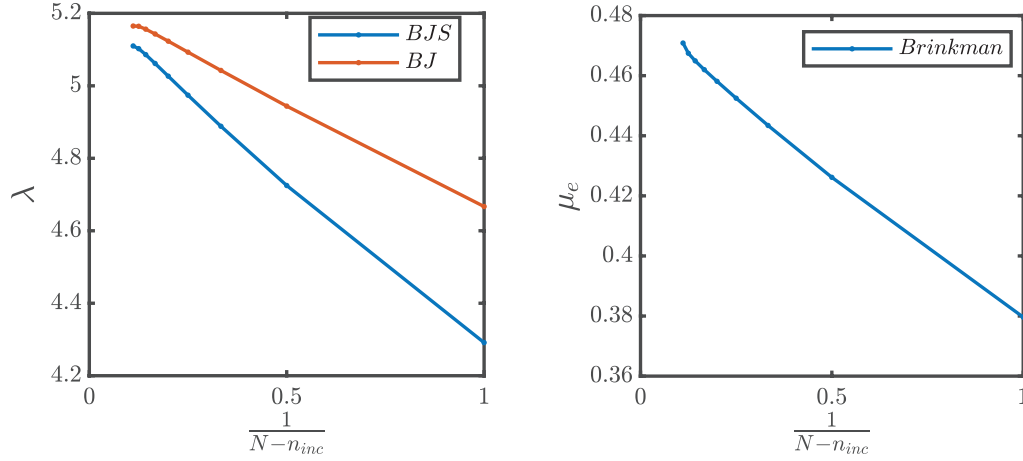


FIGURE 4.20 – Variations des coefficients λ et μ_e avec $\bar{l} = 1/(N - n_{inc})$ pour des inclusions rectangulaires orientées d'un angle de 45°

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons proposé une méthode d'identification des paramètres des modèles de Brinkman et de Beavers-Joseph pour la modélisation des propriétés de transport dans les milieux à deux échelles de porosité. Cette identification repose sur des comparaisons de solutions analytiques avec des simulations par TFR des écoulements dans des milieux organisés en couches et avec des distributions régulières d'inclusions de forme circulaire et rectangulaires. Nous avons établi dans ce chapitre, les solutions analytiques pour le milieu bicouches avec une matrice poreuse isotrope puis anisotropes.

Dans le cas de l'inclusion circulaire, nous avons montré que les paramètres peuvent s'exprimer au moyen d'une loi en puissance de la perméabilité microscopique (associée au réseau d'inclusion circulaires).

Dans un second exemple, nous avons étudié des écoulements avec des inclusions rectangulaires inclinées. Pour ce type de géométrie nous n'avons pu établir de loi simple avec les composantes de la perméabilité microscopique.

Conclusion générale

Ce travail a porté sur des contributions à l'homogénéisation numérique par Transformée de Fourier Rapide (TFR) des composites élastiques et conducteurs de la chaleur ainsi que les milieux à deux échelles de porosité.

Après un premier chapitre bibliographique, nous avons développé une méthode de calcul par TFR pour déterminer les propriétés de conductivité de composites avec discontinuité d'interface. Le modèle utilisé est celui de Kapitza [61] pour lequel la température subit une discontinuité à la traversée de l'interface dont l'intensité est proportionnelle au flux agissant sur l'interface. L'approche repose sur deux points essentiels : (i) la formulation des approches par TFR dans un cadre variationnel, (ii) l'utilisation de nouveaux champs de température discontinus (fonctions d'enrichissement). Le système linéaire associé au problème discrétisé est alors résolu avec la méthode de point fixe (méthode de Moulinec et Suquet [84]) ou la méthode du gradient conjugué. La convergence de ces schémas itératifs et la précision des résultats obtenus ont été soigneusement examinées en faisant varier les différents paramètres microstructuraux et le nombre de fonctions d'enrichissement. Les résultats ont clairement montré une meilleure convergence avec la méthode du gradient conjugué. Les résultats ont été validés avec des solutions obtenues par éléments finis.

Au troisième chapitre, nous avons étendu cette approche pour modéliser les effets d'interface dans les composites élastiques. Le modèle d'interface utilisé est le modèle ressort pour lequel le déplacement subit une discontinuité à la traversée de l'interface. La méthode a été mise en œuvre pour des composites renforcés par des fibres à section circulaire ou des inclusions sphériques. À nouveau, des comparaisons avec la méthode des éléments finis ont permis de valider nos résultats. Nous avons ensuite établi des modèles analytiques : Mori-Tanaka, cylindre et sphère composite avec conditions en déformation ou en contrainte homogène imposée sur le bord. Des comparaisons avec les solutions FFT ont permis de mettre en évidence la qualité des modèles analytiques établis.

Dans un dernier chapitre, nous avons étudié les effets de couche limite dans les milieux biporeux. L'écoulement est alors décrit par les équations de Stokes et on détermine la perméabilité homogénéisée en fonction de la géométrie des micropores et des macropores. Une approche par double changement d'échelle permet de remplacer le réseau de micropores par un milieu perméable équivalent. Deux types de modélisation peuvent alors être conduits pour le calcul de la perméabilité macroscopique. La première consiste à utiliser l'équation de Darcy dans la matrice poreuse et le modèle d'interface de Beavers-Joseph à la jonction avec les macropores. La seconde approche consiste à utiliser le modèle de Brinkman dans la matrice poreuse. L'objectif visé était d'identifier les paramètres des modèles de BJ et de Brinkman en effectuant des comparaisons avec la simulation des écou-

lements aux deux échelles simultanées. Les calculs ont été réalisés sur un milieu biporeux constitué de couches fluides et poreuses. Les couches poreuses sont elles mêmes constituées d'inclusions circulaires ou d'inclusions rectangulaires inclinées pour étudier les effets d'anisotropie. Il a été montré que les paramètres des modèles dépendent fortement de la microstructure. Pour des inclusions de forme circulaire, nous avons établi une relation avec la perméabilité microscopique sous la forme d'une loi puissance.

Les perspectives à ce travail sont multiples et je donne ici les pistes les plus pertinentes.

En tout premier lieu, et en ce qui concerne la modélisation des interfaces dans les composites élastiques ou conducteurs de la chaleur, on peut noter que les applications proposées sont restreintes à des microstructures avec des inclusions dont la géométrie reste simple : inclusions cylindriques, sphériques et inclusions rectangulaires. L'application à des microstructures plus complexes, telles que les polycristaux ou des microstructures obtenues par imagerie, reste un défi important.

L'extension à d'autres modèles d'interface est tout à fait envisageable, et en particulier, le modèle de Gurtin et Murdoch [48] qui est notamment utilisé pour décrire les effets de taille des inclusions dans les nanocomposites. Dans ce modèle le vecteur contrainte subit une discontinuité tandis que le déplacement reste continu. La modélisation des discontinuités d'interface du vecteur contrainte peut-être étudiée dans le cadre variationnel formulé avec la contrainte et des champs discontinus. Il serait également pertinent d'étendre la méthode en polarisation pour les composites avec discontinuité d'interface. Comme établi par Monchiet [77], le schéma en polarisation peut-être obtenu dans le cadre des approches variationnelles de Hashin-Shtrikman [56]. Par ailleurs, l'approche variationnelle de Hashin-Shtrikman a été étendue par Brisard et al. [25, 26] pour des composites avec interfaces imparfaites.

Concernant la modélisation des milieux biporeux avec l'équation de Brinkman, des travaux complémentaires devront être menés sur l'identification des paramètres de viscosité équivalente. Les résultats obtenus dans ce travail ont mis en évidence une dépendance du coefficient de Brinkman avec la perméabilité microscopique sous la forme d'une loi en puissance. Pour des structures anisotropes (réseau d'inclusions rectangulaires inclinées), la dépendance avec les paramètres microstructuraux est plus complexe. Des travaux complémentaires doivent être menés pour d'autres types microstructures. Notamment pour des macropores de forme circulaire.

Un autre volet d'investigation concerne l'identification des paramètres de modèles pour des situations où la microstructure est différente en surface et à cœur de la matrice microporeuse. Durant la conception des matériaux, la matrice peut présenter une porosité plus faible ou plus forte près de l'interface, ce type de situation a été observé expérimentalement par [73] pour des polymères biporeux. Sur le plan de la modélisation, on peut simuler ces modifications de microstructure en effectuant des calculs avec des inclusions plus petites ou plus grosses à la paroi qu'à cœur du matériau. Des travaux similaires ont par exemple été menés par Valdes-Parada et al. [112].

Enfin, on peut modéliser les effets de couche limite en milieux biporeux, en considérant une méthode de calcul par TFR couplant les équations de Darcy et Stokes avec le modèle d'interface de Beavers-Joseph [9]. Ceci peut-être effectué dans le

cadre de l'approche par enrichissement développée aux chapitres deux et trois de cette thèse.

Bibliographie

- [1] J.D. Achenbach and H. Zhu. Effect of interfacial zone on mechanical behavior and failure of fiber-reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 37(3) :381–393, 1989.
- [2] T. Arbogast and D.S. Brunson. A computational method for approximating a darcy-stokes system governing a vuggy porous medium. *Comput. Geosciences*, 11(3) :207–218, 2007.
- [3] L.E. Asp, L.A. Berglund, and R. Talreja. Effects of fiber and interphase on matrix-initiated transverse failure in polymer composites. *Composites Science and Technology*, 56(6) :657–665, 1996.
- [4] J.L. Auriault and C. Boutin. Deformable porous media with double porosity. quasi-statics. i : Coupling effects. *Transport in Porous Media*, 7 :63–82, 1992.
- [5] J.L. Auriault and C. Boutin. Deformable porous media with double porosity. quasi-statics. ii : Memory effects. *Transport in Porous Media*, 10 :153–169, 1993.
- [6] J.L. Auriault and C. Boutin. Deformable porous media with double porosity iii : Acoustics. *Transport in Porous Media*, 14 :143–162, 1994.
- [7] J.L. Auriault and E. Sanchez-Palencia. Etude du comportement macroscopique d’un milieu poreux saturé déformable. *Journal de Mécanique*, 16 :575–603, 1977.
- [8] S. Banerjee and G.I. Hadaller. Longitudinal laminar flow between cylinders arranged in a triangular array by a variational technique. *J. Appl. Mech.*, 40 :1136–1138, 1973.
- [9] G.S. Beavers and D.D. Joseph. Boundary conditions at a naturally permeable wall. *Journal of fluid mechanics*, 30(1) :197–207, 1967.
- [10] Y. Benveniste. The effective mechanical behaviour of composite materials with imperfect contact between the constituents. *Mechanics of Materials*, 4(2) :197–208, 1985.
- [11] Y. Benveniste. A general interface model for a three-dimensional curved thin anisotropic interphase between two anisotropic media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54(4) :708–734, 2006.

- [12] Y. Benveniste and T. Miloh. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity. *Mechanics of Materials*, 33(6) :309–323, 2001.
- [13] K. Bhattacharya and P. Suquet. A model problem concerning recoverable strains of shape-memory polycrystals. *Proc. Roy. Soc. London A.*, 461 :2797–281, 2005.
- [14] F. Bignonnet. Efficient fft-based upscaling of the permeability of porous media discretized on uniform grids with estimation of rve size. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 369 :113237, 2020.
- [15] F. Bignonnet and L. Dormieux. Fft-based bounds on the permeability of complex microstructures. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 38(16) :1707–1723, 2014.
- [16] N. Bilger, F. Auslender, M. Bornert, J.C. Michel, H. Moulinec, P. Suquet, and A. Zaoui. Effect of a nonuniform distribution of voids on the plastic response of voided materials : a computational and statistical analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 42(2) :517–538, 2005. *Micromechanics of Materials*.
- [17] N. Bilger, F. Auslender, M. Bornert, H. Moulinec, and A. Zaoui. Bounds and estimates for the effective yield surface of porous media with a uniform or a nonuniform distribution of voids. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 26(5) :810–836, 2007.
- [18] G. Bonnet. Effective properties of elastic periodic composite media with fibers. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(5) :881–899, 2007.
- [19] C. Boutin, P. Royer, and J.L. Auriault. Acoustic absorption of porous surfacing with dual porosity. *International Journal of Solids and Structures*, 35 :4709–4737, 1998.
- [20] R. Brenner. Numerical computation of the response of piezoelectric composites using fourier transform. *Phys. Rev. B*, 79 :184106, 2009.
- [21] R. Brenner and J. Bravo-Castillero. Response of multiferroic composites inferred from a fast-fourier-transform-based numerical scheme. *Smart materials and structures*, 19(11) :115004, 2010.
- [22] H.C. Brinkman. A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. *Flow, Turbulence and Combustion*, 1(1) :27, 1949.
- [23] H.C. Brinkman. On the permeability of media consisting of closely packed porous particles. *App. Sci. Res.*, 1 :81–86, 1949.
- [24] S. Brisard and L. Dormieux. Fft-based methods for the mechanics of composites : A general variational framework. *Comput. Mater. Science*, 49(3) :663–671, 2010.

- [25] S. Brisard, L. Dormieux, and D. Kondo. Hashin-shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, 48(3) :589–596, 2010.
- [26] S. Brisard, L. Dormieux, and D. Kondo. Hashin-shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, 50(2) :403–410, 2010.
- [27] W. Brown. Solid mixture permittivities. *J. Comput. Math.*, 23 :1514–1517, 1955.
- [28] D.G. Cahill, W.K. Ford, K.E. Goodson, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Merlin, and S.R. Phillpot. Nanoscale thermal transport. *J. Appl. Phys.*, 93 (2) :793–818, 2003.
- [29] P. Ponte Castaneda and P. Suquet. Nonlinear composites. volume 34, pages 171–302. Elsevier, 1997.
- [30] L.J. Challis. Kapitza resistance and acoustic transmission across boundaries at high frequencies. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 7(3) :481–495, 1974.
- [31] T. Chen, M.S. Chiu, and C.N. Weng. Derivation of the generalized young-laplace equation of curved interfaces in nanoscaled solids. *Journal of Applied Physics*, 100(7) :074308, 2006.
- [32] Y. Chen, L. Gélébart, A. Marano, and J. Marrow. Fft phase-field model combined with cohesive composite voxels for fracture of composite materials with interfaces. *Computational Mechanics*, pages 1–25, 2021.
- [33] M. Cherkaoui, H. Sabar, and M. Berveiller. Elastic composites with coated reinforcements : A micromechanical approach for nonhomothetic topology. *International Journal of Engineering Science*, 33(6) :829–843, 1995.
- [34] R.M. Christensen and K.H. Lo. Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 27(4) :315–330, 1979.
- [35] F. Dinzart and H. Sabar. New micromechanical modeling of the elastic behavior of composite materials with ellipsoidal reinforcements and imperfect interfaces. *International Journal of Solids and Structures*, 108 :254–262, 2017.
- [36] J.E. Drummond and M.I. Tahir. Laminar viscous flow through arrays of parallel solid cylinders. *Int. J. Multiphase Flow*, 10 :515–540, 1984.
- [37] H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, and B.L. Karihaloo. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(7) :1574–1596, 2005.
- [38] H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, and Z.Y. Luo. Stress concentration tensors of inhomogeneities with interface effects. *Mechanics of Materials*, 37(7) :723–736, 2005.

- [39] H. Dumontet. Boundary layers stresses in elastic composites. In *Studies in Applied Mechanics*, volume 12, pages 215–232. 1985.
- [40] H. Dumontet. Study of a boundary layer problem in elastic composite materials. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 20(2) :265–286, 1986.
- [41] M. Dunn and M. Taya. The effective thermal conductivity of composites with coated reinforcement and the application to imperfect interfaces. *Journal of applied physics*, 73(4) :1711–1722, 1993.
- [42] H.I. Ene and E. Sanchez-Palencia. Equations and surface phenomena for the flow in a porous medium. *J. Mécanique*, 14(1) :73–108, 1975.
- [43] Felix Ernesti, Matti Schneider, and Thomas Böhlke. Fast implicit solvers for phase-field fracture problems on heterogeneous microstructures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 363 :112793, 2020.
- [44] D.J Eyre and G.W. Milton. A fast numerical scheme for computing the response of composites using grid refinement. *J. Phys. III*, 6 :41–47, 1999.
- [45] S. Fliegner, T. Kennerknecht, and M. Kabel. Investigations into the damage mechanisms of glass fiber reinforced polypropylene based on micro specimens and precise models of their microstructure. *Composites Part B : Engineering*, 112 :327–343, 2017.
- [46] F. Golfier, D. Lasseux, and M. Quintard. Investigation of the effective permeability of vuggy or fractured porous media from a darcy-brinkman approach. *Comput. Geosciences*, 19 :63–78, 2015.
- [47] M. Griebel and M. Klitz. Homogenization and numerical simulation of flow in geometries with textile microstructures. *Multiscale Modeling & Simulation*, 8(4) :1439–1460, 2010.
- [48] M.E. Gurtin and A.I. Murdoch. A continuum theory of elastic material surfaces. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 57 :291–323, 1975.
- [49] L. Gélébart and R. Mondon-Cancel. Non-linear extension of fft-based methods accelerated by conjugate gradients to evaluate the mechanical behavior of composite materials. *Computational Materials Science*, 77 :430–439, 2013.
- [50] Z. Hashin. *Theory of fiber reinforced materials*. NASA CR1974, 1972.
- [51] Z. Hashin. Thermoelastic properties of fiber composites with imperfect interface. *Mechanics of Materials*, 8(4) :333–348, 1990.
- [52] Z. Hashin. The spherical inclusion with imperfect interface. *J. Appl. Mech.*, 58(2) :444–449, 1991.
- [53] Z. Hashin. Extremum principles for elastic heterogeneous media with imperfect interfaces and their application to bounding of effective moduli. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40(4) :767–781, 1992.

- [54] Z. Hashin. Thin interphase/imperfect interface in conduction. *Journal of Applied Physics*, 89(4) :2261–2267, 2001.
- [55] Z. Hashin. Thin interphase/imperfect interface in elasticity with application to coated fiber composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(12) :2509–2537, 2002.
- [56] Z. Hashin and S. Shtrikman. On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10(4) :335–342, 1962.
- [57] E. Herve and A. Zaoui. n-layered inclusion-based micromechanical modeling. *International Journal of Engineering Science*, 31(1) :1–10, 1993.
- [58] H. Pham Huy and E. Sanchez-Palencia. Phénomènes de transmission à travers des couches minces de conductivité élevée. *J. Math. Anal. Appl.*, 47 :284–309, 1974.
- [59] M. Idiart, F. Willot, Y.P. Pellegrini, and P. Ponte Castaneda. Infinite-contrast periodic composites with strongly nonlinear behavior : Effective-medium theory versus full-field simulations. *International Journal of Solids and Structures*, 46(18-19) :3365–3382, 2009.
- [60] MI Idiart, Hervé Moulinec, P Ponte Castañeda, and Pierre Suquet. Macroscopic behavior and field fluctuations in viscoplastic composites : second-order estimates versus full-field simulations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54(5) :1029–1063, 2006.
- [61] P.L. Kapitza. The study of heat transfer in helium ii. *J. Phys. (Moscow)*, 4 :181, 1941.
- [62] E. Kroner. Statistical continuum mechanic. 1972.
- [63] V.I. Kushch. Elastic ellipsoidal inhomogeneity with imperfect interface : Complete displacement solution in terms of ellipsoidal harmonics. *International Journal of Solids and Structures*, 166 :83–95, 2019.
- [64] V.I. Kushch, S.G. Mogilevskaya, H.K. Stolarski, and S.L. Crouch. Elastic interaction of spherical nanoinhomogeneities with gurtin-murdoch type interfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(9) :1702–1716, 2011.
- [65] R.E. Larson and J.J.L. Higdon. Microscopic flow near the surface of two-dimensional porous media. part i : axial flow. *J. Fluid Mech.*, 166 :449–472, 1986.
- [66] R.E. Larson and J.J.L. Higdon. Microscopic flow near the surface of two-dimensional porous media. part ii : transverse flow. *J. Fluid Mech.*, 178 :119–136, 1987.
- [67] W.J. Layton, F. Schieweck, and I. Yotov. Coupling fluid flow with porous media flow. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 40(6) :2195–2218, 2002.

- [68] R. Luciano and Willis. Bounds on non-local effective relations for random composites loaded by configuration-dependent body force. *J. Mech. Phys. Solids*, 48 :1827–1849, 2000.
- [69] H.B. Ly, V. Monchiet, and D. Grande. Computation of permeability with fast fourier transform from 3-d digital images of porous microstructures. *Polymer*, 26(5) :1328–1345, 2016.
- [70] T. Lévy. Fluid flow through an array of fixed particles. *International Journal of Engineering Science*, 21 :11–23, 1983.
- [71] A. Maiti, G.D. Mahan, and S.T. Pantelides. Dynamical simulations of nonequilibrium processes. heat flow and the kapitza resistance across grain boundaries. *Solid State Communications*, 102(7) :517–521, 1997.
- [72] M. Markov, E. Kazatchenko, A. Mousatov, and E. Pervago. Permeability of the fluid-filled inclusions in porous media. *Transp. Porous Med*, 84 :307–317, 2010.
- [73] S. Mezhoud, B. Le Droumaguet, P. Aïmedieu, V. Monchiet, M. Bornert, and D. Grande. Investigation of morphology associated with biporous polymeric materials obtained by the double porogen templating approach. *Colloid and Polymer Science*, 299(3) :537–550, 2021.
- [74] S. Mezhoud, V. Monchiet, M. Bornert, and D. Grande. Computation of macroscopic permeability of doubly porous media with fft based numerical homogenization method. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 83 :141–155, 2020.
- [75] J.C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 52 :139–160, 2001.
- [76] G.W. Milton. *The Theory of Composites*. Cambridge. Cambridge University Press, 2002.
- [77] V. Monchiet. Combining fft methods and standard variational principles to compute bounds and estimates for the properties of elastic composites. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 283 :454–473, 2015.
- [78] V. Monchiet. Fft based iterative schemes for composites conductors with non-overlapping fibers and kapitza interface resistance. *Int. J. Solids Struct.*, 135 :14–25, 2018.
- [79] V. Monchiet and G. Bonnet. A polarization-based fft iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 89(11) :1419–1436, 2012.
- [80] V. Monchiet and G. Bonnet. Numerical homogenization of non linear composites with a polarization-based fft iterative scheme. *Comput. Mater. Science*, 79 :276–283, 2013.

- [81] V. Monchiet, G. Bonnet, and G. Lauriat. A fft-based method to compute the permeability induced by a stokes slip flow through a porous medium. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(4) :192–197, 2009.
- [82] V. Monchiet, H.B. Ly, and D. Grande. Macroscopic permeability of doubly porous materials with cylindrical and spherical macropores. *Meccanica*, 54(10) :1583–1596, 2019.
- [83] H. Moulinec and F. Silva. Comparison of three accelerated fft-based schemes for computing the mechanical response of composite materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering.*, 97(13) :960–985, 2014.
- [84] H. Moulinec and P. Suquet. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. *C. R. Acad. Sci.*, 318(11) :1417–1423, 1994.
- [85] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157(1) :69–94, 1998.
- [86] S. Nemat-Nasser and M. Hori. *Micromechanics : Overall Properties of Heterogeneous Materials*. North-Holland, Amsterdam, 1999.
- [87] M.T. Nguyen, Q.D. To, and V. Monchiet. Derivation of fft numerical bounds of the effective properties of composites and polycrystals. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 11(2) :100236, 2021.
- [88] T.K. Nguyen. *Homogénéisation numérique de structures périodiques par transformée de Fourier : matériaux composites et milieux poreux*. PhD thesis, Université Paris-Est Marne-la-Vallée, 2000.
- [89] T.K. Nguyen, V. Monchiet, and G. Bonnet. A fourier based numerical method for computing the dynamic permeability of periodic porous media. *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 37 :90–98, 2013.
- [90] X. Olny and C. Boutin. Acoustic wave propagation in double porosity media. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 114 :73–89, 2003.
- [91] W.E. Pickett, J.L. Feldman, and J. Deppe. Thermal transport across boundaries in diamond structure materials. *Modell. Simul. Mater. Sci.*, 4(4) :409–419, 1996.
- [92] J. Qu. The effect of slightly weakened interfaces on the overall elastic properties of composite materials. *Mechanics of Materials*, 14(4) :269–281, 1993.
- [93] H. Le Quang and Q.-C. He. Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces. *Mechanics of Materials*, 40(10) :865–884, 2008.
- [94] H. Le Quang, Q.-C. He, and G. Bonnet. Eshelby’s tensor fields and effective conductivity of composites made of anisotropic phases with kapitza’s interface thermal resistance. *Phil.l Mag.*, 91(25) :3358–3392, 2011.

- [95] M. Rasoulzadeh and F.J. Kuchuk. Effective permeability of a porous medium with spherical and spheroidal vug and fracture inclusions. *Transp Porous Med.*, 116 :613–644, 2017.
- [96] E. Rohan, J. Turjanicová, and V. Lukeš. A darcy-brinkman model of flow in double porous media—two-level homogenization and computational modelling. *Computers & Structures*, 207 :95–110, 2018.
- [97] P. Royer, J.L. Auriault, and C. Boutin. Macroscopic modeling of double-porosity reservoirs. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 16 :187–202, 1996.
- [98] M. Sahraoui and M. Kaviani. Slip and no-slip velocity boundary conditions at interface of porous, plain media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(4) :927–943, 1992.
- [99] E. Sanchez-Palencia. Comportement limite d’un problème de transmission à travers une plaque faiblement conductrice. *C. R. Acad. Sci. Paris Serie A.*, 270 :1026–1028, 1970.
- [100] E. Sanchez-Palencia. Non-homogeneous media and vibration theory. In *Non-homogeneous media and vibration theory*, volume 127, 1980.
- [101] A.S. Sangani and A. Acrivos. Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer. *Int. J. Multiphase Flow*, 8(3) :193–206, 1982.
- [102] P.K. Schelling, S.R. Phillpot, and P. Keblinski. Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity. *Phys. Rev. B*, 65 :144306, 2002.
- [103] M. Schneider. An fft-based fast gradient method for elastic and inelastic unit cell homogenization problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 315 :846–866, 2017.
- [104] M. Schneider. A review of nonlinear fft-based computational homogenization methods. *Acta Mechanica*, ? :? ?, 2021.
- [105] P. Sharma and S. Ganti. Size-dependent eshelby’s tensor for embedded nano-inclusions incorporating surface-interface energies. *J. Appl. Mech.*, 71(5) :663–671, 2004.
- [106] G. Silva and I. Ginzburg. Stokes-brinkman-darcy solutions of bimodal porous flow across periodic array of permeable cylindrical inclusions : cell model, lubrication theory and lbm/fem numerical simulations. *Transport in Porous Media*, 111(3) :795–825, 2016.
- [107] J. Spahn, H. Andrä, M. Kabel, and R. Müller. A multiscale approach for modeling progressive damage of composite materials using fast fourier transforms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 268 :871–883, 2014.

- [108] E.M. Sparrow and A.L. Loeffler. Longitudinal laminar flow between cylinders arranged in a regular array. *A.I.Ch.E.J.*, 5 :325–330, 1959.
- [109] R.J. Stoner and H.J. Maris. Kapitza conductance and heat flow between solids at temperatures from 50 to 300 k. *Phys. Rev. B*, 48 :16373–16387, 1993.
- [110] V.T. To, V. Monchiet, and Q.D. To. An fft method for the computation of thermal diffusivity of porous periodic media. *Acta Mechanica*, 228 :3019–3037, 2017.
- [111] S. Torquato and M.D. Rintoul. Effect of the interface on the properties of composite media. *Physical review letters*, 75(22) :4067, 1995.
- [112] F.J. Valdes-Parada, J. Alvarez-Ramirez, B. Goyeau, and J.A. Ochoa-Tapia. Computation of jump coefficients for momentum transfer between a porous medium and a fluid using a closed generalized transfer equation. *Transp. Porous Med.*, 78 :439–457, 2009.
- [113] L.J. Walpole. A coated inclusion in an elastic medium. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 83(3) :495–506, 1978.
- [114] L.J. Walpole. *Elastic Behavior of Composite Materials : Theoretical Foundations*, volume 21. Elsevier, 1981.
- [115] B. Wang, G. Fang, X. Tan, J. Liang, J. Ge, and S. Liu. Investigation on the longitudinal compressive strength of unidirectional carbon fiber/nanoparticles reinforced polymer composites using fft-based method. *Composite Structures*, 247 :112448, 2020.
- [116] C.Y. Wang. Stokes flow through a rectangular array of circular cylinders. *Fluid. Dyn. Res.*, 29 :65–80, 2001.
- [117] F. Willot, L. Gillibert, and D. Jeulin. Microstructure-induced hotspots in the thermal and elastic responses of granular media. *International Journal of Solids and Structures*, 50(10) :1699–1709, 2013.
- [118] F. Willot and D. Jeulin. Elastic behavior of composites containing boolean random sets of inhomogeneities. *International Journal of Engineering Science*, 47(2) :313–324, 2009.
- [119] J. Wuttke. Numerically stable form factor of any polygon and polyhedron. *Journal of Applied Crystallography*, 54(2) :580–587, 2021.
- [120] J. Yvonnet, Q.-C. He, and C. Toulemonde. Numerical modelling of the effective conductivities of composites with arbitrarily shaped inclusions and highly conducting interface. *Composites Science and Technology*, 68(13) :2818–2825, 2008. Directions in Damage and Durability of Composite Materials, with regular papers.
- [121] J. Yvonnet, Q.-C. He, Q.-Z. Zhu, and J.-F. Shao. A general and efficient computational procedure for modelling the kapitza thermal resistance based on xfem. *Computational Materials Science*, 50(4) :1220–1224, 2011.

- [122] R. Zeller and P.H. Dederichs. Elastic constants of polycrystals. *physica status solidi (b)*, 55(2) :831–842, 1973.
- [123] J. Zeman, J. Vondrejč, J. Novák, and I. Marek. Accelerating a fft-based solver for numerical homogenization of periodic media by conjugate gradients. *Journal of Computational Physics*, 229(21) :8065–8071, 2010.
- [124] Q.-Z. Zhu, S.-T. Gu, J. Yvonnet, J.-F. Shao, and Q.-C. He. Three-dimensional numerical modelling by xfem of spring-layer imperfect curved interfaces with applications to linearly elastic composite materials. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 88(4) :307–328, 2011.
- [125] Q.Z. Zhu and J. Yvonnet. An incremental iterative method for modeling damage evolution in voxel-based microstructure models. *Computational Mechanics*, 55(2) :371–382, 2015.

Annexe A : fonctions d'interpolation

4.6 Rectangular inclusion

The interpolation functions for the rectangular inclusion are :

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{2}{a}x, \quad w_2 = \frac{2}{b}y \\ w_3 &= \frac{x(20x^2 - 3a^2)}{a^3}, \quad w_4 = \frac{y(12x^2 - a^2)}{a^2b} \\ w_5 &= \frac{x(12y^2 - b^2)}{ab^2}, \quad w_6 = \frac{y(20y^2 - 3b^2)}{b^3} \\ w_7 &= \frac{x(1008x^4 - 280x^2a^2 + 15a^4)}{4a^5}, \quad w_8 = \frac{(560x^4 - 120x^2a^2 + 3a^4)y}{4a^4b} \\ w_9 &= \frac{x(20x^2 - 3a^2)(12y^2 - b^2)}{2a^3b^2}, \quad w_{10} = \frac{y(20y^2 - 3b^2)(12x^2 - a^2)}{2a^2b^3} \\ w_{11} &= \frac{x(560y^4 - 120b^2y^2 + 3b^4)}{4ab^4}, \quad w_{12} = \frac{y(1008y^4 - 280b^2y^2 + 15b^4)}{4b^5} \end{aligned} \quad (4.122)$$

The components of matrix $\mathcal{A}$ are :

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{11} &= \frac{2}{3} \frac{6bh_s k_2 + a^2 + 3ab}{ah_s} & \mathcal{A}_{84} &= \frac{2}{3} b \frac{6h_s k_2 + a}{ah_s} \\
\mathcal{A}_{22} &= \frac{2}{3} \frac{6ah_s k_2 + 3ab + b^2}{bh_s} & \mathcal{A}_{88} &= \frac{2}{9} \frac{2a^2 h_s k_2 + 60b^2 h_s k_2 + a^2 b + 3ab^2}{abh_s} \\
\mathcal{A}_{31} &= 2b \frac{2h_s k_2 + a}{ah_s} & \mathcal{A}_{93} &= \frac{2}{7} \frac{a}{h_s} \\
\mathcal{A}_{33} &= \frac{2}{7} \frac{84bh_s k_2 + a^2 + 7ab}{ah_s} & \mathcal{A}_{95} &= \frac{2}{5} b \frac{2h_s k_2 + a}{ah_s} \\
\mathcal{A}_{42} &= \frac{2}{3} \frac{b}{h_s} & \mathcal{A}_{99} &= \frac{2}{35} \frac{30a^2 h_s k_2 + 84b^2 h_s k_2 + 5a^2 b + 7ab^2}{abh_s} \\
\mathcal{A}_{44} &= \frac{2}{15} \frac{6a^2 h_s k_2 + 30b^2 h_s k_2 + 3a^2 b + 5ab^2}{abh_s} & \mathcal{A}_{104} &= \frac{2}{5} a \frac{2h_s k_2 + b}{bh_s} \\
\mathcal{A}_{51} &= \frac{2}{3} \frac{a}{h_s} & \mathcal{A}_{106} &= \frac{2}{7} \frac{b}{h_s} \\
\mathcal{A}_{55} &= \frac{2}{15} \frac{30a^2 h_s k_2 + 6b^2 h_s k_2 + 5a^2 b + 3ab^2}{abh_s} & \mathcal{A}_{1010} &= \frac{2}{35} \frac{84a^2 h_s k_2 + 30b^2 h_s k_2 + 7a^2 b + 5ab^2}{abh_s} \\
\mathcal{A}_{62} &= 2a \frac{2h_s k_2 + b}{bh_s} & \mathcal{A}_{111} &= \frac{2}{3} \frac{a}{h_s} \\
\mathcal{A}_{66} &= \frac{2}{7} \frac{84ah_s k_2 + 7ab + b^2}{bh_s} & \mathcal{A}_{115} &= \frac{2}{3} a \frac{6h_s k_2 + b}{bh_s} \\
\mathcal{A}_{71} &= 2b \frac{2h_s k_2 + a}{ah_s} & \mathcal{A}_{1111} &= \frac{2}{9} \frac{60a^2 h_s k_2 + 2b^2 h_s k_2 + 3a^2 b + ab^2}{abh_s} \\
\mathcal{A}_{73} &= 2b \frac{12h_s k_2 + a}{ah_s} & \mathcal{A}_{122} &= 2a \frac{2h_s k_2 + b}{bh_s} \\
\mathcal{A}_{77} &= \frac{2}{11} \frac{330bh_s k_2 + a^2 + 11ab}{ah_s} & \mathcal{A}_{126} &= 2a \frac{12h_s k_2 + b}{bh_s} \\
\mathcal{A}_{82} &= \frac{2}{3} \frac{b}{h_s} & \mathcal{A}_{1212} &= \frac{2}{11} \frac{330ah_s k_2 + 11ab + b^2}{bh_s}
\end{aligned} \tag{4.123}$$

Vectors Π_i are given by :

$$\begin{aligned}
\Pi_1 &= \frac{2k_2\chi}{a}\mathbf{e}_1, \quad \Pi_2 = \frac{2k_2\chi}{b}\mathbf{e}_2 \\
\Pi_3 &= -3k_2\frac{\chi a^2 + 20k_2\chi_{,11}}{a^3}\mathbf{e}_1, \quad \Pi_4 = -k_2\frac{24\chi_{,12}}{a^2b}\mathbf{e}_1 - k_2\frac{\chi a^2 + 12\chi_{,11}}{a^2b}\mathbf{e}_2 \\
\Pi_5 &= -k_2\frac{\chi b^2 + 12\chi_{,22}}{b^2a}\mathbf{e}_1 - k_2\frac{24\chi_{,12}}{b^2a}\mathbf{e}_2, \quad \Pi_6 = -3k_2\frac{\chi b^2 + 20\chi_{,22}}{b^3}\mathbf{e}_2 \\
\Pi_7 &= k_2\frac{15a^4\chi + 840a^2\chi_{,11} + 5040\chi_{,1111}}{a^5}\mathbf{e}_1 \\
\Pi_8 &= k_2\frac{560\chi_{,2111} + 60\chi_{,12}}{a^4b}\mathbf{e}_1 + k_2\frac{3\chi a^4 + 120\chi_{,11}a^2 + 560\chi_{,1111}}{4a^4b}\mathbf{e}_2 \\
\Pi_9 &= k_2\frac{3b^2a^2\chi + 36a^2\chi_{,22} + 60b^2\chi_{,11} + 720\chi_{,1122}}{2a^3b^2}\mathbf{e}_1 + k_2\frac{720\chi_{,2111} + 108a^2\chi_{,12}}{3a^3b^2}\mathbf{e}_2 \\
\Pi_{10} &= k_2\frac{720\chi_{,1222} + 108b^2\chi_{,12}}{3b^3a^2}\mathbf{e}_1 + k_2\frac{3a^2b^2\chi + 36b^2\chi_{,11} + 60a^2\chi_{,22} + 720\chi_{,1122}}{2b^3a^2}\mathbf{e}_2 \\
\Pi_{11} &= k_2\frac{3\chi b^4 + 120\chi_{,11}b^2 + 560\chi_{,1111}}{4b^4a}\mathbf{e}_1 + k_2\frac{560\chi_{,1222} + 60\chi_{,12}}{b^4a}\mathbf{e}_2 \\
\Pi_{12} &= k_2\frac{15b^4\chi + 840b^2\chi_{,22} + 5040\chi_{,2222}}{b^5}\mathbf{e}_2
\end{aligned} \tag{4.124}$$

4.7 Spherical inclusion

In the case of a single spherical inclusion centered at the origin, the interpolation functions are :

$$\begin{aligned}
w_1 &= x_1, \quad w_2 = x_2, \quad w_3 = x_3 \\
w_4 &= \frac{1}{2}x_1(2x_1^2 - 3x_2^2 - 3x_3^2), \quad w_5 = -\frac{1}{2}x_2(3x_1^2 - 2x_2^2 + 3x_3^2) \\
w_6 &= -\frac{1}{2}x_3(3x_1^2 + 3x_2^2 - 2x_3^2), \quad w_7 = \frac{1}{2}x_1(x_2 - x_3)(x_2 + x_3) \\
w_8 &= -\frac{1}{2}x_2(x_1 - x_3)(x_1 + x_3), \quad w_9 = \frac{1}{2}x_3(x_1 - x_2)(x_1 + x_2) \\
w_{10} &= x_1x_2x_3, \quad w_{11} = x_1(R^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2) \\
w_{12} &= x_2(R^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2), \quad w_{13} = x_3(R^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2)
\end{aligned} \tag{4.125}$$

The non-zero components of matrix $\mathcal{A}$ are :

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{1,1} &= \mathcal{A}_{2,2} = \mathcal{A}_{3,3} = \frac{k_2(\alpha + 1)}{\alpha} \\
\mathcal{A}_{4,4} &= \mathcal{A}_{5,5} = \mathcal{A}_{6,6} = \frac{3R^4k_2(3\alpha + 1)}{7\alpha} \\
\mathcal{A}_{7,7} &= \mathcal{A}_{8,8} = \mathcal{A}_{9,9} = \mathcal{A}_{10,10} = \frac{R^4k_2(3\alpha + 1)}{35\alpha} \\
\mathcal{A}_{11,11} &= \mathcal{A}_{12,12} = \mathcal{A}_{13,13} = \frac{4}{7}R^4k_2
\end{aligned} \tag{4.126}$$

with α is given by :

$$\alpha = \frac{k_2 h_s}{R} \quad (4.127)$$

Vectors $\mathbf{\Pi}_i$ (still for an inclusion centered at the origin) are defined by :

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi}_1 &= k_2 \chi \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{\Pi}_2 = k_2 \chi \mathbf{e}_2, \quad \mathbf{\Pi}_3 = k_2 \chi \mathbf{e}_3 \\ \mathbf{\Pi}_4 &= \frac{k_2}{2} (3\chi_{,22} + 3\chi_{,33} - 2\chi_{,11}) \mathbf{e}_1 + 3k_2 (\chi_{,12} \mathbf{e}_2 + \chi_{,13} \mathbf{e}_3) \\ \mathbf{\Pi}_5 &= \frac{k_2}{2} (3\chi_{,33} + 3\chi_{,11} - 2\chi_{,22}) \mathbf{e}_2 + 3k_2 (\chi_{,23} \mathbf{e}_3 + \chi_{,21} \mathbf{e}_1) \\ \mathbf{\Pi}_6 &= \frac{k_2}{2} (3\chi_{,11} + 3\chi_{,22} - 2\chi_{,33}) \mathbf{e}_3 + 3k_2 (\chi_{,31} \mathbf{e}_1 + \chi_{,32} \mathbf{e}_2) \\ \mathbf{\Pi}_7 &= \frac{k_2}{2} (\chi_{,22} - \chi_{,33}) \mathbf{e}_1 + 2k_2 (\chi_{12} \mathbf{e}_2 - \chi_{13} \mathbf{e}_3) \\ \mathbf{\Pi}_8 &= \frac{k_2}{2} (\chi_{,33} - \chi_{,11}) \mathbf{e}_2 + 2k_2 (\chi_{23} \mathbf{e}_3 - \chi_{21} \mathbf{e}_1) \\ \mathbf{\Pi}_9 &= \frac{k_2}{2} (\chi_{,11} - \chi_{,22}) \mathbf{e}_3 + 2k_2 (\chi_{31} \mathbf{e}_1 - \chi_{32} \mathbf{e}_2) \\ \mathbf{\Pi}_{10} &= k_2 \chi_{,23} \mathbf{e}_1 + k_2 \chi_{,13} \mathbf{e}_2 + k_2 \chi_{,12} \mathbf{e}_3 \\ \mathbf{\Pi}_{11} &= k_2 (\chi_{,11} + \chi_{,22} + \chi_{,33} - R^2 \chi) \mathbf{e}_1 + k_2 \chi_{12} \mathbf{e}_2 + k_2 \chi_{13} \mathbf{e}_3 \\ \mathbf{\Pi}_{12} &= k_2 (\chi_{,22} + \chi_{,33} + \chi_{,11} - R^2 \chi) \mathbf{e}_2 + k_2 \chi_{23} \mathbf{e}_3 + k_2 \chi_{21} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{\Pi}_{13} &= k_2 (\chi_{,33} + \chi_{,11} + \chi_{,22} - R^2 \chi) \mathbf{e}_3 + k_2 \chi_{,31} \mathbf{e}_1 + k_2 \chi_{,32} \mathbf{e}_2 \end{aligned} \quad (4.128)$$

where χ is the shape coefficient of a spherical inclusion centered at the origin.

For an inclusion centered at $\mathbf{x} = \mathbf{X}_\beta$, vectors $\mathbf{\Pi}_i^\beta$ are obtained by multiplying vectors $\mathbf{\Pi}_i$ by $\exp(i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{X}_\beta)$. Moreover, the components of the matrix $\mathcal{A}$ are the same for all the inclusions.

Résumé

Mot clé : TFR, Homogénéisation, Interface

Résumé en français : Ce travail concerne la modélisation des propriétés effectives de composites et de milieux poreux dans le cadre des techniques d'homogénéisation numérique par Transformée de Fourier Rapide (TFR). Le premier volet porte sur la prise en compte des discontinuités d'interface entre la matrice et les inclusions. L'approche s'inscrit dans le cadre des approches variationnelles des méthodes TFR avec un enrichissement de l'espace de discrétisation pour prendre en compte les discontinuités d'interface. L'approche est développée pour simuler des discontinuités du champ de température pour les composites conducteurs de la chaleur (interface de Kapitza) et des discontinuités du déplacement dans les composites élastiques (interfaces adhésives). La méthode repose sur l'utilisation des fonctions de Green du milieu périodique et des coefficients de forme pour décrire la géométrie des inclusions. Le système linéaire est résolu avec la méthode du gradient conjugué et la TFR pour réaliser le produit de convolution avec l'opérateur de Green. On étudie la convergence et la précision des résultats obtenus pour des inclusions de forme rectangulaire, cylindrique et sphérique en effectuant des comparaisons avec la méthode des éléments finis et des solutions analytiques. Dans une seconde partie, on propose des modélisations des propriétés de transport dans les milieux à deux échelles de porosité. Une démarche par double homogénéisation est alors adoptée. À l'échelle des micropores on simule l'écoulement par les équations de Stokes. À l'échelle intermédiaire, on utilise deux types de modélisation : la première couplant les équations de Brinkman et de Stokes, la seconde couplant celles de Darcy, Stokes et le modèle d'interface de Beavers-Joseph. Le point central du travail concerne l'identification des paramètres des modèles de Brinkman et de Beavers-Joseph qui régissent les effets de couche limite en lien avec la géométrie de la microstructure. Ceux-ci sont obtenus par identification avec des calculs simulant l'écoulement de Stokes aux deux échelles simultanées.

Key word : FFT, Homogeneization, Interface

Abstract : This work concerns the modeling of the effective properties of composites and porous media within the framework of the numerical homogenization method based on Fast Fourier Transform (FFT). The first part of the work deals with the consideration of interface discontinuities between the matrix and the inclusions. The approach fits within the framework of the FFT variational approaches with an enrichment of the discretization space in order to account for the interface discontinuities. The approach is developed to simulate the jump of temperature for composite conductors (Kapitza type interface) and the jump of displacement in elastic composites (adhesive type interfaces). The method is based on the use of the periodic Green's functions and the shape coefficients to describe the geometry of the inclusions. The linear system is solved by means of the iterative gradient method combined with the FFT to achieve the convolution product with the Green operator. We study the convergence and the precision of our results in the case of composites with rectangular, cylindrical and spherical inclusion shapes by comparisons with the finite element and analytical solutions. In the second part of this work, we propose to determine the effective transport properties of porous media with two populations of pores (micropores and macropores). A double homogenization approach is then adopted. At the micropore scale, the flow is simulated by the Stokes equations. At the intermediate scale, two modeling are considered : the first use the Brinkman and the Stokes equations, the second one use the Darcy/Stokes coupled equations with the Beavers-Joseph interface model. The central point of the present work concerns the identification of Brinkman and Beavers-Joseph constitutive parameters which govern the boundary layer effects in relation with the geometry of the microstructure. These coefficients are identified by comparison with full calculations simulating the Stokes flow at both the micropores and macropores scales.