



HAL
open science

Autour de la précision des solutions à l'échelle microscopique dans le cadre de la modélisation du comportement thermo-mécanique multiéchelle de matériaux hétérogènes

Louis Belgrand

► **To cite this version:**

Louis Belgrand. Autour de la précision des solutions à l'échelle microscopique dans le cadre de la modélisation du comportement thermo-mécanique multiéchelle de matériaux hétérogènes. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Aix-Marseille Université (AMU), 2023. Français. NNT : 2023AIXM0001 . tel-04442565

HAL Id: tel-04442565

<https://theses.hal.science/tel-04442565v1>

Submitted on 6 Feb 2024

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.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0 International License

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue à Aix-Marseille Université
le 15 décembre 2023 par

Louis BELGRAND

Autour de la précision des solutions à l'échelle microscopique
dans le cadre de la modélisation du comportement
thermo-mécanique multiéchelle de matériaux hétérogènes

Discipline

Sciences pour l'Ingénieur

Spécialité

Mécanique des solides

École doctorale

ED 353 SCIENCES POUR L'INGÉNIEUR :
Mécanique, Physique, Micro et Nanoélectronique

Laboratoire/Partenaires de recherche

Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA)
Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA)

Composition du jury

Toufik KANIT	Rapporteur
Professeur à l'Université de Lille	
Fodil MERAGHNI	Rapporteur
Professeur à l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Metz	
Djimédo KONDO	Président du jury
Professeur à Sorbonne Université	
Sébastien BRISARD	Examineur
Professeur à Aix-Marseille Université	
Christelle COMBESCURE	Examinatrice
Maître de Conférences à l'Académie Militaire de Saint-Cyr Coëtquidan	
Frédéric LEBON	Directeur de thèse
Professeur à Aix-Marseille Université	
Isabelle RAMIÈRE	Co-Directrice de thèse
Directrice de recherche au CEA Cadarache	
Rodrigue LARGENTON	Co-Encadrant
Ingénieur de recherche Senior à EDF	

Affidavit

Je soussigné, Louis Belgrand, déclare par la présente que le travail présenté dans ce manuscrit est mon propre travail, réalisé sous la direction scientifique de Frédéric Lebon et Isabelle Ramière, dans le respect des principes d'honnêteté, d'intégrité et de responsabilité inhérents à la mission de recherche. Les travaux de recherche et la rédaction de ce manuscrit ont été réalisés dans le respect à la fois de la charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et de la charte d'Aix-Marseille Université relative à la lutte contre le plagiat.

Ce travail n'a pas été précédemment soumis en France ou à l'étranger dans une version identique ou similaire à un organisme examinateur.

Fait à Cadarache le 25/09/2023



Cette œuvre est mise à disposition selon les termes de la [Licence Creative Commons Attribution - Pas d'Utilisation Commerciale - Pas de Modification 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

*Le but d'une encyclopédie est de rassembler les connaissances éparses
sur la surface de la terre
D'en exposer le système général aux hommes avec qui nous vivons, et
de les transmettre aux hommes qui viendront après nous
Afin que les travaux des siècles passés n'aient pas été des travaux
inutiles pour les siècles qui succéderont
Que nos neveux, devenant plus instruits, deviennent en même temps
plus vertueux et plus heureux, et que nous ne mourions pas sans
avoir bien mérité du genre humain.*

Denis Diderot
Encyclopédie, 1751

À toute ma famille

Remerciements

Le moment est venu d'exprimer ma sincère gratitude envers toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de cette thèse. Bien que cette section soit rédigée en dernier, elle occupe une place privilégiée en tête du manuscrit, accessible à ceux qui ne sont pas familiers avec les domaines de la physique ou des mathématiques. Profitez de cette opportunité pour découvrir les coulisses de cette aventure.

Je tiens à adresser mes plus chaleureux remerciements à Isabelle Ramière et Frédéric Lebon pour leur collaboration très enrichissante. Je suis reconnaissant de la confiance qu'ils m'ont accordée et de m'avoir entraîné dans l'aventure passionnante des méthodes multiéchelles.

Ma gratitude la plus profonde va à Isabelle pour sa disponibilité constante, son partage généreux d'expériences et de connaissances en méthodes numériques, ainsi que son encouragement continu à perfectionner mon travail. Sa contribution a été inestimable et a considérablement enrichi cette expérience.

Je remercie également Frédéric pour nos discussions passionnantes sur la mécanique et les développements asymptotiques, qui se sont avérées très instructives et ont permis de prendre du recul sur mes travaux.

Je souhaite remercier Rodrigue Largenton pour ses éclairages contextuels issus du monde industriel, qui ont grandement contribué à une meilleure compréhension des enjeux liés aux développements scientifiques.

Mes remerciements vont à Toufik Kanit et Fodil Meraghni pour leur précieux travail en tant que rapporteurs de ma thèse. Un merci particulier à Djimédo Kondo pour avoir présidé le jury avec bienveillance, instaurant une atmosphère de confiance. Mes remerciements s'étendent également à Sébastien Brisard et Christelle Combescure pour les échanges stimulants tout au long de cette soutenance. La présence et la contribution de chacun ont indubitablement rendu cet événement d'autant plus agréable.

De nombreuses personnes ont contribué au développement de cette thèse en fournissant des conseils techniques ou théoriques. Tout d'abord, je tiens à exprimer ma reconnaissance envers Marc Josien pour son développement de Mérope, sa disponibilité et nos discussions approfondies sur mes travaux avec ses éclairages mathématiques. Mes remerciements vont également à Christophe Bourcier pour ses conseils sur l'outil de maillage COMBS, à Stéphane Gounand et Olivier Fandeur pour leur assistance sur l'utilisation de Cast3M, à Renaud Masson pour nos discussions sur l'homogénéisation, à Bruno Michel et Victor Blanc pour vos retours d'expérience sur les EF², à Antoine Gloria pour nos échanges sur l'efficacité des Conditions aux Limites et à Grégoire Allaire pour ses précieux éclairages sur les développements asymptotiques.

J'aimerais également exprimer ma gratitude envers Bruno Collard et Michel Freyss pour leur accueil chaleureux dans leurs laboratoires respectifs et leur suivi attentif au bon déroulement de la thèse. Un grand merci à Josiane Girard pour son aide précieuse dans les démarches administratives.

Je tiens à remercier chacun de mes collègues du CEA avec qui j'ai pu partager de nombreux moments conviviaux au sein d'une atmosphère détendue. Merci également pour vos réponses à certaines de mes questions, qui ont contribué à mon apprentissage.

Je souhaite remercier toute l'équipe MOCA de SeaTech, qui a joué un rôle déterminant en m'initiant à la modélisation et la simulation numérique. La soutenance a été l'occasion privilégiée de partager mes travaux, et la présence fortuite de Lyudmyla Yushchenko à Cadarache ce jour-là a ajouté une note touchante à cet événement.

Mes remerciements s'adressent également aux autres doctorants du service avec qui j'ai partagé de nombreux moments et débats sans fin tout au long de ces années. Nous avons su nous serrer les coudes lorsque cela était nécessaire, créant ainsi un environnement de soutien mutuel. Merci à chacun d'entre vous pour votre amitié.

J'associe à ces remerciements l'ensemble de mes amis qui ont contribué à trouver un équilibre de vie durant cette thèse, m'aidant ainsi à garder la tête froide. Merci à chacun de vous pour votre compréhension, vos encouragements et les moments de détente qui ont fait toute la différence. La présence de certains à ma soutenance a été touchante, et à présent, je me réjouis de pouvoir être davantage disponible pour vous.

Merci aux membres de l'aéroclub Saint-Rémy les Alpilles qui m'ont initié au planeur pour ensuite voler de mes propres ailes. Votre générosité et convivialité ont rendu cette expérience encore plus mémorable.

Aux SeaTechos restés dans le sud, merci pour les afterworks et weekends toujours aussi palpitants. Ces moments partagés ont été une pause bienvenue.

Aux anciens du D2, merci pour ces vacances inoubliables en Norvège et en Bulgarie, ainsi que les weekends en Bourgogne ou à Grenoble.

Un remerciement spécial à Elise pour son précieux soutien au cours de cette dernière année.

C'est avec une certaine émotion que je souhaite remercier du fond du cœur l'ensemble de ma famille pour leur soutien. Claire et Nicolas, Clément et Marlène, je vous remercie vivement pour les moments heureux que nous partageons et pour avoir toujours cru en la réussite des projets de votre petit frère. Mes remerciements s'étendent également à mes neveux et ma nièce, arrivés au cours de la thèse, illuminant nos vies de joie. Je leur souhaite de belles aventures sur les chemins de l'école. Un merci tout particulier à ma Maman pour son soutien inconditionnel et à mon Papa pour l'élan qu'il m'a donné, permettant d'aboutir jusqu'ici. J'exprime un grand respect envers mes grands-parents et les remercie pour la transmission de leurs valeurs. Je vous dédie à tous cette thèse.

Liste de publications et participation aux conférences

Liste des publications et/ou brevets réalisées dans le cadre du projet de thèse :

1. Louis Belgrand, Isabelle Ramière, Rodrigue Largenton et Frédéric Lebon. "Proximity Effects in Matrix-Inclusion Composites : Elastic Effective Behavior, Phase Moments, and Full-Field Computational Analysis" Mathematics, volume 10, 4437, 2022. DOI : [10.3390/math10234437](https://doi.org/10.3390/math10234437)
2. Louis Belgrand, Isabelle Ramière, Marc Josien et Frédéric Lebon. "Improved accuracy of Dirichlet-like microscopic solutions on Representative Volume Elements", en cours de rédaction, 2023.

Participation aux conférences et écoles d'été au cours de la période de thèse :

1. "Effets de la proximité des inclusions dans un Volume Élémentaire Représentatif sur le calcul des champs locaux et des propriétés effectives", 15e Colloque national en calcul des structures : CSMA (16 - 20 mai 2022, Giens) avec proceeding, 2022.
2. "Efficiency of boundary conditions on the computation of local fields in a Representative Volume Element", 8th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering : ECCOMAS (5 - 9 juin 2022, Oslo) avec abstract, 2022.
3. "Reliable Computation of Microscopic Solutions in Numerical Homogenization Context for Static Heat Conduction with Heterogeneous Heat Generation", 9th ECCOMAS Thematic Conference on the Mechanical Response of Composites : COMPOSITES (12 - 14 septembre 2023, Trapani) avec abstract, 2023.
4. The 2021 Frédéric Joliot / Otto Hahn Summer School on "High fidelity Modelling and Simulation of Nuclear Reactors : Turning a Promise into Reality" (25 août - 3 septembre, virtuel), 2021.

Résumé

Cette thèse s'intéresse à la simulation du comportement thermo-mécanique de composites matrice-inclusion dilués. Ce sujet est motivé par l'industrie nucléaire où les pastilles de combustibles recyclées ont des caractéristiques physico-chimiques hétérogènes. L'objectif étant de connaître précisément les grandeurs homogénéisées, mais également à l'échelle microscopique, des stratégies d'homogénéisation numérique par EF² (Éléments Finis au carré) sont choisies. Les deux échelles sont alors résolues de façon concomitante au cours du calcul. La solution homogénéisée est obtenue à convergence de ce processus itératif s'appuyant sur des calculs microscopiques réalisés à la volée sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER). Ces calculs sur VER doivent être précis et représentatifs de la réponse microstructurale. Ainsi, différents axes composent ce travail : l'influence de la proximité des inclusions, les effets des conditions limites sur le VER et la prise en compte d'une source volumique hétérogène.

La première partie de ce travail porte sur les effets induits par la proximité d'inclusions dans des composites élastiques. Le cas des hétérogénéités se chevauchant ou suffisamment loin pour ne pas interagir entre elles a été amplement étudié dans la littérature. Peu d'études concernent des situations intermédiaires. Nous proposons ainsi d'effectuer des calculs numériques par Éléments Finis pour différentes proximités d'inclusions. Les propriétés élastiques homogénéisées obtenues, ainsi que les moments par phase de la contrainte (premier et second), sont comparés aux estimations de Mori-Tanaka, qui sont couramment utilisées pour ce type de composite. Le comportement des champs locaux (contraintes) dans la microstructure est également analysé.

Pour des microstructures de type matrice-inclusion, il est bien connu que les conditions aux limites périodiques appliquées sur des VER périodisés sont beaucoup plus précises que les conditions en déformations homogènes aux contours (de type Dirichlet), au détriment du temps de calcul et de maillage. Ainsi, différentes stratégies sont explorées pour améliorer la précision des solutions microscopiques en appliquant des conditions aux limites de type Dirichlet tout en préservant la compétitivité de la vitesse de calcul associée. Ces stratégies, dont certaines sont novatrices, sont évaluées au travers de différents indicateurs globaux, moyens et locaux, semblables à ceux de la partie précédente.

L'objectif du troisième axe de travail est d'obtenir un calcul précis de la température microscopique pour un problème thermique avec terme source de chaleur hétérogène. Les différentes approches EF² autour de ce sujet se différencient majoritairement par le terme source du problème microscopique résolu sur le VER. Ces approches sont analysées et comparées à l'homogénéisation mathématique basée sur un développement asymptotique à double échelle. Les résultats numériques obtenus pour le cas d'une source de chaleur homogène (non nulle) ou hétérogène sont comparés à une simulation directe de la structure afin de discriminer les différentes approches et de proposer une solution robuste et précise.

Mots clés : homogénéisation numérique, matériaux et sources hétérogènes, solutions microscopiques, proximité des inclusions, conditions aux limites de Dirichlet, méthode des éléments finis

Abstract

This thesis focuses on thermo-mechanical simulation of behavior of dilute matrix-inclusion composites. This topic is motivated by the nuclear industry, where recycled fuel has heterogeneous physico-chemical properties. In order to find out accurate homogenized but also microscopic quantities, computational homogenization strategies based on the FE² (Finite Elements square) method are chosen. The two scales are then solved in a concurrent manner during the computation. The homogenized solution is obtained at convergence of this iterative process, based on on-the-fly microscopic calculations on a Representative Volume Element (RVE). These RVE computations must be accurate and representative of the microstructural response. This work therefore focuses on various aspects: the influence of the proximity of inclusions, the effects of RVE boundary conditions and the consideration of a heterogeneous volume source term.

The first part of this work deals with the effects of the proximity of inclusions in elastic composites. The case of overlapping heterogeneities or heterogeneities without interaction (far enough) has been extensively studied in the literature. Few studies concern intermediate situations. We therefore propose to perform Finite Element computations for different inclusion proximities. The homogenized elastic properties, as well as the first and second moment of stress per phase, are compared with the Mori-Tanaka estimates commonly used for this type of composite. The behavior of local stress fields in the microstructure is also analyzed.

For matrix-inclusion microstructures, it is well known that periodic boundary conditions applied to periodised RVEs are much more accurate than uniform strain boundary conditions (Dirichlet type), at the expense of computation and meshing time. Various strategies are therefore being explored to improve the accuracy of Dirichlet-like boundary value microscopic solutions while preserving the competitiveness of the associated computational speed. These strategies, some of which are innovative, are evaluated using various global, average and local indicators, similar to those used in the previous section.

The aim of the third line of work is to accurately compute the microscopic temperature for a heterogeneous heat generation stationary thermal problem. The various FE² approaches around this topic differ mainly in the source term of the microscopic problem solved on the RVE. These approaches are analyzed and compared with the two-scale asymptotic expansion method. The numerical results obtained for the case of a homogeneous (non-null) or heterogeneous heat generation are compared with a fine scale direct simulation of the structure in order to discriminate between the different approaches and to propose a robust and accurate solution.

Keywords: computational homogenization, heterogeneous materials and sources, microscopic solutions, proximity of inclusions, Dirichlet boundary conditions, finite element method

Table des matières

Remerciements	4
Liste de publications et participation aux conférences	6
Résumé	7
Abstract	8
Introduction	17
1. Contexte et objectifs	19
1.1. Contexte industriel	20
1.1.1. Réacteur à Eau Pressurisée	20
1.1.2. Crayon et pastille combustible	21
1.1.3. Comportement du combustible MOX sous irradiation	23
1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation	24
1.2.1. Relation de changement d'échelle	25
1.2.2. Les approches d'homogénéisation analytique	27
1.2.3. Les approches d'homogénéisation numérique	31
1.2.4. Les approches Éléments Finis multiniveaux	36
1.2.5. Modélisation hétérogène du combustible nucléaire recyclé	39
1.3. Contribution de la thèse	40
1.3.1. Identification de nouveaux paramètres importants de la microstructure	41
1.3.2. L'Étape de localisation	41
1.3.3. Méthode EF ² appliquée à la thermique avec terme source	42
2. Effets de proximité dans les composites matrice-inclusion	43
2.1. Introduction	44
2.2. Génération d'un Volume Élémentaire Représentatif d'un composite matrice-inclusion avec une distance minimale effective entre les inclusions	45
2.2.1. Méthodes de tirages des inclusions	46
2.2.2. Procédure de maillage	47
2.3. Propriétés élastiques et homogénéisation	48
2.3.1. Contraste de rigidité entre les phases	48
2.3.2. Homogénéisation analytique : Estimations de Mori–Tanaka	49
2.3.3. Homogénéisation numérique	52
2.4. Résultats numériques	52
2.4.1. Résultats pour les propriétés effectives	53
2.4.2. Résultats pour les moyennes par phase	56
2.4.3. Résultats pour les champs locaux	62
2.5. Conclusion	65
3. Amélioration des solutions microscopiques obtenues via des conditions de Dirichlet	67
3.1. Introduction	68
3.2. Définition du modèle de VER	70

3.3.	Quelques stratégies pour améliorer les résultats obtenues avec des Conditions aux Limites de type Dirichlet	71
3.3.1.	Sur l'efficacité des BC classiques imposant une déformation	71
3.3.2.	Méthodes de post-traitement	72
3.3.3.	Méthodes de prétraitement	75
3.3.4.	Modification de la formulation des USBC dans le cas d'inclusions rigides	77
3.4.	Résultats et discussion	78
3.4.1.	Comparaison des différentes stratégies sur les champs d'intérêt	79
3.4.2.	Analyse approfondie et résultats complémentaires des différentes méthodes	84
3.4.3.	Focus sur le cas des inclusions proches	87
3.4.4.	Focus sur le cas d'un contraste modéré	89
3.4.5.	Focus sur le cas des inclusions souples	91
3.5.	Conclusion	92
4.	Solutions multiéchelles en thermique stationnaire avec une source hétérogène	95
4.1.	Introduction	96
4.2.	Méthodes de résolution	97
4.2.1.	Développement asymptotique à deux échelles	97
4.2.2.	Approches EF^2	101
4.3.	Résultats numériques	111
4.3.1.	Milieu périodique et VER	112
4.3.2.	Source homogène	112
4.3.3.	Source hétérogène	120
4.3.4.	Évolution temporelle et comportement non-linéaire	122
4.4.	Conclusion	126
	Conclusion et perspectives	129
	Annexes du Chapitre 2	133
A.	Résultats complémentaires pour les propriétés effectives	133
B.	Résultats complémentaires pour les champs moyens	135
B.1.	Premier moment	135
B.2.	Second moment	138
C.	Résultats complémentaires pour les champs locaux	141
	Bibliographie	143

Table des figures

1.1.	Fonctionnement d'une centrale nucléaire avec a�ror�frig�rant. Source : IRSN . . .	21
1.2.	Repr�sentation d'un assemblage, d'un crayon et d'une pastille de combustible en REP. Source : Framatome.	22
1.3.	Processus de fabrication du MOX MIMAS. Figure issue de [ORANO 2017].	22
1.4.	Teneur en plutonium dans la microstructure du MOX, image microsonde issue de [OUDINET et al. 2008]	23
1.5.	Principe de l'homog�n�sation. Figure issue de [RAMI�RE 2021].	24
1.6.	Principe de changement d'�chelle en homog�n�sation lin�aire	25
1.7.	Comparaison des diff�rents estimateurs en fonction de la fraction volumique pour $k_1 = \mu_1 = 10$ et $k_2 = \mu_2 = 1$. Les points "Outil de Validation" repr�sentent la solution obtenue par une m�thode num�rique. Figure issue de [<i>Cours de Martin L�vesque</i>]	30
1.8.	�chelles de repr�sentation pour un milieu al�atoire. Figure issue de [BLANC 2009]	31
1.9.	Illustration de la convergence des propri�t�s effectives vers les propri�t�s apparentes pour les USBC (KUBC), PBC (PERIODIC) et SUBC. Figure issue de [KANIT et al. 2003]	35
1.10.	Principe de la m�thode EF ² . Figure issue de [RAMI�RE et al. 2017b]	37
1.11.	Repr�sentation du MOX par des VER biphas�s : en rouge les inclusions et en vert la matrice	40
2.1.	Vues en coupe du maillage des VER pour les valeurs extr�mes de s_{min} , avec des gros plans sur des inclusions s�par�s de la distance s_{min} . $SR = 10$, $r = 10 \mu m$, $f_v = 13,4 \%$	46
2.2.	Valeurs moyennes et �carts-types de la valeur moyenne des modules apparents en fonction du param�tre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clart�, les barres d'erreur et les points sont l�g�rement d�cal�s pour chaque distance minimale �tudi�e.	54
2.3.	Distance moyenne entre deux sph�res s_{mean} en fonction de la distance minimale effective s_{min} pour diff�rents rapports d'�chelle. Par souci de clart�, les barres d'erreur et les points sont l�g�rement d�cal�s pour chaque distance minimale �tudi�e.	54
2.4.	Valeurs moyennes et �carts-types de la valeur moyenne des modules apparents en fonction du param�tre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 25,1 \%$	56
2.5.	Valeurs moyennes et �carts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du param�tre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clart�, les barres d'erreur et les points sont l�g�rement d�cal�s pour chaque distance minimale �tudi�e.	57
2.6.	Valeurs moyennes et �carts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte �quivalente par phase en fonction du param�tre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clart�, les barres d'erreur et les points sont l�g�rement d�cal�s pour chaque distance minimale �tudi�e.	59

2.7.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.	60
2.8.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte équivalente par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.	61
2.9.	Histogrammes de fréquence de la contrainte équivalente par phase à $SR = 10$, $f_v = 13,4 \%$, aux valeurs extrêmes de s_{min} ($s_{min} = 0.1r$ et $s_{min} = 1.2r$) pour les contrastes de 0.01 et 100.	63
2.10.	Contrainte équivalente locale à $SR = 10$, $f_v = 13,4 \%$ aux valeurs extrêmes de s_{min} et aux contrastes de 100 et 0,01 – Vues en coupe transversale du VER. . . .	64
3.1.	Convergence d'une propriété apparente avec l'augmentation de la taille du VER pour les BC classiques imposant une déformation macroscopique : USBC et PBC. Inspiré par [WALTERS et al. 2021].	71
3.2.	Vues en coupe transversale de la contrainte équivalente de Von Mises pour le problème aux limites avec USBC ou PBC - <i>contraste</i> = 100 - Distance minimale entre les inclusions $s_{min} = 0,8r$ (rayon $r = 10 \mu m$, taille du VER $l = 100 \mu m$).	72
3.3.	Vues en coupe du volume tronqué (en rouge) et du filtre w_b	75
3.4.	Exemple de VER avec différentes lois de tirage. Pour des raisons de représentation, la matrice a été coupées et toutes les inclusions sont affichées.	76
3.5.	Vues en coupe du VER cubique avec différentes surfaces périodiques. Pour des raisons de représentation, la matrice a été coupée alors que toutes les inclusions sont affichées.	77
3.6.	Comparaison des différentes méthodes sur les indicateurs obtenus par une formulation intégrale : $s_{min} = 0,8r$, <i>contraste</i> = 100	81
3.7.	Histogrammes de fréquence de la contrainte équivalente dans les inclusions pour les différentes méthodes : $s_{min} = 0,8r$, <i>contraste</i> = 100	82
3.8.	Comparaison des estimations des champs d'intérêt avec les différentes méthodes par post-traitement : $s_{min} = 0,8r$, <i>contraste</i> = 100	85
3.9.	Histogrammes de fréquence de la contrainte équivalente dans les inclusions pour différentes méthodes par post-traitement : $s_{min} = 0,8r$, <i>contraste</i> = 100	85
3.10.	Vues en coupe de la contrainte équivalente : $s_{min} = 0,8r$, <i>contraste</i> = 100	87
3.11.	Comparaison des différentes méthodes sur les indicateurs obtenus par une formulation intégrale : $s_{min} = 0,1r$, <i>contraste</i> = 100	88
3.12.	Vues en coupe de la contrainte équivalente : $s_{min} = 0,1r$, <i>contraste</i> = 100	89
3.13.	Comparaison des différentes méthodes sur les indicateurs obtenus par une formulation intégrale : $s_{min} = 0,8r$, <i>contraste</i> = 10	90
3.14.	Comparaison des différentes méthodes sur les indicateurs obtenus par une formulation intégrale : $s_{min} = 0,8r$, <i>contraste</i> = 0,01	91
4.1.	VER avec l'inclusion en rouge et la matrice en vert	112
4.2.	Vue en coupe de la structure de la simulation de référence et maillage homogénéisé associé (points de Gauss en bleu)	112

4.3.	Comparaison des différentes méthodes EF ² et développement asymptotique aux échelles macroscopique et microscopique pour une source homogène, <i>contraste</i> = 500	114
4.4.	Convergence du gradient de $T_{\varepsilon,1}$ en l vers le gradient de T_ε	115
4.5.	Comparaison des différentes méthodes EF ² pour une source homogène, <i>contraste</i> = 500, $l = 200\mu m$	116
4.6.	Température microscopique en imposant une moyenne nulle sur les fluctuations dans le VER (cas d'une source homogène)	117
4.7.	Comparaison des différentes méthodes EF ² pour une source homogène, <i>contraste</i> = 3	118
4.8.	Comparaison des différentes méthodes EF ² pour une source homogène, <i>contraste</i> = 0.01	119
4.9.	Comparaison des différentes méthodes EF ² et développement asymptotique aux échelles macroscopique et microscopique pour une source hétérogène, <i>contraste</i> = 500	121
4.10.	Température microscopique en imposant une moyenne nulle sur les fluctuations dans le VER (cas d'une source hétérogène)	122
4.11.	Couplage multiphysique et multiéchelle	123
4.12.	Représentation multitranche et multiéchelle du crayon combustible	123
4.13.	Conductivité thermique du dioxyde d'uranium en fonction de la température	124
4.14.	Puissance volumique au cours de l'irradiation dans les inclusions	124
4.15.	Comparaison des températures maximales par phase et de la température homogénéisée au cours de l'irradiation pour les différentes méthodes EF ²	125
4.16.	Comparaison des températures locales obtenues sur le VER central pour les différentes méthodes EF ² , au temps $3,1 \times 10^7 s$ soit environ 1 an	126
A.1.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne des modules apparents en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.	133
A.2.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne des modules apparents en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 5 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.	134
B.1.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.	135
B.2.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 25,1 \%$.	136
B.3.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte équivalente par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.	137

B.4.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.	138
B.5.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 25,1 \%$	139
B.6.	Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte équivalente par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.	140
C.1.	Frequency histograms of equivalent stress by phase at $SR = 10$, $f_v = 13,4 \%$, and the extreme s_{min} values ($s_{min} = 0,1r$ and $s_{min} = 1,2r$) for contrasts of 10 and 0,1.	141
C.2.	Contrainte équivalente locale à $SR = 10$, $f_v = 13,4 \%$ aux valeurs extrêmes de s_{min} et aux contrastes de 10 et 0,1 – Vues en coupe transversale du VER.	142

Liste des tableaux

1.1. Les différentes approches d'homogénéisation en mécanique disponible dans PLEIADES	39
2.1. Convergence en maillage de k^{app} , $SR = 2, 5$, $f_v = 13, 4 \%$, $contraste = 100$	48
2.2. Nombre moyen de nœuds dans le maillage et nombre de tirage avec une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13, 4 \%$ pour différents rapports d'échelle SR avec $r = 10 \mu m$	48
3.1. Valeurs de référence des propriétés apparentes, des moments des contraintes hydrostatique et équivalente dans les inclusions	79
3.2. Écarts et dispersions entre les résultats obtenus en PBC avec le tirage modifié et les solutions PBC de référence : $s_{min} = 0, 8r$, $contraste = 100$	86

Introduction

La simulation numérique est devenue un outil essentiel dans de nombreux domaines d'activité, allant des différentes industries à l'économie en passant par la médecine. La croissance des capacités de calcul et le développement des outils numériques ont permis, ces dernières décennies, le développement de modélisations sophistiquées donnant des solutions précises à des problèmes de plus en plus complexes. Pour les industriels, ces modélisations et simulations favorisent, par la reproductibilité de phénomènes réels, l'optimisation du cycle de vie d'un produit. Ces dernières années, les scientifiques ont développé des algorithmes contribuant à la prise en compte de phénomènes couplés via des simulations dites multiéchelles et multiphysiques. De manière conjointe, le développement de méthodes de calcul sur des supercalculateurs a permis d'envisager des résolutions atteignant plusieurs milliards d'inconnues.

Dans le domaine du nucléaire, la compréhension des différents phénomènes mis en jeu lors de l'irradiation en réacteur est cruciale vis-à-vis des démarches de sûreté. Ainsi, le recours à la modélisation et à la simulation permet de réduire et de mieux cibler les expérimentations coûteuses, voire même de représenter des situations impossibles à expérimenter (situations accidentelles par exemple). Prédire le comportement du combustible nucléaire, en condition nominale, mais aussi accidentelle, est un enjeu important. Les pastilles de combustibles recyclées, cylindre de l'ordre du centimètre cube, contiennent des hétérogénéités de composition de l'ordre du micromètre. Cette séparation d'échelle rend l'utilisation d'une simulation directe très coûteuse, voire même inaccessible actuellement.

Les simulations existantes s'appuient sur des méthodes dites d'homogénéisation permettant de représenter le comportement des matériaux hétérogènes par des modèles homogènes. Plusieurs approches ont été développées dans la littérature.

Les méthodes analytiques de la communauté de la mécanique considèrent une microstructure simplifiée et fournissent des approximations analytiques des propriétés effectives, voire au mieux de certaines quantités moyennes par phase pour les méthodes dites par "champs moyens", sans avoir à mailler la microstructure.

Pour considérer également les variations locales, des méthodes d'homogénéisation numérique, dites à "champs complets", sont utilisées. Ces approches reposent sur des calculs de microstructures qui s'effectuent en pratique sur des petits éléments de volumes, appelés VER pour Volume Élémentaire Représentatif, qui se veulent caractéristiques de la microstructure. Pour réduire le temps de calcul de ces méthodes, tout en représentant les champs locaux, la tendance actuelle est au développement d'approches basées sur des techniques de réduction de l'ordre du modèle ou d'intelligence artificielle.

La communauté mathématique élabore également des techniques d'homogénéisation, majoritairement basées sur des développements asymptotiques à double échelle permettant d'obtenir une solution homogénéisée et des correcteurs rendant compte des fluctuations microscopiques, à partir de calculs de VER sur des microstructures périodiques.

Lors de l'irradiation en réacteur, les chargements, géométries et propriétés du combustible nucléaire varient fortement au cours du temps ce qui rend compliqué l'élaboration de lois analytiques. Ainsi, les méthodes de type Éléments Finis multiniveaux apparaissent particulièrement adaptées. Elles consistent à calculer le comportement effectif à la volée via des calculs couplés multiéchelles d'homogénéisation numérique où le calcul à l'échelle macroscopique appelle des calculs microscopiques hétérogènes sur VER. Ainsi, aucune loi constitutive n'est nécessaire à

l'échelle macroscopique. Ces approches sont donc considérées comme des approches de référence. De plus, ces méthodes peuvent bénéficier des avancées technologiques sur les supercalculateurs puisque les calculs sur VER sont parallélisables.

Cette thèse s'inscrit dans le cadre de la modélisation thermo-mécanique avancée des combustibles nucléaires par des techniques Éléments Finis multiniveaux de type EF² (Éléments Finis au carré).

Le premier objectif est d'identifier certains nouveaux paramètres importants de la microstructure pour la génération des VER, à savoir notamment la proximité des inclusions. Ensuite, afin de réduire les temps de simulation des calculs microscopiques, tout en conservant l'approche de référence, nous travaillons sur l'amélioration de la précision des solutions sur VER obtenues avec des conditions aux limites de Dirichlet. En effet, des conditions aux limites dites périodiques sont généralement utilisées pour obtenir des solutions précises mais au prix d'un coût de calcul plus important. Enfin, nous analysons et implémentons le jeu d'équations à résoudre aux différentes échelles afin de prendre correctement en compte les variations locales de solution dues à un terme source dépendant des hétérogénéités.

Les modèles et méthodes numériques développés dans ce manuscrit se veulent génériques et donc applicables à tout composite de type matrice-inclusions sphériques, dépassant ainsi le cadre des combustibles nucléaires.

Ces travaux de recherche utilisent et participent au développement de la plateforme PLEIADES¹, plateforme de simulation multiphysique et multiéchelle du comportement des combustibles nucléaires sous irradiation en situation normale, incidentelle ou accidentelle, co-développée dans le cadre de l'institut tripartite composé du CEA, d'EDF et de Framatome. En particulier, cette thèse a été financée par le projet CRAYON de l'institut tripartite.

Par ailleurs, ces travaux s'inscrivent dans le cadre d'une collaboration entre le CEA de Cadarache et le Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique, à travers le laboratoire commun MISTRAL (Modelling Inspection and characterization of materials and STRuctures for Advanced Low carbon energies) entre le CEA, le CNRS, Aix-Marseille Université et l'École Centrale Marseille.

1. Plateforme Logicielle pour les Éléments Irradiés dans les Assemblages en Démonstration, en Expérimentation ou en Service

Chapitre 1

Contexte et objectifs

Ce chapitre positionne les travaux de thèse dans un contexte industriel lié à la simulation du comportement du combustible nucléaire recyclé. Il s'agit alors de dégager une méthode numérique permettant d'obtenir une simulation multiéchelle thermo-mécanique de référence de ce matériau. Les différents enjeux de cette thèse sont ensuite élaborés.

Sommaire

1.1. Contexte industriel	20
1.1.1. Réacteur à Eau Pressurisée	20
1.1.2. Crayon et pastille combustible	21
1.1.3. Comportement du combustible MOX sous irradiation	23
1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation	24
1.2.1. Relation de changement d'échelle	25
1.2.2. Les approches d'homogénéisation analytique	27
1.2.3. Les approches d'homogénéisation numérique	31
1.2.4. Les approches Éléments Finis multiniveaux	36
1.2.5. Modélisation hétérogène du combustible nucléaire recyclé	39
1.3. Contribution de la thèse	40
1.3.1. Identification de nouveaux paramètres importants de la microstructure	41
1.3.2. L'Étape de localisation	41
1.3.3. Méthode EF ² appliquée à la thermique avec terme source	42

1.1. Contexte industriel

La part du nucléaire en France est élevée avec 63 % d'électricité produite en 2022 selon le Réseau de Transport d'Électricité¹. Le pays est donc fortement axé sur cette industrie et le projet de construction de nouveaux réacteurs confirme cette stratégie pour les années à venir. L'énergie nucléaire est très attractive grâce à sa faible émission de CO₂, mais aussi à sa capacité à être pilotable. Associée à des énergies renouvelables, qui sont généralement intermittentes et difficilement stockables, elle permet un mix électrique décarboné.

La sécurité des centrales nucléaires est au cœur de nombreux débats. Les risques d'accidents majeurs comme ceux de Fukushima (Japon) en 2011 ou de Tchernobyl (Ukraine) en 1986 suscitent des inquiétudes quant aux conséquences pour la population et l'environnement. Il est donc primordial de maîtriser les risques associés à cette énergie lors de la conception et l'exploitation des centrales et durant tout le cycle du combustible nucléaire.

Par conséquent, la compréhension de tous les phénomènes physiques mis en jeu est fondamentale. Le coût financier, voire la difficulté d'expérimenter dans leur globalité certains événements notamment les situations accidentelles, rend la modélisation et la simulation numérique essentielles.

1.1.1. Réacteur à Eau Pressurisée

Le Réacteur à Eau Pressurisée (REP) est le type de réacteur nucléaire le plus couramment utilisé dans le monde. Il constitue l'essentiel du parc électro-nucléaire français. Le principe de fonctionnement de ce réacteur est illustré en Figure 1.1. Il repose sur les principaux éléments suivants :

- **Combustible nucléaire** - Le combustible utilisé dans un REP est généralement de l'uranium enrichi en U235, siège de la fission. Le combustible est disposé en assemblages (cf. Section 1.1.2 pour la description de cette structure) insérés dans la cuve du réacteur et constituant le cœur du réacteur.
- **Modération des neutrons** - Les neutrons libérés lors de la fission nucléaire sont extrêmement rapides et ne sont pas efficaces pour entretenir la réaction en chaîne des combustibles de REP. Le réacteur a besoin d'un modérateur pour ralentir ces neutrons. Dans un REP, l'eau agit comme modérateur en ralentissant les neutrons, ce qui permet de provoquer de nouvelles fissions.
- **Fluide caloporteur** - L'eau du circuit primaire sert également de fluide caloporteur (en plus d'être modérateur). Elle transporte la chaleur produite par la fission des noyaux d'uranium. L'eau est maintenue à une pression suffisamment élevée (155 bars) pour empêcher son ébullition.
- **Générateur de vapeur** - L'eau du circuit primaire transfère sa chaleur à un circuit d'eau secondaire sans qu'il y ait de mélange entre les deux. L'eau du circuit secondaire se transforme en vapeur en absorbant la chaleur.
- **Turbine** - La vapeur produite dans le circuit secondaire est dirigée vers une turbine générant de l'électricité.
- **Circuit de refroidissement** - La vapeur du circuit secondaire est ensuite refroidie par de l'eau de mer ou de rivière via un circuit tertiaire sans que les deux circuits ne se mélangent : l'eau du circuit secondaire est dès lors condensée en eau liquide avant de retourner dans

1. www.rte-france.com/actualites/bilan-electrique-2022

les générateurs de vapeur.

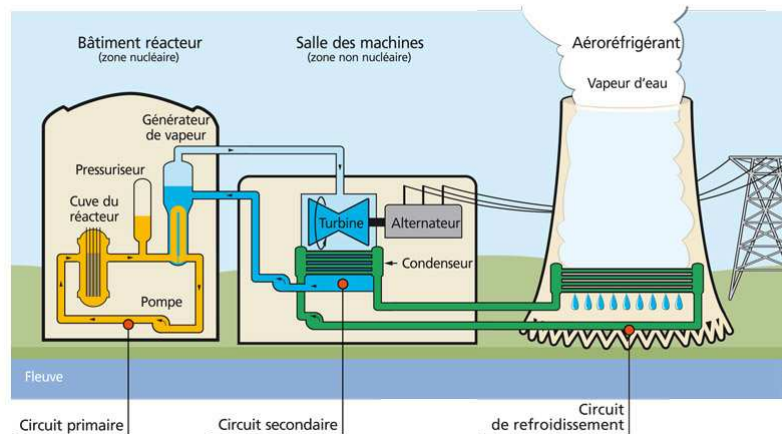


FIGURE 1.1. – Fonctionnement d'une centrale nucléaire avec aérorefrigérant. Source : IRSN

Les circuits primaire et secondaire d'un réacteur nucléaire sont des circuits fermés. La sûreté du réacteur est par ailleurs assurée par trois barrières de confinement des produits de fission. Leur rôle est de prévenir la dispersion de produits de fission potentiellement radioactifs dans l'environnement, en cas d'accident au sein du réacteur. La première barrière de confinement est la gaine cylindrique contenant les pastilles de combustible nucléaire empilées (cf. Section 1.1.2). Cette gaine est bouchonnée à chaque extrémité et parfaitement étanche. Le circuit primaire dans lequel circule le fluide caloporteur forme la deuxième barrière. Enfin, l'enceinte en béton du bâtiment réacteur (contenant la cuve du réacteur avec le combustible, le circuit primaire et les générateurs de vapeur) constitue la troisième barrière de confinement.

En cas d'incidents ou d'accidents, le système de sûreté du réacteur est conçu pour arrêter la réaction en chaîne et assurer le refroidissement du cœur du réacteur afin d'éviter tout risque d'accident grave. Un des dispositifs est composé des barres de commande absorbant les neutrons, plus ou moins introduites dans le cœur du réacteur. Elles permettent de contrôler la réaction en chaîne jusqu'à l'arrêt quasi-instantané.

1.1.2. Crayon et pastille combustible

Le cœur d'un REP d'une puissance de 900 Méga Watt électrique (MWe) est constitué de 157 assemblages (cf. Figure 1.2a) de 264 crayons de combustibles contenant chacun 300 pastilles de combustibles (cf. Figure 1.2b). Un crayon combustible, schématisé par la Figure 1.2c, est constitué d'un tube de gainage cylindrique creux en alliage de zirconium d'environ 4 m de hauteur, 9.5 mm de diamètre externe et 0.6 mm d'épaisseur, dans lequel sont insérées des pastilles cylindriques de combustible d'environ 8 mm de diamètre et 1 cm de hauteur.

Les pastilles de combustible sont généralement des céramiques de dioxyde d'uranium (UO_2) fabriquées à partir d'uranium naturel enrichi. En effet, uniquement 0.7 % de l'uranium naturel est fissile (isotope 235). Classiquement, l'uranium des combustibles UO_2 contient une proportion d'uranium 235 fissile se situant entre 3 % et 5 %, le reste étant essentiellement de l'uranium 238. Pour économiser la ressource d'uranium naturel et diminuer les déchets de matière nucléaire, la France a choisi de valoriser le plutonium 239 formé lors de l'irradiation du combustible UO_2 . Ainsi, le combustible MOX (Mixed OXide), un dioxyde mixte d'uranium et plutonium ($(U,Pu)O_2$), est obtenu par un mélange de deux poudres, l'une étant du dioxyde d'uranium appauvri et l'autre

1.1. Contexte industriel

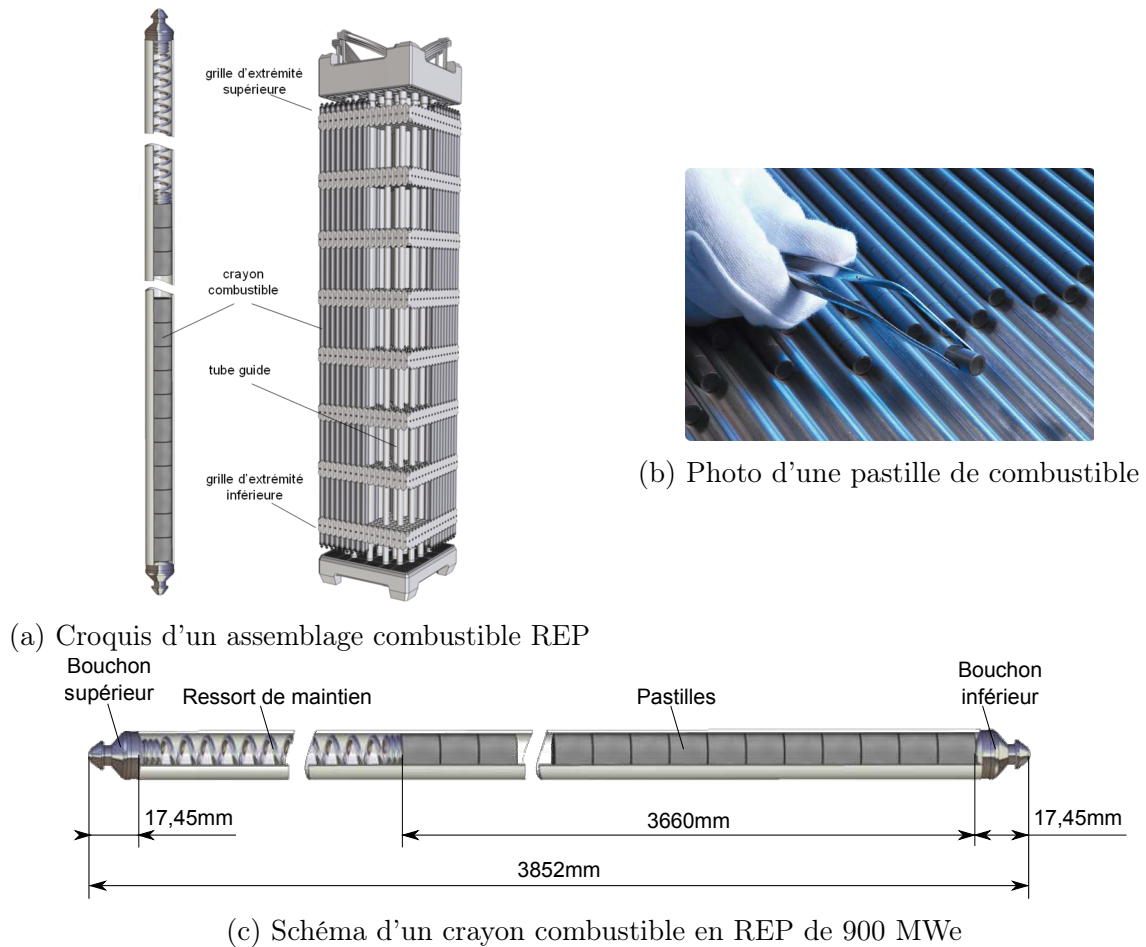


FIGURE 1.2. – Représentation d'un assemblage, d'un crayon et d'une pastille de combustible en REP. Source : Framatome.

du dioxyde de plutonium, toutes les deux obtenues à partir du retraitement du combustible nucléaire utilisé. Selon les besoins des réacteurs, la teneur en plutonium du combustible MOX se situe entre 5 % et 12,5 %. Le procédé de fabrication de ce combustible est le procédé MIMAS (acronyme anglais de MIconisation MASTer blend) décrit par la Figure 1.3. Ce procédé induit un combustible qui présente à l'étape finale une hétérogénéité en teneur de plutonium.

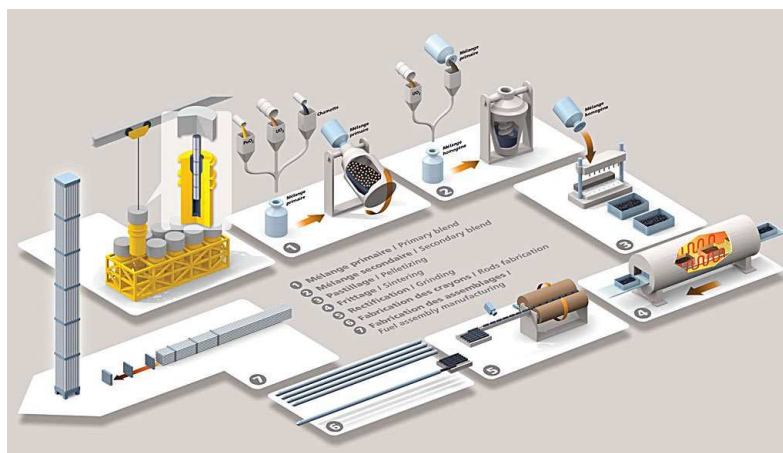


FIGURE 1.3. – Processus de fabrication du MOX MIMAS. Figure issue de [ORANO 2017].

1.1.3. Comportement du combustible MOX sous irradiation

Au sein des combustibles MOX MIMAS actuels nous distinguons classiquement trois phases, visibles sur la Figure 1.4, correspondant à des teneurs massiques en plutonium différentes. Le MOX MIMAS peut ainsi être représenté par une microstructure aléatoire de type matrice-inclusion [LARGENTON 2012] avec une phase d’enrobage à teneur modérée en plutonium (autour de 10 %) dans laquelle sont distribués des amas plutonifères (25 % à 30 % de teneur en plutonium, fraction volumique : environ 10 %) et des amas uranifères à faible teneur en plutonium (inférieure à 1 %, fraction volumique : environ 30 %). Ces données sont valables pour des pastilles à haute teneur en plutonium. Des travaux récents ont par ailleurs permis d’améliorer encore cette description [EL ABDI 2021].

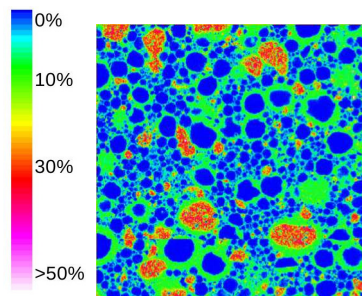


FIGURE 1.4. – Teneur en plutonium dans la microstructure du MOX, image microsonde issue de [OUDINET et al. 2008]

La teneur en matière fissile étant différente au sein des phases du combustible MOX, celles-ci évoluent localement différemment sous irradiation en fonctionnement normal, en conditions incidentelles et accidentelles, et ce tant des points de vue neutronique, thermo-mécanique et physico-chimique. Dans les codes industriels de simulation du comportement thermo-mécanique de ces combustibles, l’utilisation d’une approche homogène considérant une seule phase de teneur moyenne en plutonium est validée pour prédire les grandeurs macroscopiques d’intérêt pour les études de sûreté (comparées aux mesures expérimentales sur crayons combustibles MOX) [GEORGENTHUM et al. 2014; BOULORÉ et al. 2017]. Néanmoins, en cas de volonté de connaître ce qui se passe localement au sein de chacune des phases des combustibles MOX, d’évaluer l’interaction entre ces phases au cours de l’irradiation et de prédire plus précisément les grandeurs locales mesurées au sein de celles-ci, il est intéressant de développer des approches numériques permettant de capter ces phénomènes locaux et plus précisément en conditions accidentelles. Un exemple d’intérêt est celui d’un accident d’Éjection D’une Grappe de commande (EDG) dans un REP, accident plus connu sous l’acronyme anglais Reactivity Initiated Accident (RIA).

En effet, lors d’un pulse RIA, le combustible UO_2 suit un comportement élasto-viscoplastique non-linéaire et subit sur sa zone périphérique une décohésion des joints de grains par endommagement ductile. Cette zone de décohésion des joints de grains est d’autant plus importante radialement dans le combustible que la largeur du pulse est réduite et que l’énergie déposée y est conséquente [PAPIN et al. 2006; PAPIN et al. 2007]. L’ensemble de ces affirmations restent valables pour le MOX. Cependant, l’hétérogénéité en teneur plutonium au sein du combustible MOX fait que la densité de fission locale va être différente au sein de chacune des phases de ce combustible. Ainsi, la température et les comportements thermo-mécaniques associés (dilatation thermique, déformation élasto-viscoplastique, endommagement,...) vont également varier différemment selon les phases du MOX. Du point de vue de la R&D, il est donc intéressant

de disposer d'une méthode numérique permettant d'étudier et de quantifier l'importance de ces phénomènes locaux au sein de la microstructure du combustible MOX.

1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation

Nous avons vu dans la section précédente que le combustible nucléaire recyclé pouvait être représenté comme un composite de type matrice-inclusion. Dans cette section, nous examinons les approches permettant de déterminer le comportement macroscopique, mais également les fluctuations locales de ce type de matériau hétérogène. La simulation du comportement mécanique ou thermique des matériaux hétérogènes est basée sur des méthodes dites d'homogénéisation, cf. Figure 1.5. En effet, des simulations directes à l'échelle de la microstructure sont souvent impossibles pour des matériaux réels. Les méthodes d'homogénéisation considèrent alors deux échelles : l'échelle macroscopique correspondant à celle du matériau dans sa globalité et l'échelle microscopique correspondant à celle des hétérogénéités. Une hypothèse fondamentale de l'homogénéisation est que la taille caractéristique des hétérogénéités soit très petite devant la taille de la structure. Afin de pouvoir considérer la structure comme un matériau homogène équivalent, de nombreuses approches représentent l'échelle microscopique par un Volume Élémentaire Représentatif (VER), cf. Figure 1.5. Cette notion sera détaillée en Section 1.2.3.

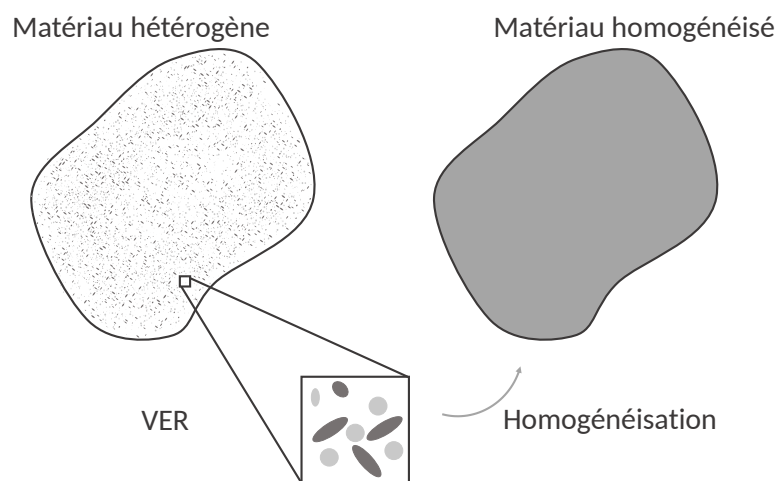


FIGURE 1.5. – Principe de l'homogénéisation. Figure issue de [RAMIÈRE 2021].

Plusieurs grands types de méthodes d'homogénéisation peuvent être distingués et sont particulièrement bien expliqués dans ces articles de revue récents [SAEB et al. 2016 ; GIERDEN et al. 2022]. Nous détaillons dans la suite les principales approches utiles pour la suite du manuscrit.

Par ailleurs, nous présentons ces approches dans un cadre mécanique. L'application à la thermique est très similaire en considérant les équivalences comportement effectif versus conductivité effective, déformation versus gradient, contrainte versus flux. La particularité de la thermique repose sur le fait que la variable primale (température) sur la microstructure est souvent d'intérêt. Ce point sera détaillé en Section 1.3.3 et surtout au Chapitre 4.

1.2.1. Relation de changement d'échelle

Dans ce manuscrit, nous adoptons la notation qui consiste à souligner un tenseur autant de fois que son ordre.

Nous avons vu précédemment que deux échelles étaient impliquées dans le processus d'homogénéisation. Nous notons $\underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{E}}$ les tenseurs de contraintes et de déformations macroscopiques (homogènes) et $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ les tenseurs de contraintes et déformations microscopiques (locaux). L'étape d'homogénéisation ou passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique, cf. Figure 1.6, se fait en considérant des moyennes volumiques sur un VER :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle, \quad \underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle \quad (1.1)$$

avec l'opérateur de moyenne volumique d'une quantité \bullet sur le VER ω défini par :

$$\langle \bullet \rangle = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \bullet \, dV \quad (1.2)$$

où $|\omega|$ est la mesure de ω .

L'étape de localisation permet de passer de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique, cf. Figure 1.6. Elle passe par la définition des tenseurs de localisation des déformations $\underline{\underline{A}}$ et des contraintes $\underline{\underline{B}}$:

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(x) = \underline{\underline{A}}(x) : \underline{\underline{E}}, \quad \underline{\underline{\sigma}}(x) = \underline{\underline{B}}(x) : \underline{\underline{\Sigma}} \quad (1.3)$$

avec $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$ des tenseurs d'ordre 4 vérifiant :

$$\langle \underline{\underline{A}} \rangle = \langle \underline{\underline{B}} \rangle = \underline{\underline{Id}} \quad (1.4)$$

où $\underline{\underline{Id}}$ est le tenseur identité d'ordre 4.

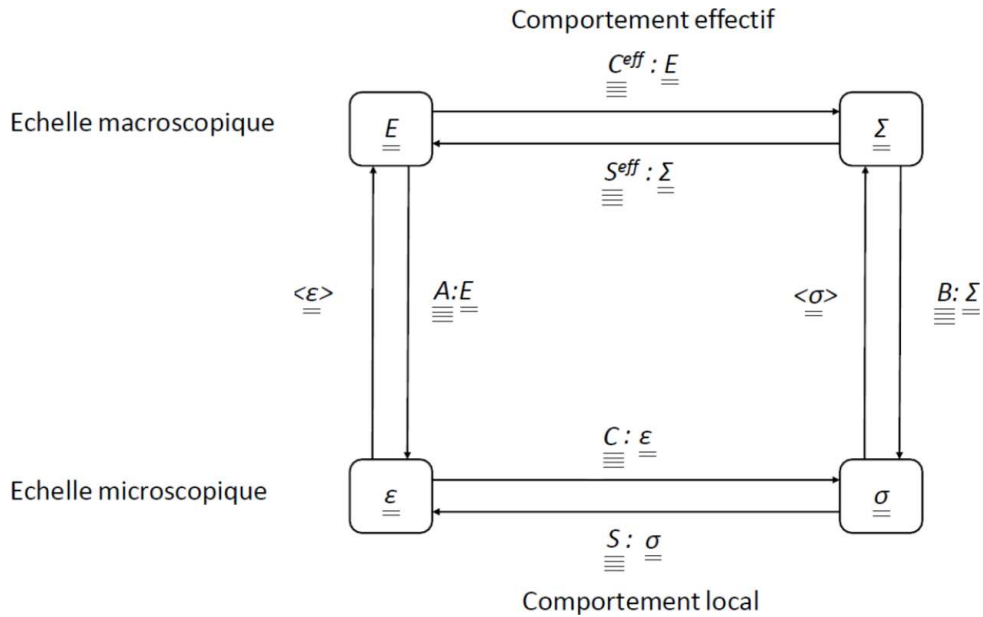


FIGURE 1.6. – Principe de changement d'échelle en homogénéisation linéaire

1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation

Lorsque le comportement local des hétérogénéités est supposé élastique linéaire :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (1.5)$$

avec $\underline{\underline{C}}$ le tenseur des modules élastiques (hétérogène par phase), le tenseur $\underline{\underline{C}}^{eff}$ des rigidités effectives s'obtient par la relation :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{E}} \rangle = \langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{A}} \rangle : \underline{\underline{E}} \Rightarrow \underline{\underline{C}}^{eff} = \langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{A}} \rangle \quad (1.6)$$

Par une démarche similaire, il est possible d'obtenir le tenseur des souplesses effectif $\underline{\underline{S}}^{eff}$ à partir du tenseur des souplesses élastiques $\underline{\underline{S}}$ ($\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\sigma}}$) et du tenseur de localisation $\underline{\underline{B}}$. Notons que $\underline{\underline{C}}^{eff} = \left(\underline{\underline{S}}^{eff} \right)^{-1}$

En considérant les symétries des tenseurs $\underline{\underline{C}}^{eff}$, $\underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{E}}$, on peut en réduire l'ordre en adoptant les notations suivantes :

$$\underline{\underline{C}}^{eff} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \sigma \rangle = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{33} \\ \Sigma_{12} \\ \Sigma_{13} \\ \Sigma_{23} \end{pmatrix}, \quad (1.8) \quad \underline{\underline{E}} = \langle \varepsilon \rangle = \begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ E_{12} \\ E_{13} \\ E_{23} \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Lorsque le matériau a un comportement macroscopique isotrope, le tenseur, symétrique, des modules élastiques $\underline{\underline{C}}_{isotrope}^{eff}$ s'écrit :

$$\underline{\underline{C}}_{isotrope}^{eff} = \begin{pmatrix} k + \frac{4}{3}\mu & k - \frac{2}{3}\mu & k - \frac{2}{3}\mu & 0 & 0 & 0 \\ & k + \frac{4}{3}\mu & k - \frac{2}{3}\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & k + \frac{4}{3}\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2\mu & 0 & 0 \\ & & & & 2\mu & 0 \\ & & & & & 2\mu \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

avec k le module de compressibilité et μ le module de cisaillement.

En mécanique, le comportement élastique est souvent donné par le couple module de Young et

coefficient de poisson (E, ν) où les relations suivantes le relie au couple (k, μ) :

$$k = \frac{E}{3(1 - 2\nu)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}. \quad (1.11)$$

Par la suite, nous détaillons des approches analytiques ou numériques permettant notamment d'estimer les modules effectifs du matériau homogène. Nous distinguons la notion de propriétés effectives et apparentes. Les propriétés effectives sont des propriétés qui représentent le comportement théorique du matériau homogène équivalent. Les propriétés apparentes sont des propriétés homogènes obtenues à partir d'une modélisation du matériau hétérogène.

1.2.2. Les approches d'homogénéisation analytique

Les communautés de la mécanique et des mathématiques appliquées nomment "approches analytiques" des méthodes bien distinctes.

Pour la communauté de la micromécanique, les approches analytiques d'homogénéisation [HERSHEY 1954; HASHIN et al. 1963; MORI et al. 1973; CHRISTENSEN et al. 1979] visent à construire des approximations analytiques du comportement mécanique du milieu homogène équivalent. L'avantage majeur de ces approches réside dans leur capacité à modéliser l'influence de certains paramètres microstructuraux à l'échelle macroscopique, sans représenter explicitement la microstructure (discrétisation et maillage), ce qui se traduit par une considérable réduction du temps de calcul.

Les premiers développements sont les bornes de Voigt et Reuss encadrant les propriétés effectives, mais souvent très éloignées des valeurs réelles. Les travaux d'Eshelby [ESHESBY 1957] sur un matériau infini et homogène dans lequel une inclusion ellipsoïdale est soumise à une déformation libre de contrainte a amené de nombreuses améliorations, notamment les bornes de Hashin-Shtrikman [HASHIN et al. 1963] qui encadrent plus précisément les propriétés effectives. Ces travaux sont les bases des approches par "champs moyens", supposant les champs de contrainte et de déformation uniformes par phases. On peut notamment citer les estimations de Mori-Tanaka [MORI et al. 1973] et le schéma auto-cohérent [HILL 1965]. Ces différentes méthodes sont formulées par la suite.

Cependant, ces approximations analytiques ne sont disponibles que pour des microstructures spécifiques. Elles permettent d'obtenir des propriétés apparentes, et au mieux des estimations moyennes par phase (moments d'ordre 1 et 2) pour les approches dites à champs moyens [BERRYMAN et al. 1996]. La prédiction de la localisation des déformations ou des contraintes n'est pas possible. De plus, elles demandent des développements substantiels, difficile à atteindre, pour modéliser certains comportements complexes et non linéaires tels que le fluage ou la fissuration [PONTE CASTAÑEDA 2016].

A titre d'exemple, les différentes formulations sont explicitées dans les sections suivantes pour un matériau biphasé de type matrice-inclusion (i.e. une matrice contenant des inclusions ayant le même comportement mécanique entre elles).

1.2.2.1. Les bornes de Voigt et Reuss

Les approximations de Voigt et Reuss permettent d'encadrer les propriétés effectives de la structure. L'approximation de Voigt se base sur une hypothèse de déformations uniformes (homogènes) dans la microstructure. Ainsi, le tenseur de localisation $\underline{\underline{A}}$ (cf. équation (1.3)) est

1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation

égal à l'identité. On réalise alors une estimation par excès des propriétés effectives, qui correspond à la moyenne arithmétique des modules de compressibilité et de cisaillement. L'approximation de Reuss suppose cette fois des contraintes homogènes dans la microstructure et donc un tenseur de localisation $\underline{\underline{B}}$ (cf. équation (1.3)) égal à l'identité. On réalise ainsi une estimation par défaut, qui correspond à faire une moyenne harmonique. Nous avons alors par exemple les relations (1.12) et (1.13) comme encadrement pour les modules effectifs de compressibilité k^{eff} et de cisaillement μ^{eff} dans le cas d'un matériau biphasé de type matrice-inclusion :

$$k^{Reuss} = \frac{1}{\frac{f_v}{k_1} + \frac{1-f_v}{k_2}} \leq k^{eff} \leq k^{Voigt} = f_v k_1 + (1-f_v)k_2 \quad (1.12)$$

$$\mu^{Reuss} = \frac{1}{\frac{f_v}{\mu_1} + \frac{1-f_v}{\mu_2}} \leq \mu^{eff} \leq \mu^{Voigt} = f_v \mu_1 + (1-f_v)\mu_2 \quad (1.13)$$

avec les indices $i = 1, 2$ correspondants respectivement aux phases inclusionnaire et matricielle, et f_v la fraction volumique d'inclusions.

1.2.2.2. Les bornes de Hashin–Shtrikman

Les bornes de Hashin–Shtrikman [HASHIN et al. 1963] s'appliquent spécifiquement aux composites biphasés et supposent un ordre sur les propriétés ($(k_1 - k_2)(\mu_1 - \mu_2) \geq 0$). Elles permettent un meilleur encadrement que les bornes de Voigt et Reuss. Elles utilisent un milieu isotrope de référence défini par (k_0, μ_0) :

$$k^{Reuss} \leq k^{HS}(\min(\mu_1, \mu_2)) \leq k^{eff} \leq k^{HS}(\max(\mu_1, \mu_2)) \leq k^{Voigt} \quad (1.14)$$

$$\mu^{Reuss} \leq \mu^{HS}(\min(k_1, k_2), \min(\mu_1, \mu_2)) \leq \mu^{eff} \leq \mu^{HS}(\max(k_1, k_2), \max(\mu_1, \mu_2)) \leq \mu^{Voigt} \quad (1.15)$$

avec

$$\begin{cases} k^{HS}(\mu_0) = k_2 + f_v \frac{k_1 - k_2}{1 + (1-f_v) \frac{k_1 - k_2}{\tilde{k} + k_2}} \\ \mu^{HS}(k_0, \mu_0) = \mu_2 + f_v \frac{\mu_1 - \mu_2}{1 + (1-f_v) \frac{\mu_1 - \mu_2}{\tilde{\mu} + \mu_2}} \end{cases} \quad (1.16)$$

$$\text{avec } \tilde{k} = \frac{4}{3}\mu_0 \text{ et } \tilde{\mu} = \frac{\mu_0}{6} \frac{9k_0 + 8\mu_0}{k_0 + 2\mu_0}.$$

Dans le cas où les propriétés ne sont pas ordonnées, un développement est proposé par [WALPOLE 1966].

1.2.2.3. Les estimations de Mori–Tanaka

La méthode d'homogénéisation de Mori–Tanaka (MT) [MORI et al. 1973], supposant les inclusions sphériques noyées dans la matrice, est utilisée pour estimer les propriétés effectives des composites de type matrice-inclusion dont les fractions volumiques d'inclusions sont modérées (cf. milieu dilué). Elles sont déduites des estimations de Hashin–Shtrikman (cf. équations (1.16)) en prenant la matrice comme milieu de référence. Les propriétés obtenues avec le schéma de MT correspondent donc naturellement à une des bornes de Hashin–Shtrikman (cf. équations (1.14) et (1.15)) selon la rigidité de la matrice par rapport à celle des inclusions. Ces estimations

peuvent être établies pour un nombre de phases quelconque [MASSON et al. 2020]. Les relations suivantes peuvent être obtenues pour un cas biphasé matrice-inclusion :

$$\left\{ \begin{array}{l} k^{MT} = k_2 + f_v \frac{k_1 - k_2}{1 + (1 - f_v) \frac{k_1 - k_2}{\frac{4}{3}\mu_2 + k_2}} \\ \mu^{MT} = \mu_2 + f_v \frac{\mu_1 - \mu_2}{1 + (1 - f_v) \frac{\mu_1 - \mu_2}{\tilde{\mu} + \mu_2}} \end{array} \right. \text{ avec } \tilde{\mu} = \frac{\mu_2}{6} \frac{9k_2 + 8\mu_2}{k_2 + 2\mu_2}. \quad (1.17)$$

Comme toute estimation analytique, cette loi a une gamme d'utilisation. En particulier, la fraction volumique des inclusions ne doit pas être trop élevée [CHRISTENSEN 1990], typiquement $f_v < 40\%$. Comme toute approche par champ moyen, l'approche MT permet également d'obtenir des estimations du champ de contrainte moyen par phase, aussi appelé premier moment de la contrainte. Elles seront détaillées en Section 2.3.2.

1.2.2.4. Le schéma auto-cohérent

Le schéma auto-cohérent (AC) [HERSHEY 1954 ; HILL 1965] suppose que les inclusions sont noyées dans le composite homogénéisé. On peut les déduire des estimations de Hashin–Shtrikman (cf. équations (1.16)) en prenant le milieu homogénéisé comme milieu de référence. Ainsi, un problème non linéaire doit être résolu. Ce schéma sera davantage utilisé pour des hautes fractions volumiques d'inclusions, ainsi que pour des polycristaux. Les estimations suivantes peuvent être obtenues pour des inclusions sphériques [HILL 1965] :

$$\left\{ \begin{array}{l} k^{AC} = k_2 + f_v \frac{k_1 - k_2}{1 + \frac{\alpha_{SE}^{AC}}{k^{AC}} (k_1 - k^{AC})} \\ \mu^{AC} = \mu_2 + f_v \frac{\mu_1 - \mu_2}{1 + \frac{\beta_{SE}^{AC}}{\mu^{AC}} (\mu_1 - \mu^{AC})} \end{array} \right. \quad (1.18)$$

où α_{SE}^{AC} et β_{SE}^{AC} , définis par l'équation (1.19), sont les parties sphérique et déviatorique du tenseur d'Eshelby évalué avec les propriétés homogénéisées.

$$\alpha_{SE}^{AC} = \frac{3k^{AC}}{3k^{AC} + 4\mu^{AC}}, \quad \beta_{SE}^{AC} = \frac{6(k^{AC} + 2\mu^{AC})}{5(3k^{AC} + 4\mu^{AC})} \quad (1.19)$$

Cette méthode permet également de formuler des estimations moyennes par phase.

1.2.2.5. Comparaison des approches analytiques

En bilan, la Figure 1.7 compare les bornes de Voigt et Reuss, les estimations de Mori–Tanaka, le schéma auto-cohérent et la méthode "diluée". Cette dernière est issue directement des travaux d'Eshelby et est valide pour une fraction volumique d'inclusions très faible dans le composite. Ces approches analytiques sont comparées à une méthode numérique de référence (cf. Section 1.2.3).

1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation

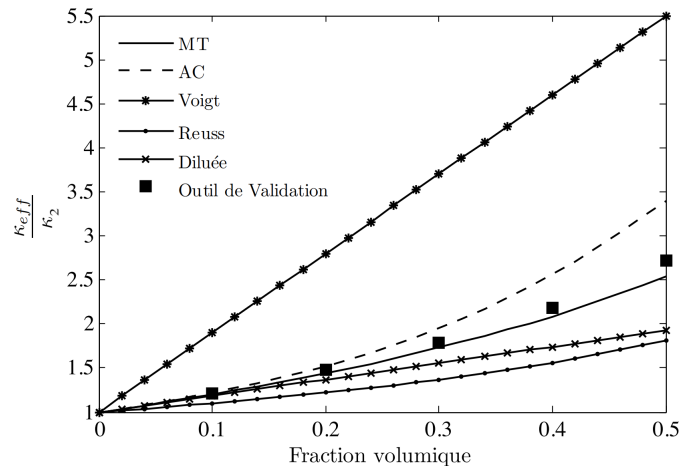


FIGURE 1.7. – Comparaison des différents estimateurs en fonction de la fraction volumique pour $k_1 = \mu_1 = 10$ et $k_2 = \mu_2 = 1$. Les points “Outil de Validation” représentent la solution obtenue par une méthode numérique. Figure issue de [*Cours de Martin Lévesque*]

1.2.2.6. Développement asymptotique à double échelle

Pour la communauté des mathématiques appliquées, les approches analytiques d’homogénéisation [BENSOUSSAN et al. 1978 ; SANCHEZ-PALENCIA 1980 ; ARTOLA et al. 1982 ; FRANCFORT et al. 1986 ; BAKHVALOV et al. 1989 ; TARTAR 1990 ; ALLAIRE 1992 ; ALLAIRE 2010] conduisent à obtenir le comportement du milieu homogénéisé enrichi de correcteurs permettant d’estimer les fluctuations microscopiques. Ces approches sont construites à partir de développements asymptotiques de la solution du type :

$$\underline{u}_\varepsilon(\underline{x}, \underline{y}) = \underline{u}_0(\underline{x}, \underline{y}) + \varepsilon \underline{u}_1(\underline{x}, \underline{y}) + \varepsilon^2 \underline{u}_2(\underline{x}, \underline{y}) + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad (1.20)$$

avec \underline{x} la composante à grande échelle, \underline{y} la composante à petite échelle relative à la cellule périodique, $\varepsilon = \frac{\underline{x}}{\underline{y}}$ la taille caractéristique de la microstructure, $\underline{u}_\varepsilon$ la solution directe multiéchelle et \underline{u}_i des fonctions périodiques par rapport à \underline{y} sur le VER.

Les dérivées spatiales séparent alors les composantes \underline{x} et \underline{y} :

$$\underline{\nabla} = \underline{\nabla}_x + \frac{1}{\varepsilon} \underline{\nabla}_y \quad (1.21)$$

En insérant les relations obtenues dans le problème microscopique, il est possible d’identifier les différents ordres de la solution. Pour des comportements linéaires et des microstructures périodiques, une convergence à double échelle peut être démontrée rigoureusement avec des taux de convergence associés [BENSOUSSAN et al. 1978 ; ALLAIRE 1992 ; ALLAIRE 2010]. Il est à noter, que contrairement à l’homogénéisation analytique en micromécanique, le comportement homogénéisé et les correcteurs sont évalués à partir de calculs numériques sur des VERs. En ce sens, ces méthodes se rapprochent des techniques d’homogénéisation numériques décrites en section suivante.

1.2.3. Les approches d'homogénéisation numérique

Les approches d'homogénéisation numérique, dites à "champs complets", reposent sur des calculs de microstructure sur des VER. Le comportement apparent est alors déterminé à partir de moyennes volumiques sur le VER. Le comportement local et tout type de moyenne par phase sont également accessibles. Ainsi, dans cette section nous expliquons comment générer un VER, puis les différentes stratégies pour obtenir les propriétés apparentes et les champs locaux.

1.2.3.1. Génération d'un VER

Le VER est choisi à l'échelle de la microstructure pour pouvoir représenter les hétérogénéités. Il est de taille caractéristique l petite par rapport à celle de la macrostructure L , afin de pouvoir considérer la structure comme un milieu homogène. Dans le cas des milieux périodiques, le choix du VER est le motif périodique. La construction du VER est plus complexe pour des milieux aléatoires : en notant d la taille caractéristique des hétérogénéités, la taille du VER doit être suffisamment grande devant d afin de permettre une représentation statistique correcte de la microstructure. Ainsi nous devons avoir la relation (1.22), illustrée par la Figure 1.8.

$$d \ll l \ll L \quad (1.22)$$

En homogénéisation numérique, il est fréquent de chercher une convergence en l des propriétés apparentes, calculées sur le VER (cf. Section 1.2.3.3), vers les propriétés effectives, voir par exemple [KANIT et al. 2003]. Il existe de multiples définitions de la notion de VER, certaines sont basées sur cette taille de VER à convergence [EL MOUMEN et al. 2021]. En général, les VER sont de forme cubique (en 3D) ou carré (en 2D), mais d'autres formes peuvent exister, notamment dans le cas des polycristaux [KIM et al. 2003 ; GRASSET-BOURDEL et al. 2011].

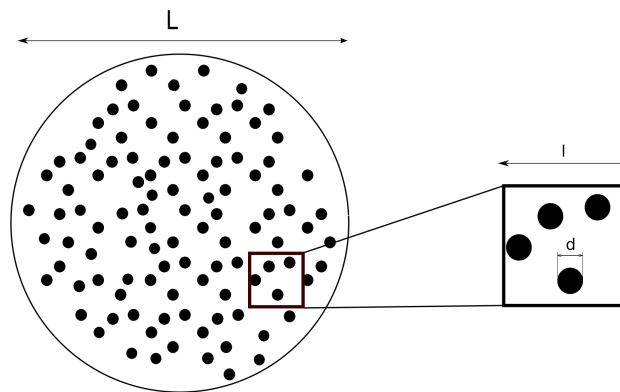


FIGURE 1.8. – Échelles de représentation pour un milieu aléatoire. Figure issue de [BLANC 2009]

Une première stratégie de génération de VER de milieu aléatoire, consiste à exploiter des images microsondes et permet la description la plus fidèle de la microstructure. Une autre stratégie se base sur des lois de tirage d'inclusions permettant de retrouver des propriétés morphologiques et physiques similaires aux microstructures réelles. Il existe de nombreuses procédures pour générer des inclusions sphériques avec une répartition aléatoire [TORQUATO 2002]. La procédure de génération la plus courante est la procédure d'addition séquentielle aléatoire (RSA, acronyme anglais de Random Sequential Addition) [COOPER 1988]. Ce processus tire successivement et uniformément dans le VER les coordonnées des centres des inclusions en

1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation

rejetant les centres conduisant à des sphères s'interpénétrant. Dans le cadre d'un processus de Poisson, le chevauchement des sphères est autorisé. Une distance tampon minimale s_{min} peut par ailleurs être imposée entre les sphères, notamment pour des raisons de maillage. Cependant, la fraction volumique maximale qui peut être obtenue par la procédure RSA est assez limitée. Pour des sphères monodispersées, la densité maximale est d'environ 38,5 % [COOPER 1988] en 3D, ce qui n'est pas suffisant pour certaines applications. C'est pourquoi d'autres méthodes de tirage ont été introduites : beaucoup sont basées sur des stratégies de réarrangement collectif [LUBACHEVSKY et al. 1990 ; WILLIAMS et al. 2003]. D'autres méthodes existent comme les tessellation de Voronoï ou de Laguerre, mais sont généralement dédiées aux polycristaux.

Lors de la génération de VER cubiques munis d'inclusions sphériques, nous utilisons comme donnée d'entrée un fuseau diamétral de la phase inclusionnaire ainsi que la fraction volumique pour chaque population d'amas. Il nous faut alors convertir la fraction volumique f_{v_k} de la population k en un nombre de sphères N_k :

$$N_k = E \left(\frac{3f_{v_k}l^3}{4\pi r_k^3} \right) \quad (1.23)$$

avec r_k le rayon des inclusions et $E()$ la partie entière inférieure.

Enfin dans la volonté d'obtenir un VER dit périodisé, si l'inclusion retenue intersecte le bord, alors les parties qui en sortent sont reproduites dans le VER par périodicité. Cette propriété est notamment profitable pour les conditions aux limites périodiques (cf. Section 1.2.3.2). Pour des VER s'appuyant sur des images microsondes, il peut être possible de modifier l'emplacement de certaines inclusions pour obtenir un VER périodisé.

Un exemple de VER étudié dans cette thèse est présenté à la Section 1.3. Les procédures de tirage et de maillage des VER utilisées dans ce manuscrit sont décrites à la Section 2.2.

1.2.3.2. Conditions aux limites du VER

Pour déterminer le comportement local sur le VER, il faut imposer des conditions aux limites (BC, acronyme anglais de Boundary Conditions) au bord du VER. Trois grands type de BC existent [BORNERT et al. 2001 ; MIEHE et al. 2002 ; KANIT et al. 2003]. Les deux premières sont des conditions dites homogènes au contour alors que la dernière est dite périodique, car initialement introduite pour les milieux périodiques.

- Les conditions aux limites de déformation uniforme (USBC, acronyme anglais de Uniform Strain Boundary Conditions) de type Dirichlet, sont parfois également appelées conditions aux limites cinématiquement uniformes (KUBC, acronyme anglais de Kinematic Uniform Boundary Conditions) ou encore conditions aux limites de déformation homogène au contour par la communauté française. Le déplacement microscopique \underline{u} est imposé aux points \underline{x} du bord $\partial\omega$ du VER tel que :

$$\underline{u}(\underline{x}) = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{x} \quad \text{sur } \partial\omega \quad (1.24)$$

avec $\underline{\underline{E}}$ le tenseur des déformations macroscopiques.

- Les conditions aux limites statiquement uniformes (SUBC, acronyme anglais de Static Uniform Boundary Conditions) de type Neumann, sont parfois également appelées conditions aux limites de contrainte homogène au contour par la communauté française. Elles

permettent d'imposer une condition sur le tenseur des contraintes microscopiques $\underline{\underline{\sigma}}$:

$$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} = \underline{\underline{\Sigma}} \cdot \underline{n} \quad \text{sur } \partial\omega \quad (1.25)$$

avec $\underline{\underline{\Sigma}}$ le tenseur des contraintes macroscopique. Pour éviter les mouvements de corps rigide, un point du VER est généralement bloqué par une condition de Dirichlet.

- Les conditions aux limites périodiques (PBC, acronyme anglais de Periodic Boundary Conditions) consistent à appliquer le déplacement suivant au bord du VER :

$$\underline{u}(\underline{x}) = \underline{E} \cdot \underline{x} + \underline{v}(\underline{x}) \quad \text{sur } \partial\omega \quad (1.26)$$

avec \underline{v} un déplacement l -périodique, c'est-à-dire des valeurs identiques pour deux points associés sur des faces opposées sur VER. Le vecteur de traction $\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}$ est quant à lui l -antipériodique, avec \underline{n} le vecteur normal à $\partial\omega$. Il convient de noter que les USBC peuvent être considérées comme un cas particulier des PBC avec $\underline{v} = \underline{0}$. En pratique, le déplacement périodique v est implicitement pris en compte via une relation reliant les déplacements des bords opposés du VER. En posant $(\underline{x}^+, \underline{x}^-)$ une paire de points opposés sur le bord du VER, nous avons en effet :

$$\underline{u}(\underline{x}^+) - \underline{u}(\underline{x}^-) = \underline{E} \cdot (\underline{x}^+ - \underline{x}^-) \quad (1.27)$$

étant donné la périodicité de \underline{v} . Ces conditions imposent une solution à une translation près. Pour contourner ce problème, un point du VER est généralement bloqué par une condition de Dirichlet.

Ces BC permettent de vérifier des conditions de moyennes sur le VER :

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{E} \quad \text{pour les USBC et PBC,} \quad (1.28)$$

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \underline{\underline{\Sigma}} \quad \text{pour les SUBC,} \quad (1.29)$$

et également la condition de macrohomogénéité (également appelée condition de Hill-Mandel ou lemme de Hill) [HILL 1967] :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{E}. \quad (1.30)$$

Nous nous intéressons particulièrement aux USBC et PBC, car elles sont plus adaptées à la détermination du tenseur des modules apparents $\underline{\underline{C}}^{app}$ puisqu'elles s'appuient directement sur le tenseur macroscopique des déformations \underline{E} . Une formulation pilotée en déformation est possible pour les conditions de type SUBC en imposant la contrainte de moyenne sur les déformations sur le bord du VER par le biais de multiplicateurs de Lagrange (représentant alors la traction uniforme) [MIEHE et al. 2002].

Pour de nombreux matériaux, la condition de séparation d'échelle (cf. équation (1.22)) n'est pas vérifiée et la variation de la sollicitation macroscopique peut être importante à l'échelle des hétérogénéités. Par exemple, pour des composites matrice-inclusion, de grosses hétérogénéités peuvent être présentes. Ainsi, pour déterminer un milieu effectif, il est nécessaire de considérer des méthodes d'homogénéisation d'ordre supérieur avec des conditions aux limites non-homogènes (ou non-uniformes) [KACZMARCZYK et al. 2008 ; YVONNET et al. 2020]. Un développement polynomial de Taylor est appliqué sur le déplacement macroscopique \underline{U} pour appliquer ce type de BC. A notre connaissance, uniquement des BC de Dirichlet sont possibles. L'équation (1.31)

1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation

est un exemple d'une formulation de BC quadratiques :

$$\underline{u}(\underline{x}) = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{x} + \frac{1}{2} \underline{\underline{G}} : (\underline{x} \otimes \underline{x}) \quad \text{sur } \partial\omega \quad (1.31)$$

avec $G_{ijk} = \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_k}$ le second gradient du déplacement macroscopique.

1.2.3.3. Obtention du tenseur apparent et des propriétés apparentes

Il est possible de déterminer le tenseur des rigidités apparentes $\underline{\underline{C}}^{app}$ à partir de l'équation (1.6) via deux approches :

- soit à partir du tenseur de localisation des déformations $\underline{\underline{A}}$ (cf. équation (1.3));
- soit à partir de la relation homogénéisée $\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{C}}^{app} : \underline{\underline{E}}$.

Dans les deux cas, 6 chargements unitaires en déformations $\underline{\underline{E}}$ sur le VER sont nécessaires. Ces chargements sont donnés par l'équation (1.32) en utilisant les notations réduites introduites en (1.9). En pratique, la deuxième stratégie est généralement utilisée, car elle est plus immédiate. Ainsi, pour déterminer $\underline{\underline{C}}^{app}$, on utilise des BC s'appuyant directement sur le tenseur macroscopique des déformations $\underline{\underline{E}}$ (USBC, PBC).

$$\underline{\underline{E}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

Après résolution de l'équation d'équilibre dans le VER nous obtenons, pour chacun des 6 chargements, la contrainte $\underline{\sigma}$ en tout point du VER, et en la moyennant sur le VER nous obtenons la contrainte homogène $\underline{\underline{\Sigma}}$ (cf. équation (1.1)). Cette contrainte homogénéisée nous fournit alors directement la $i^{\text{ème}}$ colonne de la matrice $\underline{\underline{C}}^{app}$, i allant de 1 à 6 et correspondant au numéro du chargement dans l'équation (1.32).

Pour déterminer les modules apparents k^{app} et μ^{app} d'un milieu isotrope, il suffit d'utiliser les coefficients de la matrice $\underline{\underline{C}}^{app}$ obtenus numériquement. Ainsi, en suivant par exemple la méthodologie décrite par [KANIT et al. 2003] en notant i l'indice de ligne, et j celui de colonne :

$$\begin{cases} k^{app} = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \left(\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 C_{ij}^{app} \right) \\ \mu^{app} = \frac{1}{3} \sum_{i=4}^6 \frac{1}{2} C_{ii}^{app} \end{cases} \quad (1.33)$$

Pour ce cas isotrope, [KANIT et al. 2003] proposent ainsi une méthode utilisant uniquement deux chargements, cf. équation (1.34) en utilisant les notations réduites. Ainsi, les propriétés apparentes peuvent être calculés par les formules (1.35).

$$\underline{E}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \underline{E}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.34) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} k^{app} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \langle \sigma_{ii} \rangle & \text{avec } \underline{E}_1 \\ \mu^{app} = \langle \sigma_{12} \rangle & \text{avec } \underline{E}_2 \end{cases} \quad (1.35)$$

De manière similaire, des formules peuvent être déduites pour des chargements en contraintes $\underline{\Sigma}$ en utilisant des BC s'appuyant directement sur le tenseur macroscopique des contraintes (SUBC). Ainsi, on peut déduire le tenseur des souplesses apparentes $\underline{\underline{S}}^{app}$ et les modules apparents à partir de ce tenseur [KANIT et al. 2003].

Pour des tailles de VER assez grandes, les propriétés apparentes obtenues via les différentes approches convergent vers les propriétés effectives et ainsi le tenseur des rigidités apparentes est égal à l'inverse du tenseur des souplesses apparentes [SAB 1992] :

$$\underline{\underline{C}}^{app} = \left(\underline{\underline{S}}^{app} \right)^{-1} = \underline{\underline{C}}^{eff} = \left(\underline{\underline{S}}^{eff} \right)^{-1}. \quad (1.36)$$

Pour des tailles de VER intermédiaires, les propriétés apparentes obtenues à partir des chargements en déformations ou en contraintes constituent des bornes du comportement effectif [HUET 1990] :

$$\left(\underline{\underline{S}}^{app} \right)^{-1} \leq \underline{\underline{C}}^{eff} \leq \underline{\underline{C}}^{app}. \quad (1.37)$$

De plus, il a été observé par de nombreux auteurs, notamment [SAB 1992; BORNERT et al. 2001; MIEHE et al. 2002; KANIT et al. 2003], que les conditions aux limites périodiques permettent d'atteindre la convergence des propriétés apparentes vers les propriétés effectives pour des VER de plus petite taille que pour des BC en chargements uniformes (USBC, SUBC). La Figure 1.9 illustre la convergence des propriétés apparentes pour les trois types de BC rappelées en Section 1.2.3.2.

Il est important de noter que pour bénéficier de la convergence avantageuse des PBC, il est nécessaire d'avoir un VER périodisé avec un maillage également périodique [EGLOFFE et al. 2014; GLORIA et al. 2015]. Ces contraintes associées à la génération du VER peuvent être difficile à obtenir pour certains milieux aléatoires ou réels.

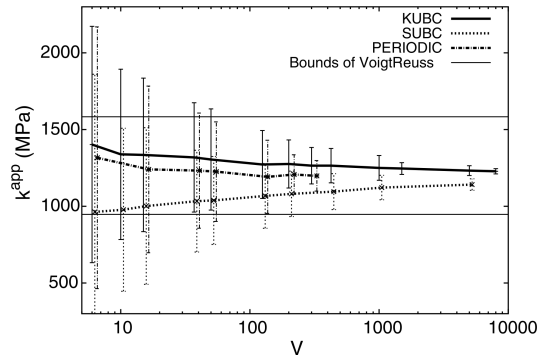


FIGURE 1.9. – Illustration de la convergence des propriétés effectives vers les propriétés apparentes pour les USBC (KUBC), PBC (PERIODIC) et SUBC. Figure issue de [KANIT et al. 2003]

1.2.4. Les approches Éléments Finis multiniveaux

Dans de nombreux matériaux réels, les chargements, géométries et propriétés sont évolutifs au cours du temps, avec des comportements non linéaires et des géométries microstructurales souvent complexes. Ainsi, la détermination de lois analytiques incrémentales est difficile, voire impossible. Dans ce cas on utilise généralement plutôt des approches Éléments Finis multiniveaux [FEYEL 1999 ; E et al. 2003 ; ABDULLE et al. 2012], qui sont basées sur l'obtention de la réponse macroscopique à la volée, à partir de calculs à "champs complets" sur des VER de la microstructure hétérogène. Ces approches fournissent donc des informations moyennes ou complètes sur l'état mécanique local de la microstructure. Ainsi, il n'est pas nécessaire de disposer de loi constitutive à l'échelle macroscopique, ce qui s'avère particulièrement bénéfique lorsqu'il faut simuler des situations avec des géométries ou des comportements pour lesquelles aucune loi analytique homogénéisée n'existe. Ces approches sont reconnues comme des approches de référence. Néanmoins, il est nécessaire de procéder à de nombreux calculs sur VER à chaque point d'intégration du maillage macroscopique, ce qui entraîne des coûts de calcul élevés, même avec les puissances de calcul actuelles.

L'article de [EIDEL et al. 2018] montre que les deux principales approches de type Éléments Finis multiniveaux, à savoir la méthode EF^2 (Éléments finis au carré) [FEYEL 1999] et la méthode des éléments finis hétérogènes et multiéchelles (FE-HMM, acronyme anglais de Finite Element - Heterogeneous Multiscale Method) [E et al. 2003], élaborées au sein de communautés scientifiques différentes (mécanique et mathématique), donnent sensiblement les mêmes résultats. Dans cette thèse, nous choisissons d'utiliser la méthode Éléments Finis au carré (EF^2) [FEYEL 1999], dont le principe est détaillé ci-dessous, car elle est bien adaptée à des études thermo-mécaniques et peu intrusive dans un code de calcul existant.

1.2.4.1. Principe de la méthode EF^2

Le principe de la méthode EF^2 est de coupler un calcul homogénéisé à l'échelle macroscopique avec des calculs locaux de microstructure, cf. Figure 1.10. A l'échelle macroscopique, un maillage de la structure (indépendant des hétérogénéités) est utilisé tandis qu'un VER est choisi pour représenter la microstructure. Les calculs locaux sont alors réalisés autour de chaque point de Gauss du maillage macroscopique. L'algorithme EF^2 consiste en un enchaînement des quatre étapes principales de l'homogénéisation (cf. Figure 1.6) de manière itérative jusqu'à convergence du champ des contraintes homogénéisées à l'échelle macroscopique :

- un calcul d'équilibre sur le maillage macroscopique qui permet d'obtenir, à partir du tenseur des contraintes homogénéisé de l'itération précédente, une estimation du tenseur des déformations macroscopiques ;
- une étape de localisation permettant de déterminer les BC (généralement de type USBC ou PBC, définies en Section 1.2.3.2) des calculs microscopiques à partir du tenseur des déformations macroscopiques ;
- des calculs sur VER utilisant une modélisation du comportement (souvent non linéaire) de la microstructure ;
- une étape d'homogénéisation permettant d'obtenir le tenseur des contraintes macroscopiques à partir des champs locaux obtenus sur la microstructure. Elle consiste généralement en une moyenne volumique des contraintes sur le VER, cf équation (1.1).

Il a été montré par [FEYEL 2003] que l'algorithme EF^2 converge numériquement quelles que soient les hypothèses choisies pour le couple localisation/homogénéisation. A la première itération

du couplage multiéchelle, le choix du tenseur du comportement homogène est arbitraire et conditionne uniquement la vitesse de convergence l’algorithme. Des propriétés homogènes obtenues par des estimateurs analytiques peuvent être utilisées pour tenter de réduire le nombre d’itération du processus EF^2 . Aux itérations suivantes, ce tenseur peut être actualisé via la matrice tangente du comportement (ou Jacobienne) déduite des calculs microscopiques. Néanmoins, ceci nécessite des calculs VER supplémentaires [MIEHE et al. 1999 ; FEYEL 1999 ; SAEB et al. 2016]. Lorsque cette matrice n’est pas réactualisée, cela revient à résoudre le problème à l’échelle macroscopique par un algorithme de type quasi-Newton, qui peut alors être accéléré par une méthode d’accélération de convergence de point-fixe [RAMIÈRE et al. 2015].

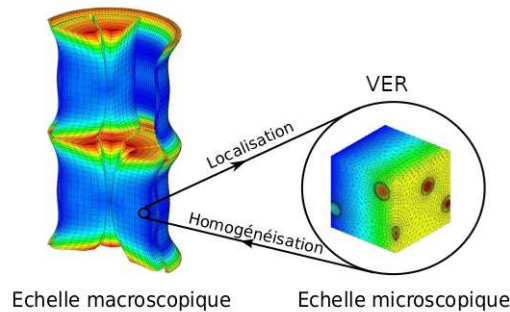


FIGURE 1.10. – Principe de la méthode EF^2 . Figure issue de [RAMIÈRE et al. 2017b]

Le calcul Éléments Finis (EF) sur le VER remplace l’intégration d’une loi de comportement au point de Gauss de la macrostructure. Cette stratégie peut donc s’implémenter dans n’importe quel solveur EF existant. Les calculs microscopiques étant tous indépendants entre eux, la méthode offre une grande scalabilité. Ainsi, en utilisant un serveur adapté, on peut utiliser un processus différent pour chaque point de Gauss.

En comparant la méthode EF^2 aux méthodes basées sur le développement asymptotique (cf. Section 1.2.2.6), on montre [BLANC 2009 ; CHATZIGEORGIOU et al. 2016] que la solution obtenue est à l’ordre 1 (cf. équation 1.20).

1.2.4.2. Résolution des problèmes locaux : solveur EF ou FFT ?

Classiquement, les problèmes locaux sont résolus par un solveur EF [FEYEL 2003], mais récemment l’utilisation de la méthode basée sur la transformée de Fourier rapide (FFT, acronyme anglais de Fast Fourier transform) est proposée [SPAHN et al. 2014 ; KOCHMANN et al. 2018 ; GIERDEN et al. 2021]. La méthode FFT fut initiée par [MOULINEC et al. 1998], une revue des dernières améliorations est faite par [M. SCHNEIDER 2021]. Cette méthode est notamment reconnue pour son efficacité numérique sur des calculs de VERs périodisés [EL SHAWISH et al. 2020]. La procédure de maillage est immédiate, car une grille cartésienne régulière est utilisée. La FFT permet un maillage de plus de 10^9 voxels [GÉLÉBART et al. 2013 ; M. SCHNEIDER et al. 2022a]. Néanmoins, jusqu’à présent, les maillages tétraédriques classiques non-structurés d’ordre élevé rendent mieux compte des caractéristiques fines de la géométrie, même si du côté de la FFT, des stratégies multigrilles et d’ordre supérieur telles que les voxels composites se développent [M. SCHNEIDER 2021].

La méthode FFT est souvent limitée pour traiter des problèmes faisant intervenir des surfaces dans le VER (exemple : fissuration locale, contact). Concernant la fissuration, des méthodes de champs de phase commencent à être développées [RABETTE et al. 2019 ; CHEN et al. 2021],

1.2. Principe des méthodes d'homogénéisation

mais une approche locale de la fissuration reste délicate à gérer [CHEN et al. 2020]. De plus, les performances de la méthode sont pénalisées avec des lois constitutives comportant de nombreuses variables internes.

Pour des raisons principalement liées à l'approximation de la géométrie mais également en vue de pouvoir traiter de la fissuration par des approches locales classiques à l'échelle du VER dans un futur proche, un solveur EF avec des maillages tétraédriques quadratiques sera privilégié dans cette thèse.

1.2.4.3. Sur la réduction du temps de calcul des approches Éléments Finis multiniveaux

Hormis le changement du solveur EF par un solveur FFT comme déjà évoqué en section précédente, il existe d'autres stratégies étudiées pour réduire le temps de calcul des simulations EF².

Comme cela a été récemment souligné par [WALTERS et al. 2021], l'application de BC de Dirichlet au bord du VER est vraiment compétitif en terme de temps de calcul, mais les solutions associées souffrent généralement d'un manque de précision. En améliorant la justesse des solutions obtenues, l'utilisation de ce type de conditions aux limites peut permettre un gain en temps sur le calcul microscopique vis-à-vis d'une solution obtenue avec des conditions périodiques. Par ailleurs, les contraintes de périodisation du VER pourraient être levées, ce qui permet un gain en temps de calcul sur la partie génération et maillage du VER.

Pour réduire le temps de calcul et l'espace mémoire des méthodes EF², on peut utiliser une méthode hybride [RAMIÈRE et al. 2017b ; PRASTER et al. 2018 ; KOLIESNIKOVA et al. 2020] où les calculs sur les VER seront uniquement effectués sur des zones spatiales d'intérêt de la structure. Ces zones sont généralement déterminées à partir d'une estimation de la validité des lois de comportements homogénéisées disponibles. Ces lois sont ainsi utilisées en dehors des zones d'intérêt EF². Cette approche hybride rend alors possible l'utilisation de stratégies EF² dans des codes industriels et sur des ordinateurs personnels. L'approche développée par [BENAIMECHE et al. 2022] vise aussi à diminuer le nombre de calcul sur VER en utilisant une méthode de clustering pour regrouper les calculs microscopiques présentant un chargement en déformation similaire.

Des stratégies basées sur de l'apprentissage automatique ont été développées dans le but de réduire le temps de calcul des méthodes EF², tout en représentant les champs locaux. Nous pouvons d'abord citer les approches basées sur des techniques de réduction de l'ordre de modèle [J.-C. MICHEL et al. 2003 ; FRITZEN et al. 2013 ; FRITZEN et al. 2018]. A chaque point d'intégration du calcul macroscopique, des problèmes micromécaniques locaux d'ordre réduit (de quelques degrés de liberté) sont alors résolus. Une phase préliminaire d'apprentissage numérique en champs complets sur VER est nécessaire pour déterminer les fonctions de base de ces problèmes locaux.

La tendance actuelle est au développement de techniques basées sur l'intelligence artificielle et les réseaux de neurones dont une revue est faite par [BISHARA et al. 2023]. Cependant, ces méthodes [L. LIU et al. 2016 ; Z. LIU et al. 2016 ; Z. LIU et al. 2019 ; MASI et al. 2021 ; BÉJI et al. 2023] doivent être entraînées sur des séries de données de simulations VER, ce qui peut entraîner une phase hors ligne très coûteuse.

Toutefois pour toutes ces approches basées sur de l'apprentissage automatique, un nouvel apprentissage hors ligne est nécessaire pour prendre en compte de nouvelles microstructures ou

de nouveaux comportements.

1.2.5. Modélisation hétérogène du combustible nucléaire recyclé

Afin de simuler le comportement thermo-mécanique des combustibles nucléaires (de tout type de filière de réacteur), le CEA, en partenariat avec EDF et Framatome, développe la plateforme numérique PLEIADES² [PLANCQ et al. 2004 ; MARELLE et al. 2013]. L'application R&D ALCYONE [THOUVENIN et al. 2006 ; MARELLE et al. 2016] et le code industriel CYRANO3 [BARON et al. 1997 ; LARGENTON et al. 2016] de la plateforme PLEIADES sont dédiés au comportement des combustibles de REP. En particulier des schémas de calcul sont destinés au combustible MOX. Concernant la simulation multiéchelle de ce combustible, des approches avancées ont été mises en place pour le comportement mécanique, cf. Tableau 1.1.

L'approche analytique de type Mori-Tanaka Incrémental (MTI) [RICAUD et al. 2009 ; BLANC et al. 2011] permet de représenter le comportement non-linéaire vieillissant du combustible MOX. Cette approche constitue l'extension au cas viscoélastique linéaire vieillissant des estimations de Mori-Tanaka [MORI et al. 1973] employé en élasticité linéaire. Le combustible MOX est alors représenté par un composite de type matrice-inclusion bi- ou triphasé (cf. Section 1.3).

Une méthode d'ordre réduit basée sur l'analyse par champs de transformation non uniformes (NTFA, acronyme anglais de Nonuniform Transformation Field Analysis) a été étendue aux composites à comportement viscoélastique linéaire vieillissant en présence de gonflement pour pouvoir représenter le combustible MOX [LARGENTON 2012 ; LARGENTON et al. 2014].

Plus récemment, une approche de référence de type EF² (hybride) a été mise en place [RAMIÈRE et al. 2017b ; RAMIÈRE et al. 2017a]. L'approche MTI a ainsi pu être vérifiée avec succès à partir de cette approche EF².

Aucune de ces approches n'a été développée en thermique.

	Analytique : MTI	Ordre réduit : NTFA	Numérique : EF ²
Rapide en temps de calcul	OUI		NON
Prise en compte de la géométrie de la micro-structure	NON : uniquement la fraction volumique est considérée	OUI, mais une étude doit être reconduite pour chaque configuration ou comportement différent	OUI
Comportement effectif et champs moyens	OUI		
Champs locaux	NON	OUI	

TABLEAU 1.1. – Les différentes approches d'homogénéisation en mécanique disponible dans PLEIADES

Du fait de la problématique industrielle et de la nécessité d'avoir une approche de référence, nous nous orientons dans cette thèse vers la construction d'une approche de référence de type EF² pour une modélisation thermo-mécanique du combustible nucléaire recyclé. Bien que dans cette thèse la mécanique et la thermique multiéchelles sont résolues séparément, en cohérence

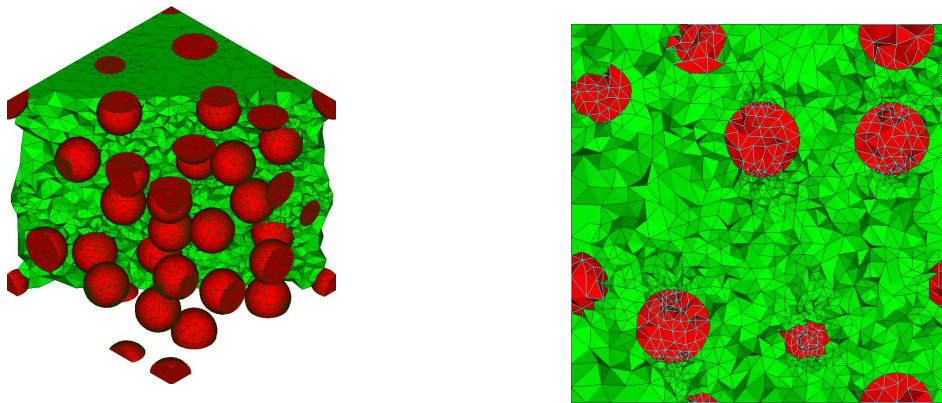
2. Plateforme Logicielle pour les Éléments Irradiés dans les Assemblages en Démonstration, en Expérimentation ou en Service

avec le schéma de couplage multiphysique partitionné des applications PLEIADES [B. MICHEL et al. 2021], des formulations EF^2 thermo-mécaniques sont envisageables [ÖZDEMİR et al. 2008 ; REGENER et al. 2011 ; FLEISCHHAUER et al. 2016].

1.3. Contribution de la thèse

Dans ce travail, nous adoptons une description 2-phases de la microstructure du MOX, description dans laquelle les inclusions représentatives des amas plutonifères sont conservées tandis que la matrice est constituée des amas uranifères et de l’enrobage (cf. description de ces phases en Section 1.1.3). Les comportements des phases matricielle et inclusionnaire sont supposés homogènes. Par ailleurs, les hétérogénéités (inclusions) seront modélisées via des sphères monodispersées (une seule taille d’inclusion est considérée) avec une fraction volumique de l’ordre de 10 % à 15 %, cohérente avec la fraction volumique des inclusions plutonifères dans le MOX. Ainsi, nous travaillons d’une façon générique sur des composites biphasés de type matrice-inclusion sphérique, avec inclusions monodispersées. Dans ce cas, nous nous attendons à ce que le comportement effectif du matériau soit isotrope. En effet, les sphères sont réparties aléatoirement dans le VER et celui-ci est périodisé.

Les VER sont générées par Mérope [JOSIEN 2023 ; Mérope], un logiciel voué aux simulations sur VER de la plateforme PLEIADES. Ensuite, la microstructure est maillée via l’outil COMBS [BOURCIER et al. 2013] basé sur la plateforme Salomé [SALOME platform] ou le logiciel gmsh [GEUZAINÉ et al. 2009]. Les calculs EF sont effectués avec Cast3M [Cast3M]. La Figure 1.11 est un exemple de VER considéré.



(a) Vue en 3D : une partie de la matrice en coupée pour une meilleure visualisation (b) Vue en 2D : Coupe dans un plan vertical

FIGURE 1.11. – Représentation du MOX par des VER biphasés : en rouge les inclusions et en vert la matrice

Le but de cette thèse est de développer une méthode d’homogénéisation basée sur un algorithme de type EF^2 , pour obtenir une solution de référence aux échelles macroscopique et microscopique en mécanique et en thermique avec terme source. L’approche EF^2 , dont une revue est faite par [RAJU et al. 2021], a été amplement étudiée en mécanique. D’un point de vue thermique, certains aspects sont encore à éclaircir dû à la présence d’un possible terme source, qui de plus peut être hétérogène.

Étant donné que les calculs à l’échelle microscopique sont au centre de la méthode EF^2 , les premières étapes de la thèse consistent à générer et modéliser précisément la microstructure

étudiée. Il s’agira d’identifier certains nouveaux paramètres importants de la microstructure, à savoir notamment la proximité des inclusions. Afin de réduire les temps de simulation des calculs microscopiques, tout en conservant l’approche de référence, nous travaillons sur l’amélioration de la précision des solutions sur VER obtenues avec des conditions aux limites de Dirichlet.

La thèse sera développée en trois chapitres introduits par les sections suivantes.

1.3.1. Identification de nouveaux paramètres importants de la microstructure

Le premier axe concerne une étude sur de nouveaux paramètres importants de la microstructure matrice-inclusion pour la génération de VER en vue de prédire finement les champs locaux. En effet, dans le cadre de la méthode EF^2 , il est primordial d’être bien représentatif de la microstructure étudiée, car un seul calcul VER est effectué à chaque point de Gauss (donc des statistiques ne sont pas réalisables). Pour ce faire, nous avons effectué de nombreux tirages de VER en faisant varier la taille des VER, le rayon des sphères, la fraction volumique et la distance minimale s_{min} entre inclusions avec un maillage robuste doté d’un raffinement entre les inclusions les plus proches. Après s’être assuré d’une bonne convergence en maillage et en taille de VER, l’effet de la proximité des inclusions, variant du rayon des sphères r à un dixième de ce rayon, est étudié sur les propriétés effectives, les moments par phase et les champs locaux. Pour différents contrastes de rigidité entre les phases, les propriétés élastiques effectives et les moments par phase des contraintes hydrostatique et équivalente obtenues sont comparés aux estimations de Mori–Tanaka, couramment utilisées pour ce type de matériaux. Les aspects locaux (contraintes), importants dans une démarche multiéchelle, sont également analysés. Nous constatons qu’en plus de la fraction volumique, la distance minimale effective entre les inclusions semble avoir de l’importance sur la localisation des quantités microscopiques d’intérêt (contraintes) et les moyennes par phase.

Ces travaux, détaillés au Chapitre 2, ont donné lieu à l’article [BELGRAND et al. 2022c] et à une présentation à la conférence CSMA [BELGRAND et al. 2022a].

1.3.2. L’Étape de localisation

Le deuxième axe se concentre sur l’étape de localisation de la méthode EF^2 . En effet, il a été vu que les conditions aux limites appliquées au bord du VER avait une importance non négligeable sur la précision des solutions et le temps de calcul. Notre étude concerne l’efficacité (rapport précision/coût) des BC de type Dirichlet, notamment pour le calcul des champs locaux dans un VER. Comme vu précédemment, à une taille de VER raisonnable, les BC de Dirichlet conduisent à des solutions moins précises que les BC périodiques, mais pour un temps de calcul largement plus faible. Les BC périodiques présentent des temps de calculs incompatibles avec une utilisation de R&D appliquée du couplage multiéchelle de type EF^2 . Après avoir analysé la source d’erreur liée aux BC de Dirichlet, différentes méthodes sont prospectées, pour différents contrastes de rigidité, dans le but d’améliorer la précision des solutions associées sans augmenter significativement leur temps de calcul. On distingue les méthodes par post-traitement consistant à filtrer ou tronquer la contrainte à la sortie du solveur, aux méthodes par prétraitement modifiant la géométrie ou le maillage avant le calcul. Des conditions aux limites innovantes de type Dirichlet basées sur un mouvement de corps rigide des inclusions aux limites du VER sont introduites. La pertinence des différentes approches sera jugée sur les propriétés effectives, les

1.3. Contribution de la thèse

moments par phase et les champs locaux.

Ces travaux, détaillés au Chapitre 3, font l'objet d'un article en cours de rédaction [BELGRAND et al. 2023a] et d'une présentation à la conférence ECCOMAS [BELGRAND et al. 2022b].

1.3.3. Méthode EF² appliquée à la thermique avec terme source

Pour ce dernier axe, nous souhaitons appliquer la méthode EF² pour obtenir les grandeurs homogénéisées, mais aussi des solutions microscopiques fiables pour des problèmes stationnaires de conduction thermique avec une conductivité et une source de chaleur hétérogènes. L'objectif est de discuter de différentes stratégies numériques pour considérer précisément la source de chaleur dans une approche multiéchelle. En mécanique quasi-statique, la présence de terme source sur la microstructure est peu courante et correspond à un terme de force volumique, par exemple le poids propre. Peu d'approches EF² établies en mécanique le prennent alors en compte. Nous établissons tout d'abord un état de l'art des quelques approches EF² considérant un terme source (hétérogène ou non), puis nous les comparons aux approches basées sur un développement asymptotique à deux échelles montrant qu'il est essentiel de prendre en compte des correcteurs d'ordre 2 pour observer les effets de la source dans les inclusions. Le but est de dégager un jeu d'équations macroscopique et microscopique à résoudre pour obtenir une température précise à chacune de ces échelles du modèle EF².

Ces travaux, détaillés au Chapitre 4, ont donné lieu à une présentation à la conférence COMPOSITES [BELGRAND et al. 2023b].

Chapitre 2

Effets de proximité dans les composites matrice-inclusion : propriétés élastiques effectives, moments par phase et analyse par champs complets

Ce chapitre se concentre sur les effets de la proximité des inclusions sur le comportement élastique des composites matrice-inclusion dilués. Des inclusions sphériques monodispersées rigides ou souples sont considérées avec des fractions volumiques modérées. Pour mener à bien cette étude, des VER avec une distance minimale locale effective entre les inclusions variant entre le rayon de la sphère et un dixième du rayon sont construits. Des calculs numériques par EF sont effectués sur les VER. Les propriétés élastiques homogénéisées obtenues, ainsi que les moments par phase de la contrainte (premier et second), sont comparés aux estimations de Mori–Tanaka, qui sont couramment utilisées pour ce type de composite. Le comportement des champs locaux (contraintes) dans la microstructure en fonction de la proximité des inclusions est également analysé.

La majorité de ce travail est publiée dans [BELGRAND et al. 2022c] et a été présentée à la conférence CSMA [BELGRAND et al. 2022a].

Sommaire

2.1. Introduction	44
2.2. Génération d'un Volume Élémentaire Représentatif d'un composite matrice-inclusion avec une distance minimale effective entre les inclusions	45
2.2.1. Méthodes de tirages des inclusions	46
2.2.2. Procédure de maillage	47
2.3. Propriétés élastiques et homogénéisation	48
2.3.1. Contraste de rigidité entre les phases	48
2.3.2. Homogénéisation analytique : Estimations de Mori–Tanaka	49
2.3.3. Homogénéisation numérique	52
2.4. Résultats numériques	52
2.4.1. Résultats pour les propriétés effectives	53
2.4.2. Résultats pour les moyennes par phase	56
2.4.3. Résultats pour les champs locaux	62
2.5. Conclusion	65

2.1. Introduction

Nous nous plaçons dans le cadre de l'homogénéisation de composites biphasés avec des inclusions sphériques monodispersées aléatoirement de fractions volumiques modérées ($f_v \sim 10\text{--}30\%$). Ce travail se concentre sur l'étude de l'influence de la distance minimale entre les inclusions qui ne s'intersectent pas sur le comportement du matériau hétérogène. Bien que les études sur le chevauchement des inclusions [TORQUATO 1998 ; EL MOUMEN et al. 2013] aient montré un impact sur les comportements homogénéisés, à notre connaissance, seules quelques études récentes [MAJEWSKI et al. 2017 ; MAJEWSKI et al. 2020] ont étudié l'effet de proximité (sans chevauchement) sur les propriétés effectives. Ces auteurs ont analysé le comportement effectif (obtenu à partir de la moyenne volumique de calculs VER) en fonction des différentes distances minimales moyennes entre les inclusions les plus proches. Une tendance à la rigidification (resp. à l'assouplissement) du matériau en fonction de la distance moyenne entre les inclusions rigides (resp. souples) a été observée. Toutefois, les écarts obtenus restent de l'ordre de quelques pourcents sur les propriétés effectives pour une gamme de fractions volumique d'inclusions comprise entre 10 % et 50 %. Les auteurs ont également comparé leurs simulations par éléments finis avec l'approche par motifs morphologiquement représentatifs (MRP, acronyme anglais de Morphologically Representative Pattern) [BORNERT et al. 1996], une méthode d'homogénéisation analytique qui vise à prendre en compte un assemblage de différents motifs à l'intérieur de la microstructure. La distance minimale moyenne entre les sphères est utilisée pour évaluer le poids de deux motifs différents. Cette approche prédit qualitativement la déviation observée des comportements effectifs. Cependant, des estimateurs plus standard (tels que les estimations auto-cohérentes généralisées ou les estimations de Mori–Tanaka) qui restent indépendants de l'effet de proximité donnent de meilleurs résultats quantitatifs. Dans [MAJEWSKI et al. 2020], les auteurs ont commencé à examiner les champs locaux dans le but de visualiser la contrainte équivalente sur le VER. Ils ont observé une contrainte locale plus importante lorsque les inclusions sont plus proches. Les contraintes dans les inclusions tendent à être homogènes pour de grandes distances entre les inclusions, ce qui est en bon accord avec la solution à une seule inclusion dans une matrice infinie [TORQUATO 2002]. Cependant, aucune analyse avancée n'a été réalisée sur l'effet de la proximité des inclusions sur les champs locaux. Dans un cadre multiéchelle, il semble important d'étudier l'effet de proximité sur le comportement local de ces microstructures. En effet, certaines quantités d'intérêt peuvent être fortement impactées localement.

Dans cette étude, nous proposons d'aller plus loin que les travaux de [MAJEWSKI et al. 2017 ; MAJEWSKI et al. 2020] en étudiant en profondeur les effets de proximité des inclusions sur les moyennes par phase et les contraintes locales. En outre, comme le paramètre de distance moyenne ne donne pas d'informations précises sur la distance minimale entre les inclusions, dans nos travaux, la distance minimale est considérée comme le paramètre de proximité pertinent. À cette fin, des VER avec une distance minimale effective donnée entre les inclusions monodispersées sont générés. Ici, le terme "distance minimale effective" signifie qu'au moins deux sphères sont effectivement séparées dans le tirage par cette distance minimale donnée. Nous générons diverses réalisations avec des distances minimales effectives variant entre le rayon des sphères et un dixième de ce rayon. Afin de couvrir un large éventail d'applications, différentes fractions volumiques d'inclusions (13 % et 25 %) et différents rayons de sphère (5 μm et 10 μm) ont également été pris en compte. Plusieurs rapports d'échelle (2, 5 ; 5 ou 10) sont considérés pour assurer la fiabilité des résultats obtenus. Des calculs élastostatiques par éléments finis sont effectués sur les différents VER. L'influence du contraste de rigidité entre les phases

(inclusions rigides ou souples) est également étudiée. Des contrastes variant entre 1/100 et 100 sont étudiés. Il faut noter que les cas d’inclusions infiniment rigides ou poreuses reviendront à exacerber les phénomènes montrés dans ce chapitre (voir [MAJEWSKI et al. 2017]). De même, les comportements non-linéaires intensifieront également les écarts, comme indiqué dans [IDIART et al. 2006].

Les estimations des propriétés effectives et les premier et second moments par phase de la contraintes peuvent être obtenus en utilisant des approches de type Mori–Tanaka (MT) (cf. Section 1.2.2.3). Pour la microstructure composite biphasée étudiée, les approches de Mori–Tanaka sont largement utilisées car elles fournissent généralement des estimations précises des propriétés effectives. Les premier et second moments par phase peuvent également être estimés, ce qui permet d’accéder à des informations légèrement plus locales. Les estimations MT dépendent des fractions volumiques d’inclusions et des propriétés mécaniques des phases, mais pas de la distribution des inclusions et en particulier, de leur proximité. En effet, ces estimations sont construites en considérant les hétérogénéités comme des inclusions isolées dans une matrice infinie. Cette étude nous permet de déterminer la distance minimale entre les inclusions à partir de laquelle les estimations MT sont valides.

Le reste du chapitre est structuré comme suit. Dans la Section 2.2, la génération de VER avec des distances minimales effectives entre les sphères est introduite. Dans la Section 2.3, les estimations de Mori–Tanaka sont étendues au second moment et nous formulons la méthode d’homogénéisation numérique utilisée. Dans la Section 2.4, les résultats numériques sont présentés et analysés : les propriétés effectives à la Section 2.4.1, les moyennes par phase à la Section 2.4.2 et les contraintes locales à la Section 2.4.3. Enfin, la Section 2.5 présente les principales conclusions de cette étude, ainsi que quelques perspectives pour les travaux futurs.

2.2. Génération d’un Volume Élémentaire Représentatif d’un composite matrice-inclusion avec une distance minimale effective entre les inclusions

Cette section donne quelques détails pratiques sur la génération de VER cubiques avec des inclusions sphériques monodispersées séparées par une distance minimale effective (dans le sens donné dans l’introduction), notée s_{min} . On étudie des VER cubiques de côté l comprenant des inclusions sphériques monodispersées de rayon r . Les VER sont générées par Mérope [JOSIEN 2023; Mérope], un logiciel voué aux simulations sur VER de la plateforme PLEIADES. Le logiciel construit un assemblage aléatoire de sphères à l’intérieur d’un cube périodique, afin d’éviter tous biais dans le calcul des propriétés effectives [M. SCHNEIDER et al. 2022b], en utilisant l’algorithme de contraction mécanique conçu par [WILLIAMS et al. 2003]. Ensuite, la microstructure est maillée en construisant naïvement un cube périodique avec des surfaces plates, grâce à l’outil COMBS [BOURCIER et al. 2013] basé sur la plateforme Salomé [SALOME platform]. Nous expliquons plus en détail la génération de la microstructure et la procédure de maillage dans les Sections 2.2.1 et 2.2.2.

Le rapport d’échelle SR est défini par le rapport entre la taille l du VER et le diamètre des inclusions ($SR = \frac{l}{2r}$). Trois rapports d’échelle $SR \in \{2, 5; 5; 10\}$ sont considérés. Le nombre d’inclusions est choisi pour avoir exactement la même fraction volumique d’inclusions f_v entre les rapports d’échelle. Pour chacun de ces rapports, 50, 10 et 5 VER sont générés respectivement, pour chaque valeur de s_{min} . La valeur maximale du paramètre de tassement $\frac{s_{min}}{r}$ est obtenue,

2.2. Génération d'un Volume Élémentaire Représentatif d'un composite matrice-inclusion avec une distance minimale effective entre les inclusions

en considérant que chaque sphère est séparée par s_{min} :

$$\max\left(\frac{s_{min}}{r}\right) = 2(C^{1/3} f_v^{-1/3} - 1), \quad \text{avec } C \text{ le facteur de compacité.} \quad (2.1)$$

Une borne supérieure sans tenir compte de la compacité est donné par [MAJEWSKI et al. 2020]. Pour la géométrie considérée du VER, nous utilisons la compacité du système cubique centré $C = \frac{\pi\sqrt{3}}{8}$. À $f_v = 13,4 \%$, la valeur maximale du paramètre de tassement est alors de 1,4 et des VER avec une distance minimale effective entre les inclusions de $\frac{s_{min}}{r} \in \{0, 1; 0, 2; 0, 4; 0, 6; 0, 8; 1; 1, 2\}$ ont été générés. La Figure 2.1 montre des exemples de deux VER avec des valeurs extrêmes de s_{min} à $SR = 10$.

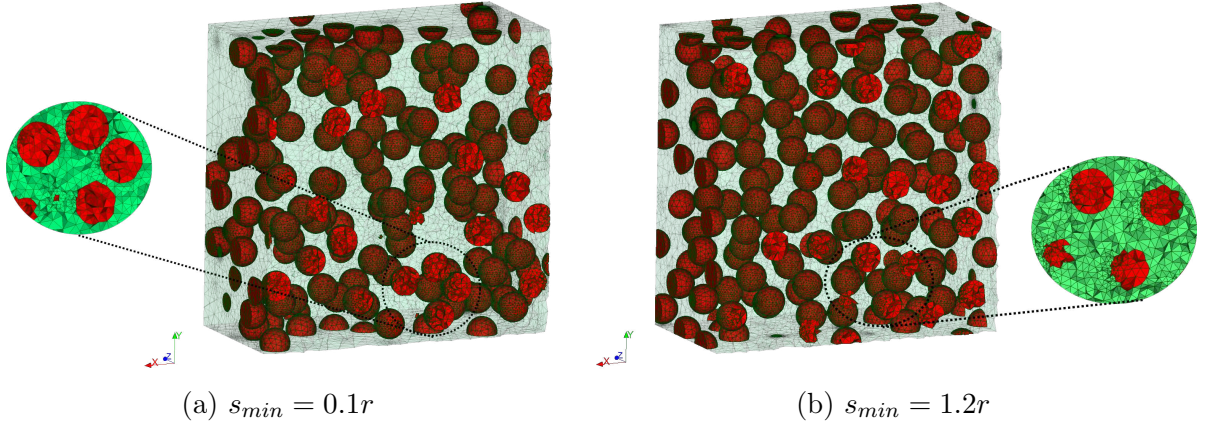


FIGURE 2.1. – Vues en coupe du maillage des VER pour les valeurs extrêmes de s_{min} , avec des gros plans sur des inclusions séparés de la distance s_{min} . $SR = 10$, $r = 10 \mu m$, $f_v = 13,4 \%$.

2.2.1. Méthodes de tirages des inclusions

Les principes de générations de VER sont rappelés à la Section 1.2.3.1. Nous décrivons ici celles que nous avons utilisées. L'une des spécificités est que la forme de l'enveloppe est un cube périodique. Une distance minimale entre deux sphères est fixée et le tirage est rejeté si la distance minimale effective est supérieure à la distance minimale imposée.

La procédure de génération la plus courante est la procédure d'addition séquentielle aléatoire (RSA, acronyme anglais de Random Sequential Addition) [COOPER 1988], qui part d'un cube vide¹ et tente de placer une nouvelle sphère à l'intérieur du cube comme suit : (i) choisir un point aléatoire à l'intérieur du cube. (ii) Vérifier si la sphère centrée sur ce point intersecte une sphère déjà placée. Si ce n'est pas le cas, la nouvelle sphère est acceptée, sinon elle est rejetée. L'algorithme itère jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt (basé sur une fraction volumique de sphère souhaitée) soit atteint, ou jusqu'à ce qu'aucune sphère ne puisse plus être placée. Il convient de noter qu'une mise en œuvre efficace de la procédure RSA n'est pas simple, en particulier pour atteindre le nombre maximal de sphères pouvant être placées à l'intérieur d'un cube donné. La stratégie efficace basée sur des octrees proposée dans [EBEIDA et al. 2012] a été implémentée dans Mérope.

1. Le cube peut être périodique ou non. Dans le premier cas, les distances entre les sphères sont calculées en tenant compte de la périodicité.

Pour pouvoir atteindre des fractions volumiques plus élevées qu’avec la procédure RSA (cf. Section 1.2.3.1, nous avons mis en œuvre et utilisé la stratégie proposée dans [WILLIAMS et al. 2003], appelée contraction mécanique de Williams et Philippse (WP). Elle consiste à placer des sphères au hasard dans un cube périodique gonflé, puis à dégonfler progressivement le cube, ce qui justifie le nom "contraction". Après une étape de dégonflement, les sphères qui se chevauchent se repoussent, jusqu’à ce qu’il n’y ait plus d’intersection. Cette deuxième étape s’apparente à une dynamique newtonienne. La procédure s’arrête lorsque le cube a atteint sa taille finale et échoue s’il n’est pas possible de supprimer toutes les intersections entre les sphères. Contrairement à la procédure RSA, la procédure WP permet une fraction volumique de sphères monodispersées d’une densité supérieure à 62%. Cependant, les structures réalisées par WP sont en quelque sorte "moins aléatoires" que celles obtenues par RSA, avec une fonction d’autocorrélation qui augmente avec la fraction volumique [M. SCHNEIDER et al. 2022a, Fig. 14].

2.2.2. Procédure de maillage

Nous nous concentrons sur les éléments finis tétraédriques quadratiques non-structurés pour leurs bonnes propriétés de convergence en maillage [RAMIÈRE et al. 2017b]. De plus, grâce à la transformation isoparamétrique des éléments finis, les éléments quadratiques conduisent à une meilleure discrétisation des sphères et à une approximation précise par le maillage de la fraction volumique théorique (géométrique) des inclusions f_v avec beaucoup moins d’éléments [RAMIÈRE 2021]. Cette fraction volumique approchée est d’une importance de premier ordre dans la détermination du comportement effectif (voir la Section 2.3). Les maillages utilisés dans le processus suivant sont alors composés d’éléments tétraédriques à dix nœuds.

Le maillage des microstructures est délicat, en raison des singularités géométriques qui peuvent apparaître. Pour un cube périodique, le problème est aggravé par la contrainte de périodicité. Pour le premier problème, nous évitons les fortes singularités géométriques causées par des sphères qui se touchent (ou presque) en imposant une distance minimale entre les inclusions. Le second problème est plus complexe, et nous le discutons en détail ici et dans la Section 3.3.3.2.

La stratégie courante pour construire un maillage d’un cube périodique consiste à projeter la géométrie périodique sur un cube classique à faces planes et à découper les inclusions à la surface du cube [K. SCHNEIDER et al. 2016]. Cependant, la géométrie résultante peut être compliquée à mailler, en particulier dans le cas où les inclusions sont presque tangentes au bord du cube. De telles situations nécessitent un maillage particulièrement fin dans les zones problématiques. Dans la plupart des cas, le problème est contourné en conditionnant le générateur de microstructure pour éviter de tels cas (cf. [K. SCHNEIDER et al. 2016, Algorithme 1]). Dans nos travaux, pour éviter ce biais, aucune condition n’est imposée au générateur de microstructure et un raffinement de maillage est utilisé pour ces inclusions tangentes avec l’outil COMBS. A la Section 3.3.3.2, nous mentionnons une autre stratégie qui contourne ces difficultés en définissant des surfaces périodiques adaptées.

Procédure de maillage avec COMBS

Pour garantir que le maillage soit non-dégénéré et non-enchevêtré, le nombre minimal d’éléments n_{min} entre deux frontières (frontières d’inclusions ou frontière d’une inclusion et la limite du VER) est fixé à 2. Cela garantit qu’il y a toujours un nœud dans la matrice entre deux frontières. Cela conduit à un maillage non-uniforme, avec un raffinement de maillage plus important entre les inclusions proches et dans les inclusions coupées par les limites du VER (cf. Figure 2.1). Pour $n_{min} = 1$, un problème EF sur certains maillages est impossible à résoudre. En

2.3. Propriétés élastiques et homogénéisation

pratique, la taille minimale du maillage est dictée par ces inclusions coupées. Ainsi, le nombre total de nœuds dans le maillage ne dépend que légèrement de la distance minimale s_{min} . La taille minimale des mailles est fixée à $r/200$, tandis que la taille maximale des mailles est choisie pour être égale à r . Un facteur de gradation g de 2 est utilisé entre les éléments. Ces différentes valeurs, choisies pour conserver un maillage robuste tout en limitant le nombre d'éléments, ont été obtenues via une étude préliminaire de convergence en maillage, dont les principaux résultats sont présentés dans le Tableau 2.1. Ce tableau indique la variation du module de compressibilité apparent k^{app} et son écart-type en fonction des paramètres du maillage et du nombre de nœuds. Nous pouvons facilement voir que les valeurs de k^{app} sont convergentes avec les paramètres mentionnés ci-dessus. D'autres valeurs plus locales montrent la même convergence avec les paramètres du maillage. Ce processus fiable de génération de maillage conduit cependant à un grand nombre d'éléments. La valeur moyenne du nombre de nœuds obtenus par SR est présentée dans le Tableau 2.2. On peut noter que l'évolution du nombre de nœuds est cohérente avec le rapport d'échelle.

	$n_{min} = 2$			$g = 2$	
	$g = 1,15$	$g = 1,5$	$g = 2$	$n_{min} = 3$	$n_{min} = 4$
k^{app} (MPa)	20,916	20,918	20,920	20,914	20,919
Écart-type de k^{app} (MPa)	0,461	0,462	0,463	0,468	0,460
Nombre de nœuds	279 000	65 300	32 500	88 900	158 700

TABLEAU 2.1. – Convergence en maillage de k^{app} , $SR = 2,5$, $f_v = 13,4\%$, $contraste = 100$

	$SR = 2,5$	$SR = 5$	$SR = 10$
Nombre de nœuds	30 000	300 000	2 500 000
Nombre de tirages	350	70	35

TABLEAU 2.2. – Nombre moyen de nœuds dans le maillage et nombre de tirage avec une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4\%$ pour différents rapports d'échelle SR avec $r = 10 \mu m$

2.3. Propriétés élastiques et homogénéisation

2.3.1. Contraste de rigidité entre les phases

Le problème aux limites considéré est un problème élastostatique, où le composite est soumis à une déformation macroscopique \underline{E} . La résolution de ce problème à l'échelle microscopique consiste à déterminer les champs satisfaisant le système d'équations suivant dans le VER noté ω :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \underline{0} & \text{dans } \omega \\ \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} & \text{dans } \omega \\ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T) & \text{dans } \omega \\ BC & \text{sur } \partial\omega \end{cases} \quad (2.2)$$

où $\underline{\underline{C}}$ est le tenseur d'élasticité d'ordre 4 et les conditions aux limites (BC) sont déterminées afin d'obtenir $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{\underline{E}}$ (cf. Section 1.2.3).

Chaque phase i est supposée avoir un comportement élastique linéaire, où l'indice 1 (resp. 2) représente la phase inclusionnaire (resp. matricielle). Un comportement isotrope est supposé :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{E_i}{1 + \nu_i} \left(\underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{\nu_i}{1 - 2\nu_i} \text{trace}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \underline{\underline{Id}} \right) \quad \text{dans chaque phase } i \quad (2.3)$$

avec E_i le module d'Young, ν_i le coefficient de Poisson de la phase i et $\underline{\underline{Id}}$ le tenseur d'identité du second ordre.

Le contraste entre les phases est ajusté en modifiant les paramètres mécaniques de la phase inclusionnaire du matériau numérique suivant :

$$\begin{cases} E_2 = 20 \text{ MPa} \\ E_1 = E_2 \times \text{contraste} \\ \nu_1 = \nu_2 = 0.3 \end{cases} \quad (2.4)$$

Par définition, le module de compressibilité k et le module de cisaillement μ (cf. équation (1.11)) ont le même contraste. Dans cette étude, les inclusions souples et rigides sont considérées en faisant varier la valeur du paramètre $\text{contraste} \in \{0, 01; 0, 1; 10; 100\}$.

2.3.2. Homogénéisation analytique : Estimations de Mori–Tanaka

La méthode d'homogénéisation de Mori–Tanaka (MT) a été rappelée en Section 1.2.2.3. Nous rappelons ici la formule des propriétés apparentes (cf. équation (2.5)).

$$\begin{cases} k^{MT} = k_2 + f_v \frac{k_1 - k_2}{1 + (1 - f_v) \frac{k_1 - k_2}{\frac{4}{3}\mu_2 + k_2}} \\ \mu^{MT} = \mu_2 + f_v \frac{\mu_1 - \mu_2}{1 + (1 - f_v) \frac{\mu_1 - \mu_2}{\tilde{\mu} + \mu_2}} \end{cases} \quad \text{avec } \tilde{\mu} = \frac{\mu_2}{6} \frac{9k_2 + 8\mu_2}{k_2 + 2\mu_2}. \quad (2.5)$$

Le $n^{\text{ème}}$ moment par phase d'un champ, désigné de manière générique par \bullet , est rappelé dans l'équation (2.6) :

$$\langle \bullet^n \rangle_i = \frac{1}{|\omega_i|} \int_{\omega_i} \bullet^n d\underline{\underline{x}} \quad (2.6)$$

avec ω_i le domaine occupé par la phase i et $|\omega_i|$ sa mesure.

Dans les sections suivantes, les estimations des premiers moments de la contrainte sont rappelées et nous formulons des estimations des seconds moments.

2.3.2.1. Premier moment

En considérant le temps de relaxation infini dans [MASSON et al. 2020], l'estimation de Mori–Tanaka de la contrainte moyenne (ou du premier moment de la contrainte) dans la phase

2.3. Propriétés élastiques et homogénéisation

inclusionnaire s'écrit comme suit :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 = 3k^{MT} \tilde{b}_m E_m \underline{\underline{Id}} + 2\mu^{MT} \tilde{b}_d \underline{\underline{E}}_d \quad (2.7)$$

où \bullet_m et \bullet_d désignent respectivement les parties sphérique et déviatorique d'un tenseur. Nous rappelons que, $\bullet_m = \text{trace}(\bullet)/3$, $\bullet_d = \bullet - \bullet_m \underline{\underline{Id}}$.

Les coefficients \tilde{b}_d et \tilde{b}_m du tenseur de localisation des contraintes $\underline{\underline{B}}$ (cf. équation (1.3)) dans la phase inclusionnaire, requis dans l'équation (2.7), sont donnés par :

$$\tilde{b}_d = \frac{\mu_1}{\mu_2} \frac{\frac{10}{3}\mu_2 + \frac{5}{2}k_2}{\frac{3}{2}(1-f_v)k_2 + (\frac{3}{2}f_v + 1)\frac{\mu_1}{\mu_2}k_2 + \frac{4}{3}(1-f_v)\mu_2 + (\frac{4}{3}f_v + 2)\mu_1} \quad (2.8)$$

$$\tilde{b}_m = k_1 \frac{\frac{4}{3}\mu_2 + k_2}{\frac{4}{3}\mu_2 \tilde{k}_e + k_2 k_1} \quad \text{avec } \tilde{k}_e = f_v k_1 + (1-f_v)k_2. \quad (2.9)$$

La contrainte moyenne dans la phase matricielle est directement déduite de l'équation (2.7) en considérant la relation suivante :

$$f_v \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 + (1-f_v) \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_2 = \underline{\underline{\Sigma}}, \quad (2.10)$$

où $\underline{\underline{\Sigma}}$ est la contrainte macroscopique sur le VER obtenue avec la formule classique

$$\underline{\underline{\Sigma}} = 3k^{MT} E_m \underline{\underline{Id}} + 2\mu^{MT} \underline{\underline{E}}_d. \quad (2.11)$$

A partir de la moyenne par phase du tenseur des contraintes, la moyenne par phase de la contrainte hydrostatique (partie sphérique du tenseur des contraintes) peut être directement estimée grâce au modèle MT en raison de la linéarité de sa définition :

$$\langle \sigma_m \rangle_i = \frac{1}{3} \text{trace}(\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_i) \quad \forall i = 1, 2. \quad (2.12)$$

Toutefois, la contrainte équivalente (Von Mises) moyenne par phase ne peut pas être évaluée à partir des estimations MT en raison des termes non-linéaires.

2.3.2.2. Second moment

La méthode MT permet par ailleurs d'obtenir des estimations analytiques du second moment de la contrainte hydrostatique (partie sphérique) $\langle \sigma_m^2 \rangle_i$ et de la contrainte équivalente (Von Mises) $\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_i$ (voir les formules de moyennes rappelées en équation (2.6), à appliquer ici à σ_m et σ_{eq} avec $n=2$). La contrainte (ou la déformation) équivalente est obtenue à partir de la partie déviatorique du tenseur des contraintes (ou des déformations) :

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\underline{\sigma}}_d : \underline{\underline{\sigma}}_d} \quad \text{et} \quad \varepsilon_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\underline{\varepsilon}}_d : \underline{\underline{\varepsilon}}_d} \quad \left(E_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\underline{E}}_d : \underline{\underline{E}}_d} \right). \quad (2.13)$$

A partir des relations entre les contraintes et les déformations :

$$\sigma_m = 3k\varepsilon_m, \quad \underline{\underline{\sigma}}_d = 2\mu\underline{\underline{\varepsilon}}_d \quad (2.14)$$

on en déduit une formulation des seconds moments de la contrainte hydrostatique et de la contrainte équivalente via ceux des déformations correspondantes :

$$\langle \sigma_m^2 \rangle_i = 9k_i^2 \langle \varepsilon_m^2 \rangle_i, \quad \langle \sigma_{eq}^2 \rangle_i = 9\mu_i^2 \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_i. \quad (2.15)$$

Pour déterminer les seconds moments de la déformation, on utilise l'énergie de déformation effective W^{eff} définie par :

$$W^{eff}(\underline{\underline{E}}) = \frac{1}{2} \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{C}}^{eff} : \underline{\underline{E}}. \quad (2.16)$$

Or, W^{eff} peut être déduit pour un composite matrice-inclusion bi-phasé [KREHER 1990] via les seconds moments de la déformation :

$$W^{eff}(\underline{\underline{E}}) = f_v \left\langle \frac{3}{2} \mu_1 \varepsilon_{eq}^2 + \frac{9}{2} k_1 \varepsilon_m^2 \right\rangle_1 + (1 - f_v) \left\langle \frac{3}{2} \mu_2 \varepsilon_{eq}^2 + \frac{9}{2} k_2 \varepsilon_m^2 \right\rangle_2. \quad (2.17)$$

Par dérivation, on obtient les relations suivantes sur les seconds moments de la déformation :

$$\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_i = \frac{2}{3f_v} \frac{\partial W^{eff}(\underline{\underline{E}})}{\partial \mu_i}, \quad \langle \varepsilon_m^2 \rangle_i = \frac{2}{9(1 - f_v)} \frac{\partial W^{eff}(\underline{\underline{E}})}{\partial k_i} \quad (2.18)$$

Ces moments sont généralement obtenus à partir de dérivées numériques.

Nous avons choisi ici de dériver de façon analytique en utilisant une autre formulation analytique de W^{eff} valable pour un comportement isotrope :

$$W^{eff}(\underline{\underline{E}}) = \frac{3}{2} \mu^{eff} E_{eq}^2 + \frac{9}{2} k^{eff} E_m^2. \quad (2.19)$$

En injectant l'équation (2.19) dans l'équation (2.18) et en utilisant les propriétés apparentes de MT (cf. équation (2.5)), on obtient alors les estimations suivantes des seconds moments de la déformation :

$$\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_1 = \frac{E_{eq}^2}{f_v} \frac{\partial \mu^{MT}}{\partial \mu_1}, \quad \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_2 = \frac{1}{(1 - f_v)} \left(E_{eq}^2 \frac{\partial \mu^{MT}}{\partial \mu_2} + 3E_m^2 \frac{\partial k^{MT}}{\partial \mu_2} \right), \quad (2.20)$$

$$\langle \varepsilon_m^2 \rangle_1 = \frac{E_m^2}{f_v} \frac{\partial k^{MT}}{\partial k_1}, \quad \langle \varepsilon_m^2 \rangle_2 = \frac{1}{(1 - f_v)} \left(\frac{1}{3} E_{eq}^2 \frac{\partial \mu^{MT}}{\partial k_2} + E_m^2 \frac{\partial k^{MT}}{\partial k_2} \right) \quad (2.21)$$

avec les formules de dérivation données aux équations (2.22) - (2.27) via des constantes définies aux équations (2.28) et (2.29).

$$\frac{\partial k_{MT}}{\partial \mu_2} = \frac{4(k_1 - k_2)}{3\left(\frac{4}{3}\mu_2 + k_2\right)} K_{12} \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial k_{MT}}{\partial k_1} = A_k - K_{12} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial k_{MT}}{\partial k_2} = 1 - A_k + K_{12} \left(\frac{k_1 - k_2}{\frac{4}{3}\mu_2 + k_2} + 1 \right) \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial \mu_{MT}}{\partial \mu_1} = A_\mu - M_{12} \quad (2.25)$$

2.4. Résultats numériques

$$\frac{\partial \mu_{MT}}{\partial \mu_2} = 1 - A_\mu + M_{12} \left(1 - \frac{(\mu_1 - \mu_2) (6\tilde{\mu} - 4\mu_2 - 1 - \frac{9k_2 + 8\mu_2}{2})}{3(k_2 + 2\mu_2)(\tilde{\mu} + \mu_2)} \right) \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial \mu_{MT}}{\partial k_2} = -M_{12} \frac{(\mu_1 - \mu_2) (\tilde{\mu} - \frac{3}{2}\mu_2)}{(k_2 + 2\mu_2)(\tilde{\mu} + \mu_2)} \quad (2.27)$$

$$K_{12} = \frac{f_v(1 - f_v)(k_1 - k_2)}{(\frac{4}{3}\mu_2 + k_2) \left(1 + (1 - f_v) \frac{k_1 - k_2}{\frac{4}{3}\mu_2 + k_2} \right)^2}, \quad A_k = \frac{f_v}{1 + (1 - f_v) \frac{k_1 - k_2}{\frac{4}{3}\mu_2 + k_2}} \quad (2.28)$$

$$M_{12} = \frac{f_v(1 - f_v)(\mu_1 - \mu_2)}{(\tilde{\mu} + \mu_2) \left(1 + (1 - f_v) \frac{\mu_1 - \mu_2}{\tilde{\mu} + \mu_2} \right)^2}, \quad A_\mu = \frac{f_v}{1 + (1 - f_v) \frac{\mu_1 - \mu_2}{\tilde{\mu} + \mu_2}} \quad (2.29)$$

2.3.3. Homogénéisation numérique

Le problème élastostatique (2.2) est résolu avec **Cast3M** [*Cast3M*] sur les VER en utilisant les conditions aux limites périodiques (cf. équation (1.26)). Pour les géométries périodiques, ce type de conditions présente une meilleure précision et une meilleure convergence en rapport d'échelle (cf. Section 1.2.3.3).

Comme expliqué à la Section 1.2.3.3, il est possible d'obtenir les propriétés apparentes via le module de compressibilité k^{app} et le module de cisaillement μ^{app} avec 2 chargements unitaires. Nous montrons ici qu'un seul chargement mixte est suffisant (cf. l'équation (2.30)).

$$\underline{\underline{E}} = \begin{pmatrix} 1. & 1. & 0. \\ 1. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} k^{app} = \frac{1}{3} \text{trace}(\underline{\underline{\Sigma}}^{app}) \\ \mu^{app} = \frac{1}{4} \left(\frac{3}{2} \Sigma_{11}^{app} - \frac{1}{2} \text{trace}(\underline{\underline{\Sigma}}^{app}) + \Sigma_{12}^{app} \right), \end{cases} \quad (2.30)$$

avec

$$\underline{\underline{\Sigma}}^{app} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle. \quad (2.31)$$

On peut noter que davantage de termes que ceux utilisés dans [KANIT et al. 2003] sont également utilisés pour le calcul de μ^{app} , ce qui assure une meilleure stabilité de cette valeur.

Les moyennes par phase (correspondant aux premier et second moments) sont obtenus directement à partir des contraintes locales (cf. l'équation (2.6)).

2.4. Résultats numériques

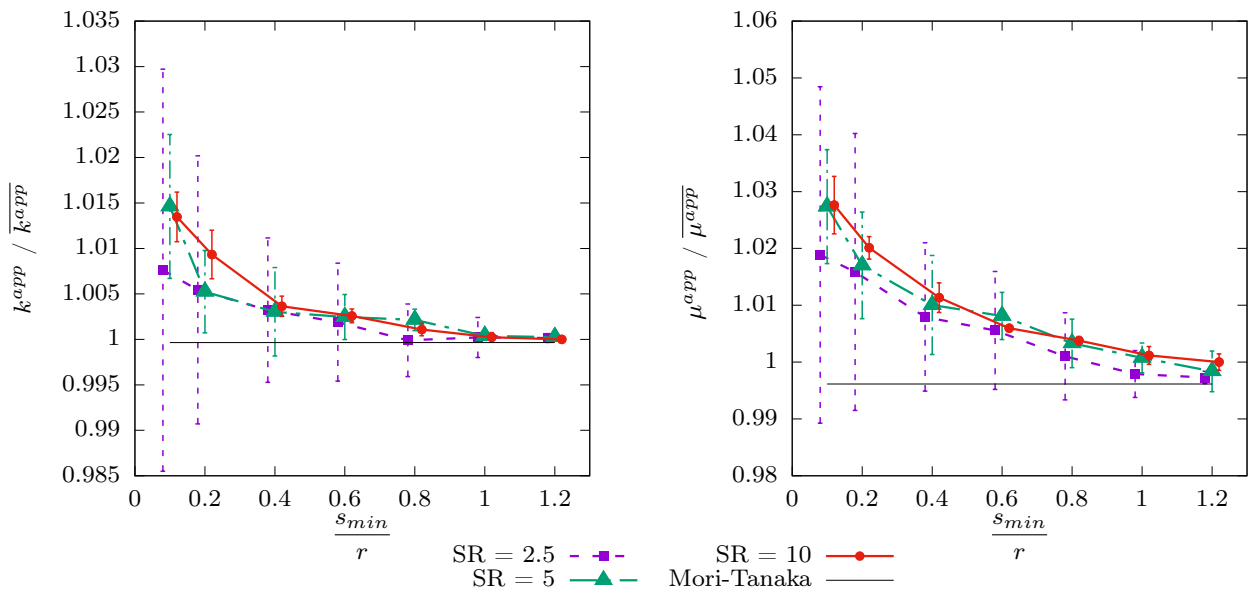
Les VER décrits dans la Section 2.2 sont utilisées pour étudier les effets de la proximité des inclusions sur le comportement du composite. Sauf indication contraire, les inclusions sont supposées avoir un rayon $r = 10 \mu m$ et une fraction volumique $f_v = 13,4 \%$. La valeur moyenne et l'écart-type de la valeur moyenne sur les tirages sont déterminés pour toutes les quantités d'intérêt. Afin d'apprécier et de comparer les tendances globales, ces post-traitements numériques sont normalisés par les valeurs moyennes issues des calculs sur les VER avec le plus grand SR (généralement $SR = 10$ est considéré comme la référence en raison de la faible dispersion des résultats) et la plus grande s_{min} (configurations dans lesquelles les inclusions sont le plus également réparties dans la matrice). Ces valeurs de normalisation sont marquées par un symbole de surlignage $\overline{\bullet}$.

L'analyse se concentre sur les contrastes de rigidité entre les phases de 0,01 et 100 (cf. Equation (2.4)), car des tendances similaires sont observées pour des contrastes de 0,1 et 10 respectivement. Par souci d'exhaustivité, les résultats pour ces derniers contrastes sont présentés en Annexe A (propriétés effectives), en Annexe B (moyennes par phase) et en Annexe C (contraintes locales).

2.4.1. Résultats pour les propriétés effectives

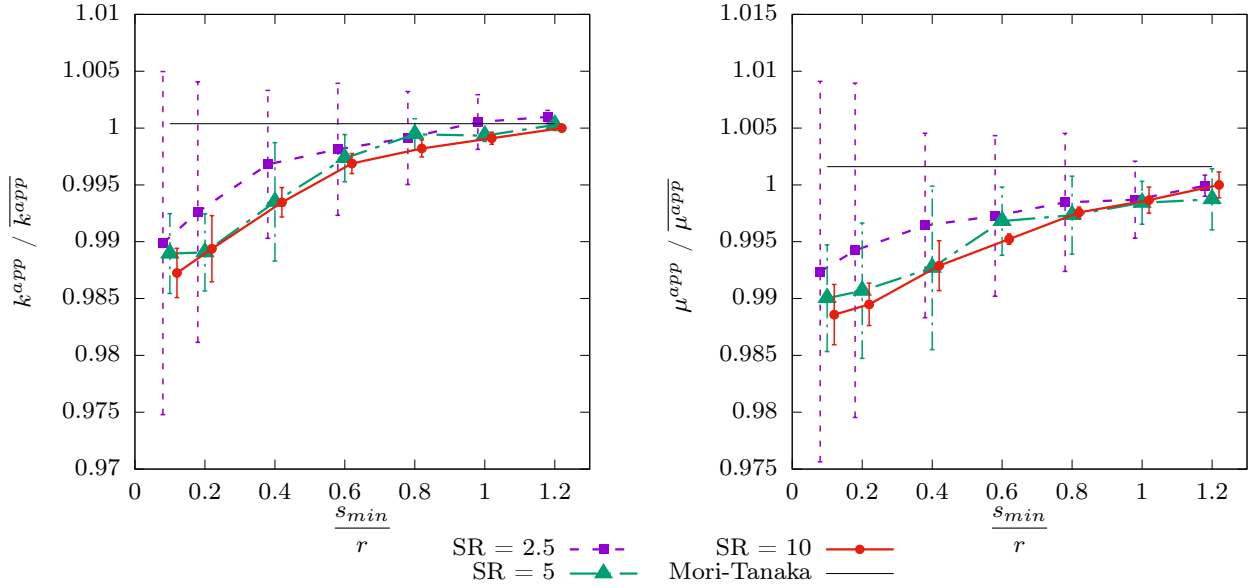
Dans cette section, les modules apparents (module de compressibilité k^{app} et module de cisaillement μ^{app}) obtenus par des simulations par champs complets (cf. l'équation (2.30)) sont comparés aux estimations de Mori–Tanaka (cf. l'équation (1.17)). L'influence de la distance minimale effective s_{min} sur les propriétés effectives est indiquée par la Figure 2.2.

La première conclusion que l'on peut dégager est que les valeurs moyennes varient peu entre les différents SR . Comme prévu, lorsque le rapport d'échelle augmente, l'écart-type diminue pour devenir très faible à $SR = 10$. Nous notons également que, quel que soit le SR , l'écart-type diminue à mesure que s_{min} augmente, pour devenir presque négligeable à $s_{min} = 1,2r$. Cette tendance est due à un biais de tirages à s_{min} élevé. En effet, la possibilité de distribuer les inclusions diminue à mesure que s_{min} augmente. Compte tenu de la périodicité, des VER très similaires sont obtenus et, par conséquent, les résultats numériques sont proches entre les tirages. Ceci peut être confirmé par la Figure 2.3, qui montre la distance moyenne entre les sphères s_{mean} en fonction de la distance minimale effective s_{min} pour les différents rapports d'échelle. Comme prévu, l'écart-type de s_{mean} diminue à mesure que s_{min} augmente et devient presque nul à $s_{min} = 1,2r$ pour les rapports d'échelle supérieurs à 5. De plus, il apparaît que les courbes convergent asymptotiquement vers la première bissectrice : $s_{mean} \rightarrow s_{min}$ lorsque s_{min} croît. Plus le rapport d'échelle est élevé, plus la vitesse de convergence est rapide. Les fluctuations de la moyenne à $SR = 5$ signifie un manque de tirages pour ce rapport.



(a) $contraste = 100$, $\overline{k^{app}} = 20,8$ MPa, $\overline{\mu^{app}} = 10,2$ MPa

2.4. Résultats numériques



(b) $contrast = 0,01$, $\overline{k^{app}} = 12,0$ MPa, $\overline{\mu^{app}} = 5,96$ MPa

FIGURE 2.2. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne des modules apparents en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4$ %. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

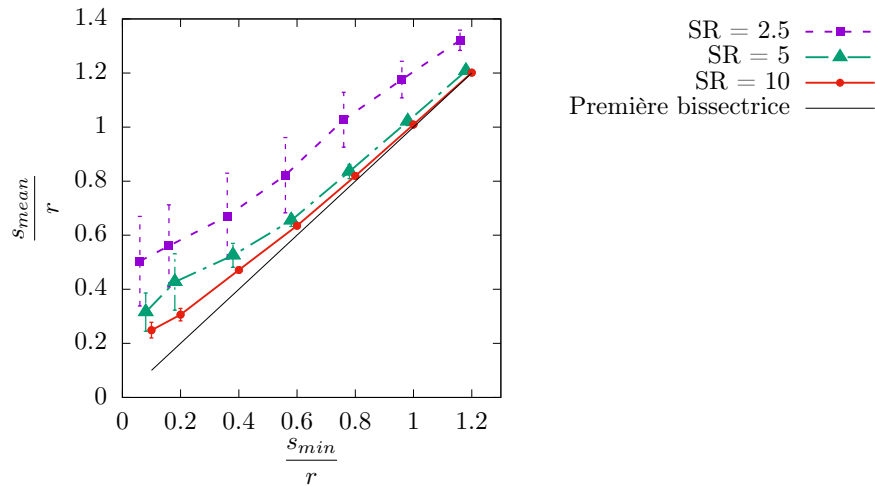


FIGURE 2.3. – Distance moyenne entre deux sphères s_{mean} en fonction de la distance minimale effective s_{min} pour différents rapports d'échelle. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

En ce qui concerne l'effet de proximité sur les propriétés effectives, nous notons à la Figure 2.2, un raidissement (resp. un assouplissement) du matériau lorsque les inclusions se rapprochent pour des hétérogénéités rigides (resp. souples). L'effet de la distance entre les inclusions semble disparaître lorsque cette distance devient supérieure au rayon de la sphère. Ce résultat est en accord avec la distance d'influence des inclusions sur la matrice mentionnée par [ODEGARD et al. 2005]. Les propriétés effectives tendent vers une asymptote dont la valeur est bien prédite par

l'estimation de Mori–Tanaka. Ceci est cohérent avec l'hypothèse théorique des inclusions isolées dans la matrice, sur laquelle ces estimations sont construites. D'un point de vue quantitatif, pour cette fraction volumique modérée ($f_v = 13.4\%$), l'écart n'atteint que quelques pourcents pour les distances minimales faibles entre les inclusions.

Par souci d'exhaustivité, l'influence du rayon de la sphère et de la fraction volumique d'inclusions a été étudiée. Dans les deux cas, les simulations à $SR = 10$ n'ont pas été effectuées, car les résultats obtenus à $SR = 5$ étaient suffisamment précis pour vérifier une tendance (cf. Figure 2.2). On constate que le rayon de la sphère (pour une fraction volumique donnée) n'a pas d'effet qualitatif ou quantitatif sur les comportements observés en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r (cf. Figure A.2 en Annexe A pour $r = 5\ \mu m$). Au contraire, la fraction volumique d'inclusions exacerbe la divergence des propriétés effectives avec une décroissance de s_{min}/r (cf. Figure 2.4 pour $f_v = 25,1\%$ avec $r = 10\ \mu m$, comme à la Figure 2.2 mais avec $\max(s_{min}/r) = 0.8$ (cf. Equation (2.1)). Dans ce cas, l'écart peut atteindre environ 10 % sur le module de cisaillement effectif pour des inclusions rigides. Les écarts des propriétés effectives avec le paramètre de tassement semblent donc être proportionnels à la fraction volumiques d'inclusions. Ces résultats sont en bon accord avec les observations de [MAJEWSKI et al. 2017]. En augmentant la fraction volumique, la convergence de s_{mean} vers s_{min} est plus rapide et davantage de sphères proches contribuent à rigidifier/assouplir le matériau.

Une tendance à l'assouplissement des propriétés effectives pour les inclusions souples ($contrast < 1$) a également été observée récemment par [ZERHOUNI et al. 2021] dans le cas de microstructures avec des canaux cylindriques entre des pores sphérique. Les auteurs ont montré que les propriétés effectives sont plus faibles (même pour une faible fraction volumique de canaux) que celles obtenues avec une microstructure sans canaux avec la même fraction volumique totale. Dans la Section 2.4.3, nous montrons que la zone de perturbation entre les inclusions proches peut effectivement être assimilée à des canaux, ou, plus généralement, à un réseau, entre les inclusions.

Concernant le comportement en fonction de s_{min}/r , dans le cas d'inclusions rigides ($contrast > 1$), des conclusions similaires ont été tirées par [MAJEWSKI et al. 2017] en ce qui concerne la rigidification du matériau lorsque s_{mean}/r (précisément $s_{mean}/2r$ dans leur article) diminue.

Compte tenu de l'écart éventuellement marqué entre les estimations analytiques et les valeurs homogénéisées simulées, une approche analytique prenant en compte l'effet de tassement au sein du VER serait intéressante. En ce qui concerne l'application de l'approche MRP menée par [MAJEWSKI et al. 2017] prenant en compte la distance moyenne entre les sphères $s_{mean}/2r$ mais ne conduisant qu'à une prédiction qualitative (et non quantitative) du comportement effectif, la Figure 2.3 peut indiquer qu'il est préférable de se concentrer sur la distance minimale relative s_{min}/r entre les inclusions.

2.4. Résultats numériques

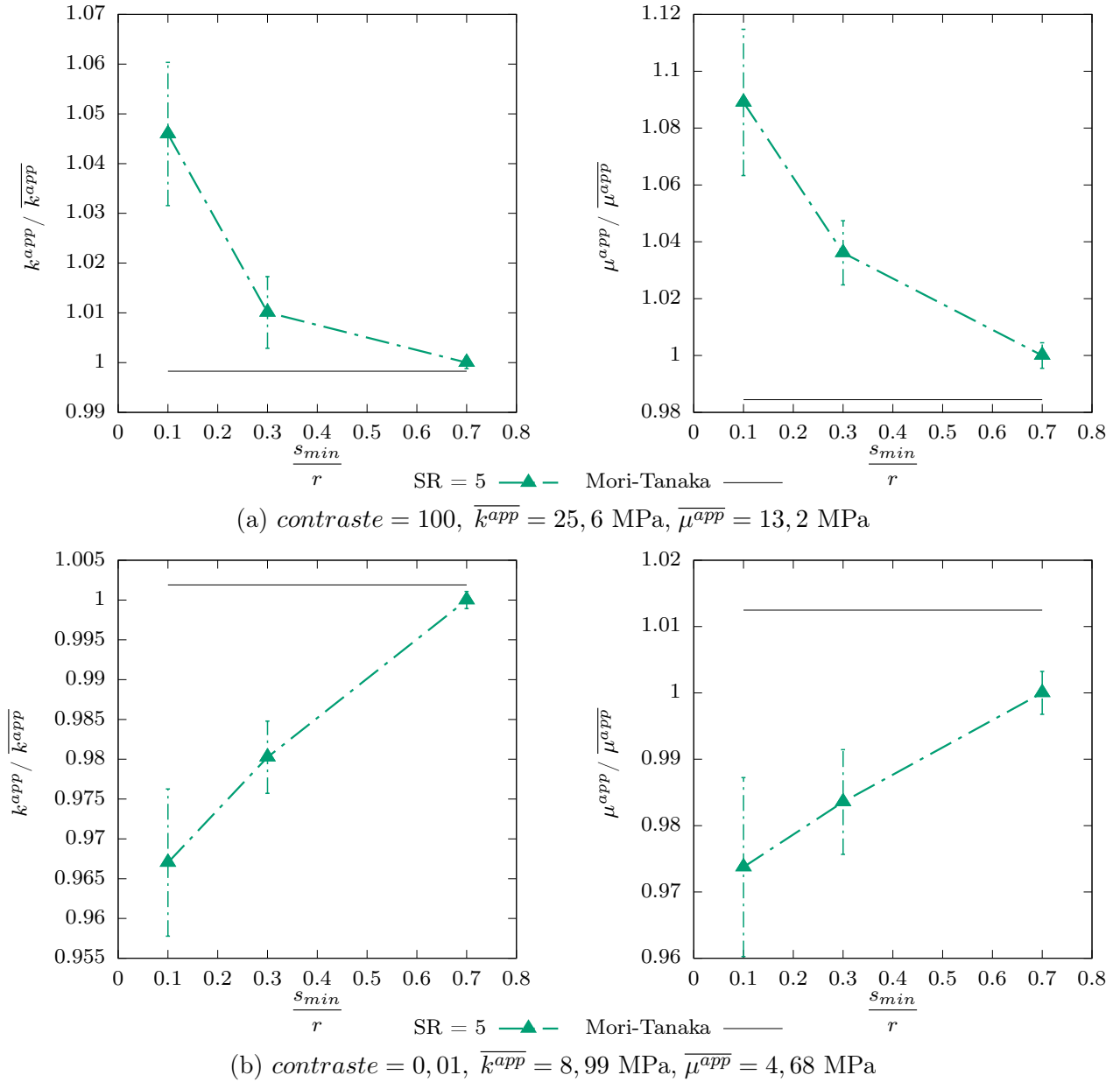


FIGURE 2.4. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne des modules apparents en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 25,1$ %.

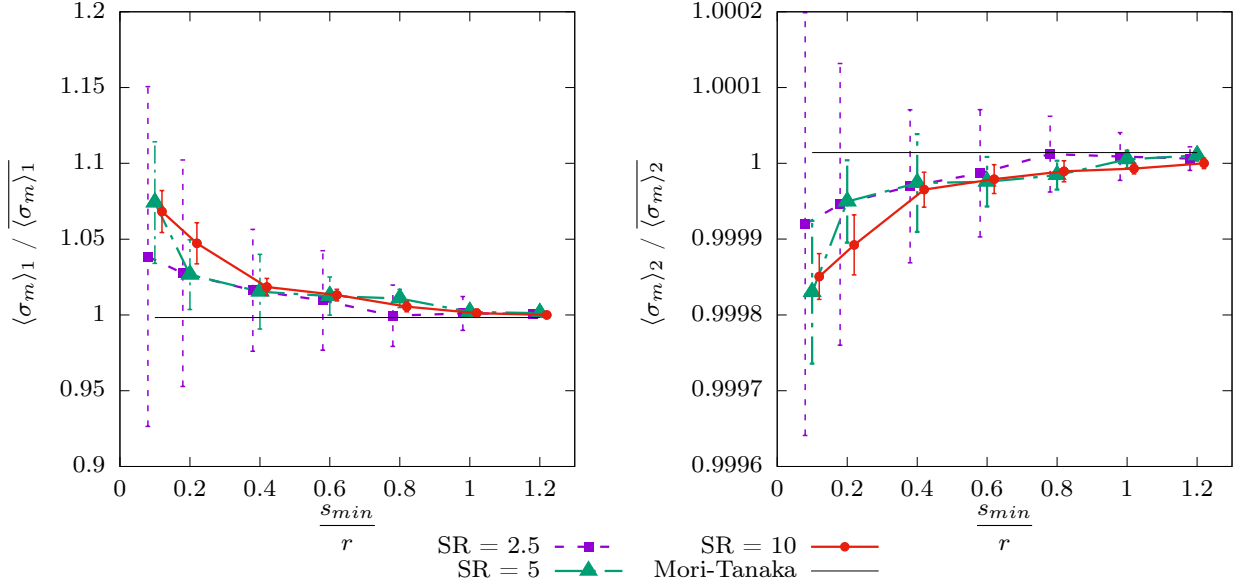
2.4.2. Résultats pour les moyennes par phase

L'une des nouveautés de cette contribution est l'étude de l'effet de la proximité des inclusions sur les moyennes par phase. Comme l'approche de Mori–Tanaka nous permet d'obtenir des estimations pour ces quantités d'intérêt (cf. Section 2.3.2), une comparaison des contraintes moyennes analytiques et simulées par EF peut être effectuée. Les premiers et seconds moments des contraintes hydrostatiques et équivalentes par phase sont analysés ci-dessous.

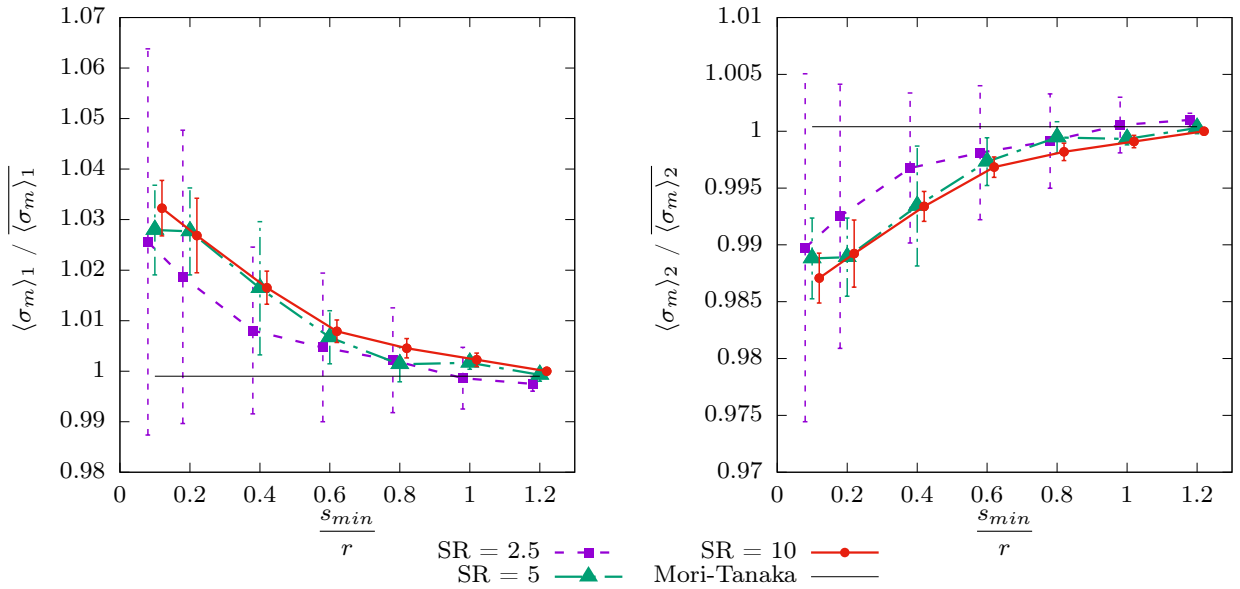
2.4.2.1. Premier moment

Contrainte hydrostatique

Sur la Figure 2.5, l'évolution du premier moment par phase de la contrainte hydrostatique (à savoir $\langle \sigma_m \rangle_i$, $i = 1, 2$) est tracée en fonction de s_{min}/r pour différents contrastes et rapports d'échelle.



(a) $contraste = 100$, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_1} = 30,9$ MPa, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_2} = 19,2$ MPa



(b) $contraste = 0.01$, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_1} = 0,356$ MPa, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_2} = 13,7$ MPa

FIGURE 2.5. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13.4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

2.4. Résultats numériques

Tout d’abord, des conclusions identiques à celles de la Section 2.4.1 peuvent être faites sur la faible influence de SR sur la tendance des résultats en moyenne. En revanche, on observe ici que la forme des courbes ne dépend pas du contraste. Lorsque les inclusions se rapprochent, la contrainte hydrostatique moyenne tend à augmenter (resp. à diminuer) dans la phase inclusionnaire (resp. matricielle), quel que soit le contraste entre les phases. Nous constatons que la phase rigide dicte les propriétés effectives, avec des courbes très similaires à celles des propriétés effectives tracées à la Figure 2.2.

Pour les inclusions rigides, la contrainte hydrostatique moyenne est davantage influencée par la proximité des inclusions dans la phase inclusionnaires que dans la phase matricielle qui a globalement un comportement moyen plus stable (écarts $< 1\%$). Dans ce cas, l’écart dans les inclusions peut dépasser 10% (cf. Figure B.2 pour $f_v = 25\%$). Des similitudes peuvent être trouvées avec [RASOOL et al. 2012], où l’influence de la forme des inclusions rigides (polyèdres et sphères) sur les moyennes par phase a été étudiée. Les auteurs ont observé que la contrainte moyenne dans la phase inclusionnaire (resp. matricielle) dans le cas des polyèdres était plus élevée (resp. plus faible) que dans le cas des sphères. Le comportement des inclusions sphériques proches ($s_{min} < 0.5r$) étudiées ici est similaire à celui des inclusions polyédriques, ce qui semble géométriquement cohérent.

Concernant les inclusions souples, les résultats sont moins impactées et présentent un écart modéré. La matrice est plus impactée que celle des inclusions rigides. Un écart du même ordre de grandeur est observé pour la matrice et les inclusions.

Contrainte équivalente

La Figure 2.6 montre l’évolution du premier moment par phase de la contrainte équivalente (à savoir $\langle \sigma_{eq} \rangle_i$, $i = 1, 2$) en fonction de s_{min}/r pour différents contrastes et rapports d’échelle. Comme souligné précédemment dans la Section 2.3.2, aucune estimation de MT ne peut être déduite pour cette quantité.

Globalement, les résultats sont proches de ceux obtenus pour la contrainte hydrostatique. Cependant, les valeurs de l’écart au minimum de s_{min}/r , notamment pour la phase inclusionnaire, sont doublées et peuvent atteindre plus de 15% . On constate que pour des inclusions (très) rigides, la tendance est différente pour la phase matricielle. Par exemple, pour le contraste de 100, la contrainte équivalente diminue au fur et à mesure que les inclusions s’éloignent. On peut supposer que lorsque le contraste augmente, l’influence de la contrainte de cisaillement devient localement importante. Il faut noter que ces conclusions sont en bon accord avec les résultats de [RASOOL et al. 2012], en considérant la même analogie que précédemment (c’est-à-dire, faible $s_{min}/r \rightarrow$ inclusions polyédriques, grand $s_{min}/r \rightarrow$ inclusions sphériques) : la contrainte hydrostatique dans la matrice est plus importante avec les inclusions sphériques qu’avec les polyédriques, alors que la contrainte équivalente est plus faible pour la même comparaison.

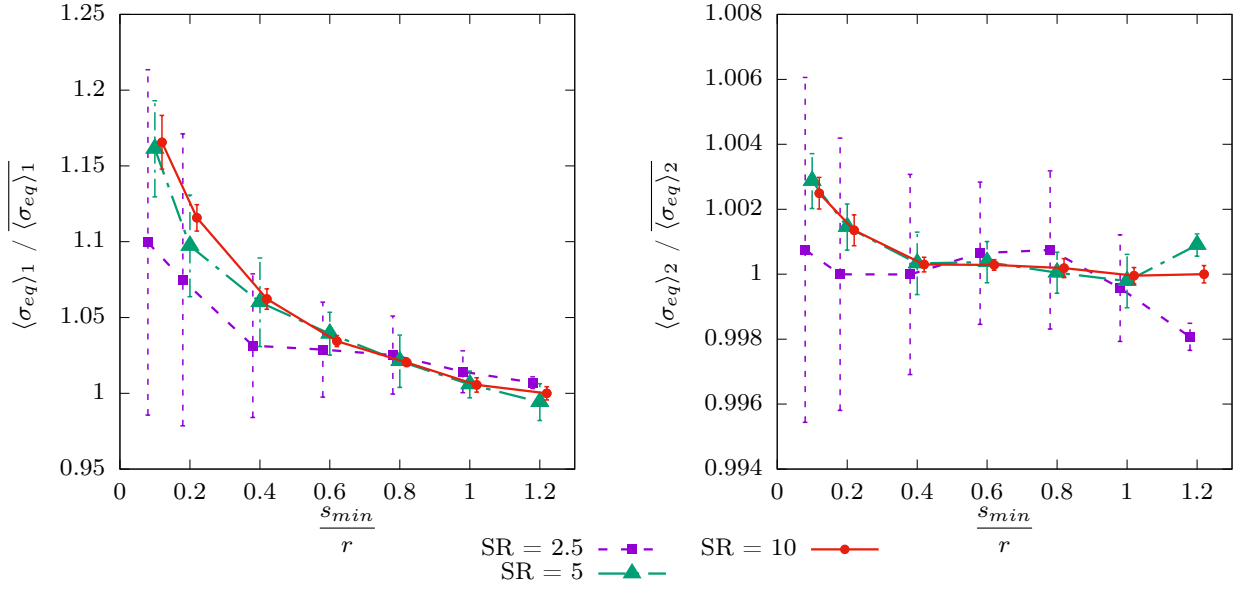
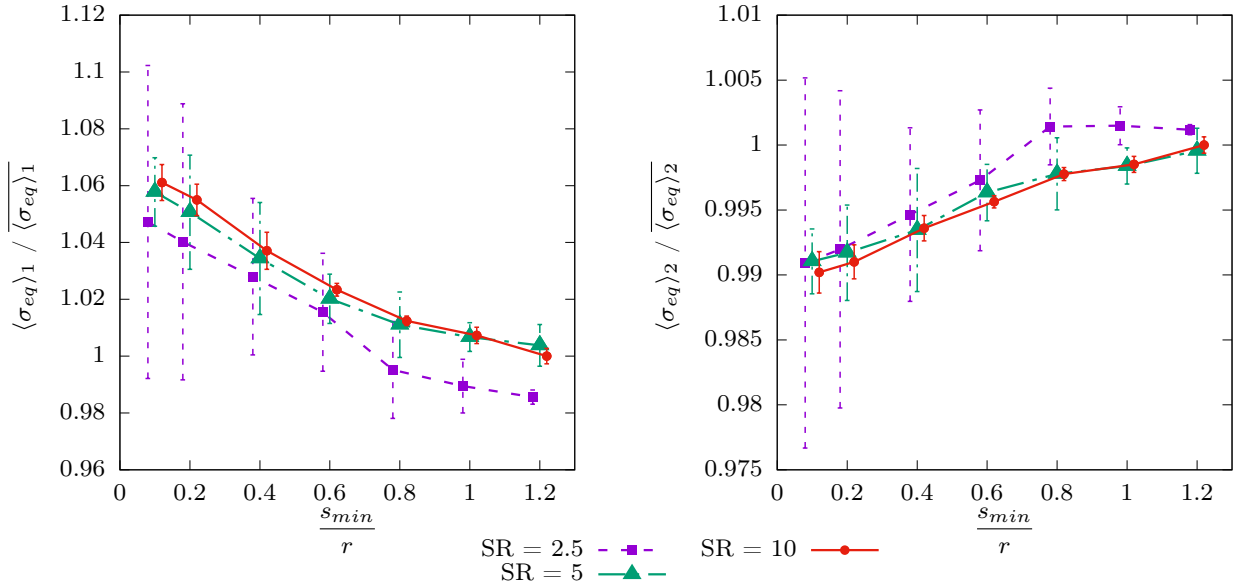
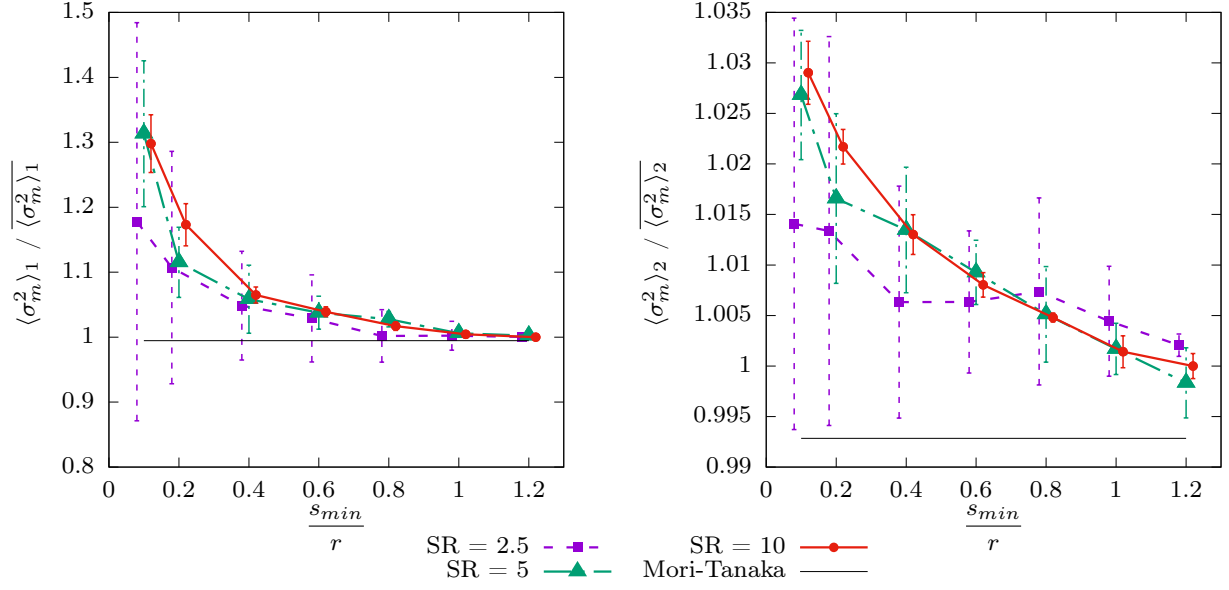

 (a) $contraste = 100$, $\overline{\langle \sigma_{eq} \rangle_1} = 75,1$ MPa, $\overline{\langle \sigma_{eq} \rangle_2} = 37,0$ MPa

 (b) $contraste = 0,01$, $\overline{\langle \sigma_{eq} \rangle_1} = 0,525$ MPa, $\overline{\langle \sigma_{eq} \rangle_2} = 29,1$ MPa

FIGURE 2.6. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte équivalente par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4$ %. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

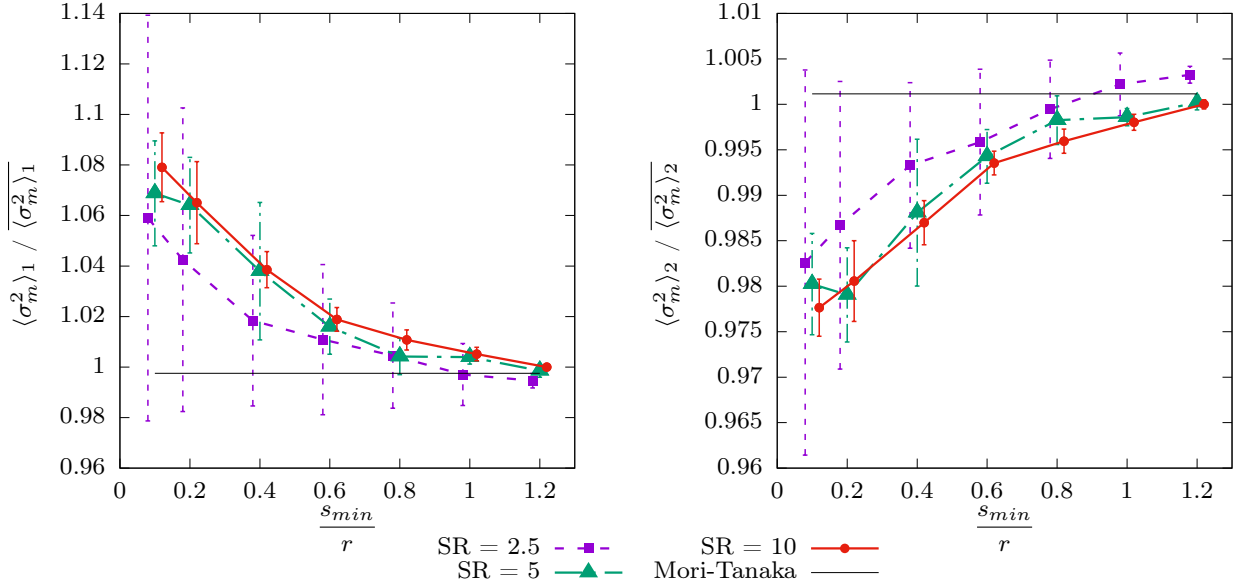
2.4.2.2. Second moment

L'évolution du second moment des contraintes hydrostatiques et équivalentes par phase ($\langle \sigma_m^2 \rangle_i$ et $\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_i$, respectivement) en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r est représentée aux figures 2.7 et 2.8, respectivement.

2.4. Résultats numériques



(a) $contrast = 100$, $\overline{\langle \sigma_m^2 \rangle_1} = 955 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_m^2 \rangle_2} = 396 \text{ MPa}^2$



(b) $contrast = 0,01$, $\overline{\langle \sigma_m^2 \rangle_1} = 0,126 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_m^2 \rangle_2} = 200 \text{ MPa}^2$

FIGURE 2.7. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

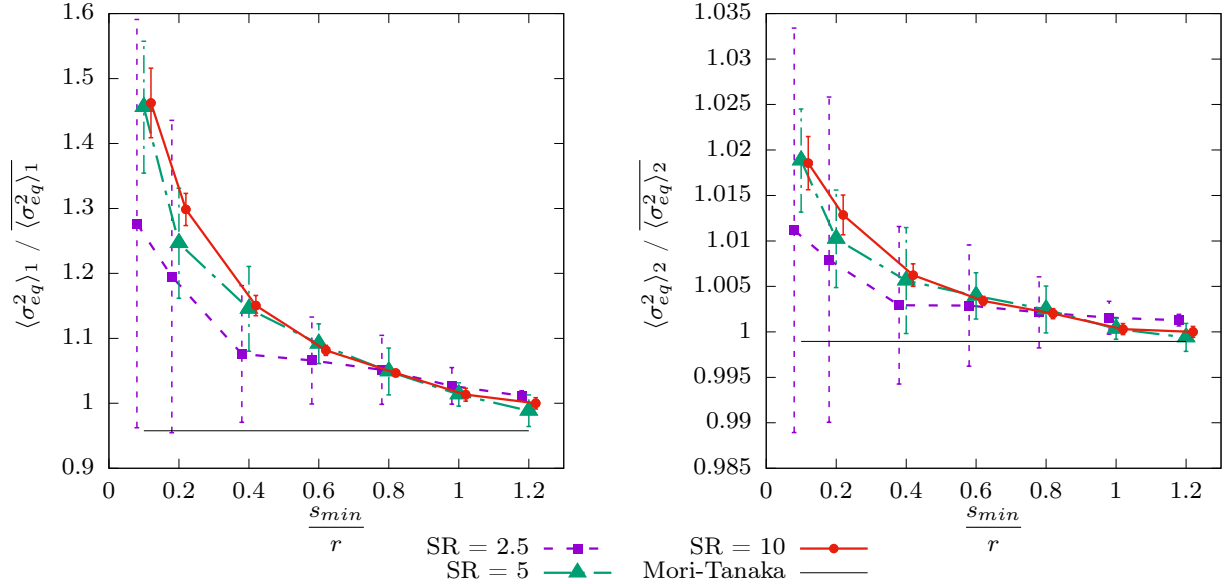
Les tendances observées sont similaires pour les deux types de contraintes. Pour les comprendre, il est utile de considérer la définition suivante du second moment :

$$\langle \bullet^2 \rangle_i = V_i(\bullet) + \langle \bullet \rangle_i^2, \quad (2.32)$$

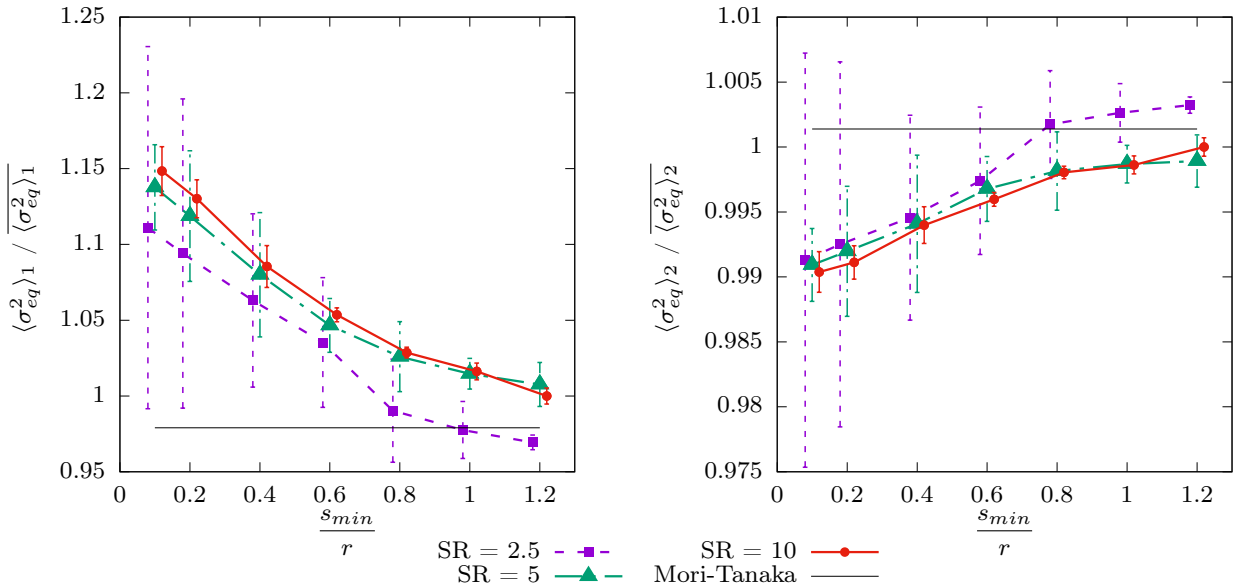
avec V_i la variance (le carré de l'écart-type) dans la phase $i = 1, 2$.

Dans les inclusions, l'écart-type varie avec le paramètre de tassement de la même manière que

les premiers moments. En effet, le tenseur des contraintes tend à être homogène (faible écart-type) lorsque les inclusions sont éloignées les unes des autres, mais très perturbé (écart-type élevé) lorsque les inclusions sont proches. Ces observations sont confirmées par l'analyse des champs locaux dans la Section 2.4.3. En conséquence, les seconds moments ont tendance à augmenter lorsque s_{min}/r diminue. Les différences sont exacerbées par rapport aux premiers moments, car l'écart peut atteindre 30 % (contrainte hydrostatique) ou 50 % (contrainte équivalente) pour les inclusions rigides les plus affectées. L'écart atteint environ 10 % pour les inclusions souples.



(a) $contrast = 100$, $\overline{\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_1} = 5650 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_2} = 1440 \text{ MPa}^2$



(b) $contrast = 0,01$, $\overline{\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_1} = 0,276 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_2} = 880 \text{ MPa}^2$

FIGURE 2.8. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte équivalente par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

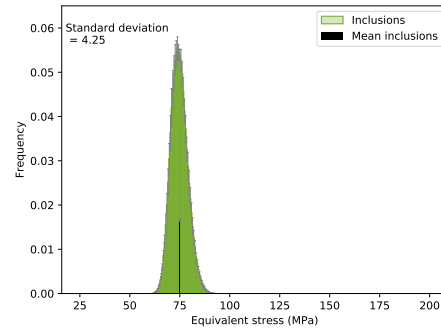
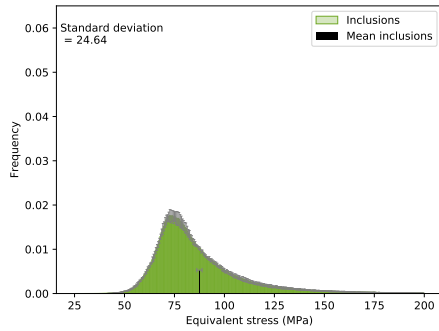
2.4. Résultats numériques

Pour la phase matricielle, la tendance est clairement différente selon que les inclusions soient souples ou rigides. Pour les inclusions rigides, le second moment augmente lorsque les inclusions se rapprochent, alors que le comportement inverse est observé pour les inclusions souples. Comme les premiers moments sont presque constants pour les inclusions rigides, le comportement observé revient à celui de l'écart-type dans la matrice. Pour les inclusions souples, l'écart-type varie moins en fonction du paramètre de tassement ; le comportement reste donc à peu près cohérent avec celui des premiers moments. Dans tous les cas, l'écart reste raisonnable dans la matrice, avec une valeur maximale de 3 %. Cependant, il devient plus important avec des fractions volumiques d'inclusions plus élevées. Par exemple, pour $f_v = 25,1$ %, l'écart pour le second moment de la contrainte hydrostatique dans la matrice peut atteindre 10 % (cf. Figure B.5).

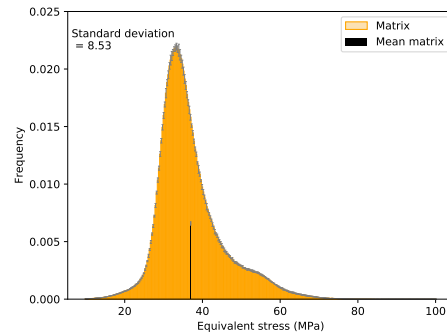
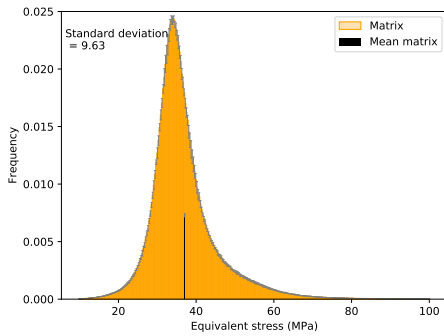
En ce qui concerne la comparaison avec les estimations MT, nous observons toujours une convergence asymptotique bien marquée des simulations vers les estimations MT lorsque s_{min}/r augmente. Dans les inclusions, les écarts sont beaucoup trop importants pour que MT soit considéré comme un bon estimateur lorsque $s_{min}/r < 0,5$. Ainsi, en utilisant l'équation (2.1), des estimations correctes grâce à l'approche MT ne peuvent être obtenues pour des fractions volumiques supérieures à 35 %. Cette fraction volumique maximale est en bon accord avec ce qui est indiqué dans la littérature (par exemple par [CHRISTENSEN 1990]).

2.4.3. Résultats pour les champs locaux

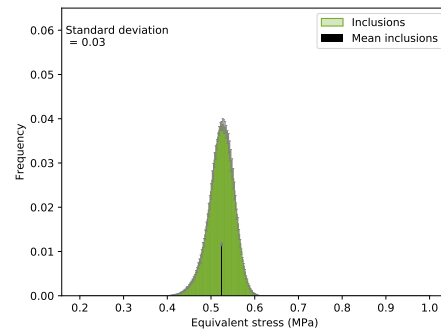
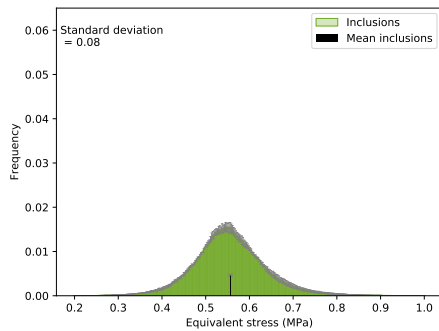
Les histogrammes de fréquence de la contrainte équivalente au sein de chaque phase sont tracés sur la Figure 2.9 pour les distances minimales extrêmes ($s_{min} = 0,1r$ et $s_{min} = 1,2r$). La première conclusion que l'on peut tirer est que plus les inclusions sont éloignées les unes des autres, plus leur comportement est homogène. Ceci est en bon accord avec la solution uniforme d'une seule inclusion dans une matrice infinie [TORQUATO 2002]. La phase inclusionnaire est clairement la plus affectée par la variation du paramètre de tassement s_{min}/r . L'écart-type peut être jusqu'à 5 fois plus important. Globalement, la matrice est peu affectée par la proximité des inclusions. Cependant, on peut observer à $s_{min}/r = 1,2$ (cf. Figure 2.9d) un second petit pic qui n'apparaît pas à $s_{min}/r = 0,1$. Ce pic est également mentionné par [RASOOL et al. 2012] et expliqué par les auteurs par une région matricielle concentrique de forte contrainte équivalente entourant chaque inclusion sphérique. Nous avons déjà remarqué cette perturbation de la matrice par les inclusions dans la Section 2.4.1, ce qui est cohérent avec les travaux de [ODEGARD et al. 2005]. Il est observé par [RASOOL et al. 2012] que ce pic est moins prononcé avec les inclusions polyédriques qu'avec les inclusions sphériques, ce qui est cohérent avec nos résultats, en considérant la même analogie que dans la Section 2.4.2 : le comportement des inclusions sphériques proches est similaire à celui des inclusions polyédriques. En effet, nous pouvons observer que les valeurs de contrainte à $s_{min} = 0,1r$ sont plus élevées et se déplacent donc plus à droite de l'histogramme : l'histogramme est plus large (cf. Figure 2.9c).



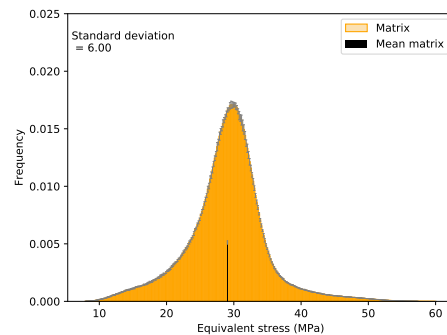
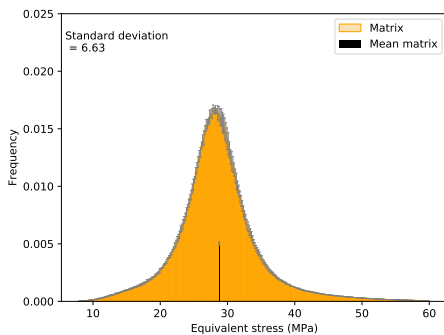
(a) Phase inclusionnaire, $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 100$ (b) Phase inclusionnaire, $s_{min} = 1, 2r$, $contrast = 100$



(c) Phase matricielle, $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 100$ (d) Phase matricielle, $s_{min} = 1, 2r$, $contrast = 100$



(e) Phase inclusionnaire, $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 0,01$ (f) Phase inclusionnaire, $s_{min} = 1, 2r$, $contrast = 0,01$



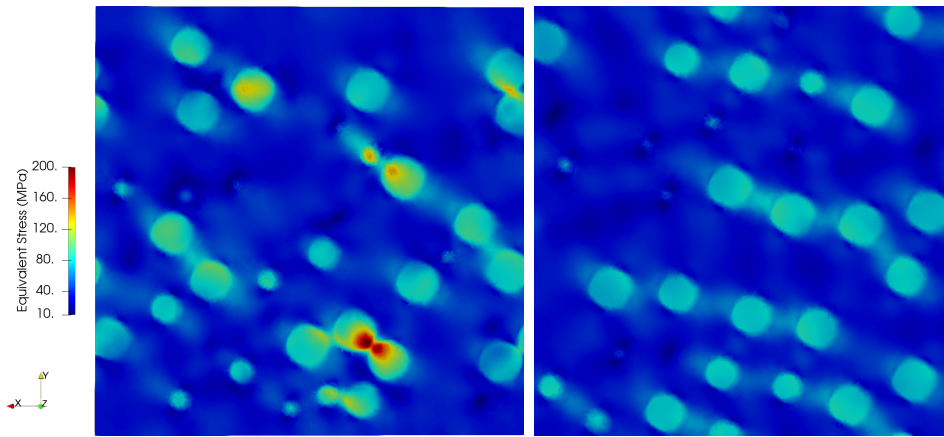
(g) Phase matricielle, $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 0,01$ (h) Phase matricielle, $s_{min} = 1, 2r$, $contrast = 0,01$

FIGURE 2.9. – Histogrammes de fréquence de la contrainte équivalente par phase à $SR = 10$, $f_v = 13,4\%$, aux valeurs extrêmes de s_{min} ($s_{min} = 0,1r$ et $s_{min} = 1,2r$) pour les contrastes de 0,01 et 100.

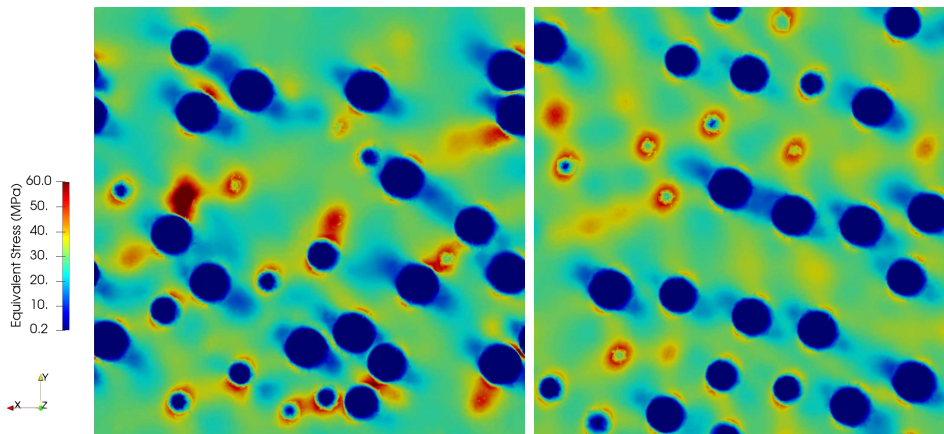
2.4. Résultats numériques

Ces effets localisés ne sont pas suffisamment visibles sur les histogrammes car ils ne concernent qu'une très petite région de la microstructure. Ainsi, des vues en coupe du VER à $SR = 10$ sont présentées à la Figure 2.10 pour les valeurs extrêmes de s_{min} . A des fins de comparaison, la même échelle a été utilisée pour chaque contraste. La Figure 2.10a confirme que les valeurs de contrainte les plus élevées sont situées dans la zone de perturbation de la matrice entre deux inclusions proches. Nous pouvons clairement voir que les zones de perturbation de la matrice près d'une interface inclusion/matrice sont de l'ordre du rayon des sphères (cf. [ODEGARD et al. 2005]), comme déjà mentionné dans la Section 2.4.1. En accord avec les observations faites par [RASOOL et al. 2012], cette zone de perturbation suit clairement la direction du chargement (cf. l'équation (2.30)). Ces valeurs de contrainte peuvent être deux fois plus importantes que celles entre des inclusions éloignées. Ces perturbations entre inclusions proches sont moins marquées lorsque les inclusions sont souples, ce qui est en bon accord avec toutes nos conclusions précédentes.

De plus, lorsque les inclusions sont proches, un réseau apparaît clairement entre les sphères, ce qui corrobore notre parallèle avec le réseau de canaux (cf. [ZERHOUNI et al. 2021]). Enfin, en regardant les sphères les plus proches, le parallèle avec une forme polyédrique des inclusions (cf. [RASOOL et al. 2012]) est plus facilement compréhensible.



(a) $contrast = 100$, à gauche : $s_{min} = 0, 1r$, à droite : $s_{min} = 1, 2r$



(b) $contrast = 0,01$, à gauche : $s_{min} = 0, 1r$, à droite : $s_{min} = 1, 2r$

FIGURE 2.10. – Contrainte équivalente locale à $SR = 10$, $f_v = 13,4\%$ aux valeurs extrêmes de s_{min} et aux contrastes de 100 et 0,01 – Vues en coupe transversale du VER.

2.5. Conclusion

L'effet de proximité d'inclusions sphériques monodispersées modérément diluées dans un composite matrice-inclusion a été étudié dans ce chapitre. Au-delà des propriétés effectives, nous analysons le comportement des moments (premier et second) de contraintes par phase et les champs locaux, ce qui n'a jamais été fait auparavant dans la littérature. Des comparaisons d'un grand intérêt avec les estimations largement utilisées de Mori–Tanaka sont également proposées en particulier pour les premiers et seconds moments par phase.

Un raidissement (resp. un assouplissement) du composite pour les hétérogénéités rigides (resp. souples) est observé lorsque les inclusions deviennent plus proches, en particulier, à une distance inférieure au rayon des sphères. Cependant, l'écart des propriétés effectives reste acceptable (moins de 5 %) et les estimations de Mori–Tanaka se révèlent fiables.

L'effet du paramètre de tassement, qui s'avère être s_{min}/r avec s_{min} la distance effective minimale entre les sphères et r le rayon de la sphère, semble plus important sur les moments par phase, en particulier dans la phase inclusionnaire (phase minoritaire). Pour le second moment, l'écart peut atteindre 50 %. Il est montré que les estimations de Mori–Tanaka sont valables pour un paramètre de tassement $s_{min}/r > 0,5$, ce qui est en bon accord avec l'hypothèse d'inclusions isolées à la base de cette approche analytique. Ces conclusions peuvent être extrapolées au cas des inclusions polydispersées, en considérant le rayon de la plus grande sphère par zone de tassement. Dans des travaux ultérieurs, il pourrait également être intéressant de confirmer les effets de proximité sur d'autres formes d'inclusions.

Il a été montré que l'augmentation de la fraction volumique d'inclusions exacerbe l'écart par rapport au paramètre de tassement. Dans des travaux ultérieurs, il serait intéressant de mener une étude numérique approfondie pour un composite concentré en comparaison avec les estimations analytiques appropriées. La plage de variation du paramètre de tassement peut, dans ce cas, concerner des valeurs très faibles.

Compte tenu de l'écart éventuellement marqué entre les estimations analytiques et les simulations EF, il serait utile d'adopter une approche analytique qui tienne compte de l'effet de tassement à l'intérieur du VER. Quelques tentatives ont été faites dans la littérature, mais sans résultats quantitatifs satisfaisants et surtout sans estimateurs des moments par phase.

Enfin, c'est sur les champs locaux que l'effet de la proximité des inclusions est le plus important et comme prévu, entre et dans les sphères les plus proches. En particulier, la contrainte maximale peut être localement doublée. Les composites avec des inclusions rigides sont les plus touchés par cette zone de perturbation locale dans la matrice. Comme ces champs locaux sont de première importance en ce qui concerne l'initiation de phénomènes locaux dans la microstructure, il semble important dans un couplage numérique multiéchelle de rechercher non seulement les propriétés effectives précises, mais aussi les champs locaux précis.

Chapitre 3

Amélioration de la précision des solutions microscopiques obtenues via des conditions de type Dirichlet aux bords de VER

Ce chapitre se concentre sur l'amélioration des solutions Éléments Finis obtenues lors de l'application de conditions aux limites (BC) de type Dirichlet au bord du VER. La microstructure étudiée est un composite matrice-inclusion aléatoire. Pour ce type de microstructure, il est bien connu que des conditions aux limites périodiques appliquées sur des VER périodisés conduisent à des solutions beaucoup plus précises que celles obtenues à partir de conditions aux limites de déformation uniforme (de type Dirichlet), au détriment du temps de calcul et de maillage. L'objectif de cette partie est d'explorer différentes stratégies pour améliorer les solutions associées aux BC de type Dirichlet sans affecter leur vitesse de calcul compétitive, en vue de les utiliser au sein d'une méthode d'homogénéisation numérique de type Éléments Finis multiniveaux. Une attention particulière est portée sur le cas des inclusions rigides, pour lesquelles la précision des solutions de type Dirichlet est très dégradée. L'efficacité des différentes stratégies étudiées est évaluée via une comparaison aux solutions de référence obtenues à partir de conditions périodiques. Les propriétés apparentes et moments par phase sont regardés, mais également la localisation des champs microscopiques.

La majorité de ce travail fait l'objet d'un article en cours de rédaction [[BELGRAND et al. 2023a](#)] et a été présentée à la conférence ECCOMAS [[BELGRAND et al. 2022b](#)].

Sommaire

3.1. Introduction	68
3.2. Définition du modèle de VER	70
3.3. Quelques stratégies pour améliorer les résultats obtenues avec des Conditions aux Limites de type Dirichlet	71
3.3.1. Sur l'efficacité des BC classiques imposant une déformation	71
3.3.2. Méthodes de post-traitement	72
3.3.3. Méthodes de prétraitement	75
3.3.4. Modification de la formulation des USBC dans le cas d'inclusions rigides	77
3.4. Résultats et discussion	78
3.4.1. Comparaison des différentes stratégies sur les champs d'intérêt	79
3.4.2. Analyse approfondie et résultats complémentaires des différentes méthodes	84
3.4.3. Focus sur le cas des inclusions proches	87
3.4.4. Focus sur le cas d'un contraste modéré	89
3.4.5. Focus sur le cas des inclusions souples	91
3.5. Conclusion	92

3.1. Introduction

Dans le cadre des approches d'homogénéisation numérique [SAEB et al. 2016], nous nous intéressons à l'application de conditions aux limites (BC) de Dirichlet au bord d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de la microstructure hétérogène, dans un cadre de résolution par Éléments Finis (EF). En effet, comme cela a été récemment souligné dans [WALTERS et al. 2021], ce type de BC est vraiment compétitif en terme de temps de calcul, mais les solutions associées souffrent généralement d'un manque de précision, en particulier pour les inclusions rigides [PECULLAN et al. 1999].

Afin d'imposer une déformation macroscopique au VER, les BC de Dirichlet les plus classiquement utilisées dans la littérature sont les conditions aux limites de déformation uniforme (USBC, acronyme anglais de Uniform Strain Boundary Conditions), formulées à la Section 1.2.3.2. Des comparaisons entre les solutions obtenues avec des USBC et des conditions aux limites périodiques (PBC, acronyme anglais de Periodic Boundary Conditions) ont été largement effectuées dans la littérature, principalement autour du comportement macroscopique apparent [MIEHE et al. 2002; KANIT et al. 2003; SAEB et al. 2016]. Les PBC produisent des résultats plus précis et une meilleure convergence en rapport d'échelle, défini comme le rapport entre la taille du VER et la taille maximale des inclusions. Cependant, ces conditions s'accompagnent de difficultés techniques liées à la génération de maillages périodiques et de coûts supplémentaires en terme de temps de calcul des solutions microscopiques [WALTERS et al. 2021]. Il convient de souligner que l'efficacité des PBC est liée à la possibilité de générer une microstructure périodisée à l'échelle du VER. C'est typiquement le cas pour les matériaux périodiques ou modèles, mais pas forcément pour les composites aléatoires quelconques. Lorsque la VER n'est pas périodisé, le taux de convergence des PBC devient similaire à celui des USBC [EGLOFFE et al. 2014; GLORIA et al. 2015]. Plusieurs méthodes [NGUYEN et al. 2012; AKPOYOMARE et al. 2016; SVENNING et al. 2017; K. SCHNEIDER et al. 2017; GIESEN LOO et al. 2020] ont été développées pour imposer les PBC sur des microstructures et maillages associés arbitraires, mais leur précision et leur utilisation (avec des interpolations supplémentaires au bord du VER) restent limitées.

Dans le cas de simulations multiéchelles à la volée, le temps CPU du calcul avec PBC peut conduire à une impossibilité de résolution en pratique [WALTERS et al. 2021]. Aucun résultat concluant n'a été obtenu pour réduire le coût de calcul des PBC, sans s'appuyer sur des méthodes basées sur l'apprentissage automatique (ML, acronyme anglais de Machine Learning), ce qui est clairement la tendance actuelle dans la littérature [Z. LIU et al. 2016; Z. LIU et al. 2019; MASI et al. 2021; BÉJI et al. 2023; BISHARA et al. 2023]. Cependant, ces méthodes doivent être entraînées sur des séries de données de simulations VER, ce qui peut entraîner une phase hors ligne très coûteuse. Une amélioration de la qualité des solutions obtenues par des BC de type Dirichlet sur le bord du VER, plus efficaces en termes de temps de calcul que les solutions PBC conventionnelles, peuvent être d'un grand intérêt.

Dans la littérature, des contributions visant à améliorer la précision des solutions avec USBC ont été introduites. Parmi elles, les approches les plus classiques pourraient être qualifiées de méthodes de "post-traitement". Il s'agit notamment du filtrage [YUE et al. 2007; GLORIA et al. 2016] ou de la troncature [YUE et al. 2007]. Comme ces méthodes travaillent sur une partie du VER initial, elles nécessitent souvent un VER plus grand ou davantage de tirages pour être suffisamment précises, ce qui réduit leur efficacité en terme de temps de calcul. Un autre type d'approches pourrait être qualifié de méthodes de "prétraitement", car elles modifient le modèle de VER (géométrie, voire équations) en amont de la résolution. Les stratégies consistant à prendre un espace de tirage plus grand, puis considérer la solution restreinte au VER initial

(proches des méthodes de troncature) obtenue avec l'ajout d'un terme d'ordre zéro [GLORIA 2011 ; GLORIA et al. 2016], sont à l'interface des méthodes de pré- et post-traitement. Là encore, le fait de considérer des VER plus grands réduit l'efficacité du calcul de ces problèmes. Dans [SALMI et al. 2012], les auteurs proposent une autre stratégie de prétraitement consistant à modifier la forme du VER afin de diminuer les effets de bord des USBC. Le développement d'un mailleur dédié est alors nécessaire, mais cette approche conduit à des solutions avec USBC significativement améliorées.

Plus récemment, des tentatives ont été faites pour améliorer la formulation des USBC. Elles sont principalement basées sur une combinaison de BC de Dirichlet et de Neumann. En effet, il est bien connu [HUET 1990 ; BORNERT et al. 2001 ; MIEHE et al. 2002 ; KANIT et al. 2003] (cf. équation (1.37)) que le comportement effectif est borné en valeur supérieure par le comportement apparent obtenu par les USBC et en valeur inférieure par celui obtenu par des BC statiquement uniforme (de type Neumann). Dans la méthode "Mixed Boundary Conditions" [DIRRENBARGER et al. 2014 ; LOW et al. 2020], des BC de Dirichlet sont imposées uniquement sur la composante de déplacement et sur les faces du VER associées au chargement, tandis que des BC de Neumann homogène sont imposées par ailleurs. L'utilisation de ces BC "mixtes" est réservée à des chargements axiaux ou de cisaillement (mais pas combinés). La méthode "Generalized Boundary Conditions" [WOJCIECHOWSKI 2022] a été introduite pour traiter avec précision les composites aléatoires non périodisés (où les PBC peuvent conduire à des solutions imprécises). La valeur moyenne de la déformation macroscopique est imposée de manière analogue à la formulation faible de traction constante de [MIEHE et al. 2002] et des contraintes de ressort (BC de Robin, combinaison pondérée de BC de Dirichlet et de Neumann) sont appliquées afin de prendre en compte les perturbations microscopiques. Ces conditions sont imposées par le biais de multiplicateurs de Lagrange dans une formulation EF assez intrusive. La convergence vers les propriétés effectives peut être très rapide avec un bon réglage du paramètre de pondération. Néanmoins, il semble difficile de paramétrer la méthode *a priori*.

La plupart des stratégies numériques énumérées ci-dessus, dédiées à réduire certains problèmes des solutions obtenues avec des USBC, se concentrent sur les propriétés apparentes. Très peu d'études se penchent sur les effets des BC sur les champs microscopiques locaux. Une analyse des aspects locaux semble nécessaire pour améliorer les solutions VER de type Dirichlet et, par conséquent, toutes les valeurs moyennes associées : modules apparents mais aussi moments par phase. Par exemple, dans l'étude récemment menée sur des composites à fibres [YIN et al. 2022], les auteurs ont observé sur les solutions de type USBC des contraintes anormalement élevées au voisinage des hétérogénéités proches du bord. Cela suggère que l'imprécision des solutions obtenues avec des USBC est due à des effets de bord localisés. En outre, dans le cadre d'une utilisation des méthodes d'homogénéisation numérique à la volée [FEYEL 1999 ; E et al. 2003], des champs locaux fiables sont d'une grande importance pour détecter les phénomènes survenant à l'échelle locale (cf. Chapitre 2).

L'objectif de ce chapitre est tout d'abord d'évaluer précisément les effets de bord des USBC sur les simulations VER afin d'identifier des moyens adaptés pour corriger les solutions associées. Ensuite, diverses méthodes de pré- et de post-traitement adaptées sont testées avec une comparaison approfondie des propriétés apparentes, des premiers et seconds moments par phase, des histogrammes de fréquence et des champs microscopiques. En vue d'utiliser ces approches pour des simulations Élément Finis multiniveaux [FEYEL 1999 ; E et al. 2003], nous nous intéressons également à l'obtention d'une dispersion statistique la plus faible possible des quantités d'intérêt. La microstructure étudiée est un composite matrice-inclusion aléatoire avec des inclusions sphériques monodisperses de fraction volumique modérée ($f_v \sim 13\%$) dans un

3.2. Définition du modèle de VER

VER périodisé. L'utilisation d'un VER périodisé permet une comparaison avec des résultats optimaux pour les PBC (cf. le premier paragraphe de cette section). Il convient donc de noter que le potentiel de solutions améliorées avec BC de Dirichlet est encore plus grand pour des VER non-périodisés. Comme cela a été montré précédemment au Chapitre 2, le paramètre de tassement, défini comme le rapport entre la distance minimale effective entre les inclusions et le rayon des inclusions, peut avoir une grande importance sur les champs locaux. Les différentes stratégies seront donc testées pour deux valeurs de distance minimale effective entre les inclusions (pour un rayon d'inclusion fixé à $r = 10 \mu m$) : l'une en dessous et l'autre autour de la distance maximale d'influence des inclusions sur la matrice (de l'ordre de grandeur d'un rayon). Des problèmes mécaniques élastostatiques hétérogènes sont considérés. Les inclusions sont supposées rigides (avec un contraste de 100 par rapport au comportement de la matrice), mais des focus sur un contraste modéré (de 10) et des inclusions souples (contraste de 1/100) sont également présentés.

La structure de ce chapitre est la suivante. La construction numérique des VER et le problème mécanique étudié sont très brièvement rappelés en Section 3.2, car similaires à ceux du Chapitre 2. Dans la section 3.3, la question de la faiblesse de précision des USBC sera abordée par une analyse de l'effet des BC sur les champs locaux. Ensuite, des stratégies visant à améliorer la précision des solutions obtenues avec les USBC sans affecter leur vitesse de calcul sont introduites théoriquement. Certaines méthodes de post-traitement sont exposées et adaptées : troncature ou filtrage. Des méthodes de prétraitement basées sur la génération de VER sans inclusions coupées au bord sont présentées. En outre, une modification de la formulation des USBC basée sur un mouvement de corps rigide des inclusions coupées est développée dans le cas d'inclusions rigides. La section 3.4 est consacrée aux comparaisons numériques des différentes méthodes introduites dans la section 3.3 et à leur analyse approfondie. Enfin, la section 3.5 contient des remarques finales et des perspectives.

3.2. Définition du modèle de VER

Les VER cubiques de taille l avec inclusions sphériques de rayon r utilisés dans ce chapitre sont générés avec la méthode décrite en Section 2.2. Soulignons ici, comme nous l'avons déjà mentionné dans l'introduction, que la génération de maillages périodiques peut être une procédure délicate (et coûteuse) pour les microstructures aléatoires. Cette procédure est nécessaire pour obtenir des solutions optimales avec les PBC mais n'est pas obligatoire pour les solutions avec USBC. Le fait de ne résoudre que des problèmes avec des BC de Dirichlet pourrait permettre d'économiser du temps de maillage et de la complexité.

Le problème aux limites considéré sur le VER est un problème élastostatique hétérogène, Eq. (2.2). Un chargement de type déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$ est considéré, conformément aux méthodes d'homogénéisation numérique multiniveaux (cf. Section 1.2.4). Le comportement élastique linéaire de chaque phase de notre matériau modèle et le contraste entre les phases, rappelés à l'équation (3.1), sont ceux décrits dans la Section 2.3.1. On rappelle que E_i est le module d'Young, ν_i le coefficient de Poisson de la phase i (1 : inclusions, 2 : matrice).

$$\begin{cases} E_2 = 20 \text{ MPa} \\ E_1 = E_2 \times \text{contraste} \\ \nu_1 = \nu_2 = 0.3 \end{cases} \quad (3.1)$$

Les BC pouvant être utilisées sont celles formulées en Section 1.2.3.2. Les BC de type Neumann pilotées par la déformation [MIEHE et al. 2002] étant au moins aussi coûteuses que les PBC (en raison de l'introduction de multiplicateurs de Lagrange) pour des solutions moins précises [WALTERS et al. 2021], elles ne seront pas considérées ici. Ainsi, les deux types de conditions étudiées sont les USBC et PBC, rappelées par les équations suivantes :

$$\text{USBC} : \underline{u}(\underline{x}) = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{x} \quad \text{sur } \partial\omega \quad (3.2)$$

$$\text{PBC} : \underline{u}(\underline{x}) = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{x} + \underline{v}(\underline{x}) \quad \text{sur } \partial\omega \quad (3.3)$$

avec \underline{v} un déplacement l -périodique et \underline{u} le déplacement microscopique.

3.3. Quelques stratégies pour améliorer les résultats obtenues avec des Conditions aux Limites de type Dirichlet

3.3.1. Sur l'efficacité des BC classiques imposant une déformation

La Figure 3.1 représente schématiquement la convergence des propriétés apparentes vers les propriétés effectives pour les BC permettant d'imposer une déformation macroscopique, cf. équations (3.2) et (3.3). Bien que les PBC produisent des résultats déjà convergés pour des tailles relativement petites de VER (faible rapport d'échelle $\frac{l}{d}$), leur coût CPU peut devenir prohibitif. Les résultats obtenus avec les USBC convergent vers la même valeur que ceux avec PBC pour des VER de grande taille. Cependant, la simulation sur ces grands VER nécessiterait des ressources informatiques trop importantes. Enfin, pour une taille de VER donnée, le temps de calcul nécessaire pour obtenir une solution avec les USBC est bien inférieur à celui nécessaire pour obtenir une solution avec les PBC.

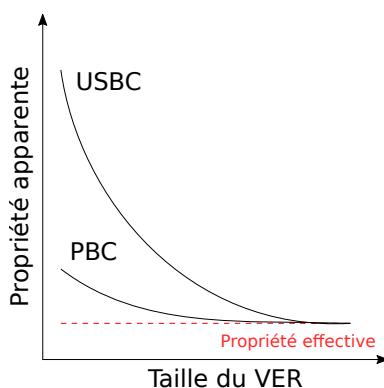


FIGURE 3.1. – Convergence d'une propriété apparente avec l'augmentation de la taille du VER pour les BC classiques imposant une déformation macroscopique : USBC et PBC. Inspiré par [WALTERS et al. 2021].

La Figure 3.2 nous permet de comparer localement les solutions obtenues avec USBC et PBC sur un VER avec des inclusions rigides ($\text{contraste} = 100$). Plus de détails sur ces simulations seront donnés dans la section 3.4. Les solutions avec USBC présentent des valeurs de contraintes élevées situées sur les inclusions coupées par le bord du VER alors que les solutions avec PBC sont plus homogènes dans la phase inclusionnaire. Cela confirme les observations faites

3.3. Quelques stratégies pour améliorer les résultats obtenues avec des Conditions aux Limites de type Dirichlet

dans [SALMI et al. 2012 ; YIN et al. 2022]. A cause de ces effets de bord, une erreur significative est observée sur les champs moyens directement calculés à partir des solutions USBC. Cependant, un peu plus loin du bord du VER, les solutions USBC apparaissent similaires aux solutions avec PBC. Les USBC semblent donc agir comme un effet de Saint-Venant. Cette observation est en cohérence avec le Lemme de Hill (ou de macrohomogénéité) qui suggère une indépendance des fluctuations des champs locaux vis-à-vis du détails des conditions aux limites.

Dans les sections suivantes, différentes méthodes sont testées afin d'améliorer les résultats obtenus avec les USBC sans affecter leur temps de calcul compétitif. Tout d'abord, des méthodes de post-traitement sont utilisées : après les calculs classiques avec les USBC, certains post-traitements tels que la troncature ou le filtrage sont appliqués afin d'éliminer les zones où l'effet de bord se produit. Dans la littérature, ces techniques ont été principalement utilisées pour améliorer les propriétés effectives [YUE et al. 2007 ; GLORIA 2011]. Nous envisageons également des stratégies de prétraitement axées sur la construction de VER sans inclusions artificiellement découpées. La première approche consiste à modifier la loi de tirage pour les VER cubiques traditionnels. La seconde approche modifie la procédure de maillage du VER avec des surfaces périodiques adaptées. Enfin, une alternative aux USBC est proposée pour les inclusions rigides. Ces différentes stratégies sont présentées théoriquement ou rappelées dans les sections 3.3.2 à 3.3.4 puis testées et comparées dans la section 3.4.

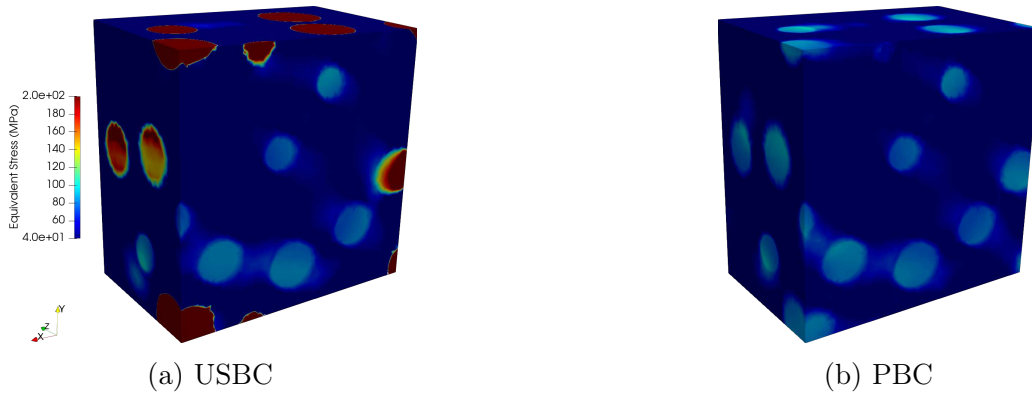


FIGURE 3.2. – Vues en coupe transversale de la contrainte équivalente de Von Mises pour le problème aux limites avec USBC ou PBC - *contraste* = 100 - Distance minimale entre les inclusions $s_{min} = 0,8r$ (rayon $r = 10 \mu m$, taille du VER $l = 100 \mu m$).

3.3.2. Méthodes de post-traitement

3.3.2.1. Troncature

Compte tenu des effets de bord localisés (cf. Figure 3.2), la stratégie la plus naturelle pour améliorer les solutions avec USBC semble être la méthode de troncature [YUE et al. 2007]. Cette méthode consiste à ne pas tenir compte de certains éléments de maillage situés près du bord du VER lors du post-traitement des résultats. Le volume tronqué considéré ω^δ peut être défini par l'équation 3.4.

$$\omega^\delta =]0 + \delta; l - \delta[^3, \delta > 0 \quad (3.4)$$

Par définition du VER cubique $\omega =]0; l[^3$, nous avons $\omega^\delta \subset \omega$.

Soit \mathcal{T}_h une triangulation de ω adaptée à la forme des inclusions. Dans la pratique, le volume

discret tronqué utilisé pour le post-traitement est défini comme suit :

$$\omega_h^\delta = \{K \in \mathcal{T}_h \mid K \subset \omega^\delta\} \quad (3.5)$$

Un exemple de coupe transversale 2D de ω_h^δ est présenté dans la Figure 3.3a.

De manière analogue, les volumes discrets des phases tronquées $\omega_{i,h}^\delta$ sont déterminés en considérant la restriction de ω_h^δ à la phase i .

La fraction volumique apparente d'inclusions f_v^δ peut être calculée avec l'équation (3.6). On s'attend à ce que cette fraction volumique tende avec le nombre de tirages vers celle du VER entier puisque la procédure de tirage (décrite en Section 2.2.1) est un processus stationnaire. En considérant des statistiques sur les solutions tronquées, les résultats sont toujours représentatifs de la microstructure du point de vue de la fraction volumique.

$$f_v^\delta = \frac{|\omega_{1,h}^\delta|}{|\omega_h^\delta|} \quad (3.6)$$

Avec cette méthode de troncature, les valeurs moyennes et $n^{\text{ème}}$ moment par phase s'écrivent :

$$\langle \bullet \rangle^T = \frac{1}{|\omega_h^\delta|} \int_{\omega_h^\delta} \bullet d\underline{x}, \quad (3.7)$$

$$\langle \bullet^n \rangle_i^T = \frac{1}{|\omega_{i,h}^\delta|} \int_{\omega_{i,h}^\delta} \bullet^n d\underline{x}. \quad (3.8)$$

La détermination de δ est cruciale. Plus δ est grand, plus les effets de bord seront éliminés, mais plus la dispersion sera grande, puisque le volume tronqué ω^δ sera petit. De plus, afin de conserver l'efficacité de calcul de la stratégie par rapport aux PBC, nous ne voulons pas considérer des VER plus grands. Par conséquent, compte tenu des valeurs de contrainte élevées dans les inclusions coupées, un bon compromis semble être :

$$\delta = r. \quad (3.9)$$

La valeur de $\delta = 2r$ (un diamètre) pour être sûr d'éliminer toutes les inclusions coupées conduit à une dispersion beaucoup plus importante entre les propriétés des VER tronqués.

Cette méthode de troncature permet évidemment d'obtenir des champs microscopiques tronqués en considérant la restriction des champs VER au domaine tronqué ω_h^δ .

3.3.2.2. Filtrage

La technique de filtrage introduite dans [YUE et al. 2007] est étudiée. L'idée principale est de négliger les éléments les plus proches du bord et de donner plus d'importance à ceux situés dans la partie centrale du VER. Le filtrage doit obéir à plusieurs conditions mathématiques définies dans [GLORIA 2011]. Les formulations permettant d'obtenir les valeurs moyennes filtrées et le

3.3. Quelques stratégies pour améliorer les résultats obtenues avec des Conditions aux Limites de type Dirichlet

$n^{\text{ème}}$ moment par phase d'un champ sont données par les équations (3.10)-(3.12).

$$\langle \bullet \rangle^F = \frac{\int_{\omega} \bullet d\mu}{\int_{\omega} d\mu} \quad (3.10)$$

$$\langle \bullet^n \rangle_i^F = \frac{\int_{\omega_i} \bullet^n d\mu}{\int_{\omega_i} d\mu} \quad (3.11)$$

$$\text{avec } d\mu = \left(\prod_{i=1}^N w(x_i, l) \right) d\underline{x} \quad (3.12)$$

où $w(., .)$ est la fonction de filtrage et N la dimension. Dans notre étude, l'origine du repère est un coin du VER.

Il est alors possible d'obtenir des histogrammes de fréquence filtrés dans chaque phase i en filtrant la fréquence de chaque échantillon de l'histogramme $[\alpha, \alpha + \partial\alpha[$:

$$\frac{\int_{V_i} \mathbb{1}_{\alpha < \bullet < \alpha + \partial\alpha} d\mu}{\int_{V_i} d\mu} \quad (3.13)$$

avec $\mathbb{1}$ la fonction indicatrice.

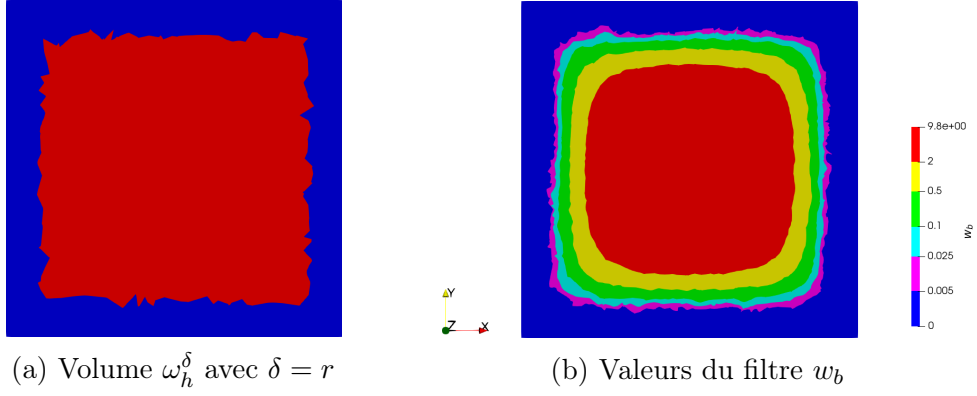
Évidemment, la précision de cette méthode dépend du choix de la fonction de filtrage w . Un filtre simple du second ordre $w_a(x_i, l) = 1 - \cos(2\pi x_i/l)$ est utilisé par [YUE et al. 2007]. Cependant, cette fonction de filtrage w_a ne s'annule pas sur les éléments proches du bord. Nous proposons un autre filtre du second ordre (cf. Eq. (3.14)) dont les valeurs s'annulent sur les éléments situés à une distance inférieure à r du bord afin de mieux réduire les effets de bord :

$$w_b(x_i, l) = K \times \begin{cases} 0 & \text{si } x_i < r \\ \left(\frac{x_i-r}{r}\right)^2 & \text{si } r \leq x_i < 2r \\ \frac{-1}{300}x_i^2 + \frac{1}{3}x_i - \frac{13}{3} & \text{si } 2r \leq x_i < l - 2r \\ \left(\frac{x_i-(l-r)}{r}\right)^2 & \text{si } l - 2r \leq x_i < l - r \\ 0 & \text{si } l - r \leq x_i \end{cases} \quad (3.14)$$

avec la constante K donnée par l'équation (3.15) et déterminée de sorte que $\int_{\omega} d\mu = l^3$ (propriété mathématique de la fonction de filtrage) :

$$K = \frac{900l}{600r + (4r - l)(l^2 - 2lr - 150l + 4r^2 + 3900)}. \quad (3.15)$$

Une coupe transversale en 2D de w_b est présentée dans la Figure 3.3b. On peut remarquer que les isovaleurs de $w_b(., .)$ décrivent des volumes arrondis dans le VER cubique.


 FIGURE 3.3. – Vues en coupe du volume tronqué (en rouge) et du filtre w_b

Les méthodes de filtrage ne donnent pas directement accès à des champs microscopiques filtrés, mais seulement à des moyennes volumiques filtrées (utilisables des propriétés apparentes à l’histogramme de fréquence). Cette stratégie rend possible l’utilisation de l’homogénéisation numérique traditionnelle avec les USBC, mais une analyse locale des solutions dans la microstructure est limitée. Une façon possible de surmonter ce problème est d’utiliser une technique de troncature (cf. Section 3.3.2.1) basée sur la valeur de la fonction de filtrage :

$$\omega_h^{\delta, F} = \left\{ K \in \mathcal{T}_h \mid \forall \underline{x} \in \overline{K}, \prod_{i=1}^N w(x_i, l) > w(\delta, l) \prod_{i=1}^{N-1} w\left(\frac{l}{2}, l\right) \right\}. \quad (3.16)$$

Par construction, la valeur du filtre w_b en $x_i = r$ est nulle. Par conséquent, en choisissant $\delta = r$, on revient à la méthode de troncature classique (cf. Figure 3.3a). Ainsi, pour bénéficier de la forme ovalisée du filtre, il faut choisir $\delta = r + \varepsilon$, avec $\varepsilon \ll r$. Ce dernier volume tronqué présente donc moins de singularités géométriques, cf. Figure 3.3b.

3.3.3. Méthodes de prétraitement

3.3.3.1. Modification de la loi de tirage

Cette stratégie consiste à modifier la loi de tirage des inclusions afin d’éviter d’avoir des inclusions coupées au bord du VER, comme le montre la Figure 3.4. À cette fin, le tirage des sphères décrit à la Section 2.2.1 n’est effectué que dans un simple VER cubique et non plus dans un VER cubique périodisé. Pour la procédure RSA, cela correspond à refuser les sphères qui coupent le bord du cube. Pour la procédure WP, les sphères sont repoussées du bord du cube. Cette modification limite la fraction volumique maximale d’inclusions (ou alors la distance maximale entre les inclusions). En effet, à partir de l’expression donnée en équation (2.1), une expression de la valeur maximale de la fraction volumique (f_v) peut être obtenue en considérant que les sphères sont séparées les unes des autres par la distance s_{min} :

$$\max(f_v) = C \left(\frac{2r}{2r + s_{min}} \right)^3, \quad \text{avec } C \text{ le facteur de compacité.} \quad (3.17)$$

Pour les VER cubiques périodiques standard, le facteur de compacité des inclusions est celui d’un système cubique centré : $C = \frac{\pi\sqrt{3}}{8}$. Avec la modification de la loi de tirage, la compacité d’un système cubique simple doit être considérée : $C = \frac{\pi}{6}$. Ainsi, la valeur maximale de la fraction

3.3. Quelques stratégies pour améliorer les résultats obtenues avec des Conditions aux Limites de type Dirichlet

volumique peut diminuer jusqu'à environ un tiers. A titre d'exemple, avec une petite distance minimum entre inclusions $s_{min} = 0,1r$, la valeur maximale de f_v obtenue avec la modification de la loi de tirage est d'environ 49 % contre 53 % avec le tirage standard. Pour des inclusions plus espacées ($s_{min} = 0,8r$), une f_v maximale de 19 % peut être obtenue avec la loi de tirage modifiée contre 23 % pour un tirage standard.

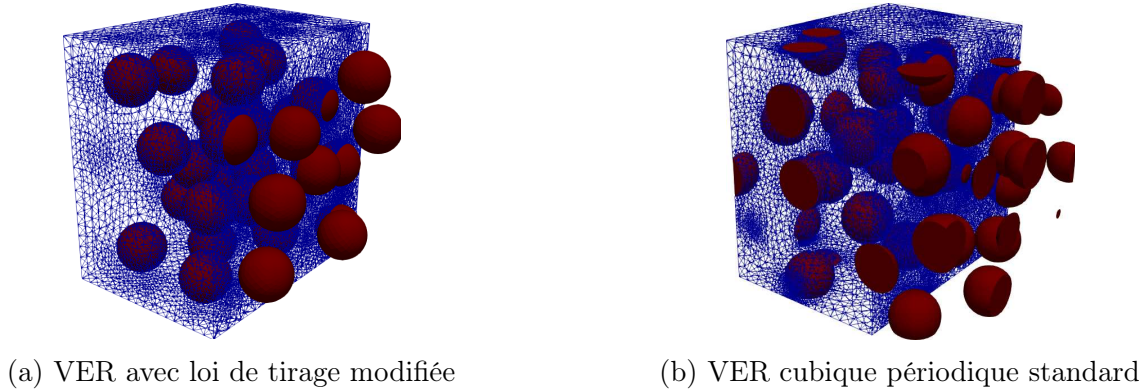


FIGURE 3.4. – Exemple de VER avec différentes lois de tirage. Pour des raisons de représentation, la matrice a été coupée et toutes les inclusions sont affichées.

3.3.3.2. Procédure alternative de maillage avec des surfaces périodiques adaptées

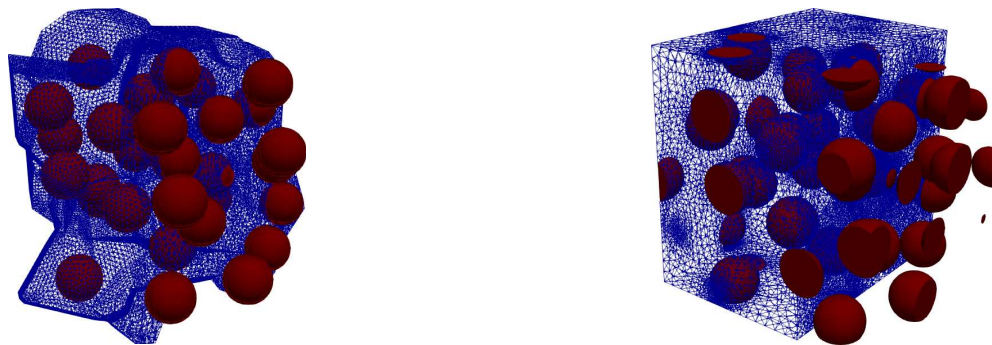
Une autre stratégie peut être utilisée pour éviter les inclusions coupées sur les surfaces du maillage périodique. Elle repose sur le fait que les "surfaces de périodicité" sont totalement libres et n'ont pas besoin d'être planes. Il est donc possible de choisir judicieusement les surfaces de périodicité pour éviter les inclusions coupées. En outre, le cas où les inclusions sont presque tangentes à la limite du cube est également évité, ce qui facilite le maillage de la structure.

La réponse la plus robuste et la plus générale à cette question est probablement de mailler directement dans le cube (abstrait) périodique. Cette idée a été développée dans la communauté de la géométrie numérique, et a donné naissance à la bibliothèque `Periodic_3D` de CGALL [CAROLI et al. 2009] par exemple, qui génère nativement des maillages sur des volumes périodiques.

Inspirés par [DANIELSSON et al. 2007 ; SALMI et al. 2012], nous proposons ici de spécifier *a priori* les surfaces de périodicité pour les éloigner le plus possible des inclusions. Ceci peut être obtenu en utilisant la tessellation de Voronoï associée aux inclusions sphériques, qui est définie comme suit : les centres des tesselles sont les centres des sphères. Par construction, les limites d'une telle tessellation sont les plus éloignées possible des sphères. Ensuite, la surface extérieure de la tessellation est retenue comme nouvelle surface périodique, à partir de laquelle le maillage est construit. On peut facilement prouver que ces surfaces n'intersectent pas les inclusions. Une telle propriété ne peut pas être obtenue directement avec des outils tels que la bibliothèque `Periodic_3D` de CGAL mentionnée ci-dessus, mais peut être obtenue par une procédure de post-traitement vraisemblablement lourde sur les maillages produits par cet outil.

Cette procédure de maillage alternative permet d'obtenir des limites périodiques angulaires, cf. Figure 3.5, ce qui évite les interactions indésirables avec les inclusions. Notez que cette stratégie peut également être utilisée pour des configurations de sphères polydispersées (en utilisant la tessellation de Laguerre au lieu des tessellations de Voronoï, les poids de Laguerre étant alors égaux au carré des rayons des sphères), et même pour des inclusions bien séparées de formes

diverses, en partant d'un recouvrement par des sphères, puis de l'utilisation de la stratégie mentionnée précédemment sur ces sphères. Cette approche ne limite pas les configurations de tirage, sauf pour les inclusions extrêmement proches.



(a) Surfaces de périodicité adaptées

(b) Surfaces de périodicité planes d'origine

FIGURE 3.5. – Vues en coupe du VER cubique avec différentes surfaces périodiques. Pour des raisons de représentation, la matrice a été coupée alors que toutes les inclusions sont affichées.

D'un point de vue technique, la paramétrisation du maillage est effectuée par Mérope à l'aide de la bibliothèque Vorop++ [RYCROFT 2009] pour produire la tessellation de Voronoï. La procédure de maillage est laissée au logiciel gmsh [GEUZAINÉ et al. 2009].

3.3.4. Modification de la formulation des USBC dans le cas d'inclusions rigides

Dans cette section, une alternative aux USBC est introduite pour le cas où les inclusions sont rigides. L'idée principale est de conserver la formulation des USBC sur la matrice, qui est peu sujette aux effets de bord, et de modifier la formulation sur les inclusions coupées par le bord cubique du VER. Considérons un composite hypothétique matrice-inclusion infini avec le comportement élastique suivant :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) & \text{dans la matrice} \\ \underline{\underline{\sigma}} = \frac{1}{\eta} \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}) & \text{dans les inclusions rigides} \end{cases} \quad (3.18)$$

avec $\underline{\underline{C}}$ le tenseur d'élasticité d'ordre 4 et $\eta \rightarrow 0$ un paramètre modélisant la rigidité. Par identification avec l'équation (3.1), nous avons $\eta = \frac{1}{\text{contraste}}$. En considérant un développement asymptotique en η pour les champs de solutions dans les inclusions du problème, il vient :

$$\underline{u}^\eta = \underline{u}^0 + \eta \underline{u}^1 + o(\eta^2) \quad (3.19)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^\eta = \underline{\underline{\sigma}}^0 + \eta \underline{\underline{\sigma}}^1 + o(\eta^2) \quad (3.20)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^0 + o(\eta) = \frac{1}{\eta} \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}^0) + \eta \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}^1) + o(\eta^2)). \quad (3.21)$$

3.4. Résultats et discussion

Par identification, il apparaît que les inclusions suivent à l'ordre 0 un mouvement de corps rigide :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}^0) = \underline{0}. \quad (3.22)$$

Ceci est en cohérence avec la déformation uniforme calculée dans une inclusion noyée dans une matrice infinie [ESHELBY 1957 ; TORQUATO 2002].

Il semble donc naturel d'imposer des conditions aux limites de déformation homogène¹ (HSBC, acronyme anglais de Homogeneous Strain Boundary Conditions) aux inclusions rigides. Afin d'obtenir une BC de type Dirichlet (avec une valeur de déplacement donnée), nous proposons d'imposer le déplacement du centre de l'inclusion déduit d'une formulation de type USBC, à la section de l'inclusion située à la frontière du VER. Ainsi, la méthode proposée, appelée HSBC, s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Matrice : } \underline{u}(\underline{x}) = \underline{E} \cdot \underline{x} \quad \text{sur } \partial\omega_2 \\ \text{Inclusions : } \underline{u}(\underline{x}) = \underline{E} \cdot \underline{x}_0(\underline{x}) \quad \text{sur } \partial\omega_1 \\ \text{avec } \underline{x}_0(\underline{x}) \text{ la fonction renvoyant le centre de l'inclusion correspondante} \end{array} \right. \quad (3.23)$$

avec $\partial\omega = \partial\omega_1 \cup \partial\omega_2$ telle que $\partial\omega_1 \cap \partial\omega_2 = \emptyset$, la partition de la frontière du VER en fonction des phases.

Comme le centre de chaque inclusion est connu à partir du fichier de sortie de l'étape de génération de la microstructure, la détermination de $\underline{x}_0(\underline{x})$ est facile en pratique. L'approche HSBC est toujours un cas particulier des PBC (cf. équation (3.3)) avec :

$$v(x) = \begin{cases} 0 & \text{sur } \partial\omega_2 \\ \underline{E} \cdot \underline{x}_0(\underline{x}) - \underline{E} \cdot \underline{x} & \text{sur } \partial\omega_1 \end{cases} \quad (3.24)$$

qui est bien l -périodique. Il s'ensuit que la condition de macrohomogénéité (aussi appelée condition de Hill-Mandel) est vérifiée et que $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{E}$.

Remarque. Notons qu'il n'est pas possible de prouver que le déplacement proposé dans les inclusions est optimal. En effet, tous les déplacements uniformes satisfont la condition de mouvement de corps rigide (3.22). Cependant, ce déplacement est cohérent avec la méthode PBC et garantit les propriétés d'homogénéisation traditionnelles.

3.4. Résultats et discussion

Pour évaluer l'efficacité des différentes méthodes introduites dans la Section 3.3, un problème élastostatique hétérogène est résolu sur un VER, cf. Section 3.2. Dix tirages de VER de microstructures matrice-inclusion aléatoires sont générés en considérant une fraction volumique modérée d'inclusion :

$$f_v = 13,4 \% \quad (3.25)$$

et des sphères monodispersées de rayon $r = 10 \mu m$. Le rapport d'échelle est donné par $SR = \frac{l}{2r} = 5$ (donc $l = 100 \mu m$).

L'analyse principale est menée pour une distance de proximité entre les inclusions de $s_{min} = 0,8r$, ce qui garantit des effets de concentration de contrainte non exacerbés entre les inclusions,

1. pris au sens de condition au bord nulle

comme le montre le Chapitre 2. La Section 3.4.3 met l'accent sur le comportement des stratégies proposées dans le cas d'inclusions proches ($s_{min} = 0, 1r$). En outre, nous considérons tout d'abord des inclusions rigides avec un paramètre de contraste de 100 (cf. Eq. (2.4)). D'autres résultats pour des inclusions modérément rigides ($contraste = 10$) et des inclusions souples ($contraste = 0, 01$) sont donnés dans les Sections 3.4.4 et 3.4.5.

Selon la méthode introduite en Section 2.3.3, une déformation macroscopique mixte $\underline{\underline{E}}$ est appliquée sur le VER afin de déduire les propriétés apparentes par les formules suivantes :

$$\underline{\underline{E}} = \begin{pmatrix} 1. & 1. & 0. \\ 1. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} k^{app} = \frac{1}{3}\text{trace}(\underline{\underline{\Sigma}}^{app}) \\ \mu^{app} = \frac{1}{4}\left(\frac{3}{2}\Sigma_{11}^{app} - \frac{1}{2}\text{trace}(\underline{\underline{\Sigma}}^{app}) + \Sigma_{12}^{app}\right), \end{cases} \quad (3.26)$$

avec

$$\underline{\underline{\Sigma}}^{app} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle. \quad (3.27)$$

Les premier et second moments par phase de la contrainte sont directement obtenus à partir du champ de contrainte microscopique $\underline{\underline{\sigma}}$, cf équation (2.6). Par la suite, la comparaison sera effectuée depuis les propriétés apparentes jusqu'aux champs de contraintes microscopiques. Nous désignerons par $\sigma_m = \frac{1}{3}\text{trace}(\underline{\underline{\sigma}})$ la contrainte hydrostatique, et par $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2}\underline{\underline{\sigma}}_d : \underline{\underline{\sigma}}_d}$ la contrainte équivalente de Von Mises avec $\underline{\underline{\sigma}}_d$ la partie déviatorique du tenseur des contraintes. Le tableau 3.1 donne les résultats de référence obtenus avec 5 VER munis des PBC avec un rapport d'échelle $SR = 10$, pour lesquels la dispersion est négligeable (cf. Chapitre 2). Ces valeurs seront utilisées pour l'évaluation des erreurs dans les sections suivantes. Ce tableau permet également de constater de l'effet des inclusions proches sur les différentes propriétés, particulièrement exacerbé pour les seconds moments (en cohérence avec ce qui a été montré au Chapitre 2).

PBC, $SR = 10$	$s_{min} = 0, 1r$	$s_{min} = 0, 8r$		
<i>contraste</i>	100	100	10	0,01
k^{ref} (MPa)	21,04	20,79	20,13	11,93
μ^{ref} (MPa)	10,45	10,21	9,703	5,944
$\langle \sigma_m \rangle_1^{ref}$ (MPa)	32,99	31,05	28,76	0,3571
$\langle \sigma_{eq} \rangle_1^{ref}$ (MPa)	87,48	76,57	67,08	0,5312
$\langle \sigma_m^2 \rangle_1^{ref}$ (MPa)	1 240,	971,4	830,6	0,1288
$\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_1^{ref}$ (MPa)	8 263,	5 914,	4 525,	0,2841

TABLEAU 3.1. – Valeurs de référence des propriétés apparentes, des moments des contraintes hydrostatique et équivalente dans les inclusions

3.4.1. Comparaison des différentes stratégies sur les champs d'intérêt

Les différentes méthodes expliquées dans la section 3.3 (y compris les méthodes traditionnelles USBC et PBC) sont comparées à l'aide de divers indicateurs : propriétés apparentes, premiers et seconds moments dans les inclusions de σ_m et σ_{eq} , ainsi que les histogrammes de fréquence de σ_{eq} . Les moments et les histogrammes sont analysés dans les inclusions, car elles sont plus sujettes aux effets de bord, cf. Figure 3.2. Ces résultats sont présentés pour $s_{min} = 0, 8r$ et $contraste = 100$ sur les Figures 3.6 et 3.7. Pour les stratégies de prétraitement, des vues en

3.4. Résultats et discussion

coupes transversales de VER représentant σ_{eq} sont également reportées dans la Section 3.4.2 en Figure 3.10.

En ce qui concerne les indicateurs obtenus par une formulation intégrale (cf. Figure 3.6), les résultats sont adimensionnés par les valeurs de référence (PBC à $SR = 10$). Comme il existe un net écart entre les résultats obtenus avec les USBC et les autres méthodes, deux échelles sont choisies : une en rouge pour les USBC et une en bleu pour les autres méthodes. Les échelles sont ajustées pour coïncider sur la valeur de référence de 1. Pour les histogrammes représentés en Figure 3.7, une échelle différente est choisie pour la contrainte obtenue par les USBC. Le nombre d'échantillons pour tracer l'histogramme de fréquence obtenu via les USBC est augmenté afin de s'assurer d'avoir une taille d'échantillon similaire (intervalle de contrainte) pour les différentes méthodes.

Concernant la méthode s'appuyant sur les PBC, on constate que les propriétés apparentes et les moments de contrainte semblent déjà convergés à ce rapport d'échelle ($SR = 5$). Par ailleurs, l'histogramme de fréquence forme une courbe en cloche centrée sur la valeur moyenne. Dans nos configurations de simulation, le temps CPU est environ 3 fois plus important pour la méthode PBC que pour les autres méthodes basées sur des BC de Dirichlet. A titre indicatif sur un serveur muni d'un bi-processeur Intel Xeon Broadwell E52699A v4 (55 Mo de cache, @2.40Ghz) avec 44 cœurs et une mémoire de 352 Go, un calcul VER d'environ 300 000 nœuds (cf. Tableau 2.2) prend 11,5 min avec les USBC et 33,3 min avec les PBC.

Pour la méthode USBC, les écarts sur les propriétés apparentes sont en bonne cohérence avec la littérature [KANIT et al. 2003], avec des erreurs supérieures à 50 % sur k^{app} et environ 100 % sur μ^{app} . Ces erreurs sont encore plus importantes pour les moments dans les inclusions, en particulier le second moment de la contrainte équivalente, pour lequel l'erreur dépasse 10 000 % ! Cette étude confirme que cette méthode ne peut pas être utilisée pour estimer numériquement les moments dans les inclusions.

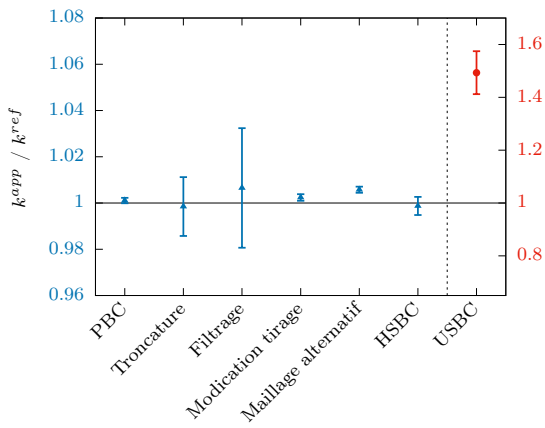
Il est intéressant de remarquer que l'histogramme des fréquences (cf. Figure 3.7g) atteint son maximum autour de la valeur moyenne de référence, mais pas sur la valeur moyenne simulée avec les USBC. Cela est dû aux fortes concentrations de contraintes localisées autour des inclusions coupées par le bord du VER (cf. Figure 3.2), que l'on retrouve ici à droite de l'histogramme. Il en résulte que l'histogramme est beaucoup plus étalé que pour les PBC.

En outre, l'erreur sur le premier moment donne directement l'écart de la valeur moyenne de la contrainte, tandis que celle sur le deuxième moment est un bon indicateur sur les différences des histogrammes de fréquence par rapport à PBC, car il inclut dans sa définition l'écart type par rapport à la valeur moyenne par phase. Ce second moment est souvent utilisé pour l'homogénéisation du comportement non linéaire [PONTE CASTAÑEDA 2016] et doit ainsi être bien approximé.

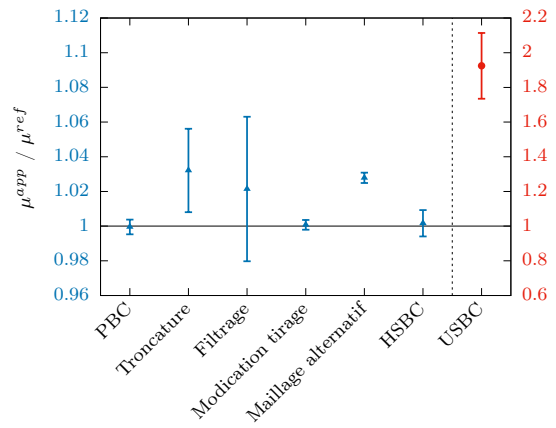
Toutes les méthodes expliquées dans la Section 3.3 améliorent considérablement les résultats des USBC. En effet, le pire résultat concerne le second moment de la contrainte équivalente : une erreur d'environ 40 % pour la méthode la moins précise contre plus de 10 000 % pour les USBC. La forme générale des histogrammes est également nettement améliorée, même si certaines contraintes élevées subsistent : la fréquence maximale de la courbe coïncide généralement avec l'abscisse du premier moment et les histogrammes sont moins étalés.

Nous effectuons maintenant une comparaison plus approfondie des différentes stratégies en se basant sur les indicateurs de la Figure 3.6 :

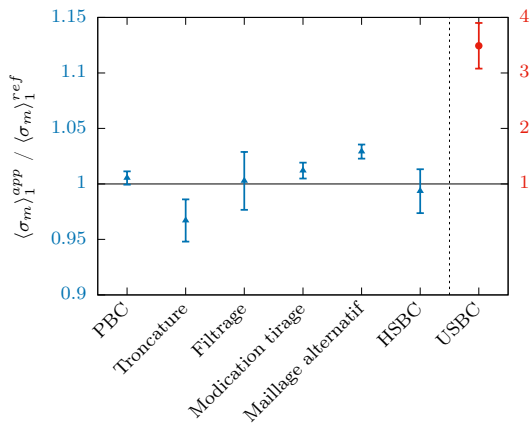
- Pour les propriétés apparentes (k^{app} , μ^{app}), toutes les méthodes présentent un faible écart à la valeur de référence (inférieur à 4 %). La modification du tirage et la méthode HSBC



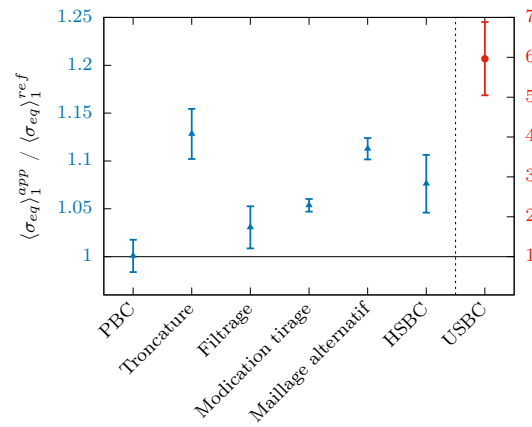
(a) Module de compressibilité apparent



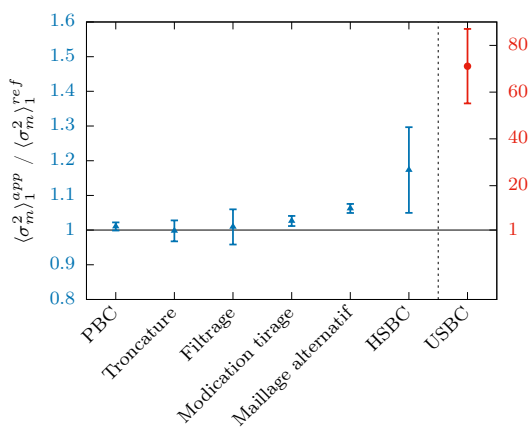
(b) Module de cisaillement apparent



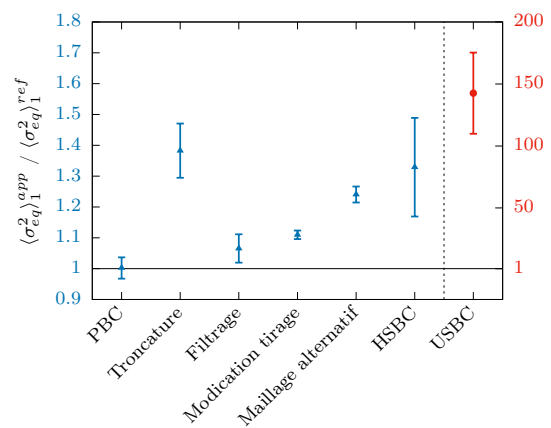
(c) Premier moment de la contrainte hydrostatique dans les inclusions



(d) Premier moment de la contrainte équivalente dans les inclusions



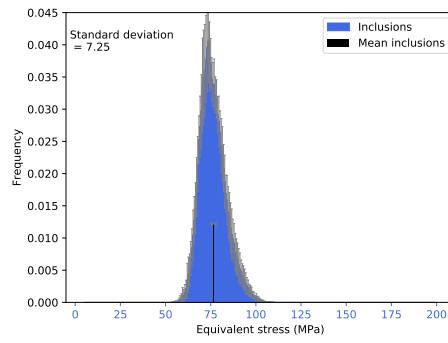
(e) Second moment de la contrainte hydrostatique dans les inclusions



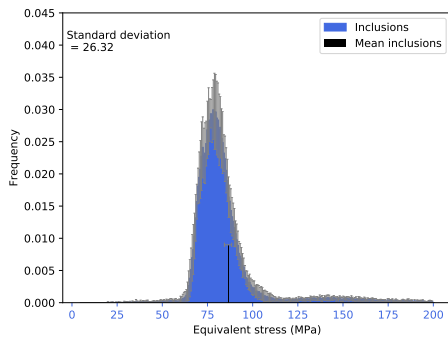
(f) Second moment de la contrainte équivalente dans les inclusions

FIGURE 3.6. – Comparaison des différentes méthodes sur les indicateurs obtenus par une formulation intégrale : $s_{min} = 0,8r$, $contrast = 100$

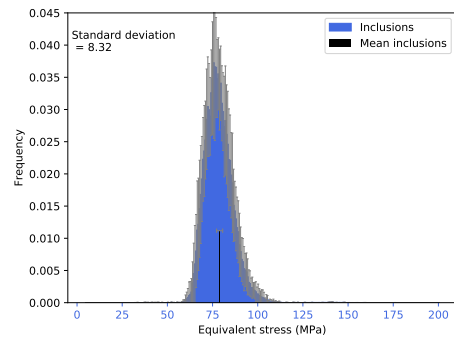
3.4. Résultats et discussion



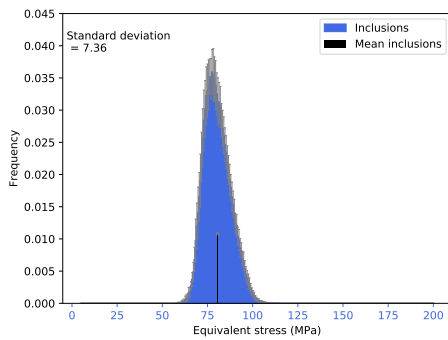
(a) PBC



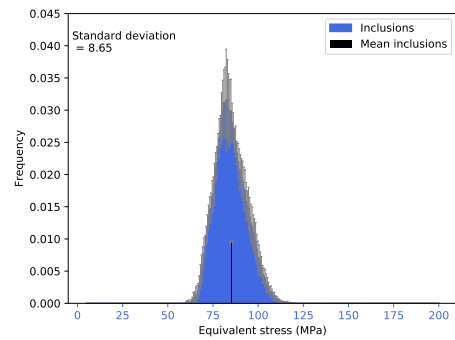
(b) Troncature



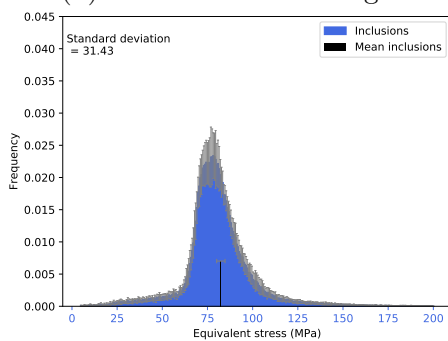
(c) Filtrage



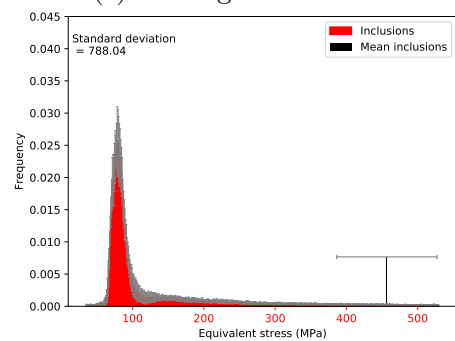
(d) Modification du tirage



(e) Maillage alternatif



(f) HSBC



(g) USBC

FIGURE 3.7. – Histogrammes de fréquence de la contrainte équivalente dans les inclusions pour les différentes méthodes : $s_{min} = 0,8r$, $contrast = 100$

donnent des résultats très précis. Notons que les méthodes de post-traitement et de maillage alternatif conduisent à un écart un peu plus significatif sur le module de cisaillement que sur le module de compressibilité. Les méthodes de prétraitement et HSBC présentent une faible dispersion alors que les méthodes de post-traitement souffrent d'une dispersion importante, en particulier l'approche basée sur le filtrage.

- Concernant les premiers moments dans les inclusions, l'approximation de la contrainte hydrostatique est fortement liée à celle du module de compressibilité, cf. l'équation (3.26). Une approximation précise de la contrainte équivalente semble plus difficile à obtenir, car elle inclut le cisaillement (plus délicat à bien approcher) et des termes non-linéaires. Les méthodes de filtrage, de modification du tirage et HSBC offrent le plus faible écart. Les méthodes de troncature et de modification du maillage présentent ici un écart supérieur à 10 % pour la contrainte équivalente. Les méthodes de prétraitement montrent encore une très faible dispersion alors que la méthode HSBC conduit dans ce cas à une dispersion plus importante que pour les propriétés apparentes. La dispersion est comparable à celle des méthodes de post-traitement.
- Pour les seconds moments dans les inclusions, là encore, la contrainte équivalente est plus difficile à approcher. Toutes les méthodes donnent lieu à des résultats précis et peu dispersés pour la contrainte hydrostatique, à l'exception de la méthode HSBC qui présente une dispersion assez élevée. Cette méthode ainsi que la méthode de troncature conduisent également aux plus mauvais résultats (hormis USBC) avec des écarts à la référence d'environ 40 % associés à une grande dispersion (d'environ ± 10 %) pour la contrainte équivalente. Les autres méthodes présentent une dispersion très faible, les méthodes de filtrage et de modification du tirage ayant toujours l'écart à la référence le plus faible (environ 10 %), mais avec une dispersion plus importante pour le filtrage.
- Pour les histogrammes de fréquence, les méthodes de troncature et HSBC présentent les histogrammes les plus éloignés de PBC. Les méthodes de modification du tirage et de filtrage offrent toujours la meilleure précision. Cependant, la dispersion dans chaque échantillon (barre d'erreur verticale) est assez importante avec la méthode de filtrage. L'approche s'appuyant sur le maillage alternatif produit des histogrammes satisfaisants avec un écart-type contrôlé et une faible dispersion dans chaque échantillon. Pour toutes les méthodes, l'erreur sur le second moment semble être un bon indicateur de la précision des histogrammes de fréquence.

Parmi les méthodes de prétraitement, la modification du tirage est l'approche conduisant aux résultats les plus précis. Cependant, il faut garder en tête qu'elle est limitée en fraction volumique d'inclusions élevées, cf. Section 3.3.3.1. La méthode HSBC est très prometteuse sur les propriétés apparentes, mais nécessite encore des améliorations en ce qui concerne l'estimation des moments par phase. Parmi les méthodes de post-traitement, le filtrage semble en moyenne plus précis que la troncature, mais au prix d'une plus grande dispersion. D'une façon générale, on privilégiera les méthodes de prétraitement.

3.4.2. Analyse approfondie et résultats complémentaires des différentes méthodes

3.4.2.1. Troncature

Pour notre étude, choisir $\delta = r$ dans l'équation conduit à conserver environ la moitié du volume du VER ($\frac{(l-2r)^3}{l^3} = 0,512$). Une étude balayant une large gamme de δ [COUTURE et al. 2022] observe un écart pouvant atteindre 30 % entre f_v^δ et f_v avec 100 tirages. Dans ce cas, le volume tronqué est moins représentatif de la microstructure. Dans notre cas, l'écart en fraction volumique est très faible, nous avons $f_v^{\delta=r} = 13,7 \pm 1,11$ % pour une $f_v = 13,4$ % initialement, ce qui représente un écart de 2.2 %. La variation de la fraction volumique entre les tirages est un facteur de la grande dispersion observée sur les résultats. Cette dispersion marquée impose de déterminer les différentes quantités par une étude statistique ou d'agrandir le VER. Il devient alors difficile de concurrencer les PBC en terme de temps de calcul. En outre, on observe des imprécisions marquées sur la contrainte équivalente. De plus, les histogrammes sont beaucoup plus étalés que l'approche de référence (PBC), avec un écart-type environ 4 fois plus grand (26,32 contre 7,25) que la référence. La partie des fortes contraintes due à l'effet de bord n'est pas totalement éliminée, mais une plus forte troncature amènerait plus de dispersion.

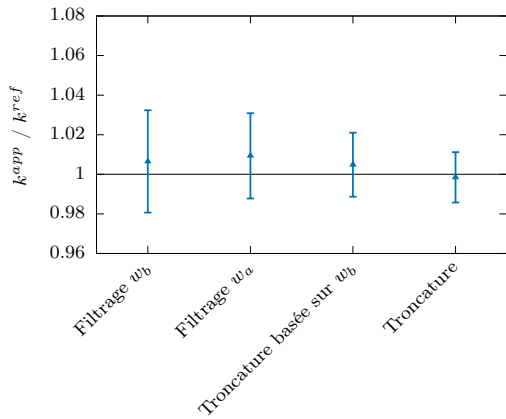
Les résultats obtenus avec la troncature basée sur le filtre w_b sont présentés aux Figures 3.8 et 3.9. Dans cette étude, nous choisissons $\varepsilon = 0,1r$ et le volume tronqué basé sur le filtre $\omega_h^{\delta,F}$ correspond aux parties cyan, verte, jaune et rouge sur la Figure 3.3b. Par rapport au volume tronqué standard ω_h^δ , le volume tronqué basé sur le filtre $\omega_h^{\delta,F}$ est légèrement arrondi aux coins et 41 % du VER est préservé. Ainsi, on s'attend à avoir annihilé plus d'effets de bord, mais le volume conservé étant plus petit, des dispersions plus grandes devraient être observées. Ici, la dispersion n'est pas sensiblement dégradée, même à l'inverse sur les premier et second moments des contraintes équivalentes. L'exclusion des zones de singularité (coins) semble bénéfique pour améliorer la méthode de troncature.

De manière générale, cette méthode n'est pas envisageable dans le cadre d'une approche EF².

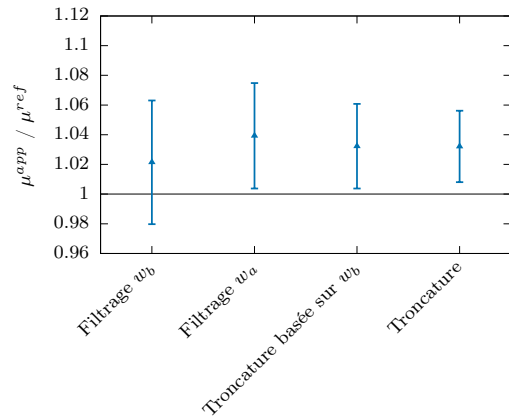
3.4.2.2. Filtrage

Les résultats obtenus avec le filtre w_a introduit en Section 3.3.2.2 sont présentés aux Figures 3.8 et 3.9. Pour les propriétés apparentes, on constate que la précision des résultats dépend peu du filtre choisi. C'est très différent pour les champs moyens : avec le filtre w_a , l'histogramme possède un très grand écart-type (71,47 contre 7,25), ce qui est cohérent avec l'écart sur le second moment nettement plus grand qu'avec les autres approches. On peut en conclure que les éléments à la frontière ne doivent absolument pas être pris en compte dans le filtre.

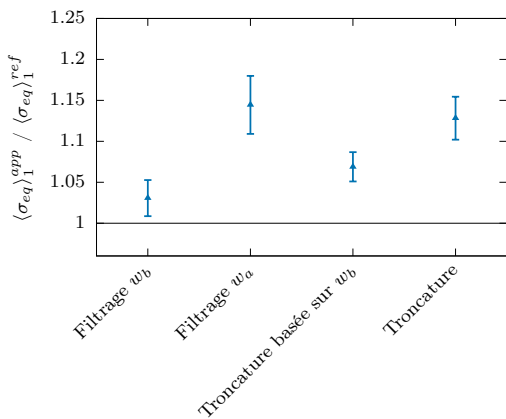
Le filtrage avec le filtre w_b (cf. équation (3.14)) semble efficace pour déterminer les propriétés apparentes, les moments par phase et les histogrammes de fréquence de la contrainte. Malgré une dispersion importante par rapport aux autres stratégies (cf. Figure 3.6), les résultats dans la gamme de dispersion demeurent tout de même acceptables. Le filtrage peut alors être utilisé dans le contexte des méthodes EF². Par ailleurs, cette méthode ne permet pas directement d'évaluer les champs locaux. Une localisation peut toutefois être faite par une troncature basée sur le filtrage (cf. Section 3.4.2.1). Néanmoins, les résultats de la Figure 3.8 montrent que ces champs conduisent à des résultats moins précis en moyenne que le filtrage lui-même.



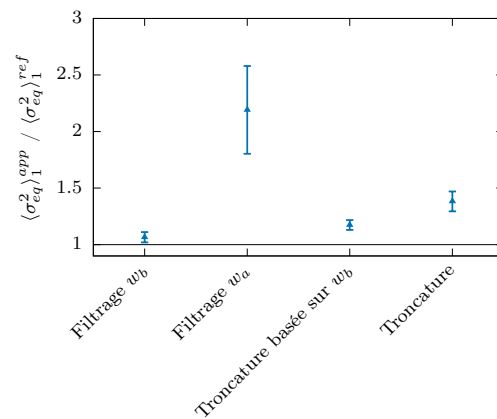
(a) Module de compressibilité apparent



(b) Module de cisaillement apparent

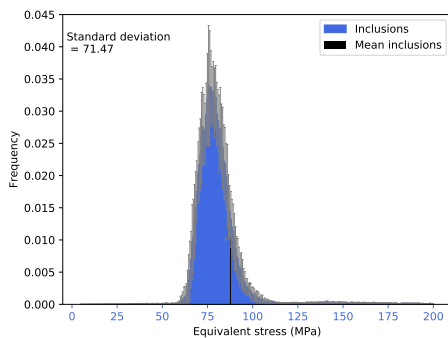


(c) Premier moment de la contrainte équivalente dans les inclusions

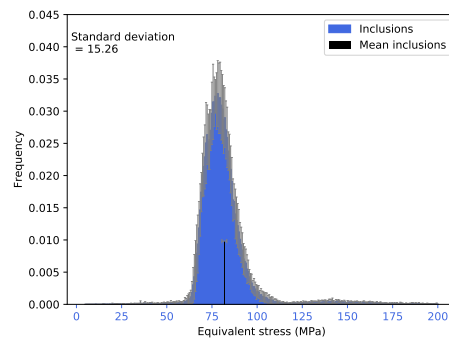


(d) Second moment de la contrainte équivalente dans les inclusions

FIGURE 3.8. – Comparaison des estimations des champs d'intérêt avec les différentes méthodes par post-traitement : $s_{min} = 0,8r$, $contrast = 100$



(a) Filtrage w_a



(b) Troncature basée sur le filtre w_b

FIGURE 3.9. – Histogrammes de fréquence de la contrainte équivalente dans les inclusions pour différentes méthodes par post-traitement : $s_{min} = 0,8r$, $contrast = 100$

3.4.2.3. Modification du tirage

Afin de s'assurer de la validité de l'approche s'appuyant sur la modification du tirage, des calculs avec les PBC ont été réalisés pour ces mêmes tirages sans inclusions coupées au bord.

3.4. Résultats et discussion

Dans le Tableau 3.2 sont reportés les écarts de résultats obtenus vis-à-vis des solutions PBC de référence. Ces écarts étant très proches de 1 avec une très faible dispersion, nous en déduisons que la modification du tirage ne modifie pas la représentativité du VER et de sa solution. Pour un champ générique \bullet , $e(\bullet)$ correspond à son écart et à sa dispersion normalisée par la référence, de façon similaire aux ordonnées de la Figure 3.6.

$e(k^{app})$	0.999 ± 0.001
$e(\mu^{app})$	1.001 ± 0.003
$e(\langle \sigma_m \rangle_1^{app})$	0.994 ± 0.006
$e(\langle \sigma_{eq} \rangle_1^{app})$	0.986 ± 0.009
$e(\langle \sigma_m^2 \rangle_1^{app})$	0.986 ± 0.011
$e(\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_1^{app})$	0.972 ± 0.018

TABLEAU 3.2. – Écarts et dispersions entre les résultats obtenus en PBC avec le tirage modifié et les solutions PBC de référence : $s_{min} = 0,8r$, $contraste = 100$

Par ailleurs, l’approche par modification du tirage permet d’obtenir la meilleure précision sur les champs d’intérêt parmi toutes les stratégies d’amélioration des USBC, avec une dispersion semblable à celle des résultats avec les PBC pour un rapport d’échelle donné. On peut constater à la Figure 3.10a que les effets de bords sont nettement diminués et plus faibles que la méthode utilisant le maillage alternatif ou les HSBC. Ainsi une solution faible à partir d’un unique calcul sur VER peut être envisagée avec cette approche. Elle est ainsi parfaitement compatible avec une stratégie EF². Cette méthode peut être utilisée si la fraction volumique d’inclusions n’est pas trop importante pour modifier le tirage.

3.4.2.4. Maillage alternatif

L’approche basée sur le maillage alternatif conduisant à des surfaces de périodicité non planes est l’approche nécessitant le plus de développements, car elle n’est quasiment disponible dans aucun outil de génération de VER. Le maillage alternatif peut être une bonne alternative pour des VER qui ne peuvent pas être générés avec la modification du tirage, bien que cette méthode semble plus sujette aux effets de bord que la méthode de modification du tirage. En effet, on constate que les inclusions proches du bord ont des contraintes élevées (cf. Figure 3.10b). Pour rappel, le domaine a moins d’un rayon d’une inclusion influence celle-ci (cf. Chapitre 2). De part cette nouvelle forme de VER avec de nombreuses facettes au bord, les inclusions proches du bord sont davantage influencées par celui-ci.

L’influence des BC sur les propriétés apparentes a également été étudié pour des cellules unitaires périodiques, où ces VER n’ont pas d’inclusion coupée (par exemple, [BORNERT et al. 2001]). Ils constatent alors un écart d’environ 10 % entre les USBC et les PBC pour le module de cisaillement. Or, dans ces cellules unitaires, l’inclusion est à moins d’un rayon du bord. C’est pourquoi, ces VER sont également sensibles aux effets de bord, malgré l’absence d’inclusion coupée.

3.4.2.5. Méthode HSBC

Un déplacement de corps rigide imposé aux inclusions coupées par la frontière du VER, semble améliorer nettement la précision des BC de type Dirichlet, mais des imperfections subsistent,

notamment sur le second moment. Ainsi, les histogrammes sont un peu plus étalés qu’avec les autres méthodes en raison d’un effet de bord subsistant. La coupe transversale du VER affichant les contraintes équivalentes sur la Figure 3.10c montre des contraintes élevées à l’interface entre la matrice et les inclusions coupées par le bord du VER. La non-continuité du déplacement (cf. équation (3.23)) peut être la cause de ces contraintes élevées. Un lissage de cette discontinuité pourrait améliorer les résultats. Cependant cette méthode présente l’avantage d’être facilement mise en place dans un environnement de calcul existant.

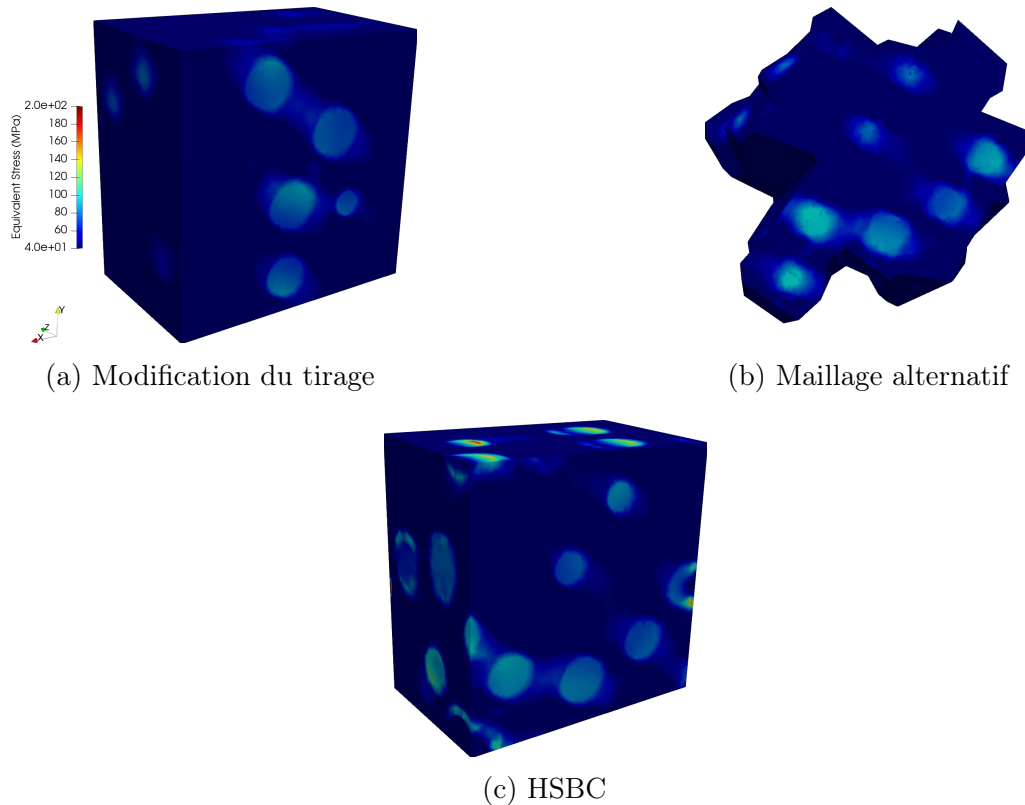


FIGURE 3.10. – Vues en coupe de la contrainte équivalente : $s_{min} = 0,8r$, $contrast = 100$

3.4.3. Focus sur le cas des inclusions proches

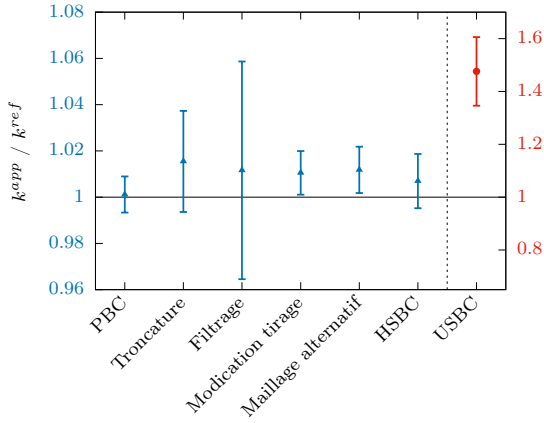
Dans cette section, l’influence de la proximité des inclusions sur les méthodes d’améliorations des solutions de type Dirichlet est analysée. On peut s’attendre à ce que la précision des méthodes de prétraitement se dégrade, car les inclusions seront davantage soumises aux effets de frontière, car davantage proches du bord. En effet, pour les méthodes de prétraitement, la distance minimale entre les inclusions et le bord du VER est de $\frac{s_{min}}{2}$. Les différentes stratégies sont comparées dans la Figure 3.11 en éliminant de l’analyse la contrainte hydrostatique, puisque la contrainte équivalente apparaît comme un indicateur saillant.

La dispersion entre les tirages est plus importante dans le cas $s_{min} = 0,1r$ que dans le cas $s_{min} = 0,8r$ (cf. Chapitre 2, Figure 2.3), du fait d’une variété de tirages plus importante. En effet, la possibilité de répartir les inclusions augmente lorsque s_{min} diminue. En d’autres termes, la distance minimale s’éloigne de la distance moyenne quand s_{min} diminue à f_v fixée.

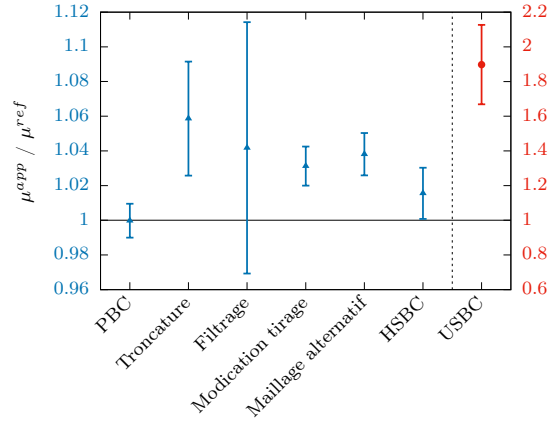
Pour les propriétés apparentes, la méthode de modification du tirage n’est plus la plus précise. En effet, la précision de la méthode HSBC est dans ce cas meilleure pour une dispersion similaire.

3.4. Résultats et discussion

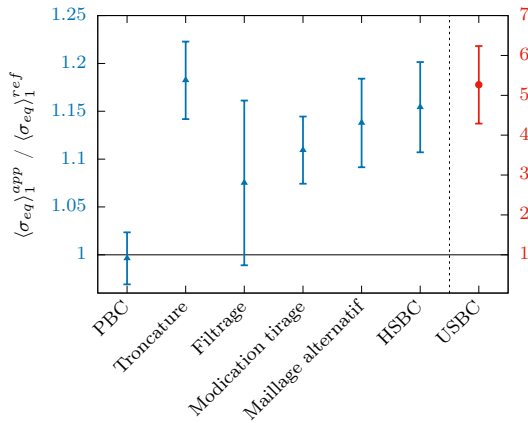
Néanmoins, les deux méthodes ont un écart inférieur à 4 %. Toutes les méthodes ont un écart moyen inférieur à 2 % sur k^{app} et 6 % sur μ^{app} ce qui est très satisfaisant vis-à-vis de la méthode USBC originelle (avec 50 % et 100 % d'écart respectivement). À l'exception de la méthode de maillage alternatif, toutes les stratégies d'amélioration ont vu leur écart augmenter avec la diminution de la distance entre inclusions. Pour les moments par phase, la méthode de filtrage présente la meilleure précision, mais la dispersion la plus élevée. Les méthodes de prétraitement semblent rester la meilleure alternative à la méthode PBC malgré la distance réduite au bord.



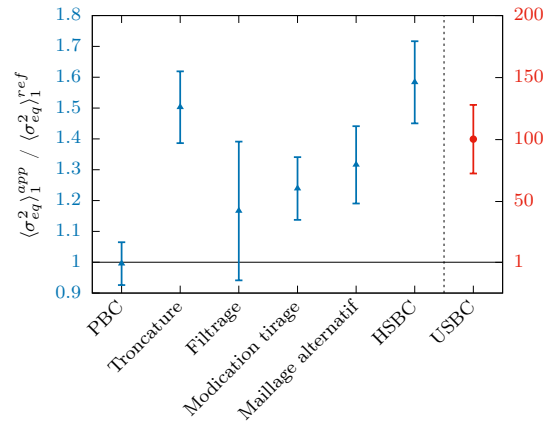
(a) Module de compressibilité apparent



(b) Module de cisaillement apparent



(c) Premier moment de la contrainte équivalente dans les inclusions



(d) Second moment de la contrainte équivalente dans les inclusions

FIGURE 3.11. – Comparaison des différentes méthodes sur les indicateurs obtenus par une formulation intégrale : $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 100$

La Figure 3.12 reporte des vues en coupe de différents calculs sur VER. Les contraintes dans les inclusions coupées ou près du bord sont plus élevées qu'avec $s_{min} = 0, 8r$ (cf. Figure 3.2 et 3.10). L'erreur restante est toujours due aux effets de bord sur les inclusions. Pour les méthodes de prétraitement, plus les inclusions sont proches du bord, moins la méthode est efficace. Une zone tampon de matrice peut être ajoutée pour avoir une distance minimale à la frontière comme celle avec $s_{min} = 0, 8r$, mais les propriétés élastiques de ce nouveau VER pourraient être modifiées. Dans notre cas, un test effectué avec une zone tampon de $0, 35r$ pour l'approche de modification du tirage, montre une réduction de l'écart sur le premier moment de la contrainte

équivalente d'environ 1 point de pourcentage (valeur de 9,7 % au lieu de 10,9 %) mais une dispersion augmentée d'autant (valeur de ± 4.8 % au lieu de ± 3.5 %). Ainsi, une zone tampon doit être utilisée avec précaution, car elle peut modifier les résultats.

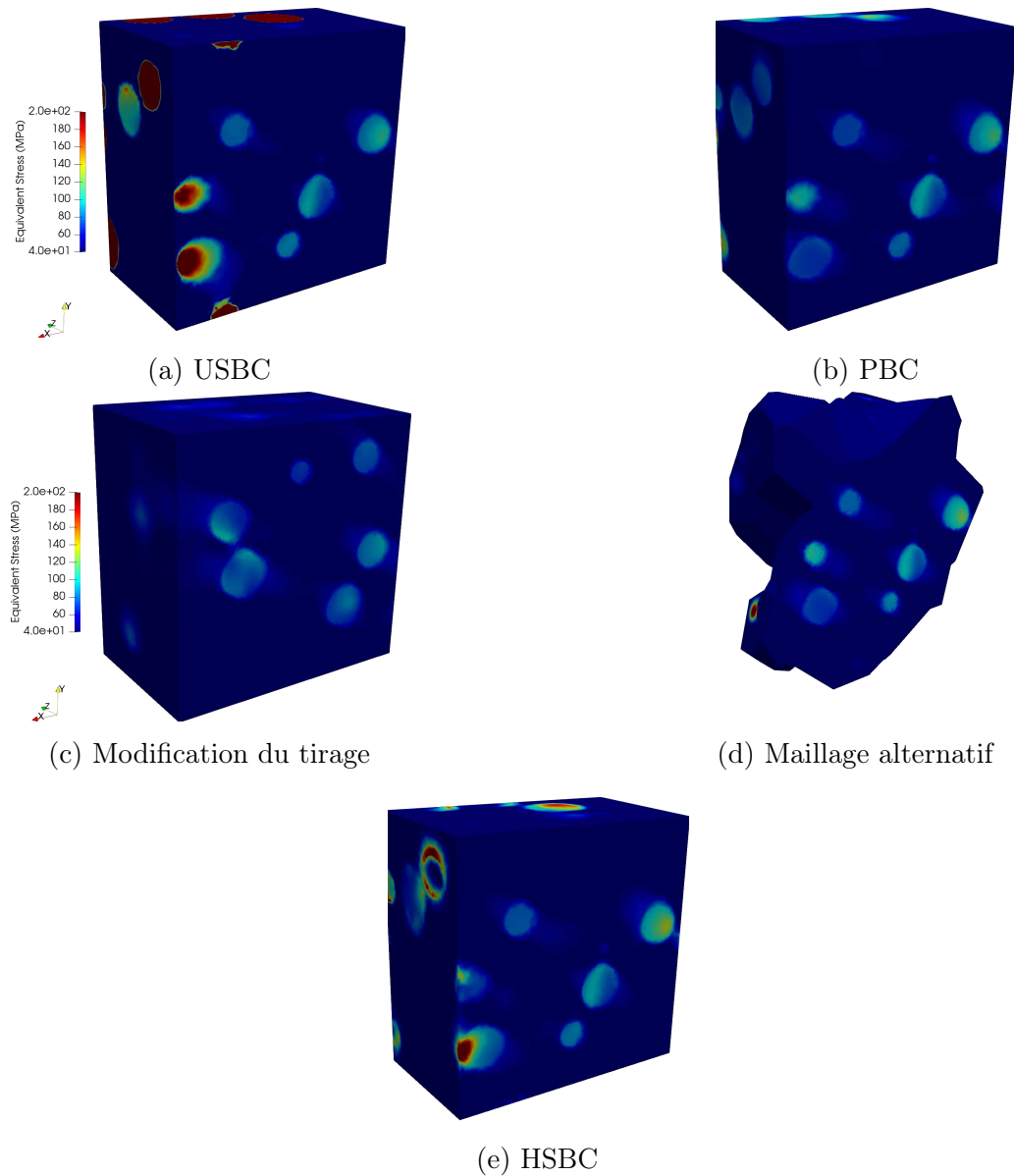


FIGURE 3.12. – Vues en coupe de la contrainte équivalente : $s_{min} = 0,1r$, $contrast = 100$

3.4.4. Focus sur le cas d'un contraste modéré

Comme expliqué dans la Section 3.3.4, la méthode HSBC a été proposée pour le cas des inclusions infiniment rigide ($contrast \rightarrow \infty$). Nous avons vu que cette méthode offre des résultats intéressants (surtout vis-à-vis des propriétés apparentes) pour un $contrast = 100$, avec une mise en œuvre informatique immédiate. Il est intéressant de savoir si cette méthode améliore significativement les USBC pour un contraste modéré. Pour cela, les résultats obtenus avec les différentes méthodes pour un contraste de 10 sont reportés dans la Figure 3.13.

3.4. Résultats et discussion

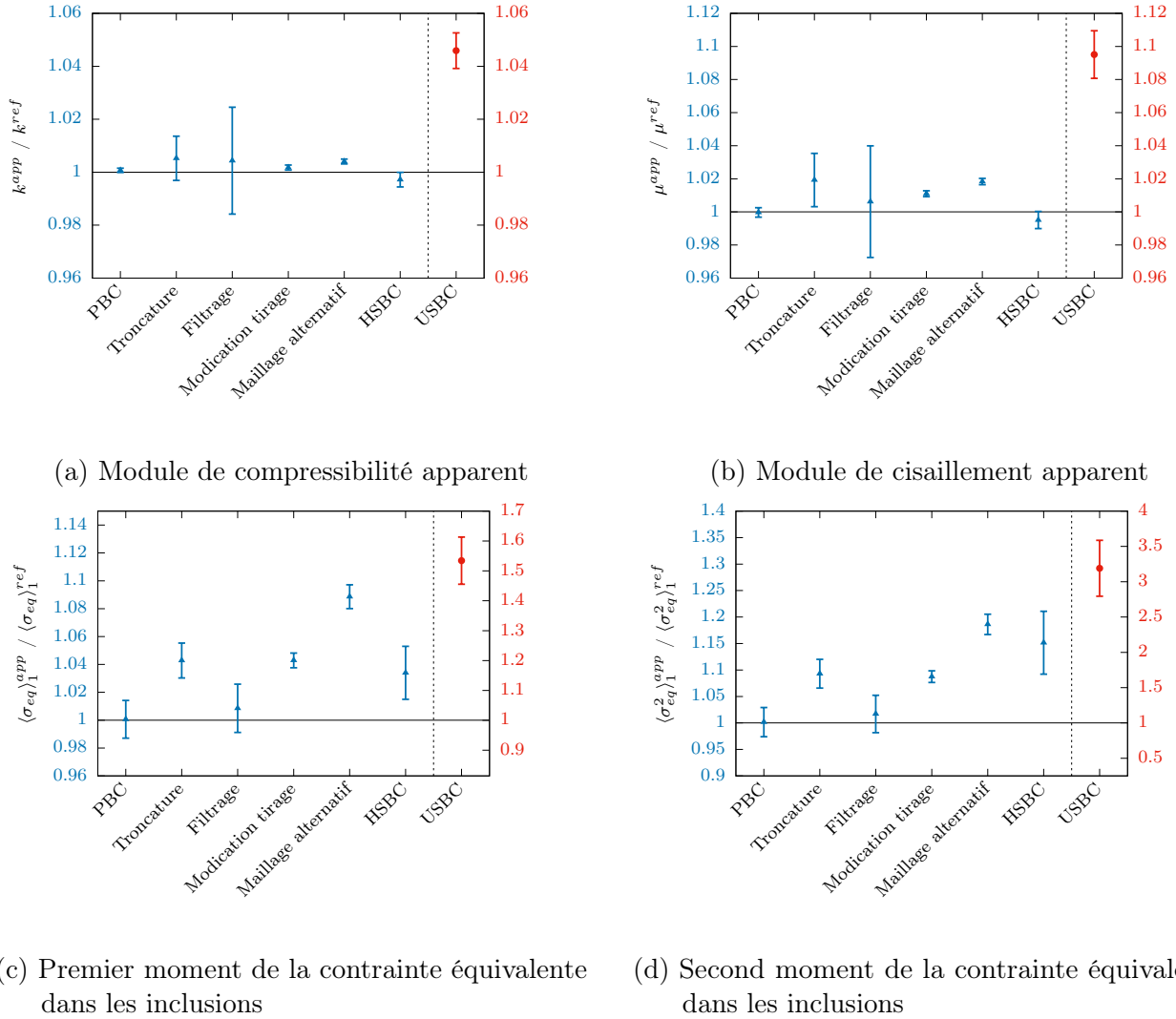


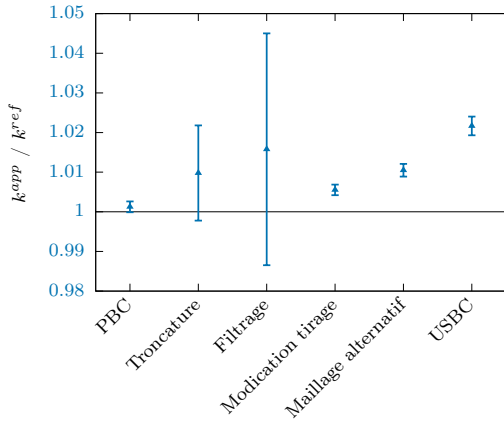
FIGURE 3.13. – Comparaison des différentes méthodes sur les indicateurs obtenus par une formulation intégrale : $s_{min} = 0,8r$, $contrast = 10$

Pour des inclusions modérément rigides, les solutions obtenues avec les USBC sont moins dégradées, ce qui est cohérent avec la littérature [PECULLAN et al. 1999]. L'erreur sur le second moment de la contrainte équivalente atteignait plus de 10 000 %, contre environ 350 % ici.

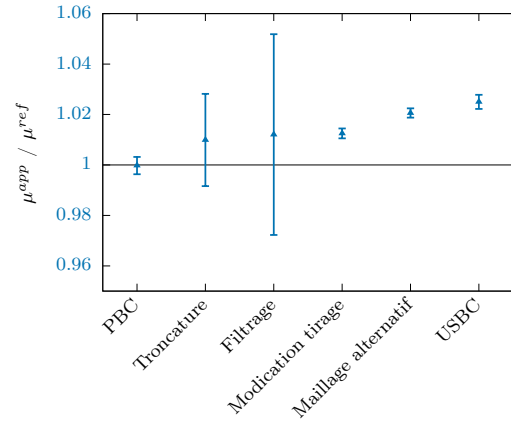
On observe une tendance similaire des différentes approches par rapport aux sections précédentes. Toutes les stratégies testées dans ce travail sont très intéressantes pour ce contraste avec de faibles dispersions. Même si les USBC présentent des meilleurs résultats qu'à contraste élevé, les différentes stratégies de pré- et post-traitement permettent de nouveau de s'approcher de la précision des PBC. On souligne que le potentiel des HSBC reste marqué pour ce contraste de 10, avec des excellentes prédictions pour les propriétés apparentes et le premier moment. C'est l'une des meilleures stratégie à ce contraste vis-à-vis des indicateurs étudiés. Néanmoins, des améliorations pour le second moment sont encore recherchées.

3.4.5. Focus sur le cas des inclusions souples

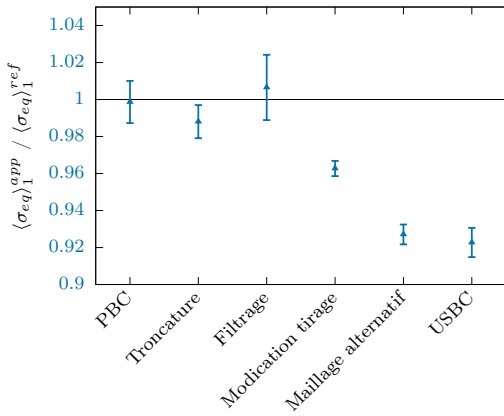
Tous les résultats précédents concernaient des inclusions rigides. Dans cette section, le cas des composites matrice-inclusion avec inclusions souples ($contrast = 0,01$) est étudié. Il est connu que les USBC ne souffrent pas d'une imprécision significative par rapport aux PBC dans ce cas [PECULLAN et al. 1999]. Nous constatons également ce comportement. Ainsi dans la Figure 3.14, l'échelle des USBC sera identique à celle des autres approches. L'écart sur les propriétés apparentes entre USBC et PBC est dans ce cas inférieur à 3 % avec une faible dispersion de valeurs. Les différentes méthodes, sans HSBC, sont testées dans la Figure 3.14.



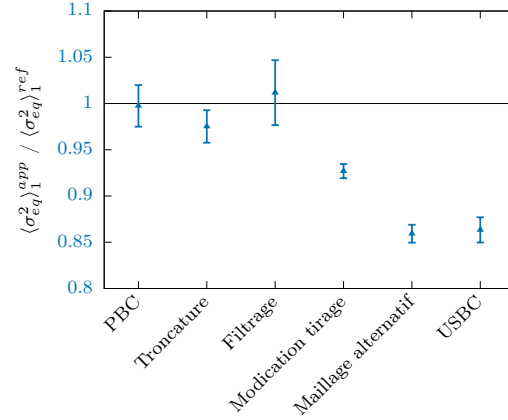
(a) Module de compressibilité apparent



(b) Module de cisailment apparent



(c) Premier moment de la contrainte équivalente dans les inclusions



(d) Second moment de la contrainte équivalente dans les inclusions

FIGURE 3.14. – Comparaison des différentes méthodes sur les indicateurs obtenus par une formulation intégrale : $s_{min} = 0,8r$, $contrast = 0,01$

L'approche basée sur la modification du tirage reste incontestablement la méthode présentant le moins de dispersion. Par ailleurs, elle s'avère être la plus précise en écart moyen sur les propriétés apparentes. Les méthodes de post-traitement présentent à nouveau la dispersion la plus élevée, mais les meilleurs écarts moyens pour les premier et second moments. Pour ces grandeurs, les résultats du maillage alternatif n'améliorent pas les USBC.

Même si les solutions obtenues avec les USBC ne nécessitaient pas forcément d'être améliorées

3.5. Conclusion

dans ce cas des inclusions souples, l'approche par modification du tirage semble tout de même intéressante dans un cadre EF^2 . En effet, pour corriger efficacement la solution macroscopique dans le processus itératif EF^2 , il est important d'avoir des propriétés apparentes les plus précises possibles. C'est pourquoi, on préférera l'utilisation de la méthode de modification du tirage, malgré une meilleure estimation des premiers et seconds moments avec les méthodes de post-traitement.

3.5. Conclusion

Les effets des conditions aux limites pilotées en déformation sur les calculs de solutions microscopiques sur des VER de microstructures matrice-inclusion aléatoires ont été étudiés dans ce chapitre. Alors que le coût CPU des PBC, permettant d'obtenir une solution de référence, est environ 3 fois supérieur à celui des USBC, l'écart des résultats avec des USBC sur les champs moyens dans les inclusions peut aller jusqu'à plus de 10 000 % (ici, le second moment de la contrainte équivalente) dans le cadre de notre étude avec des inclusions rigides. Cette erreur est due aux effets de bord situés sur les inclusions coupées et celles situées à moins d'un rayon du bord. En outre, les résultats obtenus avec les USBC au centre du VER sont similaires à ceux des PBC. Diverses méthodes sont proposées pour atténuer ces effets de bord.

Tout d'abord, une idée naturelle semble de négliger la contribution des éléments proches du bord. Pour cela, des méthodes de filtrage et de troncature sont testées. Le filtrage améliore de manière significative les propriétés apparentes et les moments par phase de la contrainte, mais une moyenne statistique sur plusieurs VER semble nécessaire au vu de la dispersion des résultats. Nous obtenons également des histogrammes de fréquence des contraintes très précis, malgré le fait qu'il n'est pas possible de localiser les contraintes au sein du VER. La troncature basée sur le filtre peut le permettre, mais avec des résultats un peu moins précis.

Une deuxième idée consiste à éviter les inclusions coupées par un prétraitement, c'est-à-dire au moment de la construction du VER. Une première approche consiste à modifier la loi de tirage pour éviter les inclusions coupées au bord du VER. Cette stratégie donne de très bons résultats, même si elle est un peu plus limitée que l'approche standard en fraction volumique. Le maillage alternatif, où les surfaces de périodicité du bord du VER sont choisies judicieusement pour éviter les inclusion coupées, n'a pas de contrainte sur la fraction volumique d'inclusions, mais cette fonctionnalité n'est pas souvent disponible sur les logiciels de maillage. Il convient de noter que cette méthode est légèrement plus sujette aux effets de bord puisque les inclusions proches du bord sont plus influencées par celui-ci, mais reste une bonne alternative dans le cas des inclusions rigides.

Enfin, des BC innovantes de type Dirichlet sont proposées dans le cas des inclusions rigides (où les USBC présentent les résultats les moins précis) : la formulation HSBC, qui considère un déplacement de corps rigide pour chaque inclusion coupées par le bord du VER. Cette méthode donne des résultats prometteurs, même pour des inclusions modérément rigides, et est facile à mettre en œuvre sur un code existant. Cette méthode conduit néanmoins à une erreur supérieure aux autres méthodes sur le moment d'ordre 2, qui est un bon indicateur de la qualité de l'histogramme de fréquence des contraintes. En effet, l'histogramme est plus étalé dû à des effets de bord résiduels. Ces contraintes semblent cette fois dues au saut de déplacement à l'interface entre la matrice et les inclusions. Une piste d'amélioration serait de lisser cette discontinuité.

Étant donné les comportements différents des stratégies visant à améliorer les USBC sur chacun des champs d'intérêt, il est difficile de dégager une méthode. Elles sont toutes intéressantes, puisque généralement elles améliorent nettement les solutions obtenues avec les USBC sans coût significatif supplémentaire.

Dans le cadre d'une approche EF², il est nécessaire pour corriger efficacement la solution microscopique d'avoir des propriétés apparentes précises, voire le premier moment (par exemple, pour un couplage avec le gonflement gazeux), avec un calcul sur un unique VER. Les méthodes de post-traitement ne semblent pas être les plus appropriées du fait de leur dispersion importante. Quant à la formulation HSBC, elle souffre d'imprécision sur les champs locaux. Ainsi, la stratégie de modification de la loi de tirage permet d'avoir des propriétés très précises, tout en permettant une analyse fiable des champs locaux.

Chapitre 4

Autour des solutions multiéchelles obtenues pour un problème de thermique stationnaire avec une source de chaleur hétérogène

L'objectif de ce chapitre est de s'intéresser à la résolution multiéchelle d'un problème de thermique stationnaire avec un terme source. Ce cas se différencie de la mécanique par le fait qu'on cherche une solution primale (la température) précise sur le VER et qu'un terme source, possiblement hétérogène, est considéré. Nous abordons différentes approches EF^2 se différenciant majoritairement par le traitement de la source sur la microstructure. Ces approches sont analysées et comparées théoriquement, notamment au travers d'un parallèle possible avec une approche basée sur un développement asymptotique à double échelle. La précision des résultats numériques obtenus par ces différentes approches est évaluée à l'aide d'une simulation directe de la structure discrétisant les hétérogénéités. Enfin un calcul EF^2 stationnaire avec un chargement temporel et un comportement non-linéaire est réalisé au sein d'une mini-application de PLEIADES. Ce calcul est représentatif d'une irradiation en réacteur, car un couplage avec les autres physiques est réalisé à l'échelle macroscopique.

Une partie de ce travail a été présentée à la conférence COMPOSITES [BELGRAND et al. 2023b].

Sommaire

4.1. Introduction	96
4.2. Méthodes de résolution	97
4.2.1. Développement asymptotique à deux échelles	97
4.2.2. Approches EF^2	101
4.3. Résultats numériques	111
4.3.1. Milieu périodique et VER	112
4.3.2. Source homogène	112
4.3.3. Source hétérogène	120
4.3.4. Évolution temporelle et comportement non-linéaire	122
4.4. Conclusion	126

4.1. Introduction

L'homogénéisation numérique est principalement utilisée pour déterminer les propriétés effectives à l'échelle macroscopique d'un matériau hétérogène. Cependant, dans un contexte multiéchelle, la connaissance du comportement local suscite un intérêt croissant (cf. Chapitre 2 notamment). Dans cette perspective, nous souhaitons obtenir les propriétés effectives, mais aussi des solutions microscopiques précises pour des problèmes stationnaires de conduction thermique avec une conductivité et une source de chaleur hétérogène.

L'objectif de ce chapitre est de discuter de différentes stratégies numériques pour considérer précisément la source de chaleur par une approche multiéchelle. En mécanique, l'analogie est de considérer des forces volumiques, par exemple le poids propre. Pour établir un état de l'art sur ces méthodes, nous nous intéressons, de manière générale, à l'homogénéisation de problèmes elliptiques de second ordre avec des propriétés et termes source hétérogènes.

Des approches sur un milieu périodique [BENSOUSSAN et al. 1978 ; BOURGAT 1979 ; SANCHEZ-PALENCIA 1980 ; BLANC 2009 ; ALLAIRE 1992 ; HALES et al. 2015] proposent de s'appuyer sur un développement asymptotique à deux échelles. Il est alors possible d'obtenir les propriétés homogénéisées et des correcteurs à différents ordres, permettant de décrire les variations locales sur la microstructure, par une succession de problèmes à résoudre. Ces approches aident à la compréhension des approches EF^2 , mais ne sont pas développées pour un milieu aléatoire et un comportement non-linéaire. De plus, elles sont peu compatibles avec une approche de type EF^2 vu le nombre de problèmes sur VER à résoudre. La plupart de ces travaux [SANCHEZ-PALENCIA 1980 ; HALES et al. 2015 ; CHATZIGEORGIOU et al. 2016] considèrent uniquement le correcteur du premier ordre, n'incluant pas le terme source localement. Les travaux de [BOURGAT 1979 ; BLANC 2009 ; ALLAIRE et al. 2013] montrent qu'il est essentiel de considérer le correcteur à l'ordre 2, dans le cas où la conductivité ou la rigidité de la matrice sont supérieures à celles des inclusions, pour décrire précisément les effets de la source.

Les approches EF^2 ont été largement étudiées ces dernières années (cf. la revue faite par [RAJU et al. 2021]), mais il est peu commun de prendre en compte un terme source volumique. L'approche classique par EF^2 [CHATZIGEORGIOU et al. 2016 ; TIKARROUCHINE et al. 2021] respecte la condition de macrohomogénéité (aussi appelé condition de Hill-Mandel). La source homogénéisée (moyenne volumique) est imposée au niveau macroscopique, mais aucun terme source n'est considéré au niveau microscopique, ce qui est cohérent avec le correcteur du premier ordre des développements asymptotiques. Notons que les auteurs s'intéressent principalement aux résultats au niveau macroscopique.

Une approche EF^2 développée par [SOUZA NETO et al. 2015] propose une condition de Hill-Mandel généralisée qui exige que la puissance virtuelle totale à l'échelle macroscopique coïncide avec la moyenne volumique de sa contrepartie à l'échelle microscopique. Il en résulte des modifications sur les équations macroscopique et microscopique, avec notamment la prise en compte de la source sur la microstructure. En imposant la moyenne des fluctuations microscopiques de la température nulle sur le VER, seule la fluctuation de la source est considérée. Malheureusement, aucun résultat numérique n'est présenté dans ces travaux.

L'approche développée par [RAMOS et al. 2017], proche de celle de [SOUZA NETO et al. 2015], considère également la condition de Hill-Mandel généralisée. Les auteurs ne font pas de supposition sur la moyenne des fluctuations microscopiques de la température, ce qui leur permet de considérer la source totale sur la microstructure. Des BC de Dirichlet sont imposées sur la formulation faible du problème sur le VER. Dans leur articles, les solutions obtenues sont comparées à une simulation directe de la structure discrétisant les hétérogénéités et semblent

très satisfaisantes.

Il est montré que l'approche classique des EF² est similaire à un développement asymptotique au premier ordre [BLANC 2009 ; CHATZIGEORGIOU et al. 2016]. L'objectif de ce chapitre est de faire un bilan des méthodes basées sur la condition de Hill-Mandel généralisée, et d'essayer de faire un parallèle avec le développement asymptotique à l'ordre 2.

Pour la suite de ce chapitre, nous détaillons et comparons les différentes approches mentionnées ci-dessus (développement asymptotique et EF²) en Section 4.2. Ces dernières sont ensuite étudiées numériquement à la Section 4.3 à l'aide d'une géométrie où une simulation directe du domaine à l'échelle de la microstructure est possible. Les cas d'une source homogène, puis hétérogène sont analysés. Enfin, le cas d'un problème thermique avec un chargement évolutif en temps et un comportement non-linéaire.

4.2. Méthodes de résolution

Soit Ω un milieu hétérogène de motif ω de taille caractéristique ε . On s'intéresse à un problème de thermique stationnaire avec s une source de chaleur locale et $\underline{\lambda}$ la conductivité définie par un tenseur d'ordre 2 symétrique défini positif. Dans le cas d'un milieu isotrope, λ est un scalaire. Le sens du flux \underline{q} est pris positif lorsqu'il est dirigé selon la normale extérieure à $\partial\Omega$. Le milieu est soumis à un flux imposé Φ_N sur Ω_N et à une température imposée T_D sur Ω_D . On recherche le champ de température T respectant le problème suivant :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \underline{q} = s & \text{dans } \Omega \\ \underline{q}(T) = -\underline{\lambda}(T) \cdot \nabla T & \text{dans } \Omega \\ \underline{q} \cdot \underline{n} = \Phi_N & \text{sur } \partial\Omega_N \\ T = T_D & \text{sur } \partial\Omega_D \end{cases} \quad (4.1)$$

4.2.1. Développement asymptotique à deux échelles

Nous reprenons les développements asymptotiques à deux échelles qui ont pu être faits dans [BENSOUSSAN et al. 1978 ; BOURGAT 1979 ; SANCHEZ-PALENCIA 1980 ; ALLAIRE 1992]. Ces travaux supposent un milieu périodique ($\underline{\lambda}$, s sont ω -périodiques) et une conductivité indépendante de la température avec un comportement linéaire avec le gradient de la température. Les travaux de [BLANC 2009] s'intéressent à un problème de thermique stationnaire avec une source hétérogène, nous détaillons donc en particulier cette approche. Dans le cas d'un milieu pour lequel les échelles sont suffisamment séparés ($l \ll L$, avec L la taille caractéristique de Ω), nous pouvons chercher les solutions sous la forme suivante (cf. Section 1.2.2.6) :

$$T_\varepsilon(\underline{x}, \underline{y}) = T_0(\underline{x}, \underline{y}) + \varepsilon T_1(\underline{x}, \underline{y}) + \varepsilon^2 T_2(\underline{x}, \underline{y}) + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad (4.2)$$

avec $\underline{y} = \frac{\underline{x}}{\varepsilon}$ et T_i des fonctions ω -périodiques par rapport à \underline{y} . Les dérivées spatiales séparent alors la composante à l'échelle lente \underline{x} de l'échelle rapide \underline{y} :

$$\underline{\nabla} = \underline{\nabla}_x + \frac{1}{\varepsilon} \underline{\nabla}_y \quad (4.3)$$

4.2. Méthodes de résolution

On obtient alors le gradient de T_ε :

$$\nabla T_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} \nabla_y T_0 + \nabla_x T_0 + \nabla_y T_1 + \varepsilon (\nabla_x T_1 + \nabla_y T_2) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (4.4)$$

En appliquant l'équation d'équilibre, on détermine des équations aux différents ordres de ε :

$$\text{Ordre -2 : } \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y T_0) = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (4.5)$$

$$\text{Ordre -1 : } \nabla_x \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y T_0) + \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T_1 + \nabla_x T_0)) = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (4.6)$$

$$\text{Ordre 0 : } \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_x T_1 + \nabla_y T_2)) + \nabla_x \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_x T_0 + \nabla_y T_1)) + s = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (4.7)$$

Il s'agit ensuite de résoudre un problème sur la structure pour calculer T_0 et plusieurs problèmes sur VER pour calculer T_1 et T_2 . Ces derniers peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{cases} -\nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y T_i) = f_i & \text{dans } \omega \\ f_i, \underline{\lambda}, T_i & \omega\text{-périodique} \end{cases} \quad (4.8)$$

et doivent respecter l'alternative de Fredholm [BENSOUSSAN et al. 1978]. C'est une condition nécessaire et suffisante d'existence de solutions périodiques qui impose que le bilan des sources de chaleur f_i soit nul sur ω . Ainsi, pour que T_i soit solution de (4.8) à une constante additive près, il faut que :

$$\langle f_i \rangle = 0 \quad (4.9)$$

avec $\langle \bullet \rangle$ l'opérateur de moyenne volumique sur le VER ω défini à l'équation (1.2).

Une fois les différents ordres de T_ε calculés, une étape de relocalisation permet d'obtenir à l'ordre souhaité sur toute la structure. Pour ce faire, il suffit de calculer directement les variations T_i dans le VER ω et de les additionner à la solution homogène.

4.2.1.1. Fonction T_0

Le système à l'ordre -2 en ε est le suivant :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y T_0) = 0 & \text{dans } \omega \\ \underline{\lambda}, T_0 & \omega\text{-périodiques en } \underline{y} \end{cases} \quad (4.10)$$

La fonction uniforme par rapport à \underline{y} est solution évidente du système (4.10) :

$$T_0(\underline{x}, \underline{y}) = T_0(\underline{x}) \quad (4.11)$$

4.2.1.2. Fonction T_1

Le système à l'ordre -1 en ε devient alors en considérant $T_0(\underline{x}, \underline{y}) = T_0(\underline{x})$:

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T_1 + \nabla_x T_0)) = 0 & \text{dans } \omega \\ \underline{\lambda}, T_1 & \omega\text{-périodiques en } \underline{y} \end{cases} \quad (4.12)$$

Ici le terme $\nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_x T_0)$ est bien à moyenne nulle par périodicité de $\underline{\lambda}$ et de T_0 et par antipériodicité de la normale au bord du VER :

$$\int_{\omega} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_x T_0) \, d\underline{y} = \int_{\partial\omega} (\underline{\lambda} \cdot \nabla_x T_0) \cdot \underline{n} \, d\underline{y} = 0 \quad (4.13)$$

Par linéarité, on peut chercher des solutions sous la forme :

$$T_1(\underline{x}, \underline{y}) = \nabla_x T_0(\underline{x}) \cdot \underline{\theta}(\underline{y}) + \hat{T}_1(\underline{x}) \quad (4.14)$$

avec $\underline{\theta}(\underline{y}) = \theta_k(\underline{y})e_k$ et $\theta_k(\underline{y})$ des fonctions correcteurs ω -périodiques solutions des problèmes suivants :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y (\theta_k + y_k))) = 0 & \text{dans } \omega \\ \underline{\lambda}, \theta_k & \omega\text{-périodiques} \end{cases} \quad (4.15)$$

et $\hat{T}_1(\underline{x})$ une constante sur chaque VER. Il est démontré notamment dans [BOURGAT 1979] que $\hat{T}_1 = 0$.

4.2.1.3. Équation homogène

Le système obtenu à l'ordre 0 en ε est le suivant, où T_2 est recherché :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_x T_1 + \nabla_y T_2)) + \nabla_x \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_x T_0 + \nabla_y T_1)) + s = 0 & \text{dans } \omega \\ \underline{\lambda}, T_1, T_2 & \omega\text{-périodiques en } \underline{y} \end{cases} \quad (4.16)$$

Pour que le système admette une solution, il faut respecter l'alternative de Fredholm (4.8), soit ici :

$$\langle \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_x T_1) + \nabla_x \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_x T_0 + \nabla_y T_1)) + s \rangle = 0 \quad (4.17)$$

Par périodicité, le terme en $\nabla_x T_1$ s'annule (cf. équation (4.13)). On utilise l'expression de T_1 en fonction de T_0 (cf. Eq.(4.14)) pour écrire (4.17) sous la forme :

$$\langle \nabla_x \cdot ((\underline{\lambda} \cdot \nabla_y(\underline{y} + \underline{\theta})) \cdot \nabla_x T_0) + s \rangle = 0 \quad (4.18)$$

On obtient alors l'équation d'équilibre homogène :

$$\nabla_x \cdot (\bar{\underline{\lambda}} \cdot \nabla_x T_0) + \langle s \rangle = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (4.19)$$

avec

$$\bar{\underline{\lambda}} = \langle \underline{\lambda} \cdot \nabla_y(\underline{y} + \underline{\theta}) \rangle \quad (4.20)$$

Les conditions aux limites sont alors imposées à T_0 et on a :

$$-\bar{\underline{\lambda}} \cdot \nabla_x T_0 \cdot \underline{n} = \Phi_N \quad \text{sur } \partial\Omega_N \quad (4.21)$$

$$T_0 = T_D \quad \text{sur } \partial\Omega_D \quad (4.22)$$

4.2. Méthodes de résolution

En bilan, le problème homogène à résoudre est :

$$\begin{cases} \nabla_x \cdot (\underline{\bar{\lambda}} \cdot \nabla_x T_0) + \langle s \rangle = 0 & \text{dans } \Omega \\ -\underline{\bar{\lambda}} \cdot \nabla_x T_0 \cdot \underline{n} = \Phi_N & \text{sur } \partial\Omega_N \\ T_0 = T_D & \text{sur } \partial\Omega_D \end{cases} \quad (4.23)$$

4.2.1.4. Fonction T_2

A partir de l'équation (4.7), on écrit les termes ne dépendant pas de T_2 en fonction de T_0 et des correcteurs $\underline{\theta}$:

$$\begin{aligned} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y T_2) + \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_x \nabla_x T_0 \cdot \underline{\theta}) \\ + \nabla_x \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_x T_0) + \nabla_x \cdot ((\underline{\lambda} \cdot \nabla_y \underline{\theta}) \cdot \nabla_x T_0) + s = 0 \end{aligned} \quad (4.24)$$

La conductivité $\underline{\lambda}$ ne dépendant que de la microstructure, est une constante dans les dérivées par rapport à \underline{x} . On factorise en fonction du second gradient de T_0 :

$$\nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y T_2) + \nabla_x \nabla_x T_0 : (\nabla_y (\underline{\lambda} \cdot \underline{\theta}) + \underline{\lambda} + \underline{\lambda} \cdot \nabla_y \underline{\theta}) + s = 0 \quad (4.25)$$

Il est ainsi possible de résoudre T_2 en cherchant des solutions de la forme :

$$T_2(\underline{x}, \underline{y}) = \nabla_x \nabla_x T_0(\underline{x}) : \underline{\tau}^\square(\underline{y}) + \hat{T}_2(\underline{x}) \quad (4.26)$$

On utilise la condition d'existence des solutions (l'équation homogène (4.27)), qui peut également s'écrire sous la forme de l'équation (4.28).

$$\nabla_x \nabla_x T_0 : \underline{\bar{\lambda}} + \langle s \rangle = 0 \quad (4.27)$$

$$-\frac{1}{\langle s \rangle} \nabla_x \nabla_x T_0 : \underline{\bar{\lambda}} = 1 \quad (4.28)$$

En multipliant l'équation (4.28) par s pour remplacer le terme s dans l'équation (4.25), on obtient :

$$\nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y T_2) + \nabla_x \nabla_x T_0 : \left(\nabla_y (\underline{\lambda} \cdot \underline{\theta}) + \underline{\lambda} + \underline{\lambda} \cdot \nabla_y \underline{\theta} - \frac{s}{\langle s \rangle} \underline{\bar{\lambda}} \right) = 0 \quad (4.29)$$

On peut ainsi déterminer le problème à résoudre sur $\underline{\tau}^\square$:

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\nabla_y \underline{\tau}^\square \cdot \underline{\lambda}) + \nabla_y (\underline{\lambda} \cdot \underline{\theta}) + \underline{\lambda} + \underline{\lambda} \cdot \nabla_y \underline{\theta} - \frac{s}{\langle s \rangle} \underline{\bar{\lambda}} = 0 & \text{dans } \omega \\ \underline{\lambda}, \underline{\tau}^\square & \omega\text{-périodiques} \end{cases} \quad (4.30)$$

On souhaite séparer les termes venant de la source, des termes venant du second gradient de T_0 , tout en respectant l'alternative de Fredholm. Pour ce faire, on note s^\sim les fluctuations de la source s , tel que :

$$s^\sim = s - \langle s \rangle. \quad (4.31)$$

Puis, on soustrait la condition d'existence des solutions (4.27) à (4.25), pour obtenir l'équation (4.32).

$$\nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y T_2) + \nabla_x \nabla_x T_0 : (\nabla_y (\underline{\lambda} \cdot \underline{\theta}) + \underline{\lambda} + \underline{\lambda} \cdot \nabla_y \underline{\theta} - \underline{\bar{\lambda}}) + s^\sim = 0 \quad (4.32)$$

On applique alors le principe de superposition pour séparer les termes venant des fluctuations de la source s^\sim des termes venant du second gradient de T_0 . On cherche alors T_2 sous la forme :

$$T_2(\underline{x}, \underline{y}) = \nabla_x \nabla_x T_0(\underline{x}) : \underline{\tau}(\underline{y}) + \tau^{s^\sim}(\underline{y}) + \hat{T}_2(\underline{x}) \quad (4.33)$$

Il faut alors résoudre deux problèmes, un premier sur $\underline{\tau}$ considérant les effets du second gradient de T_0 :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\nabla_y \underline{\tau} \cdot \underline{\lambda}) + \nabla_y (\underline{\lambda} \cdot \underline{\theta}) + \underline{\lambda} + \underline{\lambda} \cdot \nabla_y \underline{\theta} - \bar{\lambda} = 0 & \text{dans } \omega \\ \underline{\lambda}, \underline{\tau} & \omega\text{-périodique} \end{cases} \quad (4.34)$$

et un second sur τ^{s^\sim} prenant en compte la fluctuation de la source :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y \tau^{s^\sim}) + s^\sim = 0 & \text{dans } \omega \\ \underline{\lambda}, \tau^{s^\sim} & \omega\text{-périodiques} \end{cases} \quad (4.35)$$

La constante sur chaque VER $\hat{T}_2(\underline{x})$ peut être donnée par l'équation de compatibilité de T_4 [ALLAIRE et al. 2015] qui est en pratique difficile à résoudre.

4.2.2. Approches EF²

Il est bien connu dans la littérature que la méthode EF² classique ne considère pas de terme source sur la microstructure et donne une solution à l'ordre 1 [BLANC 2009 ; CHATZIGEORGIOU et al. 2016]. Or, les travaux de [BOURGAT 1979] montrent qu'il est important de considérer l'ordre 2 pour obtenir une solution précise dans les hétérogénéités, lorsque celles-ci sont isolantes par rapport à la matrice. Nous rappelons que l'ordre 2 permet de considérer les effets du second gradient de T_0 et de la source (cf. équation (4.25)). Une approche de type EF² ne peut pas nous fournir via un seul calcul de VER, la solution à l'ordre 2 puisque celle-ci dépend de la solution à l'ordre 1 (cf. l'équation (4.25)). De plus, on serait limité à l'étude d'un comportement linéaire.

Les approches EF² développées par [SOUZA NETO et al. 2015 ; RAMOS et al. 2017] sont dédiés à la prise en compte d'un terme source. Elles proposent une condition de Hill-Mandel généralisée que nous démontrons à l'équation (4.43). Dans cette section, nous les formulons et les comparons.

Elles sont basées sur une approche variationnelles du problème (4.1). On cherche $T \in \mathcal{V}(T_D)$ tel que :

$$\int_{\Omega} (\underline{q} \cdot \nabla v + sv) d\underline{x} - \int_{\partial\Omega_N} \Phi_N v d\underline{x} = 0 \quad \forall v \in \mathcal{V}(0) \quad (4.36)$$

avec $\mathcal{V}(u_0) = \{u \in H^1(\Omega) | u = u_0 \text{ sur } \partial\Omega_D\}$.

Le problème (4.1) est remplacé par un problème sur un milieu homogénéisé $\bar{\Omega}$ associé à des problèmes sur un VER noté ω . Ainsi, on modélise la température T par une approche multiéchelle. Les auteurs proposent de décomposer la température autour des coordonnées macroscopiques \underline{x} :

$$T(\underline{x}, \underline{y}) = \bar{T}(\underline{x}) + \nabla_x \bar{T}(\underline{x}) \cdot (\underline{y} - \underline{x}) + T^\sim(\underline{x}, \underline{y}) \quad \underline{x} \in \bar{\Omega}, \underline{y} \in \omega \quad (4.37)$$

avec \bar{T} la température au niveau macroscopique, T^\sim la fluctuation due à la microstructure et ω un VER centré sur chaque point \underline{x} tel que $\langle \underline{y} - \underline{x} \rangle = \underline{0}$.

4.2. Méthodes de résolution

On peut ainsi écrire le flux microscopique :

$$\underline{q}(\underline{x}, \underline{y}) = -\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T^\sim(\underline{x}, \underline{y}) + \nabla_x \bar{T}(\underline{x})) \quad (4.38)$$

On suppose que la température varie de façon régulière au bord du domaine macroscopique $\partial\bar{\Omega}$, tel que $T^\sim = 0$ sur chaque Surface Elémentaire Représentative (SER) γ , qui est l'analogie du VER pour une surface (ici le bord du domaine Ω). Ainsi, $\bar{T}(\underline{x}) = \bar{T}_D = \langle T_D \rangle_\gamma$ sur $\partial\bar{\Omega}_D$, avec $\langle \bullet \rangle_\gamma = \frac{1}{|\gamma|} \int_\gamma \bullet d\underline{y}$ et $|\gamma|$ la mesure de γ .

Une formulation variationnelle est faite sur l'espace homogénéisé $\bar{\Omega}$ avec une prise de moyenne sur le VER ω . On cherche $T \in \mathcal{V}(T_D)$ tel que :

$$\int_{\bar{\Omega}} \langle \underline{q} \cdot \nabla_y v + sv \rangle d\underline{x} - \int_{\partial\bar{\Omega}_N} \langle \Phi_N v \rangle_\gamma d\underline{x} = 0 \quad \forall v \in \mathcal{V}(0) \quad (4.39)$$

On cherche la solution homogénéisé $\bar{T} \in \bar{\mathcal{V}}(T_D)$ telle que :

$$\int_{\bar{\Omega}} (\bar{\underline{q}}^\star \cdot \nabla_x \bar{v} + \bar{s}^\star \bar{v}) d\underline{x} - \int_{\partial\bar{\Omega}_N} \bar{\Phi}_N \bar{v} d\underline{x} = 0 \quad \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0) \quad (4.40)$$

avec $\bar{\mathcal{V}}(u_0) = \{u \in H^1(\bar{\Omega}) | u = \langle u_0 \rangle_\gamma \text{ sur } \partial\bar{\Omega}_D\}$.

Il s'agit alors de définir le flux $\bar{\underline{q}}^\star$, le terme source \bar{s}^\star et le flux imposée $\bar{\Phi}_N$ par identification avec l'équation (4.39). Pour cela on soustrait l'équation (4.40) à (4.39) pour identifier les relations suivantes :

$$\int_{\bar{\Omega}} (\bar{\underline{q}}^\star \cdot \nabla_x \bar{v} + \bar{s}^\star \bar{v}) d\underline{x} = \int_{\bar{\Omega}} \langle \underline{q} \cdot \nabla_y v + sv \rangle d\underline{x} \quad \forall v \in \mathcal{V}(0), \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0) \quad (4.41)$$

$$\int_{\partial\bar{\Omega}_N} \bar{\Phi}_N \bar{v} d\underline{x} = \int_{\partial\bar{\Omega}_N} \langle \Phi_N v \rangle_\gamma d\underline{x} \quad \forall v \in \mathcal{V}(0), \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0) \quad (4.42)$$

On obtient alors le principe de Hill-Mandel généralisé, qui exige que la puissance virtuelle totale à l'échelle macroscopique coïncide avec la moyenne volumique de sa contrepartie à l'échelle microscopique :

$$\bar{\underline{q}}^\star \cdot \nabla_x \bar{v} + \bar{s}^\star \bar{v} = \langle \underline{q} \cdot \nabla_y v + sv \rangle \quad \forall v \in \mathcal{V}(0), \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0) \quad (4.43)$$

Remarque. Lorsque $s = 0$, on retrouve le principe de Hill-Mandel standard (cf. équation (1.30) en mécanique).

Afin de déterminer les problèmes macroscopique et microscopique à résoudre respectivement sur $\bar{\Omega}$ et sur ω , v est décomposé sur le même principe que T en (4.37) :

$$v(\underline{x}, \underline{y}) = \bar{v}(\underline{x}) + \nabla_x \bar{v}(\underline{x}) \cdot (\underline{y} - \underline{x}) + v^\sim(\underline{x}, \underline{y}). \quad (4.44)$$

Détermination du problème macroscopique

Pour déterminer le flux $\bar{\underline{q}}^\star$ et le terme source \bar{s}^\star macroscopique, nous choisissons arbitrairement $v^\sim = 0$ lorsque v est injecté dans l'équation (4.43) :

$$\bar{\underline{q}}^\star \cdot \nabla_x \bar{v} + \bar{s}^\star \bar{v} = \langle \underline{q} \cdot \nabla_x \bar{v} + s\bar{v} + s\nabla_x \bar{v} \cdot (\underline{y} - \underline{x}) \rangle \quad \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0) \quad (4.45)$$

$$= \langle \underline{q} \rangle \cdot \nabla_x \bar{v} + \langle s \rangle \bar{v} + \nabla_x \bar{v} \cdot \langle s(\underline{y} - \underline{x}) \rangle \quad \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0). \quad (4.46)$$

On obtient alors par identification :

$$\underline{\bar{q}}^* = \langle \underline{q} \rangle + \underline{\bar{r}} \quad (4.47)$$

$$\underline{\bar{s}}^* = \langle s \rangle \quad (4.48)$$

avec

$$\underline{\bar{r}} = \langle s(\underline{y} - \underline{x}) \rangle. \quad (4.49)$$

Pour déterminer $\bar{\Phi}_N$, on suppose que $v^\sim = 0$ sur les SER à partir de (4.42) :

$$\bar{\Phi}_N \bar{v} = \langle \bar{\Phi}_N \rangle_\gamma \bar{v} + \langle \bar{\Phi}_N(\underline{y} - \underline{x}) \rangle_\gamma \cdot \nabla_x \bar{v} \quad \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0). \quad (4.50)$$

Par identification, on obtient la valeur de $\bar{\Phi}_N$ et une condition sur $\bar{\Phi}_N$:

$$\bar{\Phi}_N = \langle \bar{\Phi}_N \rangle_\gamma \quad \text{sur } \partial\bar{\Omega}_N \quad (4.51)$$

$$\langle \bar{\Phi}_N(\underline{y} - \underline{x}) \rangle_\gamma = \underline{0} \quad \text{sur } \partial\bar{\Omega}_N. \quad (4.52)$$

En bilan, le problème au niveau macroscopique à résoudre est le suivant :

$$(P_M) \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \bar{T} \in \bar{\mathcal{V}}(T_D) \text{ tel que} \\ \int_{\bar{\Omega}} ((\langle \underline{q} \rangle + \underline{\bar{r}}) \cdot \nabla_x \bar{v} + \langle s \rangle \bar{v}) \, d\underline{x} - \int_{\partial\bar{\Omega}_N} \bar{\Phi}_N \bar{v} \, d\underline{x} = 0 \quad \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0) \end{array} \right. \quad (4.53)$$

avec le problème fort associé suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_x \cdot (\langle \underline{q} \rangle + \underline{\bar{r}}) = \langle s \rangle \quad \text{dans } \bar{\Omega} \\ \underline{\bar{q}}^* \cdot \underline{n} = \bar{\Phi}_N \quad \text{sur } \partial\bar{\Omega}_N \\ \bar{T} = \bar{T}_D \quad \text{sur } \partial\bar{\Omega}_D \end{array} \right. \quad (4.54)$$

Notons que pour une source homogène ou pour une source hétérogène ne variant pas d'un VER à l'autre, $\nabla_x \cdot \underline{\bar{r}} = 0$. Ce terme sera non nul pour une source dépendant de la température, par exemple. Dans le cas $\nabla_x \cdot \underline{\bar{r}} = 0$, le problème macroscopique est similaire à celui obtenu par développement asymptotique (4.19).

Détermination du problème microscopique

Nous choisissons arbitrairement $\bar{v} = 0$ dans l'équation (4.43) appliquée à v donnée par l'équation (4.44) pour obtenir l'équation à résoudre sur la microstructure :

$$\langle \underline{q} \cdot \nabla_y v^\sim + s v^\sim \rangle = 0 \quad \forall v^\sim \in \mathcal{V}^\sim \quad (4.55)$$

avec \mathcal{V}^\sim un espace défini par la suite.

Par intégration par parties, on obtient :

$$\int_{\omega} (-\nabla_y \cdot \underline{q} + s) v^\sim \, d\underline{y} + \int_{\partial\omega} v^\sim \underline{q} \cdot \underline{n} \, d\underline{y} = 0 \quad \forall v^\sim \in \mathcal{V}^\sim \quad (4.56)$$

Par identification avec le problème (4.1), on obtient une équation qui doit être respectée par les

4.2. Méthodes de résolution

conditions aux limites du VER :

$$\int_{\partial\omega} v^\sim \underline{q} \cdot \underline{n} d\underline{y} = 0 \quad \forall v^\sim \in \mathcal{V}^\sim \quad (4.57)$$

Deux stratégies différentes pour résoudre l'équation (4.55) sont choisies par [SOUZA NETO et al. 2015] et [RAMOS et al. 2017]. Elles diffèrent par le choix de l'espace des solutions microscopiques \mathcal{V}^\sim et les conditions aux limites appliquées aux bords du VER. Nous les détaillons dans les sections 4.2.2.1 et 4.2.2.2 et nous en proposons une troisième à la section 4.2.2.3.

4.2.2.1. Approche proposée par Souza Neto et al.

Les auteurs de [SOUZA NETO et al. 2015] proposent de respecter l'équation (4.57) via des solutions périodiques sur le VER. Ainsi, $v^\sim(\underline{x}, \underline{y}^+) = v^\sim(\underline{x}, \underline{y}^-)$ pour une paire de points $(\underline{y}^+, \underline{y}^-)$ opposés sur le bord du VER et $\underline{q} \cdot \underline{n}$ est anti-périodique. De plus, ils choisissent d'imposer la constante additive liée à une résolution par conditions périodiques, en exigeant la moyenne des fluctuations de la température sur le VER nulle :

$$\langle T^\sim \rangle = 0 \quad (4.58)$$

de sorte à avoir $\langle T(\underline{x}, \underline{y}) \rangle = \bar{T}(\underline{x})$.

Ainsi, ils choisissent l'espace des solutions suivant sur le VER :

$$\mathcal{V}_{P_P^s}^\sim = \{u \in H^1(\omega) \mid \langle u \rangle = 0, u \text{ } \omega\text{-périodique en } \underline{y}\}. \quad (4.59)$$

Ces choix impliquent que seules les fluctuations de la source interviennent dans le problème microscopique (4.55). En effet, en posant $s = \langle s \rangle + s^\sim$ (cf. équation (4.31)), on a :

$$\langle sv^\sim \rangle = \langle s \rangle \langle v^\sim \rangle + \langle s^\sim v^\sim \rangle = \langle s^\sim v^\sim \rangle \quad \forall v^\sim \in \mathcal{V}_{P_P^s}^\sim \quad (4.60)$$

L'équation (4.55) devient alors :

$$\langle \underline{q} \cdot \nabla_y v^\sim + s^\sim v^\sim \rangle = 0 \quad \forall v^\sim \in \mathcal{V}_{P_P^s}^\sim \quad (4.61)$$

En conclusion, le problème microscopique à résoudre via l'approche introduite par [SOUZA NETO et al. 2015] se formule :

$$(P_P^{s^\sim}) \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } T^\sim \in \mathcal{V}_{P_P^s}^\sim \text{ tel que} \\ \int_{\omega} (\underline{q} \cdot \nabla_y v^\sim + s^\sim v^\sim) d\underline{y} = 0 \quad \forall v^\sim \in \mathcal{V}_{P_P^s}^\sim \end{array} \right. \quad (4.62)$$

Dont le problème fort est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T^\sim + \nabla_x \bar{T})) + s^\sim = 0 \quad \text{dans } \omega \\ T^\sim \text{ } \omega\text{-périodique en } \underline{y} \end{array} \right. \quad (4.63)$$

Ce problème respecte bien l'alternative de Fredholm [BENSOUSSAN et al. 1978], car $\langle s^\sim \rangle = 0$.

De façon analogue, le flux macroscopique ne tient compte que des fluctuations de s :

$$\bar{\underline{r}} = \langle s^\sim(\underline{y} - \underline{x}) \rangle \quad (4.64)$$

Comparaison à l'approche par développement asymptotique à deux échelles

Par le développement asymptotique proposé en Section 4.2.1, on peut enrichir T_1 (cf. (4.12)) par la solution du problème considérant les fluctuations de la source τ^{s^\sim} (cf. (4.35)) :

$$T_{1s^\sim} = T_1 + \tau^{s^\sim}. \quad (4.65)$$

En additionnant les systèmes (4.12) et (4.35), on obtient une équation sur T_{1s^\sim} :

$$\begin{cases} \nabla_{\underline{y}} \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_{\underline{y}} T_{1s^\sim} + \nabla_{\underline{x}} T_0)) + s^\sim = 0 & \text{dans } \omega \\ T_{1s^\sim} & \omega\text{-périodique en } \underline{y} \end{cases} \quad (4.66)$$

On constate que le problème à l'échelle microscopique proposé par [SOUZA NETO et al. 2015] (cf. équation (4.63)) est identique à la formulation par développement asymptotique T_{1s^\sim} pour un chargement donné ($\nabla_{\underline{x}} T_0$ ou $\nabla_{\underline{x}} \bar{T}$) qui peut différer si $\nabla_{\underline{x}} \cdot \bar{\underline{r}}$ n'est pas nul. De plus, pour une source homogène ($s = \langle s \rangle$ et $s^\sim = 0$), la formulation de T_{1s^\sim} est identique à celle de T_1 pour un chargement donné. Dans ce cas, l'approche de [SOUZA NETO et al. 2015] ne permet pas de considérer un effet induit par la source sur la microstructure.

4.2.2.2. Approche proposée par Ramos et al.

Afin de vérifier l'équation (4.57), les auteurs de [RAMOS et al. 2017] proposent de considérer des BC de Dirichlet. Ainsi, la fluctuation de température au bord du VER est choisie nulle :

$$T^\sim = 0 \quad \text{sur } \partial\omega. \quad (4.67)$$

Par conséquent, l'espace des solutions choisi est le suivant :

$$\mathcal{V}_{P_D^s}^\sim = \{u \in H^1(\omega) | u = 0 \text{ sur } \partial\omega\}. \quad (4.68)$$

Aucune hypothèse supplémentaire (de moyenne ou autre) n'est effectuée. Le problème au niveau microscopique à résoudre s'écrit alors :

$$(P_D^s) \begin{cases} \text{Trouver } T^\sim \in \mathcal{V}_{P_D^s}^\sim \text{ tel que} \\ \int_{\omega} (\underline{q} \cdot \nabla_{\underline{y}} v^\sim + s v^\sim) d\underline{y} = 0 \quad \forall v^\sim \in \mathcal{V}_{P_D^s}^\sim \end{cases} \quad (4.69)$$

Dont le problème fort est :

$$\begin{cases} \nabla_{\underline{y}} \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_{\underline{y}} T^\sim + \nabla_{\underline{x}} \bar{T})) + s = 0 & \text{dans } \omega \\ T^\sim = 0 & \text{sur } \partial\omega \end{cases} \quad (4.70)$$

Comparaison à l'approche par développement asymptotique à deux échelles

Par un raisonnement similaire à ce qui a été fait en Section 4.2.1.4, il serait possible de faire

4.2. Méthodes de résolution

une autre décomposition de T_2 (cf. équation (4.33)) :

$$T_2(\underline{x}, \underline{y}) = T_2^*(\underline{x}, \underline{y}) + \tau^s(\underline{y}) + \hat{T}_2(\underline{x}) \quad (4.71)$$

où T_2^* , directement déduit de (4.25), décrit les effets du second gradient de T_0 et τ^s prend en compte les effets de la source :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_y \tau^s) + s = 0 & \text{dans } \omega \\ \tau^s = 0 & \text{sur } \partial\omega \end{cases} \quad (4.72)$$

Ainsi, il est possible d'enrichir T_1 (cf. (4.12)) par la fonction τ^s (cf. (4.72)) en considérant :

$$T_{1s} = T_1 + \tau^s. \quad (4.73)$$

En additionnant les systèmes (4.12) et (4.72), on obtient une équation sur T_{1s} :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T_{1s} + \nabla_x T_0)) + s = 0 & \text{dans } \omega \\ T_{1s} = 0 & \text{sur } \partial\omega \end{cases} \quad (4.74)$$

On constate alors que le problème à l'échelle microscopique proposé par [RAMOS et al. 2017] (cf. équation (4.69)) est identique à la formulation (4.74) pour un chargement donné. Cette formulation permet alors de considérer la source dans sa globalité et d'obtenir des effets sur la microstructure lorsque la source est homogène. Néanmoins, les effets de bord liés aux BC de Dirichlet (cf. Chapitre 3) peuvent être présents. Dans la section suivante, nous proposons une formulation considérer la source dans sa globalité et des conditions périodiques.

4.2.2.3. Nouvelle approche considérant la source complète et des conditions périodiques

De la même manière que [SOUZA NETO et al. 2015], nous proposons de respecter l'équation (4.57) via des conditions périodiques sur le VER. Pour imposer la constante additive, nous n'effectuons pas une hypothèse de moyenne, mais nous fixons $T^\sim = 0$ en un point A de $\partial\omega$ (généralement un coin du VER). Ainsi, nous choisissons l'espace des solutions suivant sur le VER :

$$\mathcal{V}_{P_P^s}^\sim = \{u \in H^1(\omega) | u \text{ } \omega\text{-périodique en } \underline{y}, u = 0 \text{ en un point } A \text{ de } \partial\omega\}. \quad (4.75)$$

Le problème microscopique à résoudre via l'approche proposée se formule :

$$(P_P^s) \begin{cases} \text{Trouver } T^\sim \in \mathcal{V}_{P_P^s}^\sim \text{ tel que} \\ \int_\omega (\underline{q} \cdot \nabla_y v^\sim + s v^\sim) d\underline{y} = 0 \quad \forall v^\sim \in \mathcal{V}^\sim \end{cases} \quad (4.76)$$

Dont le problème fort est le suivant :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T^\sim + \nabla_x \bar{T})) + s = 0 & \text{dans } \omega \\ T^\sim & \omega\text{-périodique en } \underline{y} \\ T^\sim = 0 & \text{en un point } A \text{ de } \partial\omega \end{cases} \quad (4.77)$$

Toutes ces relations (point bloqué et périodicité) sont imposées par des multiplicateurs de

Lagrange. On peut définir $\partial\omega$ par l'union des paires de surfaces de périodicité (S_i^-, S_i^+) du VER. On a alors :

$$\partial\omega = \bigcup_{i=1}^N (S_i^- \cup S_i^+) \quad (4.78)$$

avec N la dimension de l'espace.

On définit alors $\partial\omega = \partial\omega^- \cup \partial\omega^+$ (avec $\partial\omega^- \cap \partial\omega^+ = \emptyset$) et :

$$\partial\omega^- = \bigcup_{i=1}^N S_i^- \quad \partial\omega^+ = \bigcup_{i=1}^N S_i^+ \quad (4.79)$$

On note ψ l'opérateur défini sur $\partial\omega^-$ associant à tout point sa copie par périodicité sur $\partial\omega^+$.

On a ainsi un problème de minimisation sous contraintes considérant le lagrangien suivant :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(T^\sim, \alpha, \mu) = & \int_{\omega} \left(\frac{1}{2} \nabla_y T^\sim \cdot \underline{\lambda} \cdot \nabla_y T^\sim - s T^\sim + \nabla_y T^\sim \cdot \underline{\lambda} \cdot \nabla_x \bar{T} \right) d\underline{y} + \mu \int_{\omega} T^\sim \delta_A d\underline{y} \\ & + \int_{\partial\omega^-} \alpha(\underline{y}) (T^\sim(x, \underline{y}) - T^\sim(x, \psi(\underline{y}))) d\underline{y} \end{aligned} \quad (4.80)$$

avec α, μ les multiplicateurs de Lagrange, δ_A le Dirac au point A . La minimisation par rapport à T^\sim s'écrit :

$$\begin{aligned} \partial_{T^\sim} \mathcal{L}(T^\sim, \alpha, \mu)(u) = & \int_{\omega} (\nabla_y u \cdot \underline{\lambda} \cdot \nabla_y T^\sim - s u + \nabla_y u \cdot \underline{\lambda} \cdot \nabla_x \bar{T} + \mu \delta_A u) d\underline{y} \\ & + \int_{\partial\omega^-} \alpha(\underline{y}) (u(x, \underline{y}) - u(x, \psi(\underline{y}))) d\underline{y} = 0 \quad \forall u \in H^1(\omega). \end{aligned} \quad (4.81)$$

L'équation (4.81) étant valable $\forall u \in H^1(\omega)$, en particulier pour $u = 1$, on obtient que le multiplicateur de Lagrange associé au point bloqué est égal à :

$$\mu = \frac{\int_{\omega} s d\underline{y}}{\int_{\omega} \delta_A d\underline{y}} = \int_{\omega} s d\underline{y}. \quad (4.82)$$

Pour déterminer l'équation que T^\sim respecte sur le VER, on effectue une intégration par parties sur l'équation (4.81) :

$$\begin{aligned} \int_{\omega} (-\nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T^\sim + \nabla_x \bar{T})) - s + \mu \delta_A) u d\underline{y} + \int_{\partial\omega^-} \alpha(\underline{y}) (u(x, \underline{y}) - u(x, \psi(\underline{y}))) d\underline{y} \\ + \int_{\partial\omega} \underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T^\sim + \nabla_x \bar{T}) \cdot \underline{n} u d\underline{y} = 0 \quad \forall u \in H^1(\omega). \end{aligned} \quad (4.83)$$

On obtient alors l'équation sur ω suivante :

$$-\nabla_y \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_y T^\sim + \nabla_x \bar{T})) = s - \mu \delta_A \quad (4.84)$$

On peut ainsi définir le terme source de (4.84) par :

$$f = s - \mu \delta_A \quad (4.85)$$

4.2. Méthodes de résolution

Or, l'intégrale de f sur le VER est nulle par la définition de μ en (4.82) :

$$\int_{\omega} f d\underline{y} = \int_{\omega} s d\underline{y} - \mu = 0 \quad (4.86)$$

Par conséquent, le problème (4.77) respecte bien l'alternative de Fredholm.

De plus, en appliquant un changement de variable $\underline{y} \rightarrow \psi^{-1}(\underline{y})$ sur le terme en $\alpha(\underline{y})u(\underline{x}, \psi(\underline{y}))$, on reformule l'intégrale sur le bord de l'équation (4.83) par :

$$\int_{\partial\omega^-} \alpha(\underline{y})u(\underline{x}, \underline{y})d\underline{y} - \int_{\partial\omega^+} \alpha(\psi^{-1}(\underline{y}))u(\underline{x}, \underline{y})d\underline{y} = \int_{\partial\omega} \underline{q}(\underline{x}, \underline{y}) \cdot \underline{n} u(\underline{x}, \underline{y})d\underline{y} \quad \forall u \in H^1(\omega). \quad (4.87)$$

Cette égalité est vrai $\forall u \in H^1(\omega)$, donc on obtient :

$$\alpha(\underline{y}) = \underline{q}(\underline{x}, \underline{y}) \cdot \underline{n}|_{\partial\omega^-} \quad \alpha(\psi^{-1}(\underline{y})) = -\underline{q}(\underline{x}, \underline{y}) \cdot \underline{n}|_{\partial\omega^+} \quad (4.88)$$

Or pour toute paire $(\underline{y}^-, \underline{y}^+)$ de points appairés de $\partial\omega^-$ et $\partial\omega^+$ tels que $\underline{y}^+ = \psi(\underline{y}^-)$, alors $\alpha(\underline{y}^-) = \alpha(\psi^{-1}(\underline{y}^+))$ par définition de \underline{y}^+ . Ainsi, on démontre l'anti-périodicité du flux :

$$\underline{q}(\underline{x}, \underline{y}^-) \cdot \underline{n}(\underline{y}^-) = -\underline{q}(\underline{x}, \underline{y}^+) \cdot \underline{n}(\underline{y}^+) \quad (4.89)$$

Comparaison à l'approche par développement asymptotique à deux échelles

En considérant la décomposition de T_2 en équation (4.71), on peut écrire le problème sur τ_s suivant :

$$\begin{cases} \nabla_{\underline{y}} \cdot (\underline{\lambda} \cdot \nabla_{\underline{y}} \tau^s) + s = 0 & \text{dans } \omega \\ \tau^s & \omega\text{-périodique en } \underline{y} \\ \tau^s = 0 & \text{en un point A de } \partial\omega \end{cases} \quad (4.90)$$

On obtient alors l'équation sur T_{1s} suivante :

$$\begin{cases} \nabla_{\underline{y}} \cdot (\underline{\lambda} \cdot (\nabla_{\underline{y}} T_{1s} + \nabla_{\underline{x}} T_0)) + s = 0 & \text{dans } \omega \\ T_{1s} & \omega\text{-périodique en } \underline{y} \\ T_{1s} = 0 & \text{en un point A de } \partial\omega \end{cases} \quad (4.91)$$

On constate que le problème à l'échelle microscopique proposée dans cette section est identique à la formulation par développement asymptotique T_{1s} pour un chargement donné ($\nabla_{\underline{x}} T_0$ ou $\nabla_{\underline{x}} \bar{T}$). On pourra ainsi considérer la source dans sa globalité tout en ayant des conditions périodiques.

4.2.2.4. A propos de la constante additive

A la Section 4.2.1.4, nous avons vu qu'il reste une constante sur chaque VER $\hat{T}_2(\underline{x})$ à déterminer. Peu de travaux se sont intéressés au correcteur d'ordre 2 (T_2) et encore moins à cette constante. Dans [ALLAIRE et al. 2013] les auteurs imposent $\langle T_2 \rangle = 0$, ce qui revient aux hypothèses de l'approche proposée par [SOUZA NETO et al. 2015]. Or, T_2 est un correcteur qui agit essentiellement dans les inclusions. Nous proposons alors d'imposer une moyenne nulle dans la matrice :

$$\frac{1}{|\omega_2|} \int_{\omega_2} T_2(\underline{x}, \underline{y}) d\underline{y} = 0 \quad (4.92)$$

où ω_2 est le domaine matriciel de ω .

Par analogie avec le développement asymptotique, et sachant que $\hat{T}_1(\underline{x}) = 0$, nous imposerons en post-traitement des problèmes EF^2 avec conditions périodiques :

$$\langle T^\sim(\underline{x}, \underline{y}) \rangle_{\omega_2} = 0 \quad (4.93)$$

avec $\langle \bullet \rangle_{\omega_2} = \frac{1}{|\omega_2|} \int_{\omega_2} \bullet d\underline{y}$ pour un champ générique \bullet .

4.2.2.5. Schéma de résolution

Maintenant que le problème macroscopique (4.53) et les problèmes microscopiques (4.62), (4.69) ou (4.76) sont établis, on propose un schéma de résolution EF^2 , de manière à résoudre itérativement les problèmes microscopique et macroscopique.

Tout d'abord, nous rappelons le schéma de résolution standard d'un problème stationnaire de thermique non-linéaire, du type (4.94).

$$\begin{cases} \nabla \cdot \underline{Q} = f & \text{dans } D \\ \underline{Q}(u) = -\underline{\kappa}(u) \cdot \nabla u & \text{dans } D \\ \underline{Q} \cdot \underline{n} = \phi_N & \text{sur } \partial D_N \\ u = u_D & \text{sur } \partial D_D \end{cases} \quad (4.94)$$

On cherche $u \in \mathcal{W}(u_D)$ tel que :

$$\int_D (-\underline{\kappa}(u) \cdot \nabla u \cdot \nabla w + fw) d\underline{x} - \int_{\partial D_N} \phi_N w d\underline{x} = 0 \quad \forall w \in \mathcal{W}(0) \quad (4.95)$$

avec $\mathcal{W}(u_0) = \{u \in H^1(D) | u = u_0 \text{ sur } \partial D_D\}$.

L'équation (4.95) étant non-linéaire en u , différentes stratégies de linéarisation peuvent être proposées. La plus simple consiste à réaliser des itérations de point fixe. Ainsi, on pose pour $k > 0$:

$$u^k = u^{k-1} + \delta u^k \quad (4.96)$$

On applique alors un développement limité à l'ordre 1 au flux thermique :

$$\underline{Q}(u^k) \approx \underline{Q}(u^{k-1}) - \left. \frac{\partial \underline{\kappa}}{\partial u} \right|_{u^{k-1}} \cdot \nabla u^{k-1} \delta u^k - \underline{\kappa}(u^{k-1}) \cdot \left. \frac{\partial \nabla u}{\partial u} \right|_{u^{k-1}} \delta u^k \quad (4.97)$$

$$\approx \underline{Q}(u^{k-1}) - \left. \frac{\partial \underline{\kappa}}{\partial u} \right|_{u^{k-1}} \cdot \nabla u^{k-1} \delta u^k - \underline{\kappa}(u^{k-1}) \cdot \nabla \delta u^k \quad (4.98)$$

En négligeant le terme $\left. \frac{\partial \underline{\kappa}}{\partial u} \right|_{u^{k-1}}$, hypothèse valable si $\underline{\kappa}$ est considérée constant autour de u^{k-1} , on a alors :

$$\underline{Q}(u^k) = \underline{Q}(u^{k-1}) - \underline{\kappa}(u^{k-1}) \cdot \nabla \delta u^k \quad (4.99)$$

On peut également considérer le flux thermique dépendant de deux variables $\underline{Q}(u, \nabla u)$ [RAMOS et al. 2017] et réaliser un développement limité autour de u^{k-1} et ∇u^{k-1} :

$$\underline{Q}(u^k, \nabla u^k) \approx \underline{Q}(u^{k-1}, \nabla u^{k-1}) + \left. \frac{\partial \underline{Q}}{\partial u} \right|_{u^{k-1}} \delta u^k + \left. \frac{\partial \underline{Q}}{\partial \nabla u} \right|_{\nabla u^{k-1}} \nabla \delta u^k \quad (4.100)$$

4.2. Méthodes de résolution

$$\approx \underline{Q}(u^{k-1}, \nabla u^{k-1}) - \left. \frac{\partial \underline{\kappa}}{\partial u} \right|_{u^{k-1}} \cdot \nabla u^{k-1} \delta u^k - \underline{\kappa}(u^{k-1}) \cdot \nabla \delta u^k \quad (4.101)$$

aboutissant, sous les mêmes hypothèses sur le coefficient de conductivité thermique, à la même expression que l'équation (4.99).

On obtient donc :

$$\int_D \underline{\kappa}(u^{k-1}) \cdot \nabla \delta u^k \cdot \nabla w d\underline{x} = \int_D \underline{Q}(u^{k-1}) \cdot \nabla w d\underline{x} + \int_D f w d\underline{x} - \int_{\partial D_N} \phi_N w d\underline{x} \quad \forall w \in \mathcal{W}(0) \quad (4.102)$$

Pour les différents problèmes sur la microstructure, ce schéma écrit ci-dessus est implémenté dans le solveur EF non-linéaire et peut être utilisé directement. Nous rappelons alors les différents problèmes sur la microstructure :

— Le problème issu de l'approche proposée par [SOUZA NETO et al. 2015] :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot \underline{q} = s^\sim & \text{sur } \omega \\ T(\underline{x}, \underline{y}) = \bar{T}(\underline{x}) + \nabla_x \bar{T}(\underline{x}) \cdot (\underline{y} - \underline{x}) + T^\sim(\underline{x}, \underline{y}) & \text{sur } \partial\omega \\ \text{avec } T^\sim \text{ } \omega\text{-périodique en } \underline{y} \end{cases} \quad (4.103)$$

avec des BC analogues aux PBC introduites en Section 1.2.3.2, équation (1.26) donc traitées de manières similaire à l'équation (1.27).

— Le problème issu de l'approche proposée par [RAMOS et al. 2017] :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot \underline{q} = s & \text{sur } \omega \\ T(\underline{x}, \underline{y}) = \bar{T}(\underline{x}) + \nabla_x \bar{T}(\underline{x}) \cdot (\underline{y} - \underline{x}) & \text{sur } \partial\omega \end{cases} \quad (4.104)$$

avec des BC analogues aux USBC introduites en Section 1.2.3.2, équation (1.24).

— Notre proposition considérant la source complète et des conditions périodiques :

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot \underline{q} = s & \text{sur } \omega \\ T(\underline{x}, \underline{y}) = \bar{T}(\underline{x}) + \nabla_x \bar{T}(\underline{x}) \cdot (\underline{y} - \underline{x}) + T^\sim(\underline{x}, \underline{y}) & \text{sur } \partial\omega \\ \text{avec } T^\sim \text{ } \omega\text{-périodique en } \underline{y} \\ T(\underline{x}, \underline{y}(A)) = \bar{T}(\underline{x}) + \nabla_x \bar{T}(\underline{x}) \cdot (\underline{y}(A) - \underline{x}) \end{cases} \quad (4.105)$$

avec des BC analogues aux PBC introduites en Section 1.2.3.2, équation (1.26) avec un point A bloqué.

Concernant le problème macroscopique, le schéma s'écrit :

$$\begin{aligned} \int_\Omega \underline{\lambda}^0(\bar{T}^{k-1}) \cdot \nabla_x \delta \bar{T}^k \cdot \nabla_x \bar{v} d\underline{x} &= \int_\Omega \langle \underline{q}^{k-1} \rangle \cdot \nabla_x \bar{v} d\underline{x} \\ &+ \int_\Omega (\bar{\underline{r}} \cdot \nabla_x \bar{v} + \langle s \rangle \bar{v}) d\underline{x} - \int_{\partial\Omega_N} \bar{\Phi}_N \bar{v} d\underline{x} \quad \forall \bar{v} \in \bar{\mathcal{V}}(0) \end{aligned} \quad (4.106)$$

avec $\langle \underline{q}^{k-1} \rangle$ issu de la résolution du problème microscopique associé et $\underline{\lambda}^0$ une conductivité homogène arbitraire. Ce processus itératif s'arrête lorsque le critère suivant sur $\delta T^k = T^k - T^{k-1}$

est atteint :

$$\frac{\|\delta T^k\|_\infty}{\|T^k\|_\infty} < \varepsilon_R \quad (4.107)$$

avec ε_R un seuil d'erreur relative. Ce type de critère conduit généralement à une itération supplémentaire non nécessaire mais qui permet de garantir la convergence.

A la première itération du couplage multiéchelle ($k = 1$), la conductivité homogène $\underline{\lambda}^0$ est choisie arbitrairement. En pratique, on prend souvent alors la conductivité d'une des phases ou bien des estimations analytiques de la conductivité homogène (par exemple, l'estimation de Maxwell [PIETRAK et al. 2014]) pour accélérer le processus itératif. Aux itérations suivantes, ce tenseur peut être actualisé via une estimation numérique de la conductivité homogène apparente déduite des calculs microscopiques. Pour des problèmes de thermique stationnaire, le tenseur diagonal de conductivité apparente se déduit directement de la moyenne du flux et du gradient de température :

$$\lambda^0(T^{k-1})_{ii} = \bar{\lambda}(T^{k-1})_{ii} = -\frac{(\langle q^{k-1} \rangle + \bar{r})_i}{(\nabla_x \bar{T}^{k-1})_i}, \quad i = 1, \dots, N \quad (N \text{ la dimension}) \quad (4.108)$$

4.2.2.6. Bilan sur les approches EF²

En définitive, on remarque que l'approche EF² proposée par [SOUZA NETO et al. 2015] revient à considérer uniquement les fluctuations de la source dans le VER, ce qui amène un terme nul dans le cas où la source serait homogène. Cette approche est donc uniquement d'ordre 1 pour une source homogène. L'approche de [RAMOS et al. 2017] via des BC de Dirichlet considère une source complète, même si celle-ci est de moyenne non nulle (cf. développement asymptotique sans l'alternative de Fredholm, mais avec des BC de Dirichlet). Les solutions obtenues via cette approche, même si elle peuvent avoir un comportement plus proche de la solution directe, subiront les imprécisions de ce type de BC (cf. Chapitre 3). Nous avons proposé une approche via des BC périodiques nous permettant de considérer la source complète grâce à un multiplicateur de Lagrange bloquant un coin du VER. Cette approche respecte ainsi l'alternative de Fredholm.

On étudie numériquement ces trois méthodes dans la Section 4.3 pour différents contrastes de conductivité et une source homogène (non nulle), puis hétérogène. Nous regardons par ailleurs l'impact des termes en second gradient de T_0 sur le correcteur d'ordre 2 (cf. équation (4.25)).

4.3. Résultats numériques

Dans cette section, nous nous intéressons à la comparaison des résultats obtenus avec les différentes méthodes EF² exposées dans la Section 4.2 sur une structure périodique modèle. Ces méthodes sont implémentées dans la mini-application *Mirabel* dédiée au test de nouvelles fonctionnalités numériques ou de nouveaux modèles dans l'environnement PLEIADES. Ainsi, un framework codé en C++ de l'architecture PLEIADES permet de gérer la boucle EF², les échanges entre les solveurs des échelles microscopique et macroscopique (qui peuvent être deux instances du même solveur), et de réaliser les calculs VER en parallèle. Le logiciel *Cast3M* [Cast3M] est utilisé pour les résolutions macroscopiques et microscopiques. On analyse les résultats pour le cas d'une source homogène à la Section 4.3.2, puis hétérogène à la Section 4.3.3 sur le cas test présenté à la Section 4.3.1. La Section 4.3.4 est dédiée au cas d'un problème thermique avec un

4.3. Résultats numériques

chargement évolutif en temps et un comportement non-linéaire.

4.3.1. Milieu périodique et VER

On considère un milieu périodique constituée de $N = 30$ VER alignés selon l'axe e_1 (cf. Figure 4.2). Le VER (cf. Figure 4.1), de taille $l = 100 \mu m$, est constitué d'une inclusion sphérique de rayon $r = 0,3l$ ($r = 30 \mu m$) centré dans le VER. La fraction volumique est alors de $f_v \sim 11,3 \%$. Ce VER est maillé avec des tétraèdres quadratiques et comporte environ 13000 nœuds. Pour avoir une solution de référence, on maille également entièrement la structure, cf. Figure 4.2. Le domaine homogénéisé est une droite 1D maillée avec $N/3$ segments quadratiques (cf. Figure 4.2). On a donc 3 VER qui sont localisés aux points de Gauss de chaque segment, avec le VER localisé autour du deuxième point de Gauss de chaque segment coïncidant avec la structure de référence, cf. Figure 4.2. On impose une température de $500^\circ C$ pour $x_D = 3 mm$ (droite de la structure) et une condition de Neumann homogène à gauche de la structure ($x_N = 0$). On comparera les différentes approches EF² sur le 17^e VER en analysant la température le long de la droite bleue représentée sur la Figure 4.1b. Cette droite relie les points $(0; \frac{l}{2}; \frac{l}{2})$ et $(l; \frac{l}{2}; \frac{l}{2})$.



FIGURE 4.1. – VER avec l'inclusion en rouge et la matrice en vert

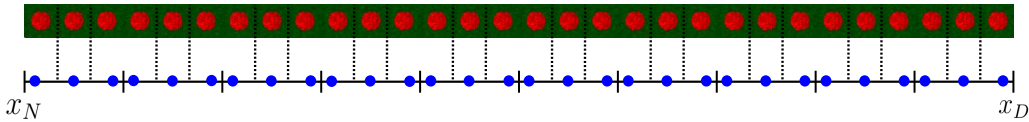


FIGURE 4.2. – Vue en coupe de la structure de la simulation de référence et maillage homogénéisé associé (points de Gauss en bleu)

4.3.2. Source homogène

On s'intéresse à un matériau modèle à comportement thermique linéaire avec une source homogène et un contraste sur la conductivité. La source est choisie telle que la source moyenne sur le VER soit identique avec le cas de la source hétérogène (qui sera présenté en Section 4.3.3). Les valeurs de ces propriétés sont données en équation (4.109) :

$$\begin{cases} \lambda_1 = 0,1 W.m^{-1}.^\circ C^{-1} \\ \lambda_2 = \lambda_1 \times \text{contraste} \\ s_1 = s_2 = s = f_v s_I \quad \text{avec } s_I = 3 \times 10^{10} W.m^{-3} \end{cases} \quad (4.109)$$

avec les indices 1 et 2 correspondant respectivement à l'inclusion et à la matrice.

Pour l'approche basée sur un développement asymptotique, on définit les températures relocalisées obtenues avec la solution homogène et les différents correcteurs (cf. équations (4.14), (4.65) et (4.73)) calculés sur le VER par :

$$T_{\varepsilon,1}(\underline{x}, \underline{y}) = T_0(\underline{x}) + T_1(\underline{x}, \underline{y}), \quad (4.110)$$

$$T_{\varepsilon,1s^\sim}(\underline{x}, \underline{y}) = T_0(\underline{x}) + T_{1s^\sim}(\underline{x}, \underline{y}), \quad (4.111)$$

$$T_{\varepsilon,1s}(\underline{x}, \underline{y}) = T_0(\underline{x}) + T_{1s}(\underline{x}, \underline{y}). \quad (4.112)$$

On réalise des simulations EF² avec localement les résolutions des problèmes ($P_P^{s^\sim}$) (cf. (4.62)), (P_D^s) (cf. (4.69)) ou (P_P^s) (cf. (4.76)). On compare ces résultats entre eux et aux différents ordres de T_ε obtenus par le développement asymptotique. Le problème macroscopique associé est identique, car dans ce cas $\bar{r} = \langle s(\underline{y} - \underline{x}) \rangle = \underline{0}$. Il s'écrit :

$$\begin{cases} \nabla_x \cdot \langle \underline{q} \rangle = \langle s \rangle & \text{pour } x \in [0; 3] \text{ mm} \\ \langle \underline{q} \rangle \cdot \underline{n} = 0 & \text{en } x_N = 0 \text{ mm} \\ \bar{T} = 500^\circ C & \text{en } x_D = 3 \text{ mm} \end{cases} \quad (4.113)$$

où $\langle \underline{q} \rangle$ est obtenu via des résolutions sur VER avec des problèmes différents. Les solutions macroscopiques peuvent donc être différentes.

Pour ce type de résolution, et quel que soit le problème microscopique considéré (($P_P^{s^\sim}$), (P_D^s) ou (P_P^s)), le processus EF² fait 3 itérations entre le solveur macroscopique et le solveur microscopique pour une erreur relative en température de $\varepsilon_R = 10^{-4}$. A noter que la dernière itération est inutile et pourrait être évitée avec un autre critère d'arrêt EF² basé sur le résidu du problème macroscopique ou sur l'incrément en flux. Pour une parallélisation sur 31 processeurs (nombre de VER + 1 processus maître), la résolution EF² se fait ici en moyenne en 45 secondes (pour environ 13 000 nœuds dans le VER) sur le même serveur¹ qu'en Section 3.4.1. En choisissant $\underline{\lambda}^0$ égale à la conductivité dans la phase matricielle (donc une approche de quasi-Newton sur le problème homogène (4.106)), le processus EF² fait alors 6 itérations en un temps moyen de 65 secondes. A titre de comparaison, la simulation directe prend 70 secondes (avec 31 processeurs).

4.3.2.1. Analyse sur les inclusions isolantes

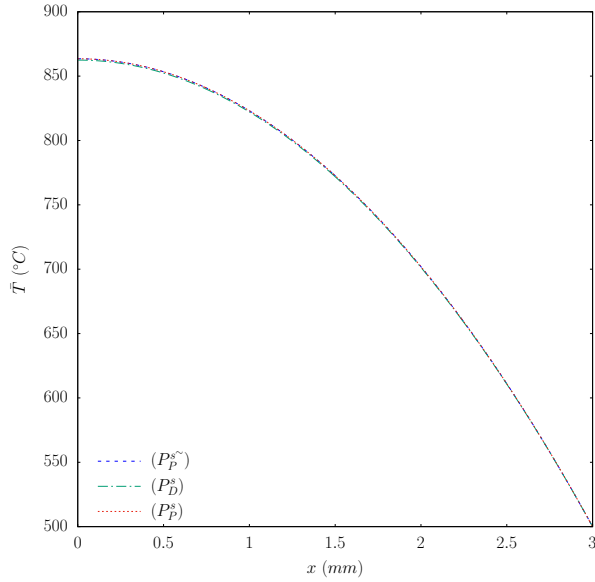
On prendra dans un premier temps le paramètre *contraste* = 500, donc des inclusions très isolantes par rapport à la matrice. Sur la Figure 4.3 on compare les solutions aux différentes échelles et avec les différentes approches.

Sur la Figure 4.3a, on compare les solutions macroscopiques obtenues avec les différentes approches EF². On remarque que les différentes méthodes EF² ne sont pas distinguables à cette échelle. On ne peut donc pas discriminer les méthodes à ce niveau. En effet, les moyennes du gradient des différentes températures locales sont similaires et conduisent à des solutions macroscopiques semblables. Sur la Figure 4.3b, on relocalise la température à l'échelle macroscopique pour les différents problèmes microscopiques et pour la solution de référence obtenue par un calcul EF complet sur la structure. La température est relocalisée uniquement aux VER coïncidant avec la structure de référence. On observe de multiples petites bosses

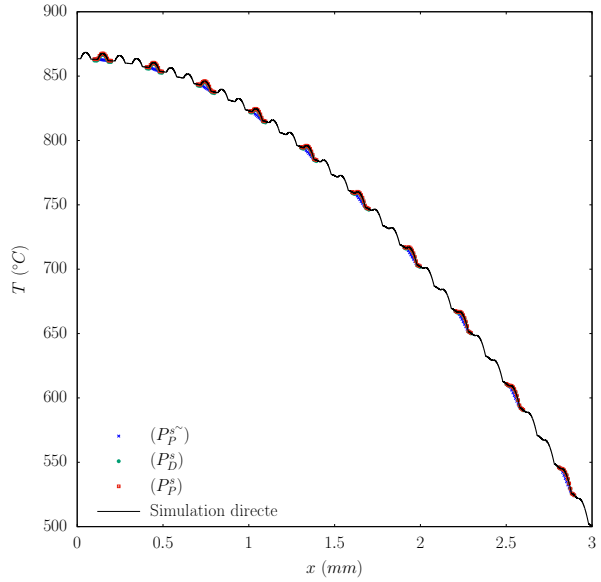
1. un bi-processeur Intel Xeon Broadwell E52699A v4 (55 Mo de cache, @2.40Ghz) avec 44 cœurs et une mémoire de 352 Go

4.3. Résultats numériques

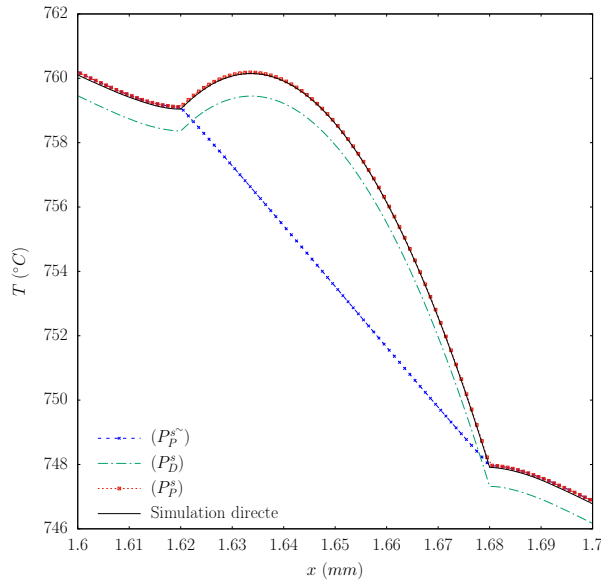
correspondant aux variations dues à la microstructure. En effet, les inclusions ayant une mauvaise conductivité par rapport à la matrice, elles conservent davantage la chaleur de la source et produisent ces fluctuations. Il est toujours difficile de différencier les méthodes EF², mais on constate que la température multiéchelle déterminée via les méthodes EF² est globalement en bon accord avec la simulation directe.



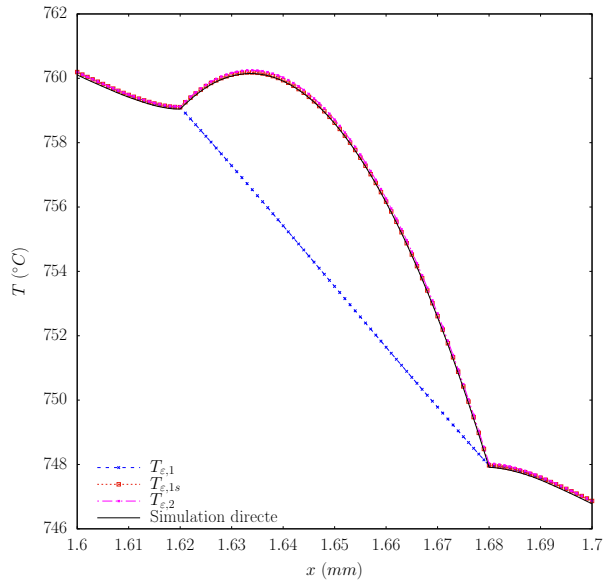
(a) Température macroscopique



(b) Température relocalisée à l'échelle macroscopique



(c) Température microscopique



(d) Différents termes du développement asymptotique

FIGURE 4.3. – Comparaison des différentes méthodes EF² et développement asymptotique aux échelles macroscopique et microscopique pour une source homogène, *contrast* = 500

Il est nécessaire d'analyser la température microscopique sur un VER pour discriminer les différentes méthodes EF² et leur capacité à représenter les fluctuations de température. Sur

la Figure 4.3c, on compare les solutions microscopiques à la solution de référence sur le 17^e VER localisée en $x = 1,65 \text{ mm}$. Sur la Figure 4.3d, les différents termes du développement asymptotique sont tracés. Ici, nous sommes dans le cas où $T_{\varepsilon,1s} \sim T_{\varepsilon,1}$.

Comme attendu par notre analyse menée en Section 4.2.2.1, le problème $(P_P^{s\sim})$ donne une solution similaire à $T_{\varepsilon,1}$ avec une température précise dans la matrice, mais pas d'effet local de la source dans l'inclusion. Théoriquement [ALLAIRE 2010, Remark 1.3.40], le gradient de la solution $T_{\varepsilon,1}$ converge en ε vers le gradient de T_ε . Nous vérifions numériquement cette convergence. On réalise trois autres VER de même type que celui présenté sur la Figure 4.1 en divisant la taille du VER par 2 successivement, tout en conservant la même fraction volumique d'inclusion. En post-traitement des calculs sur la microstructure, on calcule une erreur absolue correspondant à la norme infinie de la différence des gradients : $\left\| \nabla_y T_\varepsilon - \nabla_y T_{\varepsilon,1} \right\|_\infty$. Les erreurs sont tracées sur la Figure 4.4 pour chaque VER de taille ε . On observe bien une convergence en ε du gradient, même si l'erreur est importante (avec une erreur relative au minimum de 25 %). Ainsi, la solution $T_{\varepsilon,1s\sim}$ (ou le problème $(P_P^{s\sim})$) ne permet pas de capter correctement les variations locales de la température dans les inclusions, comme déjà constaté par [BOURGAT 1979].

Le problème (P_D^s) améliore le comportement de la solution au sein de l'inclusion, mais avec un décalage des valeurs de température. Néanmoins, on constate une bonne précision sur la température macroscopique et sur la moyenne du gradient microscopique, ce qui est cohérent avec le Chapitre 3 pour un VER sans inclusions coupées. La précision sur la variable primale locale (déplacement ou température) n'a pas été étudiée au Chapitre 3. Ici, il semble y avoir un décalage constant avec la solution de référence qui revient peut-être à un problème de constante (cf. Section 4.2.2.4).

Le problème (P_P^s) donne une solution similaire à $T_{\varepsilon,1s}$, très proche de $T_{\varepsilon,2}$. On a vu que T_2 prend en compte l'effet du second gradient de T_0 et de la source (cf. 4.25). Or la méthode EF² permet uniquement de prendre en compte les effets de la source. On compare alors $T_{\varepsilon,2}$ par rapport à $T_{\varepsilon,1s}$ et on remarque que la contribution du second gradient de T_0 est négligeable.

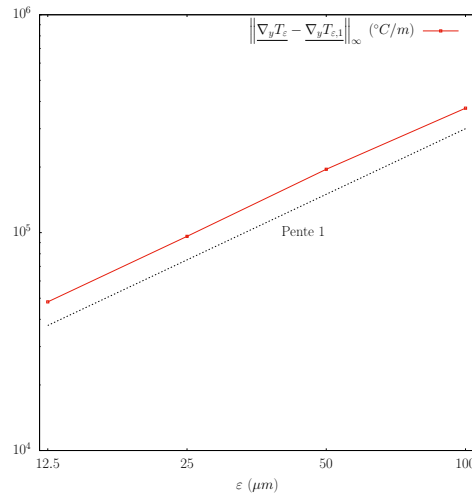
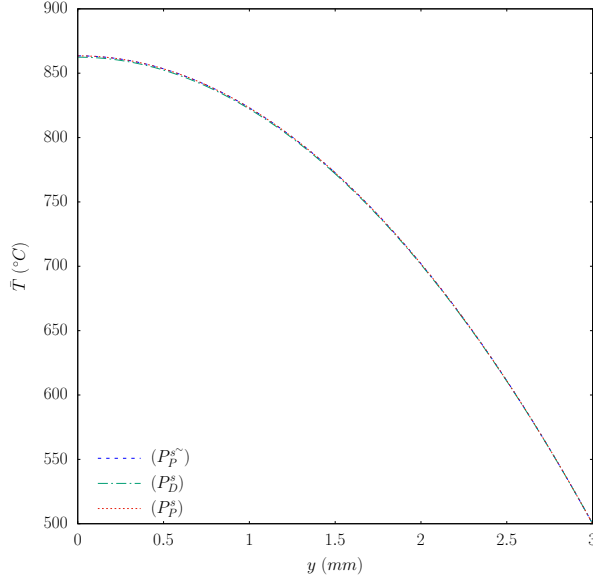


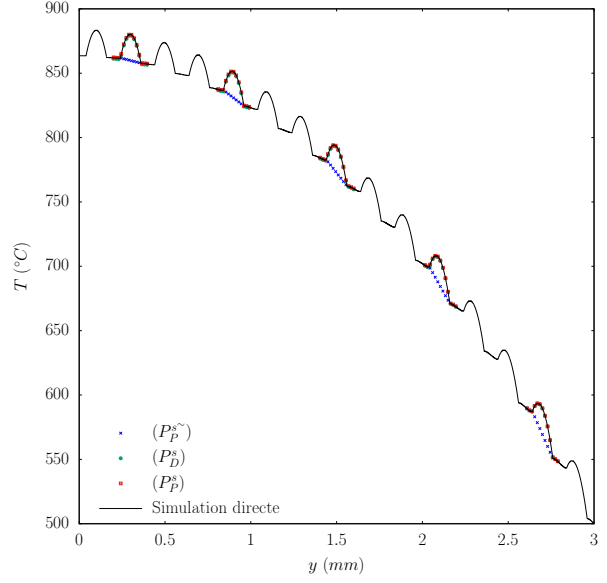
FIGURE 4.4. – Convergence du gradient de $T_{\varepsilon,1}$ en l vers le gradient de T_ε

Pour quantifier l'impact de la séparation d'échelle, on réalise une étude similaire avec un VER deux fois plus grand et deux fois moins de VER sur la structure. Les résultats sont tracés sur la Figure 4.5. On remarque que l'erreur est plus importante avec une sous-estimation d'environ $20 \text{ }^\circ\text{C}$ (soit 3 %) de la température maximale, contre environ $4 \text{ }^\circ\text{C}$ (soit 0,5 %) précédemment, par le problème $(P_P^{s\sim})$. Une plus petite séparation d'échelle impose des inclusions plus grandes proportionnellement à la structure et ainsi une erreur absolue plus importante.

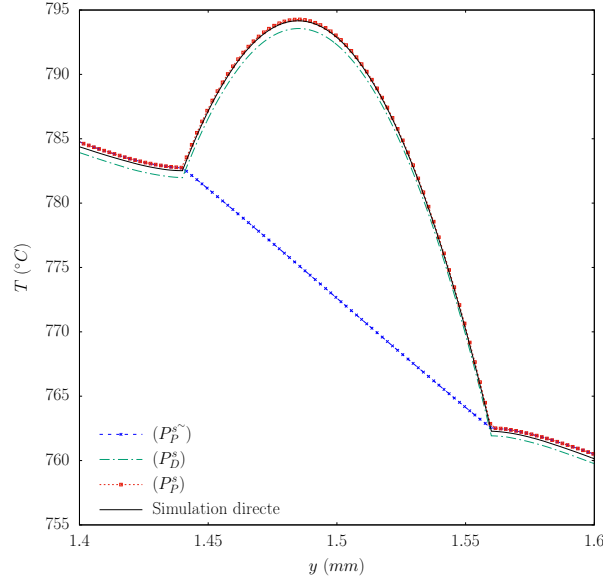
4.3. Résultats numériques



(a) Température macroscopique



(b) Température relocalisée à l'échelle macroscopique



(c) Température microscopique

FIGURE 4.5. – Comparaison des différentes méthodes EF² pour une source homogène, *contraste* = 500, $l = 200\mu m$

4.3.2.2. Comparaison des constantes additives

Comme exposé à la Section 4.2.2.4, nous avons fait le choix dans les résultats précédents d'imposer la moyenne des fluctuations de températures nulle dans la matrice. Dans la littérature, il est plus commun d'imposer cette moyenne nulle sur tout le VER [ALLAIRE et al. 2013]. Sur la Figure 4.6, nous présentons les résultats sur les problèmes munis de BC périodiques ((P_P^s) et (P_D^s)) où une moyenne nulle de la fluctuation sur le VER ($l = 100\mu m$) est imposée. En comparaison avec la Figure 4.3c, on observe uniquement une faible différence sur le problème (P_P^s) . En effet, pour le problème $(P_P^{s\sim})$, similaire à la résolution de $T_{\varepsilon,1}$, la moyenne sur le VER

des fluctuations est nulle (cf. $\hat{T}_1 = 0$). Pour une source homogène, le choix de la constante additive \hat{T}_2 a une influence très limitée, mais il semble quand même que le choix $\langle T^\sim \rangle_{\omega_2} = 0$ soit meilleur que $\langle T^\sim \rangle = 0$.

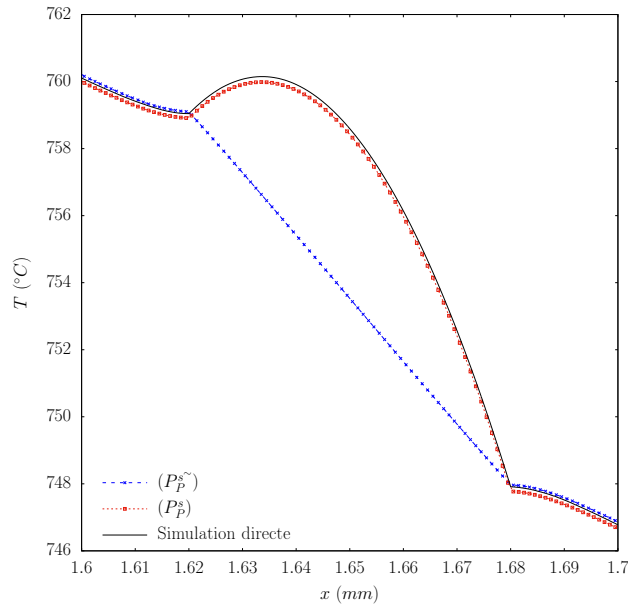
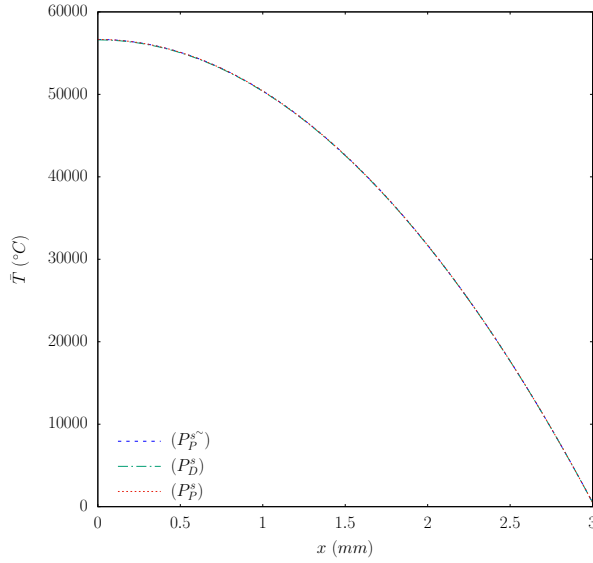


FIGURE 4.6. – Température microscopique en imposant une moyenne nulle sur les fluctuations dans le VER (cas d’une source homogène)

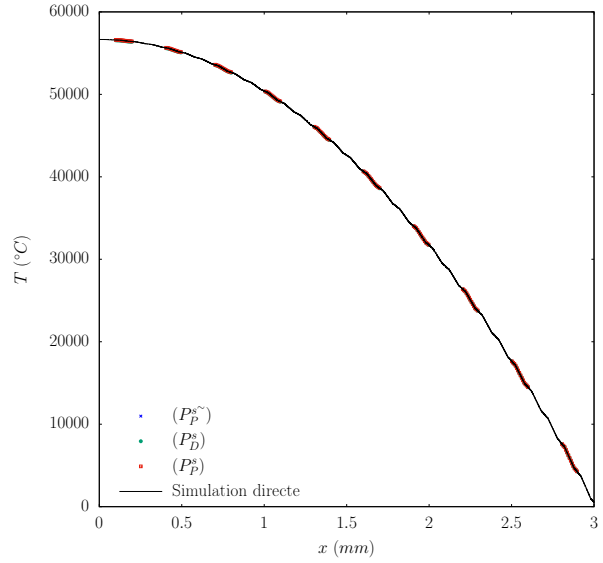
4.3.2.3. Analyse pour des inclusions non ou peu isolantes

Un autre impact à regarder est celui du contraste. Nous réalisons ainsi une comparaison des différentes méthodes pour un contraste de 3, les résultats sont reportés sur la Figure 4.7. Pour cette valeur de contraste, les inclusions sont seulement trois fois plus isolantes que la matrice : on n’a alors plus la présence de bosse de température très marquée dans la phase inclusionnaire. Par conséquent, les trois méthodes donnent des résultats similaires et très proches de la référence.

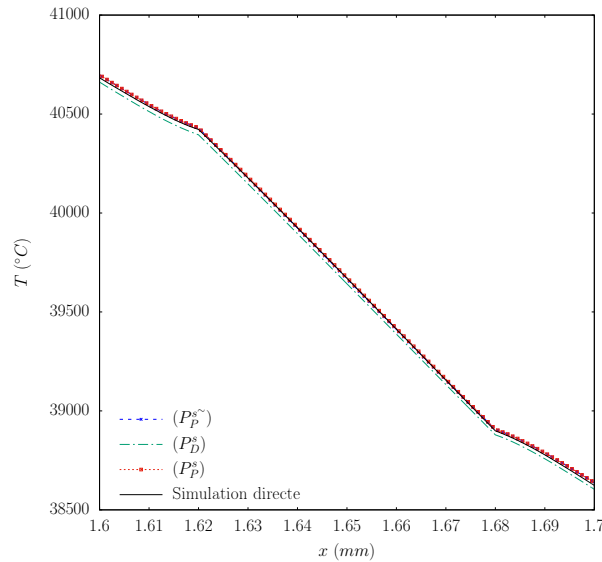
4.3. Résultats numériques



(a) Température macroscopique



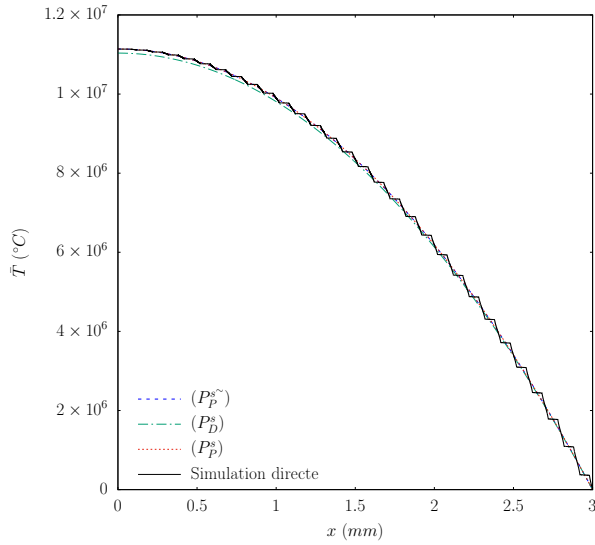
(b) Température relocalisée à l'échelle macroscopique



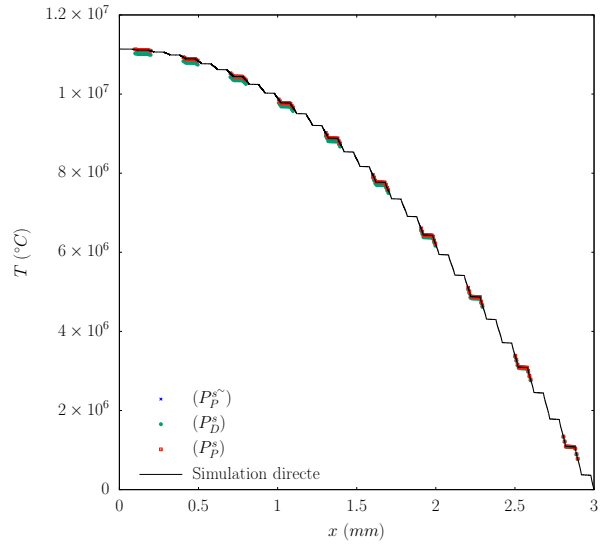
(c) Température microscopique

FIGURE 4.7. – Comparaison des différentes méthodes EF² pour une source homogène, *contraste* = 3

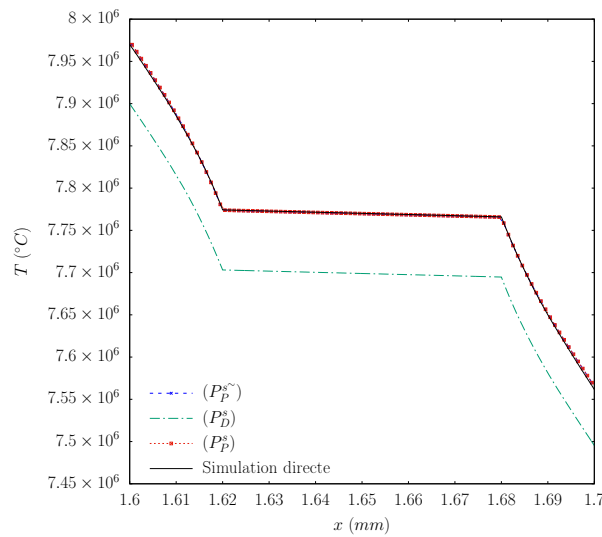
Nous avons également effectué une comparaison des méthodes pour un contraste de 0,01 (cf. Figure 4.8). Pour ce type de contraste, la matrice est isolante par rapport aux inclusions. On obtient les mêmes conclusions que pour un contraste faible avec une imprécision sur la température plus marquée de la solution du problème (P_D^s). L'écart entre cette solution et la référence semble encore être une constante. En imposant par post-traitement une moyenne nulle de la fluctuation de température dans la matrice (cf. Section 4.2.2.4), cet écart pourrait être réduit. C'est une piste à explorer.



(a) Température macroscopique



(b) Température relocalisée à l'échelle macroscopique



(c) Température microscopique

FIGURE 4.8. – Comparaison des différentes méthodes EF² pour une source homogène, *contraste* = 0.01

4.3.2.4. Conclusion sur le cas d'une source homogène

Pour conclure sur cette partie, si on s'intéresse uniquement aux propriétés homogénéisées, considérer une résolution microscopique à l'ordre 1 en température est suffisant, même avec des conditions de Dirichlet (sauf avec une répartition aléatoire des inclusions, cf Chapitre 3). Par contre, si les variations locales de la température au sein de la microstructure sont d'intérêt, il est nécessaire de calculer la solution microscopique en considérant la source complète pour le cas où les inclusions sont isolantes (*contraste* $\gg 1$). En cas de faible contraste (*contraste* $\gtrsim 1$) ou de faible source, considérer uniquement la température à l'ordre 1 peut être suffisant. Néanmoins, il

4.3. Résultats numériques

est difficile à priori de savoir si le contraste ou la source sont suffisamment faibles. On préférera considérer le problème (P_P^s) pour tous les cas où le contraste est supérieur à 1, puisque sa résolution n'ajoute que peu de complexité.

4.3.3. Source hétérogène

On s'intéresse ici à un matériau modèle à comportement thermique linéaire avec une source hétérogène et un contraste de 500 sur la conductivité. Les valeurs de ces propriétés sont données par l'équation suivante :

$$\begin{cases} \lambda_1 = 0,1 \text{ W.m}^{-1}.\text{°C}^{-1} \\ \lambda_2 = \lambda_1 \times \text{contraste} \\ s_1 = 3 \times 10^{10} \text{ W.m}^{-3} \\ s_2 = 0 \text{ W.m}^{-3} \end{cases} \quad (4.114)$$

avec les indices 1 et 2 correspondant respectivement à l'inclusion et à la matrice.

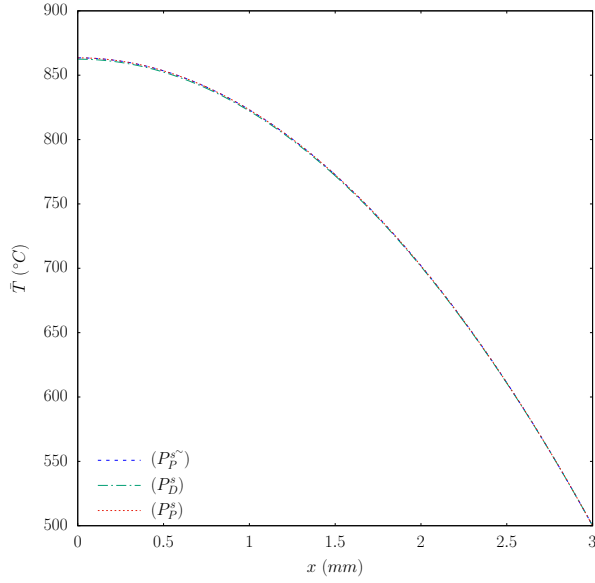
Le nombre d'itération et le temps de calcul du processus EF² sont similaires au cas d'une source homogène (pour le même critère d'arrêt $\varepsilon_R = 10^{-4}$).

4.3.3.1. Analyse sur les inclusions isolantes

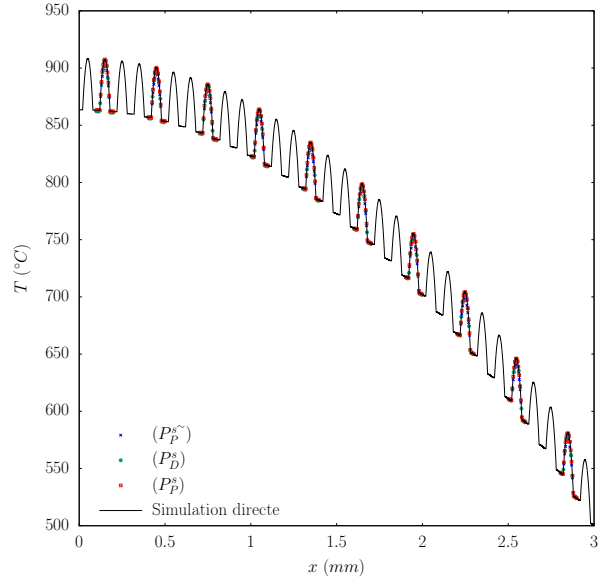
On réalise des simulations EF² via les trois méthodes décrites dans ce chapitre. Des comparaisons sont effectuées avec différents termes du développement asymptotique. Le problème macroscopique de ces différentes méthodes est toujours identique, car $\nabla_x \cdot \bar{\tau} = 0$. Cette fois les fluctuations de la source ne sont plus nulles et ainsi $T_{\varepsilon,1s\sim} \neq T_{\varepsilon,1}$ dans le développement asymptotique. Cela indique que les solutions du problème $(P_P^{s\sim})$ seront différentes de celles issues de l'approche classique des EF² sans terme source sur le VER. Sur la Figure 4.9 on compare les solutions aux différentes échelles et avec les différentes approches.

Sur les Figures 4.9a, 4.9b et 4.9c, on compare les différentes méthodes EF² aux échelles macroscopique et microscopique. Des conclusions similaires sont faites par rapport au cas d'une source homogène, pour l'échelle macroscopique et pour les solutions microscopiques de (P_D^s) et (P_P^s) . L'influence des fluctuations de la source est cette fois visible sur la solution microscopique de $(P_P^{s\sim})$. La solution est mieux qualitativement que dans le cas d'une source homogène, mais la température maximale dans les inclusions est toujours sous-estimée d'environ 5 °C (soit 0,7 % ici) . Sur la Figure 4.9d, les différents ordres du développement asymptotique sont tracés. On obtient bien que pour une source hétérogène $T_{\varepsilon,1s\sim} \neq T_{\varepsilon,1}$. De plus, l'influence du second gradient macroscopique, quantifié par la différence entre $T_{\varepsilon,2}$ et $T_{\varepsilon,1s}$, est toujours négligeable.

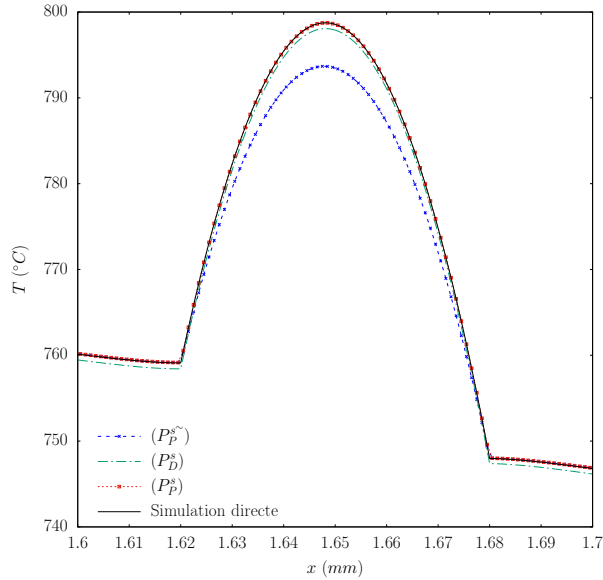
En conclusion, on remarque que le nouveau problème (P_P^s) proposé permet toujours d'obtenir la solution la plus précise vis-à-vis de la solution de référence, pour n'importe quel type de source (homogène ou hétérogène). Par ailleurs, ce problème est compatible avec une approche EF² et n'ajoute pas de complexité supplémentaire (notamment vis-à-vis du problème $(P_P^{s\sim})$). La solution obtenue avec le problème $(P_P^{s\sim})$ a une précision satisfaisante quand le rapport d'échelle est suffisant. Néanmoins, elle a tendance à sous-estimer la température maximale dans les inclusions.



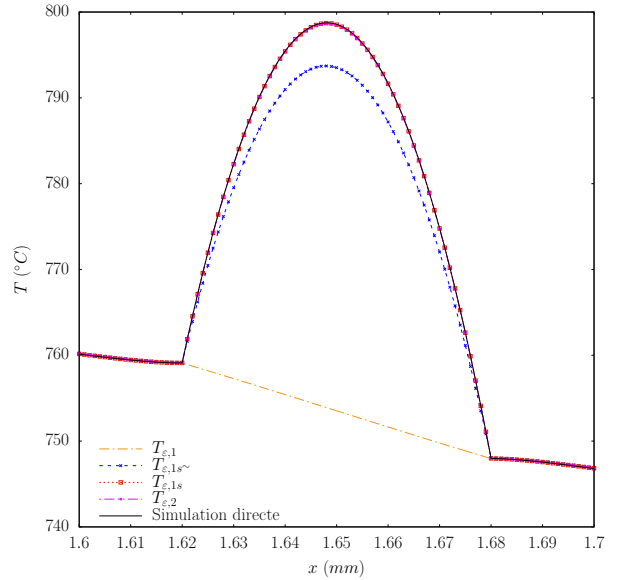
(a) Température macroscopique



(b) Température relocalisée à l'échelle macroscopique



(c) Température microscopique



(d) Différents termes du développement asymptotique

FIGURE 4.9. – Comparaison des différentes méthodes EF² et développement asymptotique aux échelles macroscopique et microscopique pour une source hétérogène, *contrast* = 500

4.3.3.2. Impact de la constante additive

Sur la Figure 4.10, nous présentons les résultats sur les problèmes munis de BC périodiques (($P_P^{s\sim}$) et (P_P^s)) où une moyenne nulle de la fluctuation sur le VER est cette fois imposée ($\langle T^\sim \rangle = 0$) au lieu d'une moyenne nulle uniquement sur la matrice (cf. équation (4.93)). En comparaison avec la Figure 4.9c, on observe une différence plus importante que celle obtenue dans le cas d'une source homogène (cf. Section 4.3.2.2), et ce pour les deux problèmes microscopiques

4.3. Résultats numériques

étudiés. On constate ici que le choix $\langle T^\sim \rangle = 0$ amène à des températures plus décalées de la solutions de référence, alors que le choix $\langle T^\sim \rangle_{\omega_2} = 0$ permet d'obtenir des solutions plus précises.

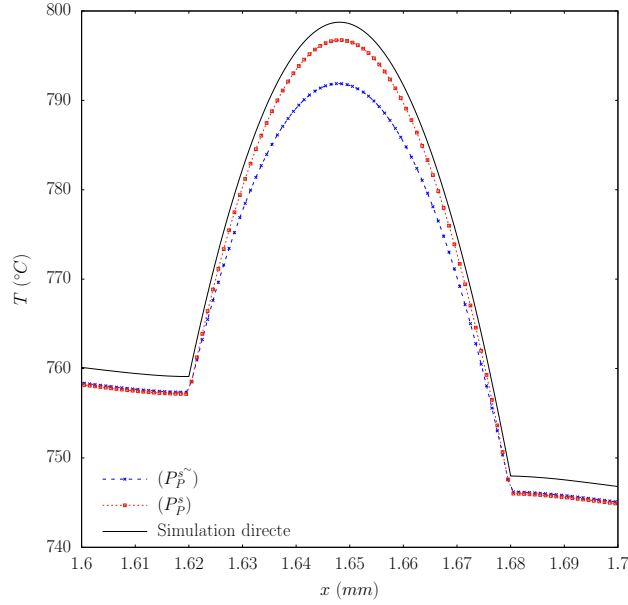


FIGURE 4.10. – Température microscopique en imposant une moyenne nulle sur les fluctuations dans le VER (cas d'une source hétérogène)

Nous pouvons par ailleurs remarquer qu'imposer $\langle T^\sim \rangle_{\omega_2} = 0$ dans le problème microscopique revient, par une approche similaire à celle développée par [SOUZA NETO et al. 2015], à imposer une source s dans les inclusions et $s - \langle s^\sim \rangle_{\omega_2}$ dans la matrice. À noter que ce dernier terme est nul dans le cas d'une source homogène par phase. Nous avons réalisé des expériences numériques qui confirment que dans ce cas une solution similaire à (P_P^s) est obtenue, ce qui confirme la validité de cette constante.

4.3.4. Évolution temporelle et comportement non-linéaire

Dans cette section, nous appliquons les approches EF² au cas d'un problème thermique avec un chargement évolutif en temps. Notamment, la puissance volumique s varie au cours du temps. Les durées mises en jeu lors de l'irradiation d'un crayon en réacteur (plusieurs années) nécessitent une approche de type quasi-stationnaire : un calcul thermique stationnaire est réalisé à chaque pas de temps. Par ailleurs, le matériau suit un comportement non-linéaire. De plus, la simulation du comportement des combustibles nucléaires implique la prise en compte de plusieurs physiques : neutronique, thermique, thermo-hydraulique, physico-chimie, mécanique, etc. Dans les applications de la plateforme PLEIADES [B. MICHEL et al. 2021], un couplage multiphysique de point fixe est réalisé entre les différents composants physiques. Ce type d'approche permet d'utiliser des solveurs dédiés et efficaces pour chacune des physiques. Ainsi, l'approche EF² peut s'implémenter directement dans le composant thermique. Le schéma de couplage présente alors une double boucle de type point fixe imbriquée (cf. Figure 4.11).

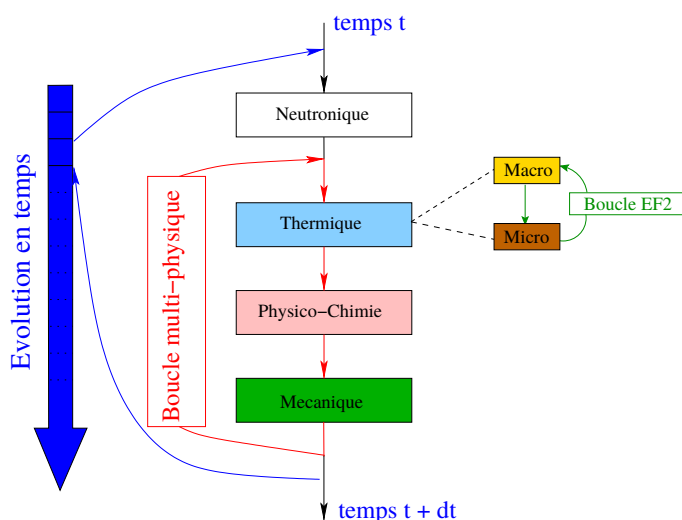


FIGURE 4.11. – Couplage multiphysique et multiéchelle

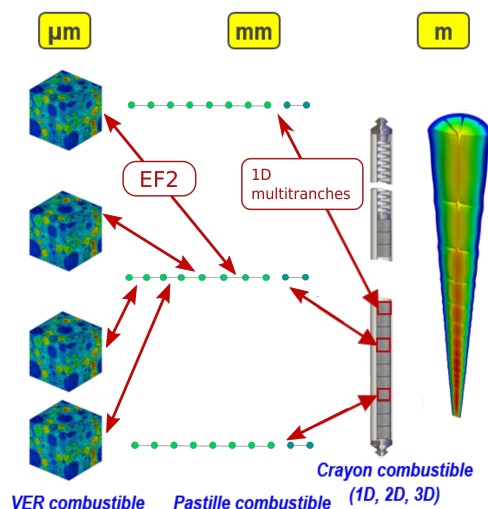


FIGURE 4.12. – Représentation multi-tranche et multiéchelle du crayon combustible

Dans le cas du schéma de couplage 1D multitranche, le couplage multiéchelle EF^2 proposé ici est aussi un couplage multidimensionnel puisque le maillage macroscopique de la structure est 1D (cf. Figure 4.12), alors que le maillage du VER est 3D. Ainsi, trois échelles sont considérées : l'échelle du crayon combustible avec les multiples tranches, l'échelle de la pastille combustible par le maillage macroscopique 1D et l'échelle des amas dans le VER (cf. Figure 4.12). Ce schéma bénéficie d'un double niveau de parallélisation proposé par l'architecture PLEIADES : la parallélisation multitranche et la parallélisation des calculs VER.

Dans cet section, nous réalisons une simulation sur une seule tranche du combustible avec un maillage de la pastille de 13 éléments finis linéaires et le VER avec une seule inclusion centrée de la Figure 4.1 est utilisé à chaque point de Gauss. On a donc 26 calculs VER. Nous utilisons la conductivité thermique du dioxyde d'uranium dans la matrice et nous la multiplions par 0,01 dans l'inclusion (ce qui correspond à $contrast = 100$ dans la section précédente). Un rapport de l'IAEA² [IAEA 2008] donne la conductivité thermique du dioxyde d'uranium en fonction de la température par l'équation non-linéaire (4.115). On pose $\tau = \frac{T}{1000}$ où T est exprimée en K et la conductivité est donnée en $W.m^{-1}.K^{-1}$. La Figure 4.13 présente les valeurs de cette conductivité en fonction de la température.

$$\lambda_{UO_2}(\tau) = \frac{100}{7,5408 + 17,692\tau + 3,6142\tau^2} + \frac{6400}{\tau^{5/2}} \exp\left(\frac{-16,35}{\tau}\right) \quad (4.115)$$

La puissance volumique (correspondant à la source s dans l'équation (4.1)) varie au cours de l'irradiation et son évolution est représentée sur la Figure 4.14 pour une irradiation en réacteur de 3 cycles ($\sim 2,5$ ans). Toute cette puissance est imposée à l'inclusion du VER. Ainsi, un terme source hétérogène similaire à la Section 4.3.3 est considéré.

4.3. Résultats numériques

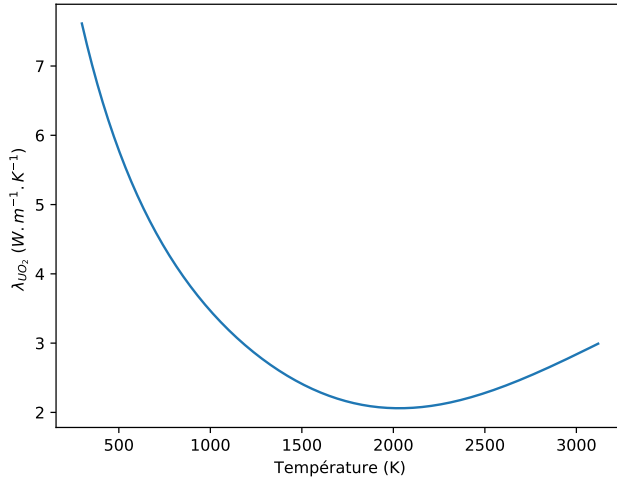


FIGURE 4.13. – Conductivité thermique du dioxyde d’uranium en fonction de la température

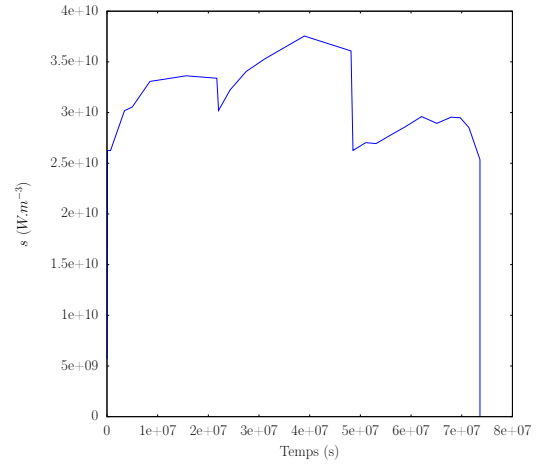


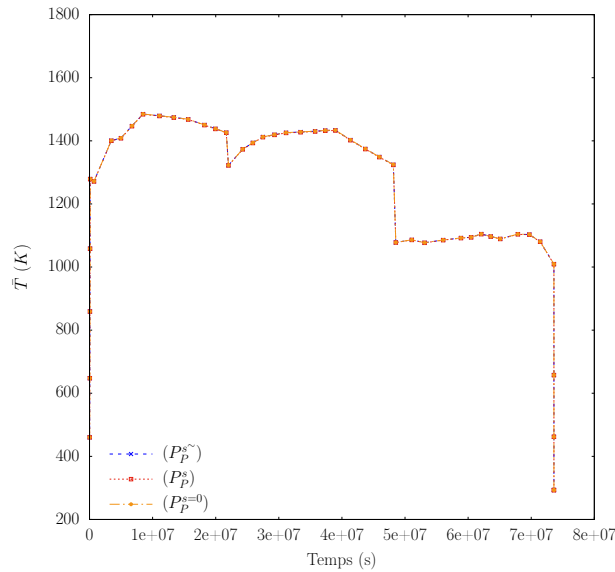
FIGURE 4.14. – Puissance volumique au cours de l’irradiation dans les inclusions

Les approches EF² utilisant les problèmes microscopiques ($P_P^{s\sim}$) et (P_P^s) sont confrontées. On se compare également à l’approche classique EF² [CHATZIGEORGIOU et al. 2016 ; TIKARROUCHINE et al. 2021], n’appliquant pas de source sur la microstructure, que l’on note ($P_P^{s=0}$). Pour ce type de résolution, le solveur EF² fait 6 ou 7 itérations entre le solveur macroscopique et le solveur microscopique pour une erreur relative en température de $\varepsilon_R = 10^{-4}$ (pour une convergence du calcul microscopique non-linéaire en maximum 6 itérations). Pour une parallélisation sur 27 processeurs (nombre de VER + 1 processus maître), la résolution du problème multiéchelle quasi-stationnaire se fait ici en moyenne en 6 heures (pour environ 13 000 nœuds dans le VER) sur le même serveur qu’en Section 4.3.2. Il faut noter que ce temps inclut la résolution du couplage multiphysique de point fixe sur le niveau macroscopique (présenté en Figure 4.11) et donc plusieurs appels du solveur EF² thermique par pas de temps (en moyenne 4 itérations multiphysiques). Ici le calcul s’effectue sur 47 pas de temps (avec un découpage automatique du pas de temps géré par Mirabel), soit en moyenne 8 minutes par pas de temps.

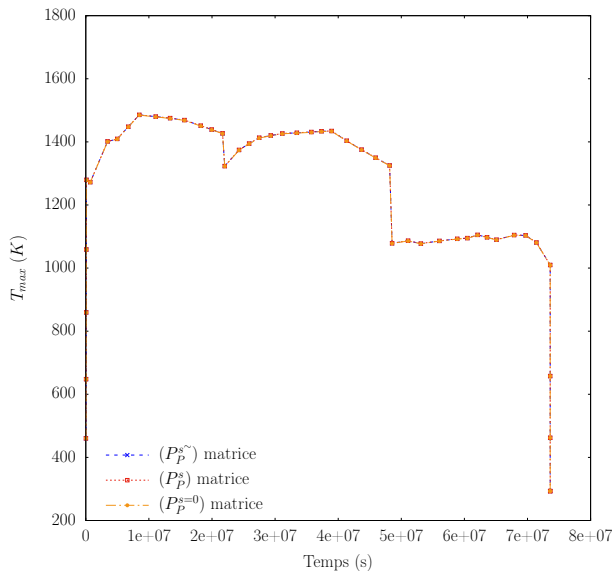
Les résultats sur le premier VER du maillage macroscopique (au centre de la pastille) sont analysées. Les évolutions de la température maximale dans l’inclusion et dans la matrice, ainsi que la température homogénéisée au cours de l’irradiation sont présentées sur la Figure 4.15. L’évolution de la température est en accord avec celle de la puissance volumique. En cohérence avec les simulations précédentes, les différentes méthodes donnent les mêmes températures homogénéisées (cf. Figure 4.15a), mais également localement dans la phase matricielle (cf. Figure 4.15b). On remarque également que la température homogénéisée est très proche de celle dans la matrice. Les approches EF² se distinguent uniquement par les températures dans la phase inclusionnaire (cf. Figure 4.15c). On peut noter une différence modérée entre les méthodes ($P_P^{s\sim}$) et (P_P^s) (maximum 40 K, soit 2,5 %). Une différence plus importante apparaît entre les méthodes ($P_P^{s=0}$) et (P_P^s) (maximum 240 K, soit 14 %). De plus, les différences relatives observées sont quasiment constantes au cours de la simulation, ce qui est en parfaite cohérence avec une résolution stationnaire à chaque pas de temps. Au pas de temps correspondant à $3,1 \times 10^7 s$ (environ 1 an), on réalise des vues en coupe du VER pour les différentes approches EF² où la température, dont l’échelle est bornée par les températures minimales et maximales obtenues par l’approche (P_P^s), est affichée sur la Figure 4.16. On observe alors une température relativement homogène pour le problème ($P_P^{s=0}$) et une différence sur la température maximale

au centre de l'inclusion pour les méthodes $(P_P^{s\sim})$ et (P_P^s) .

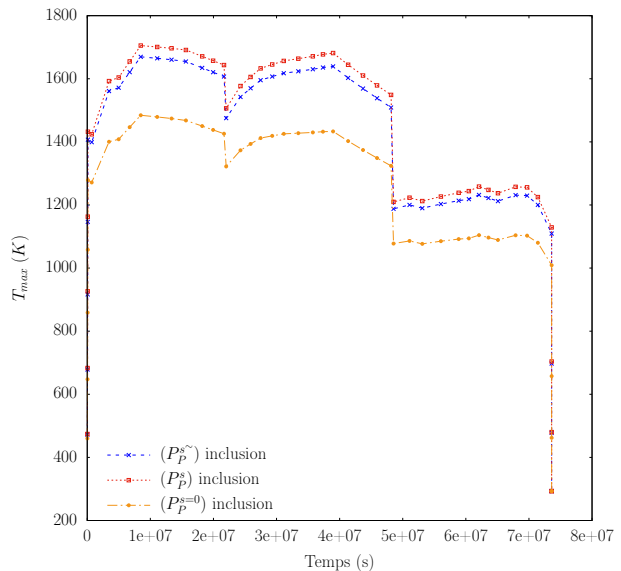
Cette section a permis de montrer qu'il est possible de considérer un comportement non-linéaire et une évolution temporelle dans les approches EF² étudiées. Les résultats sur les différentes approches EF² sont en cohérence avec les sections précédentes. En particulier, il est nécessaire de considérer les stratégies basées sur le principe de Hill-Mandel généralisé ($(P_P^{s\sim})$ et (P_P^s)) pour obtenir une température locale précise. Par ailleurs, en cas de séparation d'échelle moins importante (plus grosses inclusions), l'approche (P_P^s) proposée dans cette thèse sera nécessaire pour ne pas trop sous-estimer la température maximale dans les inclusions. De même, dans le cas de problème transitoire (situation accidentelle), cette approche semble également plus pertinente pour éviter l'accumulation d'erreur.



(a) Température homogénéisée



(b) Température maximale dans la matrice



(c) Température maximale dans les inclusions

FIGURE 4.15. – Comparaison des températures maximales par phase et de la température homogénéisée au cours de l'irradiation pour les différentes méthodes EF²

4.4. Conclusion

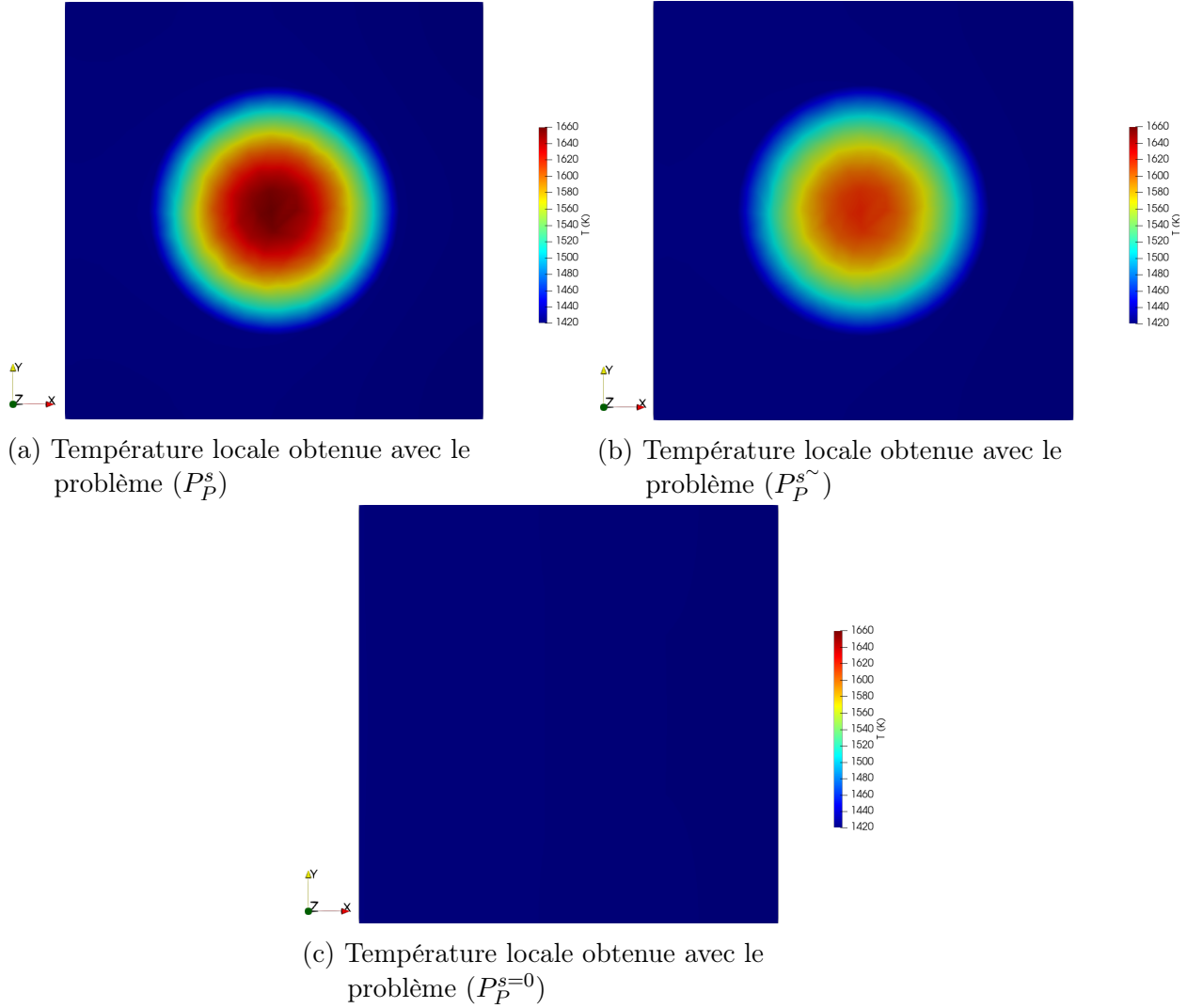


FIGURE 4.16. – Comparaison des températures locales obtenues sur le VER central pour les différentes méthodes EF^2 , au temps $3,1 \times 10^7 s$ soit environ 1 an

4.4. Conclusion

Différentes méthodes EF^2 dédiées à la prise en compte d'une source de chaleur dans un problème de thermique stationnaire ont été étudiées dans ce chapitre. Après une description théorique de ces méthodes, les différentes solutions numériques sont comparées aux différentes échelles. Un parallèle avec les approches basées sur un développement asymptotique est effectué tout au long de cette démarche.

La méthode EF^2 classique respecte le principe de Hill-Mandel et n'impose pas de source sur la microstructure. Ainsi, la méthode est à l'ordre 1 et ne prend pas en compte les variations de température locales dues à la source sur la microstructure. Dans le cas où les inclusions sont peu ou pas isolantes par rapport à la matrice, ces approches s'avèrent suffisantes. Par contre, dans le cas d'inclusions isolantes, il est essentiel de considérer l'influence locale de la source sur la microstructure.

Récemment introduit, le principe de Hill-Mandel généralisé permet de considérer la source

sur la microstructure. Nous avons montré que cela conduit à des méthodes d'ordre supérieur à 1, mais sans pouvoir démontrer théoriquement l'ordre 2. En effet, le correcteur d'ordre 2 permet de prendre en compte l'effet de la source, mais également celui du second gradient de la température macroscopique. Trois stratégies, ne pouvant être différenciées à l'échelle macroscopique, se présentent alors :

- Rechercher des solutions périodiques et imposer la moyenne des fluctuations de température nulle, ce qui revient à considérer uniquement les fluctuations de la source à l'échelle microscopique. Cette formulation est la plus proche de l'esprit du développement asymptotique. Elle respecte entre autres directement l'alternative de Fredholm. Elle aboutit à une sous-estimation de la température maximale dans les inclusions, mais à des résultats précis si une bonne séparation d'échelle est considérée.
- Prendre en compte la source complète et donc imposer des conditions aux limites de Dirichlet. Cette formulation conduit à une amélioration du comportement de la solution, mais avec les inconvénients associés à ce type de BC et de nouveaux découverts lors de cette étude, notamment un décalage constant de la température. Ce décalage n'est donc pas visible sur les flux et les calculs usuellement faits en mécanique qui s'intéressent à la contrainte.
- Nous proposons alors de considérer la source complète avec des BC périodiques en bloquant un coin du VER. Cette approche conduit alors à des résultats très précis, proches de la solution obtenue avec le correcteur de second ordre et de celle obtenue par simulation directe. Ainsi, nous montrons numériquement que l'effet du second gradient de la température macroscopique est négligeable devant l'effet de la source.

Cette étude nous permet de conclure qu'il est essentiel de considérer la source de chaleur complète sur la microstructure avec des conditions périodiques pour avoir une estimation fiable des variations de température à cette échelle. Pour certains cas (source ou contraste faible, très grande séparation d'échelle), ces variations peuvent être faibles, mais il est difficile de distinguer ces cas *a priori*. Étant donné que le choix de considérer la source complète sur la microstructure ne complexifie pas la simulation EF², il est alors conseillé de le faire systématiquement.

L'approche EF² a été mise en place avec succès sur le cas d'un milieu périodique avec un comportement non-linéaire et permet alors d'envisager des cas d'application plus complexes et réalistes, notamment le cas des milieux aléatoires avec un comportement non-linéaire. L'approche proposée sera d'autant plus discriminante pour des problèmes transitoires, où il est nécessaire d'être précis à chaque pas de temps, afin d'éviter un risque d'accumulation d'erreur.

Conclusion et perspectives

Cette thèse dédiée à la précision des solutions microscopiques dans le cadre d'une modélisation thermo-mécanique multiéchelle de matériaux de type matrice-inclusion avec des inclusions sphériques monodispersées diluées, nous a amené à considérer plusieurs aspects autour d'approches Éléments Finis multiniveaux de type EF² (Éléments Finis au carré).

Le premier axe concerne l'effet induit par la proximité des inclusions sur le comportement de la microstructure. Nous avons analysé les propriétés effectives, les moments par phase et les champs locaux. Il en résulte que les propriétés effectives et les moments par phase de la contrainte convergent asymptotiquement vers les estimations de Mori-Tanaka lorsque la distance minimale entre les inclusions augmente. L'asymptote semble être atteinte autour d'une distance égale au rayon de la sphère. Les comportements effectifs et par phase montrent un écart qui peut atteindre (pour les seconds moments) 50 % lorsque les inclusions sont proches et rigides. L'impact de la proximité des inclusions est encore plus important sur les champs de contrainte locaux. Les valeurs maximales de contrainte (hydrostatique ou équivalente) peuvent être plus de deux fois plus élevées localement. Ce travail montre l'importance de considérer la proximité des inclusions pour modéliser l'initiation de phénomènes locaux dans la microstructure. Une approche par champs moyens est alors incomplète.

Le deuxième axe de travail concerne l'amélioration des solutions Éléments Finis avec des Conditions aux Limites (BC, acronyme anglais de Boundary Conditions) de type Dirichlet sur le bord du Volume Élémentaire Représentatif (VER). Les expériences numériques menées révèlent clairement que l'imprécision des conditions limites de déformation uniforme (USBC, acronyme anglais de Uniform Strain Boundary Conditions) est principalement due aux effets de bord situés autour des inclusions artificiellement coupées en raison de la forme cubique classique du VER. Cependant ce type de condition est intéressant, car il offre un temps de calcul largement plus faible par rapport aux conditions limites périodiques (PBC, acronyme anglais de Periodic Boundary Conditions) conduisant à la solution numérique de référence (car très précises à taille de VER raisonnable). Différentes méthodes ont alors été prospectées pour améliorer la précision des solutions associées aux BC de Dirichlet sans augmenter significativement leur temps de calcul. On distingue les méthodes par post-traitement consistant à filtrer ou tronquer la contrainte à la sortie du solveur, aux méthodes par prétraitement modifiant le modèle du VER avant le calcul. On considère ainsi des VER sans inclusions coupées aux limites en modifiant la loi de tirage des inclusions (limitant la fraction volumique maximale atteignable) ou des VER avec un maillage modifié pour avoir des surfaces périodiques adaptées (qui ne coupent pas les inclusions). Des BC innovantes de type Dirichlet, appelées conditions aux limites de déformation homogène (HSBC, acronyme anglais de Homogeneous Strain Boundary Conditions), basées sur un mouvement de corps rigide des inclusions rigides aux bords du VER sont également introduites. Pour des inclusions suffisamment rigides, ces dernières montrent une efficacité prometteuse, en particulier pour les propriétés apparentes et la détermination des premiers moments par phase. Les stratégies consistant à éliminer les inclusions coupées donnent les meilleurs résultats, même sur les champs locaux, en particulier la méthode de modification de la loi de tirage. La précision de ces stratégies peut rester légèrement entravée par des inclusions proches des frontières du VER.

Le troisième axe de travail porte sur la résolution multiéchelle d'un problème de thermique stationnaire avec un terme source. Le but est de déterminer une méthode de référence permettant

d'obtenir une bonne précision sur la température homogénéisée et sur les variations locales dues à la source. Dans le cas où les inclusions sont peu ou pas isolantes par rapport à la matrice, l'approche classique des EF^2 qui respecte le principe de Hill-Mandel et ne considère pas de source sur la microstructure, s'avère suffisante. Par contre, dans le cas d'inclusions isolantes, il est essentiel de considérer l'influence locale de la source sur la microstructure pour obtenir une bonne précision de la température locale. Pour ce faire, il est nécessaire de considérer les approches basées sur le principe de Hill-Mandel généralisé. Nous proposons alors de considérer la source dans sa globalité sur la microstructure avec des conditions limites périodiques en bloquant un coin du VER. Cette approche conduit alors à des résultats très précis, proche de la solution obtenue par simulation directe.

Plusieurs travaux pourraient être menés en continuité directe de cette thèse. Nous avons développé l'approche EF^2 thermique avec terme source hétérogène uniquement pour des problèmes stationnaires. Les phénomènes rapides comme les situations accidentelles sur le combustible nucléaire, nécessitent alors une approche transitoire. Dans la littérature, des formulations basées sur le principe de Hill-Mandel généralisé pour des problèmes transitoires existent et pourraient être combinées avec notre approche considérant la source complète sur la microstructure afin d'éviter une accumulation d'erreur sur la température locale.

Toujours dans le cadre de la simulation EF^2 faite en thermique, nous n'avons pas fait de calcul sur un milieu aléatoire. Il serait intéressant d'étudier ce type de composite, plus proche du matériau réel, en caractérisant la distance minimale entre inclusion à considérer dans le VER via des images microsondes. On pourrait alors faire un calcul avec des conditions limites périodiques sur un VER périodisé et se comparer à un second calcul avec des conditions limites de Dirichlet utilisant les méthodes développées dans ce manuscrit sur un VER non périodisé. Il faudrait alors analyser si les conditions limites de Dirichlet sur le champ primal (température) peuvent être aussi améliorées. En effet, nous avons remarqué une translation de la température obtenue vis-à-vis de la température de référence. Le travail sur la constante additive du correcteur d'ordre 2 pourrait être également appliqué aux BC de Dirichlet.

Concernant les méthodes améliorant la précision des solutions de type Dirichlet sur le VER, la méthode HSBC est prometteuse, mais souffre d'un manque de précision à l'échelle locale. Cette lacune semble être due à une discontinuité de la condition aux limites à l'interface entre la matrice et les inclusions. Une étude portant sur le lissage ou la diminution de cette discontinuité pourrait améliorer cette approche.

Concernant les perspectives à moyen terme de cette thèse, il serait intéressant de développer un couplage multiniveau thermo-mécanique. Actuellement, l'approche EF^2 est implémentée séparément en thermique et en mécanique et le couplage se fait uniquement sur les champs homogénéisés (macroscopiques). Un couplage multiphysique à l'échelle microscopique donnerait alors des solutions multiéchelles plus représentatives.

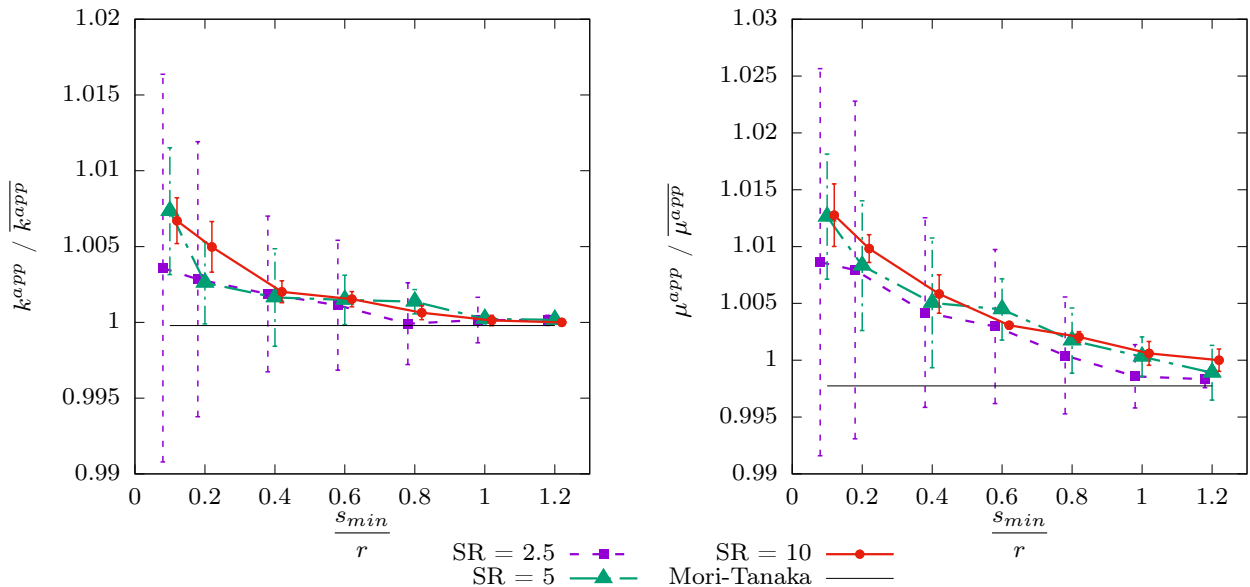
Dans un cadre de rupture du matériau, même sans développer un modèle de fissuration à l'échelle du VER, on pourrait avoir une indication empirique des sites d'initiation et des tailles de fragments à l'aide d'un critère d'endommagement appliqué sur cette approche multiéchelle de référence. L'étape suivante serait de mettre en place un modèle de fissuration à l'échelle microscopique. L'enjeu serait alors de simuler numériquement le phénomène de propagation de la fissure, depuis son initialisation à l'échelle microscopique, jusqu'à l'obtention de fragments macroscopiques.

La tendance actuelle sur les méthodes d'homogénéisation numériques porte sur le développement de modèles de substitution de la modélisation microscopique. L'intelligence artificielle est de plus en plus utilisée pour remplacer la résolution Éléments Finis à cette échelle. Cette démarche

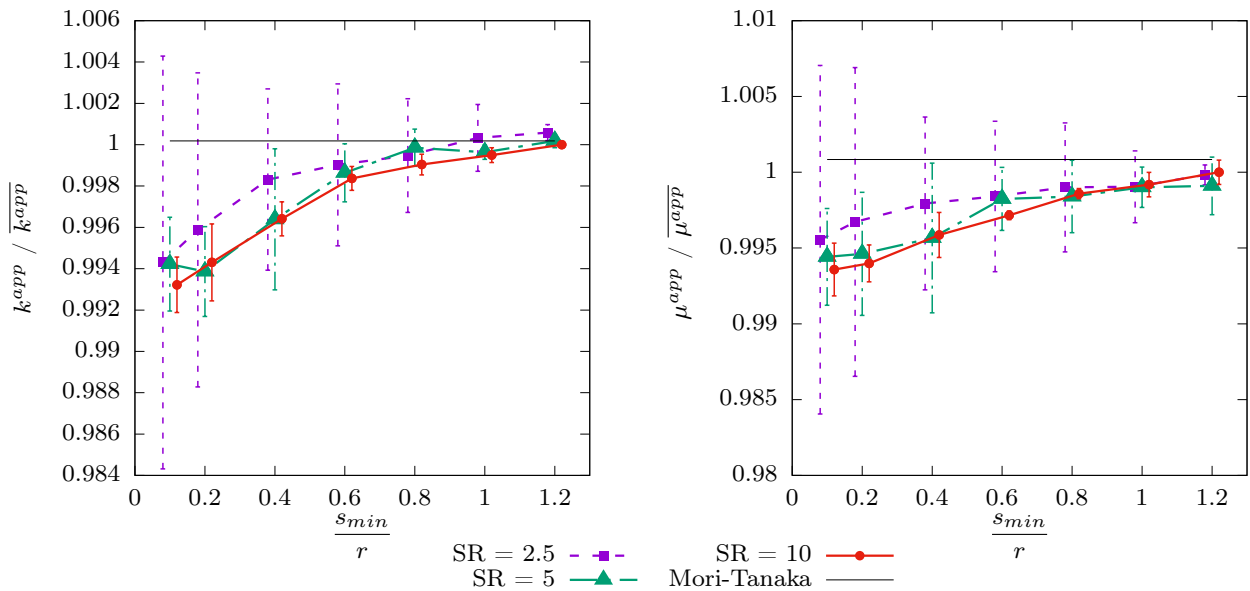
rend possible une utilisation industrielle de l'approche EF² avec des ressources informatiques contenues. Une analyse approfondie de ces méthodes portant sur leur capacité à modéliser les champs locaux et non uniquement les propriétés effectives, serait pertinente. Par ailleurs, il nous semble impératif de pouvoir facilement changer la microstructure ou son comportement pour des études statistiques ou de conception. Le temps d'apprentissage de ces méthodes de substitution devra alors lui-même être acceptable.

Annexes du Chapitre 2

A. Résultats complémentaires pour les propriétés effectives



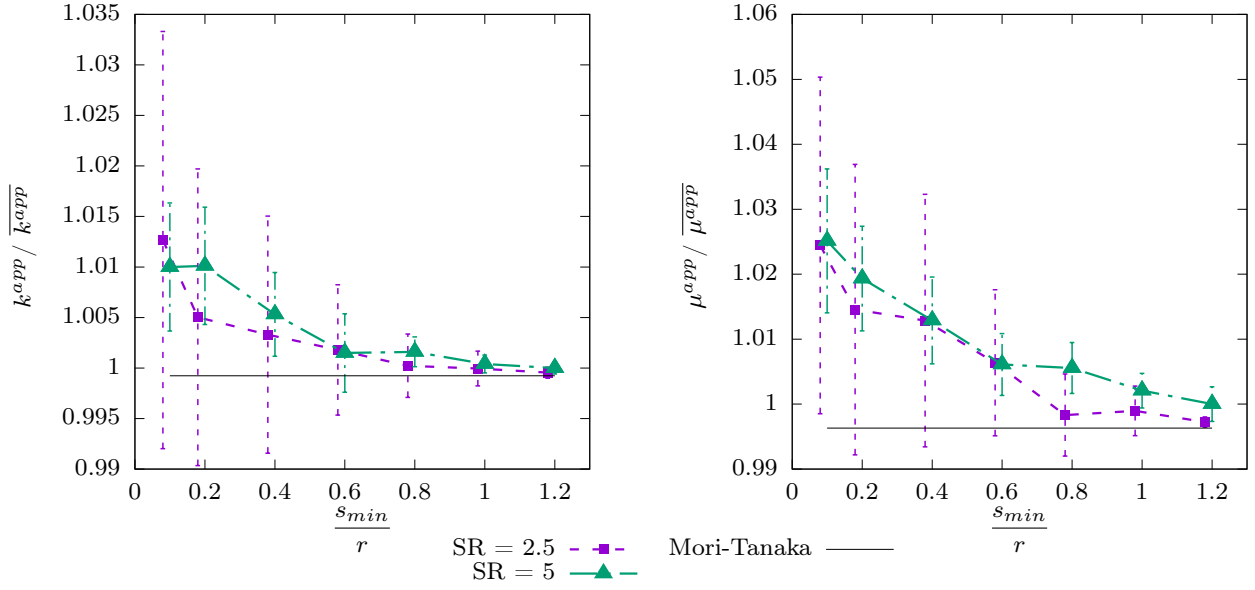
(a) $contraste = 10$, $\overline{k^{app}} = 20,1$ MPa, $\overline{\mu^{app}} = 9,68$ MPa



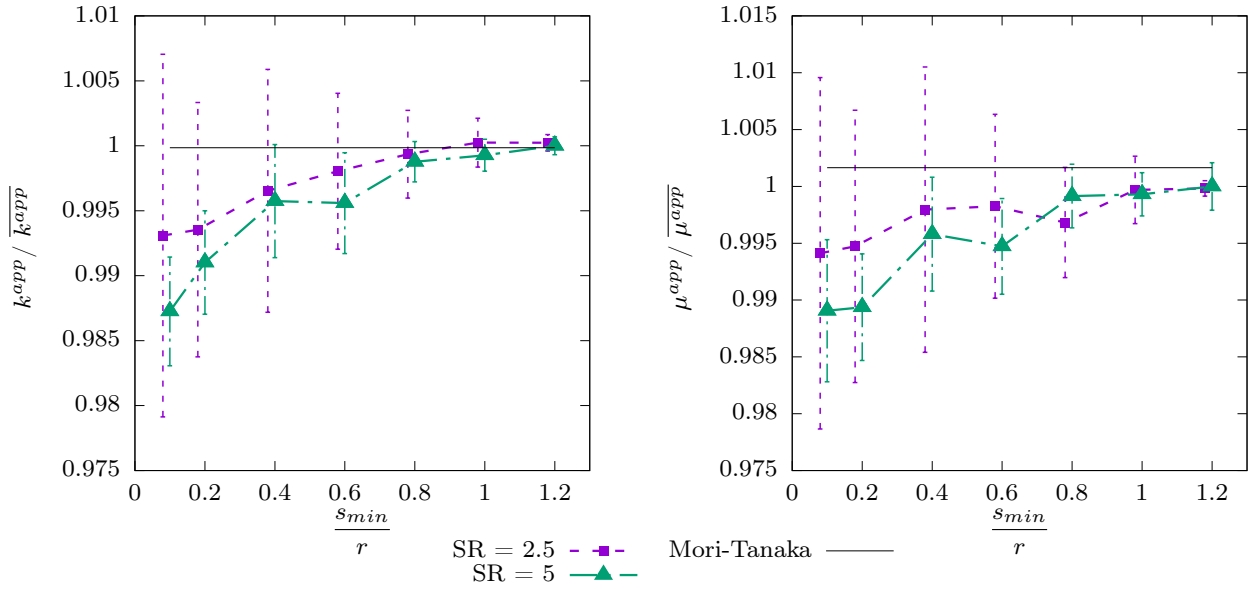
(b) $contraste = 0,1$, $\overline{k^{app}} = 12,8$ MPa, $\overline{\mu^{app}} = 6,21$ MPa

FIGURE A.1. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne des modules apparents en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

A. Résultats complémentaires pour les propriétés effectives



(a) $contraste = 100$, $\overline{k^{app}} = 20,8$ MPa, $\overline{\mu^{app}} = 10,2$ MPa

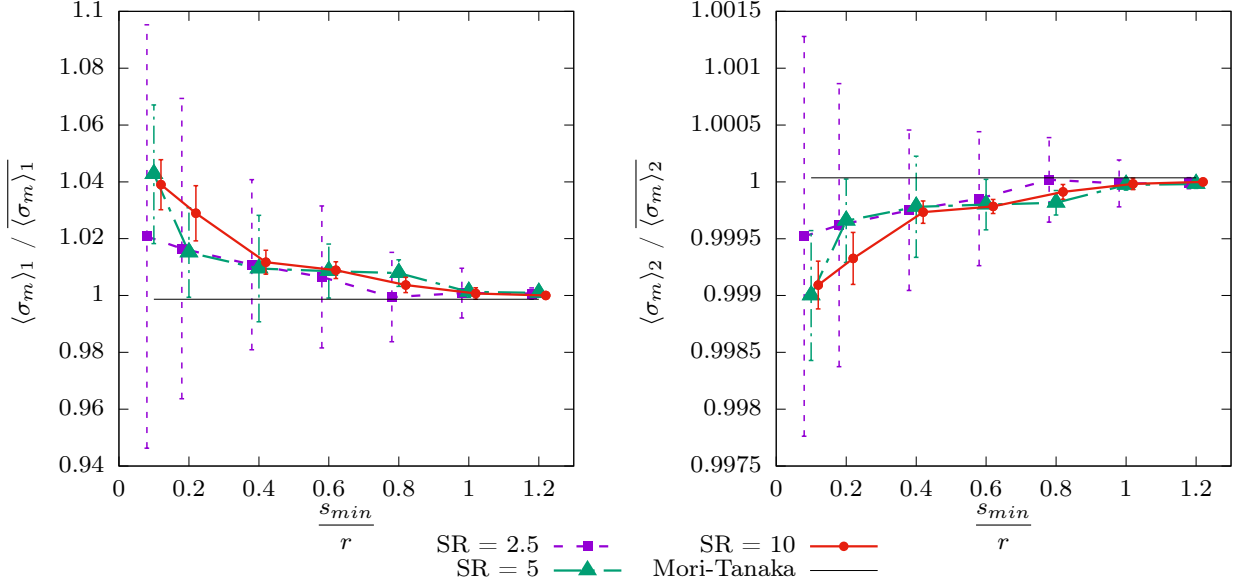


(b) $contraste = 0,01$, $\overline{k^{app}} = 12,0$ MPa, $\overline{\mu^{app}} = 5,96$ MPa

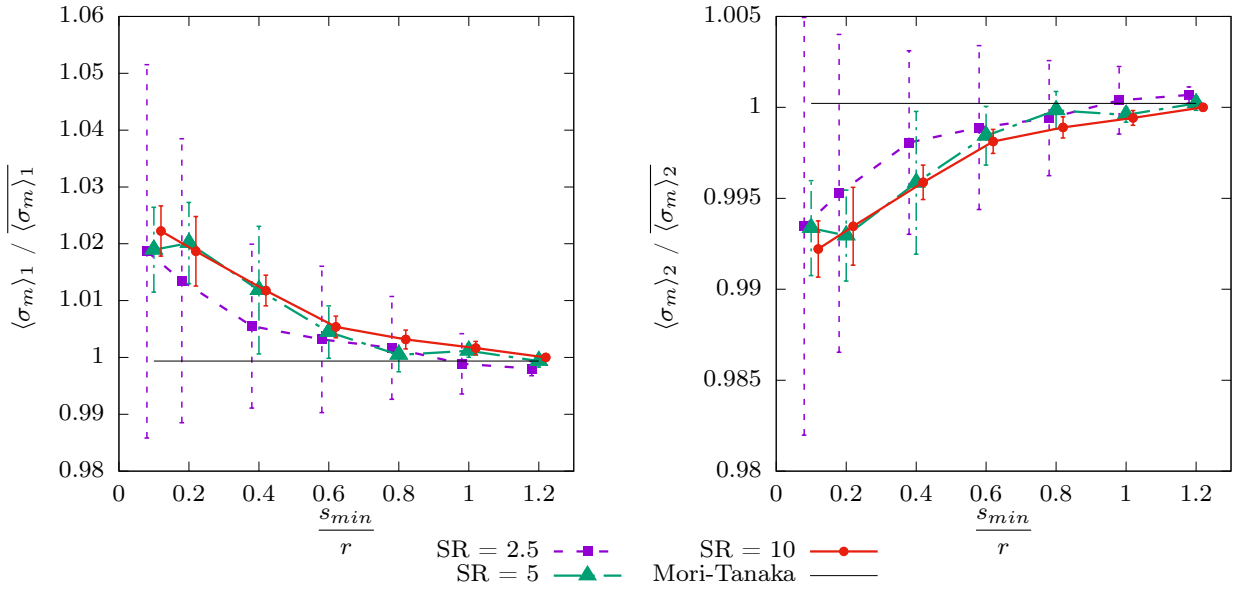
FIGURE A.2. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne des modules apparents en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 5 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4$ %. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

B. Résultats complémentaires pour les champs moyens

B.1. Premier moment



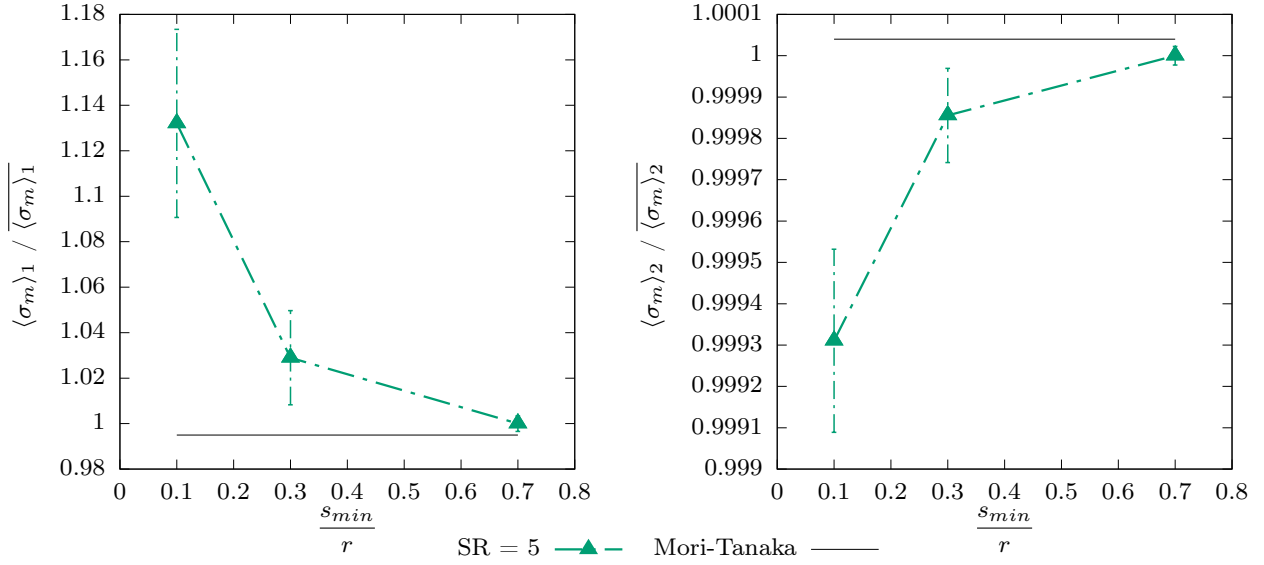
(a) *contraste* = 10, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_1} = 28,7$ MPa, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_2} = 18,8$ MPa



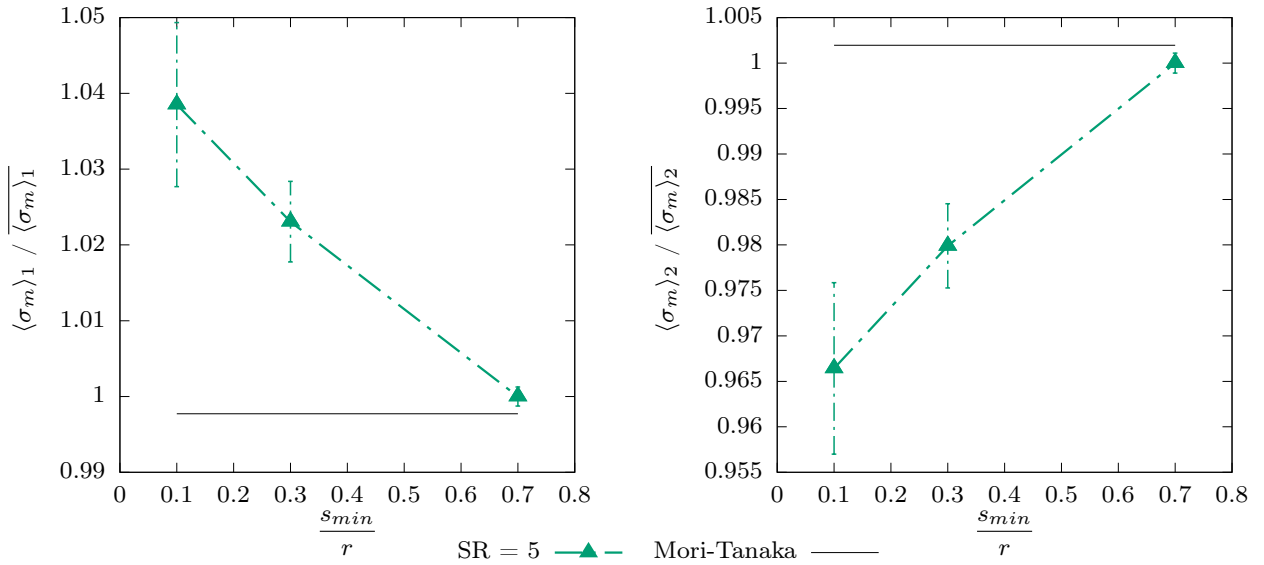
(b) *contraste* = 0,1, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_1} = 3,22$ MPa, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_2} = 14,3$ MPa

FIGURE B.1. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

B. Résultats complémentaires pour les champs moyens



(a) *contraste* = 100, $\langle \sigma_m \rangle_1 = 35,7$ MPa, $\langle \sigma_m \rangle_2 = 22,1$ MPa



(b) *contraste* = 0,01, $\langle \sigma_m \rangle_1 = 3,09$ MPa, $\langle \sigma_m \rangle_2 = 11,9$ MPa

FIGURE B.2. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 25,1$ %.

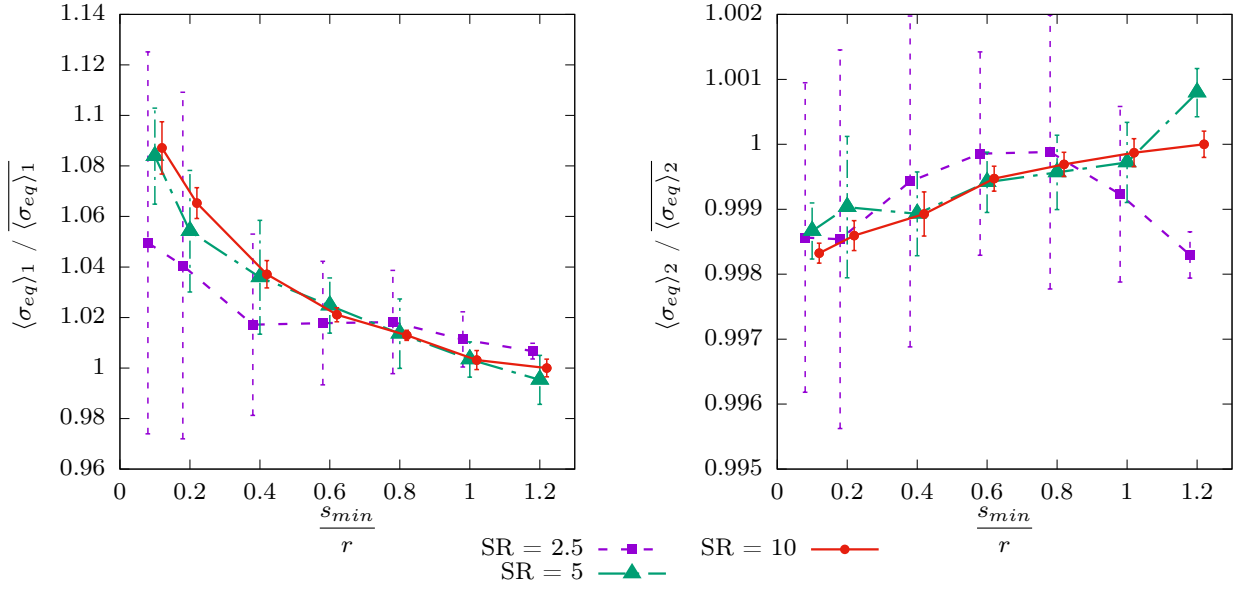
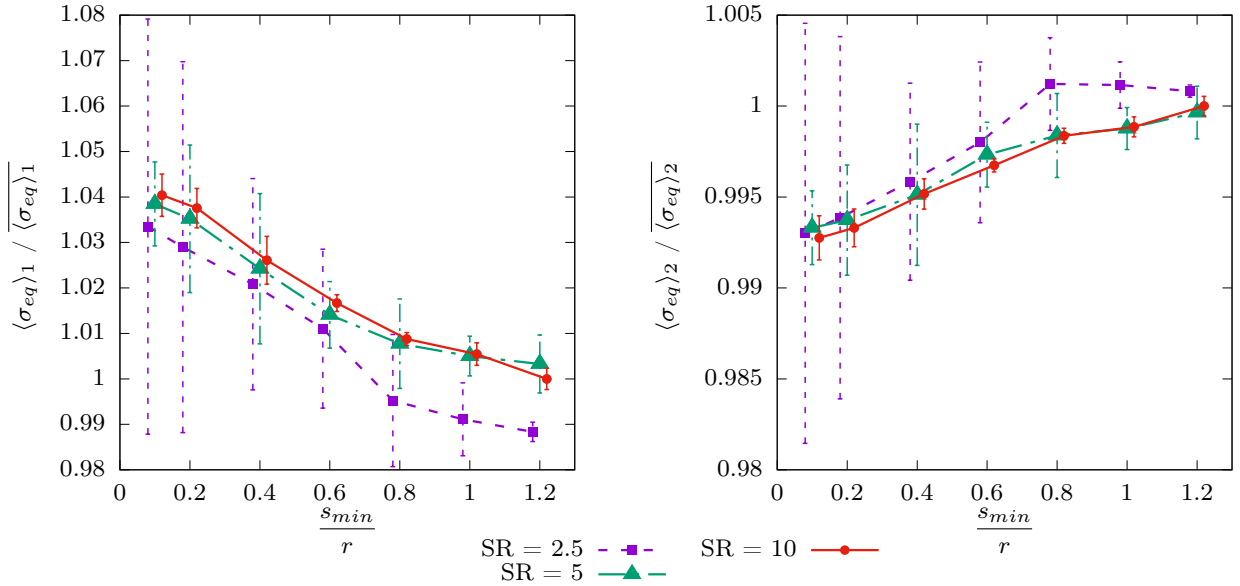
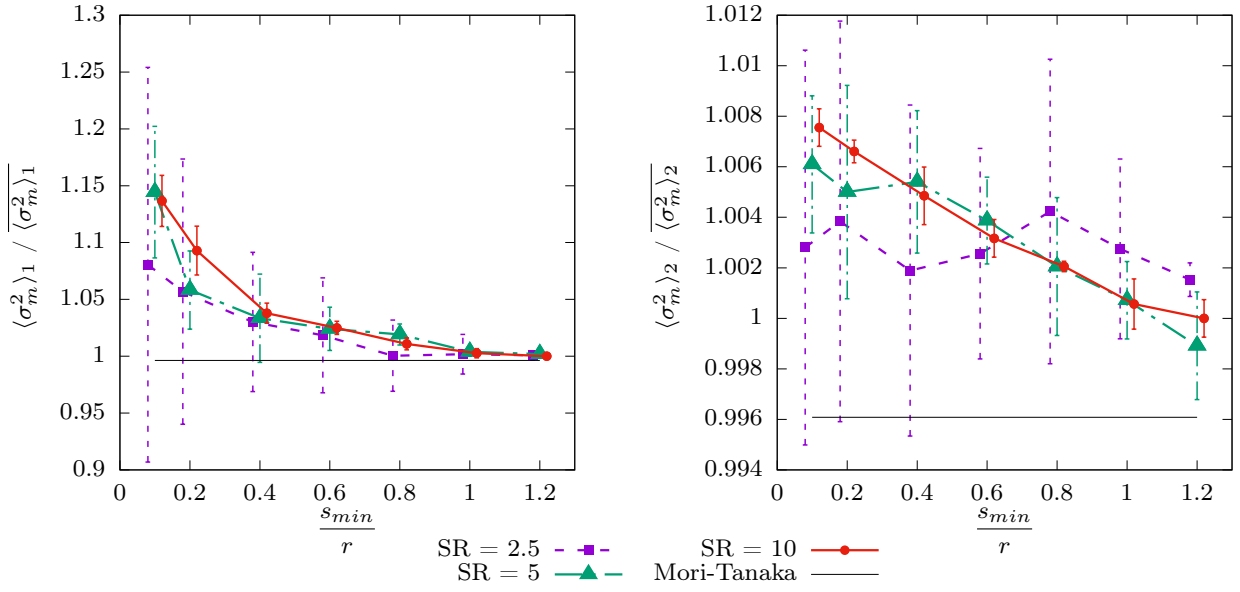
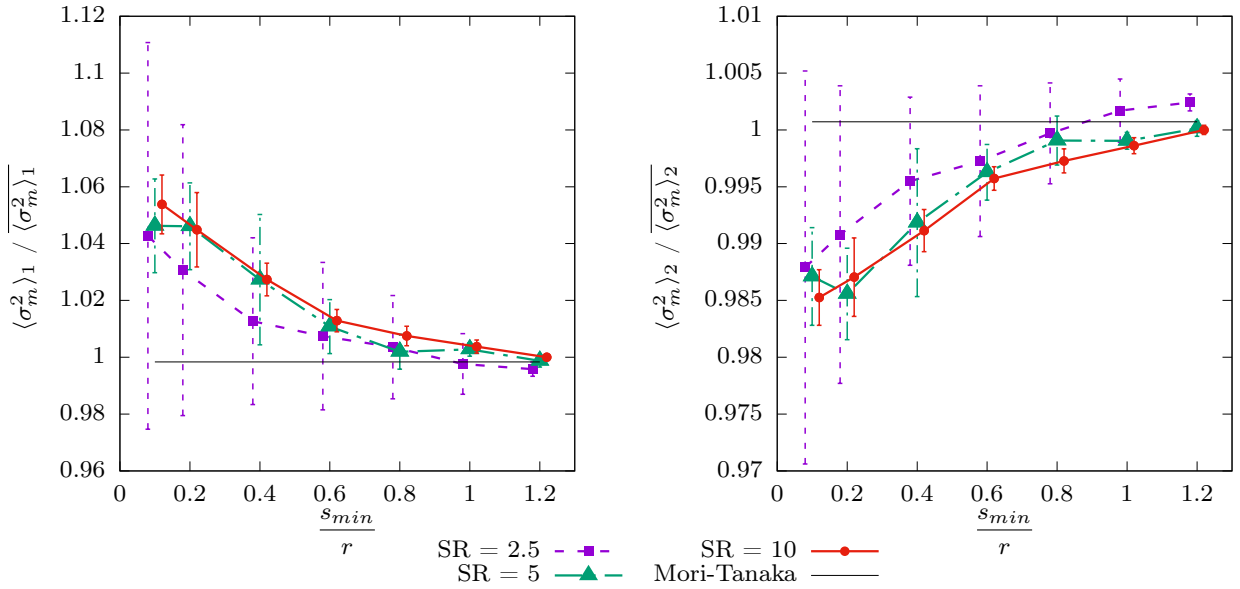
(a) $contrast = 10$, $\overline{\langle \sigma_{eq} \rangle_1} = 66,2$ MPa, $\overline{\langle \sigma_{eq} \rangle_2} = 35,6$ MPa(b) $contrast = 0,1$, $\overline{\langle \sigma_{eq} \rangle_1} = 4,92$ MPa, $\overline{\langle \sigma_{eq} \rangle_2} = 29,0$ MPa

FIGURE B.3. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du premier moment de la contrainte équivalente par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

B.2. Second moment

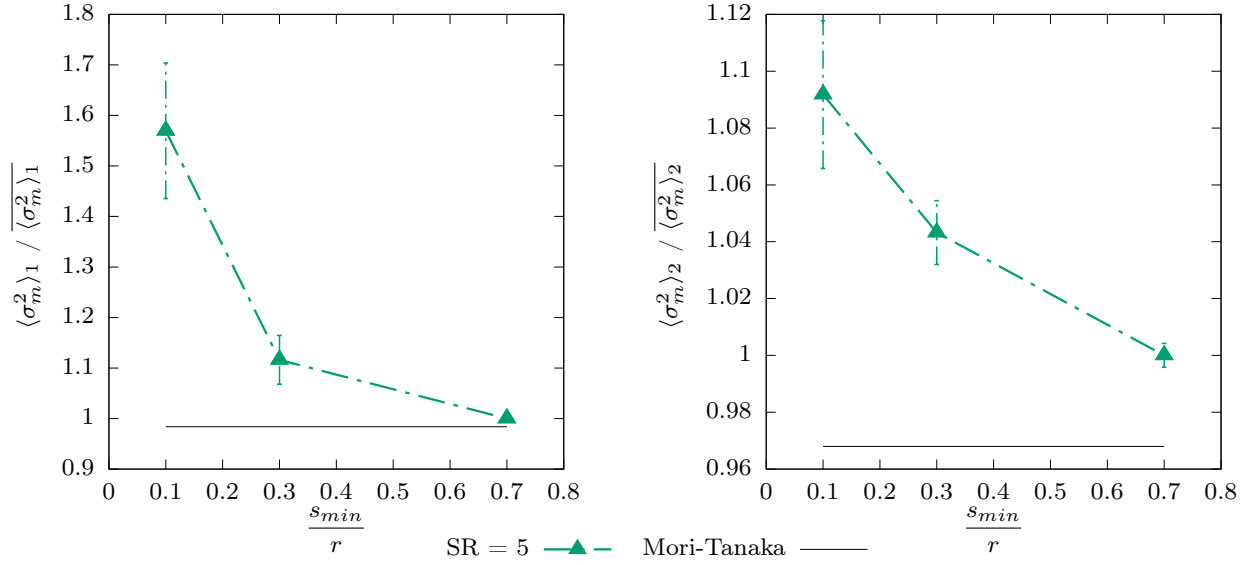
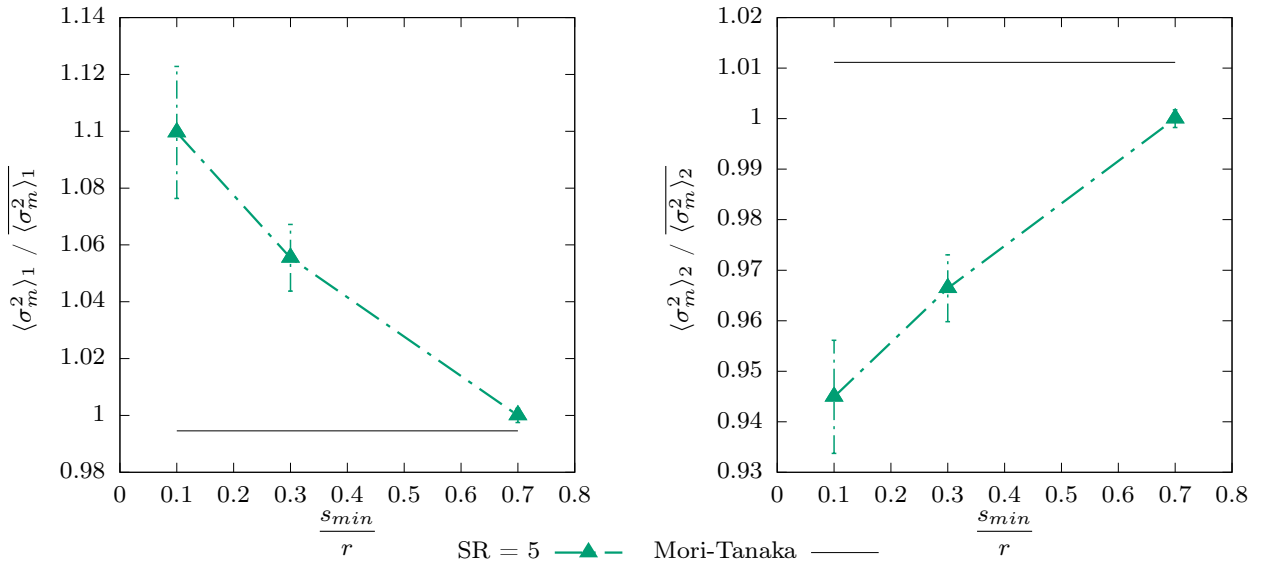


(a) *contraste* = 10, $\overline{\langle \sigma_m^2 \rangle_1} = 922 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_m^2 \rangle_2} = 371 \text{ MPa}^2$

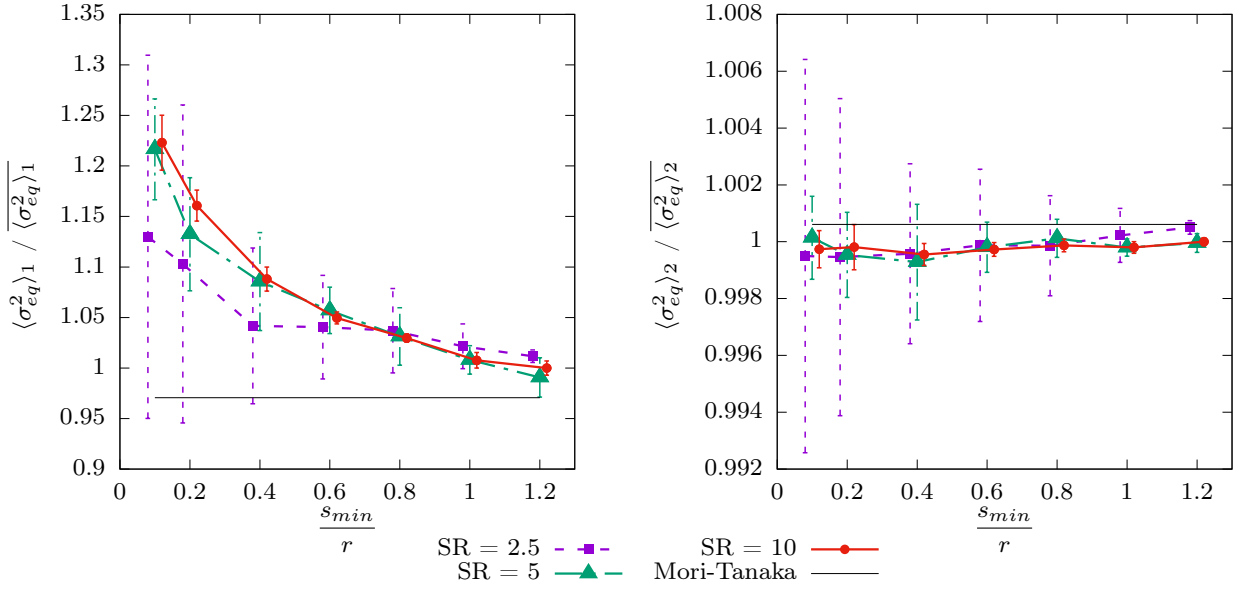


(b) *contraste* = 0, 1, $\overline{\langle \sigma_m^2 \rangle_1} = 10, 4 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_m^2 \rangle_2} = 212 \text{ MPa}^2$

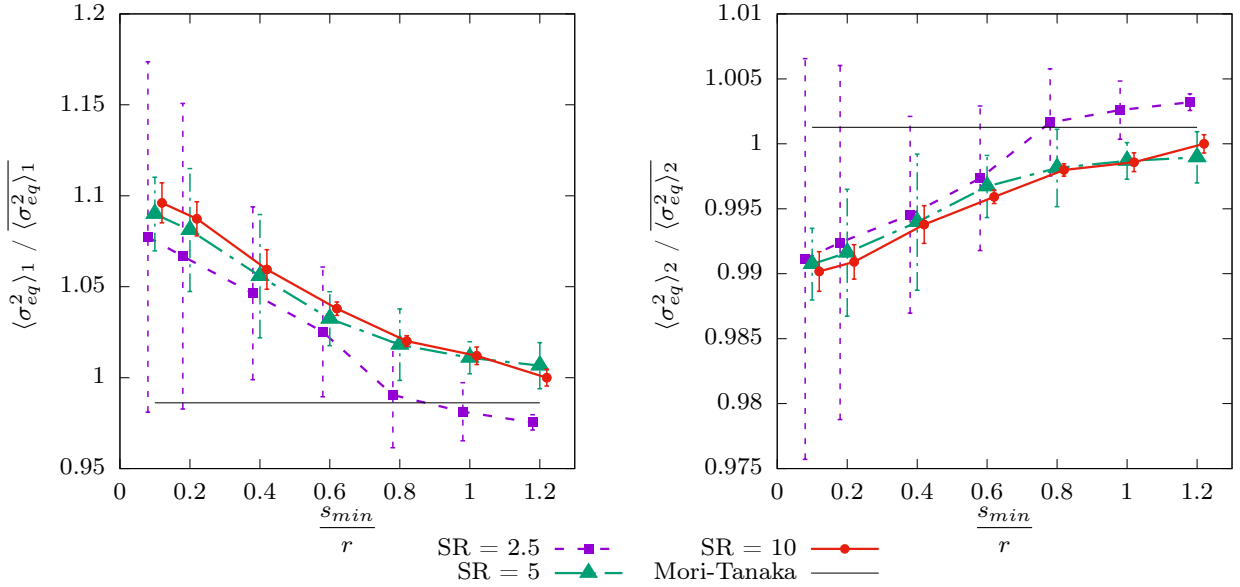
FIGURE B.4. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

(a) $contraste = 100$, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_1} = 1284 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_2} = 569 \text{ MPa}^2$ (b) $contraste = 0.01$, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_1} = 0,0954 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_m \rangle_2} = 159 \text{ MPa}^2$ FIGURE B.5. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte hydrostatique par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 25,1 \%$.

B. Résultats complémentaires pour les champs moyens



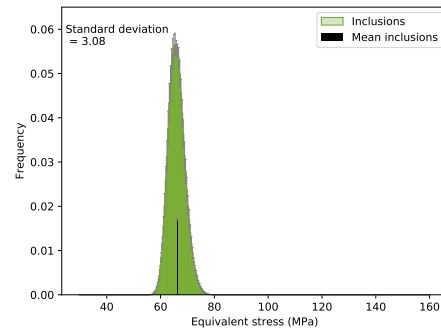
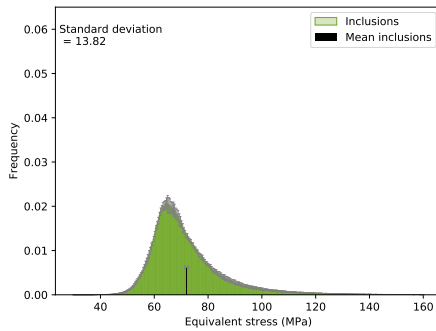
(a) $contraste = 10$, $\overline{\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_1} = 4394 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_2} = 1313 \text{ MPa}^2$



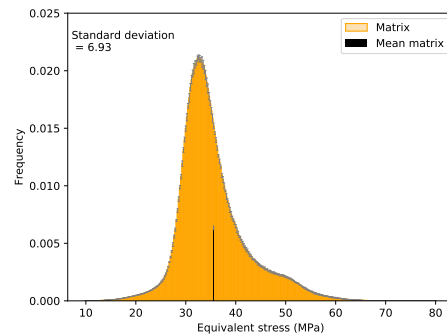
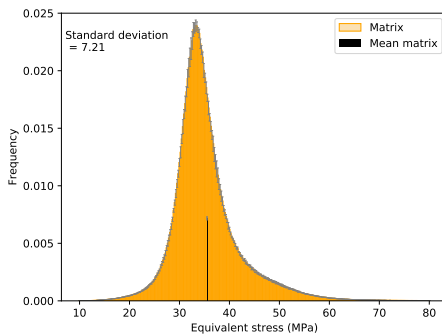
(b) $contraste = 0.1$, $\overline{\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_1} = 24,3 \text{ MPa}^2$, $\overline{\langle \sigma_{eq}^2 \rangle_2} = 870 \text{ MPa}^2$

FIGURE B.6. – Valeurs moyennes et écarts-types de la valeur moyenne du second moment de la contrainte équivalente par phase en fonction du paramètre de tassement s_{min}/r ($r = 10 \mu m$) pour une fraction volumique d'inclusions $f_v = 13,4 \%$. Par souci de clarté, les barres d'erreur et les points sont légèrement décalés pour chaque distance minimale étudiée.

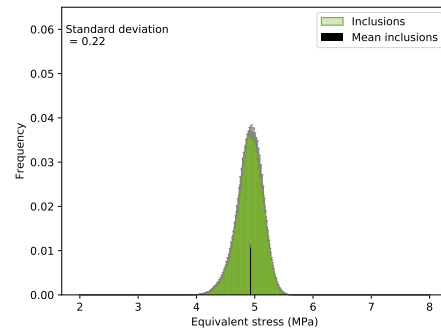
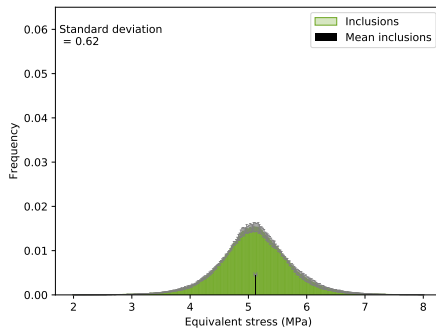
C. Résultats complémentaires pour les champs locaux



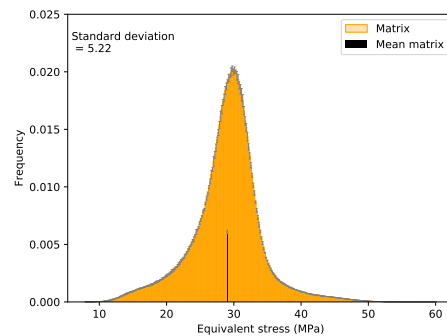
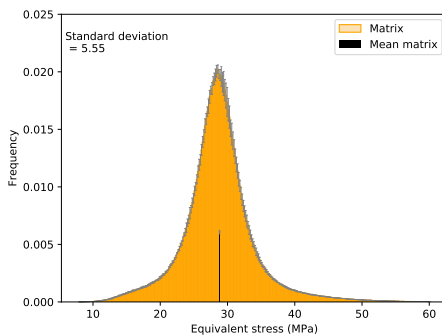
(a) Phase inclusionnaire, $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 10$ (b) Phase inclusionnaire, $s_{min} = 1, 2r$, $contrast = 10$



(c) Phase matricielle, $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 10$ (d) Phase matricielle, $s_{min} = 1, 2r$, $contrast = 10$



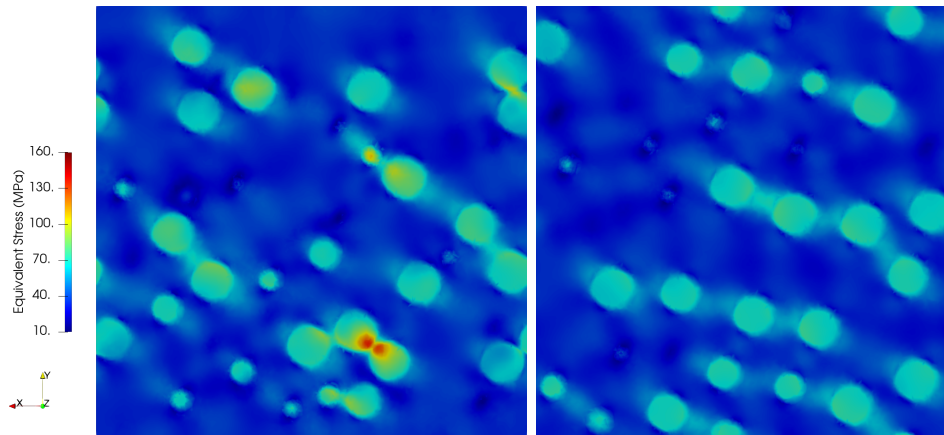
(e) Phase inclusionnaire, $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 0, 1$ (f) Phase inclusionnaire, $s_{min} = 1, 2r$, $contrast = 0, 1$



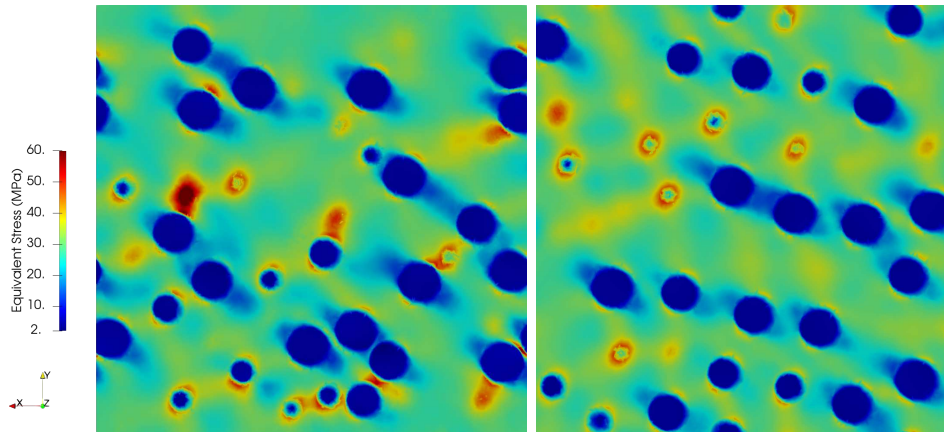
(g) Phase matricielle, $s_{min} = 0, 1r$, $contrast = 0, 1$ (h) Phase matricielle, $s_{min} = 1, 2r$, $contrast = 0, 1$

FIGURE C.1. – Frequency histograms of equivalent stress by phase at $SR = 10$, $f_v = 13,4\%$, and the extreme s_{min} values ($s_{min} = 0, 1r$ and $s_{min} = 1, 2r$) for contrasts of 10 and 0,1.

C. Résultats complémentaires pour les champs locaux



(a) *contraste* = 10, à gauche : $s_{min} = 0, 1r$, à droite : $s_{min} = 1, 2r$



(b) *contraste* = 0,1, à gauche : $s_{min} = 0, 1r$, à droite : $s_{min} = 1, 2r$

FIGURE C.2. – Contrainte équivalente locale à $SR = 10$, $f_v = 13,4\%$ aux valeurs extrêmes de s_{min} et aux contrastes de 10 et 0,1 – Vues en coupe transversale du VER.

Bibliographie

- A. ABDULLE, W. E. B. ENGQUIST et E. VANDEN-EIJNDEN (2012). The heterogeneous multiscale method. *Acta Numerica* 21, p. 1-87. DOI : [10.1017/S0962492912000025](https://doi.org/10.1017/S0962492912000025) (cf. p. 36).
- A. AKPOYOMARE, M. OKEREKE et M. S. BINGLEY (2016). Enforcing periodic boundary conditions on general finite element discretisations of heterogeneous materials. *High Performance and Optimum Design of Structures and Materials II*, p. 129-142. DOI : [10.2495/HPSM160121](https://doi.org/10.2495/HPSM160121) (cf. p. 68).
- G. ALLAIRE (2010). *Shape Optimization by the Homogenization Method*. Springer New York, NY. DOI : <https://doi.org/10.1007/978-1-4684-9286-6> (cf. p. 30, 115).
- G. ALLAIRE et Z. HABIBI (2013). Second order corrector in the homogenization of a conductive-radiative heat transfer problem. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - B* 18.1, p. 1-36. DOI : [10.3934/dcdsb.2013.18.1](https://doi.org/10.3934/dcdsb.2013.18.1) (cf. p. 96, 108, 116).
- G. ALLAIRE (1992). Homogenization and Two-Scale Convergence. *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 23.6, p. 1482-1518. DOI : [10.1137/0523084](https://doi.org/10.1137/0523084) (cf. p. 30, 96, 97).
- G. ALLAIRE, M. BRIANE et M. VANNINATHAN (oct. 2015). A comparison between two-scale asymptotic expansions and Bloch wave expansions for the homogenization of periodic structures. *SeMA Journal* 73. DOI : [10.1007/s40324-016-0067-z](https://doi.org/10.1007/s40324-016-0067-z) (cf. p. 101).
- M. ARTOLA et G. DUVAUT (1982). Un résultat d'homogénéisation pour une classe de problèmes de diffusion non linéaires stationnaires. fr. *Annales de la Faculté des sciences de Toulouse : Mathématiques* 4.1, p. 1-28 (cf. p. 30).
- N. S. BAKHVALOV et G. PANASENKO (1989). *Homogenisation : Averaging Processes in Periodic Media : Mathematical Problems in the Mechanics of Composite Materials*. Mathematics and its Applications. Springer Netherlands (cf. p. 30).
- D. BARON, J.-M. RUCK, J.-C. COUTY et P. D. BONNIÈRES (1997). Cyrano3 : un logiciel de nouvelle génération pour simuler le comportement des crayons combustible en réacteur. *Epure* 55, p. 29-40 (cf. p. 39).
- H. BÉJI, T. KANIT et T. MESSEGER (2023). Prediction of Effective Elastic and Thermal Properties of Heterogeneous Materials Using Convolutional Neural Networks. *Applied Mechanics* 4.1, p. 287-303. DOI : [10.3390/applmech4010016](https://doi.org/10.3390/applmech4010016) (cf. p. 38, 68).
- L. BELGRAND, I. RAMIÈRE, M. JOSIEN et F. LEBON (2023a). Improved accuracy of Dirichlet-like microscopic solutions on Representative Volume Elements. En préparation (cf. p. 42, 67).
- L. BELGRAND, I. RAMIÈRE, R. LARGENTON et F. LEBON (mai 2022a). Effets de la proximité des inclusions dans un Volume Élémentaire Représentatif sur le calcul des champs locaux et des propriétés effectives. *15e Colloque national en calcul des structures* (cf. p. 41, 43).
- (juin 2022b). Efficiency of boundary conditions on the computation of local fields in a Representative Volume Element. *8th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering* (cf. p. 42, 67).
- (2022c). Proximity Effects in Matrix-Inclusion Composites : Elastic Effective Behavior, Phase Moments, and Full-Field Computational Analysis. *Mathematics* 10.23. DOI : [10.3390/math10234437](https://doi.org/10.3390/math10234437) (cf. p. 41, 43).
- (sept. 2023b). Reliable Computation of Microscopic Solutions in Numerical Homogenization Context for Static Heat Conduction with Heterogeneous Heat Generation. *9th ECCOMAS Thematic Conference on the Mechanical Response of Composites : COMPOSITES 2023* (cf. p. 42, 95).
- M. A. BENAIMECHE, J. YVONNET, B. BARY et Q.-C. HE (2022). A k-means clustering machine learning-based multiscale method for anelastic heterogeneous structures with internal variables.

- International Journal for Numerical Methods in Engineering* 123.9, p. 2012-2041. DOI : <https://doi.org/10.1002/nme.6925> (cf. p. 38).
- A. BENSOUSSAN, J. L. LIONS et G. PAPANICOLAU (1978). *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*. ISSN. Elsevier Science (cf. p. 30, 96-98, 104).
- J. G. BERRYMAN et P. A. BERGE (1996). Critique of two explicit schemes for estimating elastic properties of multiphase composites. *Mechanics of Materials* 22.2, p. 149-164. DOI : [https://doi.org/10.1016/0167-6636\(95\)00035-6](https://doi.org/10.1016/0167-6636(95)00035-6) (cf. p. 27).
- D. BISHARA, Y. XIE, W. K. LIU et S. LI (2023). A State-of-the-Art Review on Machine Learning-Based Multiscale Modeling, Simulation, Homogenization and Design of Materials. *Archives of Computational Methods in Engineering* 30, p. 191-222 (cf. p. 38, 68).
- V. BLANC (déc. 2009). Modélisation du comportement thermomécanique des combustibles à particules par une approche multi-échelle. Theses. Université de Provence - Aix-Marseille 1 (cf. p. 31, 37, 96, 97, 101).
- V. BLANC, L. BARBIE, R. LARGENTON et R. MASSON (2011). Homogenization of Linear Viscoelastic Three Phase Media : Internal Variable Formulation versus Full-field Computation. *Procedia Engineering* 10. 11th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials (ICM11), p. 1889-1894. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2011.04.314> (cf. p. 39).
- M. BORNERT, C. STOLZ et A. ZAOUI (1996). Morphologically representative pattern-based bounding in elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 44.3, p. 307-331. DOI : [10.1016/0022-5096\(95\)00083-6](https://doi.org/10.1016/0022-5096(95)00083-6) (cf. p. 44).
- M. BORNERT, T. BRETHERAU et P. GILORMINI (2001). *Homogénéisation en mécanique des matériaux*. Hermes science, 250 pages (cf. p. 32, 35, 69, 86).
- A. BOULORÉ, C. STRUZIK, R. MASSON, P. MAILHÉ et R. LARGENTON (sept. 2017). Approach to better assess fission gas behaviors, applicable to fuels with complex microstructures. *Water Reactor Fuel Performance Meeting (WRFPMP) 2017*. Jeju Island, South Korea (cf. p. 23).
- C. BOURCIER, W. DRIDI, L. CHOMAT, E. LAUCOIN, B. BARY et E. ADAM (oct. 2013). Combs : Open source python library for RVE generation. Application to microscale diffusion simulations in cementitious materials. *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA + MC 2013)*. La Cité des Sciences et de l'Industrie, Paris, France. DOI : [10.1051/snanc/201402107](https://doi.org/10.1051/snanc/201402107) (cf. p. 40, 45).
- J. F. BOURGAT (1979). Numerical experiments of the homogenization method. *Computing Methods in Applied Sciences and Engineering, 1977, I*. Sous la dir. de R. GLOWINSKI, J. L. LIONS et I. LABORIA. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, p. 330-356 (cf. p. 96, 97, 99, 101, 115).
- M. CAROLI et M. TEILLAUD (2009). Computing 3D periodic triangulations. *European Symposium on Algorithms*. Springer, p. 59-70 (cf. p. 76).
- Cast3M*. <http://www-cast3m.cea.fr/>. Consulté le : 2022-10-21 (cf. p. 40, 52, 111).
- G. CHATZIGEORGIOU, N. CHARALAMBAKIS, Y. CHEMISKY et F. MERAGHNI (2016). Periodic homogenization for fully coupled thermomechanical modeling of dissipative generalized standard materials. *International Journal of Plasticity* 81, p. 18-39. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2016.01.013> (cf. p. 37, 96, 97, 101, 124).
- Y. CHEN, L. GÉLÉBART, C. CHATEAU, M. BORNERT, A. KING, C. SAUDER et P. AIMEDIEU (2020). Crack initiation and propagation in braided SiC/SiC composite tubes : Effect of braiding angle. *Journal of the European Ceramic Society* 40.13, p. 4403-4418. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2020.04.060> (cf. p. 38).
- Y. CHEN, L. GÉLÉBART, A. MARANO et J. MARROW (2021). FFT phase-field model combined with cohesive composite voxels for fracture of composite materials with interfaces. *Compu-*

- tational Mechanics* 68, p. 433-457. DOI : <https://doi.org/10.1007/s00466-021-02041-1> (cf. p. 37).
- R. M. CHRISTENSEN (1990). A critical evaluation for a class of micro-mechanics models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 38.3, p. 379-404. DOI : [10.1016/0022-5096\(90\)90005-0](https://doi.org/10.1016/0022-5096(90)90005-0) (cf. p. 29, 62).
- R. M. CHRISTENSEN et K. H. LO (1979). Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 27.4, p. 315-330. DOI : [10.1016/0022-5096\(79\)90032-2](https://doi.org/10.1016/0022-5096(79)90032-2) (cf. p. 27).
- D. W. COOPER (juill. 1988). Random-sequential-packing simulations in three dimensions for spheres. *Physical Review A* 38 (1), p. 522-524. DOI : [10.1103/PhysRevA.38.522](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.38.522) (cf. p. 31, 32, 46).
- Cours de Martin Lévesque*. Notes de cours sur l'homogénéisation analytique de Martin Lévesque : https://moodle.polymtl.ca/pluginfile.php/137989/mod_page/content/39/07_HOMOGENEISATION_ANALYTIQUE.pdf. Consulté le : 2023-09-1 (cf. p. 30).
- A. COUTURE, V. FRANÇOIS, J.-C. CUILLIÈRE et P. PILVIN (jan. 2022). Automatic generation of statistical volume elements using multibody dynamics and an erosion-based homogenization method. *Computational Mechanics* 69. DOI : [10.1007/s00466-021-02130-1](https://doi.org/10.1007/s00466-021-02130-1) (cf. p. 84).
- M. DANIELSSON, D. PARKS et M. BOYCE (2007). Micromechanics, macromechanics and constitutive modeling of the elasto-viscoplastic deformation of rubber-toughened glassy polymers. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 55.3, p. 533-561 (cf. p. 76).
- J. DIRRENBERGER, S. FOREST et D. JEULIN (2014). Towards gigantic RVE sizes for 3D stochastic fibrous networks. *International Journal of Solids and Structures* 51.2, p. 359-376. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2013.10.011> (cf. p. 69).
- W. E et B. ENGQUIST (2003). The Heterogeneous Multiscale Methods. *Communications in Mathematical Sciences* 1.1, p. 87-132 (cf. p. 36, 69).
- M. EBEIDA, S. MITCHELL, A. PATNEY, A. DAVIDSON et J. OWENS (2012). A simple algorithm for maximal Poisson-disk sampling in high dimensions. *Computer Graphics Forum*. T. 31. 2pt4. Wiley Online Library, p. 785-794 (cf. p. 46).
- A.-C. EGLOFFE, A. GLORIA, J.-C. MOURRAT et T. N. NGUYEN (2014). Random walk in random environment, corrector equation and homogenized coefficients : from theory to numerics, back and forth. *IMA Journal of Numerical Analysis*, p. 44. DOI : [10.1093/imanum/dru010](https://doi.org/10.1093/imanum/dru010) (cf. p. 35, 68).
- B. EIDEL et A. FISCHER (2018). The heterogeneous multiscale finite element method for the homogenization of linear elastic solids and a comparison with the FE2 method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 329, p. 332-368. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.10.001> (cf. p. 36).
- A. EL ABDI (jan. 2021). Génération 3D aléatoire de microstructures de combustibles nucléaires MOX et homogénéisation mécanique. Theses. Aix-Marseille Université (cf. p. 23).
- A. EL MOUMEN, T. KANIT et A. IMAD (2021). Numerical evaluation of the representative volume element for random composites. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 86, p. 104181. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2020.104181> (cf. p. 31).
- A. EL MOUMEN, T. KANIT, A. IMAD et H. EL MINOR (2013). Effect of overlapping inclusions on effective elastic properties of composites. *Mechanics Research Communications* 53, p. 24-30. DOI : [10.1016/j.mechrescom.2013.07.007](https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2013.07.007) (cf. p. 44).
- S. EL SHAWISH, P.-G. VINCENT, H. MOULINEC, L. CIZELJ et L. GÉLÉBART (2020). Full-field polycrystal plasticity simulations of neutron-irradiated austenitic stainless steel : A comparison between FE and FFT-based approaches. *Journal of Nuclear Materials* 529, p. 151927. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.151927> (cf. p. 37).

- J. D. ESHELBY (1957). The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 241.1226, p. 376-396 (cf. p. 27, 78).
- F. FEYEL (1999). Multiscale FE² elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science* 16.1, p. 344-354. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0927-0256\(99\)00077-4](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(99)00077-4) (cf. p. 36, 37, 69).
- (2003). A multilevel finite element method (FE²) to describe the response of highly nonlinear structures using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 192.28, p. 3233-3244. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(03\)00348-7](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(03)00348-7) (cf. p. 36, 37).
- R. FLEISCHHAUER, M. BOŽIĆ et M. KALISKE (nov. 2016). A novel approach to computational homogenization and its application to fully coupled two-scale thermomechanics. *Computational Mechanics* 58. DOI : [10.1007/s00466-016-1315-x](https://doi.org/10.1007/s00466-016-1315-x) (cf. p. 40).
- G. FRANCFORT et P. SUQUET (jan. 1986). Homogenization and mechanical dissipation in thermoviscoelasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 96, p. 265-293. DOI : [10.1007/BF00251909](https://doi.org/10.1007/BF00251909) (cf. p. 30).
- F. FRITZEN et M. LEUSCHNER (2013). Reduced basis hybrid computational homogenization based on a mixed incremental formulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 260, p. 143-154. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.03.007> (cf. p. 38).
- F. FRITZEN et O. KUNC (2018). Two-stage data-driven homogenization for nonlinear solids using a reduced order model. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 69, p. 201-220. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2017.11.007> (cf. p. 38).
- L. GÉLÉBART et R. MONDON-CANCEL (2013). Non-linear extension of FFT-based methods accelerated by conjugate gradients to evaluate the mechanical behavior of composite materials. *Computational Materials Science* 77, p. 430-439 (cf. p. 37).
- V. GEORGENTHUM, A. MOAL et O. MARCHAND (2014). SCANAIR a transient fuel performance code Part two : Assessment of modelling capabilities. *Nuclear Engineering and Design* 280, p. 172-180. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2014.04.030> (cf. p. 23).
- C. GEUZAINÉ et J.-F. REMACLE (2009). Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *International journal for numerical methods in engineering* 79.11, p. 1309-1331 (cf. p. 40, 77).
- C. GIERDEN, J. KOCHMANN, J. WAIMANN, T. KINNER-BECKER, J. SÖLTER, B. SVENDSEN et S. REESE (2021). Efficient two-scale FE-FFT-based mechanical process simulation of elasto-viscoplastic polycrystals at finite strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 374, p. 113566. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113566> (cf. p. 37).
- C. GIERDEN, J. KOCHMANN, J. WAIMANN, B. SVENDSEN et S. REESE (2022). A Review of FE-FFT-Based Two-Scale Methods for Computational Modeling of Microstructure Evolution and Macroscopic Material Behavior. *Archives of Computational Methods in Engineering*. DOI : [10.1007/s11831-022-09735-6](https://doi.org/10.1007/s11831-022-09735-6) (cf. p. 24).
- E. GIESEN LOO et F. P. van der MEER (2020). Stress-controlled weakly periodic boundary conditions : Axial stress under varying orientations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 121.19, p. 4458-4470. DOI : <https://doi.org/10.1002/nme.6441>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/nme.6441> (cf. p. 68).
- A. GLORIA (2011). Reduction of the resonance error. Part 1 : Approximation of homogenized coefficients. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 21.8, p. 1601-1630. DOI : [10.1142/S0218202511005507](https://doi.org/10.1142/S0218202511005507) (cf. p. 69, 72, 73).

- A. GLORIA et Z. HABIBI (2016). Reduction of the resonance error in numerical homogenisation II : correctors and extrapolation. *Foundations of Computational Mathematics* 16.1, p. 217-296. DOI : [10.1007/s10208-015-9246-z](https://doi.org/10.1007/s10208-015-9246-z) (cf. p. 68, 69).
- A. GLORIA, S. NEUKAMM et F. OTTO (2015). Quantification of ergodicity in stochastic homogenization : optimal bounds via spectral gap on Glauber dynamics. *Inventiones Mathematicae*, p. 61. DOI : [10.1007/s00222-014-0518-z](https://doi.org/10.1007/s00222-014-0518-z) (cf. p. 35, 68).
- R. GRASSET-BOURDEL, A. ALZINA, N. TESSIER-DOYEN, N. SCHMITT, M. HUGER, T. CHOTARD, D. GRUBER et H. HARMUTH (2011). Optimisation of 3D RVE for anisotropy index reduction in modelling thermoelastic properties of two-phase composites using a periodic homogenisation method. *Computational Materials Science* 50.11, p. 3136-3144. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.05.042> (cf. p. 31).
- J. D. HALES, M. R. TONKS, K. CHOCKALINGAM, D. M. PEREZ, S. R. NOVASCONE, B. W. SPENCER et R. L. WILLIAMSON (2015). Asymptotic expansion homogenization for multiscale nuclear fuel analysis. *Computational Materials Science* 99, p. 290-297. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.12.039> (cf. p. 96).
- Z. HASHIN et S. SHTRIKMAN (1963). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11.2, p. 127-140. DOI : [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90060-7](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90060-7) (cf. p. 27, 28).
- A. V. HERSHEY (sept. 1954). The Elasticity of an Isotropic Aggregate of Anisotropic Cubic Crystals. *Journal of Applied Mechanics* 21.3, p. 236-240. DOI : [10.1115/1.4010899](https://doi.org/10.1115/1.4010899) (cf. p. 27, 29).
- R. HILL (1965). A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 13.4, p. 213-222. DOI : [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(65\)90010-4](https://doi.org/10.1016/0022-5096(65)90010-4) (cf. p. 27, 29).
- (1967). The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 15.2, p. 79-95. DOI : [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(67\)90018-X](https://doi.org/10.1016/0022-5096(67)90018-X) (cf. p. 33).
- C. HUET (1990). Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 38.6, p. 813-841. DOI : [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(90\)90041-2](https://doi.org/10.1016/0022-5096(90)90041-2) (cf. p. 35, 69).
- IAEA (2008). *Thermophysical Properties of Materials for Nuclear Engineering : A Tutorial and Collection of Data*. Non-serial Publications. Vienna : INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY (cf. p. 123).
- M. IDIART, H. MOULINEC, P. PONTE CASTAÑEDA et P. SUQUET (2006). Macroscopic behavior and field fluctuations in viscoplastic composites : Second-order estimates versus full-field simulations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 6, p. 201-208. DOI : [10.1016/j.jmps.2005.11.004](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2005.11.004) (cf. p. 45).
- M. JOSIEN (2023). Merope : a microstructure generator for simulation of heterogeneous materials. in preparation (cf. p. 40, 45).
- Ł. KACZMARCZYK, C. J. PEARCE et N. BIĆANIĆ (2008). Scale transition and enforcement of RVE boundary conditions in second-order computational homogenization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 74.3, p. 506-522. DOI : <https://doi.org/10.1002/nme.2188> (cf. p. 33).
- T. KANIT, S. FOREST, I. GALLIET, V. MOUNOURY et D. JEULIN (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures* 40.13, p. 3647-3679. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(03\)00143-4](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00143-4) (cf. p. 31, 32, 34, 35, 52, 68, 69, 80).

- S.-J. KIM, J. CHOI et M. K. KWAK (2003). A finite element prediction of ferroelectric switching behavior using a regular dodecahedron RVE. *Computational Mechanics* 31, p. 469-478. DOI : <https://doi.org/10.1007/s00466-003-0453-0> (cf. p. 31).
- J. KOCHMANN, S. WULFINGHOFF, L. EHLE, J. MAYER, B. SVENDSEN et S. REESE (juin 2018). Efficient and accurate two-scale FE-FFT-based prediction of the effective material behavior of elasto-viscoplastic polycrystals. *Computational Mechanics* 61. DOI : [10.1007/s00466-017-1476-2](https://doi.org/10.1007/s00466-017-1476-2) (cf. p. 37).
- D. KOLIESNIKOVA, I. RAMIÈRE et F. LEBON (juin 2020). Analytical Comparison of Two Multiscale Coupling Methods for Nonlinear Solid Mechanics. *Journal of Applied Mechanics* 87.9, p. 094501. DOI : [10.1115/1.4047259](https://doi.org/10.1115/1.4047259) (cf. p. 38).
- W. KREHER (1990). Residual stresses and stored elastic energy of composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 38.1, p. 115-128. DOI : [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(90\)90023-W](https://doi.org/10.1016/0022-5096(90)90023-W) (cf. p. 51).
- R. LARGENTON, K. AUDIC, F. DOUCHIN et C. PETRY (2016). CYRANO3 the EDF fuel code performance : Global overview and recent developments on MOX fuel. *Proceedings of Top Fuel* (cf. p. 39).
- R. LARGENTON, J.-C. MICHEL et P. SUQUET (mars 2014). Extension of the Nonuniform Transformation Field Analysis to linear viscoelastic composites in the presence of aging and swelling. *Mechanics of Materials* 73, p. 76-100. DOI : [10.1016/j.mechmat.2014.02.004](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2014.02.004) (cf. p. 39).
- R. LARGENTON (juin 2012). Modélisation du comportement effectif du combustible MOX par une analyse micro-mécanique en champs de transformation non uniformes. Theses. Université de Provence - Aix-Marseille 1 (cf. p. 23, 39).
- L. LIU, M. A. BESSA et W. K. LIU (2016). Self-consistent clustering analysis : An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 306, p. 319-341. DOI : [10.1016/j.cma.2016.04.004](https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.04.004) (cf. p. 38).
- Z. LIU, M. A. BESSA et W. K. LIU (2016). Self-consistent clustering analysis : An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 306, p. 319-341. DOI : [10.1016/j.cma.2016.04.004](https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.04.004) (cf. p. 38, 68).
- Z. LIU, C. T. WU et M. KOISHI (2019). A deep material network for multiscale topology learning and accelerated nonlinear modeling of heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 345, p. 1138-1168. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.09.020> (cf. p. 38, 68).
- Z. K. LOW, N. BLAL, N. NAOUAR et D. BAILLIS (2020). Influence of boundary conditions on computation of the effective thermal conductivity of foams. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 155, p. 119781. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119781> (cf. p. 69).
- B. LUBACHEVSKY et F. STILLINGER (1990). Geometric properties of random disk packings. *Journal of statistical Physics* 60.5-6, p. 561-583 (cf. p. 32).
- M. MAJEWSKI, P. HOŁOBUT, M. KURSA et K. KOWALCZYK-GAJEWSKA (2020). Packing and size effects in elastic-plastic particulate composites : Micromechanical modelling and numerical verification. *International Journal of Engineering Science* 151, p. 103271. DOI : [10.1016/j.ijengsci.2020.103271](https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2020.103271) (cf. p. 44, 46).
- M. MAJEWSKI, M. KURSA, P. HOŁOBUT et K. KOWALCZYK-GAJEWSKA (2017). Micromechanical and numerical analysis of packing and size effects in elastic particulate composites. *Composites Part B : Engineering* 124, p. 158-174. DOI : [10.1016/j.compositesb.2017.05.004](https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2017.05.004) (cf. p. 44, 45, 55).

- V. MARELLE, P. GOLDBRONN, S. BERNAUD, E. CASTELIER, J. JULIEN, K. NKONGA, L. NOIROT et I. RAMIERE (sept. 2016). New developments in ALCYONE 2.0 fuel performance code. *Top Fuel 2016 - Light Water Reactor (LWR) Fuel Performance Meeting*. Boise, United States (cf. p. 39).
- V. MARELLE, B. MICHEL, J. SERCOMBE, P. GOLDBRONN, C. STRUZIK et A. BOULORE (2013). Advanced Simulation of Fuel Behavior Under Irradiation in the PLEIADES Software Environment. *IAEA TECDOC SERIES, Modelling of Water Cooled Fuel Including Design Basis and Severe Accidents*. T. IAEA-TECDOC-CD-1775 (cf. p. 39).
- F. MASI, I. STEFANOU, P. VANNUCCI et V. MAFFI-BERTHIER (2021). Thermodynamics-based Artificial Neural Networks for constitutive modeling. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 147, p. 104277. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.104277> (cf. p. 38, 68).
- R. MASSON, M. SECK, J. FAUQUE et M. GARAJEU (avr. 2020). A modified secant formulation to predict the overall behavior of elasto-viscoplastic particulate composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 137, p. 103874. DOI : [10.1016/j.jmps.2020.103874](https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.103874) (cf. p. 29, 49).
- Mérope*. <https://github.com/MarcJos/Merope>. Consulté le : 2023-06-01 (cf. p. 40, 45).
- B. MICHEL, I. RAMIÈRE, I. VIALARD, C. INTROINI, M. LAINET, N. CHAUVIN, V. MARELLE, A. BOULORE, T. HELFER, R. MASSON, J. SERCOMBE, J. C. DUMAS, L. NOIROT et S. BERNAUD (2021). Chapter 9 - Two fuel performance codes of the PLEIADES platform : ALCYONE and GERMINAL. *Nuclear Power Plant Design and Analysis Codes : Development, Validation, and Application*. Sous la dir. de J. WANG, X. LI, C. ALLISON et J. HOHORST. Woodhead Publishing Series in Energy. Woodhead Publishing. Chap. 9, p. 207-233. DOI : <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818190-4.00009-7> (cf. p. 40, 122).
- J.-C. MICHEL et P. SUQUET (2003). Nonuniform transformation field analysis. *International Journal of Solids and Structures* 40.25, p. 6937-6955. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(03\)00346-9](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00346-9) (cf. p. 38).
- C. MIEHE et A. KOCH (2002). Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures undergoing small strains. *Archive of Applied Mechanics* 72, p. 300-317. DOI : <https://doi.org/10.1007/s00419-002-0212-2> (cf. p. 32, 33, 35, 68, 69, 71).
- C. MIEHE, J. SCHRÖDER et J. SCHOTTE (1999). Computational homogenization analysis in finite plasticity Simulation of texture development in polycrystalline materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 171.3, p. 387-418. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(98\)00218-7](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00218-7) (cf. p. 37).
- T. MORI et K. TANAKA (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica* 21.5, p. 571-574. DOI : [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(73\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3) (cf. p. 27, 28, 39).
- H. MOULINEC et P. SUQUET (1998). A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 157.1, p. 69-94. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(97\)00218-1](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(97)00218-1) (cf. p. 37).
- V.-D. NGUYEN, E. BÉCHET, C. GEUZAINÉ et L. NOELS (2012). Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Computational Materials Science* 55, p. 390-406. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.10.017> (cf. p. 68).
- G. M. ODEGARD, T. C. CLANCY et T. S. GATES (2005). Modeling of the mechanical properties of nanoparticle/polymer composites. *Polymer* 46.2, p. 553-562. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2004.11.022> (cf. p. 54, 62, 64).
- ORANO (2017). *Rapport d'information du site Orano Melox*. Orano Cycle - Melox (cf. p. 22).

- G. OUDINET, I. MUNOZ-VIALLARD, L. AUFORE, M.-J. GOTTA, J. M. BECKER, G. CHIARELLI et R. CASTELLI (2008). Characterization of plutonium distribution in MIMAS MOX by image analysis. *Journal of Nuclear Materials* 375.1, p. 86-94. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2007.10.013> (cf. p. 23).
- I. ÖZDEMİR, W. A. M. BREKELMANS et M. G. D. GEERS (2008). FE2 computational homogenization for the thermo-mechanical analysis of heterogeneous solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198.3, p. 602-613. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.09.008> (cf. p. 40).
- J. PAPIN, B. CAZALIS, J.-M. FRIZONNET, J. DESQUINES, F. LEMOINE, V. GEORGENTHUM, F. LAMARE et P. MARC (mars 2007). Summary and interpretation of the CABRI REP-Na program. *Nuclear technology* 157, p. 23. DOI : [10.13182/NT07-A3815](https://doi.org/10.13182/NT07-A3815) (cf. p. 23).
- J. PAPIN, M. PETIT, C. GRANDJEAN et V. GEORGENTHUM (2006). IRSN R&D studies on high burn-up fuel behaviour under RIA and LOCA conditions. *International Meeting on LWR Fuel Performance/TopFuel*. Salamanque, Spain (cf. p. 23).
- S. PECULLAN, L. V. GIBIANSKY et S. TORQUATO (1999). Scale effects on the elastic behavior of periodic and hierarchical two-dimensional composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47.7, p. 1509-1542. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(98\)00111-2](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(98)00111-2) (cf. p. 68, 90, 91).
- K. PIETRAK et T. S. WIŚNIEWSKI (jan. 2014). A review of models for effective thermal conductivity of composite materials. *J. Power Technol.* 95, p. 14-24 (cf. p. 111).
- D. PLANCQ, J. M. RICAUD, G. THOUVENIN, C. STRUZIK, T. HELFER, F. BENTEJAC, P. THEVENIN et R. MASSEN (jan. 2004). PLEIADES : A unified environment for multi-dimensional fuel performance modelling. *Proceedings of the 2004 International Meeting on LWR Fuel Performance*, p. 709-714 (cf. p. 39).
- P. PONTE CASTAÑEDA (2016). Stationary variational estimates for the effective response and field fluctuations in nonlinear composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 96, p. 660-682. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2016.06.010> (cf. p. 27, 80).
- M. PRASTER, M. KLASSEN et S. KLINKEL (nov. 2018). An adaptive FE² approach for fiber-matrix composites. *Computational Mechanics* 63. DOI : [10.1007/s00466-018-1652-z](https://doi.org/10.1007/s00466-018-1652-z) (cf. p. 38).
- F. RABETTE, F. WILLOT et H. TRUMEL (2019). Homogénéisation en champs complets par FFT pour un matériau énergétique à forte anisotropie cristalline : prise en compte de la microfissuration par une méthode de champ de phase. *Colloque National MECAMAT 2019 : Rupture des Matériaux et des Structures, Mécamat* (cf. p. 37).
- K. RAJU, T. E. TAY et V. B. C. TAN (mars 2021). A review of the FE2 method for composites. *Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design* 4. DOI : [10.1007/s41939-020-00087-x](https://doi.org/10.1007/s41939-020-00087-x) (cf. p. 40, 96).
- I. RAMIÈRE, S. BERNAUD et R. MASSON (2017a). Mise en place d'un schéma de calcul mécanique à deux échelles (EF²) dans PLEIADES V2.0. *Note Technique CEA DEC/SESC 17-015 indice 0* (cf. p. 39).
- I. RAMIÈRE (oct. 2021). Autour de méthodes numériques pour les couplages multiphysiques et multiéchelles en mécanique des solides. Habilitation à Diriger des Recherches. Aix Marseille Université (AMU) (cf. p. 24, 47).
- I. RAMIÈRE, R. MASSON, B. MICHEL et S. BERNAUD (mai 2017b). Un schéma de calcul multi-échelles de type Éléments Finis au carré pour la simulation de combustibles nucléaires hétérogènes. *13e colloque national en calcul des structures*. Université Paris-Saclay. Giens, Var, France (cf. p. 37-39, 47).

- I. RAMIÈRE et T. HELFER (2015). Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations. *Computers & Mathematics with Applications* 70, p. 2210-2226. DOI : [10.1016/j.camwa.2015.08.025](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2015.08.025) (cf. p. 37).
- G. R. RAMOS, T. dos SANTOS et R. ROSSI (2017). An extension of the Hill–Mandel principle for transient heat conduction in heterogeneous media with heat generation incorporating finite RVE thermal inertia effects. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 111.6, p. 553-580. DOI : <https://doi.org/10.1002/nme.5471> (cf. p. 96, 101, 104-106, 109-111).
- A. RASOOL et H. J. BÖHM (2012). Effects of particle shape on the macroscopic and microscopic linear behaviors of particle reinforced composites. *International Journal of Engineering Science* 58. Recent advances in Micromechanics, p. 21-34. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2012.03.022> (cf. p. 58, 62, 64).
- B. REGENER, C. KREMPASZKY, E. WERNER et M. STOCKINGER (2011). Thermo-Mechanical FE2 Simulation Scheme for Abaqus. *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics* 11.1, p. 547-548. DOI : <https://doi.org/10.1002/pamm.201110263> (cf. p. 40).
- J.-M. RICAUD et R. RENAUD MASSON (2009). Effective properties of linear viscoelastic heterogeneous media : Internal variables formulation and extension to ageing behaviours. *International Journal of Solids and Structures* 46.7, p. 1599-1606. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2008.12.007> (cf. p. 39).
- C. RYCROFT (2009). *Voro++ : A three-dimensional Voronoi cell library in C++*. Rapp. tech. Lawrence Berkeley National Lab.(LBNL), Berkeley, CA (United States) (cf. p. 77).
- K. SAB (1992). On the homogenization and the simulation of random materials. *European Journal of Mechanics A-solids* 11, p. 585-607 (cf. p. 35).
- S. SAEB, P. STEINMANN et A. JAVILI (juin 2016). Aspects of Computational Homogenization at Finite Deformations : A Unifying Review From Reuss' to Voigt's Bound. *Applied Mechanics Reviews* 68. DOI : [10.1115/1.4034024](https://doi.org/10.1115/1.4034024) (cf. p. 24, 37, 68).
- M. SALMI, F. AUSLENDER, M. BORNERT et M. FOGLI (2012). Apparent and effective mechanical properties of linear matrix-inclusion random composites : Improved bounds for the effective behavior. *International Journal of Solids and Structures* 49.10, p. 1195-1211. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2012.01.018> (cf. p. 69, 72, 76).
- SALOME platform*. <https://www.salome-platform.org/>. Consulté le : 2022-10-21 (cf. p. 40, 45).
- E. SANCHEZ-PALENCIA (1980). Homogenization of second order equations. *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, p. 45-83 (cf. p. 30, 96, 97).
- K. SCHNEIDER, B. KLUSEMANN et S. BARGMANN (2016). Automatic three-dimensional geometry and mesh generation of periodic representative volume elements for matrix-inclusion composites. *Advances in Engineering Software* 99, p. 177-188 (cf. p. 47).
- (mai 2017). Fully periodic RVEs for technological relevant composites : Not worth the effort ! *Journal of Mechanics and Materials of Structures* 12, p. 471-484. DOI : [10.2140/jomms.2017.12.471](https://doi.org/10.2140/jomms.2017.12.471) (cf. p. 68).
- M. SCHNEIDER (2021). A review of nonlinear FFT-based computational homogenization methods. *Acta Mechanica* 232.6, p. 2051-2100 (cf. p. 37).
- M. SCHNEIDER, M. JOSIEN et F. OTTO (2022a). Representative volume elements for matrix-inclusion composites - a computational study on the effects of an improper treatment of particles intersecting the boundary and the benefits of periodizing the ensemble. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 158, p. 104652. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104652> (cf. p. 37, 47).

- M. SCHNEIDER, M. JOSIEN et F. OTTO (2022b). Representative volume elements for matrix-inclusion composites - a computational study on the effects of an improper treatment of particles intersecting the boundary and the benefits of periodizing the ensemble. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 158, p. 104652. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104652> (cf. p. 45).
- E. A. de SOUZA NETO, P. J. BLANCO, P. J. SÁNCHEZ et R. A. FEIJÓO (2015). An RVE-based multiscale theory of solids with micro-scale inertia and body force effects. *Mechanics of Materials* 80, p. 136-144. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2014.10.007> (cf. p. 96, 101, 104-106, 108, 110, 111, 122).
- J. SPAHN, H. ANDRÄ, M. KABEL et R. MÜLLER (2014). A multiscale approach for modeling progressive damage of composite materials using fast Fourier transforms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 268, p. 871-883. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.10.017> (cf. p. 37).
- E. SVENNING, M. FAGERSTRÖM et F. LARSSON (2017). Localization aligned weakly periodic boundary conditions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 111.5, p. 493-500. DOI : <https://doi.org/10.1002/nme.5483>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/nme.5483> (cf. p. 68).
- L. TARTAR (1990). H-measures, a new approach for studying homogenisation, oscillations and concentration effects in partial differential equations. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh Section A : Mathematics* 115.3-4, p. 193-230. DOI : [10.1017/S0308210500020606](https://doi.org/10.1017/S0308210500020606) (cf. p. 30).
- G. THOUVENIN, J. RICAUD, B. MICHEL, D. PLANCQ et P. THEVENIN (2006). ALCYONE : the PLEIADES fuel performance code dedicated to multidimensional PWR studies. *Proceedings of Top Fuel* (cf. p. 39).
- E. TIKARROUCHINE, A. BENAARBA, G. CHATZIGEORGIOU et F. MERAGHNI (2021). Non-linear FE2 multiscale simulation of damage, micro and macroscopic strains in polyamide 66-woven composite structures : Analysis and experimental validation. *Composite Structures* 255, p. 112926. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112926> (cf. p. 96, 124).
- S. TORQUATO (1998). Morphology and effective properties of disordered heterogeneous media. *International Journal of Solids and Structures* 35.19, p. 2385-2406. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(97\)00142-X](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(97)00142-X) (cf. p. 44).
- (2002). Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties. *Applied Mechanics Reviews* 55.4 (cf. p. 31, 44, 62, 78).
- L. J. WALPOLE (1966). On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems—I. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 14.3, p. 151-162. DOI : [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(66\)90035-4](https://doi.org/10.1016/0022-5096(66)90035-4) (cf. p. 28).
- D. J. WALTERS, D. J. LUSCHER et J. D. YEAGER (2021). Considering computational speed vs. accuracy : Choosing appropriate mesoscale RVE boundary conditions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 374, p. 113572. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113572> (cf. p. 38, 68, 71).
- S. WILLIAMS et A. PHILIPSE (juin 2003). Random Packings of Spheres and Spherocylinders Simulated by Mechanical Contraction. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics* 67, p. 051301. DOI : [10.1103/PhysRevE.67.051301](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.67.051301) (cf. p. 32, 45, 47).
- M. WOJCIECHOWSKI (2022). On generalized boundary conditions for mesoscopic volumes in computational homogenization. *Composite Structures* 294, p. 115718. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2022.115718> (cf. p. 69).

- S. YIN et M.-J. PINDERA (2022). Homogenized moduli and local stress fields of random fiber composites under homogeneous and periodic boundary conditions. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 93, p. 104504. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2022.104504> (cf. p. 69, 72).
- X. YUE et W. E (mars 2007). The local microscale problem in the multiscale modeling of strongly heterogeneous media : Effects of boundary conditions and cell size. *Journal of Computational Physics* 222, p. 556-572. DOI : [10.1016/j.jcp.2006.07.034](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.07.034) (cf. p. 68, 72-74).
- J. YVONNET, N. AUFRAY et V. MONCHIET (2020). Computational second-order homogenization of materials with effective anisotropic strain-gradient behavior. *International Journal of Solids and Structures* 191-192, p. 434-448. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2020.01.006> (cf. p. 33).
- O. ZERHOUNI, S. BRISARD et K. DANAS (2021). Quantifying the effect of two-point correlations on the effective elasticity of specific classes of random porous materials with and without connectivity. *International Journal of Engineering Science* 166, p. 103520. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2021.103520> (cf. p. 55, 64).