UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER

École Doctorale : Information, Structures, Systèmes

Spécialité : Mécanique et Génie Civil

présentée et soutenue publiquement
par

Xavier HALLER

le 23 octobre 2015

Modélisation du comportement élastique des matériaux nanoporeux : application au combustible UO_2

JURY

M. Pierre Suquet	Directeur de recherche CNRS, LMA	Président
M. Djimédo Kondo	Professeur, Université Pierre et Marie Curie	Rapporteur
M. Claude Stolz	Directeur de recherche CNRS, GEM	Rapporteur
M. Renaud Masson	Ingénieur-Chercheur, CEA	Examinateur
M. Gilles Thouvenin	Ingénieur-Chercheur, EDF	Invité
M. Yann Monerie	Professeur, Université de Montpellier	Directeur de thèse
M. Stéphane Pagano	Directeur de recherche CNRS, LMGC	Directeur de thèse
M. Pierre-Guy Vincent	Ingénieur-Chercheur, IRSN	Encadrant de thèse

à Marthe et Hortense,
sources de motivation intarissables

Remerciements

Je tiens premièrement à exprimer ma profonde gratitude aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail : à Pierre Suquet qui m'a fait l'honneur de présider la soutenance, à Djimédo Kondo et Claude Stolz pour avoir accepté la tâche fastidieuse d'être les rapporteurs de ce manuscrit, à Renaud Masson et Gilles Thouvenin pour leur lecture approfondie de ces pages. Que ces personnes aient consacré leur temps précieux à l'examen de mes travaux est pour moi une magnifique récompense.

Mes plus vifs remerciements s'adressent à mon encadrement sans qui ce travail n'aurait bien évidemment pas pu être réalisé : à Pierre-Guy Vincent qui m'a encadré, à Yann Monerie et Stéphane Pagano pour avoir dirigé ces recherches. Je retiendrai en particulier l'investissement sans limite de Pierre-Guy, qui a toujours œuvré pour que cette thèse soit une réussite. Je n'oublierai pas non plus sa patience, sa disponibilité, ses conseils bien avisés et ses compétences scientifiques évidentes aux yeux de tous. De Yann et Stéphane, je n'oublierai pas leur disponibilité, malgré des emplois du temps souvent chargés et notre éloignement, leurs remarques pertinentes, le recul qu'ils m'ont apporté. Leurs encouragements ont été particulièrement bénéfiques dans les moments de doute et m'ont également permis d'accomplir des choses dont je ne me serais jamais cru capable. Je suis reconnaissant d'avoir bénéficié d'un tel encadrement qui, tout en encourageant rigueur et excellence scientifique, a été disponible et bienveillant.

Je tiens à remercier l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) où cette thèse a été réalisée, en particulier Marc Petit, chef adjoint du Service de Maîtrise des Incidents et des Accidents (SEMIA), ainsi qu'Olivier Marchand, chef du Laboratoire de Physique et de Thermomécanique des Matériaux (LPTM), pour m'avoir donné les moyens d'accomplir ce travail dans des conditions plus que favorables, ainsi que pour leur soutien.

Ce travail s'inscrit dans le cadre de programmes de modélisation, menés conjointement par l'IRSN et EdF, concernant l'accident de réactivité dans les réacteurs à eau pressurisée. Je tiens donc évidemment à remercier EdF pour son soutien financier et l'intérêt porté à ces travaux.

Cette thèse s'inscrit également dans le cadre d'une collaboration entre l'IRSN et le Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC), à travers le laboratoire commun de Micromécanique et Intégrité des STructures (MIST). Je remercie toutes les personnes du LMGC et du laboratoire MIST rencontrées au cours de ces trois années, qui m'ont encouragé et ont

manifesté de l'intérêt pour mes travaux.

Je remercie chaleureusement les membres du LPTM pour leur soutien infaillible et leur bienveillance dont j'ai été l'objet durant cette thèse. Ils ont toujours pris le temps de m'aider, me conseiller et m'encourager. Pour cela je leur suis extrêmement reconnaissant. Je remercie tout particulièrement Frédéric Perales, sans qui les simulations numériques avec la plateforme XPER n'auraient pas pu être réalisées. Il a toujours fait preuve d'une grande disponibilité et m'a vivement encouragé à me diriger vers le *numérique*. Je remercie également Clément Introïni pour avoir fourni les résultats des simulations numériques réalisées avec le code SCANAIR. Sans ceux-ci, l'aspect applicatif de ces travaux aurait été fortement appauvri. Je remercie Céline Pélissou pour m'avoir gentiment accueilli dans son bureau ainsi que pour son support quotidien. J'adresse des remerciement particuliers à Viviane Jégou, secrétaire du LPTM, pour son aide précieuse dans la réalisation des tâches administratives, notamment pour l'organisation de la soutenance, mais aussi pour sa constante bonne humeur durant ces trois années. Elle contribue largement à la bonne ambiance qui règne dans le labo. Je remercie Guylaine Boittin, Vincent Busser, Bernard Cazalis, Vincent Georgenthum, Andrei Jelea, Julie Lasnel-Payan, Alain Moal, Raphaël Monod, Fabienne Ribeiro, André Saroli, Nicolas Vissyrias pour avoir répondu à mes questions sur le combustible, l'accident de réactivité, les programmes expérimentaux, la modélisation à l'échelle atomique, etc. J'adresse également une pensée aux doctorants : Lhassan Amarsid, Jack Arayro, Lionel Bichet, Éric Delaume, Paul Eymeoud, Louis Joessel et Tarik Madani. Je leur souhaite naturellement beaucoup de réussite pour la suite.

Je tiens également à remercier toutes les personnes qui m'ont orienté vers la recherche scientifique. Je pense notamment à mes anciens enseignants, Patrice Bailly, Jean-Luc Hanus et Benoît Magnain, mais également aux personnes que j'ai eu l'opportunité de rencontrer lors de mon stage de fin d'étude, notamment Charles Petry, Rodrigue Largenton, ainsi que l'ensemble du personnel du Laboratoire de Simulation du comportement des Combustibles (LSC) du CEA de Cadarache. Leur disposition au partage scientifique et leurs qualités humaines ont largement contribué à développer mon goût pour la recherche en mécanique et pour les problématiques liées au combustible nucléaire.

Je souhaite également remercier tout particulièrement Jérôme Julien. Sans lui et sans Vincent Busser, je n'aurais certainement pas pu effectuer cette thèse. Je le remercie pour son soutien quasi quotidien, son aide, ses bons conseils et sa bonne humeur.

J'adresse un grand merci à mes proches, notamment à mes parents, pour leur soutien inconditionnel, leurs encouragements, leur constante disponibilité et leur affection. Je leur suis reconnaissant de m'avoir donné les moyens d'arriver jusqu'ici.

C'est avec une grande fierté que je consacre mes derniers remerciements à ma femme, Marthe et à ma fille, Hortense. Je rends hommage à leur patience parfois mise à rude épreuve au cours de ces derniers mois. Je les remercie pour leur soutien, leurs encouragements, leur optimisme et surtout leur amour.

Résumé

Modélisation du comportement élastique des matériaux nanoporeux : application au combustible UO_2

Le dioxyde d'uranium irradié (UO_2), combustible nucléaire des réacteurs à eau pressurisée, contient deux populations de cavités saturées par des gaz de fission : i. des cavités intergranulaires plutôt lenticulaires, dont la taille varie de quelques dizaines à plusieurs centaines de nanomètres, ii. des cavités intragranulaires plutôt sphériques, dont la taille est de l'ordre du nanomètre. Des travaux récents ont montré qu'il existe un effet de surface à l'échelle des cavités nanométriques qui modifie le comportement élastique effectif du combustible. Ce travail vise à proposer un modèle micromécanique analytique capable de tenir compte de cette microstructure hétérogène ainsi que de l'effet de surface afin de décrire le comportement élastique macroscopique de l'UO_2 irradié. La démarche mise en oeuvre est fondée sur une modélisation multi-échelles et s'appuie sur des techniques d'homogénéisation en mécanique des matériaux. L'UO_2 irradié est décrit comme un matériau poreux contenant des nanocavités sphériques (cavités intragranulaires) et sphéroïdales (cavités intergranulaires), sous pression et orientées aléatoirement. L'effet de surface présent à l'échelle nanométrique est pris en compte via un modèle d'interface imparfaite cohérente entre la matrice et les cavités. Un modèle original fondé sur l'approche par motifs morphologiques représentatifs a été développé afin de décrire le comportement élastique effectif de ce milieu hétérogène. Le modèle analytique proposé repose sur des hypothèses simplificatrices dont la pertinence est évaluée à partir de simulations numériques par éléments finis qui s'appuient sur une formulation spécifique afin de tenir compte de la présence d'interfaces imparfaites cohérentes.

Mots-clefs : Matériaux nanoporeux, effet de surface, dioxyde d'uranium, combustible nucléaire, homogénéisation, élasticité.

Abstract

Modeling of the elastic behavior of nanoporous materials : application to UO_2 fuel

The irradiated uranium dioxide (UO_2), which is the nuclear fuel of pressurized water reactors, contains two populations of cavities saturated by fission gaz : i. intergranular cavities almost lenticular in shape whose size ranges between few tens to several hundred nanometers, ii. intragranular cavities, almost spherical in shape whose size is of the order of the nanometer. Recent studies have shown the existence of a surface effect at the scale of nanometric cavities, which influences the effective elastic behavior of the nuclear fuel. In this work, an analytical micromechanical model, which is able to take into account this heterogeneous microstructure and the surface effect at the nanometric scale, is proposed to describe the macroscopic behavior of the irradiated UO_2. The approach is based on a multiscale modeling and homogenization techniques in mechanics of materials. The irradiated UO_2 is described as a porous media, which contains pressurized spherical nanocavities (intragranular cavities) and randomly oriented pressurized spheroidal cavities (intergranular cavities). The surface effect is taken into account with imperfect coherent interfaces between the matrix and the cavities. A novel model based on the morphologically representative pattern approach has been developed to describe the effective elastic behavior of this heterogeneous medium. The proposed model relies on assumptions whose relevance is evaluated with finite element simulations which require a specific formulation to take into account the imperfect coherent interfaces.

Keywords: Nanoporous materials, surface effect, uranium dioxide, nuclear fuel, homogenization, elasticity.

Table des matières

Notations **15**

Introduction **17**

1 Contexte et problématique **23**
1 Contexte de l'étude 24
1.1 Fonctionnement des réacteurs à eau pressurisée 24
1.2 Le combustible nucléaire 25
1.3 Comportement du combustible en fonctionnement normal 27
1.4 L'accident d'insertion de réactivité 29
2 Le dioxyde d'uranium irradié 31
2.1 Microstructure 31
2.2 Comportement élastique de l'UO_2 : lois empiriques et modèles 33
2.3 Effet de surface à l'échelle nanométrique 37
3 Objectif, démarche et modélisation 37
3.1 Objectifs de la thèse 37
3.2 Démarche et principales hypothèses de modélisation 39
4 Bilan du chapitre 40

2 Techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire **41**
1 Méthodologie 42
2 Approche classique 44
2.1 Problème d'Eshelby 45
2.2 Estimations de Hashin et Shtrikman 46
2.3 Estimations de Ponte Casteñeda et Willis 47
3 Approche par motifs morphologiques représentatifs 49
3.1 Principe 49
3.2 Bornes de Voigt et Reuss généralisées 50
3.3 Estimations de Hashin et Shtrikman généralisées 50
4 Bilan du chapitre 53

3 Effet de surface à l'échelle nanométrique **55**
1 Généralités 56
2 Modélisation de la zone perturbée 57
2.1 Approches par interface 57

2.2 Approche par interphase . . . 59
2.3 Équivalence entre les approches . . . 61
3 Comportement élastique des matériaux nanoporeux : modèles existants . . . 61
3.1 Modèles avec interfaces imparfaites cohérentes . . . 62
3.2 Modèles avec interphases . . . 69
4 Bilan du chapitre . . . 70

4 Comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux 71
1 Définition des motifs . . . 72
2 Problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ . . . 74
3 Problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ . . . 78
4 Applications . . . 83
4.1 Nano-cavités sphériques . . . 83
4.2 Distribution sphéroïdale des centres des cavités . . . 86
4.3 Distribution de taille de cavités . . . 90
4.4 Nano-cavités sphéroïdales orientées aléatoirement . . . 94
4.5 Nano-cavités sphériques et sphéroïdales orientées aléatoirement . . . 97
5 Bilan du chapitre . . . 99

5 Influence des pressions internes et des tensions de surface 103
1 Nano-cavités sphériques . . . 104
1.1 Modélisation . . . 104
1.2 Applications . . . 109
2 Nano-cavités sphéroïdales . . . 112
2.1 Pressions internes . . . 113
2.2 Tensions de surface . . . 116
3 Bilan du chapitre . . . 121

6 Mise en œuvre numérique de l'approche par motifs 123
1 Objectif et démarche . . . 124
1.1 Objectif . . . 124
1.2 Formulation faible pour les interfaces imparfaites cohérentes . . . 125
1.3 Modélisation et démarche . . . 127
1.4 Validation . . . 130
2 Application . . . 135
2.1 Comparaison numérique/analytique du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ . . . 135
2.2 Comparaisons numérique/analytique des propriétés effectives . . . 139
3 Bilan du chapitre . . . 141

7 Application au dioxyde d'uranium irradié 143
1 Propositions de modèles . . . 144
1.1 Modèle simplifié . . . 144
1.2 Modèle complet . . . 146
2 Applications numériques . . . 148
2.1 Paramètres matériaux . . . 148
2.2 Étude de la sensibilité des modèles à la taille des cavités . . . 149

2.3 Application au RIA 153
3 Bilan du chapitre 156

Conclusion et perspectives **159**

A Éléments concernant le modèle de Vincent (2007); Vincent et al. (2009) **167**

B Tenseurs $\mathbb{S}^E$ et $\mathbb{N}$ **169**

C Géométrie différentielle des surfaces **171**

D Théorie des coques minces **179**

E Résolution du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ **185**
1 Chargement hydrostatique 185
2 Chargement déviatorique 186

Bibliographie **191**

Notations

Dans ce manuscrit, les scalaires sont notés en italique (a par exemple), les vecteurs et les tenseurs d'ordre deux en gras ($\boldsymbol{u}$ par exemple) et les tenseurs d'ordre quatre en « gras du tableau » ($\mathbb{C}$ par exemple).

Les tenseurs identités d'ordre deux et quatre sont notés respectivement $\boldsymbol{i}$ et $\mathbb{I}$. Les tenseurs de la base d'isotropie pour les tenseurs isotropes symétriques d'ordre quatre sont notés $\mathbb{J}$ et $\mathbb{K}$ où :

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3}\boldsymbol{i} \otimes \boldsymbol{i}, \quad \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}.$$

où l'opération « $\otimes$ » désigne le produit tensoriel. La trace est notée « Tr », le déterminant « det », le produit scalaire « $\cdot$ », le produit doublement contracté « : » et le produit quadruplement contracté « :: ». La transposée d'un vecteur ou d'un tenseur d'ordre deux $\boldsymbol{u}$ est notée ${}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}$. Les inverses d'un tenseur d'ordre deux $\boldsymbol{u}$ et d'un tenseur d'ordre quatre $\mathbb{C}$ sont notés respectivement $\boldsymbol{u}^{-1}$ et $\mathbb{C}^{-1}$. L'opérateur gradient est noté « grad » et la divergence « div ».

La moyenne d'un tenseur (d'ordre quelconque) sur le domaine ω (de dimension quelconque) est notée $\langle . \rangle_{\omega}$. La mesure d'un domaine ω est notée $|\omega|$.

Introduction

L'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) mène des actions de recherches et d'expertises sur les risques nucléaires et radiologiques. Il a notamment pour mission d'assurer un appui technique aux pouvoirs publics en matière de risques liés aux installations nucléaires. Dans ce cadre, le Service de Maîtrise des Incidents et des Accidents (SEMIA), au sein du Pôle Sûreté Nucléaire (PSN), effectue des recherches sur le comportement des combustibles des réacteurs nucléaires afin d'évaluer s'ils répondent aux exigences de sûreté.

Le laboratoire de Micromécanique et Intégrité des STructures (MIST) associe les moyens de recherche du Pôle Sûreté Nucléaire de l'IRSN et du Laboratoire de Mécanique et Génie Civil (LMGC), unité mixte de recherche de l'université de Montpellier et du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS). Le laboratoire MIST a pour objectifs de comprendre et prédire le comportement des matériaux hétérogènes et les effets des évolutions microstructurales qu'ils subissent dans des ambiances nocives caractérisées, par exemple, par de fortes sollicitations thermomécaniques, des transformations physico-chimiques, des phénomènes induits par l'irradiation. Ces sollicitations peuvent notamment être observées dans les cœurs de réacteurs nucléaires.

Ce travail s'inscrit dans le cadre du laboratoire commun MIST ainsi que dans celui des programmes de modélisation avancée, menés conjointement par l'IRSN et Électricité de France (EdF), concernant l'étude de l'accident de réactivité (RIA, *Reactivity Initiated Accident*) dans les réacteurs nucléaires à eau pressurisée (REP). Il est effectué au sein du Laboratoire de Physique et de Thermomécanique des Matériaux (LPTM) du SEMIA dont une des missions est de développer et maintenir à jour les connaissances sur le comportement du combustible des REP en situation normale, incidentelle ou accidentelle sur l'ensemble du cycle du combustible.

Le combustible des REP se présente sous forme de pastilles cylindriques en dioxyde d'uranium (UO_2), empilées dans des gaines en alliage de zirconium. L'ensemble forme un crayon combustible. La gaine est la première des trois barrières de sûreté contre le risque de dispersion de matières radioactives dans l'environnement. Son intégrité représente donc un enjeu fort, tant en fonctionnement normal qu'en situations accidentelles. Le logiciel SCANAIR, développé au LPTM, est un code de simulation du comportement thermomécanique du combustible des REP en situation de RIA. Il est notamment utilisé pour vérifier la validité des critères de sûreté et également pour permettre la préparation et l'interprétation d'essais expérimentaux. Ce code métier s'appuie sur un module de mécanique permettant de calculer les déformations des crayons combustibles. Ce module a besoin de modèles de comportement mécanique pour le combustible et la gaine.

Au cours de l'irradiation, la microstructure des matériaux évolue fortement. L'UO_2 contient initialement des macro-pores de fabrication, dont le nombre va progressivement diminuer au profit de deux autres populations de cavités pressurisées par des gaz de fission (essentiellement du xénon et du krypton). Ces cavités sont communément appelées bulles. Les bulles dites intergranulaires, dont la taille varie de quelques dizaines à plusieurs centaines de nanomètres, sont de forme aplatie et situées aux joints de grains. Les bulles intragranulaires, dont la taille est de l'ordre du nanomètre, sont plutôt de forme sphérique et situées à l'intérieur des grains.

Dans le cadre de la thèse de Vincent (2007), un modèle poroélastoplastique endommageable a été proposé pour décrire le comportement mécanique de l'UO_2 irradié en conditions de RIA. Des travaux de dynamiques moléculaires menés récemment à l'IRSN dans le cadre de la thèse de Colbert (2012) ont mis en évidence l'existence d'un *effet de surface* à l'échelle des bulles nanométriques dans l'UO_2. Cet effet, dû à la présence d'une zone perturbée de quelques rangées d'atomes entre les bulles nanométriques et la matrice (Paliwal et Cherkaoui, 2012), modifie le comportement élastique effectif du combustible. L'objectif de ce travail est d'établir un modèle analytique permettant de décrire le comportement poroélastique de l'UO_2 irradié et qui soit capable de prendre en compte l'effet de surface présent à l'échelle des bulles nanométriques.

Les évolutions microstructurales permanentes des matériaux utilisés dans le domaine nucléaire et l'impossibilité de réaliser des mesures expérimentales directes, du fait de l'ambiance nocive, conduisent naturellement à s'orienter vers la modélisation multi-échelles pour prédire le comportement mécanique effectif de ces matériaux au cours de leur séjour en réacteur. Les principaux modèles, outils et techniques mis en œuvre dans le cadre de ce travail sont :

i. **le modèle d'interface imparfaite cohérente.** Comme mentionné précédemment, l'effet de surface à l'échelle nanométrique est dû à la présence d'une zone perturbée de quelques rangées d'atomes entre les cavités et la matrice. Afin de développer des modèles micromécaniques capables de tenir compte de l'effet de surface, il est nécessaire de décrire le comportement de ce domaine dans le formalisme de la mécanique des milieux continus. L'une des approches envisageables est de faire appel à des modèles d'interface où la zone perturbée est décrite par une surface. Le modèle d'interface imparfaite cohérente (Gurtin et Murdoch, 1975) postule la continuité du déplacement et la discontinuité du vecteur contrainte à travers cette surface. Largement utilisé dans le cadre de l'étude du comportement des nanomatériaux, il s'avère être performant pour décrire l'effet de surface à l'échelle nanométrique (Mitrushchenkov et al., 2010; Yvonnet et al., 2011).

ii. **les techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire**. Elles permettent d'estimer ou de borner le comportement élastique *global* (ou *effectif*) des matériaux hétérogènes en utilisant les informations morphologiques disponibles sur leurs microstructures. L'approche mise en œuvre dans ce travail est *l'approche par motifs morphologiques représentatifs* initialement développée par Stolz et Zaoui (1991). Contrairement à l'approche dite *classique*, elle permet de tenir compte de l'arrangement local des phases. Cette information morphologique est de premier ordre pour les matériaux nanoporeux où les zones perturbées sont localisées spécifiquement entre les cavités et

la matrice. Dans le cadre de cette approche, les estimations de type *Mori et Tanaka généralisées* sont retenues pour cette étude. Ce choix relève essentiellement du fait que ces modèles sont généralement analytiques et simples à mettre en œuvre par rapport à des modèles de type *autocohérents généralisés* par exemple.

iii. **des simulations numériques de type éléments finis.** Les modèles micromécaniques développés reposent sur la solution de problèmes auxiliaires qui consistent à étudier le comportement mécanique des hétérogénéités des matériaux, des cavités dans le cas présent, lorsqu'elles sont entourées d'un milieu infini soumis à un chargement homogène à l'infini. Afin d'obtenir des modèles analytiques, la résolution de ces problèmes nécessite parfois de réaliser des hypothèses simplificatrices. De façon à vérifier la pertinence de ces hypothèses et d'identifier leurs limites, les problèmes auxiliaires sont également résolus numériquement à partir de simulation de type éléments finis. La présence d'interfaces imparfaites cohérentes nécessite néanmoins d'utiliser une formulation spécifique développée par Yvonnet et al. (2011).

Sur le plan théorique, l'apport principal de ce travail est un modèle micromécanique, fondé sur l'approche par motifs morphologiques représentatifs et sur le modèle d'interface imparfaite cohérente, permettant de décrire le comportement élastique effectif des matériaux poreux contenant des nano-cavités sphériques et sphéroïdales saturées dont la distribution des centres est ellipsoïdale.

Ce document s'articule autour de sept chapitres :

▷ Trois chapitres de contexte et bibliographie :

- **Chapitre 1 - Contexte et problématique.** Ce premier chapitre vise essentiellement à présenter le contexte industriel, la problématique ainsi que la démarche adoptée pour mener cette étude. Quelques données relatives au fonctionnement des réacteurs à eau pressurisée, au combustible nucléaire et à l'accident de réactivité sont fournies. La microstructure du dioxyde d'uranium irradié est présentée plus en détails et une partie est dédiée à la mise en évidence de l'effet de surface dans ce matériau. Finalement, la démarche et les principales hypothèses de modélisation sont présentées.
- **Chapitre 2 - Techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire.** Les méthodes de changement d'échelles permettant de déterminer le comportement élastique macroscopique des matériaux hétérogènes sont introduites dans ce chapitre. Une attention particulière est consacrée à la présentation de l'approche par motifs morphologiques représentatifs sur laquelle s'appuient les développements ultérieurs.
- **Chapitre 3 - Effet de surface à l'échelle nanométrique.** Ce chapitre a pour objectif de présenter l'effet de surface présent à l'échelle nanométrique : son origine, ses conséquences et les principales approches pour le modéliser du point de vue de la mécanique des milieux continus. Le modèle d'interface imparfaite cohérente, utilisé dans ce travail, y est notamment détaillé. Quelques modèles micromécaniques existants qui permettent de décrire le comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux sont ensuite présentés. L'accent est mis sur ceux fondés sur le modèle d'interface imparfaite cohérente.

▷ Trois chapitres de modélisation :

- **Chapitre 4 - Comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux.** L'approche par motifs est mise en œuvre dans ce chapitre afin de décrire le comportement élastique effectif des matériaux poreux contenant des nano-cavités sphériques et sphéroïdales. L'aspect nanométrique est pris en compte par l'intermédiaire du modèle d'interface imparfaite cohérente. Différentes bornes et estimations sont proposées pour les matériaux à cavités sphériques. Les modèles existants sont replacés dans le cadre théorique de l'approche par motifs qui permet de les étendre aisément à des microstructures plus complexes. En présence de nano-cavités sphéroïdales, seules des estimations du comportement macroscopique sont développées. Dans ce cas, les modèles reposent sur des hypothèses simplificatrices qui sont validées par la suite. Finalement, des exemples d'applications sont proposés afin d'illustrer les possibilités offertes par une telle approche.
- **Chapitre 5 - Influence des pressions internes et des tensions de surface.** Ce travail étant dédié à l'étude du comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux saturés, ce chapitre traite de la prise en compte de la pression exercée par d'éventuels gaz contenus dans les cavités. L'influence des pressions sur la contrainte macroscopique est pris en compte en introduisant des tenseurs de Biot usuellement mis en œuvre dans le cadre de l'étude du comportement mécanique des matériaux poreux saturés. Leurs expressions sont néanmoins réétablies afin de tenir compte de la taille nanométrique des cavités. La modélisation du comportement mécanique des zones perturbées introduit une précontrainte supposée isotrope dans le cadre de ce travail que l'on nomme aussi tension de surface. L'effet de cette précontrainte sur la contrainte macroscopique est également pris en compte dans ce chapitre à travers une démarche similaire à celle permettant de tenir compte des pressions internes.
- **Chapitre 6 - Mise en œuvre numérique de l'approche par motifs.** Comme précisé précédemment, les modèles développés au chapitre 4 pour prédire le comportement élastique effectif des matériaux contenant des nano-cavités sphéroïdales reposent sur des hypothèses simplificatrices afin d'obtenir des modèles analytiques simples à mettre en œuvre. Dans ce chapitre, une mise en œuvre rigoureuse de l'approche par motifs est réalisée de façon numérique. Les résultats obtenus sont ensuite comparés à ceux issus du modèle analytique afin d'évaluer la pertinence des simplifications réalisées.

▷ Un chapitre applicatif :

- **Chapitre 7 - Application au dioxyde d'uranium irradié.** Les résultats établis précédemment sont appliqués dans ce chapitre afin de déterminer le comportement élastique effectif du dioxyde d'uranium irradié. Deux modèles sont proposés. Ils sont comparés à la partie poroélastique du modèle de Vincent (2007) et Vincent et al. (2009). Dans un premier temps, une brève étude de sensibilité à la taille des cavités est réalisée, puis dans un second temps, une application à un transitoire de type RIA est présentée.

Ce document s'appuie également sur des annexes techniques qui regroupent des éléments concernant les modèles micromécaniques utilisés dans le cadre de ce travail (annexes A et

B), des compléments théoriques sur la géométrie différentielle des surfaces (annexe C) et la théorie des coques (annexe D), ainsi que des développements techniques (annexe E).

Chapitre 1

Contexte et problématique

Ce travail s'inscrit dans le cadre des études menées sur l'accident d'insertion de réactivité dans les réacteurs nucléaires à eau pressurisée. L'objectif est de développer un modèle de loi de comportement élastique pour le dioxyde d'uranium irradié qui soit capable de tenir compte de *l'effet de surface* présent à l'échelle nanométrique. Ce chapitre est essentiellement consacré à la description du contexte industriel, ainsi qu'à la présentation de la problématique et de la démarche adoptée. Dans un premier temps, quelques données relatives au fonctionnement des réacteurs à eau pressurisée et au combustible nucléaire sont fournies. La microstructure du dioxyde d'uranium irradié est ensuite décrite plus en détails. Une section est dédiée à la mise en évidence de *l'effet de surface* dans ce matériau. Finalement, la démarche et les principales hypothèses de modélisation mises en œuvre dans le cadre de cette étude sont présentées.

Sommaire

1 Contexte de l'étude 24
- 1.1 Fonctionnement des réacteurs à eau pressurisée 24
- 1.2 Le combustible nucléaire 25
- 1.3 Comportement du combustible en fonctionnement normal 27
- 1.4 L'accident d'insertion de réactivité 29

2 Le dioxyde d'uranium irradié 31
- 2.1 Microstructure 31
- 2.2 Comportement élastique de l'UO_2 : lois empiriques et modèles . . . 33
- 2.3 Effet de surface à l'échelle nanométrique 37

3 Objectif, démarche et modélisation 37
- 3.1 Objectifs de la thèse 37
- 3.2 Démarche et principales hypothèses de modélisation 39

4 Bilan du chapitre 40

1 Contexte de l'étude

La plupart des éléments présentés dans cette première section s'appuie sur les références suivantes : (Bailly et al., 1996; Baron et Bouffioux, 2002; Baron, 2002; Marguet, 2011; Vincent, 2007; Julien, 2008; Largenton, 2012).

1.1 Fonctionnement des réacteurs à eau pressurisée

La France dispose de 58 réacteurs nucléaires électrogènes en fonctionnement, répartis sur 19 centrales exploitées par Électricité de France (EdF), d'une puissance allant de 900 à 1400 MWe. Ils fournissent près de 80% de la production d'électricité française. Un réacteur nucléaire est un système de production d'énergie s'appuyant sur les principes des réactions nucléaires. L'essentiel des réacteurs de production d'électricité et particulièrement les réacteurs français, sont des réacteurs à neutrons thermiques [1] utilisant les réactions de fissions nucléaires. Après la seconde guerre mondiale, plusieurs concepts de réacteurs à neutrons thermiques ont été développés. Ces différentes filières sont caractérisées principalement par :

- un type de combustible qui peut être de l'uranium naturel, de l'uranium enrichi ou un mélange d'uranium appauvri et de plutonium (MOX, Mixed OXide fuel) ;
- un modérateur dont le rôle est de thermaliser [2] les neutrons ;
- un caloporteur dont le rôle est d'évacuer la chaleur produite au sein du combustible.

La filière des réacteurs à eau pressurisée (REP), développée au début des années 50, est aujourd'hui la seule utilisée en France pour les réacteurs électrogènes. Elle utilise des combustibles à l'uranium enrichi (UO_2) et des combustibles MOX. L'eau légère joue à la fois le rôle de modérateur et de caloporteur. Le fonctionnement des REP est représenté schématiquement sur la Figure 1.1.

Le principe de fonctionnement d'un réacteur à eau pressurisée repose essentiellement sur trois circuits : le circuit primaire (fermé) situé à l'intérieur de l'enceinte de confinement du bâtiment réacteur, le circuit secondaire (fermé) et le circuit de refroidissement (ouvert). L'eau du circuit primaire circule dans le cœur du réacteur, qui se situe dans la cuve. Les éléments combustibles du cœur sont le siège des réactions de fission qui permettent la production de chaleur. Au contact de ces éléments combustibles, l'eau du circuit primaire est portée à une température d'environ 320 °C. Elle est maintenue à l'état liquide à une pression de 155 bars par l'intermédiaire d'un pressuriseur. Dans les générateurs de vapeur (échangeurs thermiques), la chaleur contenue dans l'eau du circuit primaire est transmise à l'eau du circuit secondaire qui se vaporise. La vapeur permet d'entraîner une turbine. L'énergie mécanique ainsi produite est ensuite transformée en énergie électrique par un alternateur. À la sortie de la turbine, l'eau est refroidie, se condense grâce au condenseur et est renvoyée vers les générateurs de vapeur. Le circuit de refroidissement permet d'alimenter le condenseur et d'extraire la chaleur du circuit secondaire.

1. Neutrons *lents* dont l'énergie est inférieure à 0.025 eV (Baron, 2002).
2. Ralentir les neutrons rapides issus des fissions (dont l'énergie est de l'ordre de 2 MeV) pour les amener dans le domaine d'énergie thermique.

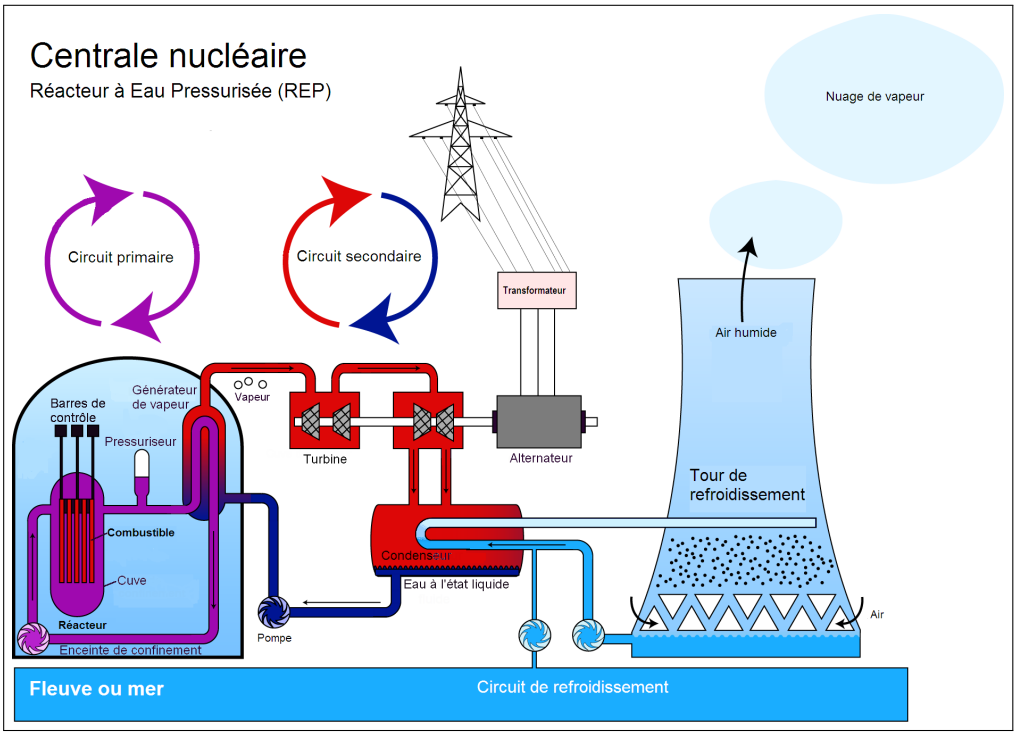


Figure 1.1 – *Représentation schématique du fonctionnement d'un réacteur nucléaire à eau pressurisée (figure tirée de fr.wikipedia.org, d'après l'œuvre originale de Steffen Kuntoff).*

Le circuit primaire et l'enceinte de confinement assurent respectivement les rôles de deuxième et troisième barrières de confinement des matières radioactives contenues dans le cœur du réacteur. La première barrière, la gaine des crayons combustibles, est présentée à la section 1.2.

1.2 Le combustible nucléaire

Le cœur du réacteur est constitué d'assemblages combustibles (Figure 1.2). Un assemblage combustible se présente sous la forme d'un réseau carré 17x17 de 264 crayons combustibles, de 24 tubes guides accueillant les barres de contrôle et d'un tube d'instrumentation central. L'assemblage est maintenu par des embouts inférieur et supérieur en acier inoxydable, deux grilles d'extrémité et 8 à 10 grilles intermédiaires. Le cœur d'un réacteur 900 MWe se compose d'un ensemble de 157 assemblages, soit plus de 40000 crayons.

Le crayon combustible (Figure 1.2) est composé d'une gaine en alliage de zirconium, dont le diamètre externe est de 9.50 mm et l'épaisseur de 0.570 mm, fermée à chaque extrémité par des bouchons soudés. Les pastilles de combustible sont empilées à l'intérieur de la gaine (environ 265 pastilles) et maintenues en haut par un ressort en Inconel. L'espace situé au niveau du ressort constitue un volume libre permettant l'expansion des gaz de fission relâchés hors du combustible. Il existe un jeu entre les pastilles et la gaine de l'ordre de 200 micromètres qui va diminuer au cours de l'irradiation jusqu'à se fermer. Le crayon a une hauteur d'environ 3.80 mètres. Initialement, il est pressurisé entre 15 et 31 bars avec de l'hélium, afin de limiter la différence de pression entre l'intérieur du crayon et l'extérieur

à 155 bars.

« Œuvre non reproduite par respect du droit d'auteur »

Figure 1.2 – *Assemblage et coupe d'un crayon combustible de réacteurs à eau pressurisée (d'après Bailly et al. (1996)).*

1.2.1 La pastille

Le combustible des REP se présente sous la forme de pastilles cylindriques (Figure 1.3) en dioxyde d'uranium enrichi (inférieur à 5 %) en noyaux fissiles (U_{235}) ou d'oxyde mixte d'uranium appauvri et de plutonium (combustibles MOX). Leur diamètre est de 8.2 mm et leur hauteur de 13.5 mm. Elles sont le siège des réactions de fission et produisent la chaleur qui permettra ensuite de produire de l'électricité. La forme d'oxyde donne au combustible une bonne résistance à la température et à l'irradiation. Cependant cette céramique poreuse est un très mauvais conducteur thermique et a un comportement mécanique fragile à basse température.

Pour des températures élevées, comme celles rencontrées lors d'un accident d'insertion de

réactivité, l'UO_2 a un comportement mécanique ductile. La zone de transition fragile-ductile se situe au environ de 1400 °C (Canon et al., 1971).

« Œuvre non reproduite
par respect du droit
d'auteur »

Figure 1.3 – *Coupe schématique d'une pastille de combustible (d'après Bailly et al. (1996)).*

1.2.2 La gaine

La gaine est la première barrière de sûreté contre le risque de dispersion de matières radioactives dans l'environnement. Elle participe également au maintien de la géométrie du cœur. Elle doit assurer ces fonctions en toutes circonstances et ce, malgré les fortes sollicitations auxquelles elle est soumise. Les matériaux de gainage utilisés en réacteur sont des alliages à base de zirconium. Ce choix technologique s'est imposé au début des années 50 du fait que le zirconium possède des propriétés déterminantes pour la fonction de gainage : très faible absorption des neutrons thermiques, bonne résistance mécanique et très bonne résistance à la corrosion par l'eau à haute température.

1.3 Comportement du combustible en fonctionnement normal

En fonctionnement normal, les pastilles se fissurent dès la première montée en température sous l'action du gradient thermique important (Figure 1.4(a)). En effet, la température des pastilles avoisine 1200 °C au centre et 450 °C en périphérie. Elles se dilatent et prennent également une forme de diabolo car la déformation d'origine thermique est plus importante au centre de ces dernières (Figure 1.4(b)).

Au cours de l'irradiation, les pastilles se densifient dans un premier temps. En effet, l'UO_2 possède initialement une porosité de fabrication et les plus petits pores disparaissent progressivement via deux phénomènes (Bailly et al., 1996) :

- l'interaction entre les pointes de fission et les petits pores ;
- la diffusion des lacunes qui atteignent les joints de grain, les gros pores ou les porosités ouvertes.

Il en résulte une diminution de la hauteur de la colonne fissile d'environ 0.25 % pour un taux de combustion supérieur à environ 5-10 GWj/t. Ensuite, les pastilles gonflent suite à l'apparition des produits de fission. En effet, les fissions libèrent en moyenne deux noyaux plus légers. Environ 30 % de ces produits de fission se trouvent sous forme gazeuse (xénon et krypton) ou volatile (I_2 et Cs). Les 70 % restant sont sous forme solide. La présence de ces produits de fission, dont la densité est nettement plus faible que celle de l'UO_2, provoque une variation de volume macroscopique appelée gonflement (Bailly et al., 1996). Deux types de gonflement sont observés :

- le gonflement solide dû aux produits de fission solides qui induit une variation de volume proportionnelle à la densité de fission et peu dépendante de la température (Bailly et al., 1996) ;
- le gonflement gazeux : les produits de fission gazeux forment des microbulles. Lorsque la puissance est suffisamment élevée, ces dernières se déplacent, par diffusion thermique, vers les porosités existantes et les joints de grains où elles coalescent. Dès que les microbulles interagissent avec les porosités ouvertes, il y a relâchement des produits de fission gazeux vers les volumes libres du crayon. Lors d'une augmentation importante de la température du combustible, entre 1400 et 1800 °C, les gaz piégés et non encore relâchés créent des suppressions locales, accroissant ainsi la taille des porosités et augmentant le volume du combustible (Bailly et al., 1996).

Progressivement le jeu entre la pastille et la gaine va diminuer sous l'action du gonflement du combustible et du fluage sous irradiation de la gaine (sous l'action de la pression extérieure du caloporteur). La fermeture du jeu et la forme de diabolo des pastilles entrainent l'apparition de plis primaires (Figure 1.5). Lorsque le jeu est fermé et après quelques cycles en réacteur, les pastilles imposent leurs déformations à la gaine.

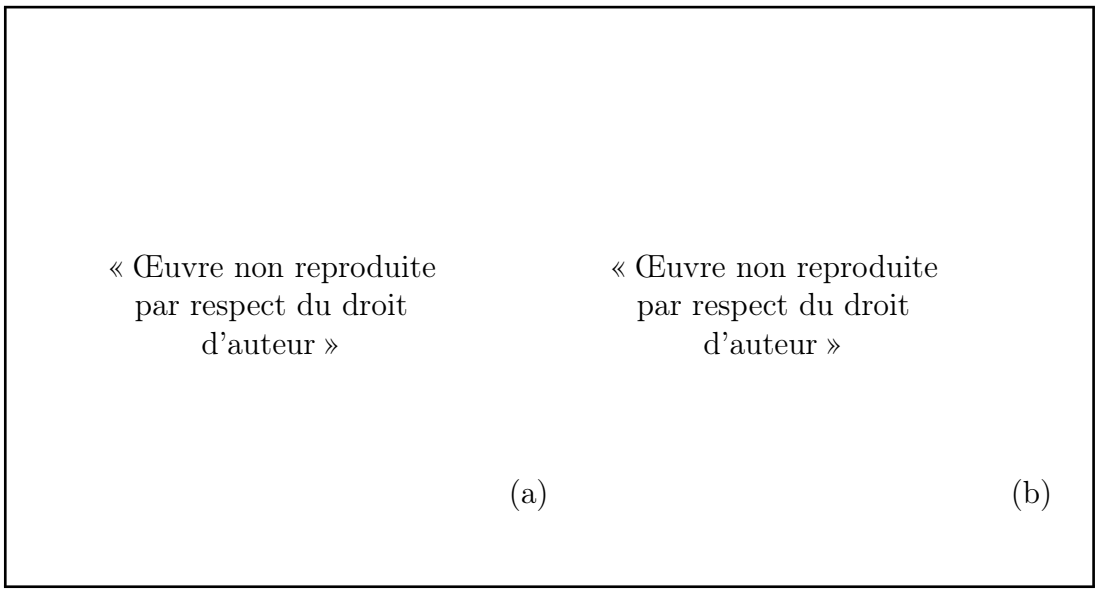


Figure 1.4 – *(a) Macrographie de pastille de combustible de réacteur à eau pressurisée fissurée par gradient thermique et (b) schéma de la forme de diabolo vers laquelle tend une pastille de combustible sous l'effet des contraintes thermiques (d'après Bailly et al. (1996)).*

« Œuvre non reproduite par respect du droit d'auteur »

Figure 1.5 – *Schéma retracant l'évolution du jeu entre pastilles et gaine au cours de son utilisation nominale et lors d'un transitoire de puissance (d'après Bailly et al. (1996)).*

Les phonèmes précédents sont modélisés dans le code FRAPCON (Geelhood et Luscher, 2014) développé par la NRC (U.S. Nuclear Regulatory Commission) et utilisé par l'IRSN pour déterminer la réponse thermomécanique des crayons combustibles des REP en fonctionnement nominal. Ce code est notamment capable d'évaluer les températures, les déformations, la pression interne, la quantité de gaz de fission relâchée et l'oxydation de la gaine des crayons combustibles.

1.4 L'accident d'insertion de réactivité

L'accident d'insertion de réactivité (RIA) est un accident de dimensionnement de catégorie 4 pour les REP, dont la probabilité d'occurrence est inférieure à 10^{-4}/an. Il correspond à une évolution incontrôlée de la réaction nucléaire. L'événement initiateur, qui conduit à l'accident enveloppe pour ce type de transitoires, est la rupture mécanique d'un carter de grappe de commande. À cause de la différence de pression entre le circuit primaire (155 bars) et l'enceinte de confinement (pression atmosphérique), la grappe est alors éjectée.

Les grappes de commande sont constituées de barres de contrôle. Ces éléments neutrophages servent à contrôler la réaction nucléaire. La conséquence de l'éjection d'une grappe est l'augmentation rapide (de l'ordre de 10 ms) de la réactivité. Cela conduit à une augmentation locale et importante de la puissance dans le cœur. La température du combustible augmente fortement (de l'ordre de 10^4 K/s) et une forte dilatation thermique des pastilles est observée. Le jeu entre les pastilles et la gaine se ferme (si cela n'est pas déjà le cas). Il en résulte une interaction forte entre ces dernières appelée PCMI (pellet-cladding mechanical interaction, Figure 1.5 : *transitoire de puissance*) qui peut conduire à une rupture fragile de la gaine. En effet, à ce stade du transitoire, la température de la gaine est encore relativement faible. Les fissures observées sont longues et orientées dans la direction axiale du

crayon (Figure 1.6(a)). Ce mode de rupture, à faible température, est surtout observé sur des combustibles à forts taux de combustion. En effet, au cours de l'irradiation, l'apparition d'hydrures en périphérie extérieure de la gaine conduit à une diminution de la ductilité de la gaine et facilite donc les ruptures fragiles.

Si la gaine ne rompt pas, sa température augmente à cause du flux thermique important provenant de la colonne fissile. L'apparition d'un film de vapeur peut alors être observée au niveau de la paroi extérieure de la gaine. Le transfert thermique entre cette dernière et le fluide caloporteur diminue et la température de la gaine continue d'augmenter. Elle se déforme alors de façon plus importante. Si cette phase à haute température se prolonge, le relâchement de gaz de fission dans les volumes libres du crayon devient important. Ces gaz exercent alors une forte pressions sur la paroi intérieure de la gaine du crayon. Un ballonnement de la gaine peut alors être observé conduisant éventuellement à sa rupture. Ce type de défaillance est qualifiée de *post-DNB* (*Departure from Nucleate Boiling*) car il intervient après le départ de l'ébullition nucléée. Les fissures post-DNB sont axiales et de petites tailles (Figure 1.6(b)). S'il n'y a pas de défaillance du gainage et que la température continue d'augmenter, les pastilles peuvent alors entrer en fusion. Dans ces conditions, il est fortement probable d'aboutir à une rupture de la gaine.

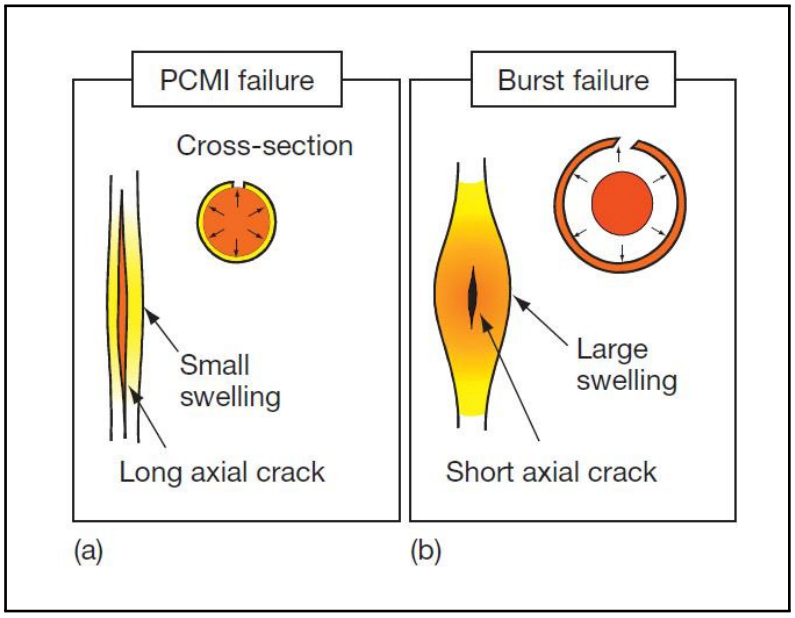


Figure 1.6 – *Principaux modes de rupture de la gaine en RIA : (a) Rupture PCMI, (b) ballonnement (d'après Fuketa (2012)).*

Le comportement thermomécanique d'un crayon combustible de REP lors d'un RIA est modélisé par le code SCANAIR (Système de Codes pour l'ANalyse d'Accidents d'Insertion de Réactivité) développé à l'IRSN (Moal et al., 2014; Georgenthum et al., 2014). Ce code a vocation à préciser les conditions de perte d'intégrité des gaines, établir et vérifier les critères de sûreté. Il permet également l'interprétation de résultats d'essais expérimentaux. Il s'appuie sur :

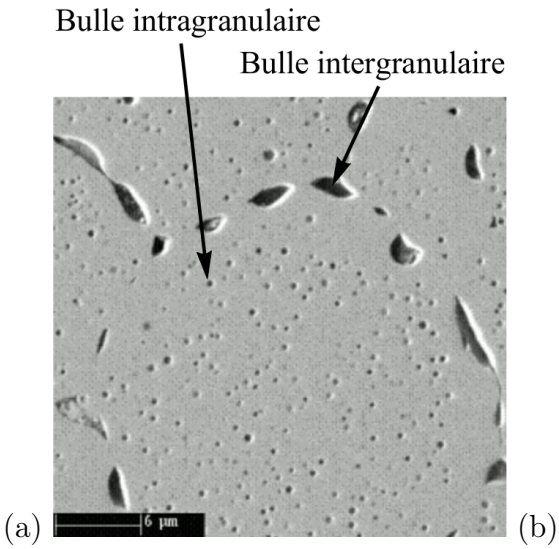
- un module de thermique qui calcule la conduction radiale dans le combustible et la gaine, ainsi que les transferts de chaleur vers le fluide réfrigérant ;
- un module qui calcule le gonflement des bulles de gaz de fission, la rupture des joints de grains à l'intérieur du combustible et l'écoulement des gaz vers les volumes libres ;
- un module de mécanique qui calcule les différents types de déformations du combustible (thermique, élastique, plastique, relative aux fissures ou au gonflement dû aux gaz de fission) conduisant à la déformation voire la rupture de la gaine en tenant compte de l'état de corrosion de celle-ci.

2 Le dioxyde d'uranium irradié

2.1 Microstructure

Il a été mentionné précédemment qu'au cours de l'irradiation, des cavités saturées par des gaz de fission (essentiellement xénon et krypton), appelées bulles, apparaissent dans le combustible. On distingue deux populations de bulles : les intragranulaires et les intergranulaires (Figure 1.7 et Figure 1.8).

« Œuvre non reproduite par respect du droit d'auteur »



(a) (b)

Figure 1.7 – *Bulles intragranulaires : (a) UO_2 irradié à 38.8 GW j/t après rampe à 1200 °C Yagnik et al. (2004), (b) UO_2 irradié à 23 GW j/t porté à 2000 K pendant 3 h environ (Dubourg et al., 2005).*

Les bulles intragranulaires sont situées à l'intérieur des grains. Elles sont de forme plutôt sphérique et de taille nanométrique. Elles apparaissent selon des lignes droites car leur nucléation se produit dans le sillage des fragments de fission (Lösönen, 2000; Turnbull, 1971; Cornell et al., 1969; Cornell, 1971; Baker, 1977a,b). Néanmoins, Kashibe et al. (1993)

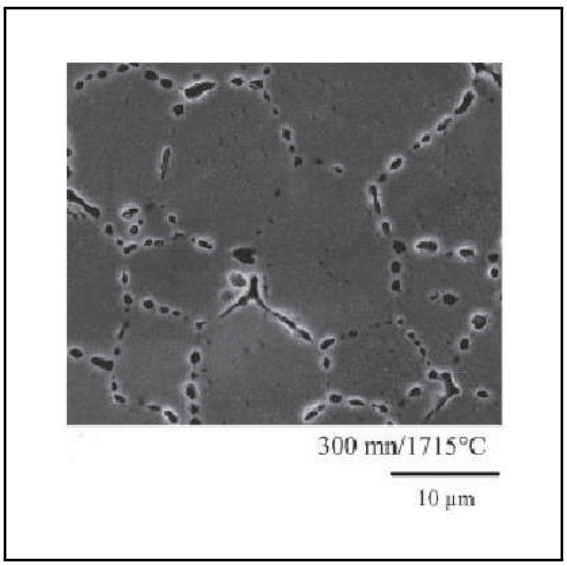


Figure 1.8 – *Bulles intergranulaires : UO_2 irradié à 25 GW j/t porté à 1700 °C pendant 300 min environ (Zacharie et al., 1998).*

montrent que pour de l'UO_2 irradié à 23 GWj/t, les bulles intragranulaires sont réparties de façon homogène. Leur diamètre est compris entre 1 et 10 nm et leur densité est de l'ordre de 10^{23} m^{-3} (Lösönen, 2000; Turnbull, 1971; Cornell et al., 1969; Kashibe et al., 1993; Ray et al., 1991) pour une distribution de taille plutôt étroite (Lösönen, 2000; Cornell et al., 1969; Cornell, 1971; Kashibe et al., 1993; Ray et al., 1991).

La densité et la taille des bulles sont presque indépendantes du taux de combustion (Lösönen, 2000). Cependant, la taille augmente et la concentration diminue lorsque :

- la température augmente ;
- le taux de fission diminue ;
- le taux de combustion augmente.

Baker (1977a) a mesuré les densités et les tailles moyennes des bulles intragranulaires en fonction de la température pour de l'UO_2 irradié. Les résultats sont représentés sur la Figure 1.9.

Pour des taux de combustion et/ou des températures élevés, une seconde population de bulles intragranulaires apparait. Elles ont un diamètre plus important, 10-20 nm (Kashibe et al., 1993) ($5 - 30$ nm (Ray et al., 1991)), une concentration plus faible, 10^{21} m^{-3} et sont souvent situées près des dislocations (Lösönen, 2000; Baker, 1977a; Ray et al., 1991; Matzke et al., 1989).

Kashibe et al. (1993) ont mis en évidence des bulles intragranulaires d'un diamètre moyen de 2.2 nm dont la densité est de 9.10^{23} m^{-3} pour de l'UO_2 irradié à 23 GWj/t. Ils ont également montré que, pour de l'UO_2 irradié à 44 et 83 GWj/t, des bulles de taille comprise entre 10 et 20 nm apparaissent en plus de celle de 2 nm. Pour de l'UO_2 irradié à 44 GWj/t, le diamètre moyen des bulles est de 3.9 nm et leur concentration est de 7.10^{23} m^{-3} et pour de l'UO_2 irradié à 83 GWj/t, le diamètre moyen est de 4.7 nm et la concentration est de 4.10^{23} m^{-3}. La concentration des bulles de taille comprise entre 10 et 20 nm augmente avec le taux de combustion. La distribution est monomodale, pour l'UO_2 irradié à 23 GWj/t, et

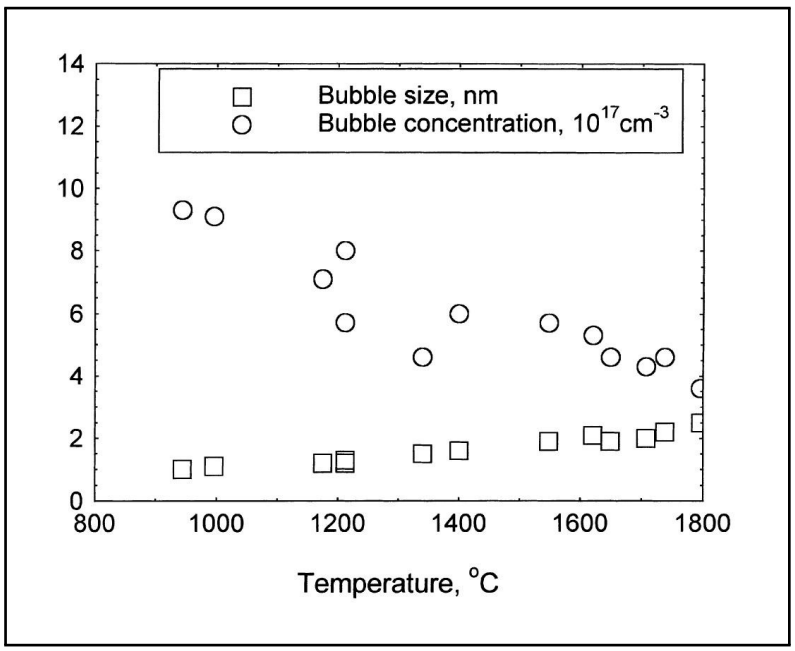


Figure 1.9 – *Évolution de la densité et de la taille moyenne des bulles intragranulaires en fonction de la température pour de l'UO_2 irradié, d'après les mesures de Baker (1977a) (d'après Lösönen (2000)).*

devient ensuite bimodale à des taux de combustion plus élevés (83 GWj/t) (Kashibe et al., 1993).

Il est à noter que certains codes de calculs, tel le code MFPR (Veshchunov et al., 2006) développé par l'IRSN, permettent de calculer l'évolution de la taille des bulles intragranulaires dans le combustible lors de son séjour en réacteur ainsi que leur concentration.

D'après Kashibe et Une (1991), pour de l'UO_2 à 28 GWj/t, les bulles intergranulaires, situées aux joints de grains, sont aplaties, ont une longueur moyenne de 229 nm et couvrent environ 10.1 % de la surface des joints de grain.

2.2 Comportement élastique de l'UO_2 : lois empiriques et modèles

Dans cette section sont présentés, de façon non-exhaustive, quelques lois et modèles permettant de déterminer le comportement élastique du dioxyde d'uranium. Dans un premier temps, des lois empiriques sont présentées et comparées. Dans un second temps, le modèle proposé par Vincent (2007) et Vincent et al. (2009) pour les matériaux poreux saturés à deux populations de cavités est décrit. Le modèle permettant de décrire l'équilibre mécanique des interfaces entre les bulles et la matrice d'UO_2 est également présenté.

2.2.1 Quelques lois empiriques

Dans la suite, les modules de Young et de cisaillement de l'UO_2 sont notés respectivement E et μ (exprimés en GPa). La porosité globale est notée f. Les modules de Young et de cisaillement de la matrice d'UO_2 sans porosité ($f = 0$) sont notés E_m et μ_m (exprimés en GPa).

Lassmann et Moreno (1977) proposent la loi empirique suivante (par comparaison à des essais expérimentaux) pour les propriétés élastiques de l'UO_2 vierge (d'après Moal (2014)) :

$$E = (1 - 2.6f)(224.3 - 31.19 \times 10^{-3}T), \quad \mu = \frac{(1 - 2.6f)(224.3 - 31.19 \times 10^{-3}T)}{2(1 + 0.325(1 - f))} \tag{1.1}$$

où la températures T est exprimée en °C.

Martin (1989) propose la loi empirique suivante (par comparaison à des essais expérimentaux) pour les propriétés élastiques de l'UO_2 vierge :

$$E = 223(1 - 2.5f)(1 - 1.32\,10^{-4}T), \quad \mu = 84(1 - 2.25f)(1 - 1.32\,10^{-4}T) \tag{1.2}$$

pour des températures T en °C ($T < 1500$ °C) et des porosités de fabrication f comprises entre 0 et 30 %.

À partir de résultats d'essais de type micro-acoustique et de modélisations micromécaniques, Gatt et al. (2005) ont proposé la loi semi-empirique suivante :

$$E = E_m(1 - 2.62f), \quad \mu = \mu_m(1 - 2.48f) \tag{1.3}$$

avec

$$\begin{aligned} E_m &= 2.2693 \times 10^2 - 1.5399 \times 10^{-2}T - 9.597 \times 10^{-6}T^2, \\ \mu_m &= 85.83 - 5.157 \times 10^{-3}T - 3.747 \times 10^{-6}T^2 \end{aligned} \tag{1.4}$$

pour des porosités f comprises entre 0 et 20 %. La température T est exprimée en Kelvin (K).

La Figure 1.10 présente les évolutions des modules de Young et de cisaillement de l'UO_2 en fonction de la porosité f d'après les lois empiriques de Martin (1989), Gatt et al. (2005) et de Lassmann et Moreno (1977) à une température de 1000 °C. Les résultats issus de ces trois lois sont en très bon accord.

2.2.2 Modèles de loi de comportement pour l'UO_2

Modèle de Vincent (2007) et Vincent et al. (2009) :

Vincent (2009) et Vincent et al. (2009) ont proposé un modèle capable de prédire le comportement macroscopique de matériaux poreux à deux populations de cavités saturées, tel que l'UO_2 irradié. La première population est composée de cavités sphériques (cavités intragranulaires) et la seconde est composée de cavités ellipsoïdales aplaties (*oblates*, ellipsoïdes de révolutions autour de leur petit axe) orientées aléatoirement (cavités intergranulaires). Les cavités ellipsoïdales sont supposées être de grandes tailles devant les cavités sphériques. Ainsi, une hypothèse de séparation d'échelles entre les deux populations de cavités peut être faite et les propriétés élastiques macroscopiques de notre matériau peuvent être obtenues par deux changements d'échelles successifs :

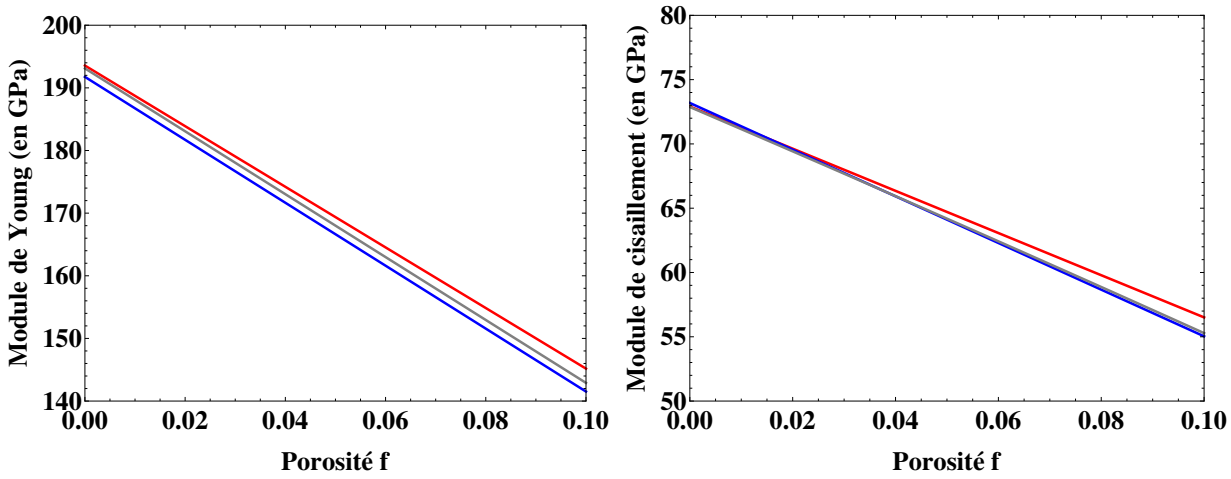


Figure 1.10 – *Évolutions des modules de Young (à gauche) et de cisaillement (à droite) de l'UO_2 en fonction de la porosité f pour une température fixée 1000 °C. En rouge : loi de Martin (1989), en bleu : loi de Gatt et al. (2005), en gris : loi de Lassmann (Lassmann et Moreno, 1977).*

- les propriétés effectives d'un milieu constitué d'une matrice et de cavités sphériques sont d'abord déterminées (premier changement d'échelle) ;
- les propriétés effectives d'un milieu constitué d'une matrice et de cavités ellipsoïdales aplaties sont ensuite déterminées. Lors de ce second changement d'échelle, les propriétés de la matrice correspondent aux propriétés effectives identifiées lors du premier changement d'échelle.

Ce double changement d'échelles est illustré schématiquement sur la Figure 1.11.

Les notations de Vincent (2007) sont reprises. Le module de compressibilité de la matrice d'UO_2 dense (sans porosité) est noté k_m. La fraction volumique des cavités sphériques est notée f_b et celle des cavités ellipsoïdales aplaties est notée f_e. Les cavités sphériques et ellipsoïdales aplaties sont respectivement saturées aux pressions p_b et p_e uniformes. Parmi les modèles de Vincent (2007), celui correspondant au comportement élastique d'un tel matériau biporeux saturé s'écrit :

$$\mathbf{\Sigma} = \mathbb{C}_2^{\text{hom}} : \mathbf{E} - b_2 p_e \boldsymbol{i} + (b_2 - 1) b_1 p_b \boldsymbol{i} \tag{1.5}$$

où $\mathbf{\Sigma}$ et $\mathbf{E}$ représentent respectivement la contrainte macroscopique et la déformation macroscopique. Le tenseur de rigidité effectif $\mathbb{C}_2^{\text{hom}}$ (isotrope) peut être décomposé en partie sphérique et en partie déviatorique :

$$\mathbb{C}_2^{\text{hom}} = 3k_2^{\text{hom}} \mathbb{J} + 2\mu_2^{\text{hom}} \mathbb{K}. \tag{1.6}$$

Les modules de compressibilité k_2^{hom} et de cisaillement μ_2^{hom} sont données à l'annexe A. Les coefficients b_1 et b_2 relatifs aux tenseurs de Biot et les coefficients k_1^{hom} et μ_1^{hom} relatifs au premier changement d'échelles s'expriment de la façon suivante :

- $b_1 = 1 - \dfrac{k_1^{\text{hom}}}{k_m}, \quad b_2 = 1 - \dfrac{k_2^{\text{hom}}}{k_1^{\text{hom}}}$

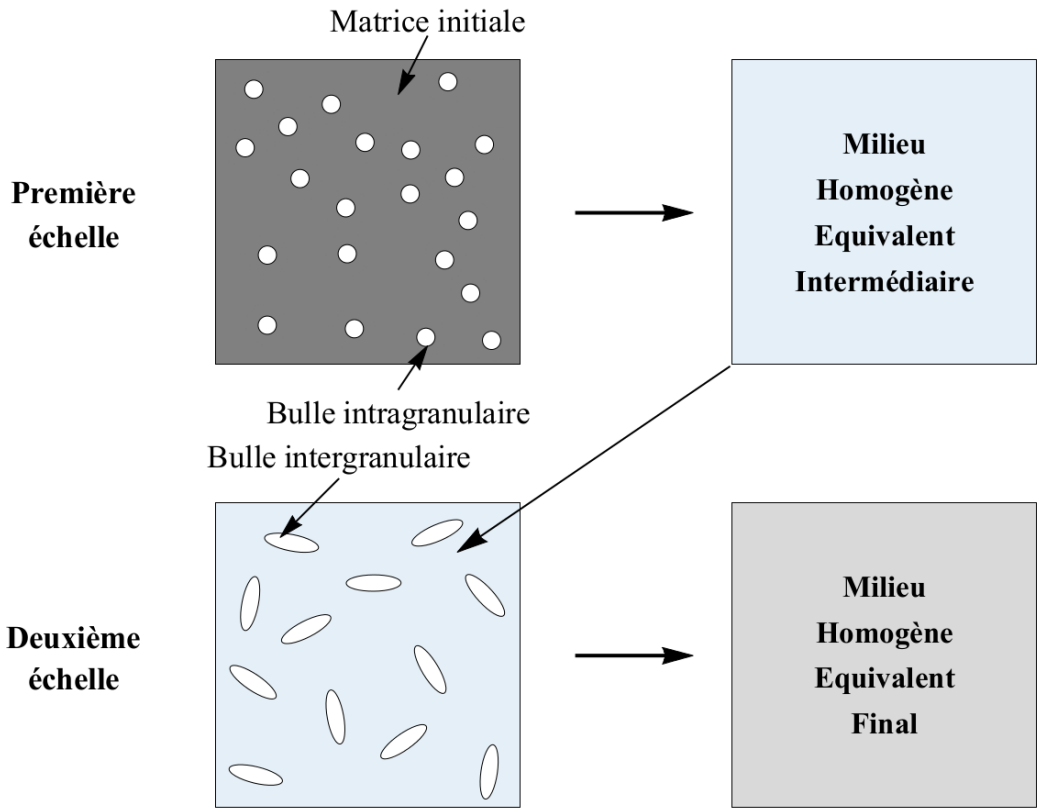


Figure 1.11 – *Démarche multi-échelles suivie dans le cadre des travaux de Vincent (2007).*

- $k_1^{\text{hom}} = \dfrac{4(1-f_{br})k_m\mu_m}{3f_{br}k_m + 4\mu_m}, \quad \mu_1^{\text{hom}} = \dfrac{(1-f_{br})\mu_m(9k_m + 8\mu_m)}{(9+6f_{br})k_m + 4(2+3f_{br})\mu_m)}$

Dans le cadre de ce modèle, la porosité f_{br} désigne la porosité (*relative*) des cavités sphériques à la première échelle. La porosité absolue des cavités sphériques f_b (égale au volume occupé par les cavités sphériques sur le volume total du matériau) et la porosité *relative* sont reliées de la façon suivante :

$$f_{br} = \frac{f_b}{1-f_e} \tag{1.7}$$

Équilibre mécanique des interfaces entre les cavités et la matrice d'UO_2 :

L'équilibre mécanique des interfaces entre les cavités et la matrice d'UO_2 est généralement décrit par l'équation de Laplace (Moal, 2014). Dans le cas de cavités sphériques, la condition d'équilibre à l'interface s'écrit :

$$p_m = p_b - \frac{2\gamma}{r_b} \tag{1.8}$$

où γ est la tension de surface (en J/m^2 ou N/m), r_b le rayon de la cavité sphérique et p_b la pression dans la cavité. Le scalaire p_m désigne la *pression* dans la matrice à l'interface. Cela se traduit par la condition aux limites suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}) = -p_m\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}) = -\big(p_b - \frac{2\gamma}{r_b}\big)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Gamma \tag{1.9}$$

avec $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes dans la matrice, Γ l'interface cavité/matrice et $\boldsymbol{n}$ la normale unitaire à Γ au point $\boldsymbol{x}$ considéré et orientée vers l'extérieur de la matrice (vers la cavité). Tenir compte de la tension de surface revient alors à soustraire $2\gamma/r_b$ à la pression dans les cavités.

Pour les interfaces entre les cavités lenticulaires et la matrice d'UO_2, la *pression* p_m dans la matrice à l'interface est égale à :

$$p_m = p_e - \frac{2\gamma \sin\theta}{b} \tag{1.10}$$

où l'angle θ est fixé à 50° (Moal, 2014). Le scalaire b désigne le rayon de la lentille et p_e la pression dans la cavité lenticulaire.

2.3 Effet de surface à l'échelle nanométrique

Les travaux, menés au SEMIA de l'IRSN en partenariat avec le CINaM (Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille) et AREVA dans le cadre de la thèse de Colbert (2012), ont montré l'existence d'un effet de surface à l'échelle des bulles intragranulaires qui impacte de façon significative les propriétés élastiques de l'UO_2. À partir de simulations numériques réalisées à l'échelle atomique (sur des cellules semblables à celles présentées sur la Figure 1.12), Jelea et al. (2011) et Colbert (2012) ont étudié l'influence du nombre de cavités de taille nanométrique (de 0 à 8 cavités) dans une cellule d'UO_2 sur le module de compressibilité effectif lorsque la porosité est constante. Ainsi, lorsque le nombre de cavités augmente, leur taille diminue et le nombre d'atomes à proximité des interfaces matrice/cavité augmente également. D'après la Figure 1.13, le module de compressibilité effectif de la cellule dépend significativement du nombre d'atomes en surface et par conséquent de la taille des cavités. Lorsque le nombre d'atomes augmente, le module de compressibilité augmente également.

Colbert (2012) souligne que la porosité n'est pas un paramètre morphologique suffisant pour les modèles permettant de déterminer les propriétés effectives de l'UO_2 irradié. Ceux-ci doivent être enrichis par des paramètres permettant de tenir compte de l'effet de surface (*« la modélisation de la porosité ne doit pas se limiter à la prise en compte du seul volume vide créé par la cavité, mais doit également inclure l'effet de surface. »*, Colbert (2012)).

3 Objectif, démarche et modélisation

3.1 Objectifs de la thèse

Comme cela a été présenté à la section 2.3, les travaux de Colbert (2012) mettent en évidence un effet de surface à l'échelle des cavités intragranulaires dans l'UO_2. L'impact de cet effet de surface sur les propriétés élastiques effectives semble non-négligeable. L'objectif principal de ce travail est donc de développer une loi de comportement évolutive pour l'UO_2 irradié capable de tenir compte de la microstructure hétérogène présentée à la section 2.1, ainsi que l'effet de surface présent à l'échelle des bulles nanométriques. Cette loi doit être analytique et simple à mettre en œuvre dans les codes de modélisation du comportement thermomécanique du combustible tel que SCANAIR, en particulier pour préserver une certaine rapidité de calcul.

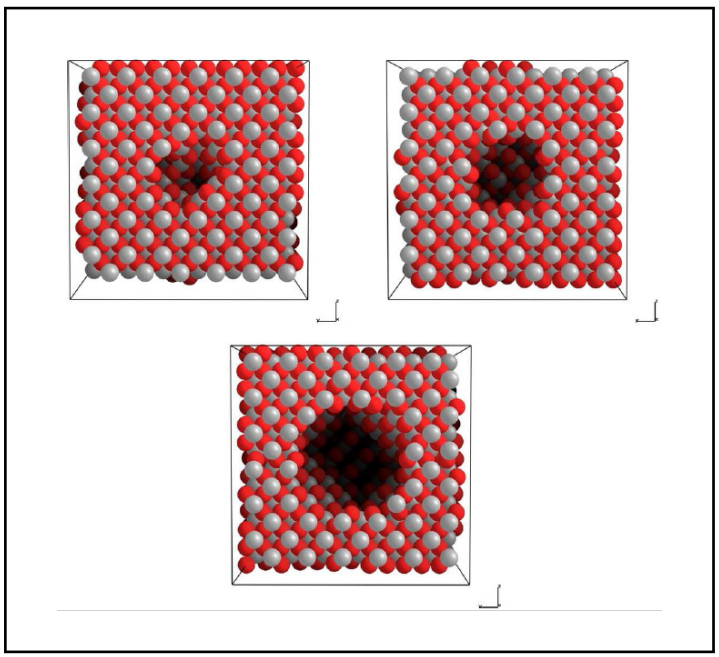


Figure 1.12 – *Exemple de cellules utilisées par Colbert (2012) pour déterminer les propriétés élastiques de l'UO_2 - tailles des cavités : 4, 6 et 8 Å (d'après Colbert (2012)).*

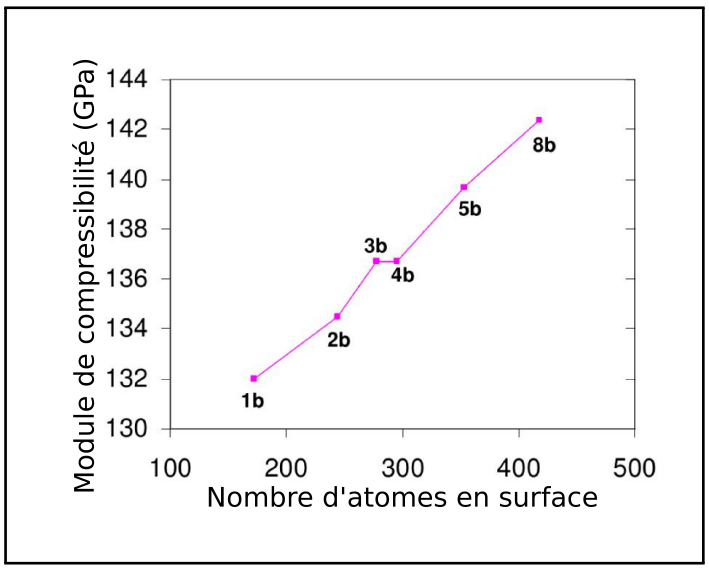


Figure 1.13 – *Impact du nombre de cavités dans une cellule de porosité constante (f=0,08) sur le module de compressibilité effectif (d'après Colbert (2012))*

D'une façon générale, le comportement mécanique de l'UO_2 irradié en situation de RIA est poroélastoplastique endommageable. Néanmoins le travail suivant se limite à l'étude de la poroélasticité :

- avant d'envisager une étude du comportement non linéaire du matériau, il est apparu judicieux de commencer par la prise en compte des effets de surface sur le comportement élastique global ;
- pour l'heure, la mise en évidence (numérique et expérimentale) des effets de surface à

l'échelle nanométrique est essentiellement axée sur le comportement élastique (Miller et Shenoy, 2000; Cuenot et al., 2004; Diao et al., 2004; Yvonnet et al., 2011).

3.2 Démarche et principales hypothèses de modélisation

La démarche mise en œuvre pour développer un modèle capable de prédire le comportement élastique macroscopique de l'UO_2 irradié est fondée sur une modélisation multi-échelles, similaire à celle de Vincent (2007) et Vincent et al. (2009), ainsi que sur des techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire (chapitre 2). Elle est représentée schématiquement sur la Figure 1.14.

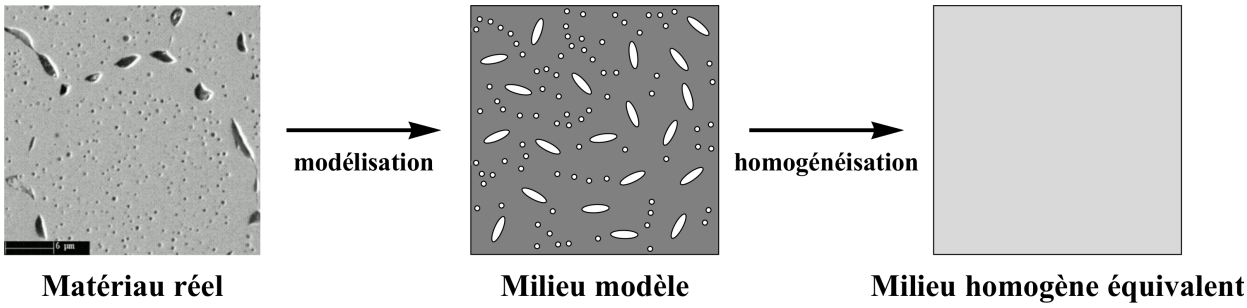


Figure 1.14 – *Représentation schématique de la démarche adoptée pour établir le modèle capable de prédire le comportement mécanique macroscopique de l'UO_2 irradié.*

Modélisation

La première étape consiste à préciser les hypothèses de modélisation utilisées et à définir un *milieu modèle* pour décrire le matériau réel. Il a été montré à la section 2.1 que l'UO_2 irradié est un matériau contenant deux populations de cavités saturées par des gaz de fission. La première population est formée de cavités intragranulaires plutôt sphériques, réparties de façon homogène et dont la taille est de l'ordre de quelques nanomètres. La seconde est constituée de cavités intergranulaires de forme lenticulaire dont la taille varie de quelques dizaines à quelques centaines de nanomètres. Comme dans les travaux de Vincent (2007), l'UO_2 irradié est représenté par un milieu composé d'une matrice, indicée m, dont le comportement est élastique linéaire isotrope (caractérisé par un module de compressibilité k_m et un module de cisaillement μ_m) et dans laquelle sont insérées :

- des cavités sphériques de **même taille** représentant les cavités intragranulaires ;
- des cavités ellipsoïdales aplaties (*oblates*) de **même taille**, même forme, **orientées aléatoirement** représentant les cavités intergranulaires.

Le rayon des cavités sphériques est noté r_b. Les cavités sphéroïdales sont caractérisées par les longueurs a et b des demi-axes (a est la longueur du demi-axe porté par l'axe de révolution). Le rapport de forme w de l'ellipsoïde de révolution est défini par a/b ($w < 1$ cavité aplatie ou *oblate*, $w > 1$ cavité allongée ou *prolate*, $w = 1$ cavité sphérique). La distribution des centres des cavités est supposée homogène et isotrope. Les cavités sphériques sont pressurisées à la pression p_b et les cavités sphéroïdales à la pressions p_e.

La modélisation doit encore être enrichie par un modèle permettant de décrire, du point de vue de la mécanique des milieux continus, l'effet de surface présent à l'échelle nanométrique. Cela sera l'objet du chapitre 3.

Il est d'ores et déjà remarquable que l'hypothèse d'orientation aléatoire des cavités intergranulaires peut être forte pour le cas du matériau réel.

Homogénéisation

Une fois le milieu modèle décrit, son comportement mécanique macroscopique doit être déterminé. Pour cela, le comportement élastique du *milieu homogène équivalent* à ce milieu hétérogène, c'est-à-dire le milieu homogène qui, lorsqu'il est soumis aux mêmes sollicitations, à la même réponse élastique macroscopique que le matériau hétérogène, doit être déterminé. Les outils mis en œuvre sont des techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire et plus particulièrement l'approche par motifs morphologiques représentatifs de Stolz et Zaoui (1991) (cf. chapitre 2, section 3) qui a l'avantage de permettre la prise en compte de l'arrangement local des phases.

Cette étude poursuit les travaux de Vincent (2007) et Vincent et al. (2009) :

- en tenant compte de l'effet de surface présent à l'échelle des cavités nanométriques ;
- en ne faisant pas d'hypothèse spécifique de séparation des échelles : le comportement élastique du milieu homogène équivalent est identifié par l'intermédiaire d'un unique changement d'échelle.

4 Bilan du chapitre

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la modélisation avancée du comportement du dioxyde d'uranium irradié lors d'un accident d'insertion de réactivité dans les réacteurs à eau pressurisée. Ce matériau hétérogène contient en première approximation deux populations de cavités saturées par des gaz de fission : i. des cavités intragranulaires plutôt sphériques et de taille nanométrique, ii. des cavités intergranulaires de forme lenticulaire dont la taille varie de quelques dizaines à plusieurs centaines de nanomètres. De plus, Jelea et al. (2011) et Colbert (2012) ont montré, à partir de simulations numériques à l'échelle atomique, qu'il existe un effet de surface à l'échelle des cavités nanométriques dans l'UO_2. L'objectif de ce travail est donc de développer une loi de comportement évolutive pour l'UO_2 irradié capable de tenir compte de cette microstructure hétérogène et de cet effet de surface présent à l'échelle nanométrique. Le présent travail se concentre sur le comportement en poroélasticité linéaire. La démarche de cette étude peut être décomposée en deux étapes principales. La première consiste à décrire un milieu modèle pour l'UO_2 irradié. La modélisation utilisée a été en partie présentée. Un modèle mécanique permettant de décrire l'effet de surface doit encore être introduit. Cela fait l'objet du chapitre 3. La seconde étape consiste à déterminer le milieu homogène équivalent à notre milieu modèle hétérogène. Pour cela, des techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire sont mises en œuvre. Elles sont présentées au chapitre 2.

Chapitre 2

Techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire

Dans ce chapitre, les méthodes de changement d'échelles permettant de déterminer le comportement élastique macroscopique des matériaux hétérogènes sont présentées. Premièrement, la méthodologie est brièvement décrite. L'approche classique et les principaux modèles micromécaniques qui en découlent, notamment les estimations de Hashin et Shtrikman (1963) et de Ponte Castañeda et Willis (1995), sont ensuite présentés. Finalement, l'approche par motifs morphologiques représentatifs est présentée plus en détails. Cette approche, qui permet de prendre en compte l'arrangement local des phases, est mise en œuvre au chapitre 4 afin de déterminer le comportement élastique macroscopique de matériaux nanoporeux.

Sommaire

1 Méthodologie 42

2 Approche classique 44

2.1 Problème d'Eshelby 45

2.2 Estimations de Hashin et Shtrikman 46

2.3 Estimations de Ponte Casteñeda et Willis 47

3 Approche par motifs morphologiques représentatifs 49

3.1 Principe 49

3.2 Bornes de Voigt et Reuss généralisées 50

3.3 Estimations de Hashin et Shtrikman généralisées 50

4 Bilan du chapitre 53

1 Méthodologie

Les éléments présentés dans ce chapitre s'appuient essentiellement sur les références suivantes : (Zaoui, 1994, 2001; Bornert, 1996b, 2001; François et al., 2012). Le lecteur désireux de plus de détails sur les notions et les approches présentées ci-après, peut s'y référer.

Historiquement, le comportement mécanique des matériaux était essentiellement identifié à partir d'approches phénoménologiques, c'est-à-dire empiriques (essais mécaniques dans des conditions physiques et pour des sollicitations particulières). Les lois de comportement identifiées à partir de telles approches perdent leur validité en cas d'évolution de la microstructure ou lorsque l'on sort du domaine pour lequel elles ont été identifiées. Les matériaux utilisés dans le domaine du nucléaire, en particulier le dioxyde d'uranium irradié (cf. section 2.1 du chapitre 1), peuvent subir de nombreuses transformations microstructurales dues à la présence d'un flux neutronique intense, aux réactions physico-chimiques et nucléaires complexes et aux sollicitions thermomécaniques sévères auxquelles ils sont soumis. De plus, la réalisation d'essais mécaniques en conditions de fonctionnement normales ou accidentelles sur un matériau tel que l'UO_2, est difficile, rendant ainsi les approches phénoménologiques limitées.

Les approches micromécaniques sont une alternative intéressante aux approches phénoménologiques car elles permettent de tenir compte de l'influence des hétérogénéités de la microstructure sur le comportement mécanique macroscopique du matériau. Ces approches, au caractère plus prédictif que les approches phénoménologiques, sont donc particulièrement adaptées pour établir des lois de comportement pour les matériaux dont la microstructure évolue au cours de leur utilisation. L'objectif de ces approches est de remplacer le matériau hétérogène par un *milieu homogène équivalent* (appelé également *milieu effectif*) qui, lorsqu'il est soumis aux mêmes sollicitations, a la même réponse globale que le matériau hétérogène. Les propriétés de ce milieu homogène sont alors recherchées en fonction des paramètres caractéristiques de la microstructure hétérogène. La méthodologie des approches micromécaniques se décompose en trois étapes, la représentation, la localisation et l'homogénéisation, qui sont présentées ci-après.

Représentation :

Il s'agit ici de décrire le volume élémentaire représentatif (VER) de notre matériau hétérogène en choisissant une échelle de description pertinente à la vue des propriétés que l'on souhaite analyser. Cela présuppose qu'il existe une séparation des échelles de départ (échelle locale) et d'arrivée (échelle macroscopique). Les différentes phases présentes à l'échelle de départ doivent être identifiées et les paramètres morphologiques pertinents pour notre étude (fraction volumique, distribution spatiale, tailles des hétérogénéités, arrangement local des phases,...) doivent être précisés.

Dans le cas de l'UO_2, cette étape a été en partie réalisée à la section 3.2 du chapitre 1. Les hétérogénéités pertinentes retenues à l'échelle locale sont les cavités intragranulaires et intergranulaires dont les porosités, les formes, les tailles et la répartition spatiale dans la matrice d'UO_2 sont supposées connues.

Localisation :

Cette étape vise à identifier les champs locaux (à l'échelle de l'hétérogénéité) sur le VER

lorsqu'il est soumis à un chargement macroscopique. Il faut tout d'abord préciser les conditions aux limites à appliquer sur le VER, noté Ω. Le contour de Ω est noté $\partial\Omega$ et sa normale sortante est notée $\boldsymbol{n}$. Ce sont généralement des conditions de déformations homogènes ou de contraintes homogènes sur le contour.

Les conditions de déformations homogènes sont de la forme $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \boldsymbol{x},\ \forall \boldsymbol{x} \in \partial\Omega$, où la déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est homogène. La déformation macroscopique s'exprime comme il suit :

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \boldsymbol{\epsilon} \, \mathrm{d}V = \boldsymbol{\epsilon}^0, \tag{2.1}$$

et la contrainte macroscopique est alors définie de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \boldsymbol{\sigma} \, \mathrm{d}V \tag{2.2}$$

De manière duale, les conditions de contraintes homogènes sont de la forme $\boldsymbol{t} = \boldsymbol{\sigma}^0 \cdot \boldsymbol{n},\ \forall \boldsymbol{x} \in \partial\Omega$, où la contrainte $\boldsymbol{\sigma}^0$ est homogène. La contrainte macroscopique s'exprime de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \boldsymbol{\sigma} \, \mathrm{d}V = \boldsymbol{\sigma}^0, \tag{2.3}$$

et la déformation macroscopique est définie comme :

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \boldsymbol{\epsilon} \, \mathrm{d}V \tag{2.4}$$

Dans le cadre de l'étude des matériaux poreux, les champs locaux sont prolongés dans les cavités. Par exemple, dans le cas d'un matériau poreux non saturé, le champ de contrainte est prolongé par un champ de tenseur nul dans les cavités. Pour ces matériaux, les moyennes des déformations et des contraintes peuvent être calculées en se ramenant aux intégrales de contour suivantes (les efforts et les moments volumiques sont négligés) :

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2} \big(\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{n} + \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{u} \big) \, \mathrm{d}S \tag{2.5}$$

et

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \big(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} \big) \otimes \boldsymbol{x} \, \mathrm{d}S \tag{2.6}$$

où le champ de vecteurs $\boldsymbol{u}$ est le champ de déplacement et $\boldsymbol{x}$ le vecteur position.

Les conditions aux limites étant choisies, il faut maintenant résoudre les équations d'équilibres mécaniques et déterminer les champs locaux sur Ω. Les problèmes traités ici sont linéaires. Il est alors possible d'établir des relations linéaires entre le chargement imposé et les champs élastiques solutions du problème. Lorsque des conditions de déformations homogènes sont appliquées, le tenseur de localisation $\mathbb{A}$ relie la déformation locale $\boldsymbol{\epsilon}$ à la déformation macroscopique $\mathbf{E}$:

$$\forall \boldsymbol{x} \in \Omega, \quad \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{x}) = \mathbb{A}(\boldsymbol{x}) : \mathbf{E} \tag{2.7}$$

Lorsque des conditions de contraintes homogènes sont appliquées, le tenseur de concentration $\mathbb{B}$ relie la contrainte locale $\boldsymbol{\sigma}$ à la déformation macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$:

$$\forall \boldsymbol{x} \in \Omega, \quad \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) = \mathbb{B}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\Sigma} \tag{2.8}$$

Par la suite, les dépendances des grandeurs au vecteur position $\boldsymbol{x}$ sont généralement omises pour plus de lisibilité.

Homogénéisation :

L'étape d'homogénéisation a pour objectif de relier la contrainte macroscopique $\mathbf{\Sigma}$ à la déformation macroscopique $\mathbf{E}$ par l'intermédiaire du tenseur de rigidité effectif $\tilde{\mathbb{C}}$ (en conditions de déformations homogènes) ou du tenseur de souplesse effectif $\tilde{\mathbb{S}}$ (en conditions de contraintes homogènes) :

$$\mathbf{\Sigma} = \tilde{\mathbb{C}} : \mathbf{E} \quad \text{ou} \quad \mathbf{E} = \tilde{\mathbb{S}} : \mathbf{\Sigma} \tag{2.9}$$

Lorsque des conditions de déformations homogènes au bord sont considérées, il vient que :

$$\mathbf{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\Omega = \langle \mathbb{C} : \boldsymbol{\epsilon} \rangle_\Omega = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} \rangle_\Omega : \mathbf{E} \tag{2.10}$$

où $\mathbb{C}$ est le tenseur de rigidité local (dépendant du point $\boldsymbol{x} \in \Omega$). Le tenseur de rigidité effectif s'exprime alors de la manière suivante :

$$\tilde{\mathbb{C}} = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} \rangle_\Omega \tag{2.11}$$

De la même manière, en conditions de contraintes homogènes au bord, il est possible de montrer que :

$$\tilde{\mathbb{S}} = \langle \mathbb{S} : \mathbb{B} \rangle_\Omega \tag{2.12}$$

avec $\mathbb{S}$ le tenseur de souplesse local ($\mathbb{S} = \mathbb{C}^{-1}$).

Lorsque les conditions de contraintes et de déformations homogènes au bord sont équivalentes, il vient que $\tilde{\mathbb{C}} = \tilde{\mathbb{S}}^{-1}$. Cette condition peut être considérée comme vraie lorsque la dimension du VER est grande devant la dimension caractéristique des hétérogénéités.

Les expressions (2.11) et (2.12) des tenseurs de rigidité et de souplesse effectifs sont exactes sous réserve de pouvoir résoudre avec exactitude le problème de localisation. Il est cependant très rare de pouvoir résoudre précisément ce problème car la connaissance de la microstructure est en général incomplète (description uniquement statistique). L'objectif est donc de déterminer des champs locaux, dits admissibles pour le problème de localisation, c'est-à-dire de trouver des champs qui fournissent une solution approchée du problème de localisation. Ils doivent vérifier les équations d'équilibre, les relations cinématiques, les conditions aux limites et tenir compte, au mieux, des informations morphologiques disponibles. Dans la suite, deux approches sont discernées : l'approche classique qui s'appuie sur des champs admissibles uniformes par morceaux et l'approche par motifs morphologiques représentatifs (MMR) qui s'appuie sur des champs admissibles non uniformes. Cette dernière approche conduit souvent à des modèles plus précis que l'approche classique. En effet, des champs non uniformes permettent d'approcher avec plus de précision les champs réels que des champs uniformes par morceaux.

2 Approche classique

Comme cela a été mentionné précédemment, l'approche classique repose sur la construction de champs admissibles uniformes par morceaux. Pour la plupart des modèles qui dérivent de cette approche, les champs admissibles sont construits à partir de la solution du problème d'Eshelby rappelée brièvement ci-après.

2.1 Problème d'Eshelby

Dans la suite, le problème d'une inclusion ellipsoïdale noyée dans un milieu infini soumis à l'infini à une déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est considéré. L'interface entre l'inclusion et le milieu infini est supposée parfaite (continuité du vecteur contrainte et du déplacement). Le milieu infini est défini sur le domaine ω_0 et son tenseur de rigidité est noté $\mathbb{C}_0$. De même, le domaine occupé par l'inclusion est noté ω_i et son tenseur de rigidité, $\mathbb{C}_i$. Ce problème est nommé par la suite problème d'inclusion d'Eshelby [1]. Il est décrit par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \dfrac{1}{2}\big(\mathrm{grad}\boldsymbol{u} + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}\big) \ \text{ dans } \ \omega_0 \cup \omega_i, \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\epsilon} \ \text{ dans } \ \omega_0, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_i : \boldsymbol{\epsilon} \ \text{ dans } \ \omega_i, \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \boldsymbol{x} \ \text{ lorsque } \ ||\boldsymbol{x}|| \to \infty \end{cases} \tag{2.13}$$

où $||\boldsymbol{x}||$ désigne la norme euclidienne de $\boldsymbol{x}$.

Ce problème conduit à une déformation homogène dans l'inclusion (Eshelby, 1957) qui s'exprime de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbb{V} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \ \text{ dans } \ \omega_i \tag{2.14}$$

où

$$\mathbb{V} = (\mathbb{C}^\star + \mathbb{C}_i)^{-1} : (\mathbb{C}^\star + \mathbb{C}_0) \tag{2.15}$$

Le tenseur $\mathbb{C}^\star$, appelé tenseur d'influence de Hill, s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{C}^\star = \mathbb{P}^{-1} - \mathbb{C}_0 \tag{2.16}$$

où $\mathbb{P}$ est le tenseur de Hill, qui s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{P} = \mathbb{S}^{\mathrm{E}} : \mathbb{C}_0^{-1} \tag{2.17}$$

Le tenseur $\mathbb{S}^{\mathrm{E}}$ est le tenseur d'Eshelby. Il dépend uniquement de la forme de l'inclusion et du tenseur $\mathbb{C}_0$. Son expression pour une inclusion de forme sphéroïdale (ellipsoïde de révolution) est donnée à l'annexe B.

Le tenseur de polarisation sur l'inclusion $\boldsymbol{\tau}$ est défini de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\tau} = (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_0) : \boldsymbol{\epsilon} \text{ dans } \ \omega_i \tag{2.18}$$

De par la linéarité du problème, il est possible de relier la polarisation sur l'inclusion au chargement $\boldsymbol{\epsilon}^0$ par l'intermédiaire d'un tenseur d'ordre quatre noté $\mathbb{T}$:

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbb{T} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \tag{2.19}$$

D'après les équations (2.14), (2.15) et (2.18), il vient que :

$$\mathbb{T} = (\mathbb{C}_i - \mathbb{C}_0) : (\mathbb{C}^\star + \mathbb{C}_i)^{-1} : (\mathbb{C}^\star + \mathbb{C}_0) \tag{2.20}$$

1. Habituellement, il est rigoureusement qualifié de problème d'Eshelby inhomogène avec chargement à l'infini et sans déformation libre dans l'inclusion.

Dans le cas particulier où l'inclusion est sphérique et que le milieu infini est isotrope, il vient que :

$$\mathbb{P} = \frac{1}{3k_0 + 4\mu_0}\mathbb{J} + \frac{3}{5\mu_0}\frac{k_0 + 2\mu_0}{3k_0 + 4\mu_0}\mathbb{K} \tag{2.21}$$

où k_0 et μ_0 sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement du milieu infini. De plus, si l'inclusion a un comportement isotrope, cela conduit aux expressions suivantes des tenseurs $\mathbb{V}$ et $\mathbb{T}$:

$$\mathbb{V} = \frac{3k_0 + 4\mu_0}{3k_i + 4\mu_0}\mathbb{J} + \frac{5\mu_0(3k_0 + 4\mu_0)}{3k_0(2\mu_i + 3\mu_0) + 4\mu_0(3\mu_i + 2\mu_0)}\mathbb{K} \tag{2.22}$$

et

$$\mathbb{T} = \frac{3(k_i - k_0)(3k_0 + 4\mu_0)}{3k_i + 4\mu_0}\mathbb{J} + \frac{10\mu_0(3k_0 + 4\mu_0)(\mu_i - \mu_0)}{3k_0(2\mu_i + 3\mu_0) + 4\mu_0(3\mu_i + 2\mu_0)}\mathbb{K} \tag{2.23}$$

où k_i et μ_i sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement de l'inclusion.

De nombreux modèles d'homogénéisation s'appuient sur la solution de ce problème pour approcher les champs locaux réels. Dans la suite, les modèles particuliers de Hashin et Shtrikman (1963) et l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995) sont décrits.

2.2 Estimations de Hashin et Shtrikman

Les modèles de Hashin et Shtrikman (1963) s'appuient sur des champs admissibles uniformes par phases. Ils tiennent compte des fluctuations interphases des champs locaux et négligent les fluctuations intraphases. En effet, dans le cadre de ces modèles, l'inclusion d'Eshelby ne fait pas référence à une inclusion réelle. C'est une inclusion fictive dont l'état mécanique est représentatif de l'état mécanique global de la phase considérée. La forme et l'orientation de l'inclusion font alors référence à la distribution spatiale de la phase. Ce sont des modèles qui tiennent compte des informations statistiques d'ordre un et deux sur la microstructure, c'est-à-dire des fractions volumiques des différentes phases et de la distribution spatiale de ces phases. Le tenseur de rigidité du milieu infini $\mathbb{C}_0$ du problème d'Eshelby, appelé également milieu de référence, peut être *a priori* quelconque.

Le matériau hétérogène considéré contient n phases, indicées r ($r \in [1, n]$), de fractions volumiques respectives c_r et de tenseur de rigidité $\mathbb{C}_r$. La distribution spatiale des phases est supposée ellipsoïdale. Les fonctions de covariances C_{rs}, qui s'interprètent comme la probabilité de trouver la phase r en un point $\boldsymbol{x}$ en ayant conjointement la phase s au point $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}$, sont alors de la forme :

$$\forall (r, s) \in [1, n]^2, \quad \forall \boldsymbol{h} \quad C_{rs}(\boldsymbol{h}) = \Phi_{rs}(||\boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{h}||), \tag{2.24}$$

où $\boldsymbol{\alpha}$ est un tenseur symétrique défini positif d'ordre deux normalisé et Φ_{rs} une fonction scalaire d'arguments scalaires. Le cas particulier $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{i}$ correspond au cas d'une distribution isotrope des phases. Dans le cas particulier d'une distribution ellipsoïdale, le tenseur de rigidité de Hashin et Shtrikman s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{C}^{\mathrm{HS}} = \Big[\sum_{r=1}^{n} c_r(\mathbb{C}^\star + \mathbb{C}_r)^{-1}\Big]^{-1} - \mathbb{C}^\star \tag{2.25}$$

où $\mathbb{C}^\star$ est le tenseur d'influence de Hill associé au milieu référence (de tenseur des modules $\mathbb{C}_0$) et dont la forme et l'orientation de l'inclusion ellipsoïdale du problème d'Eshelby correspondent à celles de la distribution spatiale.

Dans le cadre de ces modèles, le choix du milieu de référence est libre. En fonction des propriétés élastiques retenues, il est possible de développer des bornes du comportement effectif ou des estimations.

Bornes :

Lorsque le milieu de référence est la plus souple des phases, le modèle est une borne inférieure du comportement effectif. Inversement, lorsque le milieu de référence est la plus rigide des phases, le modèle est une borne supérieure du comportement effectif, c'est-à-dire (les inégalités sur les tenseurs d'ordre quatre sont à comprendre au sens des formes quadratiques) :

$$\begin{cases} \text{si } \forall r \in [1,n],\ \mathbb{C}^0 \leq \mathbb{C}_r \ \text{ alors } \tilde{\mathbb{C}} \geq \mathbb{C}^{\mathrm{HS}} \\ \text{si } \forall r \in [1,n],\ \mathbb{C}^0 \geq \mathbb{C}_r \ \text{ alors } \tilde{\mathbb{C}} \leq \mathbb{C}^{\mathrm{HS}} \end{cases} \tag{2.26}$$

L'écriture précédente suppose que les phases sont ordonnées.

Lorsque le milieu de référence est infiniment souple (resp. infiniment raide), le modèle de Hashin et Shtrikmann est égal à la borne classique de Reuss (resp. Voigt), c'est-à-dire :

$$\lim_{||\mathbb{C}_0||\to 0} \mathbb{C}^{\mathrm{HS}} = \mathbb{C}^{\mathrm{R}}, \qquad \lim_{||\mathbb{C}_0||\to +\infty} \mathbb{C}^{\mathrm{HS}} = \mathbb{C}^{\mathrm{V}} \tag{2.27}$$

où $||\ .\ ||$ désigne une norme pour les tenseurs d'ordre quatre symétriques.

Les bornes de Hashin et Shtrikmann améliorent donc systématiquement celles de Voigt et Reuss.

Estimations :

Lorsque le milieu de référence est la matrice, l'estimation construite est dite de Mori et Tanaka (1973). Ce choix est pertinent lorsque le matériau contient une phase de matrice en proportion importante (75-80 %). Dans le cas d'un matériau poreux bi-phasé dont la matrice et la distribution des phases sont isotropes, les modules de compressibilité et de cisaillement effectifs s'expriment de la façon suivante :

$$k^{\mathrm{MT}} = \frac{4(1-f)k_m\mu_m}{(3fk_m + 4\mu_m)}, \quad \mu^{\mathrm{MT}} = \frac{(1-f)\mu_m(9k_m + 8\mu_m)}{(9+6f)k_m + 4(2+3f)\mu_m)} \tag{2.28}$$

où k_m et μ_m sont les modules de compressibilité et de cisaillement de la matrice et f la porosité.

Lorsque le milieu de référence est le milieu effectif recherché, l'estimation est dite autocohérente.

2.3 Estimations de Ponte Casteñeda et Willis

Ponte Castañeda et Willis (1995) ont proposé un modèle permettant de décrire le comportement élastique effectif de matériaux à particules (matériaux constitués d'une phase prédominante de matrice dans laquelle sont insérées des inclusions disjointes). Ce modèle

permet de tenir compte de la forme des particules et d'informations concernant la distribution spatiale de leurs centres. Les champs admissibles ne sont plus supposés uniformes par phases mais uniformes par famille d'inclusions. Une famille d'inclusion regroupe les inclusions de même module, même forme et même orientation. Dans le cadre de ce modèle, les champs admissibles sont là encore construits à partir de la solution du problème d'Eshelby. Cependant, le milieu de référence a les propriétés de la matrice. Contrairement aux estimations de Hashin et Shtrikman, la forme et l'orientation de l'inclusion d'Eshelby font référence à la forme et à l'orientation de la famille d'inclusion réelle considérée.

Le matériau considéré contient $n-1$ familles d'inclusions disjointes, indicées r ($r \in [2,..,n]$), noyées dans une matrice, indicée 1 de rigidité $\mathbb{C}_1$. La famille d'inclusions r est caractérisée par le tenseur de rigidité $\mathbb{C}_r$ et un domaine I_r, centré à l'origine, précisant la forme des inclusions de la famille. Chaque famille r contient N_r inclusions, indicée i ($\forall i \in [1,..,N_r]$), dont les centres sont notés $\boldsymbol{x}_r^i$. Alors que la forme et l'orientation des inclusions sont supposées bien connues, seules des informations statistiques concernant la positions des centres des inclusions sont disponibles. Par la suite, la distribution spatiale des centres des inclusions (points $\boldsymbol{x}_r^i$, $\forall r \in [2,..,n]$ et $\forall i \in [1,..,N_r]$) est supposée ellipsoïdale. Les covariances p_{rs} entre les centres des inclusions d'une famille r et ceux d'une famille s, qui s'interprètent comme la probabilité de trouver le centre d'une inclusion de la famille r en un point $\boldsymbol{x}$ en ayant conjointement celui d'une inclusion de la famille s au point $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}$, sont alors de la forme :

$$\forall (r,s) \in [2,n]^2,\ \forall \boldsymbol{h} \neq \boldsymbol{0}, \quad p_{rs}(\boldsymbol{h}) = \psi_{rs}(||\boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{h}||) \tag{2.29}$$

avec ψ_{rs} une fonction scalaire d'arguments scalaires et $\boldsymbol{\alpha}$ un tenseur d'ordre deux symétrique normalisé (le cas $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{i}$ correspond au cas d'une distribution isotrope des centres). Pour de telles distributions, le tenseur de rigidité issu de l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995) s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{C}^{\mathrm{PCW}} = \mathbb{C}_1 + \left(\mathbb{I} - \left\langle \mathbb{T}^1 \right\rangle_p : \mathbb{P}_d^1\right)^{-1} : \left\langle \mathbb{T}^1 \right\rangle_p \tag{2.30}$$

avec $\left\langle \mathbb{T}^1 \right\rangle_p = \sum_{r=2}^n c_r \mathbb{T}_r^1$. Le scalaire c_r ($\forall r \in [2,..,n]$) correspond à la fraction volumique d'inclusion de la famille r ($c_r = |I_r| p_r$ avec p_r la densité de centres d'inclusions de la famille r). Le tenseur $\mathbb{T}_r^1$ ($\forall r \in [2,..,n]$) est identifié à partir de la solution du problème d'Eshelby correspondant à l'inclusion r (avec $\mathbb{C}_0 = \mathbb{C}_1$).

Dans le cas particulier où la forme des inclusions est identique à la forme de la distribution spatiale des centres, l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995) correspond à celle de Mori et Tanaka présentée ci-dessus.

Pour que ce modèle soit pertinent, une fraction volumique minimale de matrice doit être prise en compte (hypothèse de non-recouvrement des inclusions). Elle est imposée par la forme de la distribution des centres et par la géométrie des inclusions. Si cette condition n'est pas respectée, la positivité du tenseur $\mathbb{C}^{\mathrm{PCW}}$ n'est pas garantie. Pour palier ce problème, Ponte Castañeda et Willis (1995) ont introduit la notion d'ellipsoïdes de sûreté. L'idée vise à définir des ellipsoïdes fictives autour des inclusions dont la forme et l'orientation correspondent à celles de la distribution des centres. Dans le cas où il y a non-interpénétration des

ellipsoïdes de sûreté, la définie-positivité du tenseur $\mathbb{C}^{\mathrm{PCW}}$ est garantie. Cette approche, suffisante pour garantir le non-recouvrement des inclusions, est parfois très restrictive (Bornert, 1996b) mais simple à mettre en œuvre.

3 Approche par motifs morphologiques représentatifs

3.1 Principe

L'approche par motifs morphologiques représentatifs (MMR) a été initialement proposée par Stolz et Zaoui (1991) et fortement développée par la suite par Bornert (Bornert, 1996b,a; Bornert et al., 1996; Bornert, 2001). Contrairement à l'approche classique, l'approche par motifs repose sur la construction de champs admissibles non uniformes par phases et permet de prendre en compte des informations sur l'arrangement local des phases.

L'approche par motifs suppose que le volume élémentaire représentatif peut être décomposé en sous-domaines disjoints et connexes. Ces sous-domaines sont regroupés en familles appelées motifs morphologiques. Les membres d'un même motif ont une géométrie et une distribution spatiale des propriétés mécaniques locales identiques. La démarche de cette approche est illustrée schématiquement sur la figure 2.1.

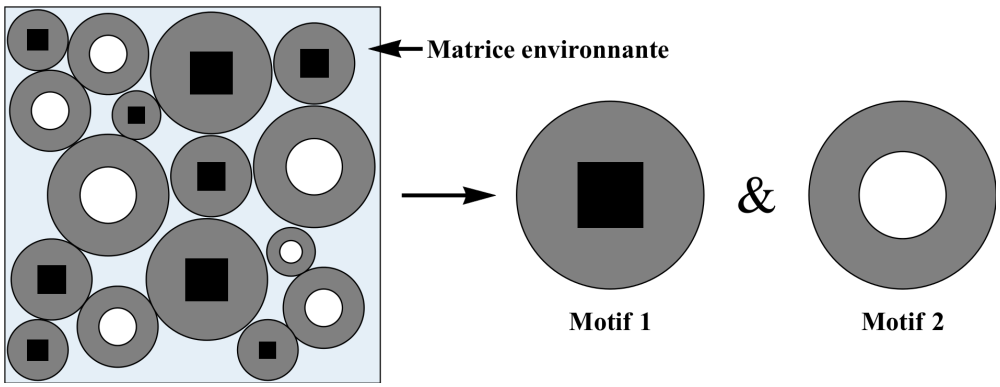


Figure 2.1 – *Illustration schématique de l'approche par motifs morphologiques représentatif : cas particulier d'une décomposition avec deux motifs de formes extérieures sphériques et un domaine de matrice environnante.*

Ci-après, le VER, noté Ω, est décomposé en $n-1$ motifs, indicés r ($r \in [2,..,n]$), et en un domaine de matrice environnante, indicée 1. Chaque motif contient N_r membres. Les membres, indicés i, de chaque motif r sont définis sur les domaines D_r^i centrés aux points $\boldsymbol{x}_r^i$ ($\forall r \in [2,..,n]$ et $\forall i \in [1,..,N_r]$). Les domaines D_r ($\forall r \in [2,..,n]$) sont centrés à l'origine et sont tels que les domaines D_r^i sont obtenus à partir des domaines D_r par une translation de vecteur $\boldsymbol{x}_r^i$. Un motif est donc caractérisé par un domaine D_r et une distribution spatiale de tenseurs de rigidité locaux $\mathbb{C}_r(\boldsymbol{x})$ ($\forall \boldsymbol{x} \in D_r$).

Comme dans le cadre de l'approche classique, différentes classes de modèles peuvent être développées à partir de la description en motifs. Ci-après les bornes de Voigt et Reuss généralisées et les estimations de Hashin et Shtrikmann généralisées sont présentées.

3.2 Bornes de Voigt et Reuss généralisées

Des bornes du premier ordre, appelées bornes de Voigt et Reuss généralisées peuvent être développées. La borne supérieure est appelée borne de Voigt généralisée (VG) et s'écrit :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{VG}} = c_1 \mathbb{C}_1 + \sum_{r=2}^{n} c_r \mathbb{C}_{\mathrm{M}r}^{\mathrm{VG}} \quad \text{avec} \quad \forall\, \mathbf{E}, \;\; \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} = \mathbb{C}_{\mathrm{M}r}^{\mathrm{VG}} : \mathbf{E} \tag{2.31}$$

La déformation homogène $\mathbf{E}$ (qui correspond également à la déformation macroscopique appliquée sur le bord du VER) est appliquée directement sur le bord du motif r et le tenseur $\boldsymbol{\sigma}$ décrit le champ de contrainte local sur le motif r induit par le chargement $\mathbf{E}$. La borne inférieure, appelée borne de Reuss généralisée (RG), s'écrit de la façon suivante :

$$\left(\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{RG}}\right)^{-1} = c_1 \left(\mathbb{C}_1\right)^{-1} + \sum_{r=2}^{n} c_r \left(\mathbb{C}_{\mathrm{M}r}^{\mathrm{RG}}\right)^{-1} \quad \text{avec} \quad \forall\, \boldsymbol{\Sigma}, \;\; \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_r} = \left(\mathbb{C}_{\mathrm{M}r}^{\mathrm{RG}}\right)^{-1} : \boldsymbol{\Sigma} \tag{2.32}$$

La contrainte homogène $\boldsymbol{\Sigma}$ (qui correspond également à la contrainte macroscopique appliquée sur le bord du VER) est appliquée directement sur le bord du motif r et le tenseur $\boldsymbol{\epsilon}$ décrit le champ de déformation local sur le motif r induit par le chargement $\boldsymbol{\Sigma}$.

Les tenseurs $\mathbb{C}_{\mathrm{M}r}^{\mathrm{VG}}$ et $\mathbb{C}_{\mathrm{M}r}^{\mathrm{RG}}$ sont donc obtenus à partir de l'étude du motif r sur lequel des conditions de déformations homogènes et de contraintes homogènes sont respectivement appliquées sur la frontière extérieure de r. Ils correspondent aux tenseurs de rigidité des bornes de Voigt et Reuss généralisées d'un matériau constitué uniquement du motif r (sans matrice environnante). Un tel matériau est appelé assemblage de Hashin généralisé (Bornert, 2001) et doit vérifier les propriétés suivantes pour pouvoir être construit sans violer l'hypothèse de non-recouvrement des motifs :

- les motifs ont tous la même forme extérieure qui correspond alors la forme de la distribution spatiale des centres des motifs ;
- l'assemblage de motifs a une structure fractale (pour paver entièrement l'espace) et par conséquent les motifs ne peuvent avoir une taille finie : *« Un tel empilement utilisant des ellipsoïdes de taille finie ferait nécessairement apparaître des zones non couvertes par les motifs. Il faut donc faire appel à une construction d'inspiration fractale, permettant de couvrir tout l'espace avec des motifs de taille de plus en plus petite »*, (Bornert, 1996b).

3.3 Estimations de Hashin et Shtrikman généralisées

Comme dans le cadre de l'approche classique, les modèles précédents peuvent être améliorés en tenant compte d'informations supplémentaires sur la distribution spatiale des centres des motifs. Une procédure inspirée des formulations variationnelles classiques de Hashin et Shtrikman a été développée dans le cadre de l'approche par motifs. Cette étude se limite au cas de matériaux dont la distribution des centres des motifs (points $\boldsymbol{x}_r^i$, $\forall r \in [2, .., n]$ et $\forall i \in [1, .., N_r]$) est supposée ellipsoïdale au sens de Ponte Castañeda et Willis (1995) (équation (2.29)). Dans le cadre d'une telle distribution, la détermination des propriétés élastiques effectives passe par l'étude de problèmes auxiliaires. Chaque problème correspond à l'étude du comportement d'un motif lorsqu'il est plongé dans un milieu de référence infini (de rigidité $\mathbb{C}_0$), soumis à l'infini à une déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$. Les tenseurs d'ordre quatre $\mathbb{U}_{\mathrm{M}r}^0$, $\mathbb{V}_{\mathrm{M}r}^0$ et

$\mathbb{T}^0_{\mathrm{M}r}$ sont introduits pour chaque problème auxiliaire. Ils sont définis comme il suit :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} &= \mathbb{U}^0_{\mathrm{M}r} : \boldsymbol{\epsilon}^0, \quad \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_r} = \mathbb{V}^0_{\mathrm{M}r} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \\ \langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_r} &= \mathbb{T}^0_{\mathrm{M}r} : \boldsymbol{\epsilon}^0 = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} - \mathbb{C}_0 : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_r} \end{aligned} \tag{2.33}$$

où le tenseur $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur de polarisation défini tel que :

$$\forall \boldsymbol{x} \in \Omega, \quad \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{x}) = \big(\mathbb{C}(\boldsymbol{x}) - \mathbb{C}_0\big) : \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{x}) \tag{2.34}$$

Le tenseur d'ordre quatre $\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}r}(\mathbb{C}^0)$ est également introduit pour chaque problème auxiliaire et s'exprime de la façon suivante :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} = \mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}r}(\mathbb{C}^0) : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_r} \tag{2.35}$$

Le tenseur $\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}r}(\mathbb{C}^0)$ correspond au tenseur de Hashin et Shtrikman (de l'approche par motif) d'un assemblage de Hashin généralisé construit à partir de l'unique motif r. La déformation (resp. contrainte) macroscopique est alors égale à la déformation (resp. déformation) moyenne sur le motif. Comme cela était précisé ci-dessus, l'hypothèse de non-recouvrement des motifs impose d'avoir des formes extérieures de motifs et une forme de distribution spatiale (ellipsoïdale) des centres compatibles.

Les tenseurs $\mathbb{C}^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}r}$ et $\mathbb{C}^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}r}$ introduits précédemment peuvent être déterminés à partir du tenseur $\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}r}(\mathbb{C}_0)$ de la façon suivante :

$$\lim_{||\mathbb{C}_0|| \to +\infty} \mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}r}(\mathbb{C}_0) = \mathbb{C}^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}r}, \qquad \lim_{||\mathbb{C}_0|| \to 0} \mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}r}(\mathbb{C}_0) = \mathbb{C}^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}r} \tag{2.36}$$

En effet, lorsque $\mathbb{C}_0$ tend vers le cas rigide, cela revient à appliquer une déformation homogène directement sur le bord du motif r et lorsque $\mathbb{C}_0$ tend vers le cas poreux, cela revient à appliquer une contrainte homogène directement sur le bord.

En suivant les travaux de Bornert (1996b), trois cas particuliers sont considérés ci-après :

- **Cas 1 :** le milieu de référence est la matrice. Ce type de modèles est qualifié d'estimation de Mori et Tanaka généralisée (MTG).
- **Cas 2 :** la fraction volumique de matrice environnante est nulle. Le pavage du VER avec les membres des motifs correspond ainsi à un assemblage de Hashin généralisé. Il est alors nécessaire que la forme extérieure des motifs corresponde à la forme ellipsoïdale de la distribution spatiale des centres afin de garantir le non-recouvrement des motifs.
- **Cas 3 :** la forme extérieure des motifs correspond à celle de la distribution spatiale des centres (comme dans le cas 2). Cependant, contrairement au cas précédent, la fraction volumique de matrice environnante n'est pas nécessairement nulle. Dans ce cas, la matrice environnante peut être traitée comme un motif homogène de rigidité $\mathbb{C}_1$ dont la forme correspond à celle de la distribution spatiale des centres des motifs.

Cas 1 : le tenseur de rigidité de l'estimation de Mori et Tanaka généralisée s'écrit :

$$\mathbb{C}^{\mathrm{MTG}}_{\mathrm{M}} = \mathbb{C}_1 + \Big(\mathbb{I} - \big\langle \mathbb{T}^1_{\mathrm{M}r} \big\rangle_{\mathrm{M}} : \mathbb{P}^1_d\Big)^{-1} : \big\langle \mathbb{T}^1_{\mathrm{M}r} \big\rangle_{\mathrm{M}} \tag{2.37}$$

où $\left\langle \mathbb{T}^0_{\mathrm{M}r} \right\rangle_{\mathrm{M}} = \sum_{r=2}^{n} c_r \mathbb{T}^0_{\mathrm{M}r}$, $\forall \mathbb{C}_0$ (dans le cas présent $\mathbb{C}_0 = \mathbb{C}_1$). De la même façon que pour l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995), le tenseur $\mathbb{P}^0_d$ est le tenseur de Hill relatif à la forme de la distribution spatiale des centres des motifs.

Cas 2 : le tenseur de rigidité de l'estimation de Hashin et Shtrikman généralisée s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}}(\mathbb{C}_0) = \mathbb{C}_0 + \left(\mathbb{I} - \left\langle \mathbb{T}^0_{\mathrm{M}r} \right\rangle_{\mathrm{M}} : \mathbb{P}^0_d\right)^{-1} : \left\langle \mathbb{T}^0_{\mathrm{M}r} \right\rangle_{\mathrm{M}} \tag{2.38}$$

où encore

$$\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}} = \left\langle \mathbb{U}^0_{\mathrm{M}r} \right\rangle_{\mathrm{M}} : \left\langle \mathbb{V}^0_{\mathrm{M}r} \right\rangle^{-1}_{\mathrm{M}} \tag{2.39}$$

Comme le souligne Bornert (1996b), la dépendance à la distribution spatiale des centres des motifs semble avoir disparue dans l'expression précédente. Elle est en faite contenue dans la forme des motifs qui doit être compatible avec celle de la distribution spatiale des centres.

Cas 3 : le tenseur de rigidité de l'estimation de Hashin et Shtrikman généralisée peut être exprimé des mêmes manières qu'au cas 2 sans oublier d'ajouter un motif supplémentaire homogène de matrice environnante. Il est également possible de montrer que :

$$\left[\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}}(\mathbb{C}^0) + \mathbb{C}^\star\right]^{-1} = c_1\left[\mathbb{C}_1 + \mathbb{C}^\star\right]^{-1} + \sum_{r=2}^{n} c_r \left[\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}r}(\mathbb{C}^0) + \mathbb{C}^\star\right]^{-1} \tag{2.40}$$

où le tenseur $\mathbb{C}^\star$ est le tenseur d'influence associé à $\mathbb{C}_0$ et à la forme des motifs.

Lorsque la forme extérieure des motifs correspond à celle de la distribution des centres (les cas 2 et 3 vérifient toujours cette condition), alors (les inégalités sur les tenseurs d'ordre quatre sont à comprendre au sens des formes quadratiques) :

$$\mathbb{C}^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}} < \mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}}(\mathbb{C}_0) < \mathbb{C}^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}} \tag{2.41}$$

Pour les cas 2 et 3, le milieu de référence peut être quelconque. Par un choix approprié du milieu de référence, il est possible de construire des bornes du comportement effectif, comme dans le cas de l'approche classique. Le développement de bornes de type Hashin et Shtrikman généralisé n'est cependant pas envisagé dans ce travail. En effet, la plus souple des phases d'un matériau poreux est le vide, infiniment souple. La borne inférieure de type Hashin et Shtrikman généralisée conduit à la borne de Reuss généralisée. De plus, les modélisations mises en œuvre par la suite s'appuient sur des modèles d'interfaces qui rendent les développements de bornes supérieures de type Hashin et Shtrikman complexes. En effet, le comportement élastique de ces interfaces est caractérisé par des tenseurs de rigidité surfaciques dont la dimension n'est pas celle des tenseurs de rigidité volumiques. Ainsi, il n'est pas aisé d'ordonner les phases et d'identifier *la phase la plus raide*.

Le cas particulier où $\mathbb{C}_0 = \mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}}(\mathbb{C}_0)$ (le milieu de référence est le milieu effectif recherché) conduit à des modèles autocohérents généralisés (ACG). Plutôt que de résoudre cette équation, les estimations autocohérentes peuvent être obtenues en résolvant l'équation suivante (condition d'autocohérence) :

$$\left\langle \mathbb{V}^0_{\mathrm{M}r} \right\rangle_{\mathrm{M}} = \mathbb{I} \tag{2.42}$$

Dans les trois cas précédents, la déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est reliée à la déformation moyenne $\mathbf{E}$ par la relation suivante :

$$\boldsymbol{\epsilon}^0 = \mathbf{E} + \mathbb{P}_d^0 : \langle \boldsymbol{\tau} \rangle_\Omega \tag{2.43}$$

Il est intéressant de remarquer que les résultats précédents, appliqués à des motifs homogènes, conduisent aux estimations de l'approche classique. L'approche par motifs généralise, en ce sens, l'approche classique. Les estimations de type Mori et Tanaka généralisées conduisent en particulier aux estimations de Ponte Castañeda et Willis (1995).

L'une des principales difficultés de la mise en œuvre de l'approche par motifs réside dans la résolution des problèmes auxiliaires associés à chacun des motifs. En effet, les cas pouvant être traités de façon analytique sont rares et il convient de s'orienter vers une résolution numérique dès lors que les comportements des phases, la géométrie des renforts ou de la distribution spatiale des centres des motifs sont anisotropes (Bornert, 2001). Dans le cas où le motif est une sphère composite, c'est-à-dire une inclusion sphérique enrobée d'une couche concentrique de matrice sphérique, le problème auxiliaire correspondant peut être résolu de manière exacte et différents modèles peuvent être établis pour l'assemblage de Hashin de sphères composites. Hashin (1962) a notamment établi les bornes de Voigt et Reuss généralisées pour l'assemblage, historiquement nommées bornes *de Hashin*. Les bornes de Hashin et Shtrikman généralisées pour l'assemblage ont ensuite été développées par Hervé et al. (1991). Elles sont usuellement nommées bornes *de Hervé, Stolz et Zaoui* (HSZ). L'estimation autocohérente généralisée pour l'assemblage correspond au modèle *à trois phases* initialement développé par Christensen et Lo (1979).

Le cas de la sphère composite a ensuite été généralisé au cas d'une inclusion multicouches par Hervé et Zaoui (1993) (Hervé et Pellegrini (1995) dans le cas d'une inclusion *poreuse*). Les auteurs s'appuient sur une résolution exacte du problème auxiliaire associé pour établir des bornes de Voigt et Reuss généralisées, de Hashin et Shtrikman généralisées et l'estimation autocohérente généralisée pour l'assemblage de Hashin généralisé de sphères multicouches.

Dans ce travail, la plupart des estimations d'ordre deux construites sont des estimations de Mori et Tanaka généralisées, déterminées à partir de l'équation (2.37). En effet, ces estimations conduisent plus facilement à des modèles analytiques que les estimations autocohérentes. De plus, elles autorisent l'utilisation de motifs des formes extérieures quelconques, non-nécessairement identiques à la forme de la distribution spatiale des centres des motifs.

4 Bilan du chapitre

La méthodologie des approches micromécaniques en élasticité linéaire a été brièvement présentée. Les modèles d'homogénéisation se distinguent principalement par les hypothèses sur lesquelles ils s'appuient pour résoudre le problème de localisation. Deux approches ont été présentées :

- l'approche classique qui repose sur la construction de champs admissibles uniformes par morceaux ;
- l'approche par motifs où les champs admissibles sont non uniformes et permettent de tenir compte de l'arrangement local des phases.

Dans le cadre de ces deux approches, il est possible d'établir des bornes du comportement effectif ou des estimations. L'intérêt des bornes est aisément perceptible lorsqu'on dispose d'une borne inférieure et d'une borne supérieure proches l'une de l'autre. En effet, dans ce cas, la pertinence des estimations construites peut être garantie. Dans le cadre de ce travail, la plupart des modèles construits sont des estimations de type Mori et Tanaka généralisées car elles sont relativement faciles à mettre en œuvre en comparaison des estimations autocohérentes généralisées.

Chapitre 3

Effet de surface à l'échelle nanométrique

Ce chapitre concerne l'effet de surface apparaissant à l'échelle nanométrique. Celui-ci est dû à l'existence d'une zone perturbée de quelques rangées d'atomes à proximité des interfaces entre deux constituants : matrice et cavité dans le cadre de ce travail. L'effet de surface est habituellement négligé en mécanique des milieux continus *classique*. Il ne peut cependant plus l'être dans le cadre de l'étude des nanomatériaux et particulièrement dans le cas des matériaux nanoporeux caractérisés par une surface spécifique importante. Cet effet doit alors être pris en compte dans les modèles d'homogénéisation pour déterminer les propriétés effectives de tels matériaux. Cela nécessite de décrire le comportement de la zone perturbée dans le formalisme de la mécanique des milieux continus. Deux approches sont envisageables : décrire la zone perturbée par une interface imparfaite ou par une interphase. Ce travail privilégie l'approche par interface qui conduit plus aisément à des modèles micromécaniques analytiques. Les principaux modèles connus, permettant de décrire le comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux, sont présentés dans ce chapitre.

Sommaire

1 Généralités 56

2 Modélisation de la zone perturbée 57

2.1 Approches par interface 57

2.2 Approche par interphase 59

2.3 Équivalence entre les approches 61

3 Comportement élastique des matériaux nanoporeux : modèles existants 61

3.1 Modèles avec interfaces imparfaites cohérentes 62

3.2 Modèles avec interphases 69

4 Bilan du chapitre 70

1 Généralités

Les nanomatériaux, dont au moins une des longueurs caractéristiques de la microstructure est de l'ordre des quelques nanomètres, ont des propriétés mécaniques particulières liées à la présence importante d'interfaces entre les différents constituants. Les propriétés mécaniques macroscopiques de tels matériaux dépendent fortement des longueurs caractéristiques nanométriques (Sharma et Ganti, 2004; Duan et al., 2005b; Paliwal et Cherkaoui, 2012). Ce phénomène est communément appelé *effet de surface* ou *effet de taille*.

Les atomes situés près de l'interface entre deux phases sont dans un environnement local différent (coordinence, énergie, position d'équilibre) de celui des atomes situés plus loin de cette interface (Duan et al., 2005a,b; Wang et al., 2011; Paliwal et Cherkaoui, 2012). Le domaine constitué par quelques rangées d'atomes à proximité des interfaces, appelé zone perturbée, a donc des propriétés mécaniques différentes de celles du domaine constitué par les atomes situés à l'intérieur des phases (Wang et al., 2011; Paliwal et Cherkaoui, 2012). En mécanique des milieux continus classique, l'impact des atomes près des interfaces est négligé car leur nombre est très faible devant le nombre total d'atomes dans le matériau. Dans le cadre de l'étude du comportement des nanomatériaux, cette hypothèse n'est plus valide car ces matériaux ont une surface spécifique importante et donc un nombre d'atomes aux interfaces important (Duan et al., 2005a,b; Le Quang et He, 2008; Brisard et al., 2010a; Wang et al., 2011; Paliwal et Cherkaoui, 2012).

Le développement de modèles micromécaniques capables de prédire le comportement mécanique macroscopique de matériaux nanocomposites nécessite de donner une description mécanicienne à cette zone perturbée de quelques rangées d'atomes. Il existe principalement deux types d'approches permettant de décrire cette dernière du point de vue de la mécanique des milieux continus : les approches par interphase et les approches par interface. Les modèles d'interphase ont l'avantage de ne pas faire d'hypothèses *a priori* sur la rigidité ou l'épaisseur de la zone perturbée contrairement aux modèles d'interface (Paliwal et Cherkaoui, 2012). Ces modèles représentent la zone perturbée par une phase classique en mécanique des milieux continus. Les équations et les grandeurs classiques en mécanique des milieux continus sont alors utilisées. Néanmoins, ce type de modélisation conduit rarement à des modèles analytiques simples en comparaison des approches par interface (Wang et al., 2011).

Avec les modèles d'interface, la zone perturbée est décrite par une surface, c'est-à-dire un domaine à deux dimensions (d'épaisseur nulle). Ces modèles supposent que l'épaisseur de la zone perturbée est petite devant les autres longueurs caractéristiques de la microstructure. Par opposition aux conditions d'interface parfaite, ces modèles sont dits *d'interface imparfaite* car le vecteur contrainte et/ou le déplacement sont discontinus à travers l'interface. Les modèles d'interface imparfaite les plus connus sont le *linear spring model* (Hashin, 1991; Duan et al., 2005c) et le *modèle d'interface imparfaite cohérente* très largement utilisé dans le cadre de l'étude du comportement mécanique des nanomatériaux.

Ci-après les modèles d'interphase et d'interface imparfaite cohérente sont présentés. Les conditions d'équivalence de ces modèles sont également discutées.

2 Modélisation de la zone perturbée

2.1 Approches par interface

Le modèle d'interface imparfaite cohérente a été proposé initialement par Gurtin et Murdoch (1975). Ces derniers ont proposé un cadre théorique pour étudier le comportement élastique des surfaces matérielles. Ce modèle considère une discontinuité du vecteur contrainte et la continuité du déplacement à travers l'interface. C'est un cas limite d'interphase fine « rigide ». Il est possible de montrer que les équations de ce modèle correspondent à celles d'un voile, plus exactement d'une coque mince de Kirchhoff-Love dont les efforts nécessaires pour la fléchir sont négligeables devant les efforts nécessaire pour l'allonger (cf. annexe D). Outre le fait que le modèle d'interface conduit plus aisément à des modèles micromécaniques analytiques que le modèle d'interphase, celui-ci a été très largement utilisé dans le cadre des nanomatériaux car, dans le passé, l'étude des surfaces solides s'est inspirée du concept thermodynamique de tension de surface dans les liquides. Dans le cas d'un système fluide, les surfaces peuvent être caractérisées par une énergie spécifique. Le système minimise son énergie libre en recherchant une forme qui expose le plus petit nombre d'atomes à sa surface et cela peut être quantifié par le concept de tension de surface. La tension de surface peut alors être vue comme la force qui pilote les échanges de matière entre la surface et l'intérieur du système (Wolfer, 2011). Gibbs a étendu le concept de tension de surface aux solides mais dans ce cas, la surface minimise son énergie non seulement par diffusion de matière mais également par des déformations élastiques. Il est alors nécessaire d'assigner à la surface une contrainte de surface $\boldsymbol{\sigma}_s$ en plus d'une énergie de surface. Shuttleworth (1950) a proposé une relation entre la contrainte, l'énergie et la déformation de surface. Cette relation est néanmoins source de débats intenses bien que très fréquemment rencontrée dans la littérature. Beaucoup d'incompréhensions sont liées également à la configuration, lagrangienne ou eulérienne, dans laquelle est établie cette relation. Pour plus de détails, il est possible de se référer aux travaux de Muller et Saul (2004). Wolfer (2011) explique que les débats liés à la définition thermodynamique peuvent être évités par une description purement mécanique de la surface en s'appuyant sur le cadre théorique proposé par Gurtin et Murdoch (1975).

Le modèle de Gurtin et Murdoch (1975) est constitué de deux équations : une loi de comportement surfacique et une équation d'équilibre. La loi de comportement surfacique est composée de deux parties : une contrainte résiduelle et une partie élastique. Celles-ci sont généralement supposées être isotropes dans le plan tangent à l'interface (appelé également plan transverse), bien qu'elles soient *a priori* anisotropes et dépendantes des paramètres cristallographiques de l'interface (Miller et Shenoy, 2000; Dingreville et Qu, 2007; Yvonnet et al., 2011). Cependant comme le font remarquer Paliwal et Cherkaoui (2012) et Duan et al. (2005b), il est peu probable que la zone perturbée soit orientée de façon particulière dans un matériau à nanoparticules. Elle est, *a priori*, orientée plutôt de manière aléatoire. Bien que l'hypothèse d'un comportement élastique isotrope de la surface ne corresponde pas exactement au cas de zones perturbées orientées de manière aléatoire, la complexité engendrée par la prise en compte de l'anisotropie surpasse le gain de précision (Paliwal et Cherkaoui, 2012; Duan et al., 2005b). C'est pourquoi, *l'isotropie du comportement mécanique de la zone perturbée est généralement postulée.*

Considérons une interface imparfaite cohérente Γ entre deux milieux (1 et 2) (Figure 3.1). Le vecteur normal unitaire à Γ (orienté de 1 vers 2) est noté $\boldsymbol{n}$. Le couple de vecteurs unitaires $\{\boldsymbol{t}_t, \boldsymbol{t}_b\}$ forme une base orthonormée directe pour les vecteurs de surface tangents. De plus, le trièdre $\{\boldsymbol{t}_t, \boldsymbol{t}_b, \boldsymbol{n}\}$ forme une base orthonormée directe pour les vecteurs de l'espace (i.e. $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{t}_t \wedge \boldsymbol{t}_b$). Les tenseurs identité d'ordre deux et quatre dans le plan tangent, respectivement notés $\boldsymbol{i}_T$ et $\mathbb{I}_T$, s'expriment alors de la façon suivante :

$$\boldsymbol{i}_T = \boldsymbol{i} - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n} \tag{3.1}$$

$$\mathbb{I}_T = \sum_{\alpha,\beta=t,b} \left[\boldsymbol{t}_\alpha \otimes \boldsymbol{t}_\alpha \otimes \boldsymbol{t}_\alpha \otimes \boldsymbol{t}_\alpha + \frac{1}{2}\big(\boldsymbol{t}_\alpha \otimes \boldsymbol{t}_\beta \otimes \boldsymbol{t}_\alpha \otimes \boldsymbol{t}_\beta + \boldsymbol{t}_\alpha \otimes \boldsymbol{t}_\beta \otimes \boldsymbol{t}_\beta \otimes \boldsymbol{t}_\alpha\big) \right] \tag{3.2}$$

Le modèle d'interface imparfaite cohérente est finalement décrit par le couple d'équations suivant :

Équation d'équilibre :

$$[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \boldsymbol{0} \tag{3.3}$$

où $\boldsymbol{b}$ est le tenseur de courbure dont la définition est donné à l'annexe C (équation C.10) et l'opérateur div_s fait référence à la divergence surfacique pour les champs tensoriels surfaciques tangents d'ordre deux (cf. annexe C). Le lecteur désireux de plus de précisions sur la théorie des surfaces, notamment sur la divergence surfacique et sur le tenseur de courbure, peut se référer à l'annexe C qui s'appuie sur le cours de Garrigues (1999).

Loi de comportement surfacique :

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s \boldsymbol{i}_T + \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s \tag{3.4}$$

où $\boldsymbol{\sigma}_s$ est défini comme le tenseur des contraintes surfaciques (cf. annexe D). Le tenseur $\boldsymbol{\epsilon}_s$, dont la définition est donnée à l'équation (3.7), est le tenseur des déformations surfaciques dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations. Le saut de contraintes $[\boldsymbol{\sigma}]$ à travers l'interface Γ est tel que $[\boldsymbol{\sigma}] = \boldsymbol{\sigma}^{(2)} - \boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ où $\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ et $\boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ sont les tenseurs des contraintes à l'interface respectivement dans le milieu 1 et le milieu 2. Le scalaire γ_s correspond à une précontrainte hydrostatique (dans le plan tangent) appelé *tension de surface* (par analogie avec les liquides) et $\mathbb{C}_s$ est un tenseur de rigidité surfacique d'ordre quatre. Dans le cas particulier du système de coordonnées sphériques $\{r, \theta, \phi\}$ ($r \in [0, \infty]$, $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [0, 2\pi]$), l'équation d'équilibre s'exprime de la façon suivante :

$$\begin{cases} [\sigma_{rr}] = \sigma_{rr}^{(2)} - \sigma_{rr}^{(1)} = \dfrac{\sigma_{\theta\theta}^s + \sigma_{\phi\phi}^s}{r} \\ [\sigma_{r\theta}] = \sigma_{r\theta}^{(2)} - \sigma_{r\theta}^{(1)} = -\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \sigma_{\theta\theta}^s}{\partial \theta} + \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial \sigma_{\theta\phi}^s}{\partial \phi} + \dfrac{\sigma_{\theta\theta}^s - \sigma_{\phi\phi}^s}{r}\cot\theta \right) \\ [\sigma_{r\phi}] = \sigma_{r\phi}^{(2)} - \sigma_{r\phi}^{(1)} = -\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \sigma_{\theta\phi}^s}{\partial \theta} + \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial \sigma_{\phi\phi}^s}{\partial \phi} + \dfrac{2\sigma_{\theta\phi}^s}{r}\cot\theta \right) \end{cases} \tag{3.5}$$

L'élasticité surfacique étant supposée isotrope dans le plan tangent, le tenseur de rigidité surfacique $\mathbb{C}_s$ peut alors s'écrire de la façon suivante dans la base d'isotropie transverse pour les tenseurs d'ordre quatre (l'axe d'isotropie transverse est porté par le vecteur $\boldsymbol{n}$) :

$$\mathbb{C}_s = 2(k_s \mathbb{J}_T + \mu_s \mathbb{K}_T) \tag{3.6}$$

où $\mathbb{J}_T = \frac{1}{2}(\boldsymbol{i}_T \otimes \boldsymbol{i}_T)$ et $\mathbb{K}_T = \mathbb{I}_T - \mathbb{J}_T$. Les scalaires k_s et μ_s sont les coefficients d'élasticité surfacique exprimés, tout comme γ_s, en J/m^2 (ou en N/m). Les composantes de la précontrainte et du tenseur de rigidité $\mathbb{C}_s$ associées à la normale $\boldsymbol{n}$ sont supposées nulles dans ce modèle (cf. équations (3.4) et (3.6)). De la même façon que Le Quang et He (2008) et Brisard et al. (2010a,b), le tenseur de rigidité surfacique $\mathbb{C}_s$ est supposé défini positif dans ce travail.

La déformation surfacique $\boldsymbol{\epsilon}_s$ est égale à la partie tangente à l'interface de la déformation dans le milieu 1 ou dans le milieu 2. En effet, le déplacement étant continu à travers l'interface, il en résulte que les composantes tangentielles du tenseur des déformations sont également continues. Cela se traduit par les relations suivantes :

$$\boldsymbol{\epsilon}_s(\boldsymbol{x}) = \mathbb{I}_T(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\epsilon}^{(1)}(\boldsymbol{x}) = \mathbb{I}_T(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\epsilon}^{(2)}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Gamma \tag{3.7}$$

où $\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}$ et $\boldsymbol{\epsilon}^{(2)}$ sont les tenseurs des déformations à l'interface respectivement dans le milieu 1 et le milieu 2.

Il est intéressant de remarquer que les équations (3.4), (3.6) et (3.7) conduisent à des tenseurs de contrainte $\boldsymbol{\sigma}_s$ et de déformation $\boldsymbol{\epsilon}_s$ tangents (cf. annexe C).

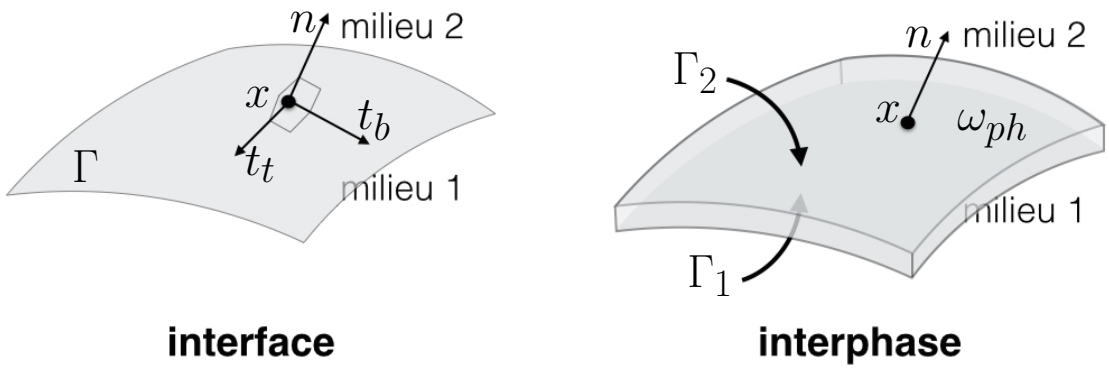


Figure 3.1 – *Représentations schématiques de l'interface imparfaite cohérente (à gauche) et de l'interphase (à droite).*

2.2 Approche par interphase

Les modèles d'interface reposent sur des hypothèses concernant la zone perturbée. Son épaisseur doit être petite devant les autres longueurs caractéristiques de la microstructure, tel que le rayon des cavités dans le cas présent. Il repose aussi sur des hypothèses phénoménologiques : continuité du déplacement et saut du vecteur contrainte dans le cas du modèle d'interface imparfaite cohérente (ou inversement, continuité du vecteur contrainte et saut de déplacement pour le *spring layer model*). Cela peut être problématique lorsque les caractéristiques morphologiques et les propriétés mécaniques de la zone perturbée ne sont pas connues *a priori*.

La solution proposée par Paliwal et Cherkaoui (2012) pour pallier ce problème est d'avoir recours à un modèle d'interphase. La zone perturbée est alors modélisée comme une phase *classique* en mécanique des milieux continus. Les champs locaux sur l'interphase vérifient alors l'équation d'équilibre *classique* en statique ($\mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$). Le comportement mécanique de l'interphase est décrit par une loi de comportement élastique linéaire supposée isotrope (pour les mêmes raisons que dans le cas du modèle d'interface imparfaite cohérente) avec un état de contrainte initial (précontrainte). Les interfaces entre l'interphase et les milieux environnants sont supposées parfaites (continuité du déplacement et du vecteur contrainte).

Considérons une interphase homogène de rigidité $\mathbb{C}_{ph}$ occupant le domaine ω_{ph} entre deux milieux (1 et 2) (Figure 3.1). Elle est soumise à une précontrainte hydrostatique $\gamma_{ph}\boldsymbol{i}$. Les interfaces entre l'interphase et le milieu 1 et entre l'interphase et le milieu 2 sont notées respectivement Γ_1 et Γ_2. Le vecteur normal unitaire au contour $\partial\omega_{ph}$ de ω_{ph} dirigé vers l'extérieur du domaine est noté $\boldsymbol{n}$. Les équations que doivent vérifier les champs mécaniques locaux dans l'interphase sont les suivantes :

$$\begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \gamma_{ph}\boldsymbol{i} + \mathbb{C}_{ph} : \boldsymbol{\epsilon} \text{ dans } \omega_{ph} \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} = \mathbf{0}, \quad [\boldsymbol{u}] = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_1 \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} = \mathbf{0}, \quad [\boldsymbol{u}] = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_2 \end{cases} \tag{3.8}$$

où $[\boldsymbol{\sigma}]$ et $[\boldsymbol{u}]$ désignent respectivement les sauts de contraintes et de déplacement à travers les interfaces Γ_i ($i \in [1, 2]$). La manière dont sont définis les sauts ou l'orientation des normales aux interfaces, n'a pas d'importance ici (contrairement au modèle d'interface imparfaite cohérente où le saut de contrainte doit être défini en fonction de l'orientation de la normale).

Le tenseur de rigidité $\mathbb{C}_{ph}$ étant supposé isotrope, il peut être décomposé de la façon suivante :

$$\mathbb{C}_{ph} = 3k_{ph}\mathbb{J} + 2\mu_{ph}\mathbb{K} \tag{3.9}$$

où k_{ph} et μ_{ph} désignent respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement de l'interphase.

Bien que les interphases soient des zones où les propriétés mécaniques évoluent, *a priori*, continûment du milieu 1 au milieu 2, les propriétés mécaniques sont en général supposées homogènes sur ω_{ph} (Marcadon, 2005; Paliwal et Cherkaoui, 2012).

Paliwal et Cherkaoui (2012) font remarquer que l'épaisseur de la zone perturbée est généralement du même ordre de grandeur que la taille des hétérogénéités. Il semble alors plus pertinent d'utiliser une description par interphase plutôt qu'une description par interface. Néanmoins, les résultats analytiques dans le cas d'une modélisation par interphase sont plus rares et plus complexes (Wang et al., 2011).

De plus, le nombre d'atomes situés dans la zone perturbée étant relativement faible, l'utilisation d'une approche par interphase, semble difficilement justifiable. Ainsi, il semble plus raisonnable de considérer qu'une modélisation par interface, ou interphase, relève dans les deux cas d'une simple analogie consistant à assimiler un modèle particulier à la zone perturbée. Les connaissances sur la zone perturbée étant limitées, il est difficile de savoir quelle approche est véritablement la plus pertinente. Cela doit être vérifié à posteriori à

partir de simulation à l'échelle atomique par exemple. Dans le cadre de ce travail, la zone perturbée est décrite par une interface imparfaite cohérente. Ce choix est essentiellement motivé par le fait que ce type d'approche conduit à des résultats analytiques relativement simples à implémenter dans un code de calcul *métier* tel que le code SCANAIR présenté au chapitre 1.

2.3 Équivalence entre les approches

Comme cela a déjà été mentionné précédemment, le modèle d'interface imparfaite cohérente est un cas limite d'interphase fine « rigide ». Ce modèle est équivalent à un voile dont l'épaisseur tend vers zéro, c'est-à-dire à une coque mince (ou à une interphase fine) de Kirchhoff-Love pour laquelle les efforts nécessaires pour la fléchir sont négligeables devant les efforts nécessaires pour l'allonger. De plus, le comportement mécanique volumique de cette coque mince d'épaisseur h *petite*, indicée ph comme à la section précédente, est le suivant :

$$\boldsymbol{\sigma} = \gamma_{ph}\boldsymbol{i} + \mathbb{C}_{ph} : \boldsymbol{\epsilon} \quad \text{avec} \quad \mathbb{C}_{ph} = 3k_{ph}\mathbb{J} + 2\mu_{ph}\mathbb{K} \tag{3.10}$$

où

$$k_{ph} = \frac{1}{h}\frac{4k_s\mu_s}{3(3\mu_s - k_s)}, \quad \mu_{ph} = \frac{\mu_s}{h}, \quad \gamma_{ph} = \frac{\gamma_s}{h}\frac{2\mu_s}{3\mu_s - k_s} \tag{3.11}$$

Lorsque l'épaisseur h tend vers zéro, les modèles surfacique et volumique sont équivalents.

Inversement, le modèle d'interface imparfaite cohérente permet de décrire le comportement d'une interphase fine rigide lorsque ces propriétés sont les suivantes :

$$k_s = h\frac{9k_{ph}\mu_{ph}}{3k_{ph} + 4\mu_{ph}}, \quad \mu_s = h\mu_{ph}, \quad \gamma_s = \gamma_{ph}\frac{6h\mu_{ph}}{3k_{ph} + 4\mu_{ph}}, \tag{3.12}$$

Ces relations *d'équivalence* des propriétés élastiques surfaciques et volumiques ont été mises en évidence par Wang et al. (2005) et Brisard et al. (2010a). Pour plus de détails concernant l'établissement de ces relations, il est possible de se référer à l'annexe D. À notre connaissance, la relation entre γ_s et γ_{ph} constitue une originalité de ce travail.

Comme Brisard et al. (2010a,b), le tenseur de rigidité de *l'interphase équivalente* à l'interface imparfaite cohérente est supposé défini positif dans l'ensemble de ce travail (c'est-à-dire $0 \leq k_s \leq 3\mu_s$).

3 Comportement élastique des matériaux nanoporeux : modèles existants

Plusieurs modèles micromécaniques capables de tenir compte de l'effet de surface à l'échelle nanométrique ont été récemment proposés (Marcadon, 2005; Duan et al., 2005b, 2007a,b; Le Quang et He, 2008; Brisard et al., 2010a,b; Paliwal et Cherkaoui, 2012). Ci-après, les principaux modèles sont présentés. La première section est consacrée aux modèles micromécaniques s'appuyant sur une description de la zone perturbée par le modèle d'interface imparfaite cohérente tel qu'il a été présenté précédemment. Dans la section suivante, quelques modèles reposant sur une description par interphase sont brièvement présentés.

3.1 Modèles avec interfaces imparfaites cohérentes

Des travaux récents ont eu pour objectif d'étendre des résultats classiques d'homogénéisation ou de développer des modèles micromécaniques permettant de décrire le comportement élastique effectif des matériaux contenant des interfaces imparfaites cohérentes (Sharma et Ganti, 2004; Duan et al., 2005a,b,c, 2007a,b; Le Quang et He, 2008; Duan et al., 2009; Brisard et al., 2010a,b). Les modèles micromécaniques existants sont restreints aux cas de matériaux contenant des inclusions nanosphériques réparties aléatoirement dans la matrice. Ci-après, les travaux de (Duan et al., 2005b; Le Quang et He, 2008; Brisard et al., 2010a,b) sont présentés plus en détails.

3.1.1 Les modèles de Duan et al. (2005b) et de Brisard et al. (2010a,b)

Duan et al. (2005b) ont proposé un formalisme permettant de développer des modèles micromécaniques capables de décrire le comportement élastique effectif des matériaux contenant des interfaces imparfaites cohérentes. À partir de ce formalisme, ils ont étendu les modèles micromécaniques suivants :

- le modèle d'assemblage de sphères composites (ASC) de Hashin (1962) ;
- le modèle de Mori et Tanaka (1973) (MT) ;
- le modèle autocohérent généralisé (ACG) (Christensen et Lo, 1979).

Ces modèles fournissent des bornes et estimations du comportement élastique effectif des matériaux contenant des nano-inclusions sphériques réparties de façon aléatoire dont la distribution est isotrope. Ils décrivent évidemment un matériau macroscopiquement isotrope dont le comportement effectif est caractérisé par un module de compressibilité et un module de cisaillement. Ces modèles sont présentés ci-après dans le cas particulier où les inclusions sont poreuses (cavités).

Extension du modèle d'assemblage de sphères composites de Hashin (1962)

Ce modèle correspond aux bornes de Voigt et Reuss généralisées d'un assemblage de sphères composites de Hashin. La solution du problème de localisation est ici approchée en étudiant le comportement d'une cavité sphérique entourée d'une couche de matrice de forme extérieure sphérique et concentrique avec la cavité. Ce système est nommé *sphère creuse* par la suite. Des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées à l'interface entre la cavité et la couche de matrice. Des conditions de déformations et de contraintes homogènes sont ensuite appliquées sur le bord de la sphère creuse. Des conditions de déformations homogènes conduisent à une borne supérieure du comportement effectif (ASC+) alors que des conditions de contraintes homogènes conduisent à une borne inférieure (ASC-). Ces problèmes sont illustrés sur la figure 3.2. Un chargement hydrostatique permet d'établir des bornes pour le module de compressibilité effectif et un chargement déviatorique permet d'établir des bornes pour le module de cisaillement effectif. Duan et al. (2005b) ont uniquement déterminé les bornes du module de compressibilité effectif. Les bornes pour le module de cisaillement sont établies par la suite dans le cadre de l'application de l'approche par motifs (cf. chapitre 4).

Extension du modèle de Mori et Tanaka (1973)

La solution du problème de localisation est ici approchée en étudiant une cavité sphérique

noyée dans un milieu infini ayant les propriétés de la matrice. Des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées à l'interface entre la cavité et le milieu infini. Des conditions de déformations, ou indifféremment de contraintes homogènes, sont appliquées à l'infini. La déformation (ou la contrainte) appliquée est celle apparaissant dans la phase de matrice du volume élémentaire représentatif (VER) notée $\boldsymbol{\epsilon}_m$. Ce problème est illustré sur la Figure 3.2. Comme précédemment, un chargement hydrostatique permet d'établir une estimation du module de compressibilité effectif et un chargement déviatorique permet d'établir une estimation du module de cisaillement effectif.

Brisard et al. (2010a,b) ont montré en s'appuyant sur l'approche variationnelle de Ponte Castañeda et Willis (1995) et en construisant des champs admissibles non uniformes que cette estimation est une borne lorsque la matrice est la plus souple des phases. Cela nécessite néanmoins de supposer que le tenseur de rigidité de l'interphase équivalente à l'interface est défini positif (c'est-à-dire $0 \leq k_s \leq 3\mu_s$ où k_s et μ_s sont les coefficients d'élasticité surfacique de l'interface (Brisard et al., 2010a)). Dans le cas poreux, le statut de borne est perdu car la phase la plus souple est le vide. Brisard et al. (2010a) ont également étendu l'estimation du module de compressibilité au cas d'un matériau polydisperse.

Extension du modèle autocohérent généralisé de Christensen et Lo (1979)

Le modèle autocohérent généralisé de Duan et al. (2005b) est établi en étudiant une sphère creuse noyé dans un milieu infini ayant les propriétés du milieu effectif recherché. Des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées à l'interface entre la cavité et la couche de matrice. L'interface entre la matrice et le milieu infini est parfaite. Des conditions de déformations, ou indifféremment de contraintes homogènes, sont appliquées à l'infini. Cette déformation (resp. contrainte) est égale à la déformation (resp. contrainte) macroscopique $\mathbf{E}$ (resp. $\boldsymbol{\Sigma}$) sur le VER. Les propriétés effectives sont obtenues en vérifiant la condition d'autocohérence : la déformation moyenne sur la sphère creuse doit être égale à déformation macroscopique (déformation appliquée à l'infini). Ce problème est illustré sur la Figure 3.2.

Les modules de compressibilité et de cisaillement de la matrice sont notés k_m et μ_m. Les modules de compressibilité et de cisaillement surfaciques de l'interface sont notés k_s et μ_s. Le rayon des cavités est noté r et la porosité f (avec $f = (r/R)^3$). Ci-après, un indice D fait référence aux modèles initialement proposés par Duan et al. (2005b). Les trois modèles précédents conduisent au même module de compressibilité ($k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{MT}} = k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ACG}} = k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ASC+}} = k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ASC\text{-}}}$ où $k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{MT}}$, $k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ACG}}$, $k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ASC+}}$ et $k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ASC\text{-}}}$ désignent respectivement les modules de compressibilité des modèles MT, ACG, ASC+ et ASC- de Duan et al. (2005a)) :

$$k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{MT}} = k_m + \frac{f}{3}\frac{(3k_m + 4\mu_m)(4k_s - 3k_m r)}{4(1-f)k_s + r(3fk_m + 4\mu_m)} \tag{3.13}$$

L'estimation de Mori et Tanaka conduit au module de cisaillement suivant :

$$\mu_{\mathrm{D}}^{\mathrm{MT}} = \mu_m + f\frac{5\beta_d\mu_m(3k_m + 4\mu_m)}{3k_m\delta_d + 4\mu_m\zeta_d - 6f\beta_d(k_m + 2\mu_m)} \tag{3.14}$$

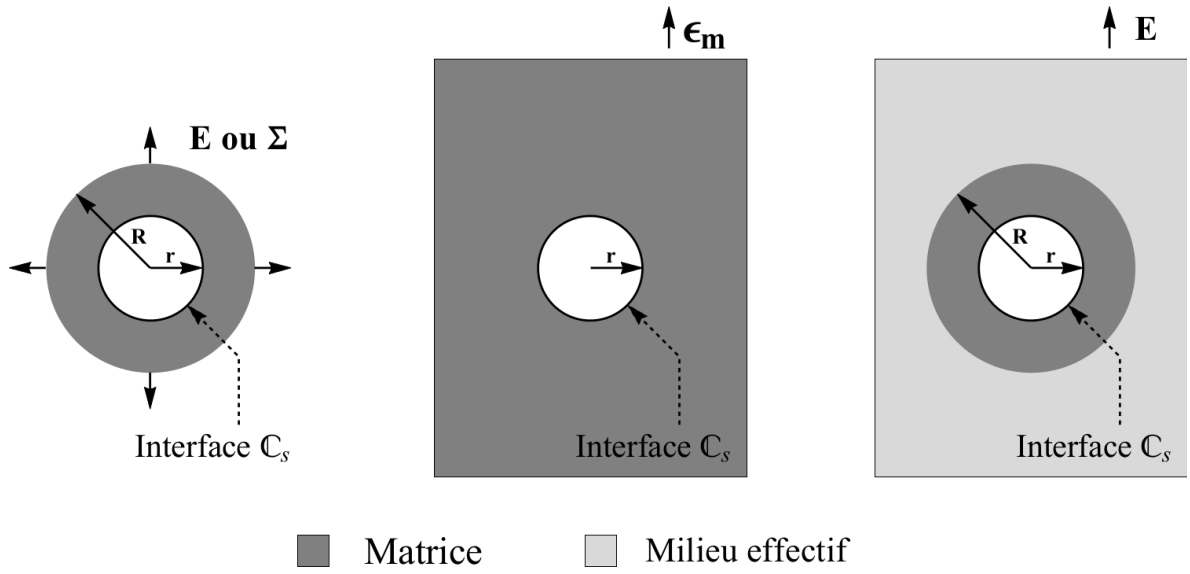


Figure 3.2 – Problèmes de localisation pour les modèles de sphères composites (à gauche), de Mori et Tanaka (au centre) et autocohérent généralisé (à droite) de Duan et al. (2005b).

où

$$\begin{aligned} \beta_d &= (k_s + r\mu_m)(\mu_s - r\mu_m), \\ \delta_d &= 3r\mu_m(r\mu_m + \mu_s) + 2k_s(2r\mu_m + \mu_s), \\ \zeta_d &= 3k_s(r\mu_m + \mu_s) + 2r\mu_m(r\mu_m + 2\mu_s) \end{aligned} \tag{3.15}$$

Finalement, le tenseur de rigidité de l'estimation MT de Duan et al. (2005b) s'exprime comme suit :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{D}}^{\mathrm{MT}} = 3k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{MT}}\mathbb{J} + 2\mu_{\mathrm{D}}^{\mathrm{MT}}\mathbb{K} \tag{3.16}$$

Il est important de noter que la définition du module de compressibilité surfacique k_s diffère ici de celle de Duan et al. (2005b). En effet, la définition retenue est celle donnée par Le Quang et He (2008); Brisard et al. (2010a,b) [1].

Dans le cas du modèle autocohérent généralisé, Duan et al. (2005b) montrent que la détermination du module de cisaillement effectif nécessite la résolution d'une équation polynômiale du second degré dont les coefficients ne sont pas explicitement fournis par les auteurs. Ceux-ci sont précisés par la suite dans le cadre de l'application de l'approche par motifs (cf. chapitre 4). Le tenseur de rigidité de l'estimation ACG de Duan et al. (2005b) est de la forme suivante :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ACG}} = 3k_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ACG}}\mathbb{J} + 2\mu_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ACG}}\mathbb{K} \tag{3.17}$$

où $\mu_{\mathrm{D}}^{\mathrm{ACG}}$ désigne le module de cisaillement effectif de l'estimation ACG de Duan et al. (2005b).

Duan et al. (2005b) mettent en évidence que leurs modèles tendent vers leurs homologues de l'approche classique lorsque les effets de surface deviennent négligeables, c'est-à-

1. Le module de compressibilité surfacique donné par Duan et al. (2005b) est égal à deux fois celui de Le Quang et He (2008); Brisard et al. (2010a,b).

dire lorsque l'interface devient très souple ou lorsque la taille des cavités devient grande.

Dans le cas, d'un matériau nanoporeux polydisperse, le module de compressibilité de l'estimation de Mori et Tanaka peut s'écrire de la manière suivante (Brisard et al., 2010a) :

$$k^{\mathrm{MT}} = k_m + \frac{1}{3}\frac{F}{1-F}(3k_m + 4\mu_m) \tag{3.18}$$

où

$$F = 3\int_0^{+\infty} \frac{k_p(a) - k_m}{3k_p(a) + 4\mu_m} f(a)\mathrm{d}a \tag{3.19}$$

et $k_p = (4k_s)/(3a)$. Le scalaire $f(a)$ est tel que $f(a)\mathrm{d}a$ désigne la porosité des cavités dont le rayon est compris entre a et $a + \mathrm{d}a$.

3.1.2 Les travaux de Le Quang et He (2008)

Le Quang et He (2008) ont étendu les principes variationnels aux matériaux contenant des interfaces imparfaites cohérentes. À partir de ces résultats fondamentaux, ils ont développé des bornes d'ordre 1 de type Voigt et Reuss en construisant des champs admissibles appropriés. Dans le cas où les hétérogénéités (cavités dans le cas présent) sont sphériques et que les phases ont un comportement élastique isotrope, ses bornes sont explicites.

Le matériau étudié est constitué de n familles de cavités sphériques, indicées i, dispersées dans une matrice homogène, indicée m et de rigidité $\mathbb{C}_m$. Le rayon des cavités de la famille i est noté $r^{(i)}$. À l'interface $\Gamma^{(i)}$ entre les cavités de la famille i ($i \in [1, ..., n]$) et la matrice, des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées. Le tenseur de rigidité associé à l'interface $\Gamma^{(i)}$ est noté $\mathbb{C}_s^{(i)}$ avec :

$$\mathbb{C}_s^{(i)} = 2(k_s^{(i)}\mathbb{J}_T + \mu_s^{(i)}\mathbb{K}_T) \tag{3.20}$$

où $k_s^{(i)}$ et $\mu_s^{(i)}$ sont les coefficients d'élasticité surfaciques associés à l'interface $\Gamma^{(i)}$. Les tenseurs $\mathbb{C}_s^{(i)}$ ($\forall i \in [1, ..., n]$) sont supposées définis positifs. La fraction volumique de matrice est noté c_m et la porosité des cavités de la famille i est notée f_i.

Comme pour la borne classique de Voigt, la borne supérieure de Le Quang et He (2008) (LQH+) est établie à partir d'un champ de déformation admissible uniforme. Cela conduit à l'expression suivante du tenseur de rigidité de la borne LQH+ :

$$\mathbb{C}^{\mathrm{LQH+}} = 3k^{\mathrm{LQH+}}\mathbb{J} + 2\mu^{\mathrm{LQH+}}\mathbb{K} \tag{3.21}$$

où

$$\tilde{k} \leq k^{\mathrm{LQH+}} = c_m k_m + \sum_{i=1}^{n} f_i\Big(\frac{4}{3}\frac{k_s^{(i)}}{r^{(i)}}\Big) \tag{3.22}$$

et

$$\tilde{\mu} \leq \mu^{\mathrm{LQH+}} = c_m \mu_m + \sum_{i=1}^{n} f_i\Big(\frac{k_s^{(i)} + 6\mu_s^{(i)}}{5r^{(i)}}\Big) \tag{3.23}$$

Les scalaires $\tilde{k}$ et $\tilde{\mu}$ sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement effectifs.

La borne inférieure ne peut pas être construite à partir d'un champ de contrainte uniforme. En effet, un tel champ conduit à un saut de contrainte nul à travers l'interface et donc à des contraintes surfaciques nulles. Il ne permet pas de tenir compte de l'effet de surface. La borne inférieure de Le Quang et He (2008) (LQH-) pour le module de compressibilité repose sur un choix de champ de contrainte admissible uniforme par phases. Le Quang et He (2008) ont développé deux bornes inférieures pour le module de cisaillement effectif. Elles sont fondées sur différentes formes de champs de contraintes admissibles. Cependant, il est possible de montrer que dans le cas où les hétérogénéités sont des cavités, ces deux bornes sont identiques. Le tenseur de rigidité de la borne LQH- s'exprime comme suit :

$$\mathbb{C}^{\text{LQH-}} = 3k^{\text{LQH-}}\mathbb{J} + 2\mu^{\text{LQH-}}\mathbb{K} \tag{3.24}$$

où

$$\tilde{k} \geq k^{\text{LQH-}} = \left[\frac{c_m}{k_m} + \sum_{i=1}^{n} f_i \frac{3}{4}\frac{r^{(i)}}{k_s^{(i)}}\right]^{-1} \tag{3.25}$$

et

$$\tilde{\mu} \geq \mu^{\text{LQH-}} = \left[\frac{c_m}{\mu_m} + \sum_{i=1}^{n} f_i \frac{(6k_s^{(i)} + \mu_s^{(i)})r_1^{(i)}}{5k_s^{(i)}\mu_s^{(i)}}\right]^{-1} \tag{3.26}$$

Les bornes de Le Quang et He (2008) tendent vers les bornes classiques de Voigt et Reuss lorsque l'effet de surface devient négligeable, c'est-à-dire lorsque les interfaces sont très souples ou lorsque la taille des cavités devient grande. Il est rappelé que la borne classique de Voigt est nulle dans le cas d'un matériau poreux.

3.1.3 Applications numériques

Les modèles présentés précédemment sont maintenant illustrés à travers une application numérique. Les propriétés élastiques effectives d'un matériau nanoporeux contenant des cavités sphériques de même taille distribuées aléatoirement sont déterminées. Les valeurs des paramètres retenues pour les applications sont présentées dans le tableau 3.1. Les propriétés élastiques de l'interface imparfaite cohérente sont choisies telles que l'interphase équivalente, d'épaisseur égale à 10^{-2} nm (afin qu'elle reste petite devant le rayon nanométrique des cavités), soit 20 fois plus rigide que la matrice (cf. équation (3.12)).

E_m (GPa)	ν_m	E_{ph} (GPa)	ν_{ph}	h (nm)	k_s (J/m^2)	μ_s (J/m^2)
100	$0,3$	2000	$0,3$	10^{-2}	$14,29$	$7,69$

Table 3.1 – *Propriétés matériaux considérées pour l'application numérique.*

Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs (normalisés respectivement par rapport au module de compressibilité et de cisaillement de la matrice) en fonction du rayon des cavités sont représentées sur les figures 3.3 et 3.4. Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs (normalisés) en fonction de la porosité sont représentées sur les figures 3.5 et 3.6. Les propriétés effectives obtenues à partir des modèles autocohérent généralisé de Duan et al. (2005b), de Mori et Tanaka de

Duan et al. (2005b) et des bornes de Le Quang et He (2008) sont tracées.

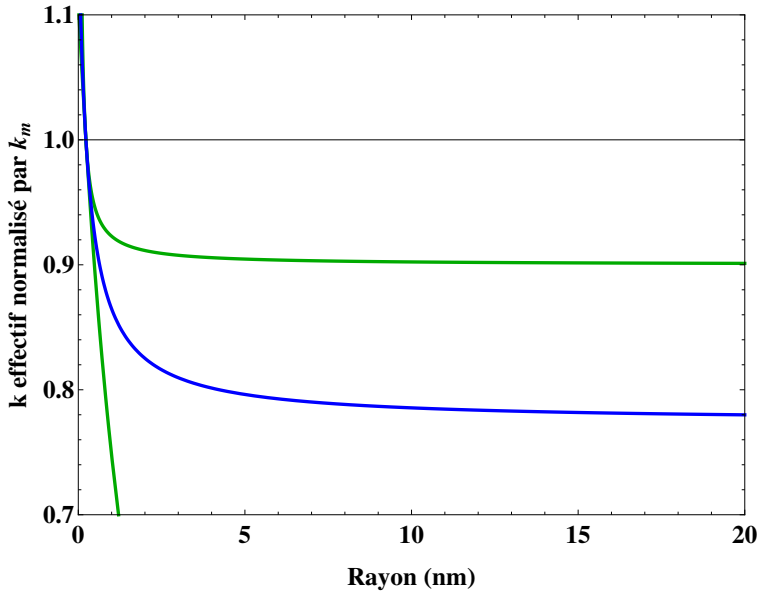


Figure 3.3 – *Évolution du module de compressibilité (normalisé par k_m) en fonction du rayon des cavités. La porosité totale f est égale à 10 %. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), en bleu : Estimation MT de Duan et al. (2005b).*

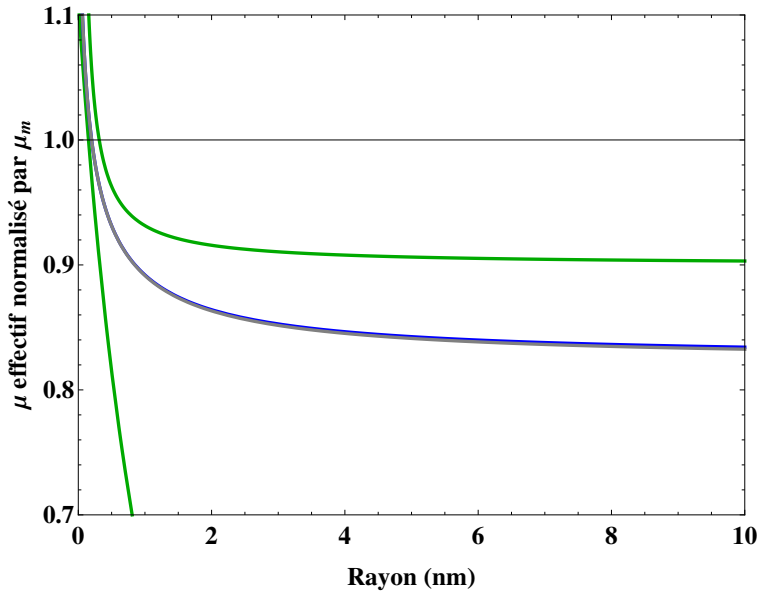


Figure 3.4 – *Évolution du module de cisaillement (normalisé par μ_m) en fonction du rayon des cavités. La porosité totale f est égale à 10 %. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), en bleu : Estimation MT de Duan et al. (2005b), en gris : Estimation ACG de Duan et al. (2005b).*

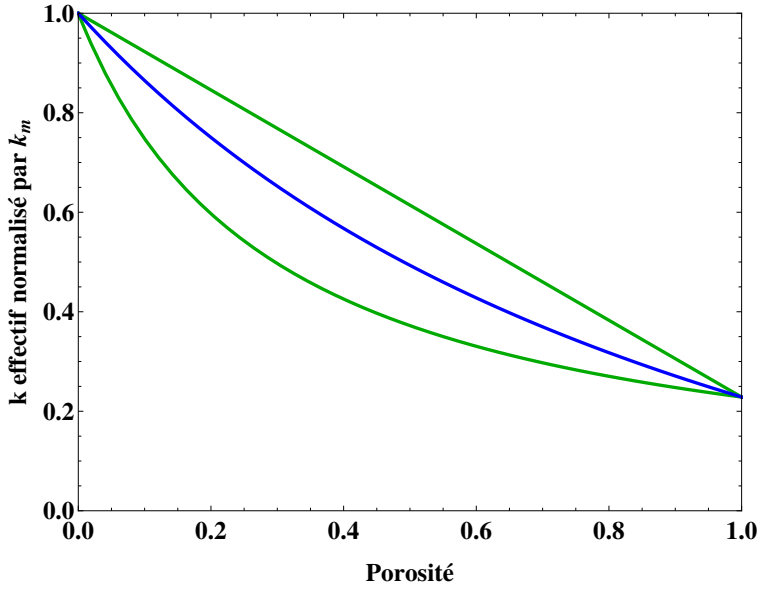


Figure 3.5 – *Évolution du module de compressibilité (normalisé par k_m) en fonction de la porosité. Le rayon des cavités est égal à 1 nm. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), en bleu : Estimation MT de Duan et al. (2005b).*

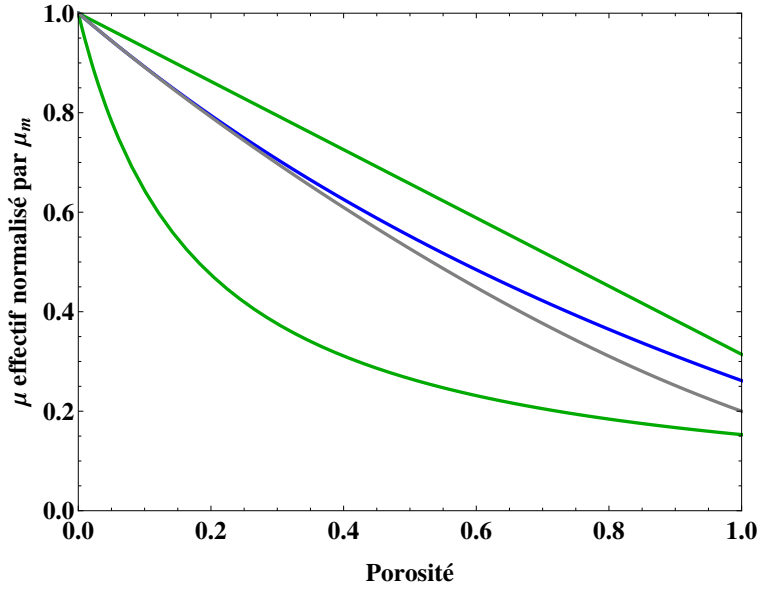


Figure 3.6 – *Évolution du module de cisaillement (normalisé par μ_m) en fonction de la porosité. Le rayon des cavités est égal à 1 nm. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), en bleu : Estimation MT de Duan et al. (2005b), en gris : Estimation ACG de Duan et al. (2005b).*

L'effet de surface est bien pris en compte et les propriétés élastiques effectives sont dépendantes du rayon des cavités. Quand la taille des cavités devient grande, l'effet de surface devient négligeable et les modèles tendent vers leur modèle homologue sans effet de surface. Pour des petites tailles de cavités, les modèles prédisent un comportement effectif

plus rigide que celui de la matrice (Duan et al., 2006). Les modèles MT et ACG sont très proches l'un de l'autre tant que la porosité est inférieure à 40 %. Ils respectent les bornes de Le Quang et He (2008).

Il est intéressant de remarquer que lorsque la porosité est égale à 1, c'est-à-dire qu'il n'y a que du vide, les propriétés effectives prédites par les modèles ne sont pas nulles. En effet, les interfaces sont toujours présentes et apportent une certaine raideur au matériau. Cela ne correspond évidemment pas à une réalité physique. En pratique, la porosité maximale que peuvent atteindre les cavités sphériques de même taille correspond à la compacité maximale d'un assemblage de sphère *monodispersées*, c'est-dire $f = \pi/(3\sqrt{2}) \approx 0.74048$.

3.2 Modèles avec interphases

Les travaux s'appuyant sur une modélisation par interphase de la zone pertubée afin de déterminer le comportement élastique effectif des matériaux nanocomposites sont relativement peu nombreux en comparaison de ceux utilisant une modélisation par interface imparfaite cohérente. Il existe cependant des modèles, dont le champ d'application est plus large que celui des nanomatériaux, qui permettent de décrire le comportement mécanique effectif des matériaux à renforts entourés d'une interphase.

Hervé et Pellegrini (1995) ont notamment proposé un modèle autocohérent généralisé, des bornes de Hashin et Shtrikman généralisées et des bornes de Voigt et Reuss généralisées pour un assemblage de Hashin généralisé de sphères creuses multi-couches. La borne inférieure de type Hashin et Shtrikman généralisée coïncide avec la borne de type Reuss généralisée (car la plus souple des phases est le vide, cf. équation (2.36)). Le cas particulier d'une sphère creuse à deux couches, interphase et matrice, semble particulièrement adapté pour la détermination des propriétés effectives des matériaux nanoporeux à cavités sphériques distribuées de façon isotrope.

L'approche par interphase a été utilisée dans le cadre de la thèse de Marcadon (2005) et dans Marcadon et al. (2007) pour décrire le comportement élastique effectif des matériaux contenant des nanoparticules sphériques distribuées aléatoirement. Marcadon (2005) a proposé un modèle d'inclusions diluées et un modèle de type Mori et Tanaka en s'appuyant sur les travaux de Hervé et Pellegrini (1995) pour résoudre le problème de localisation. Il a également utilisé le modèle autocohérent généralisé de Hervé et Pellegrini (1995). Marcadon (2005) a proposé des variantes à ce dernier modèle en appliquant l'approche par motifs. Il a notamment étudié l'influence de la prise en compte :

- d'un domaine de matrice environnante ;
- d'inclusions bi-disperses en introduisant un second motif.

Bien que l'approche par interphase ne soit pas privilégie dans cette étude, il est important de souligner que les travaux de Marcadon (2005), notamment l'utilisation de l'approche par motifs pour introduire des effets de taille, ont été sources d'inspiration pour ce travail.

Paliwal et Cherkaoui (2012) utilisent également un modèle autocohérent issu des travaux de Cherkaoui et al. (1995). Ce modèle permet de déterminer les propriétés élastiques effectives de matériaux à particules ellipsoïdales enrobées d'une interphase ellipsoïdale (non nécessairement homothétique). Les phases peuvent avoir un comportement anisotrope. Le

modèle de Cherkaoui et al. (1995) a été étendu au cas d'inclusions multi-couches par Lipinski et al. (2006). Ces modèles supposent que les épaisseurs des interphases sont petites. Ils s'appuient également sur des simplifications des champs solutions du problème de localisation qui est présenté plus en détails à la section 3 du chapitre 4. Les travaux de Cherkaoui et al. (1995) sont utilisés dans cette étude, en particulier la solution approchée du problème de localisation, pour développer un modèle de type Mori et Tanaka généralisé permettant de décrire le comportement effectif des matériaux contenant des cavités nanosphéroïdales où la zone perturbée est décrite par une interface imparfaite cohérente.

4 Bilan du chapitre

L'effet de surface présent à l'échelle nanométrique est dû à la présence d'une zone perturbée de quelques rangées d'atomes à proximité des interfaces entre les différentes phases. Cet effet, négligé dans le cadre de la mécanique des milieux continus classique, doit être pris en compte lorsque le nombre d'atomes à proximité de ces interfaces est important. C'est généralement le cas des nanomatériaux pour lesquels une forte dépendance des propriétés effectives aux longueurs caractéristiques nanométriques de la microstructure est observée.

La première étape pour développer des modèles micromécaniques capables de décrire le comportement élastique effectif des nanomatériaux, consiste à donner une description mécanique à la zone perturbée. Il existe principalement deux modèles : le modèle d'interface imparfaite cohérente et le modèle d'interphase.

Le modèle d'interface imparfaite cohérente, très largement utilisé dans le cadre de l'étude des nanomatériaux, a l'avantage de conduire à des modèles micromécaniques analytiques assez simples à mettre en oeuvre dans un code de calcul. Cependant, il repose sur des considérations phénoménologiques : la zone perturbée est supposée fine et rigide.

Le modèle d'interphase ne fait pas d'hypothèses phénoménologiques concernant la zone perturbée. Il a cependant l'inconvénient de conduire à des modèles micromécaniques plus complexes à mettre en œuvre. De plus, son utilisation n'est pas forcément plus pertinente que celle du modèle d'interface imparfaite cohérente. En effet, le nombre de couches d'atomes dans l'épaisseur de la zone perturbée étant relativement faible, l'utilisation d'une approche par interphase semble difficilement justifiable.

Quelle que soit la modélisation retenue, elle relève d'une analogie consistant à assimiler un modèle particulier à la zone perturbée. Dans cette étude, le modèle d'interface imparfaite cohérente est privilégié car il conduit à des modèles analytiques simples.

Il existe des modèles, s'appuyant sur le modèle d'interface imparfaite cohérente, capables de décrire le comportement effectif des matériaux nanoporeux (Duan et al., 2005b; Le Quang et He, 2008; Duan et al., 2007a,b; Brisard et al., 2010a,b). Ces modèles sont dédiés aux matériaux à cavités sphériques. Il existe également de nombreux modèles, s'appuyant sur le modèle d'interphase, capables de décrire le comportement effectif des matériaux nanoporeux ((Hervé et Pellegrini, 1995; Cherkaoui et al., 1995; Marcadon, 2005; Lipinski et al., 2006) par exemple). Certains d'entre eux permettent de tenir compte de l'anisotropie des phases et de la forme ellipsoïdale des cavités et de l'interphase (Cherkaoui et al., 1995; Lipinski et al., 2006).

Chapitre 4

Comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux

Des modèles permettant de décrire le comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales sont développés dans ce chapitre. Ils dérivent de l'application de l'approche par motifs morphologiques représentatifs. Les problèmes de localisation sont résolus en s'appuyant sur les travaux de Duan et al. (2005b) et de Cherkaoui et al. (1995). L'approche par motifs fournit un cadre théorique qui permet de généraliser les modèles existants et de traiter des microstructures plus complexes. Cela est illustré à travers différentes applications. Les influences de la distribution spatiale des cavités, d'une distribution de taille de cavités et de la forme des cavités sont notamment étudiées. Enfin, un modèle pour un matériau biporeux contenant à la fois des nano-cavités sphériques et des nano-cavités sphéroïdales orientées et distribuées aléatoirement est proposé.

Sommaire

1 Définition des motifs 72

2 Problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ 74

3 Problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ 78

4 Applications 83

4.1 Nano-cavités sphériques 83

4.2 Distribution sphéroïdale des centres des cavités 86

4.3 Distribution de taille de cavités 90

4.4 Nano-cavités sphéroïdales orientées aléatoirement 94

4.5 Nano-cavités sphériques et sphéroïdales orientées aléatoirement . . 97

5 Bilan du chapitre 99

1 Définition des motifs

Ce chapitre est consacré à la détermination des propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et/ou sphéroïdales. Les modèles construits reposent sur l'approche par motifs. Ce choix s'impose car cette approche permet de prendre en compte des informations concernant l'arrangement local de la microstructure. Elle est par conséquent particulièrement adaptée pour la détermination des propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux. En effet, outre le fait que les matériaux nanoporeux contiennent de nombreuses zones perturbées, l'information morphologique importante est que celles-ci sont localisées entre les cavités et la matrice.

La première étape consiste à décomposer la microstructure en motifs. Le matériau est supposé contenir des nanocavités sphériques et sphéroïdales. Deux motifs sont alors définis : un motif, noté $\mathcal{S}$, relatif au cavités sphériques et un motif, noté $\mathcal{E}$, relatif aux cavités sphéroïdales.

Le motif $\mathcal{S}$ est constitué d'une cavité sphérique (indicée v), entourée d'une couche de matrice (indicée m). Á l'interface entre la matrice et la cavité, la zone perturbée est prise en compte en appliquant des conditions d'interface imparfaite cohérente. Ce motif est représenté sur la Figure 4.1(a). Sa forme extérieure est sphérique et concentrique avec la cavité. Le centre du motif correspond au centre de la cavité. Le rayon de la cavité et le rayon extérieur du motif sont respectivement notés r_1 et r_0. Un point M du motif est défini par le vecteur position $\boldsymbol{x} = r\boldsymbol{e}_r$ avec $(\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\phi)$ la base (orthonormée) associée au système de coordonnées sphériques. Notons Γ_1 et Γ_0 les ensembles de points M caractérisés respectivement par $r = r_1$ et $r = r_0$. Le vecteur unitaire normal à Γ_1 et Γ_0 est noté $\boldsymbol{n}$. Il est orienté dans la direction opposée au centre du motif : $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_r$ (ce choix correspond bien à l'orientation de la normale unitaire à la surface sphérique lors de la détermination des opérateurs différentiels surfaciques en coordonnées sphériques à l'annexe C).

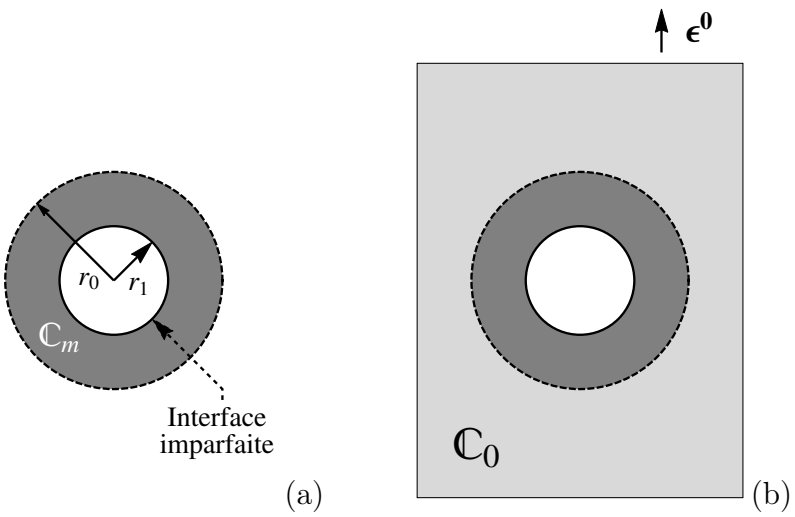


Figure 4.1 – *(a) Motif $\mathcal{S}$, (b) Problème auxilaire relatif au motif $\mathcal{S}$.*

D'une manière identique, le motif $\mathcal{E}$ est constitué d'une cavité sphéroïdale (indicée v), entourée d'une couche de matrice (indicée m). À l'interface entre la matrice et la cavité,

notée Γ_1 et de normale unitaire $\boldsymbol{n}$ (orientée vers la matrice), la zone perturbée est prise en compte en appliquant des conditions d'interface imparfaite cohérente. Ce motif est représenté schématiquement sur la Figure 4.2(a). Sa surface extérieure, noté Γ_0, est sphérique. Ce choix n'a en pratique aucune influence par la suite car seules des estimations de type MTG sont développées à partir de ce motif. La forme et la taille de la couche de matrice dans le motif n'ont pas d'influence sur les propriétés effectives issues de ce type d'estimations. Le centre du motif correspond au centre de la cavité. Le rayon extérieur du motif est noté r_0. Les longueurs des demi-axes de la cavités sont notés a et b avec a la longueur du demi-axe porté par l'axe de révolution de la cavité. Le rapport de forme w est égal à a/b ($w < 1$ cavité aplatie ou *oblate*, $w > 1$ cavité allongée ou *prolate*, $w = 1$ cavité sphérique).

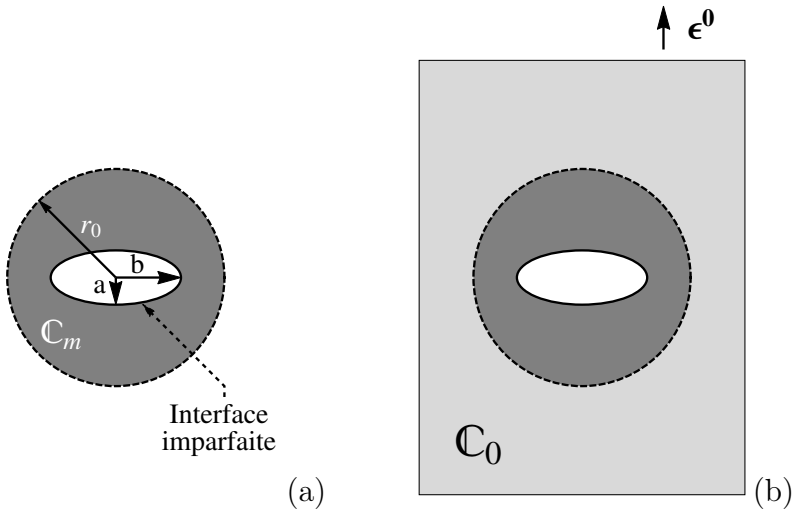


Figure 4.2 – *(a) Motif $\mathcal{E}$, (b) Problème auxilaire relatif au motif $\mathcal{E}$.*

L'étude est limitée au cas de matériaux dont la distribution spatiale des centres des cavités est ellipsoïdale. La détermination des propriétés élastiques effectives de ces matériaux, constitués des motifs $\mathcal{S}$ et $\mathcal{E}$, passe alors par la résolution de problèmes d'inclusions hétérogènes, ayant la structure des motifs, noyés dans un milieu infini (noté 0 et de rigidité $\mathbb{C}_0$) sur lequel une déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est appliquée à l'infini. Ces problèmes sont illustré sur la Figure 4.1(b) et la Figure 4.2(b). Ils sont résolus dans les sections suivantes. Le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ est résolu dans le cas où le milieu infini est quelconque en s'appuyant sur les travaux de Duan et al. (2005b). Le problème relatif au motif $\mathcal{E}$ est résolu uniquement dans le cas où le milieu de référence est la matrice. Ainsi, seules des estimations de type MTG sont développées à partir de ce motif. Ce choix découle de la complexité à résoudre ce problème dans le cas où le milieu de référence est quelconque. Malgré ce choix particulier, le problème n'a, à notre connaissance, pas de solution analytique exacte simple. Le problème est donc résolu de façon approchée en s'appuyant sur les travaux de Cherkaoui et al. (1995).

2 Problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$

Dans cette section, la résolution du problème relatif au motif $\mathcal{S}$ est présentée. Ci-après, le domaine occupé par la phase i est noté ω_i. Le problème à résoudre est décrit par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = (1/2)\big(\mathrm{grad}\boldsymbol{u} +^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}\big) \text{ dans } \omega_0 \text{ et } \omega_m \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\epsilon} \text{ dans } \omega_0 \text{ et } \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon} \text{ dans } \omega_m \\ \big(\boldsymbol{\sigma}^{(0)} - \boldsymbol{\sigma}^{(m)}\big) \cdot \boldsymbol{n} = \mathbf{0} \text{ et } \big(\boldsymbol{u}^{(0)} - \boldsymbol{u}^{(m)}\big) = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_0 \\ \boldsymbol{\sigma}^{(m)} \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s \text{ sur } \Gamma_1 \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \boldsymbol{x} \text{ lorsque } ||\boldsymbol{x}|| \to \infty \end{cases} \tag{4.1}$$

où $\boldsymbol{\sigma}^{(0)}$ et $\boldsymbol{\sigma}^{(m)}$ font référence aux tenseurs des contraintes respectivement dans le milieu infini et la matrice. Les vecteurs $\boldsymbol{u}^{(0)}$ et $\boldsymbol{u}^{(m)}$ sont les déplacement respectivement dans le milieu infini et la matrice.

Le tenseur d'élasticité surfacique est donné à l'équation (3.6). Les comportements élastiques de la matrice et du milieu de référence sont supposés isotropes :

$$\mathbb{C}_m = 3k_m\mathbb{J} + 2\mu_m\mathbb{K} \quad \text{et} \quad \mathbb{C}_0 = 3k_0\mathbb{J} + 2\mu_0\mathbb{K} \tag{4.2}$$

L'objectif est de déterminer les tenseurs $\mathbb{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et $\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ introduits au chapitre 2 (section 3). Du fait de la symétrie sphérique du problème, ils sont isotropes et peuvent se décomposer de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}} &= \mathrm{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}}\mathbb{J} + \mathrm{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}\mathbb{K}, \quad \mathbb{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = \mathrm{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}}\mathbb{J} + \mathrm{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}\mathbb{K} \\ \mathbb{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}} &= \mathrm{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}}\mathbb{J} + \mathrm{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}\mathbb{K}, \quad \mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = 3k^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}\mathbb{J} + 2\mu^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}\mathbb{K} \end{aligned} \tag{4.3}$$

Les parties hydrostatiques de ces tenseurs sont déterminées en appliquant une déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ à l'infini de la forme $\epsilon^0_{\mathrm{h}}\boldsymbol{i}$. Il est alors possible de montrer que les champs de déplacements et de vecteurs contraintes ont les formes suivantes ($\forall i \in \{m, 0\}$) :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}^{(i)} &= \Big(A_i r + \frac{B_i}{r^2}\Big)\boldsymbol{e}_r \\ \boldsymbol{\sigma}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n} &= \Big(3k_i A_i - \frac{4\mu_i B_i}{r^3}\Big)\boldsymbol{e}_r \end{aligned} \tag{4.4}$$

Les quatre constantes, A_0, B_0, A_m et B_m sont déterminées à partir des conditions aux limites. À partir du champs de déplacement à l'infini, il vient que $A_0 = \epsilon^0_{\mathrm{h}}$. Les trois autres constantes sont obtenues à partir de la continuité du vecteur contrainte et du déplacement à travers Γ_0 et des conditions d'équilibre de l'interface imparfaite cohérente en Γ_1. Leurs expressions sont données à l'annexe E (équation (E.1)).

Une fois le système d'équations résolu, les champs élastiques sont entièrement connus. Les moyennes des champs de contrainte et de déformation sur le motif $\mathcal{S}$ sont déterminées à partir des relations suivantes :

$$\langle\boldsymbol{\epsilon}\rangle_{D_{\mathcal{S}}} = \frac{1}{2|D_{\mathcal{S}}|}\int_{\Gamma_0}(\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{n} + \boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{u})\,\mathrm{d}S \tag{4.5}$$

et

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_\mathcal{S}} = \frac{1}{|D_\mathcal{S}|} \int_{\Gamma_0} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}) \otimes \boldsymbol{x} \, \mathrm{d}S \tag{4.6}$$

où $D_\mathcal{S}$ désigne le domaine occupé par le motif $\mathcal{S}$.

À des partir des moyennes des champs de déformations et de contraintes sur le motif $\mathcal{S}$ et des relations (2.33), les expressions de $\mathrm{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}}$, $\mathrm{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}}$, $\mathrm{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}}$ et $k^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ sont établies. Leurs expressions sont données à l'annexe E (équation (E.4)).

Les parties déviatoriques des tenseurs $\mathbb{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et $\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ sont déterminées en appliquant une déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ de la forme $-\gamma(\boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_y - 2\boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_z)$. Il est alors possible de montrer que les champs de déplacements et de vecteurs contraintes ont les formes suivantes ($\forall i \in \{m, 0\}$) :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}^{(i)} = \; & -\Big(A_i r + B_i r^3 + \frac{C_i}{r^2} + \frac{D_i}{r^4}\Big)\Big(1 - 3\cos^2(\theta)\Big)\boldsymbol{e}_r \\ & -\Big(3A_i r + \frac{(7-4\nu_i)r^3}{2\nu_i} B_i + \frac{6(1-2\nu_i)}{(5-4\nu_i)r^2} C_i - \frac{2}{r^4} D_i\Big)\cos(\theta)\sin(\theta)\boldsymbol{e}_\theta \end{aligned} \tag{4.7}$$

$$\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{\sigma}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}}{\mu_i} = \; & \Big(A_i - \frac{1}{2} r^2 B_i - \frac{2(5-\nu_i)}{(5-4\nu_i)r^3} C_i - \frac{4}{r^5} D_i\Big)\Big(1 + 3\cos(2\theta)\Big)\boldsymbol{e}_r \\ & -\Big(6A_i + \frac{(7+2\nu_i)r^2}{\nu_i} B_i + \frac{12(1+\nu_i)}{(5-4\nu_i)r^3} C_i + \frac{16}{r^5} D_i\Big)\cos(\theta)\sin(\theta)\boldsymbol{e}_\theta \end{aligned} \tag{4.8}$$

où ν_i est le coefficient de Poisson de la phase i ($\forall i \in \{m, 0\}$).

Les huit constantes A_0, B_0, C_0, D_0, A_m, B_m, C_m et D_m doivent être déterminées. Le chargement à l'infini impose que $A_0 = \gamma$ et $B_0 = 0$. Les six autres constantes sont obtenues à partir de la continuité des composantes du champ de déplacement u_r et u_θ à travers Γ_0, de la continuité des composantes du champ de contraintes σ_{rr} et $\sigma_{r\theta}$ à travers Γ_0 et des conditions d'équilibre de l'interface imparfaite cohérente sur Γ_1. Les expressions de ces constantes ne sont pas données explicitement du fait de leurs complexités. Néanmoins, le système linéaire à résoudre pour les obtenir est donné à l'annexe E (équation (E.5)). Comme dans le cas du chargement hydrostatique, les moyennes des déformations et des contraintes sont déterminées à partir des relations (4.5) et (4.6). Les expressions de $\mathrm{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$, $\mathrm{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$, $\mathrm{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$ et $\mu^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ sont ensuite déterminées à partir des moyennes des champs de déformations et de contraintes sur le motif $\mathcal{S}$ et des relations (2.33). Leurs expressions sont données à l'annexe E (équation (E.15)).

Il est possible de montrer que, contrairement au module de cisaillement $\mu^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, le module de compressibilité $k^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ ne dépend pas des propriétés élastiques du milieu de référence $\mathbb{C}_0$. Cela implique que $k^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = k^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = k^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$. Les tenseurs $\mathbb{C}^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et $\mathbb{C}^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ obtenus à partir de l'équation (2.36) s'expriment alors :

$$\mathbb{C}^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = 3k^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}\mathbb{J} + 2\mu^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}\mathbb{K}, \quad \mathbb{C}^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = 3k^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}\mathbb{J} + 2\mu^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}\mathbb{K} \tag{4.9}$$

où les modules de cisaillement $\mu^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et $\mu^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ sont donnés à l'annexe E (équation (E.22)).

Dans le cas où le milieu de référence est la matrice, le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ associé au motif $\mathcal{S}$ s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = f_{\mathcal{S}} \frac{(3k_m + 4\mu_m)(4k_s - 3k_m r_1)}{4(k_s + \mu_m r_1)} \mathbb{J} + f_{\mathcal{S}} \frac{10\mu_m(3k_m + 4\mu_m)\beta_d}{3k_m\delta_d + 4\mu_m\zeta_d} \mathbb{K} \tag{4.10}$$

où

$$\begin{aligned} \beta_d &= (k_s + r_1\mu_m)(\mu_s - r_1\mu_m), \\ \delta_d &= 3r_1\mu_m(r_1\mu_m + \mu_s) + 2k_s(2r_1\mu_m + \mu_s), \\ \zeta_d &= 3k_s(r_1\mu_m + \mu_s) + 2r_1\mu_m(r_1\mu_m + 2\mu_s) \end{aligned} \tag{4.11}$$

Le scalaire $f_{\mathcal{S}} = (r_1/r_0)^3$ représente la porosité dans le motif $\mathcal{S}$.

Remarque :

Dans le cadre des estimations de type Mori et Tanaka généralisées mises en œuvre dans cette étude, il est possible de montrer que la forme et la taille de la couche de matrice dans les motifs n'ont pas d'influence sur les propriétés effectives. Cela est dû au fait que le champ de polarisation est nul dans la matrice, qu'elle soit dans les motifs ou hors des motifs. Pour illustrer cette remarque, un motif $\mathcal{S}'$ est considéré. Il diffère du motif $\mathcal{S}$ uniquement par la forme et la taille de la couche de matrice, qui peuvent être quelconques. Par conséquent, comme dans le cas du motif $\mathcal{S}$, la cavité et l'interface imparfaite cohérente du motif $\mathcal{S}'$ occupent respectivement les domaines ω_v et Γ_1. Les domaines de matrice dans les motifs $\mathcal{S}$ et $\mathcal{S}'$ sont notés respectivement $\omega_m^{\mathcal{S}}$ et $\omega_m^{\mathcal{S}'}$. Il est important de remarquer que lorsque le milieu infini est la matrice, les problèmes auxiliaires relatifs à ces deux motifs sont strictement identiques. Les champs solutions de ces problèmes sont donc identiques. En sachant que $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$ sur ω_v, la moyenne du champ de polarisation sur le motif $\mathcal{S}'$ est égale à (Duan et al., 2005b) :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_{\mathcal{S}'}} &= \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_{\mathcal{S}'}} - \mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_{\mathcal{S}'}} \\ &= \frac{1}{|D_{\mathcal{S}'}|} \Big[\int_{\omega_m^{\mathcal{S}'}} \boldsymbol{\sigma} \mathrm{d}V + \int_{\Gamma_1} ([\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n}) \otimes \boldsymbol{x} \mathrm{d}S - \mathbb{C}_m : \int_{\omega_m^{\mathcal{S}'}} \boldsymbol{\epsilon} \mathrm{d}V \\ &\qquad - \frac{1}{2} \mathbb{C}_m : \int_{\Gamma_1} \big(\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{n} + \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{u} \big) \mathrm{d}S \Big] \\ &= \frac{1}{|D_{\mathcal{S}'}|} \Big[\int_{\Gamma_1} ([\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n}) \otimes \boldsymbol{x} \mathrm{d}S - \frac{1}{2} \mathbb{C}_m : \int_{\Gamma_1} \big(\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{n} + \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{u} \big) \mathrm{d}S \Big] \\ &\qquad \text{car} \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon} \quad \text{dans} \quad \omega_m^{\mathcal{S}'} \\ &= \frac{|D_{\mathcal{S}}|}{|D_{\mathcal{S}'}|} \langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_{\mathcal{S}}} \end{aligned} \tag{4.12}$$

D'après l'équation (2.33), il vient alors que :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}'} = \frac{|D_{\mathcal{S}}|}{|D_{\mathcal{S}'}|} \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} \tag{4.13}$$

Considérons, pour l'exemple, un matériau constitué d'une seule population de cavités. Le nombre de cavités par unité de volume est noté N et la porosité f. Un tel matériau

peut être décrit par un assemblage construit à partir du motif $\mathcal{S}'$. Dans ce cas, la fraction volumique des membres du motif $\mathcal{S}'$, notée $c_{\mathcal{S}'}$, est égale à $N\,|D_{\mathcal{S}'}|$. De la même façon, le matériau peut être décrit par un assemblage construit à partir du motif $\mathcal{S}$. Dans ce cas, la fraction volumique des membres du motif $\mathcal{S}$, notée $c_{\mathcal{S}}$, est égale à $N\,|D_{\mathcal{S}}|$. De l'équation précédente, il vient que :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}'} = \frac{c_{\mathcal{S}}}{c_{\mathcal{S}'}}\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} \tag{4.14}$$

Le tenseur de rigidité de l'estimation de Mori et Tanaka généralisée pour l'assemblage construit à partir du motif $\mathcal{S}'$ s'exprime comme suit (d'après l'équation (2.37)) :

$$\begin{aligned}\mathbb{C}^{\mathrm{MTG}}_{\mathrm{M}} &= \mathbb{C}_m + \left(\mathbb{I} - c_{\mathcal{S}'}\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}'} : \mathbb{P}^m_d\right)^{-1} : \left(c_{\mathcal{S}'}\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}'}\right) \\ &= \mathbb{C}_m + \left(\mathbb{I} - c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} : \mathbb{P}^m_d\right)^{-1} : \left(c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}\right) \quad \text{d'après l'équation (4.14).}\end{aligned} \tag{4.15}$$

La relation précédente correspond ainsi à celle du tenseur de rigidité de l'estimation de Mori et Tanaka généralisée pour l'assemblage construit à partir du motif $\mathcal{S}$. La forme et la taille de la couche de matrice dans les motifs n'ont donc pas d'influence sur les propriétés effectives issues de ce type de modèle. La matrice peut être considérée de façon équivalente comme matrice environnante ou comme faisant partie des motifs. En pratique, cela signifie que la valeur de la porosité $f_{\mathcal{S}} = |\omega_v|/|D_{\mathcal{S}}|$ du motif $\mathcal{S}$ peut être quelconque. Les cas extrêmes où toute la matrice est dans les motifs (*assemblage de Hashin généralisé* où $c_{\mathcal{S}} = 1$ et $f_{\mathcal{S}} = f$) ou hors des motifs ($f_{\mathcal{S}} = 1$ et $c_{\mathcal{S}} = f$) vont conduire à la même expression du tenseur $\mathbb{C}^{\mathrm{MTG}}_{\mathrm{M}}$.

Dans les lignes qui précèdent, aucune hypothèse sur la forme de la cavité n'a été nécessaire. La remarque précédente est donc valable quelle que soit la forme de la cavité et s'applique donc au cas du motif $\mathcal{E}$ (pour les cavités sphéroïdales) traité à la section suivante.

Lorsque le rayon r_1 est grand ($r_1 \to \infty$) ou lorsque l'interface est souple ($k_s = \mu_s = 0$), le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ est égal au tenseur $\mathbb{T}$ classique pour une cavité sphérique (d'après l'équation (2.23) et en posant $f_{\mathcal{S}} = 1$ sans perte de généralité d'après la remarque précédente) :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = -\frac{3k_m(3k_m + 4\mu_m)}{4\mu_m}\mathbb{J} - \frac{10\mu_m(3k_m + 4\mu_m)}{9k_m + 8\mu_m}\mathbb{K} \tag{4.16}$$

Dans ce cas, le modèle construit à partir de $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et de l'équation (2.37) tend vers le modèle de Ponte Castañeda et Willis (1995) pour des cavités sphériques.

Lorsque le rayon r_1 est petit ($r_1 \to 0$) ou lorsque l'interface est rigide ($||\mathbb{C}_s|| \to \infty$), le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ est égal au tenseur $\mathbb{T}$ classique pour une particule rigide (en posant $f_{\mathcal{S}} = 1$) :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = (3k_m + 4\mu_m)\mathbb{J} + \frac{5\mu_m(3k_m + 4\mu_m)}{3(k_m + 2\mu_m)}\mathbb{K} \tag{4.17}$$

Dans ce cas, le modèle construit à partir de $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et de l'équation (2.37) tend vers le modèle de Ponte Castañeda et Willis (1995) pour des particules sphériques rigides.

À partir de la solution de ce problème et en appliquant les résultats de l'approche par motifs (chapitre 2, section 3), il est possible de développer des estimations de Hashin et Shtrikman généralisées ainsi que des bornes de Voigt et Reuss généralisées pour des matériaux contenant des nanocavités sphériques.

3 Problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$

Dans cette section, la résolution du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ est présentée. Comme cela a déjà été mentionné précédemment, la matrice est choisie comme milieu de référence particulier. En effet, le problème n'a pas de solution analytique simple dans le cas où le milieu de référence est quelconque. Cela implique que seules des estimations de type MTG sont développées pour les matériaux contenant des nanocavités sphéroïdales.

Le domaine occupé par la phase de matrice (dans et hors du motif $\mathcal{E}$) est noté ω_m et le domaine occupé par la cavité est noté ω_v. Le domaine occupé par la matrice dans le motif $\mathcal{E}$ correspond à $D_\mathcal{E} - \omega_v$ où $D_\mathcal{E}$ est le domaine occupé par le motif $\mathcal{E}$. Le problème à résoudre, noté $\mathcal{A}$, se traduit par le système d'équations suivant :

$$\mathcal{A} : \begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = (1/2)\big(\mathrm{grad}\boldsymbol{u} + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}\big), \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon} \ \text{ dans } \omega_m \\ \boldsymbol{\sigma}^{(m)} \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s \ \text{ sur } \Gamma_1 \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \boldsymbol{x} \text{ lorsque } ||\boldsymbol{x}|| \to \infty \end{cases} \tag{4.18}$$

Les tenseurs de rigidité $\mathbb{C}_m$ et $\mathbb{C}_s$ sont donnés respectivement aux équations (4.2) et (3.6).

Le développement de l'estimation MTG nécessite le calcul du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ (équation (2.33)). Lorsque le milieu de référence est la matrice, il vient que la moyenne du champ de polarisation sur le motif $\mathcal{E}$ s'exprime de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \langle\boldsymbol{\tau}\rangle_{D_\mathcal{E}} &= \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{D_\mathcal{E}} - \mathbb{C}_m : \langle\boldsymbol{\epsilon}\rangle_{D_\mathcal{E}} \\ &= \frac{1}{|D_\mathcal{E}|}\Big[\int_{\Gamma_1}([\boldsymbol{\sigma}]\cdot\boldsymbol{n})\otimes\boldsymbol{x}\mathrm{d}S - \frac{1}{2}\mathbb{C}_m : \int_{\Gamma_1}\big(\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{n} + \boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{u}\big)\mathrm{d}S\Big] \\ &= \frac{1}{|D_\mathcal{E}|}\int_{\Gamma_1}([\boldsymbol{\sigma}]\cdot\boldsymbol{n})\otimes\boldsymbol{x}dS - f_\mathcal{E}\mathbb{C}_m : \langle\boldsymbol{\epsilon}\rangle_{\omega_v} \end{aligned} \tag{4.19}$$

avec $f_\mathcal{E}$ la porosité dans le motif $\mathcal{E}$, égale à $|\omega_v|/|D_\mathcal{E}|$. Le vecteur $\boldsymbol{x}$ désigne le vecteur position.

Dans la suite, le problème $\mathcal{A}$ n'est pas résolu directement. Sa solution est obtenue par l'intermédiaire d'un second problème identique où l'interface imparfaite cohérente est remplacée par une interphase. La solution du problème $\mathcal{A}$ est obtenue asymptotiquement en exploitant l'équivalence entre les modèles d'interface imparfaite cohérente et d'interphase fine (cf. chapitre 3, section 2.1, équation (3.11)).

Le problème d'une inclusion enrobée d'une interphase, elle-même entourée d'un milieu infini sur lequel une déformation homogène $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est appliquée à l'infini est considéré. Ce problème, noté $\mathcal{A}^\star$, est représenté schématiquement sur la Figure 4.3. Comme pour le problème $\mathcal{A}$, le milieu infini est la matrice et occupe le domaine $\omega^\star_m$. La cavité est identique à la cavité du motif $\mathcal{E}$ et occupe alors le domaine ω_v. L'interphase, d'épaisseur h constante, indicée ph, occupe le domaine ω_{ph}. Son tenseur de rigidité est $\mathbb{C}_{ph}$. L'interface cavité/interphase, de normale $\boldsymbol{n}$, est parfaite et notée Γ_1 (identique à l'interface Γ_1 du motif $\mathcal{E}$). L'interface matrice/interphase, de normale $\boldsymbol{n}'$, est également parfaite et notée Γ_2. Elle est de forme sphéroïdale et ses axes sont confondus avec les axes de la cavité. Les longueurs de ses demi-axes sont $a+h$ et $b+h$ avec $a+h$ la longueur du demi-axe porté par l'axe de révolution

de la cavité. Les normales unitaires $\boldsymbol{n}$ et $\boldsymbol{n}'$ sont orientées en direction du milieu infini. Le problème $\mathcal{A}^\star$ est décrit par les équations suivantes :

$$\mathcal{A}^\star : \begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma}^\star = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^\star = (1/2)\big(\mathrm{grad}\boldsymbol{u}^\star + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}^\star\big) \ \text{ dans } \ \omega_m^\star \cup \omega_{ph} \\ \boldsymbol{\sigma}^\star = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}^\star \ \text{ dans } \ \omega_m^\star \quad \text{ et } \quad \boldsymbol{\sigma}^\star = \mathbb{C}_{ph} : \boldsymbol{\epsilon}^\star \ \text{ dans } \ \omega_{ph} \\ \boldsymbol{\sigma}^{\star(ph)} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{0} \ \text{ sur } \Gamma_1 \\ \boldsymbol{\sigma}^{\star(m)} \cdot \boldsymbol{n}' = \boldsymbol{\sigma}^{\star(ph)} \cdot \boldsymbol{n}' \ \text{ et } \ \boldsymbol{u}^{\star(m)} = \boldsymbol{u}^{\star(ph)} \ \text{ sur } \Gamma_2 \\ \boldsymbol{u}^\star = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \boldsymbol{x} \ \text{ lorsque } \ ||\boldsymbol{x}|| \to \infty \end{cases} \tag{4.20}$$

où $\boldsymbol{\sigma}^{\star(ph)}$ et $\boldsymbol{u}^{\star(ph)}$ désignent respectivement la contrainte et le déplacement dans l'interphase. Les champs élastiques associés à un exposant * font référence à des champs élastiques solutions du problème $\mathcal{A}^\star$ et des champs élastiques sans exposant font référence à des champs solutions du problème $\mathcal{A}$.

D'après les relations (3.11), le tenseur de rigidité $\mathbb{C}_{ph}$ s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{C}_{ph} = 3k_{ph}\mathbb{J} + 2\mu_{ph}\mathbb{K} = \frac{1}{h}\tilde{\mathbb{C}}_s \tag{4.21}$$

avec

$$\tilde{\mathbb{C}}_s = 3\tilde{k}_s\mathbb{J} + 2\tilde{\mu}_s\mathbb{K} \ \text{ où } \tilde{k}_s = \frac{4k_s\mu_s}{3(3\mu_s - k_s)} \ \text{ et } \tilde{\mu}_s = \mu_s \tag{4.22}$$

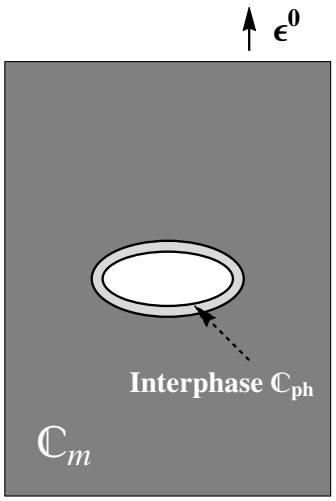


Figure 4.3 – *Représentation schématique du problème $\mathcal{A}^\star$.*

Le problème $\mathcal{A}^\star$ est résolu sous la forme d'une solution analytique *approchée* en s'appuyant sur les résultats des travaux de Cherkaoui et al. (1995). Ces derniers ont étudié le comportement mécanique d'une inclusion ellipsoïdale entourée d'une interphase, elle-même entourée d'un milieu infini sur lequel une déformation homogène est appliquée à l'infini. Le problème $\mathcal{A}^\star$ correspond donc à un cas particulier de leurs travaux. En utilisant les techniques de Green (plus précisément l'équation de *Lippmann et Schwinger*), ainsi que les opérateurs d'interface de Hill (1983), les auteurs ont donné une solution approchée de ce problème en considérant deux hypothèses principales : i. l'interphase est très mince, ii. la

déformation en tout point de l'inclusion est supposée égale à sa valeur moyenne. La particularité de la solution approchée de Cherkaoui et al. (1995) est qu'elle s'exprime en fonction de la solution du problème d'inclusion d'Eshelby (1957). En appliquant leurs résultats au cas particulier du problème $\mathcal{A}^\star$, il vient que :

$$\langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_{ph}} \approx \big(\mathbb{I} - \mathbb{W}\big) : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_v} \tag{4.23}$$

et

$$\langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_v} \approx \big(\mathbb{I} - \mathbb{M}\big)^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \tag{4.24}$$

avec

$$\mathbb{W} = \Big[\mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph}) - \frac{|\omega_v|}{|\omega_{ph}|}\big(\mathbb{P}_2(\mathbb{C}_{ph}) - \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph})\big)\Big] : \mathbb{C}_{ph} \tag{4.25}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{M} = {} & \mathbb{P}_2(\mathbb{C}_m) : \mathbb{C}_m \\ & + \frac{|\omega_{ph}|}{|\omega_v|}\Big[\mathbb{P}_1(\mathbb{C}_m) : \Delta\mathbb{C} : \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph}) : \mathbb{C}_{ph}\Big] \\ & + \frac{|\omega_{ph}|}{|\omega_v|}\Big[\big(\mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph}) - \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_m)\big) : \mathbb{C}_{ph}\Big] \\ & - \Big[\mathbb{I} + \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_m) : \Delta\mathbb{C}\Big] : \Big[\mathbb{P}_2(\mathbb{C}_{ph}) - \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph})\Big] : \mathbb{C}_{ph}\end{aligned} \tag{4.26}$$

en posant $\Delta\mathbb{C} = \mathbb{C}_{ph} - \mathbb{C}_m$.

Le tenseur $\mathbb{P}_i(\mathbb{C}_j)$ ($i \in \{1,2\}$ et $j \in \{m,\ ph\}$) est le tenseur de Hill associé au milieu de référence j et à une inclusion sphéroïdale dont la forme extérieure est identique à la forme de Γ_i. Ce tenseur s'exprime en fonction du tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_j)$ ($i \in \{1,2\}$ et $j \in \{m,\ ph\}$) de la façon suivante :

$$\mathbb{P}_i(\mathbb{C}_j) = \mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_j) : \mathbb{C}_j^{-1} \tag{4.27}$$

Le tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_j)$ associé à une inclusion de forme sphéroïdale ne dépend que du coefficient de Poisson ν_j et du rapport de forme de l'inclusion (cf. annexe B). De plus, il est possible de remarquer que (d'après les équations (4.21) et (4.22)) :

$$\nu_{ph} = \tilde{\nu}_s = \frac{3\tilde{k}_s - 2\tilde{\mu}_s}{2(3\tilde{k}_s + \tilde{\mu}_s)} = \frac{k_s - \mu_s}{k_s + \mu_s} \tag{4.28}$$

où ν_{ph}, qui est donc indépendant de h, est le coefficient de Poisson de l'interphase et $\tilde{\nu}_s$ le coefficient de Poisson associé au tenseur de rigidité (isotrope) $\tilde{\mathbb{C}}_s$. Il vient alors que :

$$\mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_{ph}) = \mathbb{S}_i^E(\tilde{\mathbb{C}}_s) \quad \forall i \in \{1,2\} \tag{4.29}$$

et par conséquent :

$$\begin{aligned}\forall i \in \{1,2\}, \quad \mathbb{P}_i(\mathbb{C}_{ph}) &= \mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_{ph}) : \mathbb{C}_{ph}^{-1} \\ &= h\mathbb{S}_i^E(\tilde{\mathbb{C}}_s) : \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1} \\ &= h\mathbb{P}_i(\tilde{\mathbb{C}}_s)\end{aligned} \tag{4.30}$$

Le tenseur $\mathbb{P}_1(\tilde{\mathbb{C}}_s)$ associé à l'interface Γ_1 ne dépend pas de h. En revanche, le tenseur $\mathbb{P}_2(\tilde{\mathbb{C}}_s)$ dépend de h à travers le rapport de forme de l'interface Γ_2 $((wb+h)/(b+h))$.

Le rapport $|\omega_{ph}|/|\omega_v|$ peut s'exprimer de la façon suivante :

$$\frac{|\omega_{ph}|}{|\omega_v|} = \frac{(wb+h)(b+h)^2}{wb^3} - 1 = \alpha h + \beta h^2 + \zeta h^3 \tag{4.31}$$

où

$$\alpha = \frac{1+2w}{bw}, \quad \beta = \frac{2+w}{b^2 w}, \quad \zeta = \frac{1}{b^3 w} \tag{4.32}$$

À partir des équations (4.23) et (4.24), il vient que :

$$\lim_{h\to 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_{ph}} \approx \Big[\mathbb{I} - \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1} : \mathbb{H} : \tilde{\mathbb{C}}_s\Big] : \Big[\mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \Big(\mathbb{C}_m - \alpha\big(\mathbb{I} - \mathbb{H}\big) : \tilde{\mathbb{C}}_s\Big)\Big]^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \tag{4.33}$$

et

$$\lim_{h\to 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_v} \approx \Big[\mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \Big(\mathbb{C}_m - \alpha\big(\mathbb{I} - \mathbb{H}\big) : \tilde{\mathbb{C}}_s\Big)\Big]^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \tag{4.34}$$

où

$$\mathbb{H} = \tilde{\mathbb{C}}_s : \big[\mathbb{S}^E(\tilde{\mathbb{C}}_s) - \frac{1}{\alpha}\mathbb{N}(\tilde{\mathbb{C}}_s)\big] : \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1} \tag{4.35}$$

Le tenseur $\mathbb{N}(\mathbb{C}_0)$, dont l'expression est donnée à l'annexe B, est défini tel que :

$$\mathbb{N}(\mathbb{C}_0) = \lim_{h\to 0} \frac{1}{h}\big[\mathbb{S}_2^E(\mathbb{C}_0) - \mathbb{S}_1^E(\mathbb{C}_0)\big] \tag{4.36}$$

où $\mathbb{S}_1^E(\mathbb{C}_0)$ et $\mathbb{S}_2^E(\mathbb{C}_0)$ sont les tenseurs d'Eshelby associés à des inclusions sphéroïdales dont les rapports de forme sont respectivement égaux à w et $(wb+h)/(b+h)$.

Les tenseurs $\mathbb{Q}_\mathcal{E}$ et $\mathbb{Z}_\mathcal{E}$, utilisés au chapitre 5 sont introduits afin d'alléger les notations :

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{\omega_v} = \lim_{h\to 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_v} \approx \mathbb{Q}_\mathcal{E} : \boldsymbol{\epsilon}^0, \quad \lim_{h\to 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_{ph}} \approx \mathbb{Z}_\mathcal{E} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \tag{4.37}$$

D'après les équations (4.33) et (4.34), ces tenseurs s'expriment de la façon suivante :

$$\mathbb{Q}_\mathcal{E} = \Big[\mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \Big(\mathbb{C}_m - \alpha\big(\mathbb{I} - \mathbb{H}\big) : \tilde{\mathbb{C}}_s\Big)\Big]^{-1} \tag{4.38}$$

et

$$\mathbb{Z}_\mathcal{E} = \Big[\mathbb{I} - \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1} : \mathbb{H} : \tilde{\mathbb{C}}_s\Big] : \mathbb{Q}_\mathcal{E} \tag{4.39}$$

La moyenne de la polarisation $\boldsymbol{\tau}$ sur $D_\mathcal{E}$ s'exprime de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_\mathcal{E}} &= \lim_{h\to 0} \langle \boldsymbol{\tau}^\star \rangle_{D_\mathcal{E}} \\
&= \lim_{h\to 0} \Big[\langle \boldsymbol{\sigma}^\star \rangle_{D_\mathcal{E}} - \mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{D_\mathcal{E}}\Big] \\
&= \lim_{h\to 0} \Big[\frac{|\omega_{ph}|}{|D_\mathcal{E}|}\langle \boldsymbol{\sigma}^\star \rangle_{\omega_{ph}} - \frac{|\omega_{ph}|}{|D_\mathcal{E}|}\mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_{ph}} - \frac{|\omega_v|}{|D_\mathcal{E}|}\mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_v}\Big] \\
&= \lim_{h\to 0} \Big[\frac{|\omega_{ph}|}{|D_\mathcal{E}|}\mathbb{C}_{ph} : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_{ph}} - \frac{|\omega_{ph}|}{|D_\mathcal{E}|}\mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_{ph}} - f_\mathcal{E}\mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_v}\Big]
\end{aligned} \tag{4.40}$$

En utilisant les relations (4.21) et (4.31) et en remarquant que $1/|D_{\mathcal{E}}| = f_{\mathcal{E}}/|\omega_v|$, il est possible de montrer que :

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_{\mathcal{E}}} = f_{\mathcal{E}} \Big[\alpha \tilde{\mathbb{C}}_s : \lim_{h \to 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_{ph}} - \mathbb{C}_m : \lim_{h \to 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_{\omega_v} \Big] \tag{4.41}$$

Finalement, le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ est approché par l'expression suivante :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}} \approx f_{\mathcal{E}} \Big[\alpha \big(\mathbb{I} - \mathbb{H} \big) : \tilde{\mathbb{C}}_s - \mathbb{C}_m \Big] : \Big[\mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \Big(\mathbb{C}_m - \alpha \big(\mathbb{I} - \mathbb{H} \big) : \tilde{\mathbb{C}}_s \Big) \Big]^{-1} \tag{4.42}$$

Il est rappelé que le scalaire α est égal à $(1 + 2w)/(bw)$. Le tenseur $\mathbb{P}_m$ est le tenseur de Hill associé à la forme de la cavité sphéroïdale considérée lorsque le milieu de référence est la matrice. Le tenseur $\tilde{\mathbb{C}}_s$, dont l'expression est donnée à l'équation (4.22), dépend uniquement des propriétés de l'interface (k_s et μ_s). Le scalaire $f_{\mathcal{E}} = w(b/r_0)^3$ représente la porosité dans le motif $\mathcal{E}$. L'expression du tenseur $\mathbb{H}$ est donnée à l'équation (4.35).

Dans le cas où $w = 1$ (cavité sphérique), le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ est isotrope et s'écrit :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}(w = 1) = f_{\mathcal{E}} \frac{(3k_m + 4\mu_m)(4k_s - 3k_m b)}{4(k_s + \mu_m b)} \mathbb{J} + f_{\mathcal{E}} \frac{10\mu_m (3k_m + 4\mu_m)\beta'_d}{3k_m \delta'_d + 4\mu_m \zeta'_d} \mathbb{K} \tag{4.43}$$

où

$$\begin{aligned} \beta'_d &= k_s - 5b\,\mu_m + 6\mu_s, \\ \delta'_d &= 2k_s + 15b\,\mu_m + 12\mu_s, \\ \zeta'_d &= 3k_s + 10b\,\mu_m + 18\mu_s, \end{aligned} \tag{4.44}$$

avec $f_{\mathcal{E}} = (b/r_0)^3$.

Remarque :

Il est notable (en posant $b = r_1$) que la partie déviatorique du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}(w = 1)$ n'est pas égale à celle du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ (équation (4.10)). Cela est dû au fait que le problème auxiliaire associé au motif $\mathcal{E}$ (problème $\mathcal{A}$) est résolu de façon approchée alors que celui relatif au motif $\mathcal{S}$ l'est de façon exacte. En revanche, la partie hydrostatique du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}(w = 1)$ est égale à celle du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ (équation (4.10)). Ainsi, il apparait que, dans le cas où la cavité est sphérique et le chargement purement hydrostatique, le problème $\mathcal{A}$ est résolu de manière exacte.

Il est par ailleurs possible de montrer que les parties déviatoriques des tenseurs $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}(w = 1)$ et $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ sont égales lorsque les cavités sont très petites ($r \to 0$)ou lorsque les cavités sont grandes ($r \to \infty$) ou lorsque l'interface est souple ($||\mathbb{C}_s|| \to 0$) ou lorsque l'interface est rigide ($||\mathbb{C}_s|| \to \infty$).

En remarquant que le tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}^E(\tilde{\mathbb{C}}_s)$ et que le produit $(1/\alpha)\mathbb{N}(\tilde{\mathbb{C}}_s)$ ne dépendent pas de b, il vient que le tenseur $\mathbb{H}$ ne dépend pas de b. Il est alors possible de montrer que pour une cavité de grande taille ($b \to \infty$, w fixe) ou lorsque l'interface est souple ($||\tilde{\mathbb{C}}_s|| \to 0$), le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ est égal à :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}} = -f_{\mathcal{E}} \mathbb{C}_m : \Big[\mathbb{I} - \mathbb{P}(\mathbb{C}_m) : \mathbb{C}_m \Big]^{-1} \tag{4.45}$$

Pour $f_{\mathcal{E}} = 1$ (le motif n'est constitué que de la cavité et de l'interface), l'expression précédente est alors égale à l'expression du tenseur $\mathbb{T}$ classique (tenseur identifié sur le problème d'Eshelby et qui relie la polarisation $\boldsymbol{\tau}$ sur l'inclusion homogène à la déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ appliqué à l'infini) lorsque l'inclusion est une cavité de même forme que la cavité considérée (d'après l'équation (2.20)). Par conséquent, le modèle construit à partir du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ et de l'équation (2.37) tend vers son homologue classique sans effet de surface (modèle de Ponte Castañeda et Willis (1995) dans le cas poreux) lorsque l'effet de surface devient négligeable (c'est-à-dire lorsque la taille des cavités est grande ou lorsque l'interface est souple).

À partir de l'expression du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ et en appliquant les résultats de l'approche par motifs (chapitre 2, section 3), il est possible de développer des estimations de Mori et Tanaka généralisées pour des matériaux contenant des nanocavités sphéroïdales.

4 Applications

Dans cette section, les propriétés élastiques effectives de matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales sont déterminées en s'appuyant sur l'approche par motifs et sur les solutions des problèmes auxiliaires traités précédemment. L'objectif est d'illustrer les possibilités qu'offrent l'approche mise en œuvre dans ce travail. Ci-après sont étudiés les cas particuliers de matériaux contenant :

- des nano-cavités sphériques distribuées aléatoirement ;
- des nano-cavités sphériques dont la distribution des centres est de forme sphéroïdale ;
- des nano-cavités sphériques *polydispersées* et distribuées aléatoirement ;
- des nano-cavités sphéroïdales orientées et distribuées aléatoirement ;
- des nano-cavités sphériques et sphéroïdales orientées et distribuées aléatoirement.

4.1 Nano-cavités sphériques

Cette partie s'attache à décrire le comportement mécanique effectif d'un matériau contenant des nanocavités de même taille dont la distribution des centres est isotrope. Le domaine qu'occupe ce matériau est décomposé à l'aide du motif $\mathcal{S}$ et d'un domaine de matrice environnante de rigidité $\mathbb{C}_m$. La porosité totale est égale à f. La fraction volumique des représentants du motif $\mathcal{S}$ est noté $c_{\mathcal{S}}$ et la fraction volumique de matrice environnante est égale à $1 - c_{\mathcal{S}}$.

Les modèles développés sont d'autant plus pertinents que la fraction volumique de matrice environnante est faible (Bornert, 1996b). En effet, sur le domaine de matrice environnante, les champs élastiques admissibles sont uniformes alors que les champs admissibles sur le domaine de matrice dans le motif $\mathcal{S}$ sont non uniformes et *a priori* plus pertinents car plus proches des champs réels. En revanche, il n'est pas non plus pertinent de choisir une fraction volumique de matrice environnante nulle car dans ce cas, le matériau est un assemblage de Hashin généralisé d'un unique motif qui repose sur une construction fractale. Or une telle construction n'est pas envisageable avec le motif $\mathcal{S}$ car les champs admissibles sur celui-ci dépendent de sa taille (plus précisément de ces deux longueurs caractéristiques

r_1 et r_0). Par conséquent, deux membres homothétiques du motif $\mathcal{S}$ ont nécessairement la même taille. Il n'est donc pas possible de paver l'ensemble de l'espace occupé par le VER avec un unique motif $\mathcal{S}$. Un domaine minimal de matrice environnante doit alors être pris en compte. Cet aspect a été mis en évidence par Marcadon (2005).

Bornes Voigt et Reuss généralisées :

Les bornes de Voigt et Reuss généralisées (VG et RG) pour une telle décomposition en motifs s'expriment alors (d'après les équations (2.31) et (2.32)) :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{VG}} = (1 - c_{\mathcal{S}})\mathbb{C}_m + c_{\mathcal{S}}\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{VG}} \tag{4.46}$$

et

$$\left[\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{RG}}\right]^{-1} = (1 - c_{\mathcal{S}})\left[\mathbb{C}_m\right]^{-1} + c_{\mathcal{S}}\left[\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{RG}}\right]^{-1} \tag{4.47}$$

où les expressions des tenseurs $\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{VG}}$ et $\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{VG}}$ sont donnés aux relations (4.9) en prenant $f_{\mathcal{S}} = f/c_{\mathcal{S}}$.

Il est remarquable que, dans le cas où $f_{\mathcal{S}} = 1$ (il n'y a pas de matrice dans le motif $\mathcal{S}$), les bornes de Voigt et Reuss généralisées s'expriment de la façon suivante :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{VG}} = (1 - f)\mathbb{C}_m + f\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{VG}} \quad \text{et} \quad \left[\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{RG}}\right]^{-1} = (1 - f)\left[\mathbb{C}_m\right]^{-1} + f\left[\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{RG}}\right]^{-1} \tag{4.48}$$

où les tenseurs $\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{VG}}$ et $\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{RG}}$ s'expriment comme suit :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{VG}} = \frac{4k_s}{r_1}\mathbb{J} + 2\frac{k_s + 6\mu_s}{5r_1}\mathbb{K}, \quad \mathbb{C}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^{\mathrm{RG}} = \frac{4k_s}{r_1}\mathbb{J} + \frac{10k_s\mu_s}{(6k_s + \mu_s)r_1}\mathbb{K} \tag{4.49}$$

Dans ce cas, ces bornes correspondent à celles de Le Quang et He (2008) (cf. équations (3.21) et (3.24)), c'est-à-dire $\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{VG}}(f_{\mathcal{S}} = 1) = \mathbb{C}^{\mathrm{LQH+}}$ et $\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{RG}}(f_{\mathcal{S}} = 1) = \mathbb{C}^{\mathrm{LQH\text{-}}}$. Les bornes de Le Quang et He (2008) ne sont pas fondées sur l'approche par motif mais s'appuient sur des champs admissibles qui sont uniformes par morceaux dans la matrice et dans les cavités. Cette forme de champs admissibles correspond à celle des champs admissibles des bornes de Voigt et Reuss généralisées construites à partir du motif $\mathcal{S}$ avec $f_{\mathcal{S}} = 1$. Les bornes de Le Quang et He (2008) (dans le cas poreux) apparaissent alors comme un cas particulier des bornes de Voigt et Reuss généralisées dérivées à partir du motif $\mathcal{S}$. Dans l'approche de Le Quang et He (2008), les champs admissibles sur la matrice sont complètement uniformes, ce qui constitue une approximation forte. Pour les bornes de Voigt et Reuss généralisées, lorsque $f_{\mathcal{S}} \neq 1$, une quantité de matrice peut être prise en compte dans le motif. Cela conduit à des champs qui peuvent être non uniformes dans la matrice du composite et ainsi, à une meilleure description de l'hétérogénéité des champs locaux réels.

Estimation autocohérente généralisée :

L'estimation autocohérente généralisée (ACG) est obtenue en résolvant l'équation suivante (d'après l'équation (2.42)) dont l'inconnue est $\mathbb{C}_0$ ($\mathbb{C}_0 = \mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{ACG}}$) :

$$(1 - c_{\mathcal{S}})\mathbb{V}_m^0 + c_{\mathcal{S}}\mathbb{V}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^0 = \mathbb{I} \tag{4.50}$$

avec $\mathbb{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ donné à l'équation (4.3) en prenant également $f_{\mathcal{S}} = f/c_{\mathcal{S}}$. L'expression de $\mathbb{V}^0_m$ est donnée à l'équation (2.22) (où l'inclusion sphérique a les propriétés de la matrice $\mathbb{C}_m$) car le champ de déformation optimal sur la matrice environnante est obtenu à partir de la solution du problème d'un motif homogène de matrice noyé dans le milieu infini 0 sur lequel la déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est appliquée à l'infini. L'inclusion a la forme de la distribution (cas 3 de la section 3.3 du chapitre 2). Ce problème correspond à un problème d'Eshelby classique.

Dans le cas particulier où $c_{\mathcal{S}} = 1$ (il n'y a pas de domaine de matrice environnante), le modèle autocohérent généralisé correspond alors à celui établi par Duan et al. (2005b) (dans le cas poreux), c'est-à-dire $\mathbb{C}^{\mathrm{ACG}}_{\mathrm{M}} = \mathbb{C}^{\mathrm{ACG}}_{\mathrm{D}}$. Le module de cisaillement effectif $\mu^{\mathrm{ACG}}_{\mathrm{D}}$ de cette estimation peut alors être obtenu en résolvant l'équation suivante (d'après l'équation (E.15) en prenant $\mu_0 = \mu^{\mathrm{ACG}}_{\mathrm{D}}$ et $f_{\mathcal{S}} = f$) :

$$V_d\Big(\mu^{\mathrm{ACG}}_{\mathrm{D}}\Big)^2 + (R_d - V_n)\mu^{\mathrm{ACG}}_{\mathrm{D}} - R_n = 0 \tag{4.51}$$

où V_n, V_d, R_n et R_d sont données à l'annexe E (équation (E.16)).

Estimation de Mori et Tanaka généralisée :

Le tenseur de rigidité de l'estimation de Mori et Tanaka généralisée (MTG) est donnée par la relation suivante (d'après l'équation (2.37)) :

$$\mathbb{C}^{\mathrm{MTG}}_{\mathrm{M}} = \mathbb{C}_m + \Big(\mathbb{I} - c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} : \mathbb{P}^m_d\Big)^{-1} : \Big(c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}\Big) \tag{4.52}$$

avec le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ donné à l'équation (4.10) en prenant également $f_{\mathcal{S}} = f/c_{\mathcal{S}}$. La distribution des centres des cavités est supposée isotrope. Le tenseur $\mathbb{P}^m_d$ s'exprime alors de la façon suivante (équation (2.21)) :

$$\mathbb{P}^m_d = \frac{1}{3k_m + 4\mu_m}\mathbb{J} + \frac{3}{5\mu_m}\frac{k_m + 2\mu_m}{3k_m + 4\mu_m}\mathbb{K} \tag{4.53}$$

Dans ce cas, l'estimation précédente correspond au modèle de Mori et Tanaka déjà établie par Duan et al. (2005b) et Brisard et al. (2010a,b) (cf. équations (3.13) et (3.14)), c'est-à-dire $\mathbb{C}^{\mathrm{MTG}}_{\mathrm{M}} = \mathbb{C}^{\mathrm{MT}}_{\mathrm{D}}$.

Comme cela a été précisé précédemment à la section 2, le tenseur $\mathbb{C}^{\mathrm{MTG}}_{\mathrm{M}}$ est indépendant de la forme et de la taille de la couche de matrice dans le motif $\mathcal{S}$, c'est-à-dire indépendant de $c_{\mathcal{S}}$. En effet, il est possible de constater que, dans le cas présent, le produit $c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ est indépendant de $c_{\mathcal{S}}$ et dépendant linéairement de f. Cette remarque ne s'applique pas aux autres modèles évoqués ci-dessus.

Dans le cas où la fraction $c_{\mathcal{S}}$ est égale à 1 (il n'y a pas de matrice environnante), les bornes de Voigt et Reuss généralisées et l'estimation autocohérente généralisée correspondent aux modèles d'assemblage de sphères composites de Hashin et autocohérent généralisé développés par Duan et al. (2005b). Comme cela a été précisé précédemment, il n'est pas possible d'occuper tout l'espace avec les seules membres du motifs $\mathcal{S}$ car une construction fractale n'est pas possible. Ainsi, les modèles de Duan et al. (2005b) peuvent être enrichis en tenant compte d'un domaine de matrice environnante dont la fraction volumique est fixée telle que

la fraction volumique $c_{\mathcal{S}}$ du motif $\mathcal{S}$ soit égale à la compacité maximale d'un assemblage de sphères *monodispersées*, c'est-à-dire $c_{\mathcal{S}} = \pi/(3\sqrt{2})$.

Dans la suite, les valeurs des paramètres retenues pour les applications numériques sont celles présentées à la Table 3.1 de la section 3.1.3 du chapitre 3. Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs normalisés en fonction de la porosité sont représentées respectivement sur la Figure 4.4 et la Figure 4.5 pour un rayon des cavités égal à 1 nm. Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs normalisés en fonction du rayon des cavités sont représentées respectivement sur la Figure 4.6 et la Figure 4.7 pour une porosité de 10 %. Les propriétés effectives obtenues à partir des modèles ACG, MTG, VG et RG ainsi que des bornes LQH sont tracées.

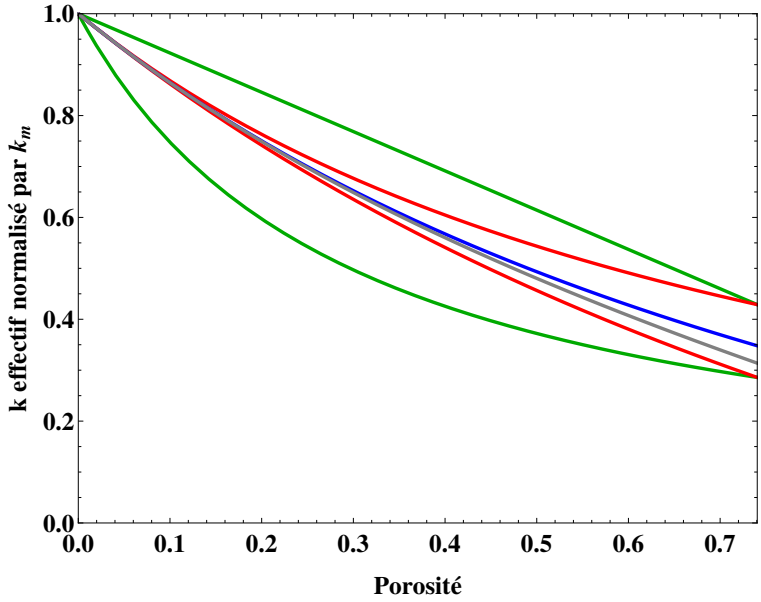


Figure 4.4 – *Évolution du module de compressibilité (normalisé par k_m) en fonction de la porosité. Le rayon des cavités est égal à 1 nm. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), En rouge : bornes VG et RG, en bleu : estimation MTG, en gris : estimation ACG.*

En complément des remarques faites à la section 3.1.3 du chapitre 3, il est possible de remarquer que les modules de compressibilité des bornes de VG et RG, de l'estimation ACG et de l'estimation MTG ne sont plus égaux lorsqu'un domaine de matrice environnante est pris en compte. Il est également possible de constater que les bornes de Voigt et Reuss généralisées améliorent les bornes de Le Quang et He (2008). Lorsque la porosité est égale à la compacité maximale (c'est-à-dire $\pi/(3\sqrt{2}) \approx 0,74$), il n'y a plus de matrice dans le motif $\mathcal{S}$ et les bornes de VG et RG sont égales aux bornes de Le Quang et He (2008). Cela illustre la remarque précédente concernant ce point.

4.2 Distribution sphéroïdale des centres des cavités

Cette section vise à étudier le comportement élastique effectif d'un matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques de même taille dont la distribution des centres est

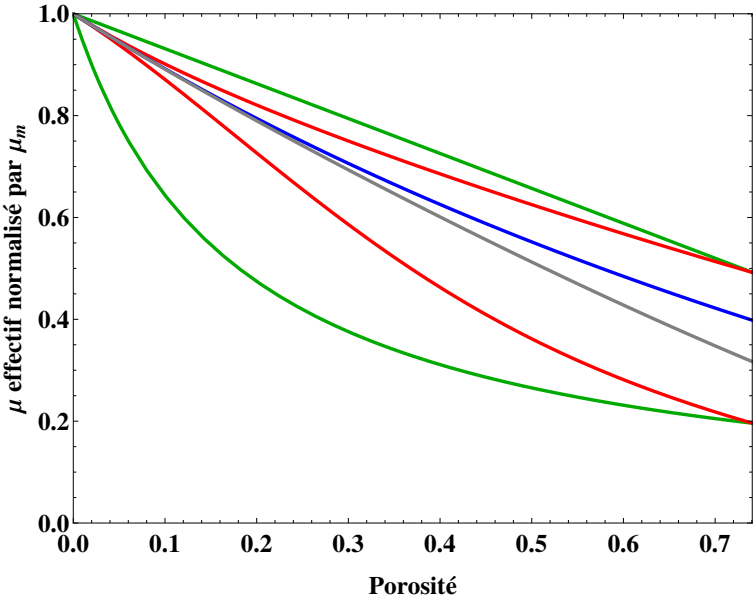


Figure 4.5 – *Évolution du module de cisaillement (normalisé par μ_m) en fonction de la porosité. Le rayon des cavités est égal à 1 nm. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), En rouge : bornes VG et RG, en bleu : estimation MTG, en gris : estimation ACG.*

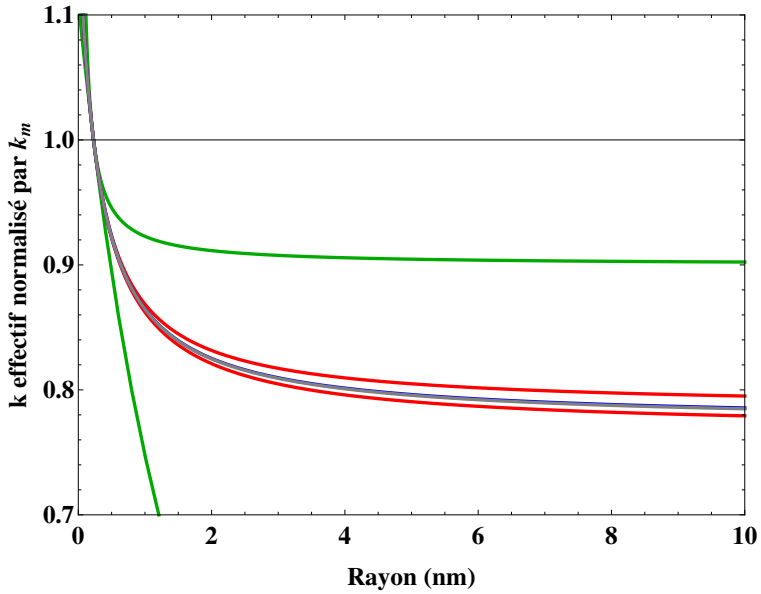


Figure 4.6 – *Évolution du module de compressibilité (normalisé par k_m) en fonction du rayon des cavités. La porosité totale f est égale à 10 %. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), En rouge : bornes VG et RG, en bleu : estimation MTG, en gris : estimation ACG.*

sphéroïdale. Cette étude s'appuie sur l'estimation MTG construite à partir de l'unique le motif $\mathcal{S}$. Comme cela a déjà été précisé à la section 2, l'estimation MTG peut être utilisée en imposant $f_{\mathcal{S}} = 1$ sans perte de généralité (cela implique que $c_{\mathcal{S}} = f$). À l'inverse des autres modèles (VG, RG, ACG), les estimations MTG permettent aisément de prendre en compte des distributions spatiales ellipsoïdales des centres des motifs. En effet, dans le cadre de ces

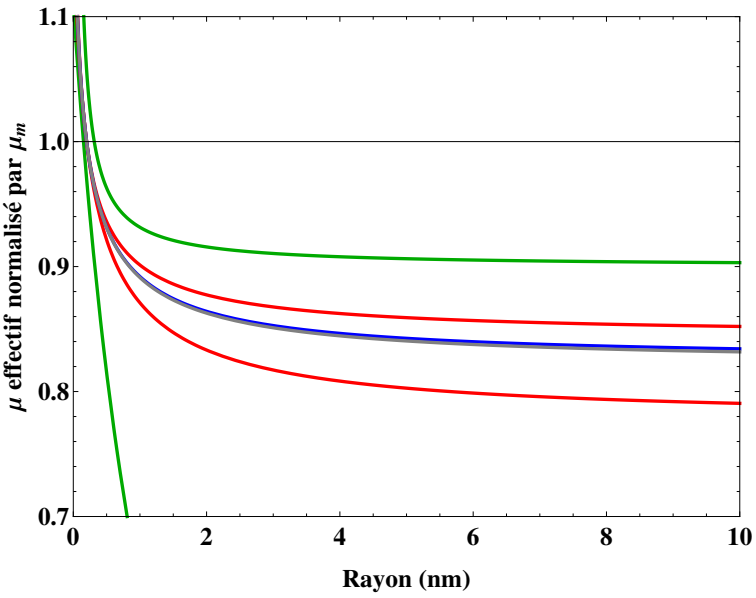


Figure 4.7 – *Évolution du module de cisaillement (normalisé par μ_m) en fonction du rayon des cavités. La porosité totale f est égale à 10 %. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), En rouge : bornes VG et RG, en bleu : estimation MTG, en gris : estimation ACG.*

modèles, la forme des supports des motifs n'est pas nécessairement la même que celle de la distribution spatiale des centres. Il n'est donc pas nécessaire de définir un nouveau motif compatible avec la distribution spatiale et de résoudre un nouveau problème auxiliaire. Comme à la section 4.1, l'estimation est établie à partir de l'équation (4.52). Le tenseur $\mathbb{P}_d^m$ est maintenant relatif à la distribution sphéroïdale des centres des cavités et est exprimé à l'équation (2.17) en fonction du tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_m)$. Le tenseur d'Eshelby relatif à une inclusion de forme sphéroïdale est donné à l'annexe B. Les longueurs des demi-axes du sphéroïde permettant de décrire la distribution spatiale sont notés a_d et b_d avec a_d la longueur du demi-axe porté par l'axe de révolution (porté par un vecteur noté $\boldsymbol{n}$) du sphéroïde. Le rapport de forme de la distribution w_d définie de la façon suivante :

$$w_d = a_d/b_d \tag{4.54}$$

Le comportement élastique est isotrope transverse dans la direction porté par $\boldsymbol{n}$. Le tenseur de rigidité effectif peut se décomposer de la façon suivante :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}} = n\mathbb{E}_l + 2k_t\mathbb{J}_T + \sqrt{2}l(\mathbb{F} + {}^{\mathrm{T}}\mathbb{F}) + 2\mu_t\mathbb{K}_T + 2\mu_l\mathbb{K}_L \tag{4.55}$$

où $\mathbb{E}_L$, $\mathbb{J}_T$, $\mathbb{F}$, ${}^{\mathrm{T}}\mathbb{F}$, $\mathbb{K}_T$ et $\mathbb{K}_L$ sont les tenseurs de la base isotropie transverse définis à l'annexe B (équation (B.1)).

Les paramètres matériaux retenus pour l'application numérique sont ceux présentés à la Table 3.1. La Figure 4.8 présente les évolutions des constantes élastiques effectives en fonction du rapport de forme w_d pour des distributions spatiales sphéroïdales oblates ($a_d < b_d$) et prolates ($a_d > b_d$) [1] des centres du motif $\mathcal{S}$. Le rayon des cavités est fixé à 1 nm.

1. Pour les distributions de formes prolates, les évolutions des constantes effectives sont tracées en fonction de $1 - 1/w_d$ afin de parcourir toute la gamme des valeurs possibles du rapport de forme.

La porosité totale est fixée à une valeur élevée $f = 25$ % afin de bien mettre en évidence l'effet de la distribution des cavités. Les constantes effectives sont normalisées par rapport aux constantes effectives lorsque la distribution est isotrope ($w_d = 1$).

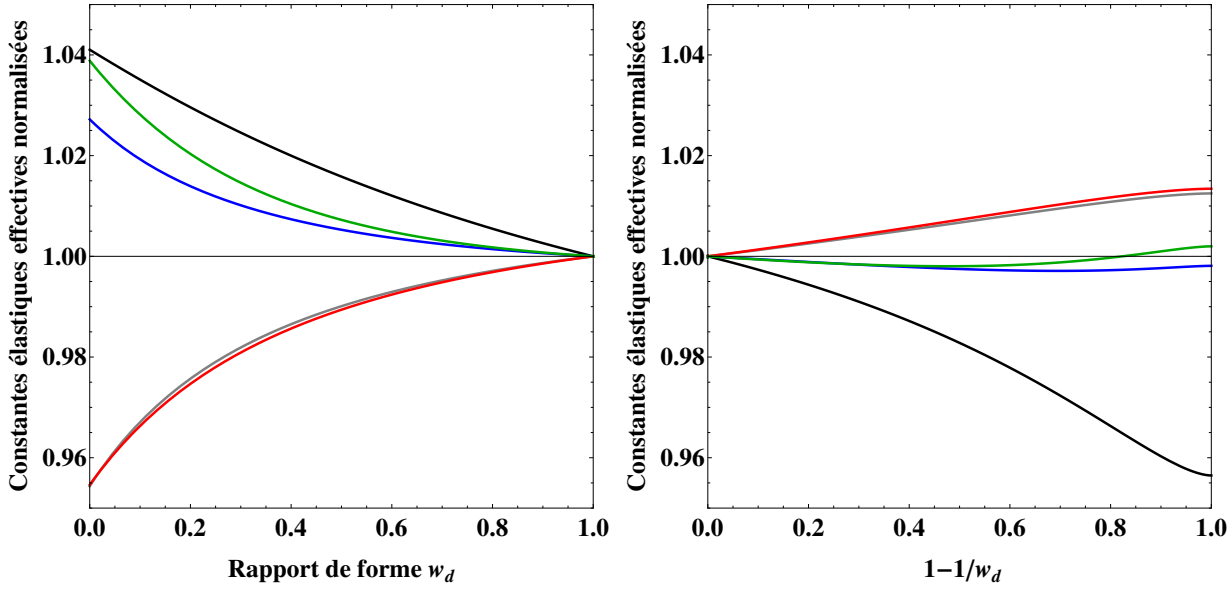


Figure 4.8 – *Évolutions des constantes élastiques effectives en fonction de rapport de forme de la distribution de formes oblate (à gauche) et prolate (à droite) des centres du motif $\mathcal{S}$. La porosité totale f est égale à 25 % et le rayon des cavités est égal à 1 nm. En noir : n, en bleu : l, en gris : k_t, En rouge : μ_t et en vert : μ_l.*

Les observations suivantes peuvent être faites :

- le comportement effectif devient de plus en plus anisotrope lorsque w_d tend vers 0 (cas oblate) et lorsque $1-1/w_d$ tend vers 1 (cas prolate) : la différence entre les coefficients longitudinaux (n, μ_l) et les coefficients transverses (k_t, μ_t) augmente lorsque w_d tend vers ces valeurs particulières.
- dans le cas oblate, les valeurs des coefficients longitudinaux (n, μ_l) augmentent lorsque w_d tend vers 0 et les valeurs des coefficients transverses diminuent plus la forme de la distribution est aplatie.
- dans le cas prolate, la valeur du coefficient n diminue lorsque w_d augmente (la forme de la distribution s'allonge), les valeurs des coefficients μ_l, k_t, μ_t augmentent. Les évolutions des coefficients l et μ_l ne sont pas monotones.

L'interprétation physique des deux dernières observations est délicate à cause des nombreux effets pris en compte par le modèle. Premièrement, dans le cadre de l'application numérique choisie, les interfaces rigidifient le comportement effectif alors que les cavités l'assouplissent. Ensuite, la distribution spatiale contrôle les distances entre les cavités et donc influe sur les interactions moyennes entre ses cavités : par exemple, lorsque w_d tend vers 0, les cavités sont espacées loin les unes des autres dans le plan transverse et elles tendent à s'aligner dans la direction axiale (comme cela a déjà été mis en évidence par Ponte Castañeda et Willis (1995) dans le cas de particules rigides ou de fissures). Évidemment, les différences de comportements entre la matrice et les interfaces influencent également le com-

portement macroscopique. Pour mettre en évidence l'influence de la distribution spatiale des centres sur les propriétés effectives, il est possible d'écrire le développement suivant à partir de l'équation (4.52) (développement initialement dû à Ponte Castañeda et Willis (1995)) :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}} = \mathbb{C}_m + c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m + (c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m) : \mathbb{P}_d^m : (c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m) + O\left[(c_{\mathcal{S}})^3\right] \tag{4.56}$$

Il apparait alors que la forme de la distribution n'influence (à travers le tenseur $\mathbb{P}_d^m$) le tenseur $\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}}$ qu'au second ordre de la fraction volumique $c_{\mathcal{S}}$ (c'est-à-dire au second ordre de la porosité f puisque $f_{\mathcal{S}} = 1$). Un nouveau tenseur $\mathbb{D}$ est défini de la façon suivante :

$$\mathbb{D} = \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m : \mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m \tag{4.57}$$

Les évolutions des composantes isotropes transverses du tenseur $\mathbb{D}$ en fonction du rapport de forme w_d peuvent être utilisées pour étudier les dépendances des paramètres n, μ_l, k_t, μ_t à la forme de la distribution. La Figure 4.9 montre les évolutions des composantes isotropes transverses de $\mathbb{D}$ en fonction de w_d dans le cas oblate. Les coefficients transverses de $\mathbb{D}$ (resp. les coefficients longitudinaux) diminuent (resp. augmentent) lorsque w_d diminue. Cela est en accord avec les évolution des constantes isotropes transverses de $\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}}$ en fonction de w_d illustrées à la Figure 4.8. Lorsque w_d diminue, les cavités sphériques sont de plus en plus espacées les unes des autres dans le plan transverse. Ainsi, les interactions entre les cavités diminuent dans le plan transverse. De la même façon, cela implique que les cavités sont plus proches les unes des autres dans la direction longitudinale. Les interactions entre les cavités sont alors plus fortes dans cette direction. Il est possible de démontrer que le module cisaillement transverse de $\mathbb{D}$ est nul lorsque w_d tend vers 0. Dans ce cas, les cavités sont tellement éloignées les unes des autres dans le plan transverse que les effets d'interaction sont négligeables et le module de cisaillement transverse de $\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}}$ correspond alors à celui du *modèle d'inclusion diluée*.

De plus, il est possible de montrer que le module de cisaillement longitudinal (resp. le module de cisaillement transverse) de la différence $\mathbb{D}(w_d = 0) - \mathbb{D}(w_d = 1)$ est toujours positif (resp. négatif) quelles que soient les valeurs des autres paramètres (propriétés de la matrice, des interfaces, rayon des cavités). Cela implique que le module de cisaillement longitudinal effectif (resp. le module de cisaillement transverse effectif) prédit par le modèle est toujours plus rigide (resp. souple) dans le cas où $w_d = 0$ que dans le cas isotrope ($w_d = 1$). Cette remarque n'est pas généralisable aux autres coefficients (n, l, k_t) de $\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}}$. Cela est illustré sur la Figure 4.10, où le tenseur $\mathbb{D}$ exhibe d'autres tendances pour un autre choix de paramètres ($\nu_m = 0.2$, $k_s = 50\ J/m^2$, $\mu_s = 30\ J/m^2$).

4.3 Distribution de taille de cavités

Les solutions des problèmes auxiliaires traités aux sections 2 et 3 sont dépendantes des longueurs caractéristiques des motifs. Il est alors envisageable de prendre en compte des distributions de ces longueurs dans les modèles. L'épaisseur de la couche de matrice dans le motif permet de caractériser, par exemple, les distances entre les cavités. Une distribution sur cette grandeur permettrait par exemple de prendre en compte des effets d'amas de cavités (Marcadon, 2005; Marcadon et al., 2007). Il n'est cependant pas possible de prendre en compte de tels effets d'amas avec les estimations MTG où la dimension de la couche de matrice n'a pas d'influence sur les propriétés effectives (cf. section 4.1) prédites par ce type

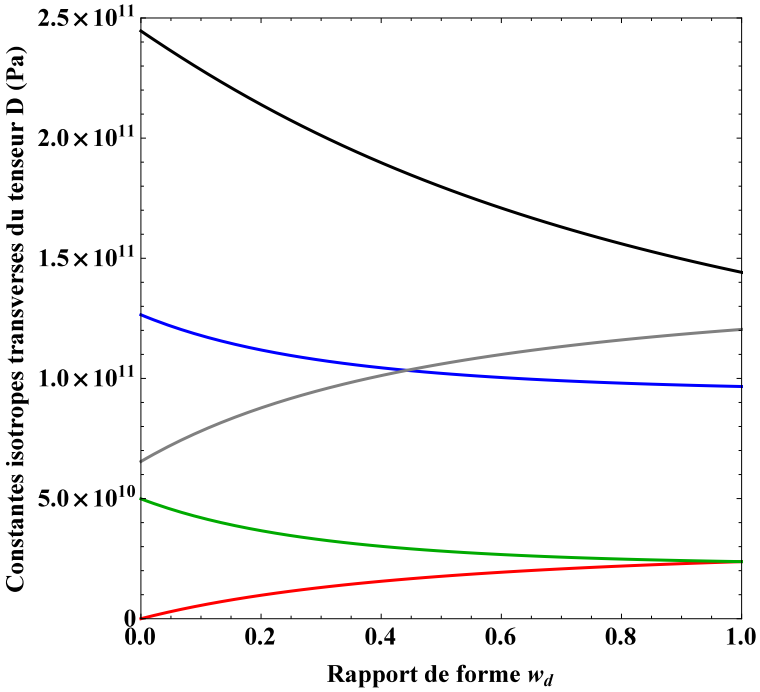


Figure 4.9 – *Évolutions des composantes isotropes transverses du tenseur* $\mathbb{D}$ *en fonction de rapport de forme de la distribution oblate des centres du motif* $\mathcal{S}$*. La porosité totale* f *est égale à* 25 % *et le rayon des cavités est égal à* 1 *nm. En noir :* n*, en bleu :* l*, en gris :* k_t*, En rouge :* μ_t *et en vert :* μ_l*.*

de modèle. Il est également possible de prendre en compte des distributions de taille de cavités. Cela est illustré dans cette section en considérant un matériau qui contient des cavités sphériques de tailles différentes et dont la distribution spatiale des centres est isotrope. Bien qu'il soit possible de construire dans ce cas une estimation ACG et des bornes de VG et RG, cette section se limite à l'estimation MTG facile à mettre en œuvre en comparaison de l'estimation AGC où il est nécessaire de résoudre l'équation (2.42).

La densité de cavités dont le rayon r' est compris entre r et $r + \mathrm{d}r$ est égale à $p(r)\mathrm{d}r$. La porosité des cavités dont le rayon est compris entre r et $r+\mathrm{d}r$ est alors égale $(4\pi/3)r^3p(r)\mathrm{d}r$. Un motif $\mathcal{S}(r')$ est défini pour chaque classe de cavités de même taille. Les rayons extérieurs des motifs sont identiques et égaux à r_0. Cela revient à supposer que la distance entre les cavités est constante et qu'il n'y a pas d'effets d'amas. Cela n'a cependant aucune influence dans le cadre de l'estimation MTG construite ici. La fraction volumique des représentants du motif $\mathcal{S}(r')$ associé aux cavités dont le rayon est compris entre r et $r + \mathrm{d}r$ est égale à $(4\pi/3)r_0^3p(r)\mathrm{d}r$. Afin de rester dans une démarche générale, un domaine de matrice environnante est pris en compte. L'assemblage de motifs étant monodisperse (r_0 constant quel que soit le motif considéré), la fraction volumique de matrice minimale à prendre en compte est telle que la fraction volumique de l'ensemble des motifs soit égale à la compacité maximale d'un assemblage monodisperse de sphères, noté d ($d = \pi/(3\sqrt{2})$). Le nombre total de cavités

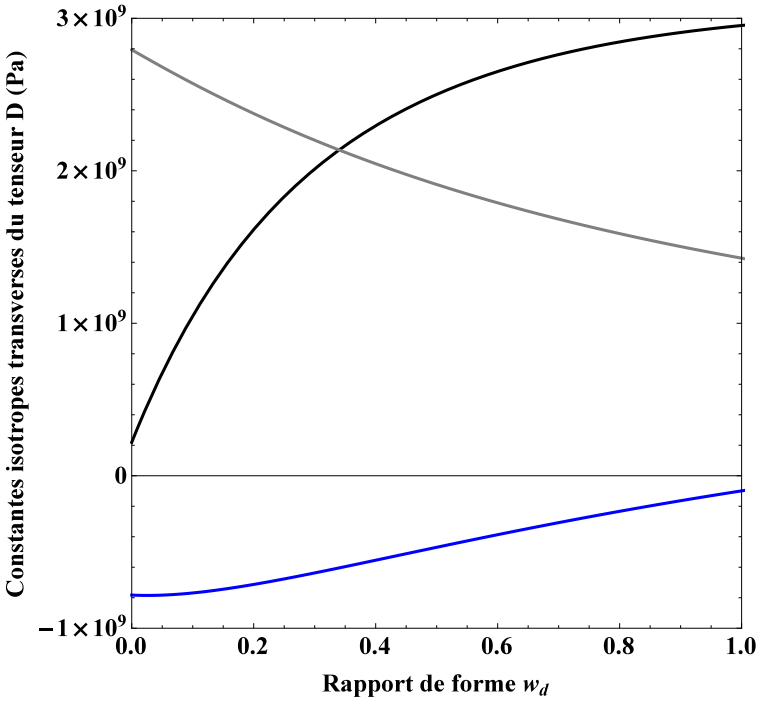


Figure 4.10 – *Évolutions des composantes isotropes transverses du tenseur $\mathbb{D}$ en fonction de rapport de forme de la distribution oblate des centres du motif $\mathcal{S}$. La porosité totale f est égale à 25 % , le rayon des cavités est égal à 1 nm et $\nu_m = 0.2$, $k_s = 50\ J/m^2$, $\mu_s = 30\ J/m^2$. En noir : n, en bleu : l, en gris : k_t.*

par unité de volume est noté N. Le rayon extérieur des motifs est alors égal à :

$$r_0 = \left(\frac{3d}{4\pi N}\right)^{1/3} \tag{4.58}$$

Le tenseur de rigidité de l'estimation MTG s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}} = \mathbb{C}_m + \left[\mathbb{I} - \left(\frac{d}{N}\int_0^{+\infty} p(r)\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}(r)}\ dr\right) : \mathbb{P}^m_d\right]^{-1} : \left[\frac{d}{N}\int_0^{+\infty} p(r)\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}(r)})\ dr\right] \tag{4.59}$$

où le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}(r)}$ est donné à l'équation (4.10) en posant $f_{\mathcal{S}} = (r/r_0)^3 = (4\pi r^3 N)/(3d)$. La distribution des centres des cavités est supposée isotrope. Le tenseur $\mathbb{P}^m_d$ est donnée à l'équation (4.53). Dans ce cas, l'estimation précédente conduit à l'expression du module de compressiblité donnée par Brisard et al. (2010a) (équation (3.18)). L'estimation peut être ici généralisée au cas de distribution spatiale ellipsoïdale des centres des cavités.

Pour les applications numériques, la fonction $p(r)$ est supposée de la forme $N \times g(r)$ où $g(r)$ est la fonction de densité d'une loi de probabilité triangulaire. Le plus petit rayon est égal à zéro et le plus grand est égal à r_0. Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs (normalisé par rapport aux modules de la matrice) en fonction du mode [2] sont représentée sur la Figure 4.11. Le nombre de cavité N est fixé à 10^{23} m^{-3}. La

2. Mode : valeur r pour laquelle la densité de probabilité $g(r)$ est maximale.

porosité totale f évolue également en fonction du mode de la loi triangulaire. Cette évolution est représentée sur la Figure 4.11. Les propriétés matériaux retenues sont présentées à la Table 3.1. Une distribution de taille de cavités a bien été prise en compte et des différences relatives entre les cas extrêmes (où le mode est égal à 0 ou à r_0) de l'ordre de 50 % pour le module de compressibilité effectif et 40 % pour le module de cisaillement effectif sont observées dans le cas présent.

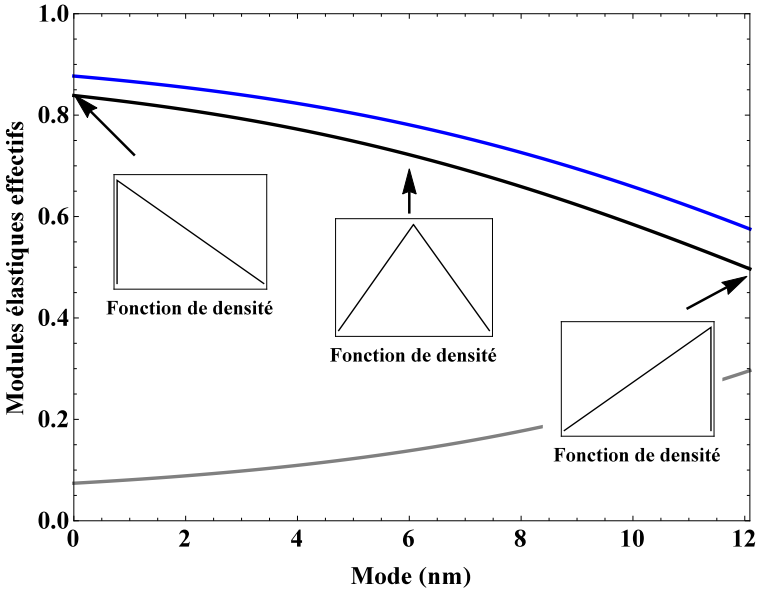


Figure 4.11 – *Évolution des modules effectifs normalisés (par rapport aux modules de la matrice) en fonction du mode (pour une loi de probabilité triangulaire). En noir : module de compressibilité normalisé par k_m, en bleu : module de cisaillement normalisé par μ_m. La porosité totale f est représentée en gris. Le nombre total de cavité est fixé à $N = 10^{23}$ m^{-3}. Le rayon maximal est fixé à 12 nm et le rayon minimal à 0 nm.*

De façon à dissocier les effets de la porosité et de la *polydispersité*, la fonction de densité $g(r)$ est supposé triangulaire *symétrique par rapport à son mode*, c'est-à-dire qu'elle est définie sur le support $[m-\epsilon,\ m+\epsilon]$ (avec $g(m-\epsilon) = g(m+\epsilon) = 0$) où m désigne le mode de la loi de probabilité triangulaire (égal à l'espérance dans ce cas particulier) et où ϵ est un réel. Dans ce cas, il est possible de montrer que le nombre total de cavités par unité de volume N et la porosité totale f sont reliés de la façon suivante :

$$N = \frac{3f}{\pi(4m^3 + 2m\epsilon^2)} \tag{4.60}$$

La Figure 4.12 présente les évolutions des modules de compressibilité et cisaillement effectifs issus de l'estimation MTG (normalisés par rapport aux modules de l'estimation MTG pour un matériau contenant des nano-cavités sphériques de même rayon m, c'est-à-dire $\epsilon = 0$) en fonction du mode m de la loi de probabilité pour $f = 0.1$ et $\epsilon = 1$ nm.

Lorsque le rayon moyen m des cavités augmente à f et ϵ fixés, l'effet de la *polydispersité* diminue et l'estimation MTG tend vers l'estimation correspondante pour un matériau nano-poreux *monodispersé*. Cela est cohérent avec le fait que l'effet de surface devient négligeable

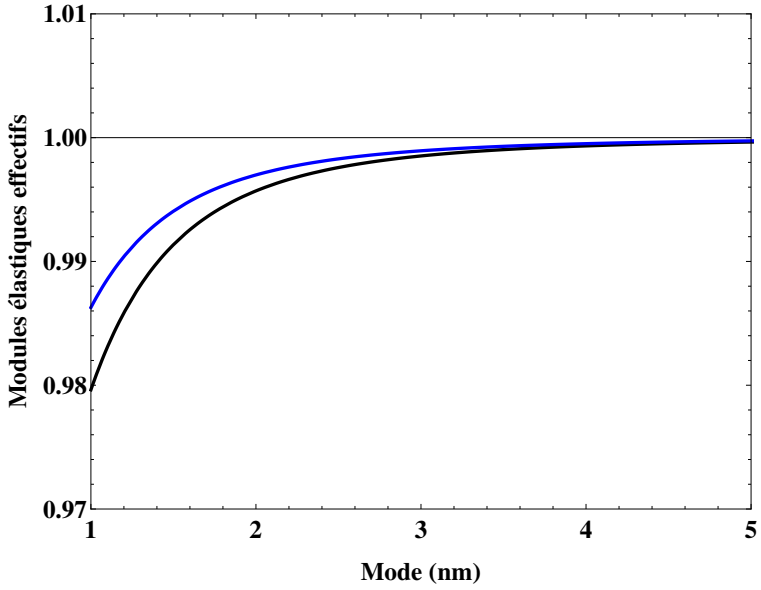


Figure 4.12 – *Évolution des modules effectifs normalisés (par rapport aux modules de l'estimation MTG pour un matériau contenant des nano-cavités sphériques de même rayon m) en fonction du mode m de la loi de probabilité triangulaire « symétrique » pour $f = 0.1$ et $\epsilon = 1$ nm. En noir : module de compressibilité normalisé, en bleu : module de cisaillement normalisé.*

à mesure que la taille des cavités augmente à porosité fixée. Dans le cas présent, la *polydispersité* conduit à un comportement effectif plus souple que lorsque le matériau ne contient que des cavités de même taille. La fonction de densité de cavités $p(r)$ étant *symétrique*, cela signifie qu'il y a autant de cavités dont le rayon est inférieur à m que de cavités dont le rayon est supérieur à m. Ainsi, dans le cadre de l'application présentée, l'effet assouplissant (par rapport aux cavités de rayon m) des *cavités de plus grande taille* ($r > m$) l'emporte sur l'effet rigidifiant (par rapport aux cavités de rayon m) des *cavités de plus petite taille* ($r < m$). L'effet de la *polydispersité* est ici relativement faible, de l'ordre de 1 à 2 % pour $m = 1$ nm. Cela est confirmé pour d'autres valeurs de ϵ.

4.4 Nano-cavités sphéroïdales orientées aléatoirement

Cette section a pour objectif d'étudier le comportement élastique effectif d'un matériau contenant uniquement des cavités sphéroïdales orientées et distribuées aléatoirement. Cette étude repose sur une estimation MTG construite à partir du motif $\mathcal{E}$. Les cavités sont supposées de même taille et de même forme. Il faut définir une distribution continue de motifs $\mathcal{E}$ qui diffèrent uniquement par leur orientation. Ci-après, le scalaire $c_{\mathcal{E}}^{\circlearrowleft}$ fait référence à la fraction volumique totale de la distribution continue de motif $\mathcal{E}$ (c'est-à-dire la fraction volumique de tous les motifs $\mathcal{E}$). Le tenseur de rigidité est donné par l'équation suivante (équation (2.37)) :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}} = \mathbb{C}_m + \left(\mathbb{I} - c_{\mathcal{E}}^{\circlearrowleft}\langle \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{E}}^m \rangle_{\circlearrowleft} : \mathbb{P}_d^m\right)^{-1} : \left(c_{\mathcal{E}}^{\circlearrowleft}\langle \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{E}}^m \rangle_{\circlearrowleft}\right) \tag{4.61}$$

L'opération $\langle \mathbb{A} \rangle_{\circlearrowleft}$ fait référence à la moyenne sur toutes les orientations de l'espace du

tenseur d'ordre quatre $\mathbb{A}$, qui est égale à la projection de $\mathbb{A}$ sur la base d'isotropie lorsque les orientations sont équiprobables (c'est-à-dire $\langle \mathbb{A} \rangle_{\circlearrowleft} = (\mathbb{J} :: \mathbb{A})\mathbb{J} + (1/5)(\mathbb{K} :: \mathbb{A})\mathbb{K}$) (Gatt et al., 2005).

L'expression du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ est donnée à l'équation (4.42) en posant $f_{\mathcal{E}} = f/c^{\circlearrowleft}_{\mathcal{E}}$ avec f la porosité totale et $f_{\mathcal{E}}$ la porosité du motif $\mathcal{E}$ (identique quel que soit le motif $\mathcal{E}$). En considérant le produit $c^{\circlearrowleft}_{\mathcal{E}} \langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}} \rangle_{\circlearrowleft}$, il est possible de constater qu'il est indépendants de $c^{\circlearrowleft}_{\mathcal{E}}$. Le modèle construit est donc indépendant du rayon extérieur des motifs r_0. Cela va dans le sens des remarques précédentes concernant la spécificité des modèles MTG. La distribution des centres des cavités étant supposée isotrope, le tenseur $\mathbb{P}^m_d$ est donné à l'équation (4.53).

Les propriétés matériaux retenues pour réaliser les applications numériques sont présentées à la Table 3.1. La porosité totale f est égale à 10 %. Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs (normalisés respectivement par rapport au module de compressibilité et de cisaillement de la matrice) en fonction du rapport de forme w des cavités sont représentées respectivement sur la Figure 4.13 et la Figure 4.14 pour différentes valeurs de b (0,01 nm, 0,25 nm, 1 nm et 5 nm). Les modules élastiques effectifs issus de l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995) (PCW) pour un matériau à cavités sphéroïdales (sans effet de surface) orientées et distribuées aléatoirement et pour un matériau à inclusions sphéroïdales rigides orientées et distribuées aléatoirement sont également représentées.

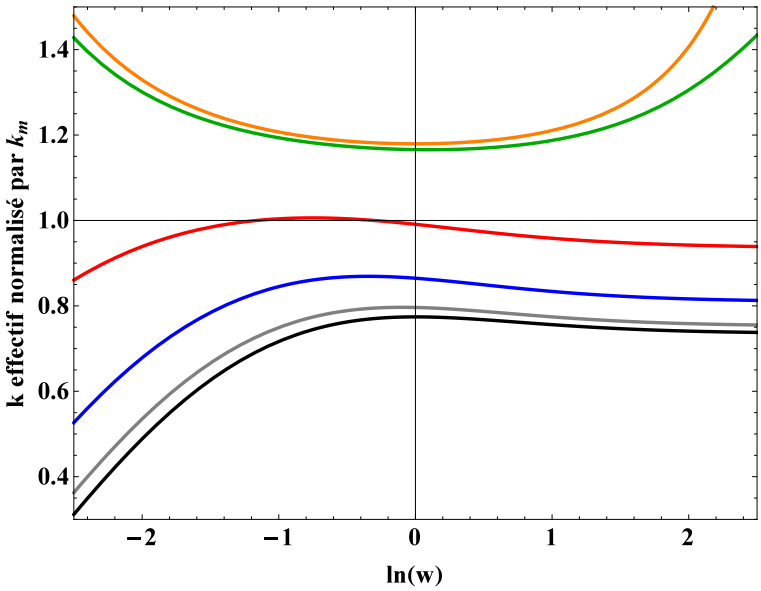


Figure 4.13 – Évolution du module de compressibilité effectif normalisé par k_m en fonction du rapport de forme des hétérogénéités. La porosité totale f est égale à 10 %. En noir : PCW (cavités), en gris : MTG - $b = 5\ nm$, en bleu : MTG - $b = 1\ nm$, En rouge : MTG - $b = 0.25\ nm$, en vert : MTG - $b = 0.01\ nm$ et en orange : PCW (inclusions rigides).

Une dépendance à la forme et à la taille des cavités a bien été introduite dans le modèle par l'intermédiaire des paramètres w et b. Lorsque la taille des cavités devient grande, l'effet de surface devient négligeable et le modèle MTG tend vers l'estimation PCW pour un matériau poreux. Lorsque la taille des cavités est très faible, le modèle MTG tend vers

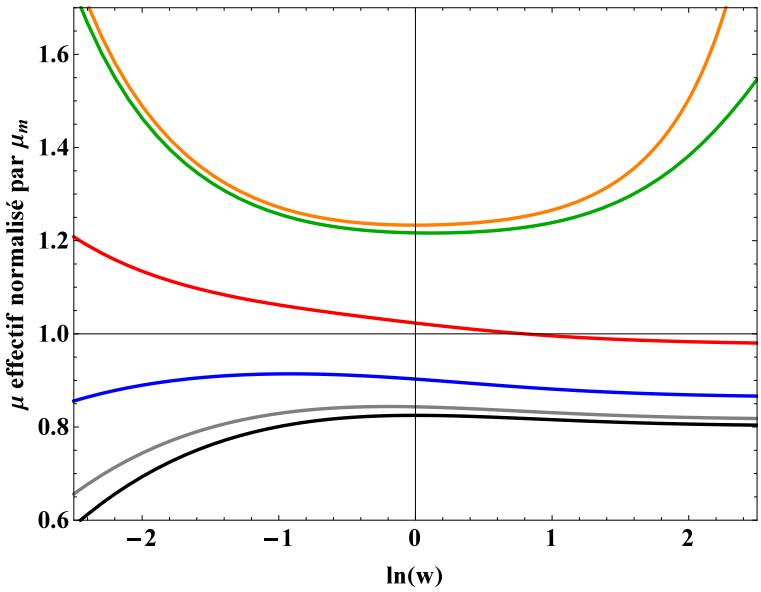


Figure 4.14 – Évolution du modules de cisaillement effectif normalisé par μ_m en fonction du rapport de forme des hétérogénéités. La porosité totale f est égale à 10 %. En noir : PCW (cavités), en gris : MTG - $b = 5\ nm$, en bleu : MTG - $b = 1\ nm$, En rouge : MTG - $b = 0.25\ nm$, en vert : MTG - $b = 0.01\ nm$ et en orange : PCW (inclusions rigides).

l'estimation PCW pour un matériau à inclusions rigides. Dans le cadre de l'application numérique présentée ici, il apparait que les écarts entre les coefficients d'élasticité prédits par le modèle MTG et par celui de PCW pour un matériau poreux sont inférieurs à 1% lorsque b est supérieur à 60 nm (pour $w = 0,125$). De la même façon, les écarts entre les coefficients d'élasticité prédits par le modèle MTG et par celui de PCW pour un matériau à inclusions rigides sont inférieurs à 1% lorsque b est inférieur à 0,5 pm (pour $w = 8$).

Il a été mis en évidence à la section 3 que les parties déviatoriques des tenseurs $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$, lorsque $w = 1$, diffèrent l'une de l'autre car le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ est résolu de façon approchée. Afin d'illustrer l'influence de cette approximation sur les propriétés élastiques effectives, les évolutions en fonction du rayon r des cavités, des modules de cisaillement effectifs d'un matériau contenant des cavités nanosphériques (distribuées aléatoirement) sont représentées sur la Figure 4.15 pour les deux cas ci-dessous :

- *cas 1* : le problème auxiliaire est résolu de façon exact via le motif $\mathcal{S}$ (cf. section 2) ;
- *cas 2* : le problème auxiliaire est résolu de façon approchée via le motif $\mathcal{E}$ avec $w = 1$ et $b = r$ (cf. section 3).

Les bornes de Le Quang et He (2008) pour un matériau à cavités nanosphériques sont également représentées. Les deux modèles de type MTG conduisent effectivement à des estimations différentes des modules de cisaillement effectifs dans le *cas 1* et le *cas 2*. Comme cela a été mis en évidence à la section 3, ces différences s'estompent cependant dans les cas de petites et grandes cavités. Bien que le module de cisaillement effectif correspondant au *cas 2* soit obtenu à partir d'un solution approchée du problème auxiliaire, il apparaît néanmoins que, pour l'application numérique présentée ici, ce module respecte les bornes de Le Quang et He (2008).

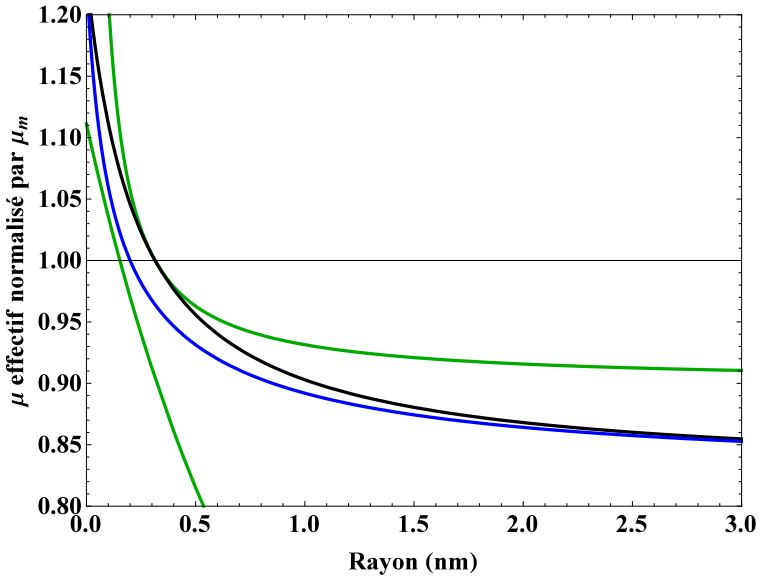


Figure 4.15 – Évolution du modules de cisaillement effectif normalisé par μ_m en fonction du rayon r des cavités sphériques. La porosité totale f est égale à 10 %. En vert : bornes de Le Quang et He (2008), en noir : MTG construit avec le motif $\mathcal{E}$ ($b = r$ et $w = 1$) et en bleu : MTG construit avec le motif $\mathcal{S}$.

4.5 Nano-cavités sphériques et sphéroïdales orientées aléatoirement

Cette dernière section traite le cas d'un matériau qui contient deux populations de cavités : i. des nano-cavités sphériques supposées de même tailles, réparties de façon homogène et isotrope, ii. des nano-cavités sphéroïdales supposées de même taille, même forme, orientées aléatoirement et réparties de façon homogène et isotrope. Les propriétés élastiques des interfaces dans les motifs $\mathcal{S}$ et $\mathcal{E}$ sont supposées identiques. Les valeurs des propriétés matériaux retenues sont données à la Table 3.1. La porosité totale dans le matériau est notée f. La porosité des cavités sphériques est égale à $(1-\theta)f$ et celle des cavités sphéroïdales est égale à θf avec $\theta \in [0,1]$. Les propriétés élastiques effectives sont déterminées à partir de l'équation suivante (d'après l'équation (2.37)), où le tenseur $\mathbb{P}_m^d$ relatif à une distribution isotrope est donnée à l'équation (4.53) :

$$\mathbb{C}_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}} = \mathbb{C}_m + \left(\mathbb{I} - \left(c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m + c_{\mathcal{E}}\langle\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{E}}^m\rangle_{\circlearrowleft}\right) : \mathbb{P}_d^m\right)^{-1} : \left(c_{\mathcal{S}}\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m + c_{\mathcal{E}}\langle\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{E}}^m\rangle_{\circlearrowleft}\right) \tag{4.62}$$

où l'expression de $\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m$ est donnée à l'équation (4.10) en posant $f_{\mathcal{S}} = (1-\theta)f/c_{\mathcal{S}}$ et l'expression de $\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{E}}^m$ est donnée à l'équation (4.42) en posant $f_{\mathcal{E}} = \theta f/c_{\mathcal{E}}$. Les orientations des cavités sphéroïdales dans l'espace étant équiprobables, la moyenne sur toutes les orientations correspond à la projection sur la base d'isotropie (Gatt et al., 2005).

Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs normalisés en fonction de la porosité totale f sont présentées respectivement sur la Figure 4.16 et la Figure 4.17 pour différentes valeurs de θ. Le rayon des cavités sphériques est fixé à 1 nm. La longueur b du demi-axe des cavités sphéroïdales est fixée à 5 nm et le rapport de forme w est fixé à 0.25.

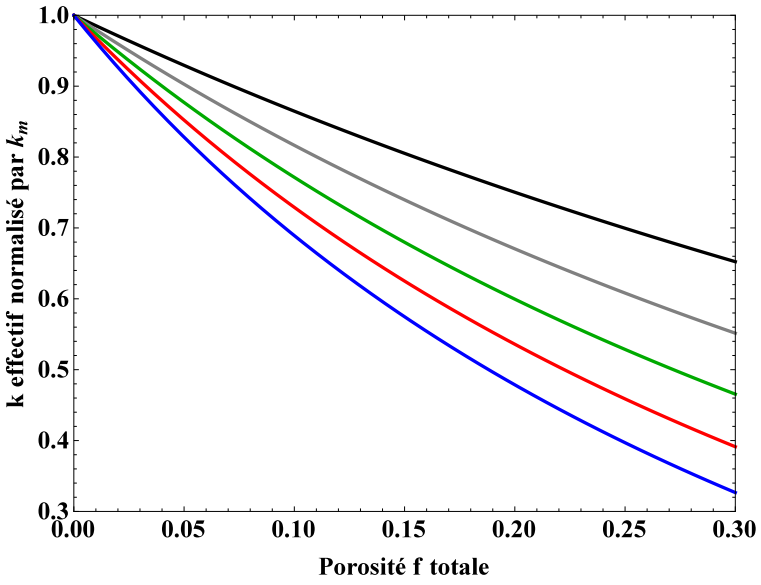


Figure 4.16 – *Évolution du module de compressibilité effectif normalisé par k_m en fonction de la porosité totale f pour différentes valeurs de θ. En noir : $\theta = 0$, en gris : $\theta = 0.25$, en vert : $\theta = 0.5$, En rouge : $\theta = 0.75$ et en bleu : $\theta = 1$. Le rayon des cavités sphériques est égal à 1 nm. La longueur b du demi-axe des cavités sphéroïdales est égale à 5 nm et le rapport de forme w est égal à 0.25.*

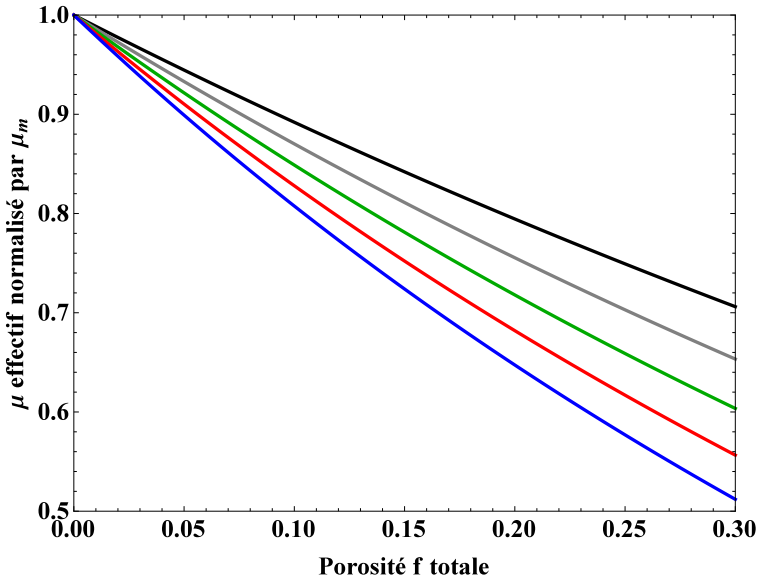


Figure 4.17 – *Évolution du module de cisaillement effectif normalisé par μ_m en fonction de la porosité totale f pour différentes valeurs de θ. En noir : $\theta = 0$, en gris : $\theta = 0.25$, en vert : $\theta = 0.5$, En rouge : $\theta = 0.75$ et en bleu : $\theta = 1$. Le rayon des cavités sphériques est égal à 1 nm. La longueur b du demi-axe des cavités sphéroïdales est égale à 5 nm et le rapport de forme w est égal à 0.25.*

Lorsque θ est nul (le matériau contient alors uniquement des cavités sphériques), le modèle *biporeux* correspond au modèle MTG de la section 4.1, et lorsque θ est égal à 1 (le

matériau contient uniquement des cavités sphéroïdales), le modèle *biporeux* correspond alors au modèle présenté à la section 4.4. Lorsque θ est compris entre 0 et 1 (les deux populations de cavités co-existent), les propriétés effectives sont alors comprises entre celles obtenues dans les deux cas précédents.

5 Bilan du chapitre

L'approche par motifs a été appliquée dans ce chapitre afin de développer des bornes et des estimations des propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales. Deux motifs morphologiques $\mathcal{S}$ et $\mathcal{E}$ relatifs à ces cavités ont été définis. Conformément à l'approche par motifs, la détermination des propriétés élastiques effectives d'un assemblage construit à partir des motifs $\mathcal{S}$ et $\mathcal{E}$ dont la distribution des centres est ellipsoïdale passe par la résolution de problèmes auxiliaires où les motifs sont plongés dans un milieu infini sur lequel un chargement homogène est appliqué à l'infini.

Concernant le motif $\mathcal{S}$:

Le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ a été résolu quel que soit le milieu de référence en s'appuyant sur les travaux de Duan et al. (2005b). Différents modèles peuvent être ainsi développés : des bornes de Voigt et Reuss généralisées, des estimations autocohérentes généralisées et des estimations de type Mori et Tanaka généralisées. Le développement d'encadrements d'ordre 2 de type Hashin et Shtrikman n'est en revanche pas aisé. En effet, la plus souple des phases étant le vide, la borne inférieure correspond alors à la borne de Reuss généralisée. De plus, la notion de *phase la plus raide* n'est pas triviale en présence d'interfaces imparfaites cohérentes.

Il apparait que l'application de l'approche par motifs au motif $\mathcal{S}$ permet de généraliser les modèles existants de Duan et al. (2005b) et de Brisard et al. (2010a,b). Les modèles d'assemblage de sphères composites et autocohérent généralisé de Duan et al. (2005b) correspondent respectivement aux bornes de Voigt et Reuss et à l'estimation autocohérente de l'approche par motifs de l'assemblage de Hashin généralisé construit à partir de l'unique motif $\mathcal{S}$. Le cadre théorique fournit par l'approche par motifs permet de généraliser ces modèles à des assemblages plus complexes en prenant en compte par exemple un domaine de matrice environnante, des distributions de tailles de cavités, des effets d'amas (cf. (Marcadon, 2005; Marcadon et al., 2007)) ou d'autres types d'hétérogénéités (sous réserve que la solution du problème auxiliaire relatif au motif caractérisant cette hétérogénéité soit disponible). Rappelons que, n'étant pas particulièrement intéressés par le développement de bornes, Duan et al. (2005b) n'ont pas établi les encadrements de type Voigt et Reuss pour le module de cisaillement effectif d'un assemblage de Hashin généralisé du motif $\mathcal{S}$. Cela a été réalisé dans le cadre de ce travail.

Il apparait que les bornes de Voigt et Reuss construites à partir du motif $\mathcal{S}$ généralisent les bornes de Le Quang et He (2008) (uniquement dans le cas de cavités). En effet, ces bornes correspondent aux bornes de Voigt et Reuss d'un assemblage construit à partir du motif $\mathcal{S}$ lorsque le motif ne contient pas de domaine de matrice ($f_{\mathcal{S}} = 1$). La matrice est alors considérée en totalité comme de la matrice environnante. Les champs admissibles sur lesquels reposent les bornes de Le Quang et He (2008) sont supposés uniformes par phases

alors que ceux sur lesquels reposent les bornes de Voigt et Reuss sont non uniformes sur les motifs. Des champs non uniformes permettant d'approcher avec plus de précisions les champs locaux réels que des champs uniformes par phases, les bornes de Voigt et Reuss améliorent alors celles de Le Quang et He (2008) pour des matériaux contenant des nano-cavités sphériques.

Lorsque la distribution des centres des cavités est isotrope, l'estimation Mori et Tanaka généralisée fondée sur le motif $\mathcal{S}$ correspond à celle déjà établie par Duan et al. (2005b); Brisard et al. (2010a,b). L'approche par motif permet de la généraliser à des distributions spatiales des centres ellipsoïdales ou de prendre en compte des distributions de tailles de cavités.

Concernant le motif $\mathcal{E}$:

Le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ a été résolu dans le cas particulier où le milieu de référence est la matrice. Ainsi, seules des estimations de type Mori et Tanaka peuvent être établies pour les matériaux contenant des cavités sphéroïdales. Il apparait que, malgré cette simplification, le problème à résoudre ne dispose pas de solution analytique simple. Il est donc résolu de façon approchée en s'appuyant sur les travaux de Cherkaoui et al. (1995). Ces derniers ont étudié le comportement mécanique d'une inclusion ellipsoïdale entourée d'une interphase, elle-même entourée d'un milieu infini sur lequel une déformation homogène est appliquée à l'infini. En utilisant les techniques de Green (plus précisément l'équation de *Lippmann et Schwinger*), ainsi que les opérateurs d'interface Hill (1983), ils ont donné une solution approchée de ce problème en considérant deux hypothèses principales : i. l'interphase est très mince, ii. la déformation en tout point de l'inclusion est supposée égale à sa valeur moyenne. La particularité de la solution approchée de Cherkaoui et al. (1995) est qu'elle s'exprime en fonction de la solution du problème d'inclusion d'Eshelby (1957). La solution du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ (lorsque le milieu de référence est la matrice) est alors obtenue asymptotiquement à partir du résultat de Cherkaoui et al. (1995) en exploitant l'équivalence entre une interphase fine et une interface imparfaite cohérente. (cf. section 2.3 du chapitre 2).

Conscient que les hypothèses sur lesquelles reposent cette résolution peuvent être *fortes*, une étude ayant pour objectif d'évaluer leur pertinence est présentée au chapitre 6. Elle repose sur une comparaison de la solution analytique approchée à une solution numérique du problème auxiliaire.

Dans le cas où le rapport de forme de la cavité sphéroïdale du motif $\mathcal{E}$ est égal à 1 (la cavité est sphérique), la partie déviatorique du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$, identifié sur le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$, n'est pas égale à celle du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ identifié sur le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$. Cela est dû au fait que le problème auxiliaire associé au motif $\mathcal{E}$ est résolu de façon approchée alors que celui relatif au motif $\mathcal{S}$ l'est de façon exacte. Néanmoins, les parties déviatoriques sont égales lorsque les cavités sont très petites ($r \to 0$) ou lorsque les cavités sont grandes ($r \to \infty$) ou lorsque l'interface est souple ($||\mathbb{C}_s|| \to 0$) ou lorsque l'interface est rigide ($||\mathbb{C}_s|| \to \infty$). La partie hydrostatique du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ (lorsque $w = 1$) est égale à celle du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$. Ainsi, il apparait que, dans le cas où la cavité est sphérique et le chargement purement hydrostatique, le problème auxiliaire est résolu de manière exacte.

Estimations de Mori et Tanaka généralisées :

Finalement, des estimations de type Mori et Tanaka généralisées analytiques permettant de déterminer les propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales peuvent être établies. Du fait du cadre théorique général que fournit l'approche par motifs, ces estimations permettent de prendre en compte des distributions spatiales ellipsoïdales des centres des cavités, des distributions de tailles de cavités, voire d'autres types d'hétérogénéités. Ces estimations reposent sur les tenseurs $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ (équation (4.10)) et $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ (équation (4.42)) relatifs aux motifs $\mathcal{S}$ et $\mathcal{E}$. Il apparait que, lorsque les cavités sont grandes ou que les interfaces imparfaites cohérentes sont *souples*, les estimations tendent vers les estimations de Ponte Castañeda et Willis (1995) correspondantes pour des matériaux poreux sans effet de surface. Lorsque les cavités sont très petites ou lorsque les interfaces imparfaites cohérentes sont *rigides*, les estimations tendent vers les estimations de Ponte Castañeda et Willis (1995) correspondantes pour des matériaux où les cavités sont remplacées par des inclusions rigides.

La Table 4.1 présente une synthèse des applications présentées dans ce chapitre. Les modèles mis en œuvre sont précisés ainsi que les équations correspondantes. Les principales remarques associées à ces modèles sont également rappelées.

Matériaux à nano-cavités sphériques	
Monodispersées distribuées de façon isotrope (section 4.1)	**Modèles mis en œuvre :** $\mathbb{C}^{\text{LQH-}}$ (3.24), $\mathbb{C}^{\text{LQH+}}$ (3.21), $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{RG}}$ (4.47), $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{VG}}$ (4.46), $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{ACG}}$ (4.50) et $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}}$ (4.52) $\mathbb{C}^{\text{LQH-}} \leq \mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{RG}} \leq \mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{HS}}(\mathbb{C}_0) \leq \mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{VG}} \leq \mathbb{C}^{\text{LQH+}}$ avec $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}} = \mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{HS}}(\mathbb{C}_m)$ et $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{ACG}} = \mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{HS}}(\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{ACG}})$ $\mathbb{C}^{\text{LQH-}} = \mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{RG}}(f_{\mathcal{S}} = 1)$, $\mathbb{C}^{\text{LQH+}} = \mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{VG}}(f_{\mathcal{S}} = 1)$, $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{ACG}}(c_{\mathcal{S}} = 1) = \mathbb{C}_{\text{D}}^{\text{ACG}}$ (3.17) et $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}} = \mathbb{C}_{\text{D}}^{\text{MT}}$ (3.16) $\lim_{r\to 0}\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}} = \mathbb{C}^{\text{MT}}$ pour des inclusions rigides $\lim_{r\to\infty}\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}} = \mathbb{C}^{\text{MT}}$ pour des inclusions *poreuses*
Polydispersées distribuées de façon isotrope (section 4.3)	**Modèle mis en œuvre :** $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}}$ (4.59) module de compressibilité établi par Brisard et al. (2010a) (3.18) **Modèles applicables (non mis en œuvre) :** $\mathbb{C}^{\text{LQH-}}$, $\mathbb{C}^{\text{LQH+}}$, $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{RG}}$, $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{VG}}$ et $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{ACG}}$
Monodispersées distribuées de façon ellipsoïdale (section 4.2)	**Modèle mis en œuvre :** $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}}$ (4.52) **Modèles applicables (non mis en œuvre) :** $\mathbb{C}^{\text{LQH-}}$, $\mathbb{C}^{\text{LQH+}}$ $\lim_{r\to 0}\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}} = \mathbb{C}^{\text{PCW}}$ pour des inclusions rigides $\lim_{r\to\infty}\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}} = \mathbb{C}^{\text{PCW}}$ pour des inclusions *poreuses*
Matériaux à nano-cavités sphéroïdales orientées aléatoirement	
Monodispersées distribuées de façon isotrope (section 4.4)	**Modèle mis en œuvre :** $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}}$ (4.61) $\lim_{b\to 0}\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}} = \mathbb{C}^{\text{PCW}}$ pour des inclusions rigides $\lim_{b\to\infty}\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}} = \mathbb{C}^{\text{PCW}}$ pour des inclusions *poreuses*
Matériau à nano-cavités sphériques et sphéroïdales orientées aléatoirement	
distribuées de façon isotrope (section 4.5)	**Modèle mis en œuvre :** $\mathbb{C}_{\text{M}}^{\text{MTG}}$ (4.62)

Table 4.1 – *Synthèse des applications présentées dans ce chapitre et des principales remarques associées.*

Chapitre 5

Influence des pressions internes et des tensions de surface

Ce chapitre est dédié à la modélisation de l'effet des pressions exercées par d'éventuels gaz contenus dans les porosités sur le comportement macroscopique d'un matériau nanoporeux. L'effet est pris en compte en introduisant des tenseurs de Biot usuellement mis en œuvre dans le cadre de l'étude du comportement mécanique des matériaux poreux saturés. Leurs expressions sont ici étendues afin de tenir compte de la présence des interfaces imparfaites cohérentes. De plus, il a été montré au chapitre 3 que le comportement mécanique de ces interfaces peut être décomposé en une partie élastique linéaire et une précontrainte, supposée isotrope dans le plan tangent à l'interface, que l'on nomme aussi *tension de surface*. L'effet des tensions de surface sur le comportement mécanique macroscopique est également investigué dans ce chapitre. La modélisation de cet effet est similaire à celle mis en œuvre pour tenir compte des pressions internes. Tout d'abord, le cas d'un matériau contenant une unique population de nano-cavités sphériques est traité. Puis, une généralisation à un matériau contenant plusieurs populations de nano-cavités sphéroïdales est proposée.

Sommaire

1 Nano-cavités sphériques 104

1.1 Modélisation 104

1.2 Applications 109

2 Nano-cavités sphéroïdales 112

2.1 Pressions internes 113

2.2 Tensions de surface 116

3 Bilan du chapitre 121

1 Nano-cavités sphériques

1.1 Modélisation

Dans cette section, le cas d'un matériau constitué d'une matrice homogène, indicée m, dans laquelle sont insérées des nano-cavités sphériques est traité. Le domaine occupé par le VER est noté Ω et sa frontière $\partial\Omega$. Le domaine occupé par la matrice est noté ω_m et celui occupé par les cavités ω_v. Le tenseur de rigidité $\mathbb{C}_m$ de la matrice est isotrope. Des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées sur l'interface Γ entre les cavités et la matrice. La rigidité surfacique associée aux interfaces imparfaites cohérentes est notée $\mathbb{C}_s$ et la tension de surface homogène γ_s. Les cavités ont un rayon r identique et sont pressurisées à la pression homogène p. La porosité totale est notée f. Une déformation macroscopique $\mathbf{E}$ est appliquée sur Ω.

Le problème ainsi décrit, noté $\mathcal{P}$, se traduit par le système d'équations suivant :

$$\mathcal{P} : \begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = (1/2)(\mathrm{grad}\boldsymbol{u} + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}) \quad \text{dans} \quad \omega_m \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s \boldsymbol{i}_T + \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s \ \text{ dans } \ \Gamma \\ \boldsymbol{\sigma} = -p\boldsymbol{i} \ \text{ dans } \ \omega_v \\ \boldsymbol{u} = \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{x} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \end{cases} \tag{5.1}$$

où $\mathbb{C}_m$ et $\mathbb{C}_s$ sont respectivement exprimés aux équations (4.2) et (3.4).

De part la linéarité du problème $\mathcal{P}$, la loi de comportement macroscopique peut se mettre sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \tilde{\mathbb{C}} : \mathbf{E} - p\boldsymbol{B} + \gamma_s \boldsymbol{G} \tag{5.2}$$

La détermination du tenseur de rigidité effectif $\tilde{\mathbb{C}}$ a fait l'objet du chapitre 4. Il est obtenu en résolvant le problème de localisation $\mathcal{P}^\star$ qui dérive du problème $\mathcal{P}$ lorsque $p = 0$ et $\gamma_s = 0$. L'objectif est ici de déterminer le tenseur $\boldsymbol{B}$ (appelé *tenseur de Biot*) et le tenseur $\boldsymbol{G}$. La détermination de ces tenseurs s'inspire fortement de la démarche utilisée pour déterminer les tenseurs de Biot usuels (sans effet de surface). Le tenseur $\boldsymbol{B}$ est obtenu en résolvant le problème $\mathcal{P}'$ qui dérive du problème $\mathcal{P}$ lorsque $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ et $\gamma_s = 0$. Le tenseur $\boldsymbol{G}$ est obtenu en résolvant le problème $\mathcal{P}''$ qui dérive du problème $\mathcal{P}$ lorsque $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ et $p = 0$.

Ci-après, les champs associés à un exposant * font référence aux champs solutions du problème $\mathcal{P}^\star$, ceux associés à un exposant $'$ font référence aux champs solutions du problème de localisation $\mathcal{P}'$ et ceux associés à un exposant $''$ font référence aux champs solutions du problème de localisation $\mathcal{P}''$.

D'après l'équation (5.2), les contraintes macroscopiques $\boldsymbol{\Sigma}^\star$, $\boldsymbol{\Sigma}'$, $\boldsymbol{\Sigma}''$ des problèmes $\mathcal{P}^\star$, $\mathcal{P}'$ et $\mathcal{P}''$ s'expriment comme suit :

$$\boldsymbol{\Sigma}^\star = \tilde{\mathbb{C}} : \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\Sigma}' = -p\boldsymbol{B}, \quad \boldsymbol{\Sigma}'' = \gamma_s \boldsymbol{G} \tag{5.3}$$

La démarche mise en œuvre pour déterminer les tenseurs $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{G}$ s'appuie sur le lemme de Hill rappelé ci-après.

Lemme de Hill (d'après Le Quang et He (2008)) :

Soit un champ de déformations compatibles $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ et un champ de contraintes équilibrées $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$:

- le champ $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ dérive d'un champ de déplacement $\tilde{\boldsymbol{u}}$ (i.e. $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}(\tilde{\boldsymbol{u}}) = (1/2)(\mathrm{grad}\tilde{\boldsymbol{u}} + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\tilde{\boldsymbol{u}})$),
- le champ $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ vérifie les équations d'équilibre (volumique et surfacique).

Les champs $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ et $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ ne sont pas nécessairement reliés par une loi de comportement locale. Lorsque $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ satisfait des conditions de déformations homogènes sur $\partial\Omega$, alors :

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle_\Omega = \langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle_\Omega : \langle \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle_\Omega \tag{5.4}$$

où la moyenne sur Ω de l'énergie élastique locale associée aux champs admissibles $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ et $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ s'exprime de la façon suivante [1] :

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_\Omega \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \mathrm{d}V + \int_\Gamma \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_s : \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_s \mathrm{d}S\Big] \tag{5.5}$$

La moyenne de la déformation locale sur Ω est égale à :

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \mathrm{d}V = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\partial\Omega} \frac{1}{2}\big(\tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \boldsymbol{N} + \boldsymbol{N} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}\big)\mathrm{d}S \tag{5.6}$$

où $\boldsymbol{N}$ désigne la normale unitaire à $\partial\Omega$ dirigée vers l'extérieur de Ω.

La moyenne de la contrainte locale sur Ω s'exprime comme suit :

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\partial\Omega} \big(\tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{N}\big) \otimes \boldsymbol{x} \mathrm{d}S \;\; = \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_\Omega \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \mathrm{d}V + \int_\Gamma \big([\tilde{\boldsymbol{\sigma}}] \cdot \boldsymbol{n}\big) \otimes \boldsymbol{x} \mathrm{d}S\Big] \tag{5.7}$$

où $\boldsymbol{x}$ est le vecteur position.

Le champ de contraintes $\boldsymbol{\sigma}'$ est équilibré pour le problème $\mathcal{P}^\star$ et inversement le champ contrainte $\boldsymbol{\sigma}^\star$ est équilibré pour le problème $\mathcal{P}'$. Par conséquent, en appliquant deux fois le lemme de Hill, il vient que :

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_\Omega &= \langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_\Omega : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_\Omega = -p\boldsymbol{B} : \mathbf{E} \\
&= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V + \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}'_s : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \mathrm{d}S - \int_{\omega_v} p\boldsymbol{i} : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V\Big] \\
&= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\epsilon}' : \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V + \int_\Gamma \boldsymbol{\epsilon}'_s : \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \mathrm{d}S - \int_{\omega_v} p\boldsymbol{i} : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V\Big] \\
&= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\epsilon}' : \boldsymbol{\sigma}^\star \mathrm{d}V + \int_\Gamma \boldsymbol{\epsilon}'_s : \boldsymbol{\sigma}^\star_s \mathrm{d}S - \int_{\omega_v} p\boldsymbol{i} : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V\Big]
\end{aligned} \tag{5.8}$$

et

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\sigma}^\star : \boldsymbol{\epsilon}' \rangle_\Omega &= \langle \boldsymbol{\sigma}^\star \rangle_\Omega : \langle \boldsymbol{\epsilon}' \rangle_\Omega = 0 \quad \text{car} \quad \langle \boldsymbol{\epsilon}' \rangle_\Omega = \mathbf{0} \\
&= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\sigma}^\star : \boldsymbol{\epsilon}' \mathrm{d}V + \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}^\star_s : \boldsymbol{\epsilon}'_s \mathrm{d}S\Big]
\end{aligned} \tag{5.9}$$

D'après l'équation (5.8), il vient que :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_\Omega = -\frac{1}{|\Omega|}\int_{\omega_v} p\boldsymbol{i} : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V \tag{5.10}$$

1. En l'absence de forces volumiques dans Ω et de forces linéïques appliquées sur le contour $\partial\Gamma$ de Γ (ou lorsque Γ est fermée).

Le champ de déformation $\boldsymbol{\epsilon}^\star$ est un champ admissible pour le problème de localisation $\mathcal{P}^\star$ donc, d'après l'équation (2.7), il vient que $\boldsymbol{\epsilon}^\star = \mathbb{A} : \mathbf{E}$ où $\mathbb{A}$ est le tenseur de localisation associé au problème $\mathcal{P}^\star$. Cela conduit à :

$$p\boldsymbol{B} : \mathbf{E} = \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_v} p\boldsymbol{i} : \mathbb{A}\mathrm{d}V\Big] : \mathbf{E}, \quad \forall \boldsymbol{E}, \quad \forall p \tag{5.11}$$

Finalement, il vient que :

$$\boldsymbol{B} = f\boldsymbol{i} : \langle \mathbb{A} \rangle_{\omega_v} \tag{5.12}$$

Cette expression est vraie indépendamment de la forme des pores.

De la même façon, le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}''$ est équilibré pour le problème $\mathcal{P}^\star$ et inversement le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}^\star$ est équilibré pour le problème $\mathcal{P}''$. En appliquant deux fois le lemme de Hill, il vient que :

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\sigma}'' : \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_\Omega &= \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_\Omega : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_\Omega = \gamma_s \boldsymbol{G} : \mathbf{E} \\
&= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\sigma}'' : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V + \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}''_s : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \mathrm{d}S\Big] \\
&= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\epsilon}'' : \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V + \int_\Gamma \boldsymbol{\epsilon}''_s : \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \mathrm{d}S + \int_\Gamma \gamma_s \boldsymbol{i}_T : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \mathrm{d}S\Big] \\
&= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\epsilon}'' : \boldsymbol{\sigma}^\star \mathrm{d}V + \int_\Gamma \boldsymbol{\epsilon}''_s : \boldsymbol{\sigma}^\star_s \mathrm{d}S + \int_\Gamma \gamma_s \boldsymbol{i}_T : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \mathrm{d}S\Big]
\end{aligned} \tag{5.13}$$

et

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\sigma}^\star : \boldsymbol{\epsilon}'' \rangle_\Omega &= \langle \boldsymbol{\sigma}^\star \rangle_\Omega : \langle \boldsymbol{\epsilon}'' \rangle_\Omega = 0 \quad \text{car} \quad \langle \boldsymbol{\epsilon}'' \rangle_\Omega = \mathbf{0} \\
&= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\sigma}^\star : \boldsymbol{\epsilon}'' \mathrm{d}V + \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}^\star_s : \boldsymbol{\epsilon}''_s \mathrm{d}S\Big]
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Il vient alors, d'après l'équation (5.13) et en rappelant que $\boldsymbol{\epsilon}^\star_s$ est un tenseur tangent à Γ, que :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}'' : \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|}\int_\Gamma \gamma_s \boldsymbol{i}_T : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \mathrm{d}S = \frac{1}{|\Omega|}\gamma_s \boldsymbol{i} : \int_\Gamma \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \mathrm{d}S \quad \text{car} \quad \boldsymbol{i} : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s = \boldsymbol{i}_T : \boldsymbol{\epsilon}^\star_s \tag{5.15}$$

Sachant que :

$$\boldsymbol{\epsilon}^\star_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^\star = \mathbb{I}_T : \mathbb{A} : \mathbf{E} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{5.16}$$

il vient que :

$$\gamma_s \boldsymbol{G} : \mathbf{E} = \frac{1}{|\Omega|}\gamma_s \boldsymbol{i} : \int_\Gamma \mathbb{I}_T : \mathbb{A}\mathrm{d}S : \mathbf{E}, \quad \forall \boldsymbol{E}, \quad \forall \gamma_s \tag{5.17}$$

Cela conduit finalement à :

$$\boldsymbol{G} = \frac{|\Gamma|}{|\Omega|}\boldsymbol{i} : \langle \mathbb{I}_T : \mathbb{A} \rangle_\Gamma = f r_{s/v} \boldsymbol{i} : \langle \mathbb{I}_T : \mathbb{A} \rangle_\Gamma \tag{5.18}$$

où $r_{s/v}$ représente le ratio surface/volume d'une cavité. Dans le cas de cavités sphériques traité ici, $r_{s/v}$ est égal à $3/r$. L'expression précédente est également établie indépendamment

de la forme des interfaces imparfaites cohérentes.

La détermination des tenseurs $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{G}$ nécessite de connaitre le tenseur de localisation $\mathbb{A}$ sur les domaines ω_v et Γ. Le tenseur de localisation est identifié à partir de la solution du problème $\mathcal{P}^\star$. Ce problème peut être résolu de façon approchée à partir de différents modèles. Dans cette étude, l'estimation du tenseur de localisation retenue est celle issue des modèles Mori et Tanaka généralisés.

Le matériau est décomposé à l'aide d'un unique motif $\mathcal{S}$ et d'un domaine de matrice environnante. La porosité dans le motif $f_\mathcal{S}$ est ici fixée à 1. Cela conduit à $c_\mathcal{S} = f$. La déformation locale sur le motif $\mathcal{S}$ est notée $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$. Le tenseur $\mathbb{R}$ est introduit tel que :

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}) = \mathbb{R}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\epsilon}^0, \quad \forall \boldsymbol{u} \in D_\mathcal{S} \tag{5.19}$$

D'après l'équation (2.43), le champ effectif $\boldsymbol{\epsilon}^0$ s'exprime alors comme suit :

$$\boldsymbol{\epsilon}^0 = \left(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\right)^{-1} : \mathbf{E} \tag{5.20}$$

Il vient alors que :

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}) = \mathbb{R}(\boldsymbol{u}) : \left(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\right)^{-1} : \mathbf{E}, \quad \forall \boldsymbol{u} \in D_\mathcal{S} \tag{5.21}$$

où l'expression du tenseur $\mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m$ est donnée à l'équation (4.10). Le tenseur $\mathbb{P}_d^m$ est le tenseur de Hill relatif à la distribution des centres du motif $\mathcal{S}$.

Le tenseur $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u})$ ne correspond pas à la déformation locale en un point de la microstructure. Il fait référence à la moyenne du champ de déformations locales aux points homologues de $\boldsymbol{u}$ dans tous les membres du motif $\mathcal{S}$, c'est-à-dire les points $\boldsymbol{x}_\mathcal{S}^i + \boldsymbol{u}$ (où les points $\boldsymbol{x}_\mathcal{S}^i$ désignent les centres des membres du motif $\mathcal{S}$). Pour plus d'information sur le concept de points homologues et sur l'opération de moyenne sur les points homologues, il est possible de se référer aux travaux de Stolz et Zaoui (1991) et Bornert (2001).

De l'équation précédente, en remarquant que $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est indépendant de $\boldsymbol{u}$ (car la distribution des centres des motifs est ellipsoïdale et le milieu de référence est la matrice), il vient que :

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{\omega_v} = \langle \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle_{\omega_v^\mathcal{S}} = \langle \mathbb{R} \rangle_{\omega_v^\mathcal{S}} : \left(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\right)^{-1} : \mathbf{E} \tag{5.22}$$

et

$$\langle \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon} \rangle_\Gamma = \langle \mathbb{I}_T : \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \rangle_{\Gamma^\mathcal{S}} = \langle \mathbb{I}_T : \mathbb{R} \rangle_{\Gamma^\mathcal{S}} : \left(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\right)^{-1} : \mathbf{E} \tag{5.23}$$

où les domaines $\omega_v^\mathcal{S}$ et $\Gamma^\mathcal{S}$ font respectivement références aux domaines occupés par la cavité et l'interface imparfaite cohérente dans le motif $\mathcal{S}$.

Finalement, les moyennes $\langle \mathbb{A} \rangle_{\omega_v}$ et $\langle \mathbb{I}_T : \mathbb{A} \rangle_\Gamma$ s'expriment comme suit (car $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbb{A} : \mathbf{E}$) :

$$\langle \mathbb{A} \rangle_{\omega_v} = \langle \mathbb{R} \rangle_{\omega_v^\mathcal{S}} : \left(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\right)^{-1} \tag{5.24}$$

et

$$\langle \mathbb{I}_T : \mathbb{A} \rangle_\Gamma = \langle \mathbb{I}_T : \mathbb{R} \rangle_{\Gamma^\mathcal{S}} : \left(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\right)^{-1} \tag{5.25}$$

À partir de la solution du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ (cf. section 2 du chapitre 4) en prenant comme milieu infini la matrice, il est possible de montrer que :

$$\langle \mathbb{R} \rangle_{\omega_v^{\mathcal{S}}} = \frac{r(3k_m + 4\mu_m)}{4(k_s + r\mu_m)} \mathbb{J} + \frac{1}{\Psi}(6k_s + \mu_s + 5\mu_m r)\mathbb{K} \tag{5.26}$$

et

$$\langle \mathbb{I}_T : \mathbb{R} \rangle_{\Gamma^{\mathcal{S}}} = \frac{r(3k_m + 4\mu_m)}{6(k_s + r\mu_m)} \mathbb{J} + \frac{1}{3\Psi}(6k_s - \mu_s + 7\mu_m r)\mathbb{K} \tag{5.27}$$

où

$$\begin{aligned} \Psi = \frac{1}{\mu_m r(3k_m + 4\mu_m)} \quad & \Big[6k_s\Big(k_m(\mu_s + 2\mu_m r) + 2\mu_m(\mu_s + \mu_m r)\Big) \\ & + \mu_m r\Big(9k_m(\mu_s + \mu_m r) + 8\mu_m(2\mu_s + \mu_m r)\Big)\Big] \end{aligned} \tag{5.28}$$

D'après les équations (5.12) et (5.18), il vient finalement que :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{B} &= f\boldsymbol{i} : \langle \mathbb{R} \rangle_{\omega_v^{\mathcal{S}}} : \Big(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\Big)^{-1} \\ &= f\frac{r(3k_m + 4\mu_m)}{4(k_s + r\mu_m)}\boldsymbol{i} : \Big(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\Big)^{-1} \end{aligned} \tag{5.29}$$

et

$$\begin{aligned} \boldsymbol{G} &= \frac{3f}{r}\boldsymbol{i} : \langle \mathbb{I}_T : \mathbb{R} \rangle_{\Gamma_v^{\mathcal{S}}} : \Big(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\Big)^{-1} \\ &= \frac{f}{2}\frac{(3k_m + 4\mu_m)}{(k_s + r\mu_m)}\boldsymbol{i} : \Big(\mathbb{I} - f\mathbb{P}_d^m : \mathbb{T}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}^m\Big)^{-1} \\ &= \frac{2}{r}\boldsymbol{B} \end{aligned} \tag{5.30}$$

Lorsque la distribution des centres des motifs est isotrope, les tenseurs $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{G}$ sont isotropes et s'expriment comme suit :

$$\boldsymbol{B} = \frac{fr(3k_m + 4\mu_m)}{(3fk_m + 4\mu_m)r + 4(1-f)k_s}\boldsymbol{i} = b_{sphere}^{iso}\boldsymbol{i} \tag{5.31}$$

et

$$\boldsymbol{G} = \frac{2f(3k_m + 4\mu_m)}{(3fk_m + 4\mu_m)r + 4(1-f)k_s}\boldsymbol{i} = g_{sphere}^{iso}\boldsymbol{i} = \frac{2}{r}b_{sphere}^{iso}\boldsymbol{i} \tag{5.32}$$

L'expression précédente du tenseur $\boldsymbol{B}$ correspond dans ce cas à celle déjà établie par Pensée et al. (2009).

Lorsque les cavités sont grandes ($r \to \infty$) ou lorsque l'interface est souple ($k_s = 0$), il vient que :

$$\boldsymbol{B} = \frac{f(3k_m + 4\mu_m)}{3fk_m + 4\mu_m}\boldsymbol{i}, \quad \boldsymbol{G} = \boldsymbol{0} \tag{5.33}$$

Dans ce cas, il n'y a plus d'effet de la tension de surface sur la contrainte macroscopique et le tenseur de Biot tend vers le tenseur de Biot classique (sans effet de surface) correspondant.

Le tenseur de Biot sans effet de surface s'exprime de la façon suivante (Vincent, 2007; Vincent et al., 2009; Dormieux et al., 2006) :

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{i} : \left[\mathbb{I} - \mathbb{C}_m^{-1} : \tilde{\mathbb{C}}\right] \tag{5.34}$$

Lorsque le milieu est isotrope (matrice isotrope et distribution isotrope des cavités), il vient que :

$$\boldsymbol{B} = \left[1 - \frac{\tilde{k}}{k_m}\right]\boldsymbol{i} \tag{5.35}$$

Dans le cadre de l'estimation de Mori et Tanaka (sans effet de surface) pour un matériau poreux dont la distribution des phases est isotropes, $\tilde{k} \approx k^{\mathrm{MT}}$ (équation (2.28)).

En résumé, pour un matériau contenant une unique population de nano-cavités sphériques dont la distribution des centres est isotrope, la loi de comportement macroscopique est la suivante dans le cadre du modèle MTG (d'après l'équation (5.2)) :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \left[3k_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}}\mathbb{J} + 2\mu_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}}\mathbb{K}\right] : \mathbf{E} - \left(p - \frac{2\gamma_s}{r}\right)b_{sphere}^{iso}\boldsymbol{i} \tag{5.36}$$

où $k_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}}$, $\mu_{\mathrm{M}}^{\mathrm{MTG}}$ et b_{sphere}^{iso} sont respectivement donnés aux équations (3.13), (3.14) et (5.31).

D'après l'équation précédente, il est remarquable que, dans le cas particulier d'un matériau contenant une unique population de nano-cavités sphériques dont la distribution des centres est isotrope, prendre en compte l'effet de la tension de surface γ_s revient à soustraire le terme $2\gamma_s/r$ à la pression p dans les cavités. Cette remarque est généralisable aux matériaux contenant des nano-cavités sphériques de différentes tailles dont la distribution des centres est ellipsoïdale (d'après l'équation (5.30)).

1.2 Applications

Ci-après, une application numérique est proposée. Les paramètres matériaux retenus sont ceux présentés à la Table 3.1. Dans un premier temps, le cas d'une distribution isotrope des centres des cavités est traité. Les tenseurs $\boldsymbol{B}$ (équation (5.31)) et $\boldsymbol{G}$ (équation (5.32)) sont alors isotropes et caractérisés respectivement par les coefficients b_{sphere}^{iso} et g_{sphere}^{iso}. La porosité est fixée à 10 %. La Figure 5.1 présente les évolutions de b_{sphere}^{iso} et g_{sphere}^{iso} en fonction du rayon de cavités pour une porosité de 10 %. La Figure 5.2 présente les évolutions de b_{sphere}^{iso} et g_{sphere}^{iso} en fonction de la porosité pour un rayon de cavités de 1 nm.

Lorsque le rayon des cavités augmente à porosité fixe, l'effet de surface devient négligeable. Le coefficient b_{sphere}^{iso} avec effet de surface tend alors vers son homologue classique sans effet de surface et le coefficient g_{sphere}^{iso} tend vers 0. Le coefficient b_{sphere}^{iso} est une fonction croissante, par conséquent plus les cavités sont petites, plus l'effet de la pression p sur la contrainte macroscopique est faible. Inversement, le coefficient g_{sphere}^{iso} croit lorsque le rayon décroit. Ainsi plus les cavités sont petites, plus l'effet de la tension de surface sur la contrainte macroscopique est importante. Il est remarquable que la pression dans les cavités et la tension de surface ont des effets sur la contrainte macroscopique opposés. Alors que

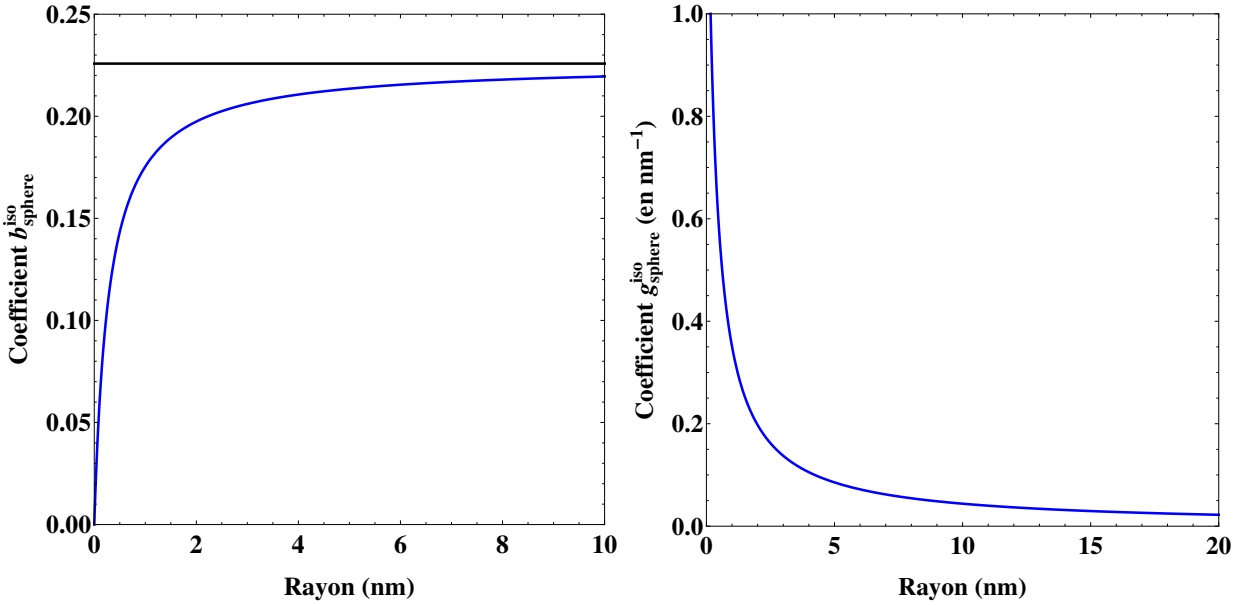


Figure 5.1 – *Évolutions de b^{iso}_{sphere} (à gauche) et g^{iso}_{sphere} (à droite) en fonction du rayon de cavités pour une porosité de 10 %. En noir : modèle sans effet de surface et en bleu : modèle avec effet de surface.*

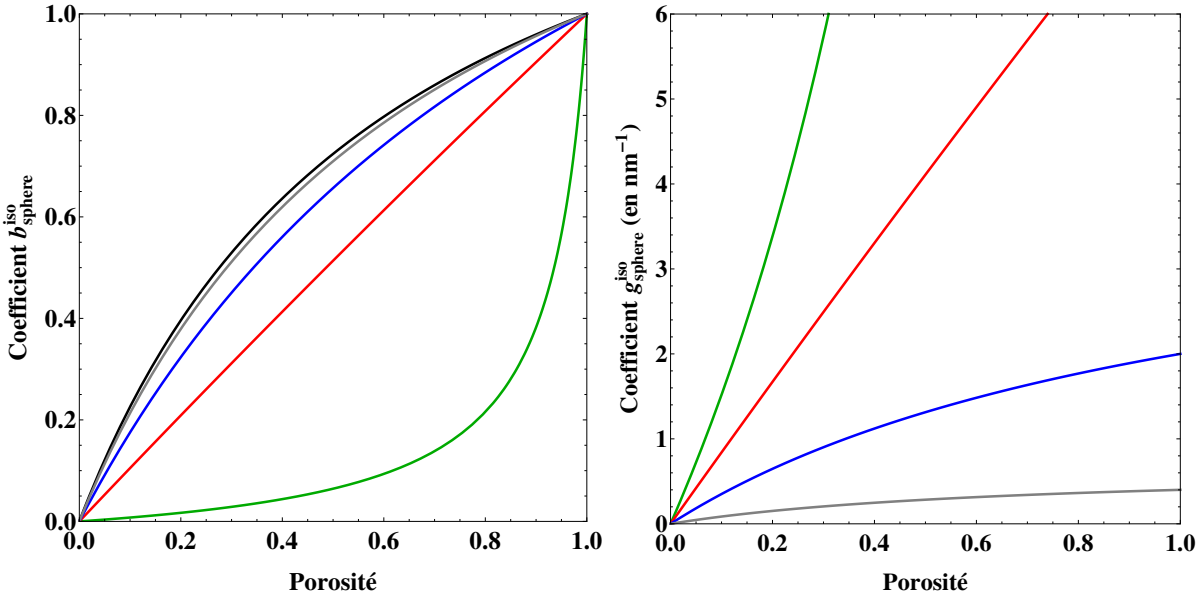


Figure 5.2 – *Évolutions de b^{iso}_{sphere} (à gauche) et g^{iso}_{sphere} (à droite) en fonction de la porosité. En noir : modèle sans effet de surface , en gris : $b = 5$ nm, en bleu : $b = 1$ nm, En rouge : $b = 0.25$ nm et en vert : $b = 0.01$ nm.*

la pression dans les cavités a tendance à placer le matériau dans un état de compression à l'échelle macroscopique, la tension de surface a tendance à le placer dans un état de traction. Cela est compatible avec le fait que la tension de surface tend à s'opposer à la pression dans les cavités. À rayon fixé, lorsque la porosité augmente, l'effet de surface devient plus important : les coefficients b^{iso}_{sphere} et g^{iso}_{sphere} augmentent. Lorsque la porosité est égale à 1, le

matériau est constitué uniquement de *vide pressurisé* à la pression p. Le coefficient b^{iso}_{sphere} est égal à 1, c'est-à-dire $\boldsymbol{\Sigma} = -p\boldsymbol{i}$. En revanche, g^{iso}_{sphere} n'est pas nul. En effet, les interface sont toujours présentes et l'effet de la tension de surface n'est alors pas nul. Cela ne correspond évidemment pas à une réalité physique. La porosité de ce matériau ne peut en pratique pas excéder $\pi/(3\sqrt{2})$ (cf. section 3.1 du chapitre 3).

L'influence d'une distribution spatiale sphéroïdale des centres des motifs est maintenant étudiée. Les tenseurs $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{G}$ sont déterminés respectivement à partir des équations (5.29) et (5.30) en prenant le tenseur $\mathbb{P}^m_d$ (relatif à la forme de la distribution spatiale des centres des cavités) approprié. La direction longitudinale (axe de symétrie pour la distribution spatiale) est portée par le vecteur $\boldsymbol{e}_x$. Le matériau est alors *statistiquement symétrique* par rotation autour de $\boldsymbol{e}_x$. Les tenseurs $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{G}$ sont alors de la forme suivante :

$$\boldsymbol{B} = b_l \boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_x + b_t\big(\boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_z\big), \quad \boldsymbol{G} = g_l \boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_x + g_t\big(\boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_z\big) \tag{5.37}$$

Le rayon des cavités est fixé à 1 nm et la porosité à 25 %. Les coefficients transverses et longitudinaux des tenseurs $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{G}$ sont normalisés par rapport aux même coefficients lorsque la distribution est isotrope ($w_d = 1$). D'après les équations (5.29) et (5.30), il vient que les coefficients longitudinaux, b_l et g_l, normalisés respectivement par $b_l(w = 1)$ et $g_l(w = 1)$ sont égaux. De même, les coefficients transverses, b_t et g_t, normalisés respectivement par $b_t(w = 1)$ et $g_t(w = 1)$ sont égaux. La Figure 5.3 présente les évolutions des coefficients longitudinaux et transverses normalisés des tenseurs $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{G}$ en fonction du rapport de forme w_d de la distribution spatiale des centres des cavités. Dans le cas de distributions prolates, les évolutions des coefficients sont tracées en fonction de $1 - 1/w_d$ afin de parcourir toute la gamme des valeurs possibles du rapport de forme.

Il est remarquable que plus la distribution est anisotrope, plus la différence entre les coefficients longitudinaux et les coefficients transverses est importante. En réalisant un développement limité à l'ordre deux en f des expressions des tenseurs $\boldsymbol{B}$ (équation (5.29)) et $\boldsymbol{G}$ (équation (5.30)), il est possible de montrer que, de la même façon que le tenseur de rigidité de l'estimation MTG, les tenseurs $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{G}$ ne dépendent de la forme de la distribution qu'à partir du deuxième ordre en f. Dans le cas présent, cela signifie que l'influence de la distribution est de l'ordre de 6 % environ. Cela correspond à ce qui peut être observé entre les cas extrêmes ($w_d = 0$ et $w_d \to \infty$) et le cas isotrope ($w_d = 1$) (cf. Figure 5.3).

Il a été précisé précédemment (cf. section 4.2 du chapitre 4) que lorsque w_d tend vers 0, les cavités s'espacent les unes des autres dans le plan transverse $(\boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z)$ et tendent à s'aligner dans la direction axiale $(\boldsymbol{e}_x)$. Inversement, lorsque w_d tend vers ∞, les cavités s'espacent les unes des autres dans la direction axiale et tendent à s'aligner dans le plan transverse. Pour l'application traitée ici, il apparait que les coefficients longitudinaux sont des fonctions croissantes de w_d et inversement, les coefficients transverses sont des fonctions décroissantes de w_d. Ainsi, les effets de la pression et de la tension de surface sur la contrainte macroscopique augmentent dans le plan transverse et diminuent dans la direction longitudinale lorsque w_d diminue. Inversement, leurs effets augmentent dans la direction longitudinale et diminuent dans le plan transverse lorsque w_d augmente.

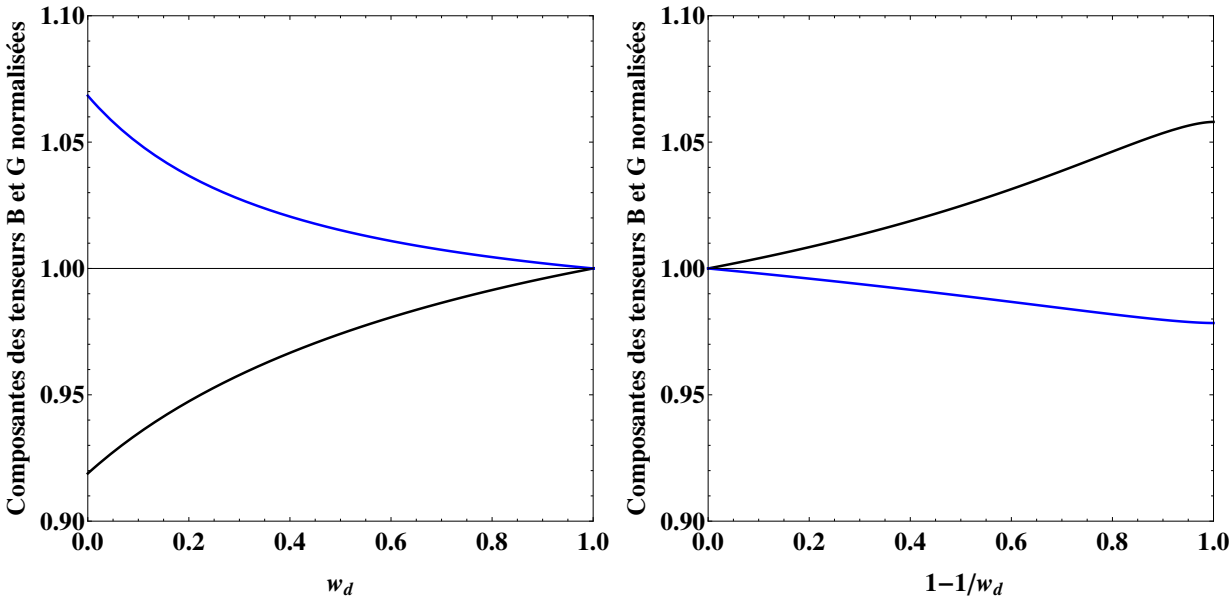


Figure 5.3 – *Évolutions des coefficients normalisés des tenseurs* $\boldsymbol{B}$ *et* $\boldsymbol{G}$ *en fonction du rapport de forme* w_d *de la distribution spatiale des centres des cavités : oblate (à gauche) et prolate (à droite). Le rayon des cavités est fixé à* 1 *nm et la porosité à* 25 %*. En noir : coefficients longitudinaux et en bleu : coefficients transverses.*

2 Nano-cavités sphéroïdales

Dans cette section, une extension du modèle précédent aux cas de matériaux contenant plusieurs populations de cavités sphéroïdales est proposée. Le matériau considéré est constitué de n familles de cavités de formes sphéroïdales dispersées dans une matrice homogène indicée m, de rigidité $\mathbb{C}_m$ et qui occupe le domaine ω_m. Le VER occupe le domaine Ω de contour extérieur $\partial\Omega$. Les familles de cavités sont indicées i ($i \in [1, ..., n]$). Chaque famille regroupe des cavités de même taille, même forme, pressurisées à la même pression homogène p_i et soumises à la même tension de surface $\gamma_s^{(i)}$. Leurs orientations peuvent néanmoins être différentes. Le domaine occupé par les cavités de la famille i est noté $w_v^{(i)}$. L'interface entre les cavités de la famille i et la matrice est notée $\Gamma^{(i)}$ ($i \in [1, ..., n]$). La normale unitaire à $\Gamma^{(i)}$ dirigée vers la matrice est notée $\boldsymbol{n}$. Des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées en $\Gamma^{(i)}$ ($\forall i \in [1, ..., i]$). Le comportement des interfaces imparfaites cohérentes associées aux cavités de la famille i est identique quelle que soit la cavité et est caractérisé par la loi de comportement suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s^{(i)} \boldsymbol{i}_T + \mathbb{C}_s^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}_s \tag{5.38}$$

où

$$\mathbb{C}_s^{(i)} = 2(k_s^{(i)} \mathbb{J}_T + \mu_s^{(i)} \mathbb{K}_T) \tag{5.39}$$

Les scalaires $k_s^{(i)}$ et $\mu_s^{(i)}$ sont les coefficients d'élasticité surfacique associés à $\Gamma^{(i)}$. La fraction volumique de matrice est noté c_m et la porosité associée aux cavités de la famille i est notée f_i. Le matériau est soumis à une déformation macroscopique $\mathbf{E}$. Le problème ainsi

décrit, noté $\mathcal{P}$, se traduit par le système d'équations suivant :

$$\mathcal{P} : \begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = (1/2)(\mathrm{grad}\boldsymbol{u} +^{\mathrm{T}} \mathrm{grad}\boldsymbol{u}) \quad \text{dans} \quad \omega_m \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon} \ \text{ sur } \ \Gamma^{(i)}, \ \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s^{(i)} \boldsymbol{i}_T + \mathbb{C}_s^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}_s \ \text{ sur } \ \Gamma^{(i)}, \ \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma} = -p_i \boldsymbol{i} \ \text{ dans } \ \omega_v^{(i)} \ \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{u} = \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{x} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \end{cases} \tag{5.40}$$

De part la linéarité du problème $\mathcal{P}$, la loi de comportement macroscopique peut se mettre sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \tilde{\mathbb{C}} : \mathbf{E} - \sum_{i=1}^{n} p_i \boldsymbol{B}_i + \sum_{i=1}^{n} \gamma_s^{(i)} \boldsymbol{G}_i \tag{5.41}$$

Le tenseur de rigidité effectif $\tilde{\mathbb{C}}$ est déterminé en résolvant le problème de localisation $\mathcal{P}^\star$ qui dérive du problème $\mathcal{P}$ lorsque tous les chargements sont nuls exceptée la déformation macroscopique $\boldsymbol{E}$. La détermination des tenseurs $\boldsymbol{B}_i$ et $\boldsymbol{G}_i$ fait l'objet des deux sections suivantes.

2.1 Pressions internes

2.1.1 Modélisation

Tout comme à la section 1, la détermination des tenseurs $\boldsymbol{B}_i$ passe par la résolution du problème $\mathcal{P}'$ qui dérive du problème $\mathcal{P}$ lorsque tous les chargements sont nuls exceptés les pressions p_i. Ce problème est décrit par le système d'équations suivant :

$$\mathcal{P}' : \begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\sigma}' = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}', \quad \boldsymbol{\epsilon}' = (1/2)(\mathrm{grad}\boldsymbol{u}' +^{\mathrm{T}} \mathrm{grad}\boldsymbol{u}') \quad \text{dans} \quad \omega_m \\ [\boldsymbol{\sigma}'] \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}'_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s \boldsymbol{\sigma}'_s = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}'_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}' \ \text{ sur } \ \Gamma^{(i)}, \ \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}'_s = \mathbb{C}_s^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}'_s \ \text{ sur } \ \Gamma^{(i)}, \ \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}' = -p_i \boldsymbol{i} \ \text{ dans } \ \omega_v^{(i)} \\ \boldsymbol{u}' = \mathbf{0} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \end{cases} \tag{5.42}$$

D'après l'équation (5.41), les contraintes macroscopiques $\boldsymbol{\Sigma}^\star$ et $\boldsymbol{\Sigma}'$ des problèmes $\mathcal{P}^\star$ et $\mathcal{P}'$ s'expriment de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma}^\star = \tilde{\mathbb{C}} : \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\Sigma}' = -\sum_{i=1}^{n} p_i \boldsymbol{B}_i \tag{5.43}$$

Le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}'$ est équilibré pour le problème $\mathcal{P}^\star$ et le champ contrainte $\boldsymbol{\sigma}^\star$ est équilibré pour le problème $\mathcal{P}'$. Par conséquent, en appliquant deux fois le lemme de Hill, il vient que :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_\Omega &= \langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_\Omega : \langle \boldsymbol{\epsilon}^\star \rangle_\Omega = -\Big[\sum_{i=1}^{n} p_i \boldsymbol{B}_i \Big] : \mathbf{E} \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\epsilon}' : \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V + \sum_{i=1}^{n} \int_{\Gamma^{(i)}} \boldsymbol{\epsilon}'_s : \mathbb{C}_s^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}_s^\star \mathrm{d}S - \sum_{i=1}^{n} \int_{\omega_v^{(i)}} p_i \boldsymbol{i} : \boldsymbol{\epsilon}^\star \mathrm{d}V \Big] \end{aligned} \tag{5.44}$$

et

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{\sigma}^\star : \boldsymbol{\epsilon}' \rangle_\Omega &= \langle \boldsymbol{\sigma}^\star \rangle_\Omega : \langle \boldsymbol{\epsilon}' \rangle_\Omega = 0 \quad \text{car} \quad \langle \boldsymbol{\epsilon}' \rangle_\Omega = \mathbf{0} \\ &= \frac{1}{|\Omega|}\Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\epsilon}^\star : \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}' \mathrm{d}V + \sum_{i=1}^{n} \int_{\Gamma^{(i)}} \boldsymbol{\epsilon}_s^\star : \mathbb{C}_s^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}_s' \mathrm{d}S \Big]\end{aligned} \tag{5.45}$$

En rappelant que $\boldsymbol{\epsilon}^\star = \mathbb{A} : \mathbf{E}$, il est possible de montrer que :

$$\Big[\sum_{i=1}^{n} p_i \boldsymbol{B}_i \Big] : \mathbf{E} = \frac{1}{|\Omega|}\Big[\sum_{i=1}^{n} \int_{\omega_v^{(i)}} p_i \boldsymbol{i} : \mathbb{A} \mathrm{d}V \Big] : \mathbf{E}, \quad \forall \boldsymbol{E}, \quad \forall p_i, \quad \forall i \in [1,..,n] \tag{5.46}$$

Finalement, il vient que :

$$\boldsymbol{B}_i = f_i \boldsymbol{i} : \langle \mathbb{A} \rangle_{\omega_v^{(i)}}, \quad \forall i \in [1,..,n] \tag{5.47}$$

Il faut à présent déterminer la moyennes $\langle \mathbb{A} \rangle_{\omega_v^{(i)}}$ du tenseur de localisation à partir de la solution du problème $\mathcal{P}^\star$. Comme précédemment, la solution du problème de localisation est approchée à partir d'une estimation de type Mori et Tanaka généralisée.

Une famille de cavités regroupe les cavités de même taille, même forme et dont les orientations sont éventuellement différentes. Les interfaces imparfaites cohérentes associées aux cavités d'une même famille ont le même comportement mécanique. Par conséquent, à chaque famille i de cavités est associée une distribution de motifs, notés $\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})$ (cf. section 1 du chapitre 4) où le vecteur $\boldsymbol{t}$ décrit l'orientation de l'axe de révolution du motif (qui correspond à l'orientation de l'axe de révolution des cavités sphéroïdales considérées). Les motifs $\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})$ ($\forall \boldsymbol{t}$) sont tous identiques à une rotation près. Les porosités $f_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}$ des motifs $\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})$ sont fixées à 1. Il vient alors que le champ effectif $\boldsymbol{\epsilon}^0$ associé à cette décomposition en motifs, lorsque l'assemblage est soumis à une déformation macroscopique $\mathbf{E}$, s'exprime de la façon suivante (d'après l'équation (2.43)) :

$$\boldsymbol{\epsilon}^0 = \Big(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} f_i \Big\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \Big\rangle_{\circlearrowleft} \Big)^{-1} : \mathbf{E} \tag{5.48}$$

Les tenseurs $\mathbb{R}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}$ ($\forall i \in [1,..,n]$) sont introduits tels que :

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}, i, \boldsymbol{t}) = \mathbb{R}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\epsilon}^0, \quad \forall \boldsymbol{u} \in D_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}, \quad \forall \boldsymbol{t}, \quad \forall i \in [1,..,n] \tag{5.49}$$

où $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}, i, \boldsymbol{t})$ désigne la déformation locale sur le motif $\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})$. D'après l'équation (4.37), il vient que :

$$\langle \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}, i, \boldsymbol{t}) \rangle_{\omega_v^{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} = \big\langle \mathbb{R}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \big\rangle_{\omega_v^{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} : \boldsymbol{\epsilon}^0 = \mathbb{Q}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} : \boldsymbol{\epsilon}^0, \quad \forall \boldsymbol{t}, \quad \forall i \in [1,..,n] \tag{5.50}$$

où l'expression des tenseurs $\mathbb{Q}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}$ est donnée à l'équation (4.38). Le domaine $\omega_v^{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}$ fait référence au domaine occupé par la cavité sur le motif $\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})$ (cf. section 1 du chapitre 4). Cela conduit à :

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{\omega_v^{(i)}} = \big\langle \mathbb{Q}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \big\rangle_{\circlearrowleft} : \Big(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} f_i \Big\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \Big\rangle_{\circlearrowleft} \Big)^{-1} : \mathbf{E} \tag{5.51}$$

et donc à :

$$\langle \mathbb{A} \rangle_{\omega_v^{(i)}} = \left\langle \mathbb{Q}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\circlearrowleft} : \left(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} f_i \left\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\circlearrowleft} \right)^{-1} \tag{5.52}$$

Finalement, d'après l'équation (5.47), le tenseur de Biot $\boldsymbol{B}_i$ relatif à la famille de cavités i s'exprime de la façon suivante :

$$\boldsymbol{B}_i = f_i \boldsymbol{i} : \left\langle \mathbb{Q}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\circlearrowleft} : \left(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} f_i \left\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\circlearrowleft} \right)^{-1} \tag{5.53}$$

Dans le cas particulier où le matériau ne contient qu'une population de cavités sphériques ($w = 1$, $b = r$), le tenseur $\boldsymbol{B}$ est de la forme suivante :

$$\boldsymbol{B} = f \frac{r(3k_m + 4\mu_m)}{4(k_s + \mu_m r)} \boldsymbol{i} : \left(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : f \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}} \right)^{-1} \tag{5.54}$$

car

$$\mathbb{Q}_{\mathcal{E}}(w = 1) = \frac{r(3k_m + 4\mu_m)}{4(k_s + \mu_m r)} \mathbb{J} + \frac{5}{\Theta} \mathbb{K} \tag{5.55}$$

où

$$\Theta = \frac{k_m(6k_s + 36\mu_s + 45\mu_m r) + 4\mu_m(3k_s + 18\mu_s + 10\mu_m r)}{5\mu_m r(3k_m + 4\mu_m)} \tag{5.56}$$

L'expression du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ dans le cas particulier où $w = 1$ est donnée à équation (4.43).

L'expression (5.54) du tenseur $\boldsymbol{B}$ pour un matériau contenant une unique population de cavités sphériques ne correspond pas à l'expression (5.29) établie à la section 1 car il a été montré, à la section 3 du chapitre 4, que $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} \neq \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}(w = 1)$. En effet, bien que les parties hydrostatiques de ces tenseurs soient égales, les parties déviatoriques diffèrent l'une de l'autre. Néanmoins, si la distribution des centres des cavités sphériques est isotrope, alors l'expression (5.54) du tenseur $\boldsymbol{B}$ conduit bien à l'expression (5.31) établie précédemment.

Dès lors qu'une famille i est constituée de cavités sphériques, il est plus judicieux de faire appel au tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ (équation (4.10)) plutôt qu'au tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}(w = 1)$, celui-ci étant issue d'une solution approchée contrairement à $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$.

2.1.2 Application

Ci-après le cas d'un matériau constitué d'une seule population de cavités sphéroïdales distribuées de façon isotrope est considéré. Le matériau est macroscopiquement isotrope. Par conséquent, le tenseur de Biot peut se mettre sous la forme $b^{iso}_{spheroïde}\boldsymbol{i}$. Il est rappelé que les longueurs des demi-axes des cavités sphéroïdales sont notées a et b où a est la longueur du demi-axe porté par l'axe de révolution. Le rapport de forme w est égal a/b. Les propriétés matériaux sont présentées à la Table 3.1. La figure 5.4 présente l'évolution de $b^{iso}_{spheroïde}$ en fonction du rapport de forme w des cavités pour différentes valeurs de b. La porosité est fixée à 10%. L'évolution du tenseur de Biot classique (sans effet de surface) est également représentée (d'après l'équation (5.35) où $\tilde{k}$ est donnée par l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995)).

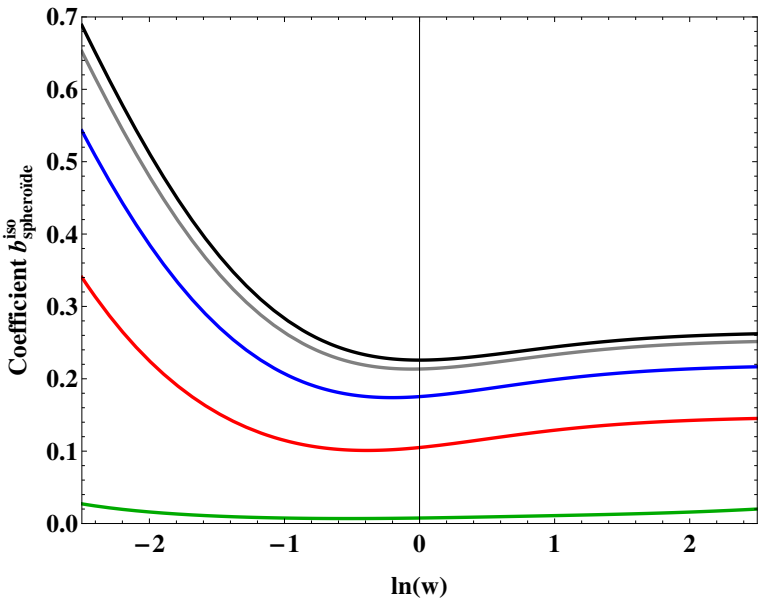


Figure 5.4 – *Évolution de $b^{iso}_{spheroïde}$ en fonction du rapport de forme w des cavités pour différentes valeurs de b. La porosité est fixée à 10%. En noir : modèle sans effet de surface, en gris : $b = 5$ nm, en bleu : $b = 1$ nm, En rouge : $b = 0.25$ nm et en vert : $b = 0.01$ nm.*

D'après la Figure 5.4, il apparait que lorsque la taille des cavités augmente à porosité fixe, le coefficient $b^{iso}_{spheroïde}$ tend vers celui issu du modèle classique sans effet de surface. L'effet de surface à l'échelle nanométrique devient alors négligeable. Lorsque les cavités sont très petites, le coefficient $b^{iso}_{spheroïde}$ tend vers 0. L'effet rigidifiant des interfaces tend alors à rendre négligeable l'effet de la pression dans les cavités sur la contrainte macroscopique. De plus, il est remarquable que le coefficient $b^{iso}_{spheroïde}$ dépend fortement du rapport de forme des cavités, notamment lorsque les cavités sont aplaties (à porosité et b fixés).

2.2 Tensions de surface

2.2.1 Modélisation

La détermination des tenseurs $\boldsymbol{G}_i$ passe par la résolution du problème $\mathcal{P}''$ qui dérive du problème $\mathcal{P}$ lorsque tous les chargements sont nuls exceptés les tensions de surface homogènes γ_i. Ce problème est décrit par le système d'équations suivant :

$$\mathcal{P}'' : \begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma}'' = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{\sigma}'' = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}'', \quad \boldsymbol{\epsilon}'' = (1/2)(\mathrm{grad}\boldsymbol{u}'' + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}'') \quad \text{dans} \quad \omega_m \\ [\boldsymbol{\sigma}''] \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}''_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}''_s = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}''_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}'' \quad \text{sur} \quad \Gamma^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}''_s = \gamma_s^{(i)}\boldsymbol{i}_T + \mathbb{C}_s^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}''_s \ \text{ sur } \ \Gamma^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}'' = \boldsymbol{0} \ \text{ dans } \ \omega_v^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{u}'' = \boldsymbol{0} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \end{cases} \tag{5.57}$$

D'après l'équation (5.41), la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}''$ du problème $\mathcal{P}''$ s'exprime de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma}'' = \sum_{i=1}^{n} \gamma_s^{(i)} \boldsymbol{G}_i \tag{5.58}$$

Il est possible de montrer que, comme à la section 1, la détermination des tenseurs $\boldsymbol{G}_i$ nécessite de pouvoir déterminer les moyennes de la déformation surfacique $\boldsymbol{\epsilon}_s^\star$ sur les domaines $\Gamma^{(i)}$ (cf. équation (5.18)). Dans le cas du motif $\mathcal{S}$, le problème auxiliaire à été résolu directement de manière exacte. Ces moyennes sont donc accessibles. En revanche, le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ est résolu de manière approchée en s'appuyant sur les travaux de Cherkaoui et al. (1995) fondés sur une approche par interphase. Par conséquent, de la même façon qu'à la section 3 du chapitre 4, la solution du problème $\mathcal{P}''$ est obtenue par l'intermédiaire d'un second problème, $\mathcal{P}^\diamond$, identique où les interfaces imparfaites cohérentes sont remplacées par des interphases. La solution du problème $\mathcal{A}$ est alors obtenue asymptotiquement en exploitant l'équivalence entre les modèles d'interface imparfaite cohérente et d'interphase fine (cf. chapitre 3, section 2.1, équation (3.11)). Le problème $\mathcal{P}^\diamond$ est décrit par le système d'équation suivant :

$$\mathcal{P}^\diamond : \begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma}^\diamond = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^\diamond = (1/2)(\mathrm{grad}\boldsymbol{u}^\diamond + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}^\diamond) \ \text{ dans } \ \omega_m \ \text{ et } \ \omega_{ph}^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}^\diamond = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}^\diamond \quad \text{dans} \quad \omega_m \\ \boldsymbol{\sigma}^\diamond = \gamma_{ph}^{(i)} \boldsymbol{i} + \mathbb{C}_{ph}^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}^\diamond \quad \text{dans} \quad \omega_{ph}^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}^\diamond = \mathbf{0} \ \text{ dans } \ \omega_v^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{u}^\diamond = \mathbf{0} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \end{cases} \tag{5.59}$$

Il est également nécessaire d'introduire le problème $\mathcal{P}^\triangledown$ identique au problème de localisation $\mathcal{P}^\star$ mais où les interfaces imparfaites cohérentes sont remplacée par des interphases. Ce problème est décrit par le système d'équation suivant :

$$\mathcal{P}^\triangledown : \begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma}^\triangledown = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^\triangledown = (1/2)(\mathrm{grad}\boldsymbol{u}^\triangledown + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}^\triangledown) \ \text{ dans } \ \omega_m \ \text{ et } \ \omega_{ph}^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}^\triangledown = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}^\triangledown \quad \text{dans} \quad \omega_m \\ \boldsymbol{\sigma}^\triangledown = \mathbb{C}_{ph}^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}^\triangledown \quad \text{dans} \quad \omega_{ph}^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{\sigma}^\triangledown = \mathbf{0} \ \text{ dans } \ \omega_v^{(i)} \ \forall i \in [1, ..., n] \\ \boldsymbol{u}^\triangledown = \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{x} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \end{cases} \tag{5.60}$$

Les contraintes macroscopiques $\boldsymbol{\Sigma}^\triangledown$ et $\boldsymbol{\Sigma}^\diamond$ des problèmes $\mathcal{P}^\triangledown$ et $\mathcal{P}^\diamond$ s'expriment de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma}^\triangledown = \tilde{\mathbb{C}} : \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\Sigma}^\diamond = \sum_{i=1}^{n} \gamma_{ph}^{(i)} \boldsymbol{G}_i^{ph} \tag{5.61}$$

Étant donné que les tensions de surface $\gamma_{ph}^{(i)}$ varient en $1/h$, les tenseurs $\boldsymbol{G}_i$ ne peuvent pas être définis comme étant les limites des tenseurs $\boldsymbol{G}_i^{ph}$ lorsque l'épaisseur h des interphases tend vers 0, contrairement à ce qui était fait implicitement pour la détermination des tenseurs $\boldsymbol{B}_i$ (cf. section 2.1) où les pressions p_i sont indépendantes de h.

Le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}^\diamond$ est équilibré pour le problème $\mathcal{P}^\triangledown$ et le champ contrainte $\boldsymbol{\sigma}^\triangledown$ est équilibré pour le problème $\mathcal{P}^\diamond$. Par conséquent, en appliquant deux fois le lemme de Hill,

il vient que :

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{\sigma}^{\diamond} : \boldsymbol{\epsilon}^{\triangledown} \rangle_{\Omega} &= \langle \boldsymbol{\sigma}^{\diamond} \rangle_{\Omega} : \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\triangledown} \rangle_{\Omega} = \Big[\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ph}^{(i)} \boldsymbol{G}_i^{ph} \Big] : \mathbf{E} \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\epsilon}^{\diamond} : \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}^{\triangledown} \mathrm{d}V + \sum_{i=1}^{n} \int_{\omega_{ph}^{(i)}} \boldsymbol{\epsilon}^{\diamond} : \mathbb{C}_{ph}^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}^{\triangledown} \mathrm{d}S + \sum_{i=1}^{n} \int_{\omega_{ph}^{(i)}} \gamma_{ph}^{(i)} \boldsymbol{i} : \boldsymbol{\epsilon}^{\triangledown} \mathrm{d}V \Big]\end{aligned} \tag{5.62}$$

et

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{\sigma}^{\triangledown} : \boldsymbol{\epsilon}^{\diamond} \rangle_{\Omega} &= \langle \boldsymbol{\sigma}^{\triangledown} \rangle_{\Omega} : \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\diamond} \rangle_{\Omega} = 0 \quad \text{car} \quad \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\diamond} \rangle_{\Omega} = \mathbf{0} \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \Big[\int_{\omega_m} \boldsymbol{\epsilon}^{\triangledown} : \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}^{\diamond} \mathrm{d}V + \sum_{i=1}^{n} \int_{\omega_{ph}^{(i)}} \boldsymbol{\epsilon}^{\triangledown} : \mathbb{C}_{ph}^{(i)} : \boldsymbol{\epsilon}^{\diamond} \mathrm{d}S \Big]\end{aligned} \tag{5.63}$$

Sachant que $\boldsymbol{\epsilon}^{\triangledown} = \mathbb{A}^{ph} : \mathbf{E}$, où $\mathbb{A}^{ph}$ est le tenseur de localisation relatif au problème $\mathcal{P}^{\triangledown}$, il est possible de montrer que à partir des deux équations précédentes :

$$\Big[\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ph}^{(i)} \boldsymbol{G}_i^{ph} \Big] : \mathbf{E} = \frac{1}{|\Omega|} \Big[\sum_{i=1}^{n} \int_{\omega_{ph}^{(i)}} \gamma_{ph}^{(i)} \boldsymbol{i} : \mathbb{A}^{ph} \mathrm{d}V \Big] : \mathbf{E}, \quad \forall \boldsymbol{E}, \quad \forall \gamma_{ph}^{(i)}, \quad \forall i \in [1, .., n] \tag{5.64}$$

Les tenseurs $\boldsymbol{G}_i^{ph}$ s'expriment alors comme suit :

$$\boldsymbol{G}_i^{ph} = \frac{|\omega_{ph}^{(i)}|}{|\Omega|} \boldsymbol{i} : \big\langle \mathbb{A}^{ph} \big\rangle_{\omega_{ph}^{(i)}} \tag{5.65}$$

Le matériau est décomposé en motifs comme à la section précédente. Les interfaces dans les motifs $\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})$ sont néanmoins remplacées par des interphases d'épaisseur h. Ces motifs sont notés $\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})$. Ils ne contiennent pas de domaine de matrice. Comme précédement, il est possible de montrer que le champ effectif $\boldsymbol{\epsilon}_{ph}^{0}$ associé à cette décomposition en motifs, lorsque l'assemblage est soumis à une déformation macroscopique $\mathbf{E}$, s'exprime de la façon suivante (d'après l'équation (2.43)) :

$$\boldsymbol{\epsilon}_{ph}^{0} = \Big(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} c_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}} \Big\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \Big\rangle_{\circlearrowleft} \Big)^{-1} : \mathbf{E} \tag{5.66}$$

où $c_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}}$ est la fraction volumique de l'ensemble des motifs $\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})$.

Par construction, la porosité d'un motif $\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})$ est égale à :

$$f_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} = \frac{w_i b_i^3}{(w_i b_i + h)(b_i + h)^2} \tag{5.67}$$

Les tenseurs $\mathbb{R}_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}$ sont introduits tels que :

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}, i, \boldsymbol{t}) = \mathbb{R}_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}(\boldsymbol{u}) : \boldsymbol{\epsilon}_{ph}^{0}, \quad \forall \boldsymbol{u} \in D_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}, \quad \forall \boldsymbol{t}, \quad \forall i \in [1, .., n] \tag{5.68}$$

où $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}, i, \boldsymbol{t})$ désigne la déformation locale sur les motifs $\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})$. Par conséquent, il vient que :

$$\langle \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}, i, \boldsymbol{t}) \rangle_{\omega_{ph}^{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} = \Big\langle \mathbb{R}_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}} \Big\rangle_{\omega_{ph}^{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} : \boldsymbol{\epsilon}_{ph}^{0}, \quad \forall \boldsymbol{t}, \quad \forall i \in [1, .., n] \tag{5.69}$$

où $\omega_{ph}^{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}$ désigne le domaine occupé par l'interphase dans le motif $\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})$. Cela conduit à :

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{\omega_{ph}^{(i)}} = \left\langle \left\langle \mathbb{R}_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\omega_{ph}^{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} \right\rangle_{\circlearrowleft} : \left(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} c_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}} \left\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\circlearrowleft} \right)^{-1} : \mathbf{E} \tag{5.70}$$

et donc finalement à (d'après l'équation (5.65)) :

$$\boldsymbol{G}_i^{ph} = \frac{|\omega_{ph}^{(i)}|}{|\Omega|} \boldsymbol{i} : \left\langle \left\langle \mathbb{R}_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\omega_{ph}^{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} \right\rangle_{\circlearrowleft} : \left(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} c_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}} \left\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\circlearrowleft} \right)^{-1} \tag{5.71}$$

La contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}''$ est ensuite obtenue à partir de la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}^{\diamond}$ du problème $\mathcal{P}^{\diamond}$ de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma}'' = \sum_{i=1}^{n} \gamma_s^{(i)} \boldsymbol{G}_i = \lim_{h \to 0} \boldsymbol{\Sigma}^{\diamond} = \lim_{h \to 0} \sum_{i=1}^{n} \gamma_{ph}^{(i)} \boldsymbol{G}_i^{ph} \tag{5.72}$$

En sachant que $\gamma_{ph}^{(i)} = (2\mu_s^{(i)} \gamma_s^{(i)})/(h(3\mu_s^{(i)} - k_s^{(i)}))$ (d'après l'équation (3.11)), il vient que :

$$\lim_{h \to 0} \gamma_{ph}^{(i)} \frac{|\omega_{ph}^{(i)}|}{|\Omega|} = \alpha_i f_i \gamma_s^{(i)} \frac{2\mu_s^{(i)}}{3\mu_s^{(i)} - k_s^{(i)}} \tag{5.73}$$

où $\alpha_i = (1 + 2w_i)/(b_i w_i)$.

D'après les équations (4.23) et (4.24), il est possible de montrer que :

$$\langle \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{u}, i, \boldsymbol{t}) \rangle_{\omega_{ph}^{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} = \left\langle \mathbb{R}_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\omega_{ph}^{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} : \boldsymbol{\epsilon}_{ph}^0 = \left(\mathbb{I} - \mathbb{W}^{(i)}(\boldsymbol{t}) \right) : \left(\mathbb{I} - \mathbb{M}^{(i)}(\boldsymbol{t}) \right)^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}_{ph}^0 \tag{5.74}$$

où les tenseurs $\mathbb{M}^{(i)}(\boldsymbol{t})$ et $\mathbb{W}^{(i)}(\boldsymbol{t})$ peuvent être déterminés à partir des équations (4.25) et (4.26). Par conséquent, il vient, d'après les équations (4.37) et (4.39), que :

$$\lim_{h \to 0} \left\langle \mathbb{R}_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \right\rangle_{\omega_{ph}^{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})}} = \mathbb{Z}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \tag{5.75}$$

Il est possible de vérifier que :

$$\lim_{h \to 0} f_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} = 1, \quad \lim_{h \to 0} c_{\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} = f_i \tag{5.76}$$

Par définition (cf. section 3 du chapitre 4), il vient que :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})} = \lim_{h \to 0} \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}_{ph}^{(i)}(\boldsymbol{t})} \tag{5.77}$$

où l'expression du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}$ peut être déterminé à partir de l'équation (4.42). Au final, la limite suivante est obtenue :

$$\lim_{h \to 0} \boldsymbol{\epsilon}_{ph}^0 = \boldsymbol{\epsilon}^0 \tag{5.78}$$

où la déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est donnée à l'équation (5.48).

Les équations (5.72), (5.73), (5.75) et (5.78) conduisent à :

$$\sum_{i=1}^{n}\gamma_s^{(i)}\boldsymbol{G}_i = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i f_i \gamma_s^{(i)} \frac{2\mu_s^{(i)}}{3\mu_s^{(i)} - k_s^{(i)}}\boldsymbol{i} : \left\langle \mathbb{Z}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}\right\rangle_{\circlearrowleft} : \left(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} f_i \left\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}\right\rangle_{\circlearrowleft}\right)^{-1} \tag{5.79}$$

Finalement, les tenseurs $\boldsymbol{G}_i$ s'expriment comme suit :

$$\boldsymbol{G}_i = \alpha_i f_i \frac{2\mu_s^{(i)}}{3\mu_s^{(i)} - k_s^{(i)}}\boldsymbol{i} : \left\langle \mathbb{Z}_{\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}\right\rangle_{\circlearrowleft} : \left(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : \sum_{i=1}^{n} f_i \left\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}^{(i)}(\boldsymbol{t})}\right\rangle_{\circlearrowleft}\right)^{-1} \tag{5.80}$$

Dans le cas particulier où le matériau ne contient qu'une population de cavités sphériques ($w = 1$, $b = r$), le tenseur $\boldsymbol{G}$ est de la forme suivante :

$$\boldsymbol{G} = \frac{f}{2}\frac{(3k_m + 4\mu_m)}{(k_s + r\mu_m)}\boldsymbol{i} : \left(\mathbb{I} - \mathbb{P}_d^m : f\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}\right)^{-1} \tag{5.81}$$

car :

$$\mathbb{Z}_{\mathcal{E}}(w = 1) = \frac{r(3k_m + 4\mu_m)(3\mu_s - k_s)}{12\mu_s(k_s + \mu_m r)}\mathbb{J} + \frac{(k_s + 6\mu_s)}{3\mu_s\Theta}\mathbb{K} \tag{5.82}$$

où Θ est donné à l'équation (5.56). L'expression du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ dans le cas particulier où $w = 1$ est donnée à l'équation (4.43).

L'expression (5.81) du tenseur $\boldsymbol{G}$ pour un matériau contenant une unique population de cavités sphériques ne correspond pas à l'expression (5.30) établie à la section 1 car $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} \neq \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}(w = 1)$. Néanmoins, si la distribution des centres des cavités sphériques est isotrope, alors l'expression (5.81) du tenseur $\boldsymbol{G}$ conduit bien à l'expression (5.32) établie précédemment.

Tout comme pour les tenseurs de Biot (section 2.1), dès lors qu'une famille i est constituée de cavités sphériques, il est plus judicieux de faire appel au tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ (équation (4.10)) plutôt qu'au tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}(w = 1)$.

2.2.2 Application

Tout comme à la section 2.1, le cas d'un matériau constitué d'une seule population de cavités sphéroïdales orientées et distribuées de façon isotrope est considéré. Le tenseur $\boldsymbol{G}$ peut se mettre sous la forme $g^{iso}_{spheroïde}\boldsymbol{i}$. La Figure 5.5 présente l'évolution de $g^{iso}_{spheroïde}$ en fonction du rapport de forme w des cavités pour différentes valeurs de b. La porosité est fixée à 10%.

D'après la Figure 5.5, il apparait que lorsque la taille des cavités augmente à porosité fixe, le coefficient $g^{iso}_{spheroïde}$ tend vers 0. À w fixé, $g^{iso}_{spheroïde}$ est une fonction décroissante de b. L'effet de la tension est alors plus important à mesure que les cavités sont petites. De plus, le coefficient $g^{iso}_{spheroïde}$ dépend fortement du rapport de forme des cavités, notamment lorsque les cavités sont petites.

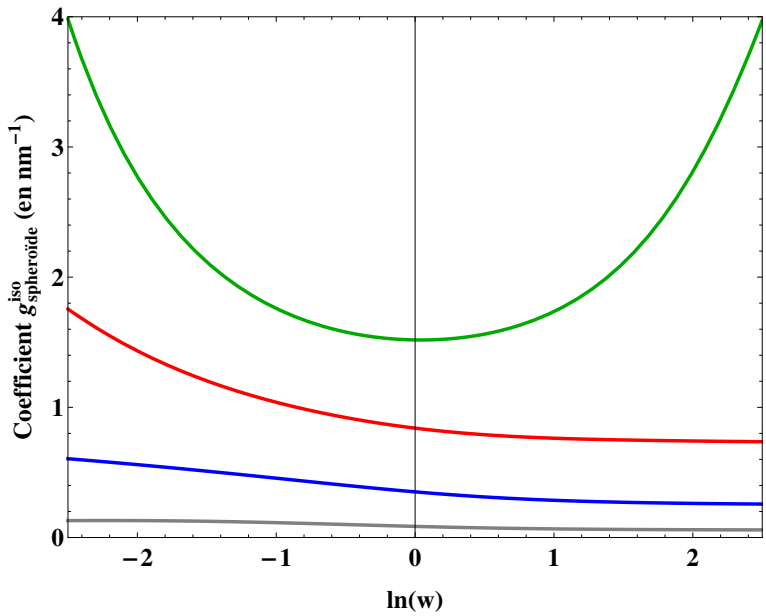


Figure 5.5 – *Évolution de $g^{iso}_{spheroïde}$ en fonction du rapport de forme w des cavités pour différentes valeurs de b. La porosité est fixée à 10%. En gris : $b = 5$ nm, en bleu : $b = 1$ nm, En rouge : $b = 0.25$ nm et en vert : $b = 0.01$ nm.*

3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, une modélisation permettant de tenir compte de l'effet des pressions exercées par des gaz contenus dans les cavités nanométriques d'un matériau nanoporeux a été proposée. L'effet de ces pressions est pris en compte à travers des tenseurs de Biot, usuellement introduits dans le cadre de l'étude des matériaux poreux saturés, dont l'expression a été corrigée afin de tenir compte de la présence d'interfaces imparfaites cohérentes entre la matrice et les cavités nanométriques. La démarche proposée, qui repose sur l'approche par motifs morphologiques représentatifs, conduit à un modèle dépendant de la forme des cavités, de leur taille et de la symétrie ellipsoïdale de leur distribution spatiale. Il a été montré que lorsque la taille des cavités augmente à porosité fixée, les tenseurs de Biot construits à partir de la présente approche tendent vers leurs homologues classiques sans effet de surface. Lorsque taille des cavités diminue à porosité fixe, ils tendent à s'annuler. L'effet de la pression interne devient alors négligeable. Dans le cadre des applications présentées, il est apparu que plus les cavités sont petites (à porosité et rapport de forme fixés), plus l'effet de la pression sur la contrainte macroscopique est faible.

De nouveaux tenseurs $\boldsymbol{G}$ ont également été introduits de façon à prendre en compte l'effet des tensions de surface sur la contrainte macroscopique. Ils sont établis à partir d'une démarche similaire à celle mise en œuvre pour déterminer les tenseurs de Biot. Les tenseurs ainsi construits permettent également de tenir compte des effets de la forme des cavités, de leur taille et de la forme de leur distribution spatiale. Lorsque la taille des cavités augmente à porosité fixée, l'influence des interfaces diminue et les tenseurs $\boldsymbol{G}$ tendent à s'annuler. Dans le cas particulier où les cavités sont sphériques, il a été montré que prendre en compte la tension de surface revient à soustraire $2\gamma_s/r$ à la pression dans les cavités.

La pression dans les cavités et la tension de surface ont des effets opposés sur la contrainte macroscopique. Alors que la pression dans les cavités a tendance à placer le matériau dans un état de compression à l'échelle macroscopique, la tension de surface a tendance à le placer dans un état de traction. Cela est compatible avec le fait que la tension de surface tend à s'opposer à la pression dans les cavités.

Chapitre 6

Mise en œuvre numérique de l'approche par motifs

Les modèles micromécaniques mis en œuvre aux chapitres 4 et 5 s'appuient sur la solution de problèmes auxiliaires. Ces problèmes consistent à étudier le comportement mécanique de chaque motif lorsqu'il est entouré d'un milieu infini soumis à un chargement homogène à l'infini. Dans le cadre de cette étude, deux motifs ont été définis : l'un relatif aux cavités sphériques (motif $\mathcal{S}$), l'autre relatif aux cavités sphéroïdales (motif $\mathcal{E}$). Alors que le problème auxiliaire associé au motif $\mathcal{S}$ a été résolu de façon exacte, le problème associé au motif $\mathcal{E}$ a été résolu en s'appuyant sur des hypothèses simplificatrices concernant la forme des champs solutions, l'objectif étant d'obtenir une solution analytique simple. Ces hypothèses conduisent à un résultat exact lorsque la cavité est sphérique et le chargement hydrostatique. Leur pertinence doit cependant être vérifiée pour les autres cas. Dans ce chapitre, le problème auxiliaire associé au motif $\mathcal{E}$ est résolu numériquement et la solution obtenue est comparée à la solution analytique approchée donnée au chapitre 4. L'objectif est d'évaluer la pertinence des simplifications réalisées pour résoudre analytiquement le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ et d'identifier les limites du modèle qui en découle.

Sommaire

1 Objectif et démarche 124
- 1.1 Objectif 124
- 1.2 Formulation faible pour les interfaces imparfaites cohérentes 125
- 1.3 Modélisation et démarche 127
- 1.4 Validation 130

2 Application 135
- 2.1 Comparaison numérique/analytique du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ 135
- 2.2 Comparaisons numérique/analytique des propriétés effectives . . . 139

3 Bilan du chapitre 141

1 Objectif et démarche

1.1 Objectif

Ce chapitre est consacré à la mise en œuvre numérique d'estimations de type Mori et Tanaka généralisées (MTG) pour déterminer le comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphéroïdales. L'objectif est de comparer les estimations des propriétés effectives obtenues numériquement à celle prédites par le modèle MTG analytique proposé au chapitre 4.

Les bornes de Hashin et Shtrikman et les modèles autocohérent généralisés ne sont pas mis en œuvre dans cette étude. En effet, l'objectif principal est d'évaluer la pertinence des hypothèses simplificatrices réalisées dans le cadre du développement du modèle MTG analytique dédié aux matériaux contenant des cavités sphéroïdales (cf. chapitre 4). Cependant, une démarche similaire à celle mis en œuvre par Bornert (1996b) est envisageable. Celle de cette étude s'inspire d'ailleurs de ses travaux. Néanmoins, il est rappelé que le développement d'encadrement de type Hashin et Shtrikman n'est pas aisé pour les matériaux nanoporeux dont les zones perturbées sont décrites par un modèle d'interface imparfaite cohérente. En effet, la borne inférieure de Hashin et Shtrikman (de l'approche par motif) correspond à la borne de Reuss généralisée (car la phase la plus souple est le vide) et la notion de *phase la plus raide* n'est pas évidente en présence d'interfaces imparfaites cohérentes.

Les estimations MTG développées dans le cadre de cette étude nécessitent de connaitre le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ identifié sur le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ (défini à la section 1 du chapitre 4) lorsque le milieu infini est la matrice. Par la suite, ce problème auxiliaire est résolu numériquement pour différentes tailles et formes de cavités. Le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ correspondant à chacune de ces configurations est ensuite déterminé.

La méthode numérique retenue dans ce travail est celle des éléments finis. Le problème a résoudre fait intervenir des interfaces imparfaites cohérentes qui nécessitent un traitement spécifique. Yvonnet et al. (2011) ont proposé une formulation qui permet de tenir compte de la présence de ces interfaces. Elle est présentée ci-après. Sa démonstration est ici quelque peu différente de la démonstration originelle de Yvonnet et al. (2011). En effet, leurs définitions des opérateurs différentiels surfaciques, notamment la divergence surfacique, sont différentes de celles utilisées dans ce document (qui correspondent à celles données par Garrigues (1999)). La démonstration présentée ici s'appuie néanmoins sur les mêmes mécanismes que celle de Yvonnet et al. (2011). Cette formulation a été implémentée dans la plateforme numérique XPER développée à l'IRSN (Perales et al., 2010).

La démarche appliquée pour déterminer numériquement le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ est ensuite présentée et validée en s'appuyant sur des résultats analytiques exacts connus. Les résultats numériques obtenus pour différentes tailles et formes de cavités sont comparés à l'approximation analytique du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ correspondant à ces configurations. Finalement, l'estimation MTG est mise en œuvre à partir des valeurs numériques du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ pour déterminer les propriétés effectives d'un matériau nanoporeux contenant des cavités sphéroïdales distribuées et orientées aléatoirement. Les constantes élastiques effectives ainsi obtenues sont comparées à celles issues du modèle MTG analytique simplifié afin d'identifier les limites de

ce modèle.

1.2 Formulation faible pour les interfaces imparfaites cohérentes

La formulation de Yvonnet et al. (2011) mise en œuvre dans ce travail est présentée ci-après. Elle est limitée ici au cas d'un matériau constitué d'une matrice et de vides.

L'équilibre mécanique du domaine de matrice Ω est considéré. Le bord de Ω, noté $\partial\Omega$, est décomposé en trois sous-domaines notés $\partial\Omega_u$, $\partial\Omega_t$ et Γ (avec $\partial\Omega_u \cap \partial\Omega_t = \emptyset$, $\partial\Omega_u \cap \Gamma = \emptyset$, $\partial\Omega_t \cap \Gamma = \emptyset$ et $\Omega_t \cup \Omega_u \cup \Gamma = \partial\Omega$). Le domaine Γ est décomposé en un domaine Γ_o, faisant référence aux surfaces ouvertes de Γ, et en un domaine Γ_f, faisant référence aux surfaces fermées de Γ ($\Gamma_o \cup \Gamma_f = \Gamma$ et $\Gamma_o \cap \Gamma_f = \emptyset$). Le contour de Γ_o est noté $\partial\Gamma_o$. Un déplacement $\boldsymbol{u}_0$ est appliqué sur $\partial\Omega_u$ et une force $\boldsymbol{t}_0$ est appliquée sur $\partial\Omega_t$. Des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées sur Γ, c'est-à-dire que :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s + \boldsymbol{t}_0' \quad \text{sur} \quad \Gamma \tag{6.1}$$

où $\boldsymbol{t}_0'$ est une force surfacique appliquée sur Γ et $\boldsymbol{n}$ la normale unitaire à $\partial\Omega$ dirigée vers l'extérieur de Ω. Le problème à résoudre est décrit par le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = (1/2)(\mathrm{grad}\boldsymbol{u} + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}) \quad \text{dans} \quad \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \ \mathrm{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s + \boldsymbol{t}_0', \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s \boldsymbol{i}_T + \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s, \quad \boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon} \quad \text{sur} \quad \Gamma \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega_u \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{t}_0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega_t \end{cases} \tag{6.2}$$

Les ensembles $\mathcal{U}$ et $\mathcal{V}$ sont définis tels que :

$$\mathcal{U} = \{\boldsymbol{v} \in H^1(\Omega) \text{ tel que } \boldsymbol{v} = \boldsymbol{u}_0 \text{ sur } \partial\Omega_u\} \text{ et } \mathcal{V} = \{\boldsymbol{v} \in H_0^1(\Omega) \text{ tel que } \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \text{ sur } \partial\Omega_u\} \tag{6.3}$$

où $H^1(\Omega)$ et $H_0^1(\Omega)$ sont les espaces usuels de Sobolev.

La solution recherchée est un champ $\boldsymbol{u} \in \mathcal{U}$ tel que :

$$\int_\Omega \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}V = 0, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V} \tag{6.4}$$

En appliquant le théorème la divergence spatiale, il vient que :

$$\int_\Omega \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}S - \int_\Omega \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{grad}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}V, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V} \tag{6.5}$$

La partition de $\partial\Omega$ conduit à :

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_u} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}S \quad &+ \int_{\partial\Omega_t} \boldsymbol{t}_0 \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}S + \int_\Gamma (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}S \\ &- \int_\Omega \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{grad}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}V = 0, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V} \end{aligned} \tag{6.6}$$

D'après l'équation (6.1) et en remarquant que $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$ sur $\partial\Omega_u$, il vient que :

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega_t} \boldsymbol{t}_0 \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S \quad &+ \int_\Gamma (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{v})\,\mathrm{d}S + \int_\Gamma \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S \\ &+ \int_\Gamma \boldsymbol{t}_0' \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S - \int_\Omega \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{grad}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}V = 0, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}\end{aligned} \tag{6.7}$$

Il est possible de montrer que :

$$\int_\Gamma \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S = \int_{\partial\Gamma_o} \big(\boldsymbol{\sigma}_s \cdot (\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\big) \cdot \boldsymbol{m}\,\mathrm{d}l - \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}_s : \mathrm{grad}_s(\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\,\mathrm{d}S \tag{6.8}$$

où $\boldsymbol{m}$ est le vecteur unitaire tangent à Γ_o, perpendiculaire à $\partial\Gamma_o$ et orienté vers l'extérieur de Γ_o.

Preuve :

$$\begin{aligned}\int_\Gamma \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S &= \int_\Gamma (\boldsymbol{i}_T \cdot \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s) \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S \quad \text{car} \quad \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s \ \text{ est un vecteur tangent.} \\ &= \int_\Gamma \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s \cdot (\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\,\mathrm{d}S \\ &= \int_\Gamma \mathrm{div}_s\big(\boldsymbol{\sigma}_s \cdot (\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\big)\mathrm{d}S - \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}_s : \ \mathrm{grad}_s(\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\mathrm{d}S \\ &= \int_{\partial\Gamma_o} \big(\boldsymbol{\sigma}_s \cdot (\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\big) \cdot \boldsymbol{m}\mathrm{d}S - \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}_s : \ \mathrm{grad}_s(\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\mathrm{d}S\end{aligned} \tag{6.9}$$

Le passage de la deuxième à la troisième ligne est réalisé en utilisant la relation (C.23) et celui de la troisième à la quatrième en appliquant le théorème de la divergence surfacique pour les champs de vecteurs tangents (équation (C.32)). Il est important de remarquer que le vecteur $\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v}$ et le tenseur $\boldsymbol{\sigma}_s$ sont bien tangents.

Il vient alors que :

$$\begin{aligned}&\int_{\partial\Omega_t} \boldsymbol{t}_0 \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S + \int_{\partial\Gamma_o} \big(\boldsymbol{\sigma}_s \cdot (\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\big) \cdot \boldsymbol{m}\,\mathrm{d}l + \int_\Gamma \boldsymbol{t}_0' \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S \\ &\quad = \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}_s : \Big(\mathrm{grad}_s(\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v}) - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{v})\boldsymbol{b}\Big)\,\mathrm{d}S + \int_\Omega \boldsymbol{\sigma} : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}V, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}\end{aligned} \tag{6.10}$$

D'après l'équation (C.31), il est possible de montrer que :

$$\mathbb{I}_T : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v} = \ \mathrm{grad}_s(\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v}) - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{v})\boldsymbol{b} \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Gamma \tag{6.11}$$

Cela conduit à :

$$\begin{aligned}&\int_{\partial\Omega_t} \boldsymbol{t}_0 \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S + \int_{\partial\Gamma_o} \big(\boldsymbol{\sigma}_s \cdot (\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\big) \cdot \boldsymbol{m}\,\mathrm{d}l + \int_\Gamma \boldsymbol{t}_0' \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S \\ &\quad = \int_\Gamma \boldsymbol{\sigma}_s : \mathbb{I}_T : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S + \int_\Omega \boldsymbol{\sigma} : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}V, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}\end{aligned} \tag{6.12}$$

En exploitant les lois de comportement surfacique et volumique, il vient que :

$$\begin{aligned}&\int_{\partial\Omega_t} \boldsymbol{t}_0 \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S + \int_{\partial\Gamma_o} \big(\boldsymbol{\sigma}_s \cdot (\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\big) \cdot \boldsymbol{m}\,\mathrm{d}l + \int_\Gamma \boldsymbol{t}_0' \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S - \int_\Gamma \gamma_s \boldsymbol{i}_T : (\mathbb{I}_T : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v})\,\mathrm{d}S \\ &= \int_\Gamma (\mathbb{I}_T : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{u}) : \mathbb{C}_s : (\mathbb{I}_T : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v})\,\mathrm{d}S + \int_\Omega \mathrm{grad}\boldsymbol{u} : \mathbb{C}_m : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}V, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}\end{aligned} \tag{6.13}$$

Finalement, la formulation faible suivante est obtenue :

$$\begin{aligned}&\text{Trouver } \boldsymbol{u} \in \mathcal{U} \text{ tel que} \\ &\int_{\partial\Omega_t} \boldsymbol{t}_0 \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S + \int_\Gamma \boldsymbol{t}_0' \cdot \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S + \int_{\partial\Gamma_o} \tilde{\boldsymbol{t}}_0 \cdot (\boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{v})\,\mathrm{d}l - \int_\Gamma \gamma_s \boldsymbol{i}_T : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S \\ &= \int_\Gamma \mathrm{grad}\boldsymbol{u} : \mathbb{C}_s : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}S + \int_\Omega \mathrm{grad}\boldsymbol{u} : \mathbb{C}_m : \ \mathrm{grad}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}V, \quad \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{V}\end{aligned} \tag{6.14}$$

où $\tilde{\boldsymbol{t}}_0$ est une force linéïque appliquée sur le contour $\partial\Gamma_o$.

Cette formulation fait apparaitre trois termes supplémentaires en comparaison d'une formulation *classique* en élasticité linéaire : i. deux termes d'intégrations surfaciques sur Γ, l'un est relatif au comportement élastique de l'interface imparfaite cohérente caractérisé par $\mathbb{C}_s$, l'autre à la tension de surface γ_s supposée isotrope dans le plan transverse à Γ, ii. un terme d'intégration sur le contour $\partial\Gamma_o$ des surfaces ouvertes relatif aux efforts appliqués sur ce domaine. Cette formulation a été implémentée dans la plateforme XPER dans le cas particulier où le tenseur $\mathbb{C}_s$ est isotrope dans le plan transverse à Γ (cf. équation (3.6)).

1.3 Modélisation et démarche

L'objectif est de déterminer numériquement le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ pour différentes tailles et formes de cavités. Rappelons que ce tenseur est identifié en étudiant la réponse mécanique du motif $\mathcal{E}$ lorsqu'il est entouré d'un domaine de matrice infini sur lequel des conditions de déformations (ou de contraintes) homogènes sont appliquées à l'infini. Dans le cas d'une déformation homogène $\boldsymbol{\epsilon}^0$ appliquée à l'infini, le problème $\mathcal{A}$ à résoudre est décrit par le système d'équations (4.18).

Pour les simulations numériques, il n'est pas possible de traiter un domaine infini. Le milieu infini est alors remplacé par un domaine fini de *grande taille* dont le contour extérieur est noté Γ_2. Dans ce cas, les conditions de déformations et de contraintes homogènes appliquées sur Γ_2 ne sont plus strictement équivalentes. Elles tendent néanmoins à fournir les mêmes résultats lorsque le domaine fini de matrice est suffisamment grand (Bornert, 1996b). Dans ce cas, la présence du motif hétérogène ne perturbe pas significativement les champs à proximité du bord Γ_2, qui sont alors homogènes. Dans ce travail, seules des conditions de déformations homogènes sur Γ_2 sont appliquées. Le domaine Γ_2 est une sphère de rayon R concentrique avec le centre de la cavité sphéroïdale du motif $\mathcal{E}$ (dont l'axe de révolution est porté par le vecteur $\boldsymbol{e}_z$). Les notations définies à la section 1 du chapitre 4 concernant le motif $\mathcal{E}$ sont reprises. Tout comme Bornert (1996b), un paramètre, noté D, *d'extension du milieu infini* est défini tel que $D = \max(a, b)/R$. Dans le cadre de son étude concernant

w	1/8	1/6	1/4	1/2	1	2	4	6	8
R	10	10	10	10	10	20	40	60	80
r_0	2	2	2	2	2	4	8	12	16
nbe	318600	318600	318600	318600	318600	286944	310464	315168	319872
nbn	324120	324120	324120	324120	324120	291772	315302	320008	324714

Table 6.1 – *Quelques données concernant les simulations numériques relatives au problème auxiliaire associé au motif $\mathcal{E}$ pour une cavité sphéroïdale telle que $b = 1$ nm : w - rapport de forme de la cavité, R - rayon de la surface Γ_2, r_0 - rayon de la surface Γ_0 sur laquelle sont effectuées les opérations de moyenne, nbe - nombre d'éléments du maillage, nbn - nombre de nœuds du maillage.*

l'assemblage de sphères composites, Bornert (1996b) a montré que le milieu fini peut être considéré comme suffisant grand pour que des conditions de contraintes et de déformations homogènes soient équivalentes dès lors que $D \approx 3$. Pour les simulations réalisées ici, D est choisi égal à 10. Le problème résolu numériquement est décrit par le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = (1/2)\big(\mathrm{grad}\boldsymbol{u} + {}^{\mathrm{T}}\mathrm{grad}\boldsymbol{u}\big), \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_m : \boldsymbol{\epsilon} \ \text{ dans } \omega_m \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s\boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s \ \text{ sur } \Gamma_1 \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{\epsilon}^0 \cdot \boldsymbol{x} \text{ sur } \Gamma_2 \end{cases} \tag{6.15}$$

où $\boldsymbol{n}$ est le vecteur unitaire normal à Γ_1 et dirigé vers la cavité.

Les propriétés matériaux retenues pour les simulations numériques sont celles présentées à la Table 3.1.

Bornert (1996b) a montré qu'il n'est pas nécessaire d'utiliser des maillages très fins pour obtenir une résolution satisfaisante des problèmes auxiliaires. Avec des maillages d'environ 600 nœuds, il obtient une très bonne concordance entre les modèles analytiques pour un assemblage de sphères composites et les mêmes modèles obtenus par une résolution numérique des problèmes auxiliaires. Les maillages utilisés dans le cadre de cette étude sont des maillages 3D structurés, réalisés avec GMSH (Geuzaine et Remacle, 2009) et construits à partir d'éléments hexaédriques linéaires à 8 nœuds. Ils comptent environ trois cent mille éléments (cf. Table 6.1). À titre d'exemple, un des maillages utilisés dans le cadre de cette étude est représenté sur la Figure 6.1. Ils sont construits de façon à ce que les arrêtes d'une maille soient, autant que possible, de la même longueur. Les quarts d'ellipses à partir desquelles les cavités sont construites comptent systématiquement une trentaine de nœuds. La discrétisation à proximité de cavités de différentes formes est représentée sur la Figure 6.2. Ces contraintes, qui permettent de contrôler la qualité du maillage, expliquent le nombre d'éléments important. Les calculs sont parallélisés sur 8 cœurs cadencés à 2,7 GHz, un huitième de sphère étant affecté à chaque cœur. La durée d'un calcul est en moyenne de l'ordre du quart d'heure.

De par la symétrie du motif $\mathcal{E}$, le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ recherché à une symétrie isotrope trans-

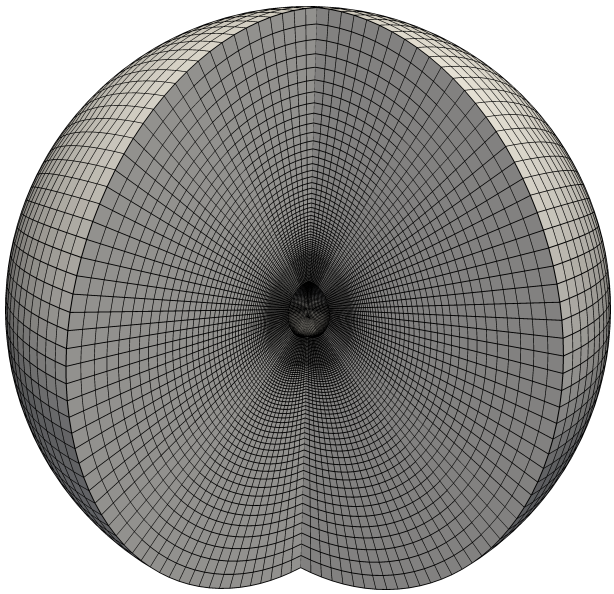


Figure 6.1 – *Exemple de maillage utilisé pour la résolution numérique du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ dans le cas où le milieu infini est la matrice : cavité sphérique de rayon 1 nm.*

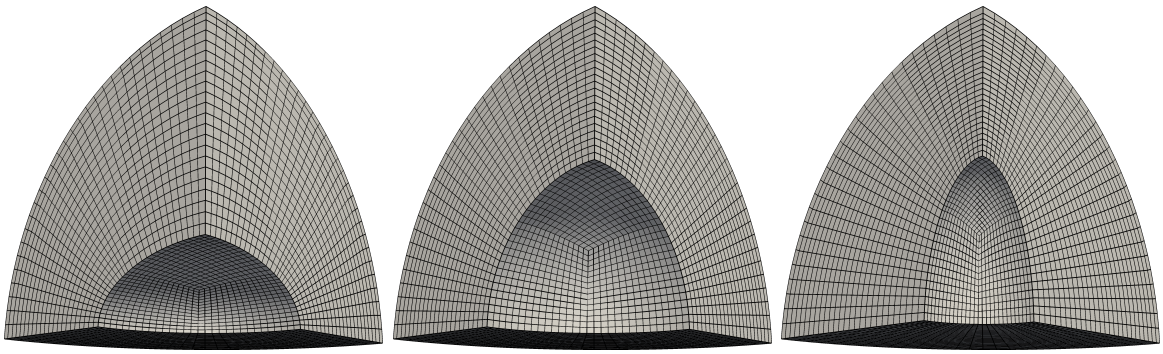


Figure 6.2 – *Exemple de maillages à proximité de cavités de différentes formes : gauche : cavité oblate, milieu : cavité sphérique, droite : cavité prolate.*

verse. Il peut être décomposé de la façon suivante :

$$\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}} = \alpha\mathbb{E}_L + \beta\mathbb{J}_T + \gamma\mathbb{F} + \gamma'\,{}^{\mathrm{T}}\mathbb{F} + \delta\mathbb{K}_T + \delta'\mathbb{K}_L \tag{6.16}$$

Deux chargements distincts sont nécessaires pour identifier les 6 composantes isotropes transverses de $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$. Les déformations homogènes $\boldsymbol{\epsilon}^0_1$ et $\boldsymbol{\epsilon}^0_2$ retenues sont les suivantes :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\epsilon}^0_1 &= \boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_y + 2\boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_z \\ \boldsymbol{\epsilon}^0_2 &= \frac{1}{2}\Big[\boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_z + \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_x + 2\boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_z\Big]\end{aligned} \tag{6.17}$$

Les champs de polarisation induits par les déformations $\boldsymbol{\epsilon}^0_1$ et $\boldsymbol{\epsilon}^0_2$ sont notés respectivement

$\boldsymbol{\tau}^{(1)}$ et $\boldsymbol{\tau}^{(2)}$. D'après les équations (6.16) et (6.17), il est possible de montrer que :

$$\begin{aligned} &\alpha = \langle \tau_{zz}^{(2)} \rangle_{D_\mathcal{E}}, \quad \beta = \langle \tau_{xx}^{(1)} \rangle_{D_\mathcal{E}} - 2\langle \tau_{xx}^{(2)} \rangle_{D_\mathcal{E}}, \quad \gamma = \sqrt{2}\langle \tau_{xx}^{(2)} \rangle_{D_\mathcal{E}}, \\ &\gamma' = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle \tau_{zz}^{(1)} \rangle_{D_\mathcal{E}} - \sqrt{2}\langle \tau_{zz}^{(2)} \rangle_{D_\mathcal{E}}, \quad \delta = 2\langle \tau_{xy}^{(2)} \rangle_{D_\mathcal{E}}, \quad \delta' = 2\langle \tau_{xz}^{(2)} \rangle_{D_\mathcal{E}} \end{aligned} \tag{6.18}$$

La surface extérieure du motif, noté Γ_0, est de forme sphérique. Son rayon r_0 est choisi arbitrairement tel que $r_0 = 2\ \max(a, b)$. En effet, dans le cadre des estimations MTG qui sont mises en œuvre dans ce travail, il a été montré que la taille et la forme de la couche de matrice dans le motif n'ont pas d'influence sur les propriétés effectives prédites par ces modèles. La fraction volumique totale de matrice, dans et hors des motifs, est le seul paramètre dont dépendent ces modèles.

La moyenne du champ de polarisation sur le motif $\mathcal{E}$ est égale à $\langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_\mathcal{E}} - \mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_\mathcal{E}}$ où les moyennes des contraintes et des déformations sont déterminées de la façon suivante :

$$\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \frac{1}{|D_\mathcal{E}|}\int_{\Gamma_0} \frac{1}{2}(\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{n} + \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{u})\mathrm{d}S, \quad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \frac{1}{|D_\mathcal{E}|}\int_{\Gamma_0} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}) \otimes \boldsymbol{x}\mathrm{d}S \tag{6.19}$$

avec $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_r$ dans ce le cas présent.

Les moyennes des champs de contraintes et de déformations sont donc calculées à partir d'intégrales surfaciques sur Γ_0. Ce choix est inévitable à cause de la présence de la cavités et de l'interface imparfaite cohérente. Les intégrales sont déterminées à partir d'intégrations numériques de fonctions d'interpolations linéaires des champs de déplacements et de contraintes aux nœuds de Γ_0. Les valeurs des champs de contraintes fournis par la plateforme XPER étant données aux centres de mailles, il est nécessaire de réaliser une extrapolation de ces champs aux nœuds du maillage. Cette extrapolation est effectué avec le logiciel Paraview (Ahrens et al., 2005). Les fonctions d'interpolations linéaires des champs élastiques aux nœuds du maillage et les opérations de moyennes sont réalisées avec Mathematica (Wolfram Research, 2012) (fonctions *Interpolation* et *NIntegrate*).

1.4 Validation

Dans cette section, la démarche décrite précédemment est validée à partir de solutions analytiques exactes connues du problème $\mathcal{A}$ (équation (4.18)). Premièrement, la démarche est appliquée au problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ dans le cas où le milieu infini est la matrice (problème $\mathcal{A}$ où le rapport de forme w de la cavité est égal à 1). Deuxièmement, elle est appliqué au problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ dans le cas où interface Γ_1 est parfaite ($k_s = \mu_s = 0$) pour différents rapports de forme w de la cavité. Ce cas correspond à un problème d'Eshelby classique où l'inclusion est une cavité. La résolution numérique de ces problèmes auxiliaires est ensuite utilisée pour déterminer les propriétés effectives d'un matériaux nanoporeux à cavités sphériques distribuées aléatoirement et d'un matériaux poreux à cavités sphéroïdales distribuées et orientées aléatoirement. Les résultats obtenus sont comparés aux modèles analytiques correspondant : les modèles de Duan et al. (2005b) et de Ponte Castañeda et Willis (1995).

	u_r	ϵ_{rr}	$\epsilon_{\theta\theta}$	$\epsilon_{\phi\phi}$	σ_{rr}	$\sigma_{\theta\theta}$	$\sigma_{\phi\phi}$
Moyenne de e (%)	0.27	11.60	0.33	0.38	0.79	0.20	0.21

Table 6.2 – *Moyennes des erreurs relatives entre les valeurs des champs analytiques non-nuls et les valeurs des champs obtenus numériquement sur les nœuds du maillage.*

De façon à valider le choix de la taille R du domaine fini de matrice, les champs élastiques solutions du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$, lorsque le milieu infini est la matrice, obtenus numériquement sont comparés à ceux issus de la solution analytique. La comparaison est limitée au cas du chargement $\boldsymbol{\epsilon}_1^0$ (axisymétrique autour de l'axe $\boldsymbol{e}_z$) pour une cavité sphérique de rayon 1 nm. La solution analytique de ce problème est une combinaison linéaire des solutions du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ lorsque les chargements à l'infini sont hydrostatique et déviatorique. Les solutions de ces problèmes, traités au chapitre 4, sont données à l'annexe E. Le chargement $\boldsymbol{\epsilon}_1^0$ peut être décomposé de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\epsilon}_1^0 = \frac{4}{3}\boldsymbol{i} - \frac{1}{3}(\boldsymbol{e_x} \otimes \boldsymbol{e_x} + \boldsymbol{e_y} \otimes \boldsymbol{e_y} - 2\boldsymbol{e_z} \otimes \boldsymbol{e_z}) \tag{6.20}$$

Par conséquent, les champs élastiques solutions du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ pour le chargement $\boldsymbol{\epsilon}_1^0$ sont une superposition des champs élastiques solutions de ce problème lorsque les chargements sont hydrostatiques avec $\epsilon_{\mathrm{h}}^0 = 4/3$ et déviatorique avec $\gamma = 1/3$ (cf. chapitre 4).

La Figure 6.3 présente une comparaison entre les isovaleurs des champs u_r, ϵ_{rr} et σ_{rr}, induits par le chargement $\boldsymbol{\epsilon}_1^0$, obtenus numériquement et analytiquement. Qualitativement, les champs sont semblables. Seules de légères différences sont visibles entre les résultats analytiques et numériques à proximité de la cavité pour les champs ϵ_{rr} et σ_{rr}. Ces différences sont en partie dues à l'extrapolation de ces champs aux nœuds du maillage, qui est moins bonne à proximité des bords du domaine (le nombre de données, sur lesquelles s'appuie l'extrapolation, est en effet plus faible à proximité des bords). Les moyennes des erreurs relatives entre les valeurs des champs analytiques non-nuls et les valeurs des champs obtenus numériquement aux nœuds du maillage sont présentés à la Table 6.2. La moyenne de l'erreur relative concernant le champ ϵ_{rr} est élevée (11.6 %). Cela est dû au fait que le champ s'annule sur une partie du domaine (cf. Figure 6.3). La division par des valeurs proches de zéro conduit alors à des erreurs relatives très importantes sur le domaine où cette composante est nulle. Cette moyenne de l'erreur relative n'est donc pas représentative des différences entre le champ analytique et le champ obtenu numériquement. Les moyennes des erreurs relatives concernant les autres champs sont très faibles (< 1 %). De la comparaison des champs analytiques et numériques, il est possible de conclure que la taille retenue pour le milieu fini de matrice ($10 \max(a, b)$) est suffisamment grande pour représenter un domaine quasi infini.

La Figure 6.4 présente les évolutions des champs u_r et σ_{rr} sur Γ_0 dans le plan ($\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_z$) en fonction de l'angle θ (angle entre $\boldsymbol{e}_z$ et $\boldsymbol{e}_r$). Les évolutions issues de la solution analytique et des interpolations réalisées à partir des valeurs numériques des champs aux nœuds ainsi que les valeurs numériques des champs aux nœuds sont représentées. Les valeurs des champs

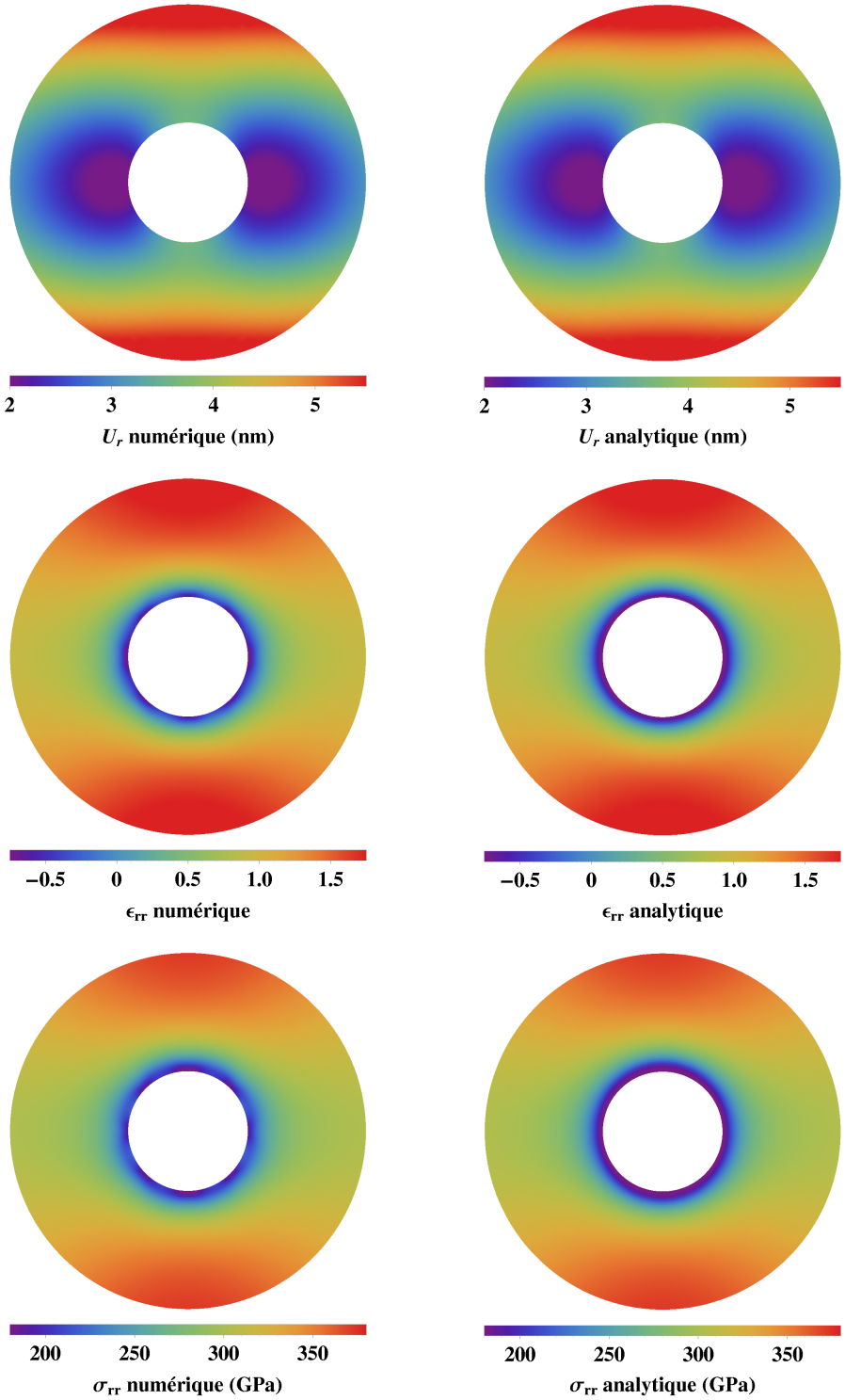


Figure 6.3 – *Isovaleurs des champs u_r, ϵ_{rr} et σ_{rr} solutions du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$, lorsque le milieu de référence est la matrice et pour le chargement $\boldsymbol{\epsilon}_1^0$, à proximité de la cavité de rayon 1 nm (coupe dans le plan $(\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_z)$ et 1 nm $\leq r \leq$ 3 nm où r est défini tel que $\boldsymbol{x} = r\boldsymbol{e}_r$ avec $\boldsymbol{x}$ le vecteur position) : comparaison entre les résultats numériques et analytiques.*

rayon	0.01 nm	0.25 nm	1 nm
Erreur relative sur k^{MTG} (%)	0.42	0.09	0.26
Erreur relative sur μ^{MTG} (%)	0.30	0.05	0.24

Table 6.3 – *Erreurs relatives entre les propriétés élastiques effectives d'un matériau nanoporeux à cavités sphériques distribuées aléatoirement prédites par le modèle MTG analytique et par l'application numérique de ce modèle. La porosité est égale à* 10 %.

aux nœuds et les interpolations qui en découlent sont en parfait accord avec les résultats issus de la solution analytique, que ce soit pour les champs de déplacement et de contrainte. L'erreur générée par l'extrapolation des champs de contrainte aux nœuds du maillage est très limitée. Les fonctions d'interpolations permettent de décrire correctement l'évolution des champs de contrainte et de déplacement sur l'interface Γ_0. Elles sont donc adaptées pour réaliser les intégrations numériques sur la surface Γ_0 permettant de déterminer les moyennes des champs de contraintes et déformations sur le motif.

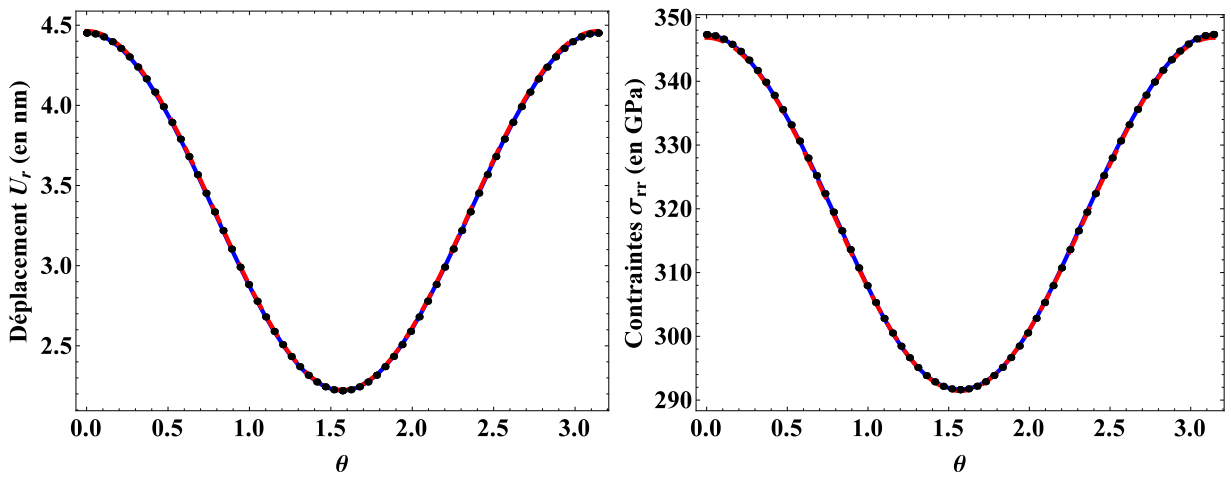


Figure 6.4 – *Évolutions des champs u_r et σ_{rr} sur Γ_2, induits par le chargement $\boldsymbol{\epsilon}_1^0$, dans le plan ($\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_z$) en fonction de l'angle θ : en bleu : interpolations réalisées à partir des valeurs numériques des champs aux nœuds, en pointillés rouges : solution analytique exacte, • : valeurs numériques des champs aux nœuds.*

La démarche a finalement est appliquée dans son ensemble pour déterminer numériquement le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ relatif au motif $\mathcal{S}$ pour des rayons de cavités égaux à 0.01 nm, 0.25 nm et 1 nm. Les propriétés élastiques effectives issues de l'estimation MTG pour des matériaux nanoporeux à cavités sphériques distribuées aléatoirement ont ensuite été déterminées à partir de ces résultats numériques. Elles sont comparées à celles issues du modèle analytique correspondant (Duan et al., 2005b) sur la Figure 6.5. La porosité du matériau est de 10%. Les erreurs relatives entre les propriétés effectives issues du modèle analytique et celles issues de l'application numérique de l'estimation MTG sont présentées à la Table 6.3 . Elles sont inférieures à 0.5 % pour une porosité de 10 %. Ces résultats permettent de valider la démarche mise en œuvre dans cette étude.

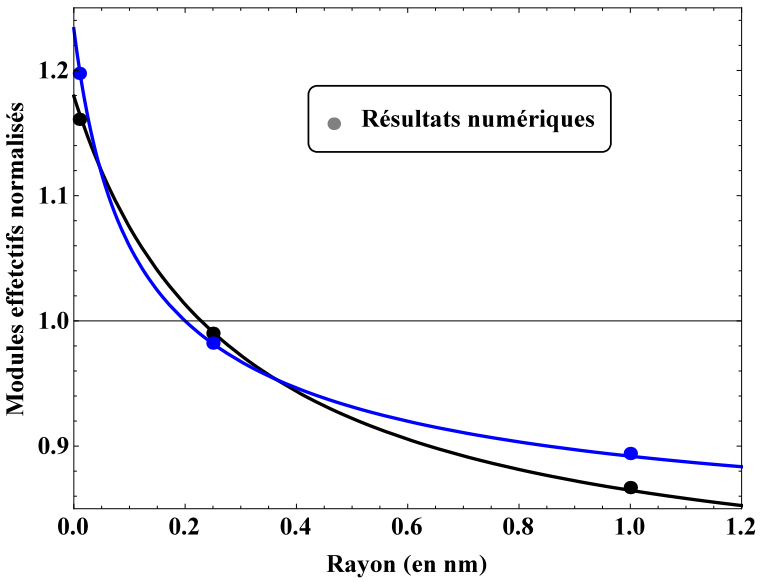


Figure 6.5 – *Évolution des constantes élastiques effectives d'un matériau nanoporeux à cavités sphériques distribuées de façon isotrope (normalisées par rapport aux propriétés élastiques de la matrice) en fonction du rayon des cavités : comparaison entre les modèles MTG analytique et numérique - en noir : module de compressibilité, en bleu : module de cisaillement. La porosité est fixée à* 10 *%.*

La démarche a également été mise en œuvre pour déterminer le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ dans le cas où les propriétés de l'interface imparfaite cohérente sont nulles (c'est-à-dire $k_s = \mu_s = 0$) pour différents rapports de forme de cavités sphéroïdales. Le problème a résoudre correspond alors à un simple problème d'Eshelby dont la solution est connue dans ce cas. Les propriétés effectives d'un matériaux poreux à cavités sphéroïdales distribuées et orientées aléatoirement sont ensuite déterminées à partir de ces résultats numériques pour une porosité de 10 %. Les résultats obtenus sont comparés au modèle analytique de Ponte Castañeda et Willis (1995) correspondant à ce matériau. Les évolutions des modules élastiques effectifs en fonction du rapport de forme des cavités sont présentées sur la Figure 6.6. Les erreurs relatives entre les propriétés effectives obtenues analytiquement et numériquement sont présentées à la Table 6.4. Les résultats numériques sont en accord avec le modèle analytique. Les erreurs relatives n'excèdent pas 3 %. Pour des rapports de forme compris entre 0.25 et 6, elles sont inférieures à 1 %. Il est possible de remarquer que l'erreur relative sur les propriétés effectives a tendance à augmenter lorsque l'on s'éloigne du cas des cavités sphériques.

À la vue des comparaisons entre les résultats numériques et les résultats analytiques, il apparait que la démarche décrite à la section 1.3 semble adaptée pour déterminer numériquement le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ pour différentes configurations avec une précision acceptable.

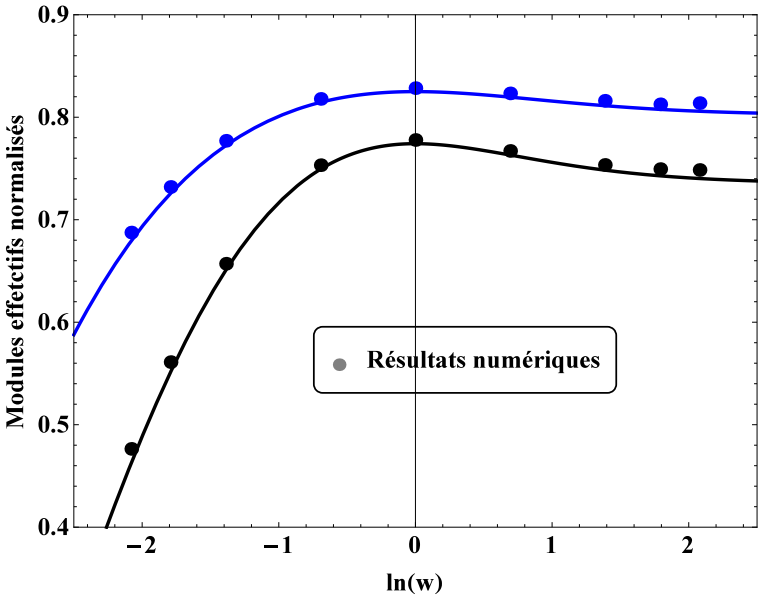


Figure 6.6 – *Évolution des constantes élastiques effectives d'un matériau poreux à cavités sphéroïdales (sans effet de surface) distribuées et orientées aléatoirement (normalisées par rapport aux propriétés élastiques de la matrice) en fonction du rapport de forme des cavités : comparaison entre les modèles MTG analytique et numérique - en noir : module de compressibilité, en bleu : module de cisaillement. La porosité est fixée à* 10 %.

Rapport de forme w	1/8	1/6	1/4	1/2	1	2	4	6	8
Erreur relative sur k^{PCW} (%)	2.99	1.76	0.93	0.51	0.46	0.52	0.68	0.89	1.12
Erreur relative sur μ^{PCW} (%)	1.2	0.86	0.58	0.4	0.41	0.44	0.59	0.61	0.99

Table 6.4 – *Erreurs relatives entre les propriétés élastiques effectives d'un matériau poreux à cavités sphéroïdales (sans effet de surface) distribuées et orientées aléatoirement prédites par le modèle PCW analytique et par l'application numérique du modèle MTG (correspondant au modèle PCW dans ce cas). La porosité est fixée à* 10 %.

2 Application

2.1 Comparaison numérique/analytique du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$

La démarche a été appliquée afin de déterminer le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ pour différentes formes et tailles de cavités. La Figure 6.7 présente une comparaison entre les constantes isotropes transverses du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ obtenues numériquement et celles issues de la solution analytique approchée (équation (4.42)). La solution analytique est évaluée avec $f_{\mathcal{E}} = 1$ et la solution numérique est obtenue avec $f_{\mathcal{E}} = w(b/r_0)^3 \neq 1$. Afin de pouvoir comparer les tenseurs $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ obtenus avec les deux approches, il convient de multiplier le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ de la solution numérique par $1/f_{\mathcal{E}} = r_0^3/(wb^3)$ (cela correspond à une application directe de la relation (4.13) au motif $\mathcal{E}$). Les propriétés matériaux retenues sont celles présentées à la Table 3.1. Les valeurs de w retenues sont 1/8, 1/6, 1/4, 1/2, 1, 2, 4, 6 et 8 et les valeurs de b retenues sont 0.01 nm, 0.25 nm et 1 nm.

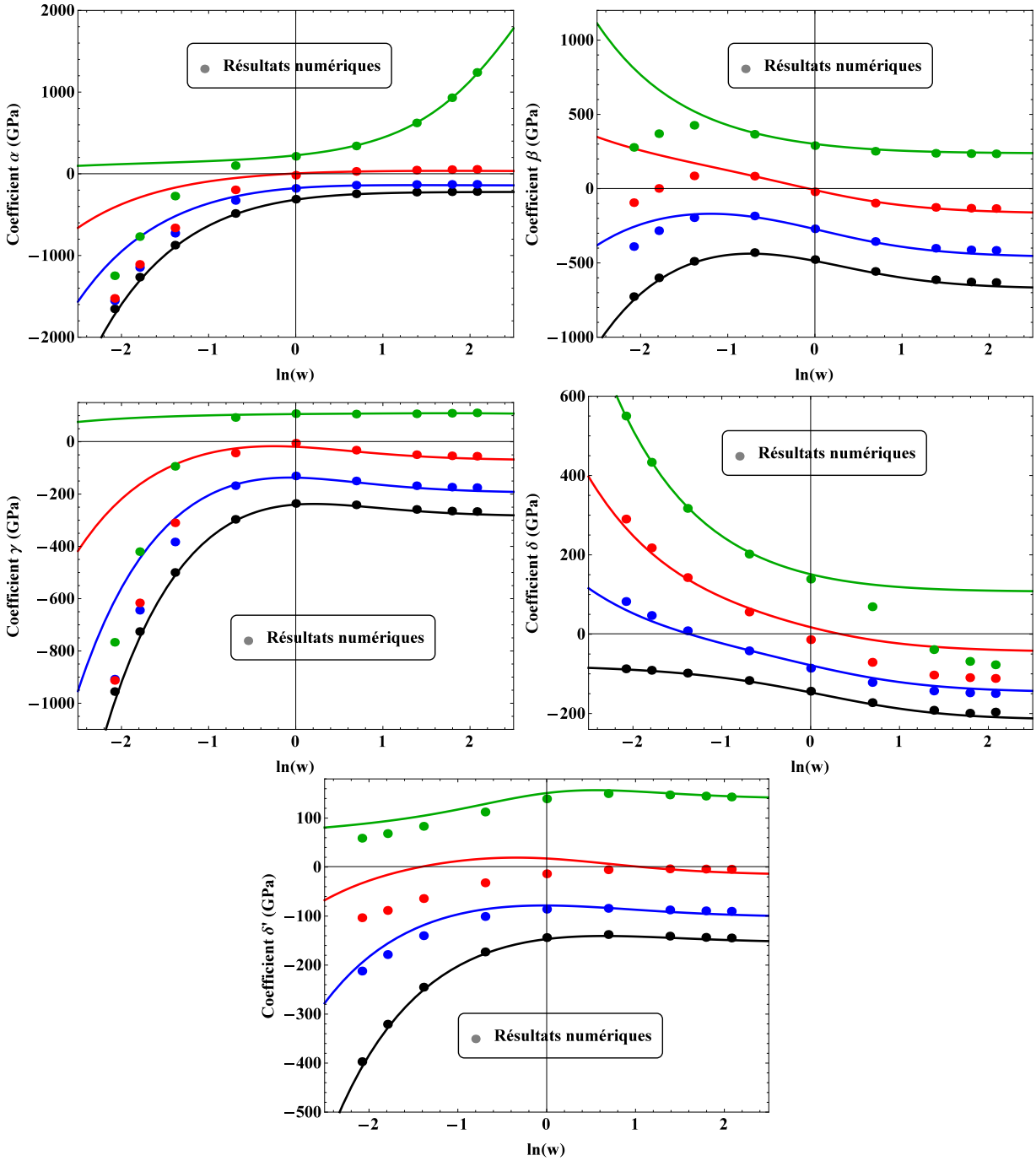


Figure 6.7 – *Évolutions des constantes élastiques isotropes transverses du tenseur* $\mathbb{T}^m_{M\mathcal{E}}$ *en fonction du rapport de forme* w *des cavités : comparaison entre les résultats du modèle analytique et les résultats numériques. En vert :* $b = 0.01$ *nm, en rouge :* $b = 0.25$ *nm, en bleu :* $b = 1$ *nm, en noir : sans effet de surface. La porosité* $f_{\mathcal{E}}$ *du motif* $\mathcal{E}$ *est égale à* 1.

Composante α :

L'opération $\mathbb{E}_l : \boldsymbol{\epsilon}^0$ extrait la déformation uniaxiale selon l'axe d'isotropie transverse ($\boldsymbol{e}_z$

dans notre cas) (Suquet et Bornert, 2001). La composante α de $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ caractérise la réponse élastique du motif (du point de vue de la polarisation $\boldsymbol{\tau}$) dans la direction longitudinale lorsque la déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est uniaxiale suivant l'axe d'isotropie transverse ($\langle \tau_{zz} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \alpha\epsilon$ lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \epsilon \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_z$).

Dans le cas où les cavités sont de forme prolate, une très bonne concordance est observée entre les résultats numériques et analytiques. Pour des rapports de formes compris entre 0.5 et 1, la différence entre les résultats issus du modèle analytique simplifié et les résultats numériques est relativement faible. La prédiction du modèle analytique semble acceptable. En revanche pour des rapports de forme inférieurs à 0.5, les différences entre les résultats analytiques et numériques sont de plus en plus importants à mesure que le rapport de forme diminue. Ces différences s'amplifient lorsque la taille des cavités diminue. Lorsque w diminue sur ce domaine, le modèle analytique prédit une diminution du coefficient α. La tendance observée à partir des résultats numériques est similaire. Néanmoins, cette diminution est beaucoup plus rapide dans le cas des résultats numériques. Le modèle analytique prédit alors un coefficient α trop raide.

Composante β :

Le résultat de l'opération $\mathbb{J}_T$: $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est un tenseur de déformation isotrope dans le plan transverse ($(\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y)$ dans notre cas). La composante β de $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ caractérise alors la réponse élastique du motif lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est isotrope dans le plan transverse ($\langle \tau_{xx} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \langle \tau_{yy} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \beta\epsilon$ lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \epsilon(\boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_y)$. Le module de compressibilité transverse k_t est parfois introduit tel que $k_t = \beta/2$.

Lorsque w est supérieur à 0.5, les résultats numériques et analytiques sont très proches. Lorsque w est compris entre 0 et 0.5, des différences sont observées. Ces différences ont tendance à augmenter lorsque w et b diminuent. La prédiction de β fournie par le modèle analytique lorsque $b = 1$ nm et $w \in [0, 0.5]$ reste acceptable, en particulier lorsque w est supérieur à 0.25. Lorsque b est égal à 0.25 nm et 0.01 nm, le modèle analytique prédit une augmentation de β lorsque w diminue alors qu'une diminution est observée à partir des résultats numériques.

Composantes γ et γ' :

Il est possible de vérifier que les coefficients γ et γ' prédits par le modèle analytique sont égaux. Ainsi, le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ est bien symétrique. Les résultats numériques conduisent également à des coefficients γ et γ' égaux *aux approximations numériques près*. Il est à rappeler que le tenseur $\mathbb{F}$ traduit un couplage entre l'allongement dans la direction axiale et une contraction dans le plan transverse (effet de Poisson) (Suquet et Bornert, 2001).

Le coefficient γ décrit la réponse du motif dans le plan transverse lorsqu'une déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est appliquée dans la direction longitudinale ($\langle \tau_{xx} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \langle \tau_{yy} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \gamma\epsilon/\sqrt{2}$ lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \epsilon(\boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_z)$. Il décrit également la réponse du motif dans la direction longitudinale lorsqu'une déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$ isotrope dans le plan transverse est appliquée ($\langle \tau_{zz} \rangle_{D_\mathcal{E}} = \sqrt{2}\gamma\epsilon$ lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \epsilon(\boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_y)$. Le coefficient de Poisson longitudinal ν_l est parfois intro-

duit tel que $\nu_l = \gamma/(\sqrt{2}\beta)$.

Tout comme les coefficients α et β, les résultats numériques et analytiques pour le coefficient γ sont en très bon accord lorsque w est supérieur à 0.5. Lorsque w est inférieur à cette valeur, des différences apparaissent. Ces différences ont tendance à s'amplifier lorsque w et b diminuent. Sur ce domaine, les résultats numériques prédisent une diminue de γ lorsque w diminue. Les résultats analytiques prédisent également cette tendance mais de façon beaucoup moins prononcée.

Composante δ :
L'opération $\mathbb{K}_T$ permet d'extraire les composantes de cisaillement transverse de $\boldsymbol{\epsilon}^0$ (Suquet et Bornert, 2001). Le coefficient β permet de caractériser la réponse du motif lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est un chargement en cisaillement pure dans le plan transverse ($\langle\boldsymbol{\tau}\rangle_{D_\mathcal{E}} = \delta\epsilon(\boldsymbol{e}_x\otimes\boldsymbol{e}_y+\boldsymbol{e}_y\otimes\boldsymbol{e}_z)$ lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \epsilon(\boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_z)$. Le module de cisaillement transverse peut être introduit tel que $\mu_t = \delta/2$.

Contrairement aux coefficients précédents, les résultats numériques et analytiques pour le coefficient δ sont en très bon accord lorsque w est inférieur ou égal à 1. Lorsque b est égal à 1 nm et w est compris entre 1/8 et 8, une très bonne adéquation entre les résultats numériques et analytiques est observée. Concernant les cas où $b = 0.25$ nm et $b = 0.01$ nm, des différences sont observées dès lors que w est supérieur à 1. Ces différences tendent à augmenter lorsque w augmente et lorsque b diminue.

Composante δ' :
L'opération $\mathbb{K}_L$ permet d'extraire les composantes de cisaillement longitudinales de $\boldsymbol{\epsilon}^0$ (Suquet et Bornert, 2001). Le coefficient δ' permet de caractériser la réponse du motif lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0$ est un chargement en cisaillement pur dans la direction longitudinale ($\langle\boldsymbol{\tau}\rangle_{D_\mathcal{E}} = \delta'\epsilon(\boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_z + \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_x)$ lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \epsilon(\boldsymbol{e}_x \otimes \boldsymbol{e}_z + \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_x)$ et $\langle\boldsymbol{\tau}\rangle_{D_\mathcal{E}} = \delta'\epsilon(\boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_z + \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_y)$ lorsque $\boldsymbol{\epsilon}^0 = \epsilon(\boldsymbol{e}_y \otimes \boldsymbol{e}_z + \boldsymbol{e}_z \otimes \boldsymbol{e}_y)$).

D'une manière générale, les résultats numériques et analytiques pour ce coefficient sont proches, en particulier lorsque b est égal à 1 nm. Les résultats ont une meilleure correspondance dans le cas de cavités prolates que dans le cas oblate. Lorsque les cavités sont de forme oblate et que b est égale à 0.25 nm, des différences non-négligeables sont observées. Néanmoins, les tendances sont globalement bien décrites pour ce coefficient sur le domaine étudié.

Il est remarquable que, lorsque l'effet de surface n'est pas pris en compte ($k_s = \mu_s = 0$), les résultats numériques et analytiques sont en très bon accord. Dans ce cas, la solution approchée du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ est identifiée sur un problème d'Eshelby classique dont la solution exacte est connue.

Pour résumer, lorsque w est supérieur ou égal à 1 (cas sphérique et prolate), les résultats issus du modèle analytique simplifié sont en très bon accord avec les résultats numériques, hormis pour le coefficient δ lorsque b est inférieur à 1 nm. Une bonne correspondance est

également observée lorsque w est compris entre 0.5 et 1 quelle que soit la valeur de b. En revanche, lorsque w est inférieur à 0.5, de fortes différences peuvent être observées entre les résultats analytiques et numériques pour les coefficients α, β et γ. Ces différences ont tendance à augmenter lorsque w et b diminuent. Le modèle analytique prédit des coefficients plus raides en comparaison des résultats numériques. Lorsque $b = 1$ nm sur ce domaine, la prédiction de β par le modèle analytique est néanmoins correcte. Le coefficient δ issu des résultats analytiques est en très bon accord avec les résultats numériques sur ce domaine. Le coefficient δ' y est également en bon accord.

Ces différences sont dues au fait que le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ a été résolu de façon approchée en s'appuyant sur les travaux de Cherkaoui et al. (1995). La déformation dans la cavité est supposée homogène dans ce modèle. Cette hypothèse est potentiellement très forte, en particulier lorsque la géométrie de la cavité présente des *singularités* telles que les pôles pour une cavités très allongée ou l'équateur pour des cavités très aplaties. Ces singularités géométriques peuvent alors être sources d'hétérogénéités des champs élastiques à proximité de la cavité. Les pôles d'un sphéroïde allongé sont décrits par seulement deux points alors que l'équateur d'un sphéroïde aplati est décrit par toute une ligne. En considérant que ces domaines sont effectivement sources d'hétérogénéités des champs locaux, cela peut éventuellement expliquer pourquoi le modèle analytique a tendance à fournir de meilleurs résultats lorsque les cavités sont de forme prolate plutôt que de forme oblate.

2.2 Comparaisons numérique/analytique des propriétés effectives

Dans cette section, les valeurs numériques du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ déterminées précédemment sont utilisées afin d'établir les propriétés élastiques effectives d'un matériau contenant une unique population de nano-cavités sphéroïdales orientées et distribuées aléatoirement (cf. section 4.4 du chapitre 4). Les propriétés matériaux retenues sont présentées à la Table 3.1. La porosité totale f est égale à 10 %. Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs (normalisés par rapport à ceux de la matrice) issus du modèle MTG analytique en fonction du rapport de forme w des cavités sont représentées respectivement sur la Figure 6.8 et la Figure 6.9 pour différentes valeurs de b (0.01 nm, 0.25 nm et 1 nm). Les modules élastiques effectifs issus de l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (1995) pour un matériau à cavités sphéroïdales (sans effet de surface) orientées et distribuées aléatoirement sont également représentées. Les modules effectifs issus de la mise en œuvre numérique de l'estimation MTG sont également représentés.

Module de compressibilité :

Les modules de compressibilité effectifs obtenus analytiquement sont en très bon accord avec ceux obtenus numériquement dès lors que w est supérieur à 0.5. La Table 6.5 présente les erreurs relatives entre les modules de compressibilité obtenus analytiquement et numériquement. Lorsque $w \geq 0.5$, l'erreur relative maximale observée est égale à 2.6 % (pour $w = 0.5$ et $b = 0.25$ nm). Lorsque w est inférieur à 0.5, de fortes différences sont observées entre les résultats analytiques et numériques. Des erreurs relatives allant jusqu'à 90 % peuvent être obtenues ($w = 1/8$ et $b = 0.01$ nm). Le modèle analytique est alors très imprécis sur ce domaine et sa mise en œuvre doit être réalisée avec prudence, voire n'est pas recommandée. Les erreurs relatives lorsque $b = 1$ nm pour des rapports de forme w égaux à 1/4 et 1/6 sont respectivement égales à 6.7 % et 14.66 %. Une mise en œuvre du modèle

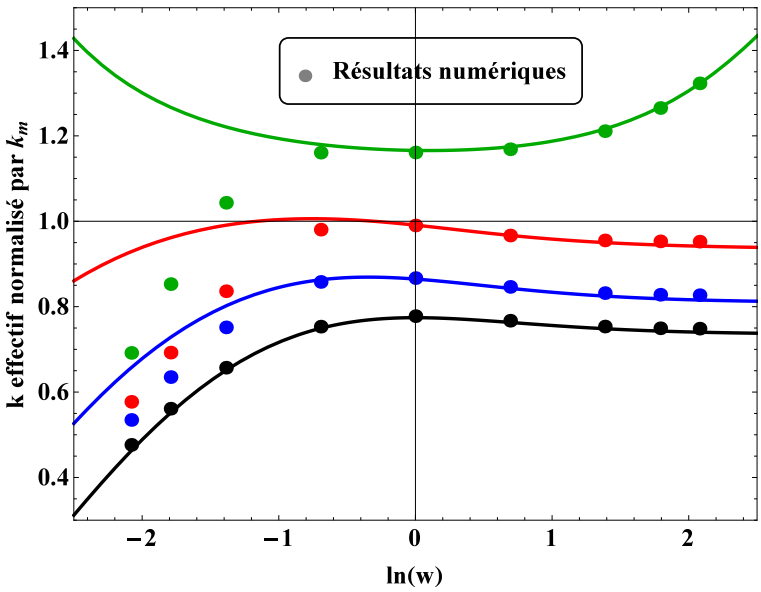


Figure 6.8 – *Évolution du module de compressibilité effectif d'un matériau poreux contenant une population de nano-cavités sphéroïdales distribuées et orientées aléatoirement (porosité égale à 10 %) en fonction du rapport de forme w pour différentes tailles de cavités : comparaison entre les résultats du modèle analytique et les résultats numériques. En vert : b=0.01 nm, en rouge : b=0.25 nm, en bleu : b=1 nm, en noir : sans effet de surface (PCW), résultats numériques ●.*

lorsque $1/6 \leq w \leq 1/4$ et $b \geq 1$ nm peut être éventuellement envisagée en étant conscient que l'erreur commise n'est en revanche pas négligeable. Ces observations sont compatibles avec celles réalisées à la section précédente concernant les composantes du tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$.

Module de cisaillement :

La Table 6.6 présente les erreurs relatives entre les modules de cisaillement obtenus analytiquement et numériquement. L'erreur relative maximale observée entre les modules de cisaillement effectifs obtenus numériquement et analytiquement est égale à 10.08 % (pour $w = 8$ et $b = 0.01$ nm). Sur le domaine d'étude, ces erreurs sont confinées autour de valeurs relativement faibles en comparaison des erreurs observables pour le module de compressibi-

Rapport de forme w	1/8	1/6	1/4	1/2	1	2	4	6	8
PCW ($k_s = \mu_s = 0$)	2.99	1.76	0.93	0.51	0.46	0.52	0.68	0.89	1.12
b=1 nm	22.91	14.66	6.70	0.59	0.26	0.4	0.83	1.14	1.36
b=0.25 nm	60.94	38.85	18.48	2.6	0.09	0.03	0.53	0.90	1.11
b=0.01 nm	90.25	48.55	17.02	1.63	0.42	0.49	0.42	0.19	0.05

Table 6.5 – *Erreurs relatives (en %) entre les modules de compressibilité effectifs d'un matériau poreux à nano-cavités sphéroïdales distribuées et orientées aléatoirement prédits par le modèle MTG analytique et obtenus numériquement.*

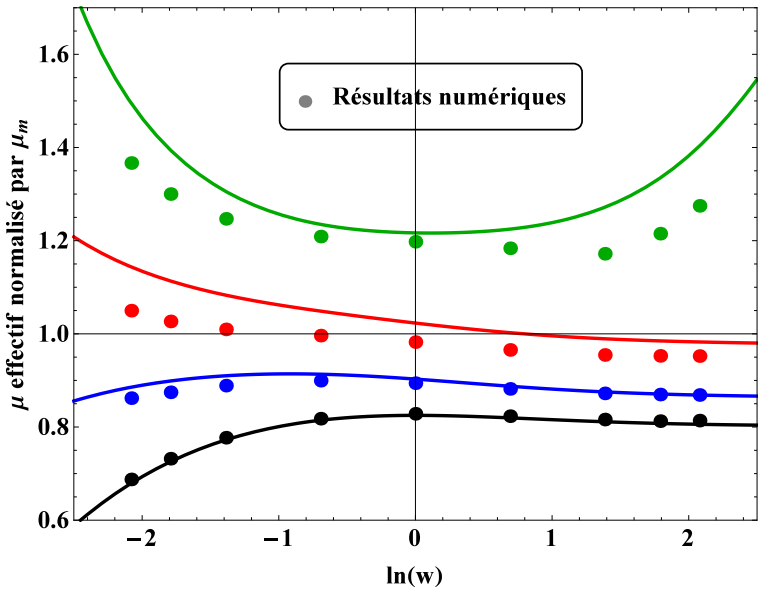


Figure 6.9 – *Évolution du module de cisaillement effectif d'un matériau poreux contenant une population de nano-cavités sphéroïdales distribuées et orientées aléatoirement (porosité égale à 10 %) en fonction du rapport de forme w pour différentes tailles de cavités : comparaison entre les résultats du modèle analytique et les résultats numériques. En vert : b=0.01 nm, en rouge : b=0.25 nm, en bleu : b=1 nm, en noir : sans effet de surface (PCW), résultats numériques ●.*

lité effectif lorsque w est inférieur à 0.5. Les tendances prédites par le modèles analytique sont en accord avec les résultats numériques. Lorsque $b = 1$ nm, l'erreur relative maximale est égale à 2.78 % (pour $w = 1/6$). Cette erreur est acceptable à la vue des erreurs observables entre les modèles analytiques exactes et les résultats numériques correspondants (de l'ordre de 3 % au maximum d'après la section 1.4, Table 6.4). Il est possible d'en conclure que la prédiction du modèle est pertinente dans ce cas. Lorsque $b = 0.25$ nm, les erreurs relatives sont de l'ordre de $3 - 4$ % lorsque w est supérieur ou égal à 1. Elles augmentent lorsque w diminue pour atteindre 8.93 % (pour $w = 1/8$). Lorsque $b = 0.01$ nm, l'erreur relative est inférieure à 5 % lorsque w est compris entre 1/4 et 2. Hors de ce domaine, l'erreur est supérieure à 7 % et atteint 10 % sur le domaine étudié.

En conclusion, lorsque w est supérieur ou égal à 0.5, les résultats du modèle analytique sont en bon accord avec les résultats numériques pour toutes les valeurs de b testées. Lorsque w est inférieur à 0.5, les résultats du modèle analytique pour le module de cisaillement effectif sont en bon accord avec les résultats numériques pour toutes les valeurs de b testées. En revanche, les deux approches ne sont pas en accord sur ce domaine pour le module de compressibilité effectif sauf lorsque w est compris entre 0.25 et 1 et b supérieur à 1 nm.

3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ a été résolu numériquement à partir de simulations de type éléments finis. Une formulation spécifique permettant de tenir

Rapport de forme w	1/8	1/6	1/4	1/2	1	2	4	6	8
PCW ($k_s = \mu_s = 0$)	1.2	0.86	0.58	0.4	0.41	0.44	0.59	0.61	0.99
b=1 nm	2.73	2.78	2.38	1.54	0.98	0.64	0.35	0.13	0.02
b=0.25 nm	8.93	8.44	7.27	5.27	4.15	3.83	3.63	3.37	3.18
b=0.01 nm	9.36	7.24	4.69	2.16	1.59	3.48	8.52	9.85	10.08

Table 6.6 – *Erreurs relatives (en %) entre les modules de cisaillement effectifs d'un matériau poreux à nano-cavités sphéroïdales distribuées et orientées aléatoirement prédits par le modèle MTG analytique et obtenus numériquement.*

compte des interfaces imparfaites cohérentes (Yvonnet et al., 2011) a été nécessaire. Celle-ci a été implémentée dans la plateforme numérique XPER (Perales et al., 2010) développée à l'IRSN.

Une démarche inspirée des travaux de Bornert (1996b) a été proposée afin de déterminer de façon numérique le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ sur lequel repose les estimations MTG pour les matériaux contenant des nano-cavités sphéroïdales. Cette démarche a été validée avec succès à partir de cas particuliers dont les solutions analytiques exactes sont connues. Elle a ensuite été appliquée afin de déterminer le tenseur $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$ pour différentes valeurs du rapport de forme w et différentes tailles b de cavités. Ces résultats numériques ont été comparés à ceux issus du modèle analytique développé au chapitre 4.

D'une manière générale, il est apparu que, dans le cadre de l'application présentée, le modèle analytique est pertinent lorsque w est supérieur ou égal à 0.5 et lorsque w est compris entre 0.25 et 0.5 pour b supérieur à 1 nm. Hors de ces domaines, les résultats du modèle analytique ne sont pas en bon accord avec les résultats numériques.

Chapitre 7

Application au dioxyde d'uranium irradié

Les résultats établis aux chapitres précédents sont ici mis en œuvre afin de décrire le comportement élastique effectif du dioxyde d'uranium irradié. Dans un premier temps, deux modèles sont proposés : i. un modèle qualifié de *simplifié* qui repose sur deux changements d'échelles successifs (cf. démarche mise en œuvre par Vincent (2007)) et où l'effet de surface est pris en compte à l'échelle des cavités intragranulaires et partiellement à l'échelle des cavités intergranulaires, ii. un modèle qualifié de *complet* qui repose sur un unique changement d'échelles et où l'effet de surface est pris en compte pour les cavités intragranulaires et intergranulaires. Dans un second temps, une application numérique de ces modèles est proposée. Ils sont comparés à la partie poroélastique du modèle proposé par Vincent (2007) pour les matériaux bi-poreux saturés. Tout d'abord, la sensibilité des modèles à la taille des cavités est étudiée. Puis, ils sont mis en œuvre en considérant des conditions de type RIA.

Sommaire

1 Propositions de modèles 144

1.1 Modèle simplifié 144

1.2 Modèle complet 146

2 Applications numériques 148

2.1 Paramètres matériaux 148

2.2 Étude de la sensibilité des modèles à la taille des cavités 149

2.3 Application au RIA 153

3 Bilan du chapitre 156

1 Propositions de modèles

L'objectif est de décrire le comportement élastique effectif du dioxyde d'uranium irradié (UO_2). La modélisation de ce matériau présentée à la section 3.2 du chapitre 1 est reprise. L'UO_2 est alors décrit comme un matériau bi-poreux qui contient :

- des nano-cavités sphériques de même rayon r et dont la porosité est notée f_b ;
- des nano-cavités aplaties (sphéroïdes oblates) de même taille b, même rapport de forme w, orientées aléatoirement et dont la porosité est notée f_e.

Il est à rappeler que a et b sont les longueurs des demi-axes des cavités oblates (a est la longueur du demi-axe porté par l'axe de révolution). Le rapport de forme w est égal à a/b. La distribution des centres des cavités est supposée homogène et isotrope. Les cavités sphériques sont pressurisées à la pression p_b et les cavités sphéroïdales à la pression p_e.

La zone perturbée autour des cavités est décrite par un modèle d'interface imparfaite cohérente. Les propriétés élastiques des interfaces associées aux cavités sphériques et sphéroïdales sont supposées identiques. Leur comportement est supposé isotrope dans le plan transverse. Il est alors caractérisé par un module de compressibilité surfacique k_s et un module de cisaillement surfacique μ_s (cf. équations (3.4) et (3.6)). Des tensions de surface sont également prises en compte. Elles sont éventuellement différentes entre les interfaces relatives aux cavités sphériques et relatives aux cavités sphéroïdales. Elles sont notés γ_b (cavités sphériques) et γ_e (cavités sphéroïdales). La matrice d'UO_2 vierge a un comportement isotrope caractérisé par un module de compressibilité k_m et un module de cisaillement μ_m :

$$\mathbb{C}_m = 3k_m\mathbb{J} + 2\mu_m\mathbb{K} \tag{7.1}$$

Le matériau est macroscopiquement isotrope. La loi de comportement recherchée est alors de la forme suivante :

$$\mathbf{\Sigma} = \left[3\tilde{k}\mathbb{J} + 2\tilde{\mu}\mathbb{K}\right] : \mathbf{E} - \left[p_bB_b + p_eB_e - \gamma_bG_b - \gamma_eG_e\right]\boldsymbol{i} \tag{7.2}$$

Les tenseur $\mathbf{\Sigma}$ et $\mathbf{E}$ représentent respectivement les tenseurs des contraintes et des déformations macroscopiques.

La relation précédente conduit à :

$$\begin{aligned} \Sigma_m &= 3\tilde{k}\mathrm{E}_m - p_bB_b - p_eB_e + \gamma_bG_b + \gamma_eG_e \\ \mathbf{\Sigma}_d &= 2\tilde{\mu}\mathbf{E}_d \end{aligned} \tag{7.3}$$

où Σ_m et E_m désignent respectivement la contrainte et la déformation macroscopiques hyrdostatiques ($\Sigma_m = (1/3)\mathrm{Tr}\mathbf{\Sigma}$ et $\mathrm{E}_m = (1/3)\mathrm{Tr}\mathbf{E}$) et où $\mathbf{\Sigma}_d$ et $\mathbf{E}_d$ désignent respectivement les parties déviatoriques des tenseurs des contraintes et des déformations macroscopiques ($\mathbf{\Sigma}_d = \mathbf{\Sigma} - \Sigma_m\boldsymbol{i}$ et $\mathbf{E}_d = \mathbf{E} - \mathrm{E}_m\boldsymbol{i}$).

Ci-après, deux modèles sont proposés afin de déterminer les coefficients $\tilde{k}$, $\tilde{\mu}$, B_b, B_e, G_b et G_e.

1.1 Modèle simplifié

Le modèle *simplifié* s'appuie sur une démarche similaire à celle mise en œuvre par Vincent (2007) et repose sur deux changements d'échelles successifs (cf. section 2.2.2 du chapitre 1).

Dans l'UO_2 irradié, les cavités intragranulaires sont généralement de plus petite taille que les cavités intergranulaires. Ainsi, l'effet de surface est ici pris en compte à l'échelle des cavités intragranulaires sphériques et partiellement à l'échelle des cavités intergranulaires. Les deux changements d'échelles successifs sont les suivants :

- Le matériau à la première échelle est remplacé par un matériau contenant une unique population de nano-cavités sphériques distribuées de façon isotrope. La loi de comportement d'un tel milieu a été établie précédemment dans le cadre de l'estimation de Mori et Tanaka généralisée. Elle est caractérisée par un module de compressibilité k_1^{hom} et un module de cisaillement μ_1^{hom}, dont les expressions sont respectivement données aux équations (3.13) et (3.14), un coefficient de Biot b_1, dont l'expression est donnée à l'équation (5.31) et un coefficient g_1 (relatif à la prise en compte de γ_b) donné à l'équation (5.32). Il a été montré à la section 1 du chapitre 5 que prendre en compte l'effet de la tension de surface γ_b pour les cavités sphériques revient à soustraire le terme $2\gamma_b/r$ à la pression p_b.
- Pour le deuxième changement d'échelles, le modèle de Ponte Castañeda et Willis (1995) est utilisé sur un matériau poreux contenant des cavités ellipsoïdales oblates, sous pression, orientées et distribuées aléatoirement. Les propriétés élastiques de la matrice sont celles du milieu effectif identifié lors du premier changement d'échelles. La tension de surface γ_e au niveau des cavités sphéroïdales est prise en compte en minorant p_e par $(2\gamma_e \sin\theta)/b$ où $\theta = 50°$ (pour l'UO_2 irradié (Moal, 2014)). Finalement, les coefficients de la relation (7.2) issus du présent modèle sont déterminés comme suit.

Les coefficients $\tilde{k}$ et $\tilde{\mu}$ (issus du modèle de Ponte Castañeda et Willis (1995)) sont tels que :

$$\tilde{\mathbb{C}} = 3\tilde{k}\mathbb{J} + 2\tilde{\mu}\mathbb{K} = \mathbb{C}_1^{\text{hom}} + \left(\mathbb{I} - f_e\langle\mathbb{T}^e\rangle_{\circlearrowleft} : \mathbb{P}_d^1\right)^{-1} : \left(f_e\langle\mathbb{T}^e\rangle_{\circlearrowleft}\right) \tag{7.4}$$

où

- $\mathbb{P}_d^1 = \dfrac{1}{3k_1^{\text{hom}} + 4\mu_1^{\text{hom}}}\mathbb{J} + \dfrac{3}{5\mu_1^{\text{hom}}}\dfrac{k_1^{\text{hom}} + 2\mu_1^{\text{hom}}}{3k_1^{\text{hom}} + 4\mu_1^{\text{hom}}}\mathbb{K}$;
- $\mathbb{T}^e = -\mathbb{C}_1^{\text{hom}} : \left[\mathbb{I} - \mathbb{P}(\mathbb{C}_1^{\text{hom}}) : \mathbb{C}_1^{\text{hom}}\right]^{-1}$ d'après l'équation (2.20) dans le cas poreux ;
- $\mathbb{P}(\mathbb{C}_1^{\text{hom}}) = \mathbb{S}^{\text{E}}(\mathbb{C}_1^{\text{hom}}) : (\mathbb{C}_1^{\text{hom}})^{-1}$

Le tenseur $\mathbb{S}^{\text{E}}(\mathbb{C}_1^{\text{hom}})$ est le tenseur d'Eshelby, exprimé à l'annexe B, dont le rapport de forme de l'inclusion correspond à celui des cavités sphéroïdale (w) et dont le milieu infini correspond au milieu effectif identifié lors du premier changement d'échelles ($\nu_0 = \nu_1^{\text{hom}}$). Il est à rappeler que :

$$\nu_1^{\text{hom}} = \frac{3k_1^{\text{hom}} - 2\mu_1^{\text{hom}}}{2(3k_1^{\text{hom}} + \mu_1^{\text{hom}})} \tag{7.5}$$

La moyenne $\langle\mathbb{T}^e\rangle_{\circlearrowleft}$ sur les orientations (équiprobable) de l'espace du tenseur $\mathbb{T}^e$ est égale à la projection de $\mathbb{T}^e$ sur la base d'isotropie :

$$\langle\mathbb{T}^e\rangle_{\circlearrowleft} = (\mathbb{J} :: \mathbb{T}^e)\mathbb{J} + \frac{1}{5}(\mathbb{K} :: \mathbb{T}^e)\mathbb{K} \tag{7.6}$$

Les coefficients B_e, B_b, G_e et G_b s'expriment de la façon suivante :

$$B_e = 1 - \frac{\tilde{k}}{k_1^{\text{hom}}}, \quad G_e = \frac{2\sin\theta}{b}B_e, \quad B_b = -(B_e - 1)b_1, \quad G_b = \frac{2}{r}B_b \tag{7.7}$$

Le tenseur $\mathbb{C}_1^{\text{hom}}$ est à égal à $3k_1^{\text{hom}}\mathbb{J}+2\mu_1^{\text{hom}}\mathbb{K}$ et les coefficients k_1^{hom}, μ_1^{hom} et b_1 identifiés lors du premier changement d'échelles s'expriment comme suit :

- $k_1^{\text{hom}} = k_m + \dfrac{f_{br}}{3}\dfrac{(3k_m+4\mu_m)(4k_s-3k_m r)}{4(1-f_{br})k_s + r(3f_{br}k_m+4\mu_m)}$;
- $\mu_1^{\text{hom}} = \mu_m + f_{br}\dfrac{5\beta_d\mu_m(3k_m+4\mu_m)}{3k_m\delta_d+4\mu_m\zeta_d-6f_{br}\beta_d(k_m+2\mu_m)}$;
  - $\beta_d = (k_s+r\mu_m)(\mu_s-r\mu_m)$,
  - $\delta_d = 3r\mu_m(r\mu_m+\mu_s)+2k_s(2r\mu_m+\mu_s)$,
  - $\zeta_d = 3k_s(r\mu_m+\mu_s)+2r\mu_m(r\mu_m+2\mu_s)$,
- $b_1 = \dfrac{f_{br}r(3k_m+4\mu_m)}{(3f_{br}k_m+4\mu_m)r+4(1-f_{br})k_s}$

Dans le cadre de ce modèle, la porosité f_{br} désigne la porosité (*relative*) des cavités sphériques à la première échelle. La porosité absolue des cavités sphériques f_b (égale au volume occupé par les cavités sphériques dans le VER sur le volume total du VER) et la porosité *relative* sont reliées de la façon suivante :

$$f_{br} = \frac{f_b}{1-f_e} \tag{7.8}$$

De la même façon que dans le cadre de la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007), les coefficients $\tilde{k}$ et $\tilde{\mu}$ peuvent éventuellement être exprimés à partir des équations (A.1) et (A.4) (en faisant un développement limité à l'ordre 1 en f_e pour $\tilde{\mu}$).

Il est à remarquer que finalement seuls trois paramètres ont été modifiés par rapport à la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) : k_1^{hom}, μ_1^{hom} et b_1.

Les tenseurs d'ordre quatre mis en œuvre dans le cadre de ce modèle sont isotropes ou isotropes transverses ($\mathbb{S}^{\text{E}}$, $\mathbb{P}$ et $\mathbb{T}^e$). Dans la perspective d'une intégration du modèle dans un code de calcul, il est donc judicieux de travailler sur les composantes isotropes transverses de ces tenseurs plutôt que dans la base canonique. Les opérations tensorielles sont ainsi plus aisées et plus rapides, en particulier lors de l'inversion de tenseurs. Pour plus d'informations sur les règles de calcul pour les tenseurs d'ordre quatre à symétrie isotrope transverse, il est possible de se référer à (Suquet et Bornert, 2001).

1.2 Modèle complet

Le modèle proposé dans cette section, qualifié de *complet*, prend en compte l'effet de surface à l'échelle des cavités intragranulaires de forme sphérique et intergranulaires de forme sphéroïdale oblate. Contrairement au modèle *simplifié*, il repose sur un unique changement d'échelles, les deux populations de cavités étant prises en compte à la même échelle. Dans le cadre de ce modèle, les coefficients de la relation (7.2) s'expriment comme suit.

Les coefficients $\tilde{k}$ et $\tilde{\mu}$ sont tels que :

$$\tilde{\mathbb{C}} = 3\tilde{k}\mathbb{J}+2\tilde{\mu}\mathbb{K} = \mathbb{C}_m + \left(\mathbb{I} - \langle \mathbb{T}^m_{\text{M}r}\rangle_{\text{M}} : \mathbb{P}^m_d\right)^{-1} : \langle \mathbb{T}^m_{\text{M}r}\rangle_{\text{M}} \tag{7.9}$$

où

- $\langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}r} \rangle_{\mathrm{M}} = f_b \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} + f_e \langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}} \rangle_{\circlearrowleft}$
- $\mathbb{P}^m_d = \dfrac{1}{3k_m + 4\mu_m}\mathbb{J} + \dfrac{3}{5\mu_m}\dfrac{k_m + 2\mu_m}{3k_m + 4\mu_m}\mathbb{K}\,;$
- $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = \dfrac{(3k_m + 4\mu_m)(4k_s - 3k_m r)}{4(k_s + \mu_m r)}\mathbb{J} + \dfrac{10\mu_m(3k_m + 4\mu_m)\beta_d}{3k_m\delta_d + 4\mu_m\zeta_d}\mathbb{K}\,;$
  - $\beta_d = (k_s + r\mu_m)(\mu_s - r\mu_m)$,
  - $\delta_d = 3r\mu_m(r\mu_m + \mu_s) + 2k_s(2r\mu_m + \mu_s)$,
  - $\zeta_d = 3k_s(r\mu_m + \mu_s) + 2r\mu_m(r\mu_m + 2\mu_s)$,
- $\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}} = \Big[\alpha\big(\mathbb{I} - \mathbb{H}\big) : \tilde{\mathbb{C}}_s - \mathbb{C}_m\Big] : \mathbb{Q}_{\mathcal{E}}$
  - $\alpha = \dfrac{1 + 2w}{bw}$,
  - $\mathbb{H} = \tilde{\mathbb{C}}_s : \big[\mathbb{S}^E(\tilde{\mathbb{C}}_s) - \dfrac{1}{\alpha}\mathbb{N}(\tilde{\mathbb{C}}_s)\big] : \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1}$,
  - $\tilde{\mathbb{C}}_s = \dfrac{4k_s\mu_s}{3\mu_s - k_s}\mathbb{J} + 2\mu_s\mathbb{K}$,
  - $\mathbb{Q}_{\mathcal{E}} = \Big[\mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \Big(\mathbb{C}_m - \alpha\big(\mathbb{I} - \mathbb{H}\big) : \tilde{\mathbb{C}}_s\Big)\Big]^{-1}$
  - $\mathbb{P}_m = \mathbb{S}^{\mathrm{E}}(\mathbb{C}_m) : \mathbb{C}_m^{-1}$

Les tenseurs $\mathbb{S}^{\mathrm{E}}(\mathbb{C}_m)$ et $\mathbb{S}^E(\tilde{\mathbb{C}}_s)$ sont les tenseurs d'Eshelby, exprimés à l'annexe B, dont les rapports de forme des inclusions correspondent à celui des cavités sphéroïdales (w). Le tenseur $\mathbb{N}(\tilde{\mathbb{C}}_s)$ est donné à l'annexe B où le rapport de forme correspond également à celui des cavités sphéroïdales (w). Il est à rappeler que :

$$\nu_m = \frac{3k_m - 2\mu_m}{2(3k_m + \mu_m)}, \quad \tilde{\nu}_s = \frac{3\tilde{k}_s - 2\tilde{\mu}_s}{2(3\tilde{k}_s + \tilde{\mu}_s)} = \frac{k_s - \mu_s}{k_s + \mu_s} \tag{7.10}$$

Les coefficients B_b, B_e, G_b et G_e sont tels que :

- $B_b = \dfrac{f_b}{3}\dfrac{r(3k_m + 4\mu_m)}{4(k_s + \mu_m r)}\boldsymbol{i} : \Big(\mathbb{I} - \mathbb{P}^m_d : \langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}r} \rangle_{\mathrm{M}}\Big)^{-1} : \boldsymbol{i}\,;$
- $B_e = \dfrac{f_e}{3}\boldsymbol{i} : \langle \mathbb{Q}_{\mathcal{E}} \rangle_{\circlearrowleft} : \Big(\mathbb{I} - \mathbb{P}^m_d : \langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}r} \rangle_{\mathrm{M}}\Big)^{-1} : \boldsymbol{i}\,;$
- $G_b = \dfrac{2}{r}B_b\,;$
- $G_e = \dfrac{\alpha f_e}{3}\dfrac{2\mu_s}{3\mu_s - k_s}\boldsymbol{i} : \langle \mathbb{Z}_{\mathcal{E}} \rangle_{\circlearrowleft} : \Big(\mathbb{I} - \mathbb{P}^m_d : \langle \mathbb{T}^m_{\mathrm{M}r} \rangle_{\mathrm{M}}\Big)^{-1} : \boldsymbol{i}\,;$
- $\mathbb{Z}_{\mathcal{E}} = \Big[\mathbb{I} - \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1} : \mathbb{H} : \tilde{\mathbb{C}}_s\Big] : \mathbb{Q}_{\mathcal{E}}$

Comme à la section précédente, il est important de remarquer que les tenseurs d'ordre 4 mis en œuvre dans le cadre de ce modèle sont isotropes ou isotropes transverses ($\mathbb{T}^m_{\mathrm{M}\mathcal{E}}$, $\mathbb{H}$, $\mathbb{S}^{\mathrm{E}}$, $\mathbb{N}$, $\mathbb{Q}_{\mathcal{E}}$, $\mathbb{P}_m$ et $\mathbb{Z}_{\mathcal{E}}$). Il est donc préférable de travailler sur les composantes isotropes transverses de ces tenseurs.

2 Applications numériques

Dans cette section, une application numérique des deux modèles précédents est proposée. Ils sont comparés à la partie poroélastique du modèle de Vincent (2007) où l'effet des tensions de surface est pris en compte en soustrayant $(2\gamma_b)/r$ et $(2\gamma_e \sin\theta)/b$ (avec $\theta = 50°$) respectivement aux pressions p_b et p_e. Cela va introduire une dépendance des coefficients G_b et G_e du modèle aux longueurs r et b. Voilà pourquoi, ce modèle est qualifié de *partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface*. Les équations de ce modèle correspondent à celles du modèle *simplifié* où les expressions de k_1^{hom}, μ_1^{hom} et b_1 sont données à la section 2.2.2 du chapitre 1.

2.1 Paramètres matériaux

Les paramètres matériaux retenus pour la matrice d'UO_2 vierge sont celles prédites par la loi de Martin (1989) pour une température de 1200° C (en prenant la porosité de fabrication nulle). La porosité des cavités intragranulaires est fixée à 3 % et celle des cavités intergranulaires à 1 %. Le rapport de forme des cavités intragranulaires est fixé à 0.4. Cette valeur correspond à celle du rapport de forme d'une cavité sphéroïdale oblate dont la longueur b (longueur du plus grand demi-axe) et le volume sont égaux à ceux de la lentille correspondante où $\theta = 50°$ (Moal, 2014). Le rayon des cavités intragranulaires est fixé à 1 nm et la taille b des cavités sphéroïdales oblate est fixée à 10 nm.

Les propriétés élastiques des surfaces de l'UO_2 n'étant pas connues, une extrapolation est proposée pour les paramètres k_s et μ_s à partir des valeurs identifiées pour d'autres matériaux. L'idée est de définir un ordre de grandeur pour ces paramètres. Cette extrapolation s'appuie sur les travaux de Yvonnet et al. (2011) et de Wolfer (2011). Yvonnet et al. (2011) étudient le comportement de nano-fils d'AlN à partir de simulations de type éléments finis (qui reposent sur la formulation présentée à la section 1.2 du chapitre 6). Les propriétés du matériau ont été identifiées à partir de simulations de type *ab initio*. Par comparaisons des résultats issus des simulations éléments finis et des simulations *ab initio* (du nano-fil entier), ils montrent que le comportement élastique des nano-fils et plus particulièrement l'effet de taille, est très bien décrit en considérant un comportement élastique volumique (pour la partie interne du nano-fil) et un comportement élastique surfacique de type interface imparfaite cohérente (pour la partie surfacique du nano-fil). Les propriétés matériaux qu'ils ont identifiées sont présentées à la Table 7.1.

C_{11}^s	C_{33}^s	C_{13}^s	C_{55}^s	C_{11}^b	C_{33}^b	C_{12}^b	C_{13}^b	C_{44}^b
114.1	93.59	22.3	44.0	421.0	405.4	133.2	100.1	129.9

Table 7.1 – *Propriétés élastiques surfaciques (C_{ij}^s) et volumiques (C_{ij}^b) d'un alliage AlN identifiées par Yvonnet et al. (2011) exprimées respectivement en $N.m^{-1}$ et en GPa.*

Dans les modèles proposés, les comportements élastiques surfaciques et volumiques sont supposés isotropes afin d'obtenir des modèles analytiques simples à mettre en œuvre. Les propriétés matériaux issues de la Table 7.1 sont alors *« isotropisées »* en recherchant les

tenseurs volumique et surfacique isotropes dont les composantes *approchent au mieux* (par la méthode des moindres carrés) les composantes anisotropes présentés à la table Table 7.1. Cette démarche conduit à $k_s^{AlN} = 63.1\ N.m^{-1}$, $\mu_s^{AlN} = 31.4\ N.m^{-1}$, $k_b^{AlN} = 212.7\ GPa$ et $\mu_s^{AlN} = 101.3\ GPa$ où k_s^{AlN} et μ_s^{AlN} sont les coefficients d'élasticité surfacique *« isotropisés »* et où k_b^{AlN} et μ_b^{AlN} sont les coefficients d'élasticité volumique *« isotropisés »*. Il est remarquable que les rapports k_s^{AlN}/k_b^{AlN} et μ_s^{AlN}/μ_b^{AlN} sont égaux à 0.3×10^{-9} m.

À partir de l'étude de la variation du paramètre de mailles dans des nanoparticules de différentes tailles, Wolfer (2011) a proposé une méthode permettant de déterminer, en autres, la valeur de $2(\lambda_s + \mu_s)$, qui vaut $2k_s$ dans le cadre de la convention adoptée dans le présent travail. Les mesures des paramètres de mailles s'appuient sur des résultats expérimentaux et/ou numériques. Quelques uns des résultats issus de ces travaux sont présentés à la Table 7.2 pour différents matériaux. Des valeurs usuelles des modules de compressibilité volumiques (k_b) correspondants à ces matériaux sont également précisées.

	Au	Al	Ag	Pt
$k_s(N.m^{-1})$	88.35	51.2	24.35	84.6
$k_b\ (GPa)$	≈ 163	≈ 68	≈ 106	≈ 233
$k_s/k_b\ (10^{-9}\ m)$	0.54	0.75	0.23	0.36

Table 7.2 – *Paramètres k_s identifiés à partir des travaux de Wolfer (2011).*

D'après les travaux de Yvonnet et al. (2011) et Wolfer (2011), les rapports k_s/k_b sont l'ordre de $0.2 - 0.8 \times 10^{-9}$ m. Pour les surfaces de l'UO_2, les paramètres k_s et μ_s sont choisis tels que $k_s = 0.5 \times 10^{-9} k_m$ et $\mu_s = 0.5 \times 10^{-9} \mu_m$, c'est-à-dire $k_s = 90.6\ N.m^{-1}$ et $\mu_s = 35.3\ N.m^{-1}$ pour l'application visée ici. Les paramètres retenus pour l'application numérique sont finalement répertoriés à la Table 7.3.

E_m	ν_m	k_m	μ_m	k_s	μ_s
$188\ GPa$	0.33	$181\ GPa$	$70.7\ GPa$	$90.6\ N.m^{-1}$	$35.3\ N.m^{-1}$
f_b	f_e	r	b	w	
3 %	1 %	1 nm	10 nm	0.4	

Table 7.3 – *Paramètres matériaux de l'UO_2 pour les applications numériques de la section 2.*

2.2 Étude de la sensibilité des modèles à la taille des cavités

Dans cette section une étude de sensibilité des modèles à la taille des cavités est présentée. Les évolutions des coefficients $\tilde{k}$, $\tilde{\mu}$, B_b, B_e, G_b et G_e en fonction du rayon r à b fixé (10 nm) et en fonction de la longueur b à r fixé (1 nm) sont étudiées.

Module de compressibilité $\tilde{k}$:

La Figure 7.1 présente les évolutions du module de compressibilité $\tilde{k}$ en fonction du rayon r et de la longueur b. Il est possible de constater que les modèles *simplifié* et *complet* sont proches l'un de l'autre lorsque $b = 10$ nm. L'effet de surface à l'échelle des cavités intergranulaires est très faible dès lors que b est supérieur à 10 nm pour les paramètres matériaux utilisés. Il devient presque inexistant lorsque b est supérieur à 20 nm.

L'effet des cavités intragranulaires est non-négligeable. Il est de l'ordre de 8 % lorsque $r = 1$ nm. Lorsque $r = 20$ nm, son influence sur le module de compressibilité effectif n'est plus que d'environ 1.5 %.

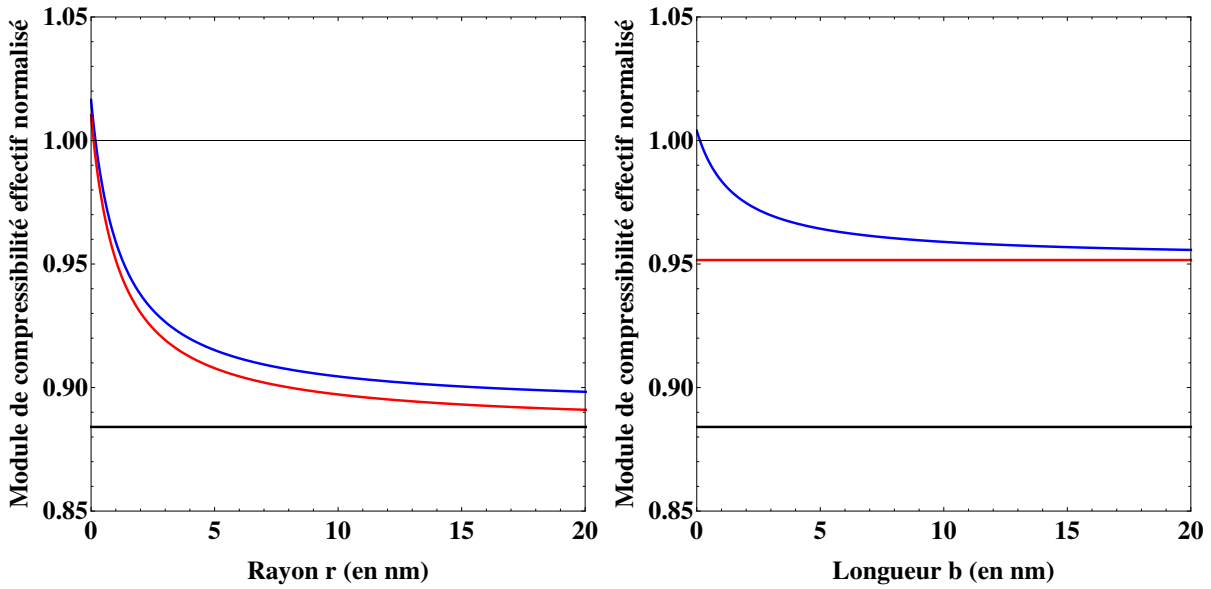


Figure 7.1 – *Évolutions du module de compressibilité $\tilde{k}$ normalisé par k_m en fonction du rayon r (à gauche) et de la longueur b (à droite). En noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en rouge : modèle simplifié et en bleu : modèle complet.*

Module de cisaillement effectif $\tilde{\mu}$:

La Figure 7.2 présente les évolutions du module de cisaillement $\tilde{\mu}$ normalisé par μ_m en fonction du rayon r et de la longueur b. Les mêmes observations que pour le module de compressibilité effectif $\tilde{k}$ peuvent être réalisées. L'effet de surface à l'échelle des cavités intergranulaires est faible lorsque b est supérieur à 10 nm. Il devient presque inexistant dès lors que b est supérieur à 20 nm. L'effet de surface à l'échelle des cavités intragranulaires sur le module de cisaillement effectif est de l'ordre de 5 % lorsque $r = 1$ nm et de 0.9 % lorsque $b = 20$ nm.

Coefficients B_b et G_b :

La Figure 7.3 présente les évolutions des coefficients B_b et G_b en fonction de la longueur r. Ces coefficients sont très peu dépendants de b. En effet, la dépendance à la longueur b est uniquement due aux effets d'interactions *moyennes* entre les cavités sphériques et sphéroïdales. Les évolutions de B_b et G_b en fonction de la longueur b ne sont donc pas présentées.

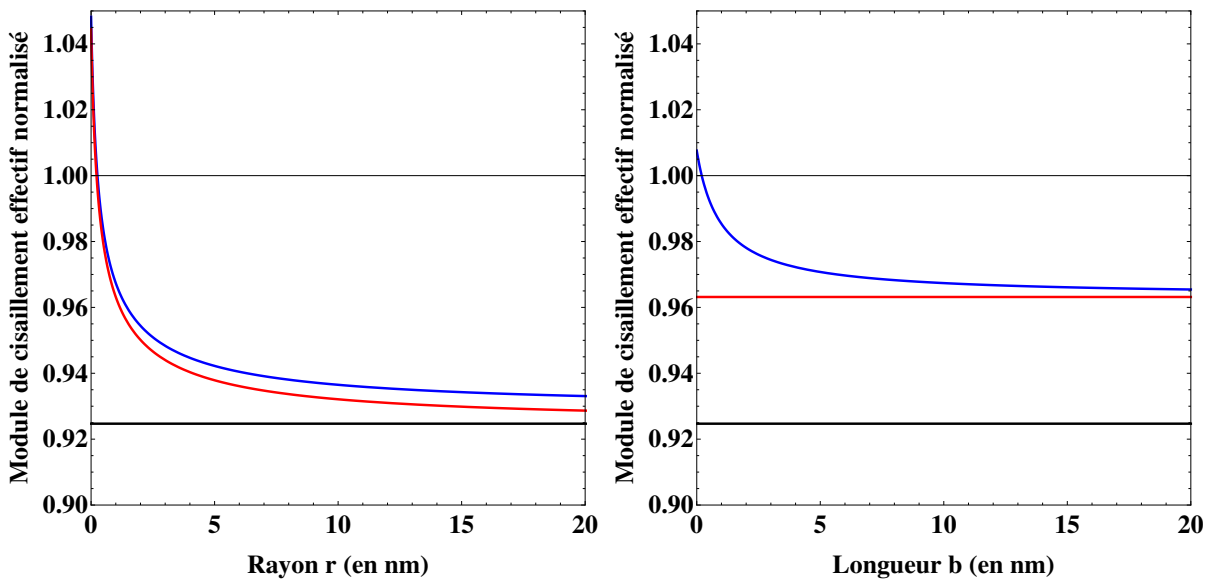


Figure 7.2 – *Évolutions du module de cisaillement $\tilde{\mu}$ normalisé par μ_m en fonction du rayon r (à gauche) et de la longueur b (à droite). En noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en rouge : modèle simplifié et en bleu : modèle complet.*

Les modèles *simplifié* et *complet* tiennent tous deux compte de l'effet de surface à l'échelle des cavités intragranulaires. Cela conduit donc à des coefficients B_b et G_b prédits par ces deux modèles très proches les uns des autres. Les très faibles différences observées résultent des termes d'interactions *moyennes* qui diffèrent entre les modèles. L'effet de surface est important. Lorsque r est égal à 1 nm, l'écart relatif entre la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface et les modèles proposés est de l'ordre de 54 % sur les coefficients B_b et G_b. En considérant un pression p_b de 1 GPa, l'influence de p_b sur la contrainte macroscopique est alors d'environ -81 MPa d'après la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface. Elle n'est que de -37 MPa d'après les modèles *complet* et *simplifié*. De même en considérant une tension de surface γ_b égale à 1 N.m^{-1}, l'influence de γ_b sur la contrainte macroscopique est d'environ 161 MPa d'après la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface. Elle est de 75 MPa d'après les modèles proposés. Lorsque $r = 20$ nm, les écarts relatifs sont de l'ordre de 5 % par rapport à la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface.

Coefficients B_e et G_e :

La Figure 7.4 présente les évolutions des coefficients B_e et G_e en fonction de la longueur b. Ces coefficients sont très peu dépendants de r. Comme pour les coefficients B_b et G_b, la dépendance de B_e et G_e à r est uniquement due aux effets d'interactions *moyennes* entre les cavités sphériques et sphéroïdales. Les évolutions de B_e et G_e en fonction de la longueur r ne sont donc pas présentées. Les modèles *simplifié* et *complet* ne conduisent pas au même résultats dans ce cas. Le modèle *simplifié* donne des résultats similaires à la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets

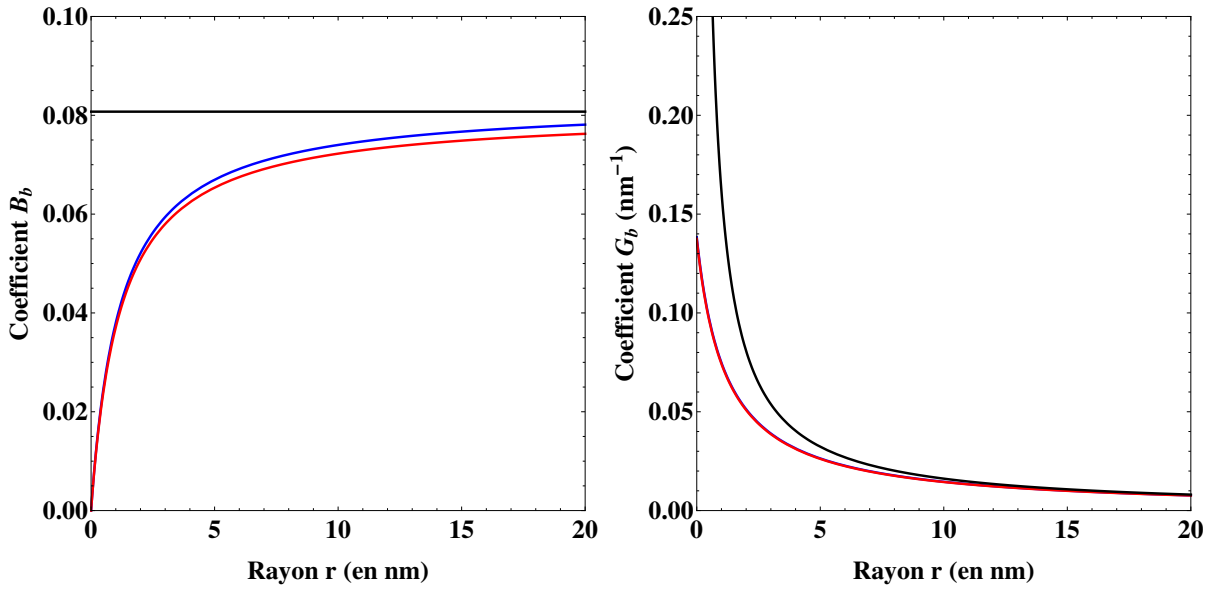


Figure 7.3 – *Évolutions des coefficient B_b (à gauche) et G_b (à droite) en fonction du rayon r. En noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en rouge : modèle simplifié et en bleu : modèle complet.*

de surface. Cela est dû au fait que le modèle *simplifié* ne tient compte que partiellement de l'effet de surface à l'échelle des cavités intergranulaires. Lorsque b est égal à 10 nm, l'écart relatif entre le modèle *complet* et la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface est de l'ordre de 12 % pour B_e et 24 % pour G_e. Cependant, en considérant une pression p_e égale à 200 MPa, l'influence de p_e sur la contrainte macroscopique est de l'ordre de -6.2 MPa d'après le modèle *complet* et de -7 MPa d'après la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface. De la même façon en considérant, une tension de surface γ_b égale à 1 N.m^{-1}, l'influence de γ_e sur la contrainte macroscopique est de 6.7 MPa d'après le modèle *complet* et de 5.4 MPa d'après la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface. L'influence des cavités sphéroïdales est relativement faible en comparaison de l'influence des cavités sphériques. Cela est dû au fait que la porosité f_e est plus faible (1 %) et que les cavités sphéroïdales sont plus grandes.

Pour résumer, l'effet de surface des cavités intergranulaires est très faible dans le cadre de cette application. Les modèles *complet* et *simplifié* conduisent à des résultats très similaires. L'effet de surface à l'échelle des cavités intergranulaires devient non-négligeable dès lors que b est inférieur à 5 nm pour $f_e = 1$ %. L'effet de surface des cavités intragranulaires, lorsque r est égal à 1 nm, influence les propriétés élastiques effectives à hauteur de $5-8$ %. L'influence sur les coefficients B_s et G_s est plus importante, de l'ordre de 54 %. L'élasticité surfacique tend à diminuer l'influence de la tension de surface γ_b et de la pression p_b sur la contrainte macroscopique.

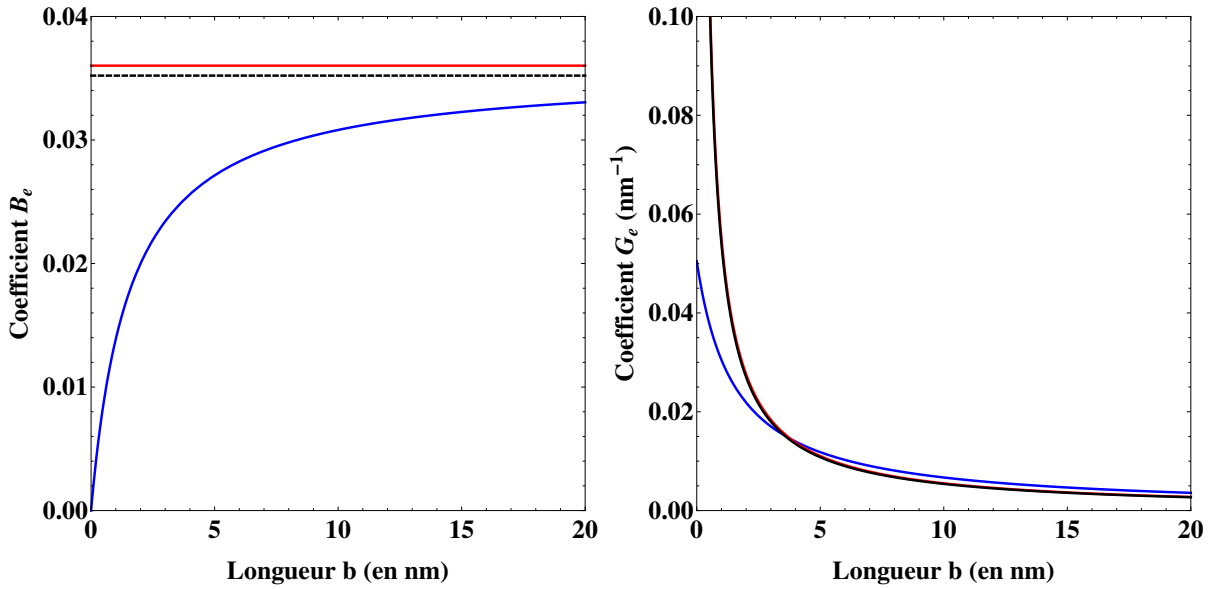


Figure 7.4 – *Évolutions des coefficient B_e (à gauche) et G_e (à droite) en fonction de la longueur b. En noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en rouge : modèle simplifié et en bleu : modèle complet.*

2.3 Application au RIA

Les modèles proposés sont ici mis en œuvre en considérant des conditions d'accident de réactivité. Les données de températures, porosités et de tailles des cavités sont issues d'une simulation numérique d'un essai de type RIA réalisée avec le code SCANAIR. Le jeu de données utilisé fait partie de la base de validation du code et correspond à la simulation de l'essai REP-Na 3. La campagne REP-Na, effectuée en collaboration avec EDF, compte 12 essais réalisés dans le cœur CABRI. Le fluide réfrigérant est du sodium à 280°C, 3 bars et qui circule à la vitesse de 4 m.s^{-1}. Le combustible utilisé lors de l'essai REP-Na 3 est de l'UO_2 irradié à 53 GWj/t. La largeur du pulse de puissance est de 9.5 ms. L'énergie déposée à 0.4 s après le début de l'essai est égale à 120 cal.g^{-1}. Les valeurs des paramètres nécessaires aux modèles sont extraites au plan de flux maximum dans la zone centrale, à 1.7 mm du centre du crayon. Il est important de préciser que dans cette zone, les tailles des cavités augmentent plus fortement que dans les zones situées en périphérie des pastilles. D'après les résultats de la simulation, le rapport des rayons des cavités intragranulaires peut atteindre 1/10 entre le centre et la périphérie des pastilles. À 1.7 mm du centre, l'effet de surface n'est donc pas maximal. Cependant, au cours du transitoire, une décohésion des joints de grain est obtenue en périphérie par simulation. La porosité des cavités intergranulaire devient alors nulle dans la simulation. De façon à observer un effet des cavités intergranulaires sur le comportement macroscopique, le choix a été fait de se placer plus au centre de la colonne fissile (à 1.7 mm du centre du crayon). Seules les vingts premières secondes du transitoire sont étudiées. La Figure 7.5 présente les évolutions de la température, des porosités et des tailles des cavités au plan de flux maximum à 1.7 mm du centre du crayon en fonction du temps.

Les propriétés de la matrice d'UO_2 vierge utilisées pour les modèles (k_m et μ_m) sont issues des résultats de la simulation SCANAIR. Elles sont calculées à partir de la loi de

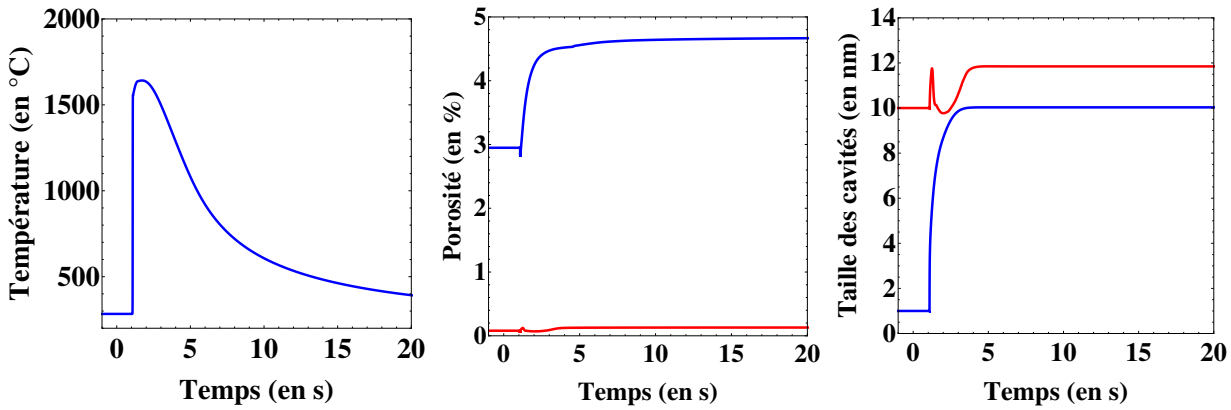


Figure 7.5 – *À gauche : évolution de la température en fonction du temps, au centre : évolution des porosités intragranulaires (en bleu) et intergranulaires (en rouge) en fonction du temps, à droite : évolution du rayon r des cavités intragranulaires (en bleu) et de la taille b des cavités intergranulaires (en rouge) en fonction du temps.*

Lassmann (Lassmann et Moreno, 1977; Moal, 2014) qui dépend uniquement de la température et de la porosité de fabrication. Les propriétés k_s et μ_s sont telles que $k_s = 0.5\ k_m \times 10^{-9}$ et $\mu_s = 0.5\ \mu_m \times 10^{-9}$. Les tailles des cavités et les porosités utilisées sont celles présentées à la Figure 7.5. Comme précédemment, le rapport de forme des cavités intergranulaires est fixé à 0.4.

La Figure 7.6 présente les évolutions des modules de compressibilité $\tilde{k}$ et de cisaillement $\tilde{\mu}$ fonction du temps. Les résultats issus de la loi de *Lassmann*, de la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface et des deux modèles proposés précédemment sont représentés. La Figure 7.7 présente les évolutions des coefficients B_b et G_b fonction du temps et la Figure 7.8 présente les évolutions des coefficients B_e et G_e fonction du temps. Les résultats issus de la partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, du modèle *complet* et du modèle *simplifié* sont représentés.

Il est possible de remarquer que les modèles *simplifié* et *complet* conduisent aux mêmes résultats excepté pour B_e et G_e. L'effet de surface à l'échelle des cavités intergranulaires est négligeable dans ce cas. Cela s'explique par le fait que la porosité des cavités intergranulaires f_e est très faible, de l'ordre de 0.08 %. Pour les coefficients B_e et G_e, les différences entre les modèles *simplifié* et *complet* s'expliquent par le fait que le modèle *simplifié* ne tient compte que partiellement de l'effet de surface pour les cavités intergranulaires contrairement au modèle *complet*. Les différences relatives entre les deux modèles sont non-négligeables. Cependant, l'influence sur la contrainte macroscopique est très faible dans les deux cas à cause de la faible valeur de la porosité f_e. En considérant un pression p_e égale à 200 MPa et une tension de surface γ_e égale à 1 N.m^{-1}, l'effet sur la contrainte macroscopique est de l'ordre de 1 MPa quel que soit le modèle considéré.

L'effet de surface des cavités intragranulaires est non-négligeable au début du transitoire lorsque les cavités ont un rayon de 1 nm, en particulier sur les coefficients B_b et G_b où un facteur deux peut être observé entre les modèles proposés et la partie poroélastique du

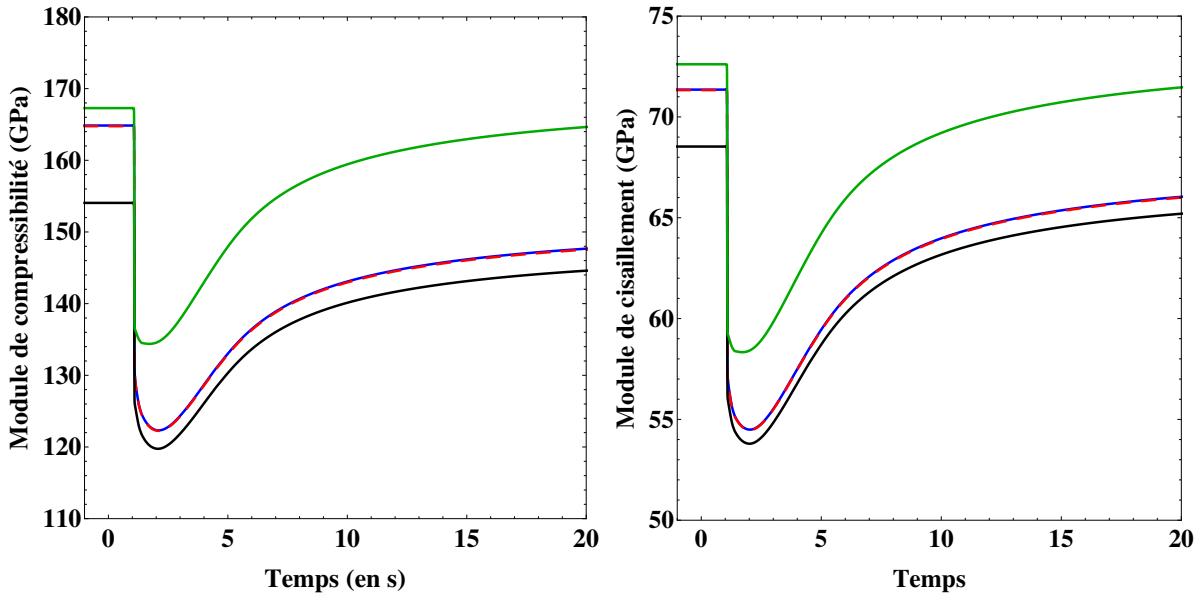


Figure 7.6 – *Évolutions des modules de compressibilité $\tilde{k}$ (à gauche) et de cisaillement $\tilde{\mu}$ (à droite) en fonction du temps. En vert : loi de Lassmann, en noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en bleu : modèle complet et en pointillés rouges : modèle simplifié.*

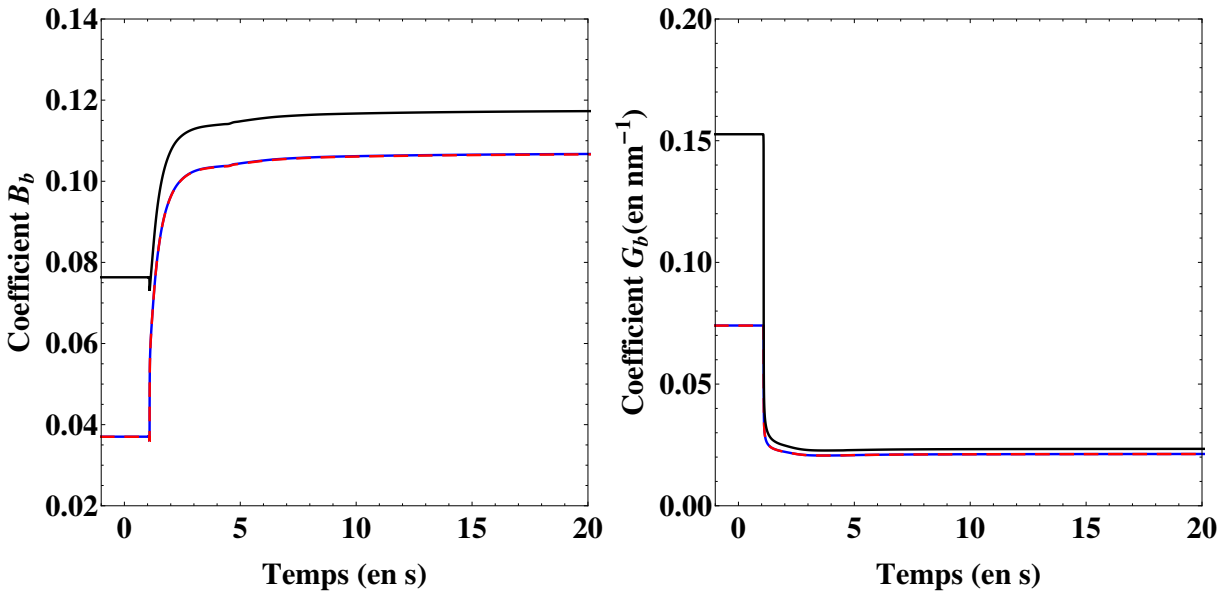


Figure 7.7 – *Évolutions des coefficient B_b (à gauche) et G_b (à droite) en fonction du temps. En noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en bleu : modèle complet et en pointillés rouges : modèle simplifié.*

modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface. L'effet de surface a tendance à rigidifier le matériau. Il diminue également l'influence de la pression p_b sur la contrainte macroscopique. La tension de surface tend à s'opposer à cette pression.

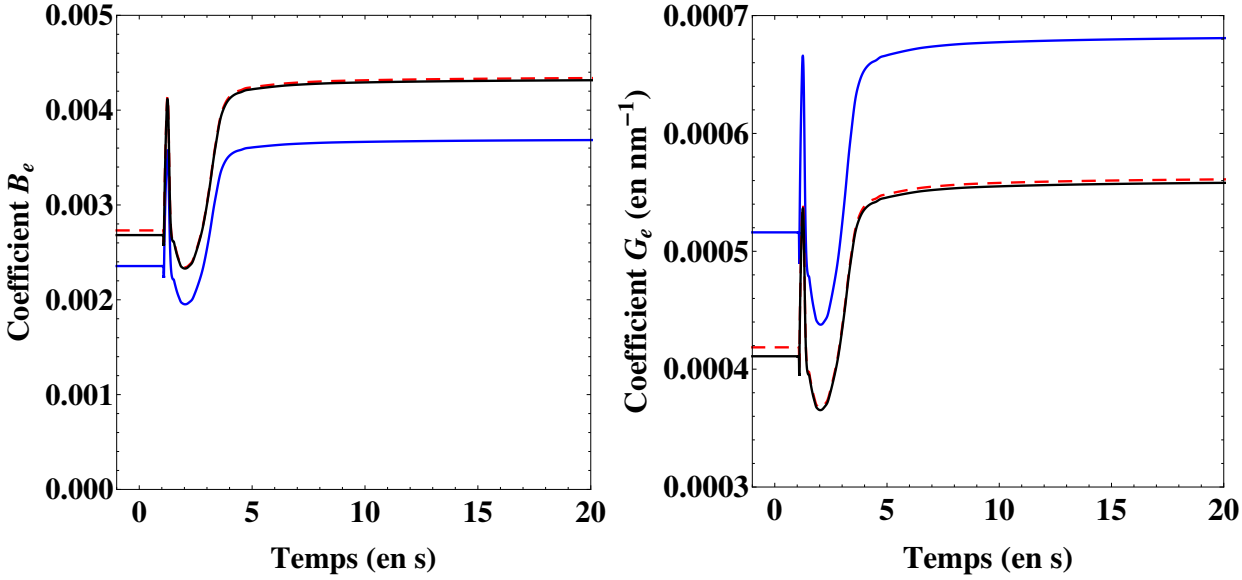


Figure 7.8 – *Évolutions des coefficient B_e (à gauche) et G_e (à droite) en fonction du temps. En noir : partie poroélastique saturée du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, en bleu : modèle complet et en pointillés rouges : modèle simplifié.*

Dans le cas de la partie poroélastique du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface, où elle est prise en compte en soustrayant $(2\gamma_b)/r$ à p_b, son effet est surévaluée.

L'effet de surface diminue ensuite à mesure que le rayon des cavités augmente au cours du transitoire.

3 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, deux modèles, s'appuyant sur les résultats établis aux chapitres précédents, ont été proposés afin de décrire le comportement poroélastique saturé du dioxyde d'uranium irradié : le premier qualifié de *simplifié* où l'effet de surface est pris en compte pour les cavités intragranulaires et partiellement pour le cavités intergranulaires et le second qualifié de *complet* où l'effet de surface est pris en compte pour les deux populations de cavités. Le modèle *simplifié* dérive de la démarche mise en œuvre par Vincent (2007) qui repose sur deux changements d'échelles successifs. En pratique, ce modèle ne diffère de la partie poroélastique du modèle Vincent (2007) que par trois termes (k_1^{hom}, μ_1^{hom} et b_1). L'intégration dans un code de calcul est alors aisée dès lors que la partie poroélastique du modèle Vincent (2007) est déjà intégrée.

Une application numérique a été ensuite été proposée pour l'UO_2 irradié. Les propriétés élastiques des surfaces de l'UO_2 n'étant pas connues, une extrapolation de celles-ci a été proposée à partir des valeurs identifiées pour d'autres matériaux (Yvonnet et al., 2011; Wolfer, 2011). Une étude de sensibilité aux longueurs caractéristiques des cavités a été présentée dans un premier temps. Il en ressort que l'effet de surface des cavités intergranulaires

est faible dans le cadre de cette application, à cause de la faible porosité de ces cavités. Il devient non-négligeable dès lors que la taille des cavités intergranulaires est inférieure à 5 nm. L'effet de surface des cavités intragranulaires est non-négligeable, voire très important sur les coefficients B_b et G_b relatifs à la prise en compte de la pression p_b et de la tension de surface γ_b des cavités intragranulaires.

Dans un second temps, l'étude de sensibilité a été complétée par une application numérique où des conditions d'accident de réactivité ont été considérées. Les évolutions des paramètres de la loi de comportement élastique proposée pour l'UO_2 irradié au cours du temps ont été déterminées pour l'essai REP Na 3 réalisé dans le cœur CABRI. Les paramètres matériaux (porosités, tailles des cavités et propriétés de la matrice vierge) sont issus d'une simulation réalisée avec le code SCANAIR correspondant à cet essai. Il a été observé que les deux modèles proposés conduisent aux mêmes résultats car la porosité intergranulaire est très faible. L'effet de surface à l'échelle des cavités intragranulaires n'est pas négligeable, en particulier au début du transitoire où les cavités sont petites (1 nm). L'étude a été menée près du centre de la colonne fissile où les cavités grandissent plus fortement qu'en périphérie, à cause d'une température plus importante. Bien que les porosités grossissent fortement, un effet de surface sur le comportement effectif peut tout de même y être observé.

Conclusions et perspectives

Bilan du travail réalisé

Le dioxyde d'uranium irradié, combustible des réacteurs nucléaires à eau pressurisée, est un matériau hétérogène qui subit de nombreuses transformations microstructurales durant son séjour en réacteur. Deux populations de bulles pressurisées par des gaz de fissions apparaissent notamment au cours de l'irradiation : des bulles intergranulaires de forme aplatie dont la taille varie de quelques dizaines à plusieurs centaines de nanomètres et des bulles intragranulaires de forme plutôt sphérique dont la taille est de l'ordre du nanomètre. Des travaux récents menés à l'IRSN dans le cadre de la thèse de Colbert (2012) ont montré qu'il existe un effet de surface à l'échelle des bulles nanométriques qui modifie le comportement élastique effectif du combustible. Ce travail a consisté à proposer un modèle micromécanique analytique capable de tenir compte de cette microstructure hétérogène ainsi que de l'effet de surface afin de décrire le comportement élastique effectif de ce matériau nanoporeux saturé.

L'effet de surface trouve son origine dans l'existence d'une zone perturbée de quelques rangées d'atomes entre les cavités et la matrice d'UO_2. Le modèle retenu pour décrire cette zone perturbée du point de vue de la mécanique des milieux continus est le modèle d'interface imparfaite cohérente. Il est particulièrement adapté à la modélisation de l'effet de surface à l'échelle nanométrique (Mitrushchenkov et al., 2010; Yvonnet et al., 2011) et conduit plus aisément à des modèles micromécaniques analytiques qu'une description par une interphase. Le modèle, qui postule la continuité du déplacement et la discontinuité du vecteur contrainte à travers l'interface, repose sur une équation d'équilibre et une loi de comportement surfacique. Cette dernière est composée d'une précontrainte, appelée également *tension de surface*, et d'une partie élastique, supposées isotrope dans le plan tangent à l'interface.

La démarche mise en œuvre dans ce travail est fondée sur une modélisation multi-échelles et s'appuie sur des techniques d'homogénéisation en mécanique des matériaux, plus particulièrement sur l'approche par motifs morphologiques représentatifs qui permet de tenir compte de l'arrangement local des phases (Stolz et Zaoui, 1991). Cette approche consiste à décomposer le volume élémentaire représentatif du matériau étudié en différents sous-domaines appelés motifs morphologiques représentatifs. Dans le cadre de cette étude, deux motifs ont été définis afin d'étudier le comportement élastique effectif des matériaux contenant des nano-cavités sphériques et sphéroïdales : un motif $\mathcal{S}$ relatif au cavités sphériques et un motif $\mathcal{E}$ relatif aux cavités sphéroïdales. Les modèles micromécaniques reposent sur la résolution de problèmes auxiliaires où les motifs sont entourés d'un milieu infini soumis à un chargement homogène à l'infini. Le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$ a été résolu

quelles que soient les propriétés élastiques du milieu infini en s'appuyant sur les travaux de Duan et al. (2005b). Le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ a été résolu dans le cas particulier où le milieu infini est la matrice. Ainsi, seules des estimations de type Mori et Tanaka généralisées sont établies pour les matériaux contenant des nano-cavités sphéroïdales. Il apparait que, malgré cette simplification, le problème à résoudre ne dispose pas de solution analytique simple. Il est donc résolu asymptotiquement de façon approchée en s'appuyant sur les travaux de Cherkaoui et al. (1995) et sur l'équivalence entre une interphase fine rigide et une interface imparfaite cohérente.

Sur le plan théorique, l'apport principal de ce travail est un modèle micromécanique permettant de décrire le comportement poroélastique des matériaux nanoporeux saturés dont les cavités sont sphériques et sphéroïdales. Il repose sur :

- **une partie élastique caractérisée par un tenseur de rigidité effectif.** Ce tenseur est estimé à partir d'un modèle de type Mori et Tanaka généralisé qui permet de prendre en compte des distributions spatiales ellipsoïdales des centres des cavités, des distributions de tailles de cavités, voire éventuellement d'autres types d'hétérogénéités. Il apparait que, lorsque les cavités sont de grande taille ou que les interfaces imparfaites cohérentes sont *souples*, les estimations tendent vers les estimations de Ponte Castañeda et Willis (1995) correspondantes pour des matériaux poreux sans effet de surface. Lorsque les cavités sont très petites ou lorsque les interfaces imparfaites cohérentes sont *rigides*, les estimations tendent vers les estimations de Ponte Castañeda et Willis (1995) correspondantes pour des matériaux où les cavités sont remplacées par des inclusions rigides. Lorsque le matériau contient uniquement des nano-cavités sphériques distribuées aléatoirement de façon isotrope, l'estimation correspond à celle déjà établie par Duan et al. (2005b).

- **une partie permettant de tenir compte de l'effet des pressions appliquées sur les bords des cavités nanométriques.** L'influence des pressions internes sur la contrainte macroscopique est décrite par l'intermédiaire de tenseurs de Biot usuellement introduits pour l'étude du comportement mécanique des matériaux poreux saturés. Leurs expressions, corrigées afin de tenir compte des interfaces imparfaites cohérentes entre les cavités nanométriques et la matrice, reposent sur la solution du problème de localisation résolu dans le cadre des estimations de type Mori et Tanaka généralisées. Cela conduit à un modèle dépendant de la forme des cavités, de leur taille et de la symétrie ellipsoïdale de la distribution spatiale de leurs centres. Il a été montré que lorsque la taille des cavités augmente à porosité fixée, les tenseurs de Biot ainsi construits tendent vers leurs homologues classiques sans effet de surface. Lorsque la taille des cavités diminue à porosité fixe, ils tendent à s'annuler. L'effet de la pression interne devient alors négligeable. Dans le cadre des applications présentées, il est apparu que plus les cavités sont petites, plus l'effet de la pression sur la contrainte macroscopique est faible.

- **une partie permettant de tenir compte de l'effet des tensions de surface**. L'influence de la tension de surface est décrite par l'intermédiaire de tenseurs nouvellement introduits (notés $\boldsymbol{G}_i$ dans ce document). Leurs expressions sont établies à partir d'une démarche similaire à celle mise en œuvre pour déterminer les tenseurs de Biot.

Ces tenseurs sont également dépendants de la forme sphéroïdale des cavités, de leur taille et de la forme ellipsoïdale de la distribution spatiale de leurs centres. Lorsque la taille des cavités augmente à porosité fixée, ces tenseurs tendent à s'annuler. L'effet de la tension de surface devient alors négligeable. Dans le cas particulier où les cavités sont sphériques (de rayon r), il a été montré que prendre en compte la tension de surface γ_s revient à soustraire $2\gamma_s/r$ à la pression p dans les cavités.

Ce travail a également été l'occasion de replacer dans le cadre de l'approche par motifs les modèles existants capables de décrire le comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux dont les cavités sont sphériques (Duan et al., 2005b; Le Quang et He, 2008; Brisard et al., 2010a,b). En effet, il apparait que ces modèles (dans le cas poreux) peuvent être établis en appliquant l'approche par motifs à partir du motif $\mathcal{S}$. Le cadre théorique fourni par cette approche permet d'étendre ces modèles à des assemblages de motifs plus complexes en prenant en compte par exemple un domaine de matrice environnante, des distributions de tailles de cavités, des effets d'amas (Marcadon, 2005; Marcadon et al., 2007)), des distributions spatiales ellipsoïdales des centres des cavités (uniquement dans le cadre des estimations de type Mori et Tanaka généralisées) ou éventuellement d'autres types d'hétérogénéités.

Au cours de cette étude, des bornes de type Voigt et Reuss généralisées pour des matériaux constitués uniquement de nano-cavités sphériques ont également été développées à partir d'assemblages du motif $\mathcal{S}$. Ces bornes améliorent significativement celles de Le Quang et He (2008) qui sont un cas particulier (uniquement dans le cas poreux) des bornes développées où le motif $\mathcal{S}$ ne contient pas de domaine de matrice.

Les modèles micromécaniques développés reposent sur la solution de problèmes auxiliaires. Afin d'obtenir des modèles analytiques, la résolution du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ s'appuie sur des hypothèses simplificatrices. De façon à vérifier la pertinence de ces hypothèses et à identifier leurs limites, ce problème a également été résolu numériquement à partir de simulations de type éléments finis. La présence d'interfaces imparfaites cohérentes a nécessité l'implémentation d'une formulation spécifique (Yvonnet et al., 2011) dans la plateforme numérique XPER développée à l'IRSN. L'approche par motifs, plus particulièrement le schéma de Mori et Tanaka, a été mis en œuvre à partir de ces résultats numériques. Le modèle numérique ainsi construit a été comparé au modèle analytique. Il est apparu que, dans le cadre de l'application présentée, le modèle analytique est pertinent pour des rapports de forme de cavités supérieurs à 0.5, quelle que soit la taille des cavités et pour des rapports de forme compris entre 0.25 et 0.5 pour des tailles de cavités b supérieures à 1 nm. Hors de ces domaines, les résultats du modèle analytique ne sont pas en bon accord avec les résultats numériques.

Sur le plan applicatif, deux modèles micromécaniques, qui reposent sur le résultats théoriques précédents, ont été proposés afin de décrire le comportement du dioxyde d'uranium irradié. Ce matériau est décrit comme un matériau poreux contenant des nano-cavités sphériques (cavités intragranulaires) et sphéroïdales (cavités intergranulaires) pressurisées et orientées aléatoirement. La distribution des centres des cavités est supposée isotrope. Le premier modèle qualifié de *simplifié* tient compte de la tension de surface ainsi que l'élasticité surfacique à l'échelle des cavités sphériques. En revanche, il ne tient compte que de la

tension de surface à l'échelle des cavités sphéroïdales. Le second modèle qualifié de *complet* prend en compte la tension de surface et l'élasticité surfacique pour les deux populations de cavités. Ces modèles ont été appliqués en considérant l'évolution de la microstructure de l'UO_2 au cours d'un transitoire de type RIA. Il est apparu que les deux modèles proposés conduisent à des résultats comparables du fait des faibles porosités intergranulaires observées dans le cadre de cette application. Ils ont été comparés à la partie poroélastique du modèle de Vincent (2007) avec prise en compte partielle des effets de surface (uniquement des tensions de surface). Un effet de surface à l'échelle des cavités sphériques non-négligeable a été observé, notamment sur les parties relatives à la prise en compte des pressions internes et des tensions de surface.

Sur le plan phénoménologique, l'effet de surface présent à l'échelle nanométrique, tel qu'il est modélisé dans ce travail, peut être synthétisé ainsi :

- il tend à rigidifier les matériaux nanoporeux ;
- il diminue l'effet des pressions internes dans les cavités sur la contrainte macroscopique ;
- les tensions de surface s'opposent à l'effet des pressions dans les cavités.

Les zones perturbées se présentent comme des couches raides en tension autour des cavités qui apportent une certaine *raideur* au matériau et qui lui permettent de *résister* à l'effet des pressions internes.

Perspectives

Les modèles construits dans ce travail font intervenir des paramètres matériaux qui caractérisent le comportement mécanique des zones perturbées. Pour les applications numériques menées dans le cadre de cette étude, ces paramètres ont été extrapolés pour les surfaces de l'UO_2 à partir de valeurs connues pour d'autres matériaux. Afin d'évaluer avec précision l'effet de surface pour ce matériau, il est nécessaire d'identifier ces paramètres en s'appuyant par exemple sur les travaux de Yvonnet et al. (2011), fondés sur des calculs atomistiques.

Le modèle micromécanique proposé pour déterminer les propriétés effectives des matériaux contenant des nano-cavités sphéroïdales repose sur des hypothèses simplificatrices qui conduisent dans certaines situations à des prédictions peu pertinentes. Une amélioration du modèle peut potentiellement être envisagée en résolvant de façon exacte le problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{E}$ lorsque le milieu infini est la matrice. La forme des champs solutions de ce problème peut être déterminée en s'inspirant des travaux de Duan et al. (2005d) et Ou et al. (2009).

Dans la gamme de températures atteintes lors de transitoires de type RIA, le comportement de l'UO_2 irradié est principalement élastoplastique endommageable. À l'heure actuelle, l'effet de surface a uniquement été mis en évidence sur le comportement élastique de ce matériau. Néanmoins, un effet sur le comportement plastique ne peut être exclu. Des travaux peuvent être engagés dans cette direction en s'appuyant sur ceux de Dormieux et Kondo (2010), Monchiet et Kondo (2012), Dormieux et Kondo (2013) et Monchiet et Kondo (2013).

Il est également possible d'envisager une validation *globale* du modèle proposé en déterminant les propriétés effectives de volumes élémentaires représentatifs numériques contenant des nano-cavités sphériques et sphéroïdales. Dans le cadre d'une telle validation, l'extension de la formulation éléments finis développée par Yvonnet et al. (2011) au cas périodique peut également être envisagée.

Annexes techniques

Annexe A

Éléments concernant le modèle de Vincent (2007); Vincent et al. (2009)

Dans le cadre de la démarche mise en œuvre par Vincent (2007) pour établir un modèle poroélastique à deux populations de cavités, les modules de compressibilité k_2^{hom} et de cisaillement μ_2^{hom} issus du second changement d'échelle correspondent à ceux issus du modèle de Ponte Castañeda et Willis (1995) (cf. section 2.3 du chapitre 2) pour un matériau contenant des cavités sphéroïdales oblates orientées et distribuées aléatoirement de façon isotrope. Le module de compressibilité k_2^{hom} s'exprime de la façon suivante :

$$k_2^{\text{hom}} = -\frac{k_n}{k_d}. \tag{A.1}$$

où

$$\begin{aligned} k_n = \; & 2k_1^{\text{hom}}\mu_1^{\text{hom}}\left\{k_1^{\text{hom}}\left[2f_e - (3-4f_e)w^2\right]\left[-2+w^2+w^4\right]\right. \\ & +2(1-f_e)w^2\left(1+w^2-2w^4\right)\mu_1^{\text{hom}} \\ & +w\arccos(w)\left[2\sqrt{1-w^2}\left(3k_1^{\text{hom}}\left(1+f_e-(1-2f_e)w^2\right)\right.\right. \\ & \left.\left.\left.+(1-f_e)(1-4w^2)\mu_1^{\text{hom}}\right) - 9k_1^{\text{hom}}w\arccos(w)\right]\right\} \end{aligned} \tag{A.2}$$

et

$$\begin{aligned} k_d = \; & (w^2-1)\left\{3f_ek_1^{\text{hom}}\left[1+2w^2\right]\left[k_1^{\text{hom}}\left(2+w^2\right)+w^2\mu_1^{\text{hom}}\right]\right. \\ & \left.+2w^2\mu_1^{\text{hom}}\left[3k_1^{\text{hom}}\left(2+w^2\right)+2\mu_1^{\text{hom}}+4w^2\mu_1^{\text{hom}}\right]\right\} \\ & +w\arccos(w)\left\{\sqrt{1-w^2}\left[9f_ek_1^{\text{hom}^2}\left(1+2w^2\right)-3k_1^{\text{hom}}\left(4+f_e-4(1+f_e)w^2\right)\mu_1^{\text{hom}}\right.\right. \\ & \left.\left.-4\left(1-4w^2\right)\mu_1^{\text{hom}^2}\right]+18k_1^{\text{hom}}w\mu_1^{\text{hom}}\arccos(w)\right\} \end{aligned} \tag{A.3}$$

Les coefficients k_1^{hom} et μ_1^{hom} sont les modules de compressibilité et de cisaillement de la matrice à la seconde échelle, c'est-à-dire les modules effectifs identifiés lors du premier changement d'échelle. Les scalaires w et f_e désignent respectivement le rapport de forme et la porosité des cavités sphéroïdales.

Le résultat analytique pour μ_2^{hom} est trop compliqué pour être donné sous la forme d'une expression de scalaires. Un développement limité à l'ordre 1 en w conduit à l'expression suivante (avec $f_e = \alpha_c w$ où α_c est donné à l'équation (A.5)) :

$$\begin{aligned}\frac{\mu_2^{\text{hom}}}{\mu_1^{\text{hom}}} = \; & \Big\{5625\pi^2 w^2 (3k_1^{\text{hom}} + \mu_1^{\text{hom}})^2 (3k_1^{\text{hom}} + 2\mu_1^{\text{hom}})^2 \\ & -96 {f_e}^2 (k_1^{\text{hom}} + 2\mu_1^{\text{hom}})(9k_1^{\text{hom}} + 4\mu_1^{\text{hom}})^2 (9k_1^{\text{hom}} + 8\mu_1^{\text{hom}}) \\ & -25 f_e w \Big[81 {k_1^{\text{hom}}}^4 \Big(800w + 9\pi(4 + 15\pi w)\Big) + 108 {k_1^{\text{hom}}}^3 \Big(3\pi + 5\big(304 + 45\pi^2\big)w\Big)\mu_1^{\text{hom}} \\ & -54 {k_1^{\text{hom}}}^2 \Big(68\pi - 5(496 + 69\pi^2)w\Big){\mu_1^{\text{hom}}}^2 - 24 k_1^{\text{hom}} \Big(96\pi - 5(368 + 45\pi^2)w\Big){\mu_1^{\text{hom}}}^3 \\ & - 8(48\pi - 640w - 45\pi^2 w){\mu_1^{\text{hom}}}^4\Big]\Big\} \Big/ \\ & \Big[9\Big(25\pi w(3k_1^{\text{hom}} + \mu_1^{\text{hom}})(3k_1^{\text{hom}} + 2\mu_1^{\text{hom}}) + 8 f_e (k_1^{\text{hom}} + 2\mu_1^{\text{hom}})(9k_1^{\text{hom}} + 4\mu_1^{\text{hom}})\Big)^2\Big]\end{aligned} \tag{A.4}$$

Le paramètre α_c s'exprime de la façon suivante :

$$\alpha_c = \frac{4}{3}\pi b^3 N_c \tag{A.5}$$

où b est le demi-grand axe des cavités sphéroïdales oblates et N_c le nombre de cavités sphéroïdales par unité de volume.

Annexe B

Tenseurs $\mathbb{S}^E$ et $\mathbb{N}$

Dans cette annexe, les expressions du tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_0)$ et du tenseur $\mathbb{N}(\mathbb{C}_0)$ pour une inclusion sphéroïdale sont données. Le tenseur de rigidité $\mathbb{C}_0$ est supposé isotrope (ν_0 correspond au coefficient de Poisson). L'axe de révolution du sphéroïde est porté par le vecteur unitaire $\boldsymbol{n}$. Les longueurs des demi-axes du sphéroïde sont notées a et b où a correspond à la longueur du demi-axe porté par $\boldsymbol{n}$. Le rapport de forme a/b est noté w ($w < 1$ cas aplati, $w > 1$ cas allongé, $w = 1$ cas sphérique). Les tenseurs $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_0)$ et $\mathbb{N}(\mathbb{C}_0)$ pour une inclusion sphéroïdale sont isotropes transverses. Les tenseurs d'ordre 4 de la base d'isotropie transverse $\left\{\mathbb{E}_L \;\; \mathbb{F} \;\; {}^{\mathrm{T}}\mathbb{F} \;\; \mathbb{J}_T \;\; \mathbb{K}_T \;\; \mathbb{K}_L\right\}$ sont donc introduits et s'expriment de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}_L = \boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n}, \quad \mathbb{J}_T = \frac{1}{2}\boldsymbol{i}_T\otimes\boldsymbol{i}_T,\\
&\mathbb{K}_E = \frac{1}{6}\big(2\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n}-\boldsymbol{i}_T\big)\otimes\big(2\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n}-\boldsymbol{i}_T\big),\\
&\mathbb{K}_T = \mathbb{I}_T - \mathbb{J}_T, \quad \mathbb{K}_L = \mathbb{K} - \mathbb{K}_T - \mathbb{K}_E,\\
&\mathbb{F} = \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{i}_T\otimes\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n} \quad \text{et} \quad {}^{\mathrm{T}}\mathbb{F} = \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{n}\otimes\boldsymbol{i}_T
\end{aligned} \tag{B.1}$$

Le tenseur d'Eshelby peut se décomposer sous la forme suivante :

$$\mathbb{S}^E = S_1^E\mathbb{E}_L + S_2^E\mathbb{J}_T + S_3^E\mathbb{F} + S_4^E\,{}^{\mathrm{T}}\mathbb{F} + S_5^E\mathbb{K}_L + S_6^E\mathbb{K}_T \tag{B.2}$$

où

$$\begin{aligned}
S_1^E &= \frac{1}{\Delta}\Big[2(1-\nu_0) - 2(2-\nu_0)w^2 - \Big(1-2\nu_0-2(2-\nu_0)w^2\Big)L(w)\Big]\\
S_2^E &= \frac{1}{\Delta}\Big[-w^2 + \frac{3}{2}L(w)\Big]\\
S_3^E &= \frac{\sqrt{2}}{2\Delta}\Big[2w^2 - \Big(1-2\nu_0+2(1+\nu_0)w^2\Big)L(w)\Big]\\
S_4^E &= \frac{\sqrt{2}}{2\Delta}\Big[4\nu_0 + 2(1-2\nu_0)w^2 - \Big(1+4\nu_0+2(1-2\nu_0)w^2\Big)L(w)\Big]\\
S_5^E &= \frac{1}{\Delta}\Big[2(1-\nu_0) + 2\nu_0 w^2 - \Big(2-\nu_0+(1+\nu_0)w^2\Big)L(w)\Big]\\
S_6^E &= \frac{1}{4\Delta}\Big[-2w^2 + \Big(7-8\nu_0-4(1-2\nu_0)w^2\Big)L(w)\Big]
\end{aligned} \tag{B.3}$$

et le tenseur $\mathbb{N}$ peut se décomposer sous la forme suivante :

$$\mathbb{N} = N_1\mathbb{E}_L + N_2\mathbb{J}_T + N_3\mathbb{F} + N_4\,{}^{\mathrm{T}}\mathbb{F} + N_5\mathbb{K}_L + N_6\mathbb{K}_T \tag{B.4}$$

où

$$\begin{aligned}
N_1 &= -\frac{1}{\Delta'}\Big[2(1+2\nu_0)w + 4(2-\nu_0)w^3 \\
&\qquad + \Big(1 - 2\nu_0 - 2(4+\nu_0)w^2 - 4(2-\nu_0)w^4\Big)\frac{L(w)}{w}\Big] \\
N_2 &= \frac{1}{2\Delta'}\Big[-10w + 3\Big(1+4w^2\Big)\frac{L(w)}{w}\Big] \\
N_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}\Delta'}\Big[2(3-2\nu_0)w + 4(1+\nu_0)w^3 \\
&\qquad - \Big(1 - 2\nu_0 + 2(5-\nu_0)w^2 + 4(1+\nu_0)w^4\Big)\frac{L(w)}{w}\Big] \\
N_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}\Delta'}\Big[2(3+4\nu_0)w + 4(1-2\nu_0)w^3 \\
&\qquad - \Big(1 + 4\nu_0 + 2(5+2\nu_0)w^2 + 4(1-2\nu_0)w^4\Big)\frac{L(w)}{w}\Big] \\
N_5 &= \frac{1}{\Delta'}\Big[2(4-\nu_0)w + 2(1+\nu_0)w^3 \\
&\qquad - \Big(2 - \nu_0 + (11-\nu_0)w^2 + 2(1+\nu_0)w^4\Big)\frac{L(w)}{w}\Big] \\
N_6 &= \frac{1}{4\Delta'}\Big[-2(9-8\nu_0)w + 8(1-2\nu_0)w^3 \\
&\qquad + \Big(7 - 8\nu_0 + 8(2-\nu_0)w^2 - 8(1-2\nu_0)w^4\Big)\frac{L(w)}{w}\Big]
\end{aligned} \tag{B.5}$$

La fonction $L(w)$ est de la forme suivante :

$$L(w) = \begin{cases} \dfrac{w\Big(\arccos(w) - w\sqrt{1-w^2}\Big)}{(1-w^2)^{3/2}} & \text{si } w < 1 \\[2ex] \dfrac{w\Big(w\sqrt{w^2-1} - \operatorname{arccosh}(w)\Big)}{(w^2-1)^{3/2}} & \text{si } w > 1 \end{cases} \tag{B.6}$$

et les constantes Δ et Δ' s'expriment de la façon suivante :

$$\Delta = 2(1-\nu_0)(1-w^2) \tag{B.7}$$

$$\Delta' = b(1+w)\Delta \tag{B.8}$$

Lorsque l'inclusion est sphérique (c'est-à-dire $w = 1$), il vient que :

$$\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_0) = \frac{1+\nu_0}{3(1-\nu_0)}\mathbb{J} + \frac{2}{15}\frac{4-5\nu_0}{1-\nu_0}\mathbb{K} \tag{B.9}$$

et

$$\mathbb{N}(\mathbb{C}_0) = \mathbb{O} \tag{B.10}$$

Le tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_0)$ dépend seulement du coefficient de Poisson du milieu de référence ν_0 et du rapport de forme de l'inclusion w. Le tenseur $\mathbb{N}(\mathbb{C}_0)$ dépend de ν_0, de w et de la longueur b.

Annexe C

Géométrie différentielle des surfaces

Quelques éléments concernant la théorie des surfaces sont rappelés dans cette annexe qui s'appuie sur le cours de Garrigues (1999). L'objectif principal est de donner les expressions générales du tenseur de courbure et de la divergence surfacique d'un champ tensoriel surfacique tangent d'ordre deux. Leur expressions dans le cas particulier d'une surface sphérique sont également fournies. Dans la suite, les indices grecs peuvent prendre les valeurs 1 et 2 et la convention de sommation d'Einstein est utilisée (sommation sur les indices qui apparaissent deux fois dans un monôme, une fois en haut et une fois en bas). La surface S est composée de l'ensemble des points M caractérisés par le vecteur position $\boldsymbol{x}$ tel que $\boldsymbol{x} = f(x^1, x^2)$. Le couple (x^1, x^2) est la paramétrisation de la surface S. Les vecteurs de la base naturelle associée à la paramétrisation (x^1, x^2) sont définis comme :

$$\boldsymbol{a}_\alpha = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial x^\alpha} = \partial_\alpha \boldsymbol{x} \tag{C.1}$$

Ces deux vecteurs forment une base pour les vecteurs tangents à la surface S au point M. L'espace généré par cette base est appelé *plan tangent* ou *plan transverse*. La normale unitaire à la surface S en M est définie comme :

$$\boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{a}_1 \wedge \boldsymbol{a}_2}{||\boldsymbol{a}_1 \wedge \boldsymbol{a}_2||} \tag{C.2}$$

La base duale $(\boldsymbol{a}^1, \boldsymbol{a}^2)$ est définie comme :

$$\boldsymbol{a}^\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\beta = \delta^\alpha_\beta \tag{C.3}$$

où δ^α_β est le symbole de Kronecker.

Un vecteur $\boldsymbol{u}$ tangent à la surface S peut s'écrire de la façon suivante :

$$\boldsymbol{u} = u_\alpha \boldsymbol{a}^\alpha = u^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha \tag{C.4}$$

Les quantités u_α sont les composantes dans la base duale, appelées covariantes, et les quantités u^α sont les composantes dans la base naturelle, appelées contravariantes.

Un tenseur d'ordre deux $\boldsymbol{T}$ dit *tangent* est un tenseur tel que :

$$\boldsymbol{T} = T^{\alpha\beta}\boldsymbol{a}_\alpha \otimes \boldsymbol{a}_\beta = T_{\alpha\beta}\boldsymbol{a}^\alpha \otimes \boldsymbol{a}^\beta = T^\alpha_{\ \beta}\boldsymbol{a}_\alpha \otimes \boldsymbol{a}^\beta = T_\alpha^{\ \beta}\boldsymbol{a}^\alpha \otimes \boldsymbol{a}_\beta \tag{C.5}$$

Les composantes $T^{\alpha\beta}$ de $\boldsymbol{T}$ sont dites complètement contravariantes, les composantes $T_{\alpha\beta}$ complètement covariantes, les composantes $T_\alpha^{\ \beta}$ 1-covariante 2-contravariante et les composantes $T^\alpha_{\ \beta}$ 1-contravariante 2-covariante.

La base physique $(\tilde{\boldsymbol{a}}_1, \tilde{\boldsymbol{a}}_2)$ est définie comme :

$$\tilde{\boldsymbol{a}}_1 = \frac{\boldsymbol{a}_1}{||\boldsymbol{a}_1||}, \quad \tilde{\boldsymbol{a}}_2 = \frac{\boldsymbol{a}_2}{||\boldsymbol{a}_2||} \tag{C.6}$$

La matrice de passage de la base naturelle à la base physique est notée $\boldsymbol{P}$ et est diagonale :

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{||\boldsymbol{a}_1||} & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{||\boldsymbol{a}_2||} \end{pmatrix} \tag{C.7}$$

La matrice de passage de la base physique à la base naturelle est notée $\boldsymbol{Q}$ où $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P}^{-1}$. Les composantes dans la base physique d'un vecteur $\boldsymbol{V}$ tangent et d'un tenseur surfacique d'ordre deux $\boldsymbol{T}$ sont notées respectivement $\tilde{V}^\alpha$ et $\tilde{T}^{\alpha\beta}$. Les règles de passage suivantes sont rappelées :

$$T^{\alpha\beta} = \tilde{T}^{\gamma\mu} P_\gamma^{\ \alpha} P_\mu^{\ \beta}, \quad \tilde{V}^\alpha = V^\beta Q_\beta^{\ \alpha} \tag{C.8}$$

Le tenseur métrique de surface $\boldsymbol{A}$ est le tenseur dont les composantes complètement covariantes et complètement contravariantes s'expriment de la façon suivante :

$$A_{\alpha\beta} = \boldsymbol{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\beta, \quad A^{\alpha\beta} = \boldsymbol{a}^\alpha \cdot \boldsymbol{a}^\beta \tag{C.9}$$

Les composantes covariantes du tenseur de courbure $\boldsymbol{b}$ s'expriment de la façon suivante :

$$b_{\alpha\beta} = -\boldsymbol{a}_\alpha \cdot \partial_\beta \boldsymbol{n} = \boldsymbol{n} \cdot \partial_\beta \boldsymbol{a}_\alpha \tag{C.10}$$

et les coefficients de connexion Riemannienne sont exprimés de la façon suivante :

$$\Gamma^\gamma_{\alpha\beta} = \boldsymbol{a}^\gamma \cdot \partial_\alpha \boldsymbol{a}_\beta = \boldsymbol{a}^\gamma \cdot \partial_\beta \boldsymbol{a}_\alpha = \frac{1}{2} A^{\gamma\mu}\Big(\partial_\alpha A_{\mu\beta} + \partial_\beta A_{\mu\alpha} - \partial_\mu A_{\alpha\beta}\Big) \tag{C.11}$$

Un champ tensoriel *surfacique* est une application qui associe un tenseur à un point M de S caractérisé par le vecteur position $\boldsymbol{x}$. Soit $f(\boldsymbol{x})$ un champ scalaire surfacique. Le gradient surfacique de $f(\boldsymbol{x})$ est un vecteur tangent défini comme :

$$df = \mathrm{grad}_s f \cdot \boldsymbol{dx}, \quad \forall \boldsymbol{dx} = dx^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha \tag{C.12}$$

et dont les composants covariantes s'expriment de la façon suivante :

$$(\mathrm{grad}_s f)_\alpha = \partial_\alpha f \tag{C.13}$$

Soit $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ un champ vectoriel surfacique tangent. Le gradient de surface (ou surfacique) de $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ est un tenseur d'ordre deux défini comme :

$$\mathrm{Tg}(\boldsymbol{du}) = \mathrm{grad}_s \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{dx}, \quad \forall \boldsymbol{dx} = dx^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha \tag{C.14}$$

L'opération Tg(.) extrait la partie tangente. Les composantes complètement covariantes du gradient surfacique de $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ s'expriment alors :

$$(\mathrm{grad}_s \boldsymbol{u})_{\alpha\beta} = \partial_\beta u_\alpha - u_\mu \Gamma^\mu_{\beta\alpha} \tag{C.15}$$

La divergence surfacique d'un champ vectoriel surfacique tangent $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ est un scalaire défini comme :

$$\mathrm{div}_s \boldsymbol{u} = \mathrm{grad}_s \boldsymbol{u} : \boldsymbol{A} = \mathrm{Tr}(\mathrm{grad}_s \boldsymbol{u}) \tag{C.16}$$

et peut s'exprimer de la façon suivante :

$$(\mathrm{div}_s \boldsymbol{u})^\alpha{}_\alpha = \partial_\alpha u^\alpha + u^\mu \Gamma^\alpha_{\alpha\mu} \tag{C.17}$$

Soit $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x})$ un champ tensoriel surfacique tangent d'ordre deux. Le gradient de surface (ou surfacique) de $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x})$ est un tenseur d'ordre trois défini comme :

$$\mathrm{Tg}(\boldsymbol{dT}) = \mathrm{grad}_s \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{dx}, \quad \forall \boldsymbol{dx} = dx^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha \tag{C.18}$$

et dont les composants 12 contravariantes 3 covariantes s'exprime de la façon suivante :

$$(\mathrm{grad}_s \boldsymbol{T})^{\alpha\beta}{}_\gamma = \partial_\gamma T^{\alpha\beta} + T^{\mu\beta}\Gamma^\alpha_{\gamma\mu} + T^{\alpha\mu}\Gamma^\beta_{\gamma\mu} \tag{C.19}$$

La divergence surfacique d'un champ de tenseurs surfacique tangent du second ordre $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x})$ est un vecteur défini comme :

$$\mathrm{div}_s \boldsymbol{T} = \mathrm{grad}_s \boldsymbol{T} : \boldsymbol{A} \tag{C.20}$$

Les composantes complètement contravariantes de la divergence surfacique de $\boldsymbol{T}$ s'expriment :

$$(\mathrm{div}_s \boldsymbol{T})^\alpha = \partial_\gamma T^{\alpha\gamma} + T^{\mu\gamma}\Gamma^\alpha_{\gamma\mu} + T^{\alpha\mu}\Gamma^\gamma_{\gamma\mu} \tag{C.21}$$

Il est possible de montrer la relation suivante :

$$\mathrm{div}_s(\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{u}) = \mathrm{div}_s({}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}) \cdot \boldsymbol{u} + {}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T} : \mathrm{grad}_s \boldsymbol{u} \tag{C.22}$$

De plus, si $\boldsymbol{T}$ est symétrique, il est évident que :

$$\mathrm{div}_s(\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{u}) = \mathrm{div}_s(\boldsymbol{T}) \cdot \boldsymbol{u} + \boldsymbol{T} : \mathrm{grad}_s \boldsymbol{u} \tag{C.23}$$

Preuve :

Soit $\boldsymbol{u}$ un vecteur surfacique tangent et $\boldsymbol{T}$ un tenseur d'ordre deux surfacique tangent. Il est possible de montrer les relations suivantes à partir des expressions des opérateurs différentiels présentés ci-dessus :

$$\big(\mathrm{div}_s(\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{u})\big)^\alpha{}_\alpha = \frac{\partial T^{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha} u_\beta + T^{\alpha\beta}\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + T^{\mu\beta} u_\beta \Gamma^\alpha_{\alpha\mu} \tag{C.24}$$

$$\left(\mathrm{div}_s({}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T})\cdot\boldsymbol{u}\right)^{\alpha}{}_{\alpha} = \frac{\partial T^{\gamma\alpha}}{\partial x_\gamma}u_\alpha + T^{\gamma\mu}\Gamma^{\alpha}_{\gamma\mu}u_\alpha + T^{\mu\alpha}u_\alpha\Gamma^{\gamma}_{\gamma\mu} \tag{C.25}$$

$$\left({}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T} : \mathrm{grad}_s\boldsymbol{u}\right)^{\alpha}{}_{\alpha} = T^{\beta\alpha}\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - T^{\beta\alpha}u_\mu\Gamma^{\mu}_{\beta\alpha} \tag{C.26}$$

En additionnant la relation C.25 (en remplaçant γ par α et α par β) et la relation C.26 (en remplaçant α par β et β par α), il vient que :

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{div}_s({}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T})\cdot\boldsymbol{u} + {}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T} : \mathrm{grad}_s\boldsymbol{u}\right)^{\alpha}{}_{\alpha} = \frac{\partial T^{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha}u_\beta \quad & + T^{\alpha\mu}u_\beta\Gamma^{\beta}_{\alpha\mu} + T^{\mu\beta}u_\beta\Gamma^{\alpha}_{\alpha\mu} \\ & + T^{\alpha\beta}\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - T^{\alpha\beta}u_\mu\Gamma^{\mu}_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{C.27}$$

En changeant l'indice μ par β et l'indice β par μ dans le dernier monôme, la relation C.28 devient simplement :

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{div}_s({}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T})\cdot\boldsymbol{u} + {}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T} : \mathrm{grad}_s\boldsymbol{u}\right)^{\alpha}{}_{\alpha} &= \frac{\partial T^{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha}u_\beta + T^{\mu\beta}u_\beta\Gamma^{\alpha}_{\alpha\mu} + T^{\alpha\beta}\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \\ &= \left(\mathrm{div}_s(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{u})\right)^{\alpha}{}_{\alpha}\end{aligned} \tag{C.28}$$

La base naturelle $\{\boldsymbol{a}_\alpha\}$ peut être complétée par la normale unitaire $\boldsymbol{n}$ pour former une base de l'espace. Un point N de l'espace peut alors être repéré par le vecteur position $\boldsymbol{x'}$ tel que :

$$\boldsymbol{x'} = x^\alpha\boldsymbol{a}_\alpha + x^3\boldsymbol{n} = \boldsymbol{x} + x^3\boldsymbol{n} \tag{C.29}$$

avec $\boldsymbol{x}$ le vecteur position associé au point M correspondant au projeté orthogonal du point N sur la surface S et x^3 est la distance entre les points $\boldsymbol{x'}$ et $\boldsymbol{x}$ (avec $x_3 = x^3$).

Soit $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x'})$ un champ vectoriel spatial que l'on décompose de la façon suivante :

$$\boldsymbol{v} = v^\alpha\boldsymbol{a}_\alpha + v^3\boldsymbol{n} \tag{C.30}$$

Le gradient spatial de $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x'})$ peut s'écrire :

$$\mathrm{grad}\boldsymbol{v} = \Big[\mathrm{grad}_s\mathrm{Tg}(\boldsymbol{v}) - v^3\boldsymbol{b} + \boldsymbol{n}\otimes\mathrm{grad}_s v^3 + \boldsymbol{n}\otimes\big(\boldsymbol{b}\cdot\mathrm{Tg}(\boldsymbol{v})\big)\Big]\cdot\Big(\boldsymbol{A} - x^3\boldsymbol{B}\Big)^{-1} \tag{C.31}$$

Théorème de la divergence surfacique pour un champ vectoriel surfacique tangent :

Soit $\boldsymbol{u}$ un champ vectoriel surfacique tangent. Soit S_0 une portion de S de contour fermé C_0. Le théorème de la divergence surfacique pour un champ vectoriel surfacique tangent se traduit par la relation suivante :

$$\int_{S_0}\mathrm{div}_s\boldsymbol{u}\;ds = \int_{C_0}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{m}\;dl \tag{C.32}$$

où $\boldsymbol{m}$ est le vecteur unitaire tangent à S, perpendiculaire à C_0 et orienté vers l'extérieur de S_0.

Théorème de la divergence surfacique pour un champ tensoriel surfacique tangent du second ordre :

Soit $\boldsymbol{T}$ un champ tensoriel surfacique tangent d'ordre deux. Le théorème de la divergence surfacique pour un champ tensoriel surfacique tangent du second ordre se traduit par la relation suivante :

$$\int_{S_0} \left(\mathrm{div}_s \boldsymbol{T} + (\boldsymbol{b} : \boldsymbol{T})\boldsymbol{n}\right) \, ds = \int_{C_0} \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{m} \, dl \tag{C.33}$$

où $\boldsymbol{n}$ est le vecteur unitaire normal à S.

Il est remarquable que dans le cas où la base physique est orthonormée (la base naturelle est orthogonale), le tenseur métrique de surface $\boldsymbol{A}$ exprimé dans la base physique correspond au tenseur identité d'ordre deux dans le plan tangent $\boldsymbol{i}_T$ (équation 3.1). De plus, dans une base orthonormée, l'opérateur Tg(.) qui extrait les parties tangentes d'un vecteur $\boldsymbol{u}$ non-tangent et d'un tenseur $\boldsymbol{T}$ d'ordre deux non-tangent correspond à :

$$\mathrm{Tg}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{u}, \quad \mathrm{Tg}(\boldsymbol{T}) = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{T} \tag{C.34}$$

avec $\mathbb{I}_T$ le tenseur identité d'ordre quatre dans le plan tangent (équation 3.2).

Cas particulier d'une surface sphérique :

Le tenseur de courbure est un tenseur d'ordre deux bi-dimensionnel et la divergence surfacique d'un tenseur surfacique d'ordre deux tangent est un vecteur bi-dimensionnel. Il est parfois plus commode de travailler avec des tenseurs tri-dimensionnels. Ces quantités bi-dimensionnelles sont alors complétées avec des zéros pour les composantes normales. Dans la base $(\boldsymbol{n}, \tilde{\boldsymbol{a}}_1, \tilde{\boldsymbol{a}}_2)$, elles sont alors de la forme suivante en notation matricielle :

$$\tilde{b}^{\bullet\bullet} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{b}^{11} & \tilde{b}^{12} \\ 0 & \tilde{b}^{12} & \tilde{b}^{22} \end{pmatrix}, \quad (\widetilde{\mathrm{div}_s \boldsymbol{T}})^{\bullet} = \begin{pmatrix} 0 \\ (\widetilde{\mathrm{div}_s \boldsymbol{T}})^1 \\ (\widetilde{\mathrm{div}_s \boldsymbol{T}})^2 \end{pmatrix}, \, . \tag{C.35}$$

Soit $(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3)$ la base canonique de l'espace. Le cas particulier d'une surface S sphérique de rayon r est considéré. La surface est constituée de l'ensemble des points définis par le vecteur $\boldsymbol{x}$ tel que :

$$\boldsymbol{x} = f(\theta, \phi) \;\; \text{avec } f : (\theta, \phi) \rightarrow \begin{pmatrix} r \sin\theta \cos\phi \\ r \sin\theta \sin\phi \\ r \cos\theta \end{pmatrix} \tag{C.36}$$

où $r \in [0, \infty]$, $\theta \in [0, \pi]$ et $\phi \in [0, 2\pi]$.

Les vecteurs de la base naturelle $(\boldsymbol{a}_\theta, \boldsymbol{a}_\phi)$ et le vecteur normal unitaire $\boldsymbol{n}$ à la surface s'expriment de la façon suivante (d'après les équations (C.1) et (C.2)) dans la base canonique :

$$\boldsymbol{a}_\theta = \begin{pmatrix} r\cos\theta\cos\phi \\ r\cos\theta\sin\phi \\ -r\sin\theta \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_\phi = \begin{pmatrix} -r\sin\theta\sin\phi \\ r\cos\phi\sin\theta \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\phi\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix}, \tag{C.37}$$

les vecteurs de la base duale $(\boldsymbol{a}^\theta, \boldsymbol{a}^\phi)$ (d'après l'équation (C.3)) :

$$\boldsymbol{a}^\theta = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi \\ \cos\theta\sin\phi \\ -\sin\theta \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{a}^\phi = \frac{1}{r\sin\theta}\begin{pmatrix} -\sin\phi \\ \cos\phi \\ 0 \end{pmatrix} \tag{C.38}$$

et les vecteurs de la base physique $(\tilde{\boldsymbol{a}}_\theta, \tilde{\boldsymbol{a}}_\phi)$ (d'après l'équation (C.6)) :

$$\tilde{\boldsymbol{a}}^\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi \\ \cos\theta\sin\phi \\ -\sin\theta \end{pmatrix}_{\{\boldsymbol{e}_i\}}, \quad \tilde{\boldsymbol{a}}^\phi = \begin{pmatrix} -\sin\phi \\ \cos\phi \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{C.39}$$

Dans ce cas, la base naturel est orthogonale. Le tenseur métrique est alors diagonal (d'après l'équation (C.9)) :

$$A_{\bullet\bullet} = \begin{pmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & r^2(\sin\theta)^2 \end{pmatrix}, \quad A^{\bullet\bullet} = \begin{pmatrix} 1/r^2 & 0 \\ 0 & 1/(r^2(\sin\theta)^2) \end{pmatrix} \tag{C.40}$$

Le tenseur de courbure s'exprime de la façon suivante (d'après l'équation (C.10)) :

$$b_{\bullet\bullet} = \begin{pmatrix} -r & 0 \\ 0 & -r(\sin\theta)^2 \end{pmatrix} \tag{C.41}$$

Les coefficients de connexion riemannienne s'expriment de la façon suivante (d'après l'équation (C.11)) :

$$\Gamma^\theta_{\bullet\bullet} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\cos\theta\sin\theta \end{pmatrix}, \quad \Gamma^\phi_{\bullet\bullet} = \begin{pmatrix} 0 & \cot\theta \\ \cot\theta & 0 \end{pmatrix} \tag{C.42}$$

Soit $\boldsymbol{T}$ un champ tensoriel surfacique tangent d'ordre deux. Les composantes de la divergence surfacique de $\boldsymbol{T}$ dans la base naturelle sont exprimées de façon suivante (d'après l'équation (C.21)) :

$$(\mathrm{div}_s\boldsymbol{T})^\bullet = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial T^{\theta\theta}}{\partial\theta} + \dfrac{\partial T^{\theta\phi}}{\partial\phi} - T^{\phi\phi}\cos\theta\sin\theta + T^{\theta\theta}\cot\theta \\ \dfrac{\partial T^{\phi\theta}}{\partial\theta} + \dfrac{\partial T^{\phi\phi}}{\partial\phi} + (2T^{\phi\theta} + T^{\theta\phi})\cot\theta \end{pmatrix} \tag{C.43}$$

Les composantes de $\boldsymbol{T}$ dans la base naturelle s'expriment en fonction des composantes de $\boldsymbol{T}$ dans la base physique de la façon suivante :

$$T^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{r^2}\tilde{T}^{\theta\theta} & \dfrac{1}{r^2\sin\theta}\tilde{T}^{\theta\phi} \\ \dfrac{1}{r^2\sin\theta}\tilde{T}^{\phi\theta} & \dfrac{1}{r^2(\sin\theta)^2}\tilde{T}^{\phi\phi} \end{pmatrix} \tag{C.44}$$

Finalement, la divergence surfacique de $\boldsymbol{T}$ dans la base physique s'écrit :

$$(\tilde{\mathrm{div}}_s \boldsymbol{T})^{\bullet} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \tilde{T}^{\theta\theta}}{\partial \theta} + \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial \tilde{T}^{\theta\phi}}{\partial \phi} + \dfrac{\tilde{T}^{\theta\theta} - \tilde{T}^{\phi\phi}}{r}\cot\theta \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial \tilde{T}^{\phi\theta}}{\partial \theta} + \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial \tilde{T}^{\phi\phi}}{\partial \phi} + \dfrac{\tilde{T}^{\theta\phi} + \tilde{T}^{\phi\theta}}{r}\cot\theta \end{pmatrix} \tag{C.45}$$

et le tenseur de courbure :

$$\tilde{b}^{\bullet\bullet} = \begin{pmatrix} -1/r & 0 \\ 0 & -1/r \end{pmatrix} \tag{C.46}$$

Annexe D

Théorie des coques minces

Cette annexe, qui s'appuie sur le cours de Garrigues (1999), fournit un bref résumé de la théorie des coques minces. L'équilibre mécanique d'une coque, occupant le domaine ω_{ph} et d'épaisseur h constante, comprise entre deux milieux, notés respectivement 1 et 2, est considérée. La surface moyenne, noté $\bar{S}$, est caractérisée par l'ensemble des points $\bar{\boldsymbol{x}}$. La coque est alors caractérisée par l'ensemble des points $\boldsymbol{x}$ tels que :

$$\boldsymbol{x} = \bar{\boldsymbol{x}} + x_n \boldsymbol{n}, \quad x_n \in [-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}] \tag{D.1}$$

où $\boldsymbol{n}$ est la normale unitaire à la surface $\bar{S}$ orientée de 1 vers 2.

Les interfaces entre la coque et les milieux 1 et 2, notées respectivement Γ_1 et Γ_2 sont supposées parfaites. Le vecteur $\boldsymbol{n}$ normal à $\bar{S}$ au point $\bar{\boldsymbol{x}}$ est également normal à Γ_1 et Γ_2 respectivement aux points $\bar{\boldsymbol{x}} - (h/2)\boldsymbol{n}$ et $\bar{\boldsymbol{x}} + (h/2)\boldsymbol{n}$. Les champs mécaniques locaux sur la coque vérifient les équations suivantes :

$$\begin{cases} \text{div}\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \gamma_{ph}\boldsymbol{i} + \mathbb{C}_{ph} : \boldsymbol{\epsilon} \text{ dans } \omega_{ph} \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}, \quad [\boldsymbol{u}] = \boldsymbol{0} \text{ sur } \Gamma_1 \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}, \quad [\boldsymbol{u}] = \boldsymbol{0} \text{ sur } \Gamma_2 \end{cases} \tag{D.2}$$

où $[\boldsymbol{\sigma}]$ et $[\boldsymbol{u}]$ désignent respectivement les sauts de contrainte et de déplacement à travers les interfaces Γ_i ($i \in [1, 2]$).

Le tenseur de rigidité $\mathbb{C}_{ph}$ est supposé isotrope :

$$\mathbb{C}_{ph} = 3k_{ph}\mathbb{J} + 2\mu_{ph}\mathbb{K} \tag{D.3}$$

Soit un couple $(\boldsymbol{t}_t, \boldsymbol{t}_b)$ formant une base orthonormée pour les vecteurs tangents à $\bar{S}$ (avec $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{t}_t \wedge \boldsymbol{t}_b$). La base directe $(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{t}_t, \boldsymbol{t}_b)$ est une base pour les vecteurs de l'espace. La coque peut être considérée comme mince si $h << \text{Inf}(R_1, R_2)$ où R_1 et R_2 sont les rayons de courbure principaux. Les rayons de courbure principaux peuvent être déterminés à partir des invariants du tenseur de courbure :

$$\text{Tr}\boldsymbol{b} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}, \quad \det\boldsymbol{b} = \frac{1}{R_1 R_2} \tag{D.4}$$

Le tenseur de membrane $\boldsymbol{T}$ (d'ordre deux), tranchant $\boldsymbol{Q}$ (d'ordre un) et de moments linéïques $\boldsymbol{M}$ (d'ordre deux) sont introduits. Dans le cadre de la théorie des coques minces, ces trois tenseurs s'expriment de la façon suivante en fonction du tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\boldsymbol{T} = \int_{-h/2}^{h/2} \boldsymbol{\sigma}_T dx_n, \quad \boldsymbol{Q} = \int_{-h/2}^{h/2} \boldsymbol{i}_T \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}) dx_n \quad \text{et} \quad \boldsymbol{M} = \int_{-h/2}^{h/2} x_n \boldsymbol{\sigma}_T dx_n \tag{D.5}$$

où

$$\boldsymbol{\sigma}_T = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\sigma} \tag{D.6}$$

Les équations d'équilibre local des coques sont de la forme suivante :

$$\begin{cases} \boldsymbol{i}_T \cdot \boldsymbol{p} + \mathrm{div}_s \boldsymbol{T} - \boldsymbol{b} \cdot \mathrm{div}_s \boldsymbol{M} = 0 \\ \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{n} + \boldsymbol{T} : \boldsymbol{b} + \mathrm{div}_s(\mathrm{div}_s \boldsymbol{M}) = 0 \end{cases} \tag{D.7}$$

Le vecteur $\boldsymbol{p}$ est la densité de force surfacique extérieure appliquée sur la coque. Dans le cas présent, $\boldsymbol{p}$ est égal à $(\boldsymbol{\sigma}^{(2)} - \boldsymbol{\sigma}^{(1)}) \cdot \boldsymbol{n} = [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n}$.

La coque est supposée suffisamment fine pour que les efforts nécessaires pour la fléchir soient négligeables devant les efforts nécessaire pour l'allonger. Dans ce cas particulier, les moments linéïques peuvent être négligés ($\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$) et les équations précédentes deviennent :

$$\begin{cases} \boldsymbol{i}_T \cdot [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s \boldsymbol{T} = \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{n} \cdot [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} + \boldsymbol{T} : \boldsymbol{b} = 0 \end{cases} \tag{D.8}$$

où encore :

$$[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{T} : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s \boldsymbol{T} = \boldsymbol{0} \tag{D.9}$$

Les hypothèses cinématiques de Kirchhoff-Love sont considérées, c'est-à-dire que les fibres perpendiculaires à la surface moyenne ont des mouvements de corps rigides (les fibres restent perpendiculaires à la surface moyennes et gardent leur longueur). Cela conduit au champ de déformation suivant :

$$\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}_T = \bar{\boldsymbol{\epsilon}} - x_n \boldsymbol{\kappa} \tag{D.10}$$

où $\boldsymbol{\epsilon}_T = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}$. Le tenseur $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ est la déformation sur la surface moyenne. Le tenseur d'ordre deux $\boldsymbol{\kappa}$ est appelé tenseur de variation de courbure. Les approximations de Kirchhoff-Love conduisent à un état de déformation plane dans la coque. Les champs de déformations et de contraintes dans la coque sont alors de la forme suivante dans la base $(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{t}_t, \boldsymbol{t}_b)$:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{tt} & \epsilon_{tb} \\ 0 & \epsilon_{tb} & \epsilon_{bb} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{nn} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{tt} & \sigma_{tb} \\ 0 & \sigma_{tb} & \sigma_{bb} \end{pmatrix}, \tag{D.11}$$

Afin de relier les parties tangentielles des tenseurs des contraintes et des déformations et d'établir la loi de comportement des coques, il est souvent supposé que $\sigma_{nn} << \mathrm{Tr}\boldsymbol{\sigma}$ (cette hypothèse est communément appelée quatrième hypothèse de Kirchhoff-Love). La loi de comportement volumique de la coque peut se mettre sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1 + \nu_{ph}}{E_{ph}} (\boldsymbol{\sigma} - \gamma_{ph} \boldsymbol{i}) - \frac{\nu_{ph}}{E_{ph}} \mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma} - \gamma_{ph} \boldsymbol{i}) \boldsymbol{i} \tag{D.12}$$

avec E_{ph} et ν_{ph} respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson de la coque. En prenant la partie tangentielle de la relation suivante (en contractant doublement avec $\mathbb{I}_T$), il vient que :

$$\boldsymbol{\epsilon}_T = \frac{1+\nu_{ph}}{E_{ph}}(\boldsymbol{\sigma}_T - \gamma_{ph}\boldsymbol{i}_T) - \frac{\nu_{ph}}{E_{ph}}\Big(\mathrm{Tr}\boldsymbol{\sigma} - 3\gamma_{ph}\Big)\boldsymbol{i}_T \tag{D.13}$$

En considérant l'hypothèse $\sigma_{nn} << \mathrm{Tr}\boldsymbol{\sigma}$, c'est-à-dire $\mathrm{Tr}\boldsymbol{\sigma} \approx \mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_T)$, il vient que :

$$\boldsymbol{\epsilon}_T \approx \frac{1+\nu_{ph}}{E_{ph}}(\boldsymbol{\sigma}_T - \gamma_{ph}\boldsymbol{i}_T) - \frac{\nu_{ph}}{E_{ph}}\Big(\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_T) - 3\gamma_{ph}\Big)\boldsymbol{i}_T \tag{D.14}$$

Cela conduit à :

$$\boldsymbol{\sigma}_T \approx \frac{1-\nu_{ph}-2\nu_{ph}^2}{1-\nu_{ph}^2}\gamma_{ph}\boldsymbol{i}_T + \frac{E_{ph}\nu_{ph}}{1-\nu_{ph}^2}\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\epsilon}_T)\boldsymbol{i}_T + \frac{E_{ph}}{1+\nu_{ph}}\boldsymbol{\epsilon}_T \tag{D.15}$$

Les scalaires γ_T, λ_T et μ_T sont définis comme suit :

$$\gamma_T = \frac{1-\nu_{ph}-2\nu_{ph}^2}{1-\nu_{ph}^2}\gamma_{ph} = \frac{6\mu_{ph}}{3k_{ph}+4\mu_{ph}}\gamma_{ph}, \tag{D.16}$$

$$\lambda_T = \frac{E_{ph}\nu_{ph}}{1-\nu_{ph}^2} = \frac{2\mu_{ph}(3k_{ph}-2\mu_{ph})}{3k_{ph}+4\mu_{ph}}, \tag{D.17}$$

$$\mu_T = \frac{1}{2}\frac{E_{ph}}{1+\nu_{ph}} = \mu_{ph} \tag{D.18}$$

Le scalaire k_T est défini tel que :

$$k_T = \lambda_T + \mu_T = \frac{9k_{ph}\mu_{ph}}{3k_{ph}+4\mu_{ph}} \tag{D.19}$$

Finalement, l'équation (D.15) peut s'écrire sous la forme tensorielle suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}_T \approx \gamma_T\boldsymbol{i}_T + \mathbb{C}_T : \boldsymbol{\epsilon}_T \tag{D.20}$$

où

$$\mathbb{C}_T = 2(k_T\mathbb{J}_T + \mu_T\mathbb{K}_T) \tag{D.21}$$

En utilisant la représentation vectorielle suivante pour les tenseurs d'ordre deux symétriques :

$$\boldsymbol{a} = \Big\{a_{nn},\, a_{tt},\, a_{bb},\, \sqrt{2}a_{tb},\, \sqrt{2}a_{nb},\, \sqrt{2}a_{nt}\Big\}^T, \tag{D.22}$$

le tenseur d'ordre quatre $\mathbb{C}_T$ s'écrit de la façon suivante :

$$\mathbb{C}_T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_T+\mu_T & k_T-\mu_T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_T-\mu_T & k_T+\mu_T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu_T & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{D.23}$$

En considérant l'approximation cinématique de Kirchoff-Love (état plan de déformation) ainsi que l'hypothèse $\sigma_{nn} << \mathrm{Tr}\boldsymbol{\sigma}$, le champ de contrainte dans la coque à la forme suivante (état de contraintes planes [1]) :

$$\boldsymbol{\sigma} \approx \boldsymbol{\sigma}_T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{tt} & \sigma_{tb} \\ 0 & \sigma_{tb} & \sigma_{bb} \end{pmatrix} \tag{D.24}$$

Finalement, cela conduit à (d'après les équations (D.5), (D.10) et (D.20)) :

$$\boldsymbol{T} = \gamma_T h \boldsymbol{i}_T + h\mathbb{C}_T : \bar{\boldsymbol{\epsilon}}, \quad \boldsymbol{M} = -\frac{1}{12}h^3\mathbb{C}_T : \boldsymbol{\kappa}, \quad \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{0} \tag{D.25}$$

Le tenseurs des moments linéïques $\boldsymbol{M}$ étant négligé, il vient (d'après l'équation (D.25)), que $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{0}$. L'équation (D.10) impose alors que le champ de déformations est homogène dans l'épaisseur de la coque ($\boldsymbol{\epsilon}_T = \boldsymbol{\epsilon} = \bar{\boldsymbol{\epsilon}}$). Cela conduit également à un champ de contrainte homogène dans l'épaisseur de la coque. Il vient finalement que :

$$\boldsymbol{T} = h\boldsymbol{\sigma}_T = h\gamma_T \boldsymbol{i}_T + h\mathbb{C}_T : \boldsymbol{\epsilon}_T, \tag{D.26}$$

avec :

$$\boldsymbol{\epsilon}_T = \boldsymbol{\epsilon} = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{x}} - \frac{h}{2}\boldsymbol{n}) = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^{(2)}(\bar{\boldsymbol{x}} + \frac{h}{2}\boldsymbol{n}), \ \forall \bar{\boldsymbol{x}} \in \bar{S} \tag{D.27}$$

Le système d'équations suivant est obtenu :

$$\begin{cases} \boldsymbol{T} = h\,\gamma_T\,\boldsymbol{i}_T + h\,\mathbb{C}_T : \boldsymbol{\epsilon}_T \\ [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{T} : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s\boldsymbol{T} = 0 \\ \boldsymbol{\epsilon}_T = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{x}} - \frac{h}{2}\boldsymbol{n}) = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^{(2)}(\bar{\boldsymbol{x}} + \frac{h}{2}\boldsymbol{n}), \ \forall \bar{\boldsymbol{x}} \in \bar{S} \end{cases} \tag{D.28}$$

Il est supposé à ce stade que les propriétés de l'interphase varient en $1/h$, dans le sens où $\gamma_T(h) = \gamma_s/h$ et $\mathbb{C}_T(h) = \mathbb{C}_s/h$ avec γ_s et $\mathbb{C}_s$ fixes. Le système précédent s'écrit en précisant les dépendances en h :

$$\begin{cases} \boldsymbol{T}(h) = h\,\gamma_T(h)\,\boldsymbol{i}_T + h\,\mathbb{C}_T(h) : \boldsymbol{\epsilon}_T(h) \\ [\boldsymbol{\sigma}(h)] \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{T}(h) : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s\boldsymbol{T}(h) = 0 \\ \boldsymbol{\epsilon}_T(h) = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{x}} - \frac{h}{2}\boldsymbol{n}, h) = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^{(2)}(\bar{\boldsymbol{x}} + \frac{h}{2}\boldsymbol{n}, h), \ \forall \bar{\boldsymbol{x}} \in \bar{S} \end{cases} \tag{D.29}$$

En notant :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_s &= \lim_{h\to 0} \boldsymbol{T}(h), \quad \boldsymbol{\epsilon}^- = \lim_{h\to 0} \boldsymbol{\epsilon}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{x}} - \frac{h}{2}\boldsymbol{n}, h), \quad \boldsymbol{\epsilon}^+ = \lim_{h\to 0} \boldsymbol{\epsilon}^{(2)}(\bar{\boldsymbol{x}} + \frac{h}{2}\boldsymbol{n}, h) \\ \boldsymbol{\epsilon}_s &= \lim_{h\to 0} \boldsymbol{\epsilon}_T(h), \quad \boldsymbol{\sigma}^- = \lim_{h\to 0} \boldsymbol{\sigma}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{x}} - \frac{h}{2}\boldsymbol{n}, h), \quad \boldsymbol{\sigma}^+ = \lim_{h\to 0} \boldsymbol{\sigma}^{(2)}(\bar{\boldsymbol{x}} + \frac{h}{2}\boldsymbol{n}, h) \end{aligned} \tag{D.30}$$

1. Cette hypothèse conduit à des contradictions. En effet, la loi de comportement volumique et l'état de contraintes planes conduisent généralement à $\boldsymbol{\epsilon}_{nn} \neq 0$ alors que l'approximation cinématique de Kirchoff-Love impose que $\boldsymbol{\epsilon}_{nn} = 0$.

les limites lorsque h tend vers zéro des équations précédentes s'écrivent :

$$(\star)\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s \boldsymbol{i}_T + \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s \\ \big(\boldsymbol{\sigma}^+ - \boldsymbol{\sigma}^-\big) \cdot \boldsymbol{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{b})\boldsymbol{n} + \mathrm{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = 0 \\ \boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^-(\bar{\boldsymbol{x}}) = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}^+(\bar{\boldsymbol{x}}),\ \forall \bar{\boldsymbol{x}} \in \bar{S} \end{cases} \tag{D.31}$$

Les coefficients k_s et μ_s sont introduits de sorte que $\mathbb{C}_s = 2\big(k_s \mathbb{J}_T + \mu_s \mathbb{K}_T\big)$:

$$k_s = h\frac{9k_{ph}\mu_{ph}}{3k_{ph} + 4\mu_{ph}}, \quad \mu_s = h\mu_{ph} \tag{D.32}$$

Enfin, la relation $\gamma_T(h) = \gamma_s/h$ peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\gamma_s = h\frac{6\mu_{ph}}{3k_{ph} + 4\mu_{ph}}\gamma_{ph}, \tag{D.33}$$

La différence $\boldsymbol{\sigma}^+ - \boldsymbol{\sigma}^-$ correspond au saut de contrainte de part et d'autre de l'interphase d'épaisseur nulle et les tenseurs $\boldsymbol{\epsilon}^+$ et $\boldsymbol{\epsilon}^-$ correspondent aux déformations de part et d'autre de cette interphase. Le problème $(\star)$ correspond alors au problème du modèle d'interface imparfaite cohérente.

Annexe E

Résolution du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$

Cette annexe fournit quelques éléments concernant la résolution du problème auxiliaire relatif au motif $\mathcal{S}$.

1 Chargement hydrostatique

Les quatre constantes A_0, B_0, A_m et B_m sont déterminées à partir des conditions aux limites. La forme du déplacement à l'infini conduit à $A_0 = \epsilon_{\mathrm{h}}^0$. Les trois autres constantes sont ensuite obtenues à partir de la continuité du vecteur contrainte en Γ_0, de la continuité du déplacement en Γ_0 et de l'équilibre de l'interface imparfaite cohérente en Γ_1. Les expressions sont données ci-après :

$$\left\{\begin{aligned}
A_m &= \frac{\epsilon_{\mathrm{h}}^0}{\delta}\left(3k_0 + 4\mu_0\right)\left(k_s + r_1\mu_m\right) \\
B_m &= \frac{\epsilon_{\mathrm{h}}^0 r_1^3}{4\delta}\left(3k_0 + 4\mu_0\right)\left(3r_1k_m - 4k_s\right) \\
A_0 &= \epsilon_{\mathrm{h}}^0 \\
B_0 &= \frac{\epsilon_{\mathrm{h}}^0 r_1^3}{4f\delta}\Big[4\left(3(1-f)r_1k_m\mu_m + k_s\left(4f\mu_m + 3k_m\right)\right) \\
&\quad -3k_0\left(r_1\left(3fk_m + 4\mu_m\right) + 4(1-f)k_s\right)\Big]
\end{aligned}\right. \tag{E.1}$$

avec

$$\delta = r_1\Big[3fk_m\left(\mu_0 - \mu_m\right) + \mu_m\left(3k_m + 4\mu_0\right)\Big] + k_s\Big[4\big(\mu_0 - f\left(\mu_0 - \mu_m\right)\big) + 3k_m\Big] \tag{E.2}$$

À partir des relations (4.5) et (4.6) appliquées aux expressions (4.4), les résultats suivants sont obtenus :

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{D_{\mathcal{S}}} = \Big[3A_mk_m - \frac{4B_m\mu_m}{r_0^3}\Big]\boldsymbol{i}, \quad \langle\boldsymbol{\epsilon}\rangle_{D_{\mathcal{S}}} = \Big[A_m + \frac{B_m}{r_0^3}\Big]\boldsymbol{i} \tag{E.3}$$

À partir des expressions précédentes et des relations (2.33), il vient que :

$$\left\{\begin{array}{lcl} U^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}} & = & \dfrac{(3k_0+4\mu_0)\alpha_{\mathrm{h}}}{\gamma_{\mathrm{h}}} \\[2ex] V^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}} & = & \dfrac{(3k_0+4\mu_0)\beta_{\mathrm{h}}}{4\gamma_{\mathrm{h}}} \\[2ex] T^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{h}} & = & \dfrac{(3k_0+4\mu_0)(4\alpha_{\mathrm{h}}-3k_0\beta_{\mathrm{h}})}{4\gamma_{\mathrm{h}}} \\[2ex] k^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} & = & \dfrac{4}{3}\dfrac{3k_m\mu_m(1-f_{\mathcal{S}})r_1+k_s(3k_m+4f_{\mathcal{S}}\mu_m)}{(3f_{\mathcal{S}}k_m+4\mu_m)r_1+4(1-f_{\mathcal{S}})k_s} \\[2ex] \alpha_{\mathrm{h}} & = & k_s(4f_{\mathcal{S}}\mu_m+3k_m)+3(1-f_{\mathcal{S}})k_m\mu_m r_1 \\[1ex] \beta_{\mathrm{h}} & = & 4(1-f_{\mathcal{S}})k_s+r_1(3f_{\mathcal{S}}k_m+4\mu_m) \\[1ex] \gamma_{\mathrm{h}} & = & k_s\Big[4((1-f_{\mathcal{S}})\mu_0+f_{\mathcal{S}}\mu_m)+3k_m\Big] \\[1ex] & & +r_1\Big[3f_{\mathcal{S}}k_m(\mu_0-\mu_m)+\mu_m(3k_m+4\mu_0)\Big] \end{array}\right. \tag{E.4}$$

Le scalaire $f_{\mathcal{S}}=(r_1/r_0)^3$ représente la porosité dans le motif $\mathcal{S}$.

2 Chargement déviatorique

Les huit constantes A_0, B_0, C_0, D_0, A_m, B_m, C_m et D_m doivent maintenant être déterminées. La forme du chargement appliqué à l'infini impose que $A_0=\gamma$ et $B_0=0$. Les six autres constantes sont obtenues à partir de la continuité des composantes u_r et u_θ du déplacement en Γ_0, de la continuité des composantes σ_{rr} et $\sigma_{r\theta}$ du tenseur des contraintes en Γ_0 et en considérant l'équilibre de l'interface imparfaite cohérente en Γ_1. Le système d'équations à résoudre est donné ci-après :

$$\boldsymbol{W}\cdot\boldsymbol{X}=\boldsymbol{B} \tag{E.5}$$

avec

$$\left\{\begin{array}{l} {}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\{A_m\ \ B_m\ \ C_m\ \ D_m\ \ C_0\ \ D_0\} \\ {}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}=\{r_0\ \ -3r_0\ \ \mu_0\ \ -6\mu_0\ \ 0\ \ 0\} \end{array}\right. \tag{E.6}$$

et

$$\boldsymbol{W}=\left(\begin{array}{c|c} W_1 & W_2 \\ \hline W_3 & W_4 \end{array}\right) \tag{E.7}$$

où

$$W_1=\begin{pmatrix} r_0 & r_0^3 & \dfrac{1}{r_0^2} \\ -3r_0 & \dfrac{(4\nu_m-7)}{2\nu_m}r_0^3 & -\dfrac{6}{r_0^2}\dfrac{(2\nu_m-1)}{(4\nu_m-5)} \\ \mu_m & -\dfrac{r_0^2\mu_m}{2} & -\dfrac{2\mu_m}{r_0^3}\dfrac{(\nu_m-5)}{(4\nu_m-5)} \end{pmatrix} \tag{E.8}$$

$$W_2 = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{r_0^4} & -\dfrac{1}{r_0^2} & -\dfrac{1}{r_0^4} \\ \dfrac{2}{r_0^4} & \dfrac{6}{r_0^2}\dfrac{(2\nu_0-1)}{(4\nu_0-5)} & -\dfrac{2}{r_0^4} \\ -\dfrac{4\mu_m}{r_0^5} & \dfrac{2\mu_0}{r_0^3}\dfrac{(\nu_0-5)}{(4\nu_0-5)} & \dfrac{4\mu_0}{r_0^5} \end{pmatrix} \tag{E.9}$$

$$W_3 = \begin{pmatrix} -6\mu_m & -r_0^2\mu_m\dfrac{7-2\nu_m}{\nu_m} & -\dfrac{12\mu_m}{r_0^3}\dfrac{(1+\nu_m)}{(5-4\nu_m)} \\ \dfrac{k_s+r_1\mu_m}{r_1} & \alpha_{\mathrm{d}} & \beta_{\mathrm{d}} \\ \dfrac{6(k_s+2\mu_s-r_1\mu_m)}{r_1} & \gamma_{\mathrm{d}} & \zeta_{\mathrm{d}} \end{pmatrix} \tag{E.10}$$

$$W_4 = \begin{pmatrix} -\dfrac{16}{r_0^5}\mu_m & -\dfrac{12\mu_m}{r_0^3}\dfrac{(1+\nu_m)}{(5-4\nu_m)} & \dfrac{16}{r_0^5}\mu_0 \\ -4\dfrac{(k_s+r_1\mu_m)}{r_1^6} & 0 & 0 \\ -8\dfrac{(3k_s+\mu_s+2r_1\mu_m)}{r_1^6} & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{E.11}$$

avec

$$\begin{cases} \alpha_{\mathrm{d}} = -\dfrac{r_1}{2\nu_m}\big[r_1\mu_m\nu_m + k_s(8\nu_m-7)\big] \\ \beta_{\mathrm{d}} = \dfrac{-2r_1\mu_m(\nu_m-5)+4k_s(1+\nu_m)}{r_1^4(4\nu_m-5)} \\ \gamma_{\mathrm{d}} = -\dfrac{r_1}{\nu_m}\big[r_1\mu_m(2\nu_m+7)+2\mu_s(4\nu_m-7)+3k_s(8\nu_m-7)\big] \\ \zeta_{\mathrm{d}} = \dfrac{12\big[2k_s(1+\nu_m)+r_1\mu_m(1+\nu_m)+\mu_s(4\nu_m-2)\big]}{r_1^4(4\nu_m-5)} \end{cases} \tag{E.12}$$

Les moyennes des champs de déformation et de contrainte sur le motif $\mathcal{S}$ sont obtenues à partir des équations (4.5) et (4.6) :

$$\langle\boldsymbol{\epsilon}\rangle_{D_{\mathcal{S}}} = -\Big(\gamma + \frac{2}{5r_0^3}\frac{(k_0+2\mu_0)}{(k_0+\mu_0)}C_0\Big)\Big(\boldsymbol{e_x}\otimes\boldsymbol{e_x}+\boldsymbol{e_y}\otimes\boldsymbol{e_y}-2\boldsymbol{e_z}\otimes\boldsymbol{e_z}\Big) \tag{E.13}$$

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{D_{\mathcal{S}}} = -2\mu_0\Big(\gamma - \frac{1}{15r_0^3}\frac{(9k_0+8\mu_0)}{(k_0+\mu_0)}C_0\Big)\Big(\boldsymbol{e_x}\otimes\boldsymbol{e_x}+\boldsymbol{e_y}\otimes\boldsymbol{e_y}-2\boldsymbol{e_z}\otimes\boldsymbol{e_z}\Big), \tag{E.14}$$

Les parties déviatoriques des tenseurs $\mathbb{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et $\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ sont ensuite déterminées

à partir des relations (2.33) :

$$\begin{cases} U^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}} = 2\mu_0 \left(1 - \Delta \dfrac{9k_0 + 8\mu_0}{r_0^3}\right) \\ V^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}} = 1 + 6\Delta \dfrac{k_0 + 2\mu_0}{r_0^3} \\ T^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}} = -10\Delta \dfrac{3k_0 + 4\mu_0}{r_0^3}\mu_0 \\ \mu^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = \dfrac{R_n + V_n\mu_0}{R_d + V_d\mu_0} \\ \Delta = \dfrac{1}{15(k_0 + \mu_0)} \dfrac{C_0}{\gamma} \end{cases} \tag{E.15}$$

Les constantes R_n, R_d, V_n et V_d ne dépendent pas des propriétés élastiques du milieu de référence. De plus, ce sont des polynômes du second degré en r_1. Elles peuvent s'écrire comme $R_n = A(3,1)$, $R_d = A(4,2)$, $V_n = A(1,2)$, $V_d = A(2,3)$ avec :

$$A(i,j) = \sum_{k=1}^{3} f_k(i,j) r_1^{k-1} \tag{E.16}$$

Les fonctions $f_k(i,j)$ (avec $k \in [1,..,3]$) ont les formes suivantes :

$$\begin{aligned} f_1(i,j) &= k_s\mu_s\mu_m^{3-j}\xi(\mathrm{M}_1^{(i)}, \mathrm{M}_2^{(i)}, \mathrm{M}_3^{(i)}) \\ f_2(i,j) &= \mu_m^{4-j}\left[k_s\xi(\mathrm{M}_4^{(i)}, \mathrm{M}_5^{(i)}, \mathrm{M}_6^{(i)}) + \mu_s\xi(\mathrm{M}_7^{(i)}, \mathrm{M}_8^{(i)}, \mathrm{M}_9^{(i)})\right] \\ f_3(i,j) &= \mu_m^{5-j}\xi(\mathrm{M}_{10}^{(i)}, \mathrm{M}_{11}^{(i)}, \mathrm{M}_{12}^{(i)}) \end{aligned} \tag{E.17}$$

où

$$\xi(x,y,z) = k_m^2 x + k_m\mu_m y + \mu_m^2 z \tag{E.18}$$

Les coefficients $\mathrm{M}_j^{(i)}$, ($\forall i \in [1,\cdots,4]$, $\forall j \in [1,\cdots,12]$) dépendent seulement de la porosité $f_{\mathcal{S}} = (r_1/r_0)^3$ du motif $\mathcal{S}$ et ont la forme suivante :

$$\mathrm{M}_j^{(i)} = a_j^{(i)} + b_j^{(i)} f_{\mathcal{S}} + c_j^{(i)} f_{\mathcal{S}}^{5/3} + d_j^{(i)} f_{\mathcal{S}}^{7/3} + e_j^{(i)} f_{\mathcal{S}}^{10/3} \tag{E.19}$$

où les coefficients $a_j^{(i)}$, $b_j^{(i)}$, $c_j^{(i)}$, $d_j^{(i)}$, et $e_j^{(i)}$ ($\forall i \in [1,\cdots,4]$, $\forall j \in [1,\cdots,12]$) sont obtenus à partir des tables E.1 et E.2 en considérant les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \forall j \in [1,\cdots,12], \quad & a_j^{(2)} = a_j^{(1)}, \quad a_j^{(3)} = a_j^{(4)}, \\ & c_j^{(2)} = c_j^{(1)} = -c_j^{(3)} = -c_j^{(4)}, \\ & d_j^{(2)} = d_j^{(1)} = -d_j^{(3)} = -d_j^{(4)}, \\ & e_j^{(3)} = -e_j^{(1)}, \quad e_j^{(4)} = -e_j^{(2)} \end{aligned} \tag{E.20}$$

j	$a_j^{(1)}$	$b_j^{(1)}$	$c_j^{(1)}$	$d_j^{(1)}$	$e_j^{(1)}$
1	-288	1080	-3024	1800	432
2	-1392	-600	-2016	2400	1608
3	-1632	-920	-336	1800	1088
4	-576	-1080	1512	450	-621
5	-2208	600	-504	3300	-2028
6	-1632	920	-336	1800	-1312
7	-432	1080	-4536	2700	-702
8	-1992	-600	-4536	3000	-912
9	-2176	-920	-1008	1000	-256
10	-432	-1080	3024	-2025	513
11	-1608	600	2016	-1500	492
12	-1088	920	336	-200	32

Table E.1 – *Coefficients* $a_j^{(1)}$, $b_j^{(1)}$, $c_j^{(1)}$, $d_j^{(1)}$ *et* $e_j^{(1)}$ *(*$\forall j \in [1, \cdots, 12]$*).*

j	$b_j^{(2)}$	$e_j^{(2)}$	$a_j^{(3)}$	$b_j^{(3)}$	$b_j^{(4)}$
1	1800	-288	-342	-2025	-1170
2	2400	-1392	-708	-1500	-300
3	1800	-1632	-48	-200	-120
4	-1800	414	-684	2025	1170
5	-2400	1812	-732	1500	300
6	-1800	1968	-48	200	120
7	1800	468	-513	-2025	-1170
8	2400	1128	-948	-1500	-300
9	1800	384	-64	-200	-120
10	-1800	-342	-513	2025	1170
11	-2400	-708	-492	1500	300
12	-1800	-48	-32	200	120

Table E.2 – *Coefficients* $b_j^{(2)}$, $e_j^{(2)}$, $a_j^{(3)}$, $b_j^{(3)}$ *et* $b_j^{(4)}$ *(*$\forall j \in [1, \cdots, 12]$*).*

L'expression de C_0/γ (dans les expressions (E.15)) ne dépend pas du chargement extérieur γ. Par conséquent les expressions de Δ, $U^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$, $V^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$, et $T^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$ ne dépendent pas non plus de γ [1]. L'expression de Δ peut être obtenue à partir des expressions (2.33) et (2.35) :

$$\Delta = r_0^3 \frac{\mu_0 - \mu^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}}{(9k_0 + 8\mu_0)\mu_0 + 6\mu^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}(k_0 + 2\mu_0)} \tag{E.21}$$

L'expression de $\mu^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ étant complètement connue, il vient que l'expression de Δ est également connue et par conséquent, les expressions complètes de $U^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$, $V^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$ et $T^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}|\mathrm{d}}$ sont accessibles.

Contrairement au module de compressibilité effectif $k^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, le module de cisaillement effectif $\mu^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ dépend du tenseur de rigidité $\mathbb{C}_0$ (pour être plus précis, il dépend seulement de μ_0 car les constantes R_n, V_n, R_d, et V_d ne dépendent pas de $\mathbb{C}_0$). A partir de l'équation (2.36), il est donc évident que :

$$\mu^{\mathrm{VG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = \frac{V_n}{V_d} \quad \text{et} \quad \mu^{\mathrm{RG}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}} = \frac{R_n}{R_d} \tag{E.22}$$

En résumé, les tenseurs $\mathbb{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et $\mathbb{C}^{\mathrm{HS}}_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ relatifs au motif $\mathcal{S}$ ont été déterminés. Leurs parties hydrostatique et déviatorique sont exprimées respectivement aux équations (E.4) and (E.15).

1. Les tenseurs $\mathbb{U}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$, $\mathbb{V}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ et $\mathbb{T}^0_{\mathrm{M}\mathcal{S}}$ sont indépendants du chargement appliqué.

Bibliographie

Ahrens, J., Geveci, B. et Law, C. (2005). *ParaView : An end-user tool for large-data visualization.* 130

Bailly, H., Ménessier, D. et Prunier, C. (1996). *Le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides.* Eyrolles, Paris. 24, 26, 27, 28, 29

Baker, C. (1977a). The fission gas bubble distribution in uranium dioxide from high temperature irradiated sghwr fuel pins. *Journal of Nuclear Materials*, 66(3) : 283–291. 31, 32, 33

Baker, C. (1977b). The migration of intragranular fission gas bubbles in irradiated uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 71(1) : 117–123. 31

Baron, D. (2002). *Notions de physique nucléaire et application aux réacteurs. Cours de l'Ecole de Centrale Nantes, EDF.* 24

Baron, D. et Bouffioux, P. (2002). *Le crayon combustible des réacteurs à eau pressurisée de grande puissance (tranches 900 et 1300 mwe. Cours de l'Ecole de Centrale Nantes, EDF.* 24

Bornert, M. (1996a). A generalized pattern-based self-consistent scheme. *Computational Materials Science*, 5(1-3) : 17–31. 49

Bornert, M. (1996b). *Morphologie microstructurale et comportement mécanique ; caractérisations expérimentales, approches par bornes et estimations autocohérentes généralisées.* Thèse, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées. 42, 49, 50, 51, 52, 83, 124, 127, 128, 142

Bornert, M. (2001). Homogénéisation des milieux aléatoires : bornes et estimations. In Bornert, M., Bretheau, T. et Gilormini, P., éditeurs, *Homogénéisation en mécanique des matériaux*, volume 1, chapitre 5, pages 133–221. Hermès Science Publications, Paris. 42, 49, 50, 53, 107

Bornert, M., Stolz, C. et Zaoui, A. (1996). Morphologically representative pattern based bounding in elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(3) : 307–330. 49

Brisard, S., Dormieux, L. et Kondo, D. (2010a). Hashin-Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, 48(3) : 589–596. 56, 59, 61, 62, 63, 64, 65, 70, 85, 92, 99, 100, 102, 161

Brisard, S., Dormieux, L. et Kondo, D. (2010b). Hashin-Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, 50(2) : 403–410. 59, 61, 62, 63, 64, 70, 85, 99, 100, 161

Canon, R. F., Roberts, J. T. A. et Beals, R. J. (1971). Deformation of UO_2 at high temperatures. *Journal of the American Ceramic Society*, 54(2) : 105–112. 27

Cherkaoui, M., Sabar, H. et Berveiller, M. (1995). Elastic composites with coated reinforcements : A micromechanical approach for nonhomothetic topology. *International Journal of Engineering Science*, 33(6) : 829–843. 69, 70, 71, 73, 79, 80, 100, 117, 139, 160

Christensen, R. et Lo, K. (1979). Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 27(4) : 315–330. 53, 62, 63

Colbert, M. (2012). *Etude du comportement de gaz rares dans une matrice céramique à haute température : modélisation par approches semi-empiriques.* Thèse, Université d'Aix-Marseille. 18, 37, 38, 40, 159

Cornell, R. (1971). An electron microscope examination of matrix fission-gas bubbles in irradiated uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 38(3) : 319–328. 31, 32

Cornell, R., Speight, M. et Masters, B. (1969). The role of bubbles in fission gas release from uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 30(1-2) : 170–178. 31, 32

Cuenot, S., Frétigny, C., Demoustier-Champagne, S. et Nysten, B. (2004). Surface tension effect on the mechanical properties of nanomaterials measured by atomic force microscopy. *Phys. Rev. B*, 69 : 165410. 39

Diao, J., Gall, K. et Dunn, M. L. (2004). Atomistic simulation of the structure and elastic properties of gold nanowires. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(9) : 1935 – 1962. 39

Dingreville, R. et Qu, J. (2007). A semi-analytical method to compute surface elastic properties. *Acta Materialia*, 55(1) : 141–147. 57

Dormieux, L. et Kondo, D. (2010). An extension of gurson model incorporating interface stresses effects. *International Journal of Engineering Science*, 48(6) : 575–581. 162

Dormieux, L. et Kondo, D. (2013). Non linear homogenization approach of strength of nanoporous materials with interface effects. *International Journal of Engineering Science*, 71 : 102–110. 162

Dormieux, L., Kondo, D. et Ulm, F.-J. (2006). *Microporomechanics.* 109

Duan, H., Wang, J., Huang, Z. et Karihaloo, B. (2005a). Eshelby formalism for nano-inhomogeneities. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 461(2062) : 3335–3353. 56, 62, 63

Duan, H., Wang, J., Huang, Z. et Karihaloo, B. (2005b). Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(7) : 1574–1596. 56, 57, 61, 62, 63, 64, 66, 67, 68, 70, 71, 73, 76, 85, 99, 100, 130, 133, 160, 161

Duan, H., Wang, J., Huang, Z. et Luo, Z. (2005c). Stress concentration tensors of inhomogeneities with interface effects. *Mechanics of Materials*, 37(7) : 723–736. 56, 62

Duan, H., Wang, J., Huang, Z. et Zhong, Y. (2005d). Stress fields of a spheroidal inhomogeneity with an interphase in an infinite medium under remote loadings. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 461(2056) : 1055–1080. 162

Duan, H., Wang, J. et Karihaloo, B. (2009). Theory of elasticity at the nanoscale. *Advances in Applied Mechanics*, 42 : 1–68. 62

Duan, H., Wang, J., Karihaloo, B. et Huang, Z. (2006). Nanoporous materials can be made stiffer than non-porous counterparts by surface modification. *Acta Materialia*, 54(11) : 2983–2990. 69

Duan, H., Yi, X., Huang, Z. et Wang, J. (2007a). A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects. part i : Theoretical framework. *Mechanics of Materials*, 39(1) : 81–93. 61, 62, 70

Duan, H., Yi, X., Huang, Z. et Wang, J. (2007b). A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects : Part ii-application and scaling laws. *Mechanics of Materials*, 39(1). 61, 62, 70

Dubourg, R., Faure-Geors, H., Nicaise, G. et Barrachin, M. (2005). Fission product release in the first two PHEBUS tests FPT0 and FPT1. *Nuclear Engineering and Design*, 235 : 2183–2208. 31

Eshelby, J. D. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problem. *Proc. R. Soc. Lond.*, A 241 : 376–396. 45, 80, 100

François, D., Pineau, A. et Zaoui, A. (2012). *Mechanical Behaviour of Materials Volume 1 : Micro- and Macroscopic Constitutive Behaviour.* Ed. Springer. 42

Fuketa, T. (2012). 2.22 - transient response of {LWR} fuels (ria). In in Chief : Rudy J.M. Konings, E., éditeur, *Comprehensive Nuclear Materials*, pages 579–593. Elsevier, Oxford. 30

Garrigues, J. (1999). Statique des coques élastiques. Notes, Ecole Centrale Marseille. 58, 124, 171, 179

Gatt, J.-M., Monerie, Y., Laux, D. et Baron, D. (2005). Elastic behavior of porous ceramics : Application to nuclear fuel materials. *Journal of Nuclear Materials*, 336(2-3) : 145–155. 34, 35, 95, 97

Geelhood, K. J. et Luscher, W. G. (2014). Frapcon-3.5 : A computer code for the calculation of steady-state, thermal-mechanical behavior of oxide fuel rods for high burnup. U.S. Nuclear Regulatory Commission. 29

Georgenthum, V., Moal, A. et Marchand, O. (2014). {SCANAIR} a transient fuel performance code part two : Assessment of modelling capabilities. *Nuclear Engineering and Design*, 280 : 172 – 180. 30

Geuzaine, C. et Remacle, J.-F. (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) : 1309–1331. 128

Gurtin, M. et Murdoch, A. (1975). A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 57(4) : 291–323. 18, 57

Hashin, Z. (1962). The elastic moduli of heterogeneous materials. *J. Appl. Mech.*, 29 : 143–150. 53, 62

Hashin, Z. (1991). Spherical inclusion with imperfect interface. *Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME*, 58(2) : 444–449. 56

Hashin, Z. et Shtrikman, S. (1963). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(2) : 127–140. 41, 46

Hervé, E. et Pellegrini, O. (1995). The elastic constants of a material containing spherical coated holes. *Arch. Mech*, 47(2) : 223–246. 53, 69, 70

Hervé, E., Stolz, C. et Zaoui, A. (1991). À propos de l'assemblage des sphères de hashin. *C. R. Acad. Sci*, 313 : 857–862. 53

Hervé, E. et Zaoui, A. (1993). n-layered inclusion-based micromechanical modelling. *International Journal of Engineering Science*, 31(1) : 1–10. 53

Hill, R. (1983). Interfacial operators in the mechanics of composite media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 31(4) : 347–357. 79, 100

Jelea, A., Colbert, M., Ribeiro, F., Tréglia, G. et Pellenq, R.-M. (2011). An atomistic modelling of the porosity impact on UO_2 matrix macroscopic properties. *Journal of Nuclear Materials*, 415(2) : 210–216. 37, 40

Julien, J. (2008). *Modélisation multi- échelles du couplage physico-chimie - mécanique du comportement du combustible à haute température des réacteurs à eau sous pression.* Thèse, Université de Provence - Aix-Marseille I. 24

Kashibe, S. et Une, K. (1991). Effects of temperature cycling and heating rate on fission gas release of bwr fuels. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 28 : 1090–1099. 33

Kashibe, S., Une, K. et Nogita, K. (1993). Formation and growth of intragranular fission gas bubbles in UO_2 fuels with burnup of $6 - 83$ GWd/t. *Journal of Nuclear Materials*, 206 : 22–34. 31, 32, 33

Largenton, R. (2012). *Modélisation du comportement effectif du combustible MOX : par une analyse micro-mécanique en champs de transformation non uniformes.* Thèse, Université de Provence - Aix-Marseille I. 24

Lassmann, K. et Moreno, A. (1977). The light-water-reactor version of the uranus integral fuel-rod code. *ATKE BD*, 30 : 207–215. 34, 35, 154

Le Quang, H. et He, Q.-C. (2008). Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces. *Mechanics of Materials*, 40(10) : 865–884. 56, 59, 61, 62, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 84, 86, 87, 88, 96, 97, 99, 100, 104, 161

Lipinski, P., Barhdadi, E. et Cherkaoui, M. (2006). Micromechanical modelling of an arbitrary ellipsoidal multi-coated inclusion. *Philosophical Magazine*, 86(10) : 1305–1326. 70

Lösönen, P. (2000). On the behaviour of intragranular fission gas in uo2 fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 280(1) : 56–72. 31, 32, 33

Marcadon, M. (2005). *Effets de taille et d'interphase sur le comportement mécanique de nanocomposites particulaires.* Thèse, Ecole Polytechnique. 60, 61, 69, 70, 84, 90, 99, 161

Marcadon, V., Herve, E. et Zaoui, A. (2007). Micromechanical modeling of packing and size effects in particulate composites. *International Journal of Solids and Structures*, 44(25-26) : 8213–8228. 69, 90, 99, 161

Marguet, S. (2011). Fonctionnement des réacteurs à eau pressurisée - l'exemple des centrales edf de type 900 et 1300 mwe. cours de fonctionnement de l'ecole nationale supérieure d'ingénieurs de bourges - option energie nucléaire. 24

Martin, D. (1989). The elastic constants of polycristalline UO_2 and (U, Pu) mixed oxides : a review and recommandations. *High Temperatures - High Pressures*, 21 : 13–24. 34, 35, 148

Matzke, H., Blank, H., Coquerelle, M., Lassmann, K., Ray, I., Ronchi, C. et Walker, C. (1989). Oxide fuel transients. *Journal of Nuclear Materials*, 166 : 165 – 178. 32

Miller, R. et Shenoy, V. (2000). Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements. *Nanotechnology*, 11(3) : 139–147. 39, 57

Mitrushchenkov, A., Chambaud, G., Yvonnet, J. et He, Q.-C. (2010). Towards an elastic model of wurtzite aln nanowires. *Nanotechnology*, 21(25) : 255702. 18, 159

Moal, A. (2014). Scanair reference documentation. version v. 7.5. Rapport PSN-RES/SEMIA-2014-00409. 34, 36, 37, 145, 148, 154

Moal, A., Georgenthum, V. et Marchand, O. (2014). Scanair : A transient fuel performance code : Part one : General modelling description. *Nuclear Engineering and Design*, 280 : 150 – 171. 30

Monchiet, V. et Kondo, D. (2012). Semi-analytical investigation of stress interfacial effects in ductile media with nanosized spheroidal cavities. In *Procedia IUTAM*, volume 3, pages 228–238. 162

Monchiet, V. et Kondo, D. (2013). Combined voids size and shape effects on the macroscopic criterion of ductile nanoporous materials. *International Journal of Plasticity*, 43 : 20–41. 162

Mori, T. et Tanaka, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21(5) : 571 – 574. 47, 62

Muller, P. et Saul, A. (2004). Elastic effects on surface physics. *Surface Science Reports*, 54(5-8) : 157–258. 57

Ou, Z., Wang, G. et Wang, T. (2009). Elastic fields around a nanosized spheroidal cavity under arbitrary uniform remote loadings. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 28(1) : 110 – 120. 162

Paliwal, B. et Cherkaoui, M. (2012). Estimation of anisotropic elastic properties of nanocomposites using atomistic-continuum interphase model. *International Journal of Solids and Structures*, 49(18) : 2424–2438. 18, 56, 57, 60, 61, 69

Pensée, V., He, Q.-C. et Quang, H. (2009). Poroelasticity of fluid-saturated nanoporous media. *Materials Science Forum*, 614 : 35–40. 108

Perales, F., Dubois, F., Monerie, Y., Piar, B. et Stainier, L. (2010). A nonsmooth contact dynamics-based multi-domain solver : Code coupling (xper) and application to fracture. *European Journal of Computational Mechanics*, 19(4) : 389–417. 124, 142

Ponte Castañeda, P. et Willis, J. (1995). The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43(12) : 1919–1951. 41, 46, 47, 48, 50, 52, 53, 63, 77, 83, 89, 90, 95, 101, 115, 130, 134, 139, 145, 160, 167

Ray, I., Thiele, H. et Matzke, H. (1991). Fission gas behaviour during power transients in high burn-up lwr nuclear fuels studied by electron microscopy. *Fundamental Aspects of Inert Gases in Solids*. 32

Sharma, P. et Ganti, S. (2004). Size-dependent Eshelby's tensor for embedded nanoinclusions incorporating surface/interface energies. *Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME*, 71(5) : 663–671. 56, 62

Shuttleworth, R. (1950). The surface tension of solids. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 63(5) : 444–457. 57

Stolz, C. et Zaoui, A. (1991). Analyse morphologique et approches variationnelles du comportement d'un milieu élastique hétérogène. *C. R. Acad Sci.*, 312 : 143–150. 18, 40, 49, 107, 159

Suquet, P. et Bornert, M. (2001). Rappels de calcul tensoriel et d'élasticitè. In Bornert, M., Bretheau, T. et Gilormini, P., éditeurs, *Homogénéisation en mécanique des matériaux*, volume 2, chapitre 5, pages 171–202. Hermès Science Publications, Paris. 137, 138, 146

Turnbull, J. (1971). The distribution of intragranular fission gas bubbles in UO_2 during irradiation. *Journal of Nuclear Materials*, 38(2) : 203–212. 31, 32

Veshchunov, M., Ozrin, V., Shestak, V., Tarasov, V., Dubourg, R. et Nicaise, G. (2006). Development of the mechanistic code mfpr for modelling fission-product release from irradiated uo2 fuel. *Nuclear Engineering and Design*, 236(2) : 179–200. 33

Vincent, P.-G. (2007). *Modélisation micromécanique de la croissance et de la percolation de pores sous pression dans une matrice céramique à haute température*. Thèse, Université d'Aix-Marseille I. 13, 18, 20, 24, 33, 34, 35, 36, 39, 40, 109, 143, 144, 146, 148, 150, 151, 152, 153, 154, 155, 156, 162, 167, 168

Vincent, P.-G., Monerie, Y. et Suquet, P. (2009). Porous materials with two populations of voids under internal pressure : I. Instantaneous constitutive relations. *International Journal of Solids and Structures*, 46 : 480–506. 13, 20, 33, 34, 39, 40, 109, 167, 168

Wang, J., Duan, H., Zhang, Z. et Huang, Z. (2005). An anti-interpenetration model and connections between interphase and interface models in particle-reinforced composites. *International Journal of Mechanical Sciences*, 47(4-5 SPEC. ISS.) : 701–718. 61

Wang, J., Huang, Z., Duan, H., Yu, S., Feng, X., Wang, G., Zhang, W. et Wang, T. (2011). Surface stress effect in mechanics of nanostructured materials. *Acta Mechanica Solida Sinica*, 24(1) : 52–82. 56, 60

Wolfer, W. (2011). Elastic properties of surfaces on nanoparticles. *Acta Materialia*, 59(20) : 7736–7743. 57, 148, 149, 156

Wolfram Research, I. (2012). Mathematica 9. 130

Yagnik, S., Turnbull, J. et Gomme, R. (2004). Microstructure investigations of as-irradiated, annealed and power ramped high burn-up fuel. In *Pellet-clad Interaction in Water Reactor Fuels*, pages 123–141, Aix-en-Provence, France. OECD Publishing. 31

Yvonnet, J., Mitrushchenkov, A., Chambaud, G. et He, Q.-C. (2011). Finite element model of ionic nanowires with size-dependent mechanical properties determined by ab initio calculations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(5-8) : 614–625. 18, 19, 39, 57, 124, 125, 142, 148, 149, 156, 159, 161, 162, 163

Zacharie, I., Lansiart, S., Combette, P., Trotabas, M., Coster, M. et Groos, M. (1998). Microstructural analysis and modelling of intergranular swelling of an irradiated UO_2 fuel treated at high temperature. *Journal of Nuclear Materials*, 255 : 92–104. 32

Zaoui, A. (1994). *Matériaux hétérogènes et composites*. 42

Zaoui, A. (2001). Changement d'échelle : motivation et méthodologie. In Bornert, M., Bretheau, T. et Gilormini, P., éditeurs, *Homogénéisation en mécanique des matériaux*, volume 1, chapitre 1, pages 19–39. Hermès Science Publications, Paris. 42

Modélisation du comportement élastique des matériaux nanoporeux : application au combustible UO_2

Résumé : Le dioxyde d'uranium irradié (UO_2), combustible nucléaire des réacteurs à eau pressurisée, contient deux populations de cavités saturées par des gaz de fission : i. des cavités intergranulaires plutôt lenticulaires, dont la taille varie de quelques dizaines à plusieurs centaines de nanomètres, ii. des cavités intragranulaires plutôt sphériques, dont la taille est de l'ordre du nanomètre. Des travaux récents ont montré qu'il existe un effet de surface à l'échelle des cavités nanométriques qui modifie le comportement élastique effectif du combustible. Ce travail vise à proposer un modèle micromécanique analytique capable de tenir compte de cette microstructure hétérogène ainsi que de l'effet de surface afin de décrire le comportement élastique macroscopique de l'UO_2 irradié. La démarche mise en oeuvre est fondée sur une modélisation multi-échelles et s'appuie sur des techniques d'homogénéisation en mécanique des matériaux. L'UO_2 irradié est décrit comme un matériau poreux contenant des nanocavités sphériques (cavités intragranulaires) et sphéroïdales (cavités intergranulaires), sous pression et orientées aléatoirement. L'effet de surface présent à l'échelle nanométrique est pris en compte via un modèle d'interface imparfaite cohérente entre la matrice et les cavités. Un modèle original fondé sur l'approche par motifs morphologiques représentatifs a été développé afin de décrire le comportement élastique effectif de ce milieu hétérogène. Le modèle analytique proposé repose sur des hypothèses simplificatrices dont la pertinence est évaluée à partir de simulations numériques par éléments finis qui s'appuient sur une formulation spécifique afin de tenir compte de la présence d'interfaces imparfaites cohérentes.

Mots-clefs : Matériaux nanoporeux, effet de surface, dioxyde d'uranium, combustible nucléaire, homogénéisation, élasticité.

Modeling of the elastic behavior of nanoporous materials : application to UO_2 fuel

Abstract: The irradiated uranium dioxide (UO_2), which is the nuclear fuel of pressurized water reactors, contains two populations of cavities saturated by fission gaz : i. intergranular cavities almost lenticular in shape whose size ranges between few tens to several hundred nanometers, ii. intragranular cavities, almost spherical in shape whose size is of the order of the nanometer. Recent studies have shown the existence of a surface effect at the scale of nanometric cavities, which influences the effective elastic behavior of the nuclear fuel. In this work, an analytical micromechanical model, which is able to take into account this heterogeneous microstructure and the surface effect at the nanometric scale, is proposed to describe the macroscopic behavior of the irradiated UO_2. The approach is based on a multiscale modeling and homogenization techniques in mechanics of materials. The irradiated UO_2 is described as a porous media, which contains pressurized spherical nanocavities (intragranular cavities) and randomly oriented pressurized spheroidal cavities (intergranular cavities). The surface effect is taken into account with imperfect coherent interfaces between the matrix and the cavities. A novel model based on the morphologically representative pattern approach has been developed to describe the effective elastic behavior of this heterogeneous medium. The proposed model relies on assumptions whose relevance is evaluated with finite element simulations which require a specific formulation to take into account the imperfect coherent interfaces.

Keywords: Nanoporous materials, surface effect, uranium dioxide, nuclear fuel, homogenization, elasticity.