



**HAL**  
open science

# A numerical model for the two-phase composites matrix-rigid inclusions: Application to the determination of the elastic and fatigue properties of the bituminous materials

Adel Lachihab

► **To cite this version:**

Adel Lachihab. A numerical model for the two-phase composites matrix-rigid inclusions: Application to the determination of the elastic and fatigue properties of the bituminous materials. Engineering Sciences [physics]. Ecole des Ponts ParisTech, 2004. English. NNT: . pastel-00001036

**HAL Id: pastel-00001036**

**<https://pastel.hal.science/pastel-00001036>**

Submitted on 14 Feb 2005

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



**ÉCOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSEES**

**THÈSE DE DOCTORAT**

*Pour obtenir le grade de*

**DOCTEUR DE  
L'ÉCOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSEES**

*Spécialité : Structures et Matériaux*

*Présentée par*

**Adel Lachihab**

Titre :

**Un modèle numérique pour les composites biphasés matrice -  
inclusions rigides : Application à la détermination des propriétés  
élastiques et en fatigue des enrobés bitumineux**

Soutenue le 6 Décembre 2004

devant le jury composé de :

<b>D. Bouvard</b>	Rapporteur
<b>D. Jeulin</b>	Rapporteur
<b>Q. C. Hé</b>	Examineur
<b>P. Ponte-Castañeda</b>	Examineur
<b>P. Tamagny</b>	Examineur
<b>K. Sab</b>	Directeur de Thèse



*"Le peu que je sais, c'est à mon ignorance que je le dois"*

Sacha Guitry (1885-1957)

À ma mère, à mon père,

À tous ceux qui me sont chers,...



# REMERCIEMENTS

Voilà venue une section très importante... la section des remerciements!!! Peut-être est-ce la plus difficile dans une thèse! En effet, chaque personne qui y est citée mérite la plus belle phrase ce qui nécessite des réels talents littéraires... Ainsi, comme tout un chacun, je vais essayer de faire au mieux et que tous les gens qui me liront sachent que ces quelques lignes ont été écrites avec tout mon coeur.

Pour certains, il peut avoir peu de valeur à leurs yeux, mais pour moi, si j'en suis arrivé là, c'est bien par la patience, la disponibilité, les précieux conseils des gens qui ont croisé mon chemin.

Tout d'abord, je ne pourrais pas commencer les remerciements sans évoquer la personne qui m'a proposé le sujet de thèse et qui m'a encadré tout au long de ces trois années : Karam SAB. Au travers de nos discussions, ils m'a apporté une compréhension plus approfondie des divers aspects du sujet. Je salue aussi sa souplesse, son ouverture d'esprit et sa bonne humeur qui ont su me laisser une large marge de liberté pour mener à bien ce travail de recherche.

Je remercie tous les membres de mon jury, c'est-à-dire Didier Bouvard et Dominique Jeulin pour avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse, Qi-Chang Hé, Pedro Ponte-Castañeda et Philippe Tamagny pour en avoir été examinateurs.

Cette thèse s'est déroulée successivement au sein du Laboratoire des Matériaux et Structures du Génie Civil (LMSGC) et du Laboratoire d'Analyse des Matériaux et Identification (LAMI). Je tiens à remercier tous mes collègues et mes amis du LMSGC et du LAMI pour l'ambiance chaleureuse, amicale et passionnée.

Toute ma gratitude à toutes les personnes ayant relu, corrigé et commenté mon manuscrit et ayant ainsi participé à son amélioration.

J'aimerais remercier Ferhat Hammoum, Didier Bodin et Chantal De La Roche pour m'avoir accueilli à la division MSC du LCPC-Nantes et pour les diverses discussions que j'ai pu avoir avec eux.

Je voudrais remercier tous les auteurs des programmes du domaine public que j'ai utilisés intensément durant cette thèse, à savoir tous les contributeurs à Linux, gcc, Glut, pdfL<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X... Sans eux, mes conditions de travail auraient sans doute été très différentes et beaucoup moins agréables.

Et pour finir, je remercie ma famille et mes amis de m'avoir soutenu et supporter durant ces 3 années de thèse et en particulier mes parents, mes frères et soeurs et tous les autres qui se reconnaîtront et qui ont su me soutenir pendant les moments difficiles que j'ai pu avoir et me faire profiter de leur bonne humeur.

# RÉSUMÉ

Un modèle discret tridimensionnel dédié à la prédiction des propriétés élastiques linéaires et en fatigue des matériaux granulaires cohésifs (matrice+inclusions) tel que les bétons bitumineux est présenté. Le matériau est considéré comme un assemblage d'inclusions cohésives infiniment rigides. La mosaïque de Voronoï pour un ensemble de sphères et sa triangulation duale de Delaunay sont utilisées pour modéliser la microstructure du matériau. Le comportement mécanique des contacts entre particules est modélisé via une loi d'interface. Une méthode d'homogénéisation discrète est employée pour l'estimation des propriétés effectives du matériau. Les prédictions du modèle sont comparées à celles déterminées par la méthode des éléments finis pour les réseaux cubique simple et cubique centré. Les résultats des simulations ont montré que les erreurs de modélisation sont inférieures à 15% lorsque à la fois le contraste entre rigidité des inclusions et celle de la matrice est supérieure à 100 et la compacité des inclusions est assez élevée ( $> 50\%$ ).

Dans un premier lieu, le modèle discret est appliqué aux matériaux aléatoires pour la détermination de la taille minimale du Volume Élémentaire Représentatif (*VER*) en élasticité linéaire et en fatigue en utilisant une approche statistique.

Dans un second lieu, le modèle proposé est appliquée à l'étude de l'influence des caractéristiques morphologiques sur les propriétés effectives du matériau.

*Mots clefs* : Modélisation discrète ; Homogénéisation ; Volume Élémentaire Représentatif ; Caractéristiques morphologiques.



# ABSTRACT

A discrete 3D model for the elastic behavior of random aggregate composites has been proposed. The aggregates are rigid particles embedded into an elastic matrix. The inter-particle contact layers are modeled by an elastic interface constitutive equation. The Dirichlet tessellation and its dual Delaunay network are used to connect the neighboring particles. A discrete homogenization method is used to estimate the linear effective properties of the material. The validity and limitations of the model have been discussed through comparisons with finite element simulations on regular periodic unit cells in the limit case of rigid inclusions.

The proposed model has been applied to random microstructures generated by the Voronoï tessellation.

Firstly, the minimum RVE size for the (not weighted) Voronoï tessellation model has been numerically determined.

Secondly, a fatigue damage law has been introduced into the interfaces in order to determine the minimum RVE size in the fatigue damage case. Lastly, the proposed model has been used in the study of the influence of the morphological characteristics on the effective properties of the material.

*Key words* : A discrete 3D model ; Homogenization ; Representative Volume Element ; Morphological characteristics.



# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>I Introduction bibliographique</b>	<b>5</b>
<b>1 Introduction bibliographique</b>	<b>7</b>
1.1 Introduction . . . . .	8
1.2 Modélisation continue des matériaux matrice-inclusions . . . . .	9
1.2.1 Modèles micromécaniques pour les enrobés bitumineux . . . . .	9
1.2.1.1 Aperçu sur le modèle autocohérent à trois phases . . . . .	9
1.2.1.2 Prise en compte de la répartition du film de bitume . . . . .	10
1.2.1.3 Une modélisation micromécanique des mastics d'asphalte d'après Shashidhar et Shenoy (2002) . . . . .	11
1.2.2 Une modélisation des milieux granulaires cohésifs (Christoffersen, (1983)) . . . . .	12
1.2.2.1 Description géométrique . . . . .	12
1.2.2.2 Position du problème mécanique . . . . .	13
1.3 Modélisation discrète des matériaux matrice-inclusions . . . . .	15
1.3.1 Description classique des matériaux granulaires . . . . .	15
1.3.1.1 Description géométrique des matériaux granulaires . . . . .	16
1.3.1.2 Description statique des matériaux granulaires . . . . .	18
1.3.1.3 Description cinématique des matériaux granulaires . . . . .	19
1.3.2 Comportement local dans les milieux granulaires secs ou cohésifs . . . . .	21
1.3.2.1 Les milieux granulaires secs : loi de contact de Hertz et de Mindlin . . . . .	21
1.3.2.2 Une loi de contact dans les milieux granulaires cohésifs proposée par Zhu et Nodes (2000) : . . . . .	23
1.3.3 Relation entre comportement local et comportement global : Technique d'homogénéisation . . . . .	27
1.4 Conclusion . . . . .	28

<b>II</b>	<b>Construction du modèle proposé</b>	<b>29</b>
<b>2</b>	<b>Modélisation géométrique de la microstructure</b>	<b>31</b>
2.1	Introduction . . . . .	32
2.2	Tessellation de Voronoï pour un ensemble de points . . . . .	33
2.2.1	Principe . . . . .	33
2.2.2	Quelques algorithmes de construction du diagramme de Voronoï	35
2.2.3	Disposition des centres . . . . .	37
2.2.3.1	Structures régulières . . . . .	37
2.2.3.2	Structures aléatoires : . . . . .	38
2.3	Généralisations de la tessellation de Voronoï à des systèmes polydisperses . . . . .	43
2.3.1	Principe . . . . .	43
2.3.2	Assemblage de sphères . . . . .	47
2.3.2.1	Empilements RSA (Random Sequential Adsorption) . . . . .	47
2.3.2.2	Empilements RSA densifiés . . . . .	47
2.4	Génération de microstructures contrôlées . . . . .	49
2.4.1	Caractérisation d'une distribution granulométrique par la fonction de répartition des rayons . . . . .	49
2.4.1.1	La tessellation de Voronoï . . . . .	49
2.4.1.2	Calcul de la fonction de répartition à partir de la courbe granulométrique . . . . .	50
2.4.2	Étude paramétrique de la distribution granulométrique des régions de Voronoï par la méthode de Monte-Carlo . . . . .	52
2.4.2.1	Rappel sur le principe de la méthode de Monte-Carlo	52
2.4.2.2	Génération d'un ensemble de sphères à partir d'une fonction de répartition des rayons . . . . .	52
2.4.2.3	Résultats des simulations . . . . .	55
2.5	Le modèle géométrique proposé . . . . .	59
<b>3</b>	<b>Modélisation mécanique des connexions inter-particulaires</b>	<b>63</b>
3.1	Introduction . . . . .	64
3.2	Écriture de l'équilibre du système de particules . . . . .	65
3.3	Écriture du comportement du système de particules . . . . .	68
3.3.1	Interactions inter-particulaires : Une loi d'interface en élasticité endommageable . . . . .	68
3.3.1.1	Modélisation asymptotique d'une interface mince entre solides rigides en élasticité linéaire . . . . .	68
3.3.1.2	Extension à l'élasticité endommageable . . . . .	73
3.3.2	Comportement élastique linéaire du système de particules . . . . .	74
3.3.3	Récapitulatif . . . . .	78
3.4	Du micro au macro : Homogénéisation discrète . . . . .	79

3.4.1	Principe . . . . .	79
3.4.2	Développement de la démarche . . . . .	79
3.5	Mise en oeuvre numérique . . . . .	81
3.5.1	Position du problème . . . . .	82
3.5.2	Méthode du Lagrangian augmenté . . . . .	83
3.5.2.1	Principe de la méthode . . . . .	83
3.5.2.2	Algorithmes de détermination de point-selle . . . . .	85
3.6	Conclusions . . . . .	89
 <b>III Validation et exploitation du modèle</b>		<b>91</b>
 <b>4 Comparaisons et validation en élasticité linéaire</b>		<b>93</b>
4.1	Introduction . . . . .	94
4.2	Limitations de l'hypothèse <b>H2</b> "inclusions infiniment rigides" . . . . .	95
4.2.1	Homogénéisation périodique par la méthode des éléments finis des réseaux <i>CS</i> et <i>CC</i> . . . . .	95
4.2.1.1	Géométries et problèmes à résoudre . . . . .	95
4.2.1.2	Résultats des simulations par éléments finis . . . . .	101
4.2.2	Une borne supérieure des coefficients élastiques homogénéisés pour le réseau <i>CS</i> . . . . .	104
4.2.2.1	Développement de la démarche . . . . .	107
4.2.2.2	Résultats des calculs analytiques et comparaison avec les simulations par <i>EF</i> dans le cas limite d'inclusions infiniment rigides . . . . .	109
4.2.2.3	Application à l'estimation de l'erreur induite par l'hypothèse "inclusions infiniment rigides" . . . . .	114
4.2.3	Conclusions . . . . .	115
4.3	Comparaisons éléments finis-modèle discret . . . . .	117
4.3.1	Homogénéisation discrète des réseaux <i>CS</i> et <i>CC</i> . . . . .	117
4.3.1.1	Géométrie et problèmes à résoudre . . . . .	117
4.3.1.2	Résultats des calculs analytiques . . . . .	118
4.3.2	Comparaisons avec la méthode des éléments finis . . . . .	121
4.4	Conclusions . . . . .	125
 <b>5 Volume Élémentaire Représentatif en élasticité linéaire et en fatigue</b>		<b>127</b>
5.1	Introduction . . . . .	128
5.2	Notion de <i>VER</i> et étude bibliographique . . . . .	129
5.2.1	Les conditions aux limites . . . . .	129
5.2.2	Les modules élastiques apparents et effectifs . . . . .	131
5.2.3	Détermination de la taille du <i>VER</i> par une approche statistique . . . . .	133
5.2.3.1	Rappel sur la covariance et notions de "portée intégrale" . . . . .	133

5.2.3.2	Les fonctions de corrélation . . . . .	135
5.3	Détermination de la taille du <i>VER</i> en élasticité linéaire . . . . .	139
5.3.1	Génération des microstructures et conditions aux limites . . . . .	139
5.3.1.1	Génération des microstructures . . . . .	139
5.3.1.2	Conditions aux limites . . . . .	140
5.3.2	Les modules élastiques homogénéisés . . . . .	141
5.3.3	Résultats des simulations par le modèle discret . . . . .	142
5.3.3.1	Les propriétés élastiques moyennes . . . . .	142
5.3.3.2	Dispersion des modules élastiques effectifs . . . . .	145
5.3.4	Application de l'approche utilisant les fonctions de corrélation . . . . .	146
5.4	Détermination de la taille du <i>VER</i> en fatigue . . . . .	151
5.4.1	Quelques rappels sur la fatigue . . . . .	151
5.4.2	Prise en compte de la fatigue des interfaces inter-granulaires . . . . .	154
5.4.2.1	Cumul des dommages . . . . .	155
5.4.2.2	Génération des microstructures et conditions aux limites . . . . .	156
5.4.3	Résultats des simulations pour la détermination de la taille du <i>VER</i> . . . . .	158
5.4.4	Influence des paramètres de la loi de fatigue considérée . . . . .	162
5.5	Conclusions . . . . .	165
<b>6</b>	<b>Influence des caractéristiques morphologiques sur les propriétés effectives du matériau</b> . . . . .	<b>167</b>
6.1	Introduction . . . . .	168
6.2	Génération des microstructures . . . . .	169
6.3	Résultats des simulations . . . . .	175
6.3.1	Élasticité linéaire . . . . .	175
6.3.2	Élasticité endommageable par fatigue . . . . .	178
6.4	Conclusions . . . . .	182
	<b>Conclusions et perspectives</b> . . . . .	<b>185</b>
	<b>Annexe</b> . . . . .	<b>199</b>

# Table des figures

1.1	Modèle à trois phases (dans Hammoum (2000)). . . . .	9
1.2	Schématisation du concept de percolation d'après Shashidhar et She- noy (2002). . . . .	12
1.3	Configuration des particules d'après Christoffersen (1983). . . . .	12
1.4	Définition de la déformation microscopique à partir d'une triangula- tion de l'ensemble de particules circulaires rigides. <b>(a)</b> D'après Sab (1996) et <b>(b)</b> D'après Bagi (1996). . . . .	20
1.5	Modèle de contact simplifié. . . . .	22
1.6	Configuration des particules d'après Zhu et Nodes (2000). . . . .	23
1.7	Contact des particules avec prise en compte d'un liant d'après Zhu et Nodes (2000). . . . .	23
1.8	Représentation schématique d'un système élastique particule-matrice d'après Zhu et al. (1996a). . . . .	24
1.9	Deux types de système équivalent ressort-amortisseur d'après Zhu et al. (1996b) : <b>(a)</b> matrice de Maxwell et <b>(b)</b> matrice de Voigt. . . . .	26
1.10	Principe de l'homogénéisation dans les milieux granulaires d'après Cambou et al. (1995). . . . .	27
2.1	Constitution du mélange : (1) Les "grosses" inclusions (2) La matrice, elle-même constituée des "petites" inclusions et du liant (le bitume). . .	32
2.2	La microstructure est constituée par la répétition d'un ensemble de points contenus dans une cellule de base $V$ . . . . .	33
2.3	Construction de la cellule de Voronoï du point $P_0$ à partir des médiatrices des segments $P_0P_j$ avec $j \in [1, 7]$ . Le point $P_5$ n'est pas voisin de $P_0$ au sens de Voronoï. La médiatrice joignant ces deux points ne coupe pas le plus petit polygone convexe formé par les autres médiatrices. La cellule correspondante est représentée en (b). . . . .	34
2.4	Diagramme périodique de Voronoï et triangulation duale de Delaunay d'un ensemble de points en 2D. . . . .	35
2.5	Dualité entre le pavage de Voronoï et la triangulation de Delaunay. . .	36
2.6	Disposition "cubique simple" des sites de germination et structure en cube correspondante générée par la méthode de Voronoï. . . . .	38

2.7	Disposition "cubique centrée" des sites de germination et structure en tétrakaïdécaèdres correspondante générée par la méthode de Voronoï.	38
2.8	Disposition "cubique à faces centrées" des sites de germination et structure en dodécaèdres rhomboïdaux correspondante générée par la méthode de Voronoï. . . . .	39
2.9	Le nombre de points contenus dans une surface $S$ quelconque pour différentes réalisations d'un processus de Poisson suit une loi de Poisson de paramètre $\rho S$ . . . . .	40
2.10	Deux exemples de simulations de processus de Neyman-Scott d'après Goreaud (2000). . . . .	41
2.11	Exemple de trois semis obtenus par un processus de Gibbs, avec les fonctions de coût associées : un semis régulier (i) ; et deux structures mixtes (ii) et (iii) constituées de petits agrégats répartis régulièrement dans l'espace. ( D'après Goreaud (2000)) . . . . .	42
2.12	Disposition aléatoire des sites de germination et structure en polyèdres convexes correspondante générée par la méthode de Voronoï. . . . .	43
2.13	Le plan médiateur entre deux sphères de rayons différents peut couper une des sphères. . . . .	44
2.14	Généralisation de la tessellation de Voronoï. (a) Tessellation de Voronoï pour un système monodisperse (b) Tessellation radicale. . . . .	44
2.15	Lorsque les sphères sont en contact, le plan radical passe par le point de contact. . . . .	45
2.16	La structure est constituée par la répétition bidimensionnelle (spatiale) d'un ensemble de cercles (sphères). . . . .	46
2.17	Méthode des plans radicaux. . . . .	46
2.18	Dynamique moléculaire : Algorithme de prédiction-corrrection d'ordre 3 d'après Emam (2002). . . . .	48
2.19	La fonction de répartition des rayons normalisés des sphères. . . . .	54
2.20	Comparaisons entre la fonction de répartition des rayons des sphères initialement générées et la fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Voronoï associées. <b>(a)</b> RSA avec $f = 10\%$ , <b>(b)</b> RSA avec $f = 30\%$ , <b>(c)</b> RSA avec $f = 50\%$ , <b>(d)</b> RSA densifié avec $f = 75\%$ . . . . .	56
2.21	Fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Poisson-Voronoï. . . . .	57
2.22	Comparaisons entre la fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Voronoï et celle des rayons des sphères initialement générées pour différentes fractions volumiques. . . . .	58
2.23	Écart relatif entre la fonction de répartition des rayons des sphères et celle des rayons équivalents des régions de Voronoï : Densité des sphères 75%. . . . .	58
2.24	Configuration des particules. . . . .	60

3.1	Les inclusions sont modélisées par les régions de Voronoï contractées. La matrice se situe dans l'interface entre deux régions voisines. L'ensemble forme une cellule élémentaire périodique. . . . .	64
3.2	Les efforts exercés par la particule $P^j$ sur la particule $P^i$ . . . . .	65
3.3	Géométrie du problème tridimensionnel. . . . .	69
3.4	Le chargement appliqué à la structure $\Omega^e$ . . . . .	70
3.5	Le domaine occupé par la matrice est assimilé à une surface $S$ . . . . .	70
3.6	La microstructure continue et périodique est équivalente à un réseau de "poutres" encastrées. . . . .	79
3.7	Le même réseau périodique de liaisons est produit avec deux cellules unitaires différentes. . . . .	80
4.1	La microstructure modèle est équivalente à un réseau périodique de "poutres" encastrées. Le milieu homogène équivalent est déduit en appliquant une méthode d'homogénéisation discrète. . . . .	94
4.2	(a) région de Voronoï pour le réseau $CS$ (b) région de Voronoï pour le réseau $CC$ . . . . .	96
4.3	Microstructure périodique d'un matériau composite. . . . .	97
4.4	Maillage du huitième de la cellule élémentaire périodique : (1) réseau $CS$ ; (2) réseau $CC$ . . . . .	100
4.5	Variation des propriétés effectives en fonction du rapport $\frac{E^I}{E^M}$ pour le <b>réseau cubique simple</b> : (a) $f = 61\%$ , (b) $f = 73\%$ et (c) $f = 80\%$ . . . . .	102
4.6	Variation des propriétés effectives en fonction du rapport $\frac{E^I}{E^M}$ pour le <b>réseau cubique centré</b> : (a) $f = 61\%$ , (b) $f = 73\%$ et (c) $f = 80\%$ . . . . .	103
4.7	Estimation, <b>par la méthode des éléments finis</b> , de l'erreur relative sur les modules élastiques effectifs induite par l'hypothèse "inclusions infiniment rigides" pour le <b>réseau cubique simple</b> : (a) module de compressibilité, (b) module de cisaillement et (c) coefficient d'anisotropie cubique. . . . .	105
4.8	Estimation, <b>par la méthode des éléments finis</b> , de l'erreur relative sur les modules élastiques effectifs induite par l'hypothèse "inclusions infiniment rigides" pour le <b>réseau cubique centré</b> : (a) module de compressibilité, (b) module de cisaillement et (c) coefficient d'anisotropie cubique. . . . .	106
4.9	En $2D$ , les inclusions sont disposées suivant un réseau carré. Les déformations sont homogènes par morceau. . . . .	108
4.10	Un huitième de la cellule de base tridimensionnelle. Les déformations sont homogènes par morceau. Le nombre total de zones est huit. . . . .	109
4.11	Comparaisons entre le <b>module de compressibilité</b> normalisé obtenue par la méthode des éléments finis ( $\frac{k_{\infty}^{EF}}{k^M}$ ) et celui estimé par la borne supérieure ( $\frac{k_{\infty}^{sup}}{k^M}$ ). . . . .	112

4.12 Comparaisons entre <b>le module de cisaillement</b> normalisé obtenue par la méthode des éléments finis ( $\frac{\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par la borne supérieure ( $\frac{\mu_{\infty}^{SUP}}{\mu^M}$ ). . . . .	112
4.13 Comparaisons entre <b>le coefficient d'anisotropie cubique</b> normalisé obtenue par la méthode des éléments finis ( $\frac{\delta\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par la borne supérieure ( $\frac{\delta\mu_{\infty}^{SUP}}{\mu^M}$ ). . . . .	113
4.14 Récapitulatif des erreurs relatives sur <b>les trois coefficients élastiques</b> : comparaisons entre les coefficients élastiques "exacts" obtenus par <b>la méthode des éléments finis</b> et les estimations de <b>la borne supérieure</b> . . . . .	114
4.15 Estimation, <b>par la borne supérieure proposée</b> , de l'erreur relative sur les modules élastiques effectifs induite par l'hypothèse "inclusions infiniment rigides" pour <b>le réseau cubiques simple</b> : <b>(a)</b> module de compressibilité, <b>(b)</b> module de cisaillement et <b>(c)</b> coefficient d'anisotropie cubique. . . . .	116
4.16 Cellule de base périodique du <b>réseau discret CS</b> . La région de Voronoï est un cube : <b>6 connections identiques</b> sont associées aux 6 faces (carrés) du cube. . . . .	117
4.17 Cellule de base périodique du <b>réseau discret CS</b> . La région de Voronoï est un tétrakaïdécaèdres : 8 connections identiques associées aux 8 hexagones et 6 connections identiques associées aux 6 carrés ( <b>14 connections</b> ) . . . . .	118
4.18 Comparaisons entre <b>le module de compressibilité</b> normalisé obtenu par la méthode des éléments finis ( $\frac{k_{\infty}^{EF}}{k^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{k^{Discet}}{k^M}$ ) : Cas du <b>réseau cubique simple</b> . . . . .	121
4.19 Comparaisons entre <b>le module de cisaillement</b> normalisé obtenu par la méthode des éléments finis ( $\frac{\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{\mu^{discet}}{\mu^M}$ ) : Cas du <b>réseau cubique simple</b> . . . . .	122
4.20 Comparaisons entre <b>le coefficient d'anisotropie cubique</b> normalisé obtenu par éléments finis ( $\frac{\delta\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{\delta\mu^{discet}}{\mu^M}$ ) : Cas du <b>réseau cubique simple</b> . . . . .	122
4.21 Comparaisons entre <b>le module de compressibilité</b> normalisé obtenue par la méthode des éléments finis ( $\frac{k_{\infty}^{EF}}{k^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{k^{Discet}}{k^M}$ ) : Cas du <b>réseau cubique centré</b> . . . . .	123
4.22 Comparaisons entre <b>le module de cisaillement</b> normalisé obtenu par la méthode des éléments finis ( $\frac{\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{\mu^{discet}}{\mu^M}$ ) : Cas du <b>réseau cubique centré</b> . . . . .	123

4.23	Comparaisons entre le <b>coefficient d'anisotropie cubique</b> normalisé obtenu éléments finis ( $\frac{\delta\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{\delta\mu^{discet}}{\mu^M}$ ) : Cas du <b>réseau cubique centré</b> . . . . .	124
5.1	Illustration de la microstructure aléatoire périodisée en 2D. . . . .	140
5.2	Nombre de réalisations en fonction du nombre moyen de particule $\rho V $ (équivalent à la taille du <i>VER</i> ) pour la détermination des modules élastiques apparents. . . . .	143
5.3	La valeur moyenne et l'intervalle de confiance du <b>coefficient d'anisotropie cubique normalisé</b> ( $\frac{\delta\mu^{Hom}}{\mu^M}$ ) en fonction de la taille du volume élémentaire. . . . .	143
5.4	La valeur moyenne et l'intervalle de confiance du <b>module de compressibilité normalisé</b> ( $\frac{k^{Hom}}{k^M}$ ) en fonction de la taille du volume élémentaire. . . . .	144
5.5	La valeur moyenne et l'intervalle de confiance du <b>module de cisaillement normalisé</b> ( $\frac{\mu^{Hom}}{\mu^M}$ ) en fonction de la taille du volume élémentaire. . . . .	145
5.6	Variation de la variance ( $\sigma_{\mu}^2$ ) sur le module de cisaillement normalisé en fonction de l'inverse de taille du <i>VER</i> . . . . .	146
5.7	Fonctions de corrélation $\langle\chi_m\varepsilon_{11}\rangle$ suivant l'axe $x$ pour trois différentes tailles du <i>VER</i> : <b>(a)</b> $\frac{L}{D} = 4.282$ , <b>(b)</b> $\frac{L}{D} = 2.141$ et <b>(c)</b> $\frac{L}{D} = 1.285$ . . . . .	150
5.8	Énergies élastiques moyennes et intervalles de confiance pour les trois tailles du <i>VER</i> considérées. . . . .	151
5.9	Fonctions de corrélation $\langle\chi_m\varepsilon_{11}\rangle$ pour la taille $\frac{L}{D} = 2.14$ suivant différents axes. . . . .	152
5.10	Courbe de Wöhler d'après Baaj (2002). . . . .	153
5.11	Algorithme de résolution en élasticité endommageable par fatigue. . . . .	157
5.12	Nombre de réalisations en fonction du nombre moyen de particule $\rho V $ (équivalent à la taille du <i>VER</i> ) pour la détermination du <i>VER</i> en fatigue. (Erreur relative de Monte-Carlo est fixée à 5%). . . . .	158
5.13	Exemple d'évolution de l'endommagement en fonction du nombre de cycles imposés pour les deux modes de ruptures envisagés. Taille de la réalisation 154 grains. . . . .	159
5.14	Courbe moyenne et écart type de l'énergie normalisée (par rapport à l'état vierge) en fonction du nombre de cycles pour différentes tailles du <i>VER</i> : <b>Rupture progressive</b> de chaque connexion. . . . .	160
5.15	Courbe moyenne et écart type de l'énergie normalisée (par rapport à l'état vierge) en fonction du nombre de cycles pour différentes tailles du <i>VER</i> : <b>Rupture brutale</b> de chaque connexion. . . . .	160
5.16	Valeur moyenne et écart type du nombre de cycles à la rupture (diminution de 50% de la rigidité initiale) en fonction de la taille du <i>VER</i> : <b>Rupture progressive</b> de chaque connexion. . . . .	161

5.17	Valeur moyenne et écart type du nombre de cycles à la rupture (diminution de 50% de la rigidité initiale) en fonction de la taille du $VER$ : <b>Rupture brutale</b> de chaque connexion. . . . .	162
5.18	Estimation de l'erreur commise sur la détermination de la durée de vie de la microstructure en fonction de la taille du $VER$ . . . . .	163
5.19	Influence du paramètre $\alpha$ . . . . .	163
5.20	Influence du paramètre $\beta$ . . . . .	164
6.1	Variation des $FVL$ en fonction des volumes normalisés des inclusions ( $\frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle}$ ) pour différentes valeurs des paramètres $\gamma$ et $\eta$ . La microstructure est générée à partir de la méthode des plans radicaux et la fraction volumique globale des inclusions est fixée à 75% : <b>(a)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$ et <b>(b)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ . . . . .	171
6.2	Fonction de répartition des $FVL$ pour la microstructure de Poisson-Voronoi : <b>(a)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$ et <b>(b)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ . . . . .	173
6.3	Fonction de répartition des $FVL$ pour la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux : <b>(a)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$ et <b>(b)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ . . . . .	174
6.4	Variation des modules élastiques effectifs en fonction du paramètre $\gamma$ pour la microstructure de Poisson-Voronoi : <b>(a)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$ et <b>(b)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ . . . . .	176
6.5	Variation des modules élastiques effectifs en fonction du paramètre $\gamma$ pour la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux : <b>(a)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$ et <b>(b)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ . . . . .	177
6.6	Variation du nombre de cycles à la rupture ( $N(50\%)$ ) en fonction du paramètre $\gamma$ pour la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux : <b>(a)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$ et <b>(b)</b> $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ . . . . .	179

6.7 Fonction de répartition de la déformation équivalente ( $\epsilon_{eq}$ ) pour différentes valeurs de  $\gamma$ . La microstructure est générée à partir de la méthode des plans radicaux et  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1+\eta^2 \left(\frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle}\right)^\gamma}$ . . . . . 180

6.8 Variation du nombre de cycles à la rupture ( $N(50\%)$ ) en fonction du paramètre  $\gamma$  pour la microstructure de Poisson-Voronoi :  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1+\eta^2 \left(\frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle}\right)^\gamma}$ . . . . . 181

6.9 Fonction de répartition de la déformation équivalente ( $\epsilon_{eq}$ ) pour différentes valeurs de  $\gamma$  pour la microstructure de Poisson-Voronoi :  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1+\eta^2 \left(\frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle}\right)^\gamma}$ . . . . . 181



# Liste des tableaux

2.1	La distribution granulométrique non tronquée du mélange : pourcentage du passant en fonction des dimensions des tamis. . . . .	53
2.2	La distribution granulométrique tronquée utilisée dans les simulations : $r_{min} = 0.5mm$ . . . . .	53
2.3	Les tailles des échantillons et les nombres de réalisations. . . . .	55
4.1	Récapitulatif des erreurs relatives pour un contraste de 100. Cas du réseau <i>CS</i> (calculs par éléments finis). . . . .	104
4.2	Récapitulatif des erreurs relatives pour un contraste de 100. Cas du réseau <i>CC</i> (calculs par éléments finis). . . . .	104
4.3	Récapitulatif des erreurs relatives pour un contraste de 100. Cas du réseau <i>CS</i> ( <b>calculs par la borne supérieure proposée</b> ). . . . .	115
4.4	Récapitulatif des erreurs relatives commises par le modèle discret pour un contraste $\frac{E^I}{EM} = 50$ dans le cas où $f = 80\%$ . . . . .	125
5.1	Nombre de réalisations pour chaque taille du <i>VER</i> considérée (intensité du processus de Poisson $\rho = 0.15$ ). . . . .	148
6.1	Les valeurs des couples $(\gamma, \eta)$ utilisées dans les simulations et pour lesquelles $f = 75\%$ . . . . .	172



# **Introduction générale**



# Introduction générale

Les enrobés bitumineux sont des matériaux hétérogènes aléatoires constitués d'un mélange, dans une proportion choisie, de particules solides de différentes tailles (les granulats et les fines) enrobés d'une matrice (le liant hydrocarboné). Dans ce mélange, le liant hydrocarboné (le bitume) est principalement responsable de la cohésion tandis que le squelette minéral constitué par les granulats assure la rigidité de l'ensemble.

Les granulats se répartissent suivant leur taille moyenne en plusieurs familles : fine, sable, gravillons et cailloux. Les diamètres minimaux de ces familles sont normalisés. La morphologie des granulats est caractérisée par plusieurs paramètres ayant une influence importante sur le comportement du mélange. Parmi ces paramètres, on distingue essentiellement :

- La granularité caractérisée par la distribution dimensionnelle des grains d'un granulats. Elle conditionne la compacité de l'enrobé ainsi que ces caractéristiques mécaniques.
- La courbe granulométrique du mélange traduisant la distribution de la taille de différents grains. Celle-ci peut-être continue ou discontinue, selon la destination du mélange et les propriétés visées. À titre d'exemple, la courbe granulométrique des enrobés drainants est fortement discontinue, ce qui permet d'obtenir une porosité après la mise en place.
- La forme d'une particule est définie par ses trois caractéristiques dimensionnelles principales : la longueur, la largeur et l'épaisseur. Les particules de mauvaise forme se fragmentent plus facilement, ils diminuent la maniabilité et le compactage devient plus difficile.
- L'angularité des grains qui permet de caractériser la stabilité et la maniabilité du mélange. En effet, les éléments qui présentent des faces se coupant avec les angles vifs augmentent l'angle de frottement interne du matériau et diminuent sa maniabilité. Ils confèrent une stabilité plus élevée.

Les enrobés bitumineux héritent des caractéristiques viscoélastiques et thermo-plastiques du liant hydrocarboné qu'ils contiennent. Leurs propriétés mécaniques dépendent de la durée de sollicitation et de la température.

Sous l'effet du passage répété des charges roulantes, les enrobés bitumineux subissent une dégradation progressive de la rigidité allant jusqu'à la rupture de la structure de chaussée.

La détermination du comportement effectif de ce matériau à partir de la donnée de l'ensemble des paramètres morphologiques et mécaniques constitue une tâche difficile. La plupart des modèles actuels sont empiriques ou phénoménologiques. Parmi eux, un modèle d'endommagement continu a été développé par Bodin (2002).

Le propos de ce travail de thèse est de proposer une modélisation simplifiée de ce type de matériau permettant de prendre en compte les paramètres morphologiques et mécaniques des différents constituants.

Cette question est abordée sous l'angle des simulations numériques des milieux granulaires cohésifs où chaque grain est considéré comme un solide rigide doué d'un mouvement de translation et de rotation. Le nombre et la taille des granulats correspondent à la courbe granulométrique du squelette du matériau. La microstructure est générée numériquement par la méthode de Voronoï. Une fois la microstructure du matériau réalisée, un modèle mécanique est bâti en prenant en compte l'interaction entre deux granulats selon une loi d'interface.

Ce mémoire se compose de trois parties : après la première partie consacrée à l'introduction bibliographique, vient la deuxième partie dédiée à la construction du modèle proposé. Dans la troisième partie, nous présentons la validation et l'exploitation du modèle.

Dans la première partie, nous présentons un rapide aperçu sur les travaux portant sur la modélisation des enrobés bitumineux à partir des caractéristiques mécaniques et morphologiques des différents constituants (chapitre 1). En particulier, nous distinguons deux approches : une approche dite continue, et une approche dite discrète que nous adopterons par la suite.

Dans la seconde partie, nous présentons, d'abord, les aspects géométriques de la modélisation proposée (chapitre 2). Pour cela, des régions polyédriques générées par la méthode de Voronoï sont utilisées pour approcher la forme et la distribution granulométrique des particules rigides. Ensuite, nous présentons les aspects mécaniques de la modélisation (chapitre 4). En utilisant une loi d'interface, nous montrons, en particulier, que le système matrice-inclusions rigides est équivalent un réseau de poutres encastrées. Une méthode d'homogénéisation discrète est alors utilisée pour la

prédiction des propriétés effectives.

La troisième partie est consacrée à la validation et à l'exploitation de l'outil numérique. Elle est composée des chapitres 4, 5 et 6.

Dans le chapitre 4, la validité et les limitations du modèle sont discutées à travers des comparaisons avec des simulations par la méthode des éléments finis sur des cellules unitaires périodiques régulières, dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides. Les microstructures choisies sont le réseau cubique simple (*CS*) et le réseau cubique centré (*CC*).

Après la validation, vient l'exploitation du modèle proposé au cours des chapitres 5 et 6. Dans un premier temps, l'outil numérique est utilisé pour la détermination de la taille minimale du Volume Élémentaire Représentatif (*VER*) en élasticité linéaire et en fatigue (chapitre 5). Pour ce faire, nous utilisons la méthode de Monte-Carlo pour estimer les propriétés effectives linéaires et en fatigue d'une microstructure générée par la tessellation de Poisson-Voronoi. Des simulations sont effectuées sur des tailles du *VER* croissantes. Pour chaque taille, plusieurs réalisations indépendantes sont considérées.

En fatigue, le nombre de cycles avant rupture de chacune des interfaces est calculé en utilisant la règle de cumul de Miner. Deux modes de rupture ont été envisagés (1) chaque interface subit une dégradation continue de sa rigidité (variant de 0 à 1) et (2) la rupture de chaque interface est brutale (la dégradation vaut 0 ou 1). La moyenne du nombre de cycles à la rupture de l'échantillon est déterminée pour des tailles croissantes de *V*.

Dans le chapitre 6, le modèle proposé est appliqué à l'étude de l'influence des caractéristiques morphologiques sur les propriétés effectives du matériau. Une étude paramétrique qui porte sur la répartition des fractions volumiques locales (*FVL*) des inclusions est menée.

Enfin, la conclusion du mémoire reprend les principaux résultats obtenus et préconise un certain nombre de voies potentielles d'amélioration du modèle proposé. On propose en particulier la prise en compte de la déformation des particules dans la modélisation et l'introduction de lois d'interface prenant en compte la viscosité, la plasticité et la thermo-susceptibilité de la matrice.



## **Première partie**

### **Introduction bibliographique**



# Chapitre 1

## Introduction bibliographique

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Introduction</b> . . . . .	<b>8</b>
<b>1.2</b>	<b>Modélisation continue des matériaux matrice-inclusions</b> . . . . .	<b>9</b>
1.2.1	Modèles micromécaniques pour les enrobés bitumineux . . .	9
1.2.2	Une modélisation des milieux granulaires cohésifs (Christoffersen, (1983)) . . . . .	12
<b>1.3</b>	<b>Modélisation discrète des matériaux matrice-inclusions</b> . . . . .	<b>15</b>
1.3.1	Description classique des matériaux granulaires . . . . .	15
1.3.2	Comportement local dans les milieux granulaires secs ou cohésifs . . . . .	21
1.3.3	Relation entre comportement local et comportement global : Technique d'homogénéisation . . . . .	27
<b>1.4</b>	<b>Conclusion</b> . . . . .	<b>28</b>

---

## 1.1 Introduction

L'objet de ce premier chapitre est de donner un aperçu des travaux et théories développées autour de la modélisation des enrobés bitumineux. Nous nous attacherons en particulier aux modèles permettant de prendre en compte à la fois les caractéristiques mécaniques et morphologiques des constituants (forme de grains, distribution spatiale des différentes composantes, épaisseur du film de bitume..).

Deux classes de modèles existent dans la littérature : **(1)** des modèles traitant ce matériau comme un biphasé matrice-inclusions **(2)** des modèles numériques simulant les enrobés bitumineux sous l'angle des milieux granulaires cohésifs.

Concernant la première classe de modèles, nous présentons deux modélisations micromécaniques ; l'une proposée par Hammoum et al. (1999), Hammoum (2000) et Castenada et al. (2004) et l'autre par Christoffersen (1983)(section 2) permettant de prendre en compte des caractéristiques morphologiques et mécaniques des constituants.

Quant à la deuxième classe de modèles pour les matériaux bitumineux, nous commençons, tout d'abord, par une brève présentation des milieux granulaires secs (section 3.1). Nous nous attacherons par la suite à la modélisation des milieux granulaires cohésifs proposée par Zhu et Nodes (2000) (sections 3.2) et nous finissons par donner un bref aperçu sur les techniques d'homogénéisation dans les milieux granulaires (sections 3.3).

Enfin, la section 4 est dédiée à la conclusion de ce chapitre.

## 1.2 Modélisation continue des matériaux matrice-inclusions

### 1.2.1 Modèles micromécaniques pour les enrobés bitumineux

Nous présentons, dans cette section, deux modèles micromécaniques, l'un utilisé par Hammoum et al. (1999), Hammoum (2000) et Castenada et al. (2004) pour la détermination des propriétés effectives du matériau à partir des caractéristiques des différents constituants (grains, matrice), et l'autre utilisé par Shashidhar et Shenoy (2002) pour la prédiction des propriétés mécanique des mastics d'asphalte (mélange de bitume et de fines) et la prise en compte du concept de percolation.

Les deux modélisations sont basées sur un modèle autocohérent à trois phases "inclusion couronne" développé par Christensen et Lo (1969, 1979) et Hervé et Zaoui (1990).

#### 1.2.1.1 Aperçu sur le modèle autocohérent à trois phases

Ce modèle apparaît comme un schéma autocohérent pour lequel le problème de localisation concerne une inclusion sphérique élastique isotrope de rayon  $d$ . Cette sphère est surmontée d'une couronne de rayon extérieur  $d + e$ . La sphère composite est située dans un milieu homogène équivalent dont le module de compressibilité est  $k^*$  et le module de cisaillement  $\mu^*$  (cf. Fig. 1.1).

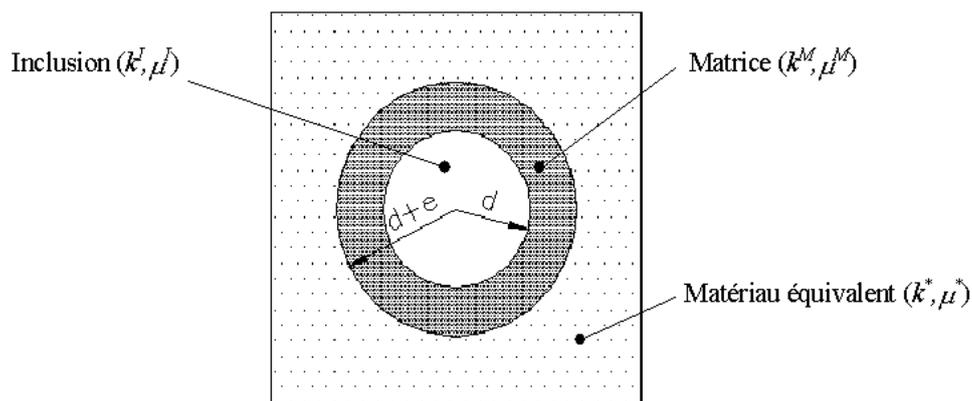


FIG. 1.1 – Modèle à trois phases (dans Hammoum (2000)).

Les propriétés élastiques ou viscoélastiques de ces matériaux sont déterminées en résolvant les deux problèmes élémentaires (compression hydrostatique et cisaillement

simple) posés sur le milieu infini. Le module de compressibilité,  $k^*$ , est donné par :

$$k^* = k^M + \frac{c(k^I - k^M)}{1 + (1 - c)(k^I - k^M)(k^m + \frac{4}{3}\mu^M)} \quad (1.1)$$

où  $c = \left(\frac{d}{d+e}\right)^3$  est la fraction volumique de renfort.

Le module de cisaillement complexe est donné par la solution de l'équation quadratique suivante :

$$A \left(\frac{\mu^*}{\mu^M}\right)^2 + 2B \left(\frac{\mu^*}{\mu^M}\right) + C = 0 \quad (1.2)$$

Les valeurs des constantes complexes  $A$ ,  $B$  et  $C$  sont déterminées à partir des expressions proposées par Hervé et Zaoui (1990). Ces constantes dépendent de la fraction volumique du renfort et des caractéristiques mécaniques des constituants.

### 1.2.1.2 Prise en compte de la répartition du film de bitume

Hammoum et al. (1999), Hammoum (2000) et Castenada et al. (2004) ont proposé une description plus précise de la morphologie de l'enrobé. Cette description passe par la donnée de la variation de l'épaisseur du liant permet d'accéder à la valeur de la fraction volumique de renfort pour chacune des classes granulaires.

Soit  $N$  le nombre de classes granulaires, chaque grain de taille  $d_j$  d'une classe  $j$  sera enrobé d'une pellicule d'épaisseur  $e_j$ . Le paramètre  $c_j = \left(\frac{d_j}{d_j+e_j}\right)^3$  prend en compte la variation de la pellicule de bitume sur les différents grains.

Les expressions théoriques du module complexe pour chaque classe granulaire sont ensuite déterminées à l'aide du modèle autocohérent.

Pour un niveau de déformation donnée, la contrainte moyenne calculée dans les différentes classes granulaires sera égale à la contrainte équivalente dans l'enrobé et par conséquent, on enduit le module complexe de l'enrobé sous la forme d'une moyenne pondérée sur l'ensemble des classes granulaires.

$$\begin{cases} k^* = \sum_N w_j k_j^* \\ \mu^* = \sum_N w_j \mu_j^* \end{cases} \quad (1.3)$$

Où  $w_j$  est la proportion volumique de la classe  $j$ .

Ainsi, un modèle prenant en compte la granulométrie des agrégats a été développé.

Dans la section suivante, nous présentons une modélisation micromécanique dédiée à la prédiction du comportement des mastics d'asphalte (le bitume et les fines), utilisant le modèle autocohérent à trois phases.

### 1.2.1.3 Une modélisation micromécanique des mastics d'asphalte d'après Shashidhar et Shenoy (2002)

Shashidhar et Shenoy (2002) ont proposé une simplification du modèle à trois phases développé par Christensen et Lo (1979). La version simplifiée a été appliquée à la prédiction du comportement des mastics d'asphalte.

Cette simplification consiste à négliger la rigidité du bitume par rapport aux fines. Ainsi, des expressions simplifiées des constantes  $A$ ,  $B$  et  $C$  de l'équation 1.2 ont été obtenues.

Afin d'introduire le concept de percolation de la matrice (le bitume) dans la modélisation, Shashidhar et Shenoy (2002) ont proposé de modifier la fraction volumique des fines  $c$ , par  $c_{eff}$  comme suit :

$$c_{eff} = 1 - (1 - c) \left( \frac{1 - \frac{c}{c_{max}}}{1 - \frac{c_{pt}}{c_{max}}} \right)^{0.4} \quad (1.4)$$

où :

- $c_{max}$  est la concentration volumique des fines pour laquelle la fraction volumique de la partie de la matrice non-percolée,  $f_{mp}$ , est négligée (cf. Fig 1.2) :

$$c_{mp} = 0 \text{ pour } c = c_{max}$$

- $c_{pt}$  est la concentration volumique des fines telle que (cf. Fig 1.2) :

$$c_{mp} = 1 - f \text{ pour } c = c_{pt}$$

D'autres modélisations continues des milieux granulaires cohésifs existent dans la littérature. Nous présentons, dans la section suivante, une modélisation proposée par Christoffersen (1983).

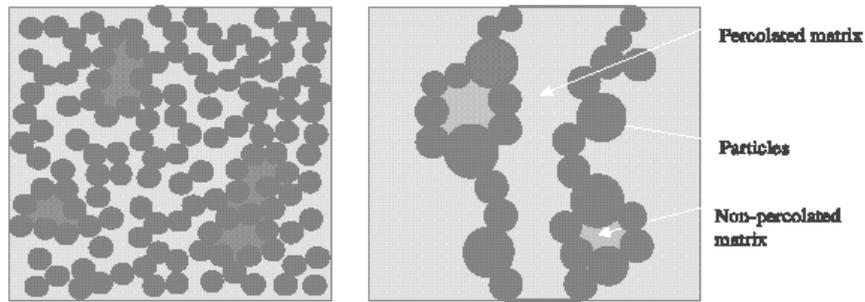


FIG. 1.2 – Schématisation du concept de percolation d’après Shashidhar et Shenoy (2002).

## 1.2.2 Une modélisation des milieux granulaires cohésifs (Christoffersen, (1983))

### 1.2.2.1 Description géométrique

La figure 1.3 montre des grains de différentes tailles séparés par une matrice d’épaisseur uniforme d’après Christoffersen (1983). La forme des grains est supposée polyédrique. Les particules voisines sont connectées par une matrice d’épaisseur uniforme. L’interface particule-matrice est caractérisée par la normale  $\underline{n}^\alpha$  et sa surface  $A^\alpha$ . Le vecteur reliant les centres de deux particules voisines est noté  $\underline{d}^\alpha$ .

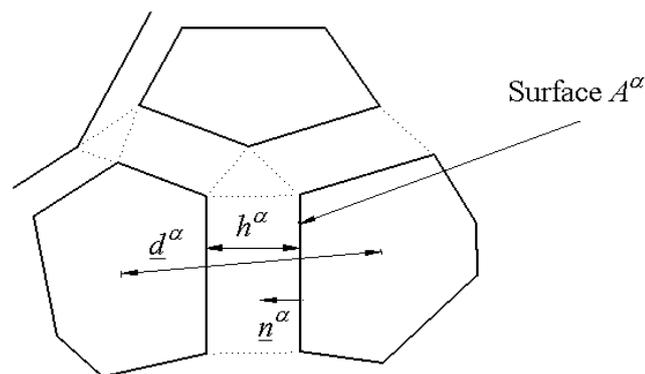


FIG. 1.3 – Configuration des particules d’après Christoffersen (1983).

Une méthode d’homogénéisation non-conventionnelle a été utilisée pour modéliser le comportement mécanique du système. Dans la suite, nous développons les grandes

lignes de cette méthode.

### 1.2.2.2 Position du problème mécanique

L'approche locale de problème est basée sur la définition d'un contexte cinématique simplifié. Quatre hypothèses ont été postulées :

1. la cinématique du centre des grains est caractérisée par la déformation macroscopique  $\underline{\underline{\mathbf{E}}} = \underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\underline{\mathbf{U}}})$ ,
2. la déformation dans tous les grains est supposée uniforme et est égale à  $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^0 = \underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\underline{\mathbf{u}}}^0)$ ,
3. pour chaque interface  $\alpha$ , la déformation est supposée homogène ( $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^\alpha = \underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\underline{\mathbf{u}}}^\alpha)$ ),
4. les perturbations locales dans les bords et les coins des grains sont négligées.

Avec les hypothèses précédentes, la continuité du déplacement dans les interfaces grain-matrice impose que la déformation dans la couche  $\alpha$  soit de la forme :

$$e_{ij}^\alpha = e_{ij}^0 + (E_{ik} - e_{ik}^0) \frac{d_k^\alpha n_j^\alpha}{h^\alpha} \quad (1.5)$$

où  $h^\alpha$  est l'épaisseur de la couche  $\alpha$ .

Afin d'assurer la compatibilité entre les déformations locales et globales caractérisées par  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$ , la condition de moyenne suivante est imposée :

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}} = \langle \underline{\underline{\mathbf{e}}} \rangle_V = (1 - c) \underline{\underline{\mathbf{e}}}^0 + \frac{1}{|V|} \sum_{\alpha} \underline{\underline{\mathbf{e}}}^\alpha A^\alpha h^\alpha, \quad c = \frac{1}{|V|} \sum_{\alpha} A^\alpha h^\alpha \quad (1.6)$$

où  $|V|$  est le volume des grains et des interfaces. Les zones se trouvant entre les interfaces ont été exclues de  $|V|$  (i.e. les triangles en pointillé dans la figure 1.3). L'insertion de l'équation 1.5 montre que la condition de compatibilité est satisfaite si, et seulement si :

$$\frac{1}{|V|} \sum_{\alpha} d_i^\alpha n_j^\alpha A^\alpha = \delta_{ij} \quad (1.7)$$

où  $\delta_{ij} = 1$  si  $i = j$  et 0 sinon. (pour l'interprétation géométrique de l'équation 1.7, voir Christoffersen (1983))

Supposons qu'on impose une traction uniforme,  $\underline{\underline{\Sigma}}$ , aux bords du volume élémentaire représentatif. Alors, l'application du lemme de Hill-Mandel nous permet de conclure que :

$$\underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{\mathbf{E}}} = (1 - c)\underline{\underline{\sigma}}^0 + \frac{1}{|V|} \sum_{\alpha} \underline{\underline{\sigma}}^{\alpha} : \underline{\underline{\mathbf{e}}}^{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} \quad (1.8)$$

pour tout  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$  et tout  $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^0$ .  $\underline{\underline{\sigma}}^0$  et  $\underline{\underline{\sigma}}^{\alpha}$  représentent, respectivement, la contrainte moyenne dans les grains et dans la couche  $\alpha$ . En insérant l'équation 1.5 et en prenant deux valeurs particulières de  $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^0$ , on peut montrer que :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = (1 - c)\underline{\underline{\sigma}}^0 + \frac{1}{|V|} \sum_{\alpha} \underline{\underline{\sigma}}^{\alpha} A^{\alpha} h^{\alpha} \\ \underline{\underline{\Sigma}} = \frac{1}{|V|} \sum_{\alpha} \underline{\underline{\mathbf{t}}}^{\alpha} \otimes \underline{\underline{\mathbf{d}}}^{\alpha}, \quad \underline{\underline{\mathbf{t}}}^{\alpha} = A^{\alpha} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{\alpha} \cdot \underline{\underline{\mathbf{n}}}^{\alpha} \end{cases} \quad (1.9)$$

où  $\underline{\underline{\mathbf{t}}}^{\alpha}$  représente la force totale transmise à travers la couche  $\alpha$ .

Le problème consiste à trouver  $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^0$  de manière à ce que le champs de contrainte réelle satisfasse le système (1.9), lorsque  $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^{\alpha}$  est substitué dans l'équation 1.5.

Pour la détermination de  $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^0$ , Christoffersen (1983) a considéré le cas où le comportement des constituants est linéaire isotrope. Les modules de tous les grains sont uniformes et notés  $\underline{\underline{\mathbf{L}}}^0$ . Ceux des couches sont aussi uniformes mais différents et sont notés  $\underline{\underline{\mathbf{L}}}^{(e)l}$ .  $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^0$  est donc obtenue de la manière suivante :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\mathbf{e}}}^0 = \underline{\underline{\mathbf{E}}} - \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{-1} : \underline{\underline{\mathbf{A}}} : \underline{\underline{\mathbf{E}}}; \\ \underline{\underline{\mathbf{A}}} = \langle \underline{\underline{\mathbf{L}}}^{(e)} \rangle_V - \underline{\underline{\mathbf{L}}}^{(e)l}, \quad \langle \underline{\underline{\mathbf{L}}}^{(e)} \rangle_V = (1 - c)\underline{\underline{\mathbf{L}}}^0 + c\underline{\underline{\mathbf{L}}}^{(e)l} \end{cases} \quad (1.10)$$

$$\begin{cases} B_{ijkl} = A_{ijkl} - L_{ijkl}^{(e)l} + L_{mjnl}^{(e)l} \bar{R}_{imkn}, \\ \bar{R}_{imkn} = \frac{1}{|V|} \sum_{\alpha} d_i^{\alpha} n_j^{\alpha} d_k^{\alpha} n_l^{\alpha} \frac{A^{\alpha}}{h^{\alpha}} \end{cases} \quad (1.11)$$

En insérant l'équation 1.10 dans l'équation 1.5, on obtient l'expression de  $\underline{\underline{\mathbf{e}}}^{\alpha}$  en fonction de  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$ . La déformation locale est déduite à partir de la relation de localisation

comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\underline{\mathbf{y}}) = \underline{\underline{\mathbf{C}}}(\underline{\mathbf{y}}) : \underline{\underline{\mathbf{E}}} \\ C_{ijkl}(\underline{\mathbf{y}}) = \begin{cases} C_{ijkl}^0 = \left( \underline{\underline{\mathbf{1}}} - \underline{\underline{\mathbf{1}}} : \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{-1} : \underline{\underline{\mathbf{A}}} \right)_{ijkl} & \text{pour } \underline{\mathbf{y}} \in \text{grains} \\ C_{ijkl}^\alpha = 1_{ijkl} - 1_{ijuv} \left( \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{-1} : \underline{\underline{\mathbf{A}}} \right)_{vmkl} \Pi_{mu}^\alpha & \text{pour } \underline{\mathbf{y}} \in \text{couche } \alpha \end{cases} \end{array} \right. \quad (1.12)$$

où  $1_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$  et  $\Pi_{mu}^\alpha = \delta_{ij} - d_i^\alpha n_j^\alpha / h^\alpha$ . Finalement, la contrainte macroscopique est déduite à partir de l'équation 1.9 :

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}}(\underline{\underline{\mathbf{E}}}) = \underline{\underline{\mathbf{L}}} : \underline{\underline{\mathbf{E}}}; \quad \underline{\underline{\mathbf{L}}} = \left\langle \underline{\underline{\mathbf{L}}}^{(e)} \right\rangle_V - \underline{\underline{\mathbf{A}}} : \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{-1} : \underline{\underline{\mathbf{A}}} \quad (1.13)$$

Ainsi, à partir des caractéristiques géométriques et mécaniques des constituants, ce modèle permet de prédire le comportement effectif du matériau considéré. En particulier, la morphologie des inclusions est prise en compte. Toutefois, la méthode d'homogénéisation utilisée est non conventionnelle.

Dans la section suivante, nous présentons la deuxième classe de modèles pour les enrobés bitumineux : ceux traitant le matériaux sous l'angle des milieux granulaires.

### 1.3 Modélisation discrète des matériaux matrice-inclusions

Outre la modélisation des enrobés bitumineux comme un biphasé matrice-inclusions, une autre approche consiste à considérer ce type de matériaux comme un milieu granulaire cohésif.

Dans un premier temps, nous rappelons la description classique des milieux granulaires.

Dans un second temps, nous nous attacherons aux descriptions adaptées aux milieux granulaires cohésifs tels que les enrobés bitumineux.

### 1.3.1 Description classique des matériaux granulaires

Qu'est-ce qu'un milieu granulaire ? C'est un assemblage de nombreux éléments solides, qui peuvent interagir par exemple lors de collisions, mais aussi sous l'effet de forces électromagnétiques ou gravitationnelles. Ces éléments, désignés sous le terme générique de grains, sont généralement arrangés de manière désordonnée et présentent souvent des différences de forme, de taille et d'état de surface. On trouve des milieux granulaires à toutes les échelles : des fines poudres compactées composant les cachets d'aspirine, en passant par les dunes du désert, jusqu'aux infrastructures routières et ferroviaires. La structure et les propriétés de ces milieux ne dépendent pas seulement des caractéristiques des grains, mais aussi de l'histoire du milieu, c'est-à-dire de l'ensemble des mouvements subis, des traitements appliqués, etc.

Bien que très courants, les milieux granulaires présentent une variété de comportements qui les rendent inclassables parmi les trois états de la matière habituels, à savoir solide, liquide et gazeux.

Ces milieux ont par ailleurs des propriétés que l'on ne trouve dans aucun des trois autres états, parmi lesquelles on peut citer l'effet de voûte, la dilatance et la ségrégation.

La modélisation du comportement d'un milieu granulaire à partir de sa microstructure comporte différents aspects : géométrie, cinématique, statique, comportement. Et elle implique deux échelles d'analyse : celle du milieu discret et celle du milieu continu équivalent.

#### 1.3.1.1 Description géométrique des matériaux granulaires

Généralement, pour la modélisation géométrique des milieux granulaires sont utilisés des grains ayant une géométrie simple : sphères ou disques, et plus rarement des ellipses ou des polygones.

#### Coordinance

Pour un assemblage, on définit la coordinance ( $z$ ) comme le nombre moyen de contacts d'un grain. Dans un empilement constitué de sphères ou de disques identiques, la coordinance  $z$  est voisine de 6 pour des sphères et de 4 pour des disques.

Pour un empilement dense et désordonné, la coordinance minimum, assurant la stabilité sous gravité, est égale à 3 pour des sphères et à 2 pour des disques. (Shafabakhsh (1999))

### Orientations des contacts

L'orientation du contact entre deux particules est caractérisée par la direction de la normale  $\mathbf{n}$  au plan de contact. dans un assemblage de particules, la distribution des orientations de contacts peut être définie par la détermination de la probabilité d'obtenir un contact dans les différents angles d'orientation de contact  $\theta$ . Cette répartition des orientations de contact est un paramètre essentiel pour décrire la géométrie de l'assemblage des particules.

La distribution des orientations de contact permet de caractériser l'anisotropie du milieu. Elle peut être décrite par diverses représentations mathématiques. À partir des résultats des simulations numériques sur un assemblage de particules, Rothenburg et al. (1989) ont proposé une équation polaire pour la distribution des contacts :

$$P(\theta) = \frac{1}{2} (1 + a \cos 2(\theta - \theta_0))$$

où  $a$  est un paramètre déterminé numériquement et  $\theta_0$  est la direction de l'axe majeur de contacts (direction de la sollicitation imposée).

Pour décrire l'arrangement des particules d'une structure granulaire, de nombreux auteurs (Satake (1978), Oda et al. (1982), etc) ont proposé un tenseur du second ordre appelé "tenseur de structure" (fabric tensor).

Satake (1978) a présenté l'anisotropie structurale à l'aide d'un tenseur défini par :

$$\Phi_{ij} = \langle n_i, n_j \rangle \quad (1.13)$$

où  $n_i$  et  $n_j$  représentent les composantes du vecteur d'orientations de contacts et  $\langle . \rangle$  signifie la valeur moyenne spatiale.

Une autre définition a été proposée par Oda et al. (1982) pour un assemblage de particules. Elle est connue sous le nom de tenseur de structure,  $F_{ij}$ , qui prend en compte d'une part l'anisotropie structurale à l'aide du tenseur de Satake et d'autre part la compacité du milieu par le terme  $N \bar{D}$  :

$$\begin{aligned} F_{ij} &= N \bar{D} \int_{\omega} P(\mathbf{n}) n_i n_j d\Omega \\ &= N \bar{D} \langle n_i, n_j \rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

où :

- $N$  : nombre de contacts par unité de volume,
- $\bar{D}$  : diamètre moyen des particules,
- $\Omega$  : cercle ou sphère unitaire,
- $P(\underline{\mathbf{n}})$  : fonction paire de distribution des normales aux contacts.

La densité de probabilité de contact doit vérifier :

$$\int_{\Omega} P(\underline{\mathbf{n}}) d\Omega = 1 \quad (1.15a)$$

$$P(\underline{\mathbf{n}}) = P(-\underline{\mathbf{n}}) \quad (1.15b)$$

### 1.3.1.2 Description statique des matériaux granulaires

Dans un milieu granulaire, la transmission des efforts est un phénomène essentiellement discontinu : les forces de ne se transmettent qu'aux points de contact et dépendent à la fois de la sollicitation appliquée et de la géométrie de la structure formée par les particules.

Des méthodes d'homogénéisation permettent de décrire le passage du niveau local au niveau global en termes de paramètres statiques (Love (1929), Weber (1966), Cambou (1989), Sidoroff et al. (1993)).

Weber (1966) a proposé une relation, dans un milieu granulaire quelconque à l'équilibre, qui permet de construire un tenseur de contraintes à partir des forces de contact dans un volume  $V$ . Elle s'écrit sous la forme :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{k=n} f_i^k l_j^k \quad (1.16)$$

où :

- $f_i^k$  et  $l_j^k$  représentent respectivement les composantes  $i$  de la force de contact au point  $k$  et  $j$  du vecteur joignant les centres des deux particules en contact au point  $k$ ,
- $n$  est le nombre de contacts dans le volume considéré  $V$ .

En introduisant une variable statique locale dépendant de la direction du contact  $\underline{\mathbf{n}}$ ,  $\underline{\mathbf{f}}(\underline{\mathbf{n}})$ , la relation précédente (Eq. 1.16) peut s'écrire sous la forme :

$$\sigma_{ij} = N \bar{D} \int_{\Omega} f_i(\underline{\mathbf{n}}) n_j d\Omega \quad (1.17)$$

où  $N$  et  $\bar{D}$  sont respectivement le nombre de contacts par unité de volume et le diamètre moyen des particules.

Cambou (1989) a proposé d'exprimer  $f_i(\underline{\mathbf{n}})$  en fonction de la probabilité de contact,  $P(\underline{\mathbf{n}})$ , et la force moyenne de contact,  $\bar{F}_i(\underline{\mathbf{n}})$ , dans la direction  $\underline{\mathbf{n}}$ .

$$f_i(\underline{\mathbf{n}}) = \frac{3}{N \bar{D} \pi (d+1)} P(\underline{\mathbf{n}}) \bar{F}_i(\underline{\mathbf{n}}) d\Omega \quad (1.18)$$

où  $d$  est la dimension de l'espace (2 ou 3) et  $N$  le nombre de contact par unité de volume ou de surface.

### 1.3.1.3 Description cinématique des matériaux granulaires

Les variables cinématiques à l'échelle des grains sont les déplacements (translations et rotations) relatifs entre particules voisines. Ils peuvent être décrits par :

1. le déplacement relatif entre les centres des deux particules voisines,
2. le déplacement relatif du point de contact.

Pour chaque orientation de contact,  $\underline{\mathbf{n}}$ , on peut définir les valeurs moyennes des déplacements relatifs  $\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{n}})$ .

L'opération d'homogénéisation pour les variables cinématiques peut être décrite par la définition du tenseur de déformation  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}$  à partir des déplacements locaux moyens des centres des particules ( $\bar{u}_i$ ).

Si on considère une partition de  $\Omega$  ( $\Omega^1, \dots, \Omega^N$ ), le gradient moyen des déplacements,  $(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{ij}^k)$ , calculé sur un sous domaine  $\Omega^k$  s'écrit sous la forme :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{ij}^k = \frac{1}{V^k} \int_{\Omega^i \in \Omega} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} d\Omega^k \quad (1.19)$$

$$= \frac{1}{V^k} \int_{S^k = \partial V^k} u_i(\underline{\mathbf{n}}) n_j dS^k \quad (1.20)$$

où :

- $V^k$  est le volume du sous domaine  $\Omega^k$ ,

- $u_i(\mathbf{n})$ ,  $n_j$  sont respectivement les composantes suivant les directions  $i$  et  $j$  du déplacement relatif des particules et de la normale  $\mathbf{n}$ .

Le tenseur des déformations macroscopiques,  $(\bar{\varepsilon}_{ij})$ , peut alors être déterminé par la relation suivante :

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{\Omega^k \in \Omega} V^k \bar{\varepsilon}_{ij}^k \quad (1.21)$$

Bagi (1996), et Sab (1996) ont proposé d'utiliser la triangulation de Delaunay pour partitionner  $\Omega$  (cf. Fig. 1.4 ). Ainsi, une interpolation linéaire du déplacement  $\mathbf{u}$  à l'intérieur de chaque triangle  $\Omega^k$ , permet d'exprimer  $(\bar{\varepsilon}_{ij}^k)$  en fonction des déplacements relatifs aux points de contact.

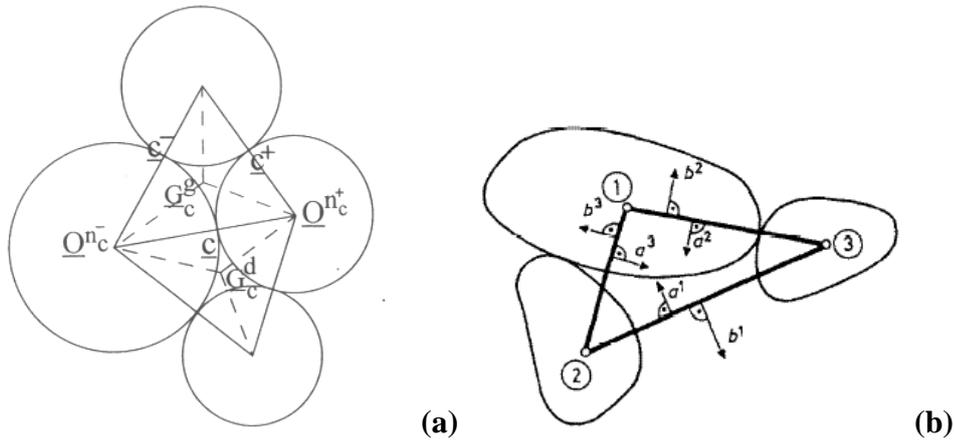


FIG. 1.4 – Définition de la déformation microscopique à partir d'une triangulation de l'ensemble de particules circulaires rigides. (a) D'après Sab (1996) et (b) D'après Bagi (1996).

Une autre relation a été proposée par Cambou (1989), dans le cas d'un milieu isotrope, entre la variable cinématique globale et le déplacement relatif moyen au contact entre les particules :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{3}{d+1} \int_{\Omega} \left( \mu n_j u_i + \frac{1-\mu}{2} ((2+d)n_i n_j - \delta_{ij}) n_k u_k \right) d\Omega \quad (1.22)$$

où  $d$  et  $\bar{D}$  représentent respectivement la dimension de l'espace et le diamètre moyen des particules ;  $\mu$  est un paramètre.

## 1.3.2 Comportement local dans les milieux granulaires secs ou cohésifs

### 1.3.2.1 Les milieux granulaires secs : loi de contact de Hertz et de Mindlin

La loi de comportement local d'un matériau granulaire, décrit la relation entre la force de contact et le déplacement relatif de deux particules en contact. Le comportement mécanique au contact de deux grains est complexe mais il est le plus souvent décrit par des lois relativement simples. L'élasticité linéaire est généralement décrite par :

$$F^n = k^n \cdot \delta^n \quad (1.23a)$$

$$F^t = k^t \cdot \delta^t \quad (1.23b)$$

où  $F^n$  et  $F^t$  sont respectivement les composantes normale et tangentielle de la force de contact.

$K^n$ ,  $K^t$ ,  $\delta^n$  et  $\delta^t$  représentent, respectivement, les rigidités normale et tangentielle de contact, les composantes normale et tangentielle du déplacement relatif entre deux particules en contact.

Dans le cas non linéaire, on peut citer les théories de Hertz et de Mindlin qui sont adaptées pour la modélisation des déformations des particules de forme sphérique ou cylindrique. Hertz a établi des relations théoriques dans le domaine élastique, pour des contacts ponctuels. Il a considéré des cas simples tels que : sphère-sphère, sphère-plan, cylindre-plan, etc.

Dans le cas de deux sphères élastiques de rayon  $R_1$ ,  $R_2$  soumises à une force de normale  $F^n$ , le rapprochement de leurs centres  $d$  (cf. Fig 1.5 ) est donné par la relation suivante :

$$d^{3/2} = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{R_1 + R_2}{R_1 R_2}} \left( \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \right) \cdot F^n \quad (1.24)$$

où  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $\nu_1$  et  $\nu_2$  sont respectivement les modules de Young et les coefficients de Poisson des matériaux constitutifs des sphères 1 et 2.

D'autre part, Mindlin (1945) a introduit dans la théorie de Hertz, les effets d'une composante tangentielle non nulle de la force de contact. Il a montré que la surface de contact entre deux sphères, qui est circulaire, est formée de deux zones :

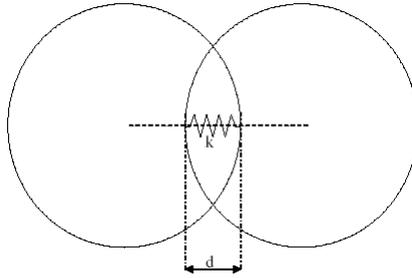


FIG. 1.5 – Modèle de contact simplifié.

- une zone autour du point de contact où il n’y pas de déplacement relatif entre les deux solides en contact,
- une zone pour le contour du cercle de contact où le frottement arrive à une valeur maximale et où apparaît le glissement entre les deux solides.

Dans le domaine élastique, l’intensité de la composante tangentielle de la force de contact est déterminée par l’équation 1.24. Pour des sphères de même rayon  $R$  et de mêmes propriétés élastiques ( $E$ ,  $G$ ,  $\nu$ ), Mindlin a déterminé le coefficient  $K^t$ , quand la composante  $F^n$  reste constante, par :

$$K^t = \frac{4Ga}{2-\nu} \left(1 - \frac{F^t}{f \cdot F^n}\right)^{1/3} \quad \text{avec :} \quad a^3 = \left(\frac{3(1-\nu^2)}{4E}\right) F^n R \quad (1.25)$$

$a$  est le rayon de la surface de contact. La loi de contact est non linéaire et  $K^t$  dépend de la force normale et tangentielle.

Ici  $f$  caractérise la loi de frottement de Coulomb :

$$F^t = f F^n \quad (1.26)$$

D’autres lois de contact de type (visco)-élasto-plastique ont été utilisées dans la modélisation des milieux granulaires métalliques. Parmi ces lois, nous citons la loi (visco)-élasto-plastique utilisée dans Storakers et al. (1999), Martin et al. (2003) et Martin et Bouvard (2004).

Dans la section suivante, nous présentons une loi de contact entre deux grains cohésifs proposée par Zhu et Nodes (2000).

### 1.3.2.2 Une loi de contact dans les milieux granulaires cohésifs proposée par Zhu et Nodes (2000) :

Récemment, Zhu et Nodes (2000) ont développé un modèle de contact inter granulaire avec prise en compte de la présence d'un liant. Ils ont traité le cas d'un liant élastique, viscoélastique de type Voigt et viscoélastique de type Maxwell.

Comme le montre la figure 1.6, les particules sont modélisées par des ellipses. Le contact entre deux particules voisines est schématisé dans la figure 1.7.

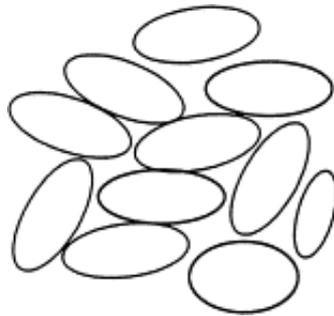


FIG. 1.6 – Configuration des particules d'après Zhu et Nodes (2000).

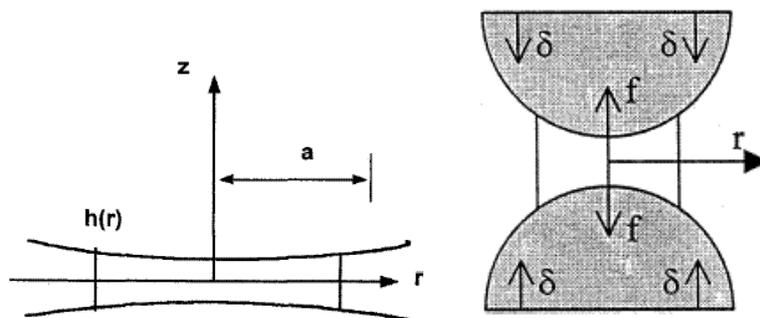


FIG. 1.7 – Contact des particules avec prise en compte d'un liant d'après Zhu et Nodes (2000).

Dans le cas de l'élasticité, les relations entre le déplacement  $\delta$  et la force  $\mathbf{f}$  sont données par :

$$\delta = k(r)\mathbf{p}(r) + \int_A K(r, r') \mathbf{p}(r') dA(r'), \quad (1.27a)$$

$$\mathbf{f} = \int_A \mathbf{p}(r) dA \quad (1.27b)$$

où :

- $k(r)$  et  $K(r, r')$  sont deux fonctions qui dépendent de la géométrie et des propriétés mécaniques des particules et de la matrice.
- $\mathbf{p}(r)$  est la pression de contact dans l'interface entre la matrice et la particule, et  $A$  est la surface de contact.

Dans le cas où le comportement de la matrice et des particules est élastique isotrope, Zhu et al. (1996a) ont montré que le système (particule- matrice- particule) est équivalent à deux ressorts élastiques  $C_1$  et  $C_2$  montés en série (cf. Fig. 1.8).

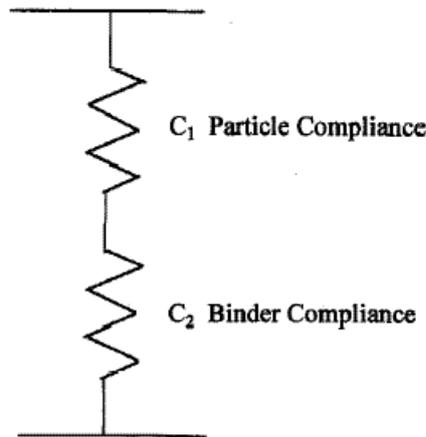


FIG. 1.8 – Représentation schématique d'un système élastique particule-matrice d'après Zhu et al. (1996a).

Les rigidités normale et tangentielle ( $C_{1z}$  et  $C_{1x}$ ), du ressort  $C_1$  sont calculées dans le cas limite où les particules sont infiniment rigides. Elles sont données par :

$$C_{1z} = \frac{h_0}{\pi a^2 E_2 X} \quad (1.28a)$$

$$C_{1x} = \frac{h_0}{\pi a^2 G_2 X} \quad (1.28b)$$

où :

- $h_0 = h(0)$ ,  $h(r)$  est l'épaisseur de la matrice se trouvant entre deux particules voisines (cf. Fig 1.7),
- $X$  est donné par :

$$X = \frac{\log(1+d)}{d} \quad (1.29)$$

- $d$  est donné par :

$$d = \frac{a^2}{2 R h_0} \quad (1.30)$$

- $E_2$  et  $G_2$  sont, respectivement, le module d'Young et de cisaillement de la matrice.

Celles du ressort  $C_2$  sont calculées dans le cas limite où la matrice est infiniment rigide. Elles sont données par :

$$C_{2z} = \frac{1 - \nu_1^2}{2 a E_1} \quad (1.31a)$$

$$C_{2x} = \frac{2 - \nu_1}{8 a G_1} \quad (1.31b)$$

où  $E_1$ ,  $G_1$  et  $\nu_1$  sont respectivement le module d'Young, le module de cisaillement et le coefficient de Poisson des particules.  $X$  est défini dans l'équation 1.29.

La viscoélasticité a été introduite dans le comportement mécanique de la matrice (Zhu et al. (1996b)). Deux modèles rhéologiques de viscoélasticité ont été traités : le modèle de Maxwell et le modèle de Voigt.

Il a été montré dans Zhu et al. (1996b) que le système (particule-matrice-particule), dans le cas de la viscoélasticité, est équivalent à celui schématisé dans la figure 1.9a (resp. 1.9b) pour le modèle de Maxwell (resp. Voigt).

Les rigidités normale et tangentielle ( $C_{1z}$  et  $C_{1x}$ ), du ressort  $C_1$  sont données, respectivement, par les équations 1.28a et 1.28b.

Celles du ressort  $C_2$  sont données par les équations 1.31a et 1.31b.

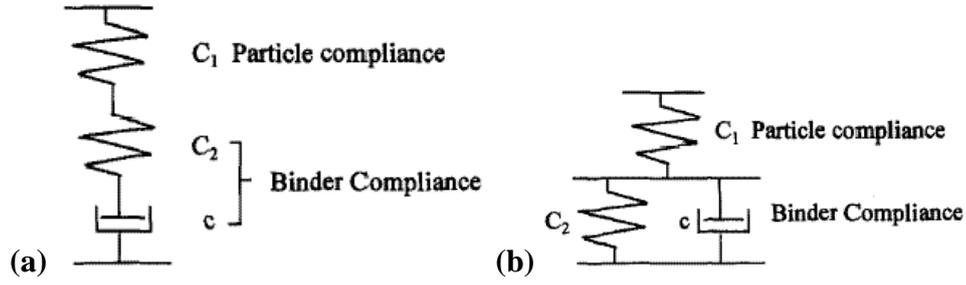


FIG. 1.9 – Deux types de système équivalent ressort-amortisseur d'après Zhu et al. (1996b) : (a) matrice de Maxwell et (b) matrice de Voigt.

Les coefficients ( $c_z$  et  $c_x$ ) de l'amortisseur  $c$  sont donnés par :

$$c_z = \frac{\eta_\varepsilon}{E_2 C_{1z}} \quad (1.32a)$$

$$c_x = \frac{\eta_\gamma}{G_2 C_{1x}} \quad (1.32b)$$

$\eta_\varepsilon$  et  $\eta_\gamma$  sont, respectivement, le coefficient de viscosité dans la direction normale et tangentielle.

Les lois de comportement s'écrivent alors :

$$\dot{\delta}_z(t) = (C_{1z} + C_{2z}) \dot{f}_z(t) + \frac{\dot{f}_z(t)}{c_z} \quad (1.33a)$$

$$\dot{\delta}_x(t) = (C_{1x} + C_{2x}) \dot{f}_x(t) + \frac{\dot{f}_x(t)}{c_x} \quad (1.33b)$$

pour le modèle rhéologique de Maxwell, et :

$$\dot{\delta}_z(t) + \frac{\delta_z(t)}{C_{1z} c_z} = C_{2z} \dot{f}_z(t) + \frac{C_{1z} + C_{2z}}{C_{1z} c_z} f_z(t) \quad (1.34a)$$

$$\dot{\delta}_x(t) + \frac{\delta_x(t)}{C_{1x} c_x} = C_{2x} \dot{f}_x(t) + \frac{C_{1x} + C_{2x}}{C_{1x} c_x} f_x(t) \quad (1.34b)$$

pour le modèle rhéologique de Voigt.

À partir des lois de contact, Zhu et Nodes (2000) ont déterminé le comportement macroscopique des enrobés bitumineux. Pour cela, une technique d'homogénéisation a été utilisée. Celle-ci consiste à imposer une contrainte macroscopique  $\underline{\underline{\Sigma}}$  et d'utiliser une relation de localisation permettant d'exprimer les déplacements relatifs aux points de contact en fonction de  $\underline{\underline{\Sigma}}$ . Une relation est alors déduite entre la contrainte macroscopique  $\underline{\underline{\Sigma}}$ , calculée à partir de l'équation 1.16, et la déformation macroscopique  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$ . Plus de détails sur les techniques d'homogénéisation dans les milieux granulaires seront présentés dans la section suivante.

### 1.3.3 Relation entre comportement local et comportement global : Technique d'homogénéisation

L'homogénéisation des milieux granulaires vise à établir un lien entre le comportement macroscopique d'un échantillon et les mécanismes de déformation et de rupture qui se produisent à l'échelle des grains. Bien que les approches puissent différer d'un auteur à l'autre, le principe de l'homogénéisation est généralement celui schématisé par Cambou et al. (1995) (cf. Figure 1.10).

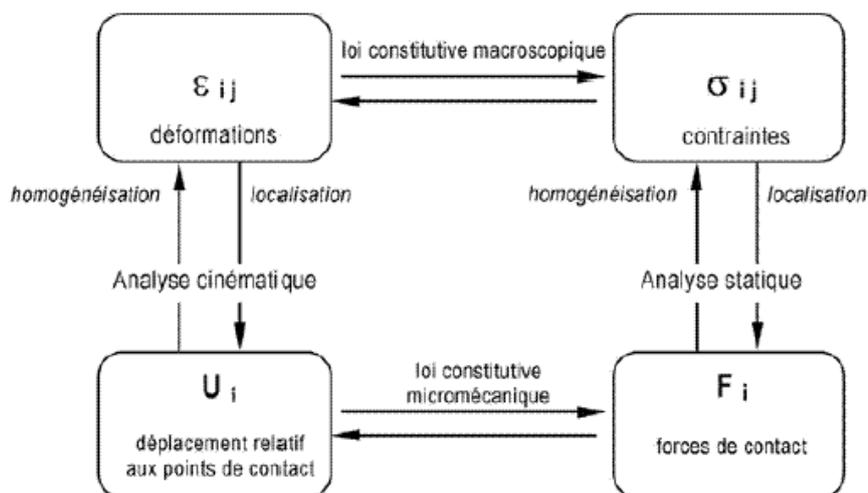


FIG. 1.10 – Principe de l'homogénéisation dans les milieux granulaires d'après Cambou et al. (1995).

D'une part, la détermination des paramètres macroscopiques à partir des paramètres microscopiques peut se faire formellement par l'utilisation des relations de comportement local et celles de localisation et d'homogénéisation en respectant le

schéma décrit précédemment (Fig. 1.10).

D'autre part, les simulations numériques permettent de déterminer directement les paramètres de comportement macroscopique. Roux (1997) a mis en évidence, par cette voie, l'influence de la microstructure sur le comportement élastique d'un assemblage de disques lisses soumis à une compression isotrope.

Également, par simulations numériques, un certain nombre de résultats ont été obtenus permettant de relier l'angle de frottement macroscopique à l'angle microscopique correspondant aux contacts inter-particulaires (Mahboubi et al. (1996), Shafabakhsh (1999)).

## 1.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté brièvement quelques modèles pour la prédiction du comportement des enrobés bitumineux à partir des caractéristiques mécaniques et morphologiques des différents constituants.

Deux classes de modèles ont été distinguées : ceux s'inspirant de la modélisation des milieux continus et ceux traitant le matériau sous l'angle des simulations numériques des milieux granulaires.

Dans la suite, nous proposerons une modélisation de ce type de matériaux s'appuyant sur les simulations numériques des milieux granulaires où chaque grain est représenté discrètement et considéré comme un solide rigide doué d'un mouvement de translation et de rotation. La cohésion du matériau est assurée par une matrice enrobant les particules rigides.



## **Deuxième partie**

### **Construction du modèle proposé**



# Chapitre 2

## Modélisation géométrique de la microstructure

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>32</b>
<b>2.2</b>	<b>Tessellation de Voronoï pour un ensemble de points</b>	<b>33</b>
2.2.1	Principe	33
2.2.2	Quelques algorithmes de construction du diagramme de Voronoï	35
2.2.3	Disposition des centres	37
<b>2.3</b>	<b>Généralisations de la tessellation de Voronoï à des systèmes polydisperses</b>	<b>43</b>
2.3.1	Principe	43
2.3.2	Assemblage de sphères	47
<b>2.4</b>	<b>Génération de microstructures contrôlées</b>	<b>49</b>
2.4.1	Caractérisation d'une distribution granulométrique par la fonction de répartition des rayons	49
2.4.2	Étude paramétrique de la distribution granulométrique des régions de Voronoï par la méthode de Monte-Carlo	52
<b>2.5</b>	<b>Le modèle géométrique proposé</b>	<b>59</b>

---

## 2.1 Introduction

La première étape pour effectuer des simulations numériques consiste à générer des microstructures à l'image des matériaux granulaires cohésifs. Nous avons choisi de considérer ces structures sous la forme d'assemblage d'inclusions cohésives infiniment rigides. La distribution granulométrique des inclusions pour ce type de matériaux présente généralement une assez large dispersion. Typiquement, pour les enrobés bitumineux, les rayons des plus petits grains sont de l'ordre de quelques dixièmes de millimètre, alors que les plus gros grains peuvent atteindre quelques dizaines de millimètres. Ceci nous amène à distinguer deux classes d'inclusions : une première classe où les grains ont un petit rayon équivalent (le rayon de la sphère ayant le même volume) et une deuxième classe où les grains présentent une taille assez grande. Un choix sur le rayon de troncature  $r_{min}$  doit être fait. Zhu et Nodas (2000) ont proposé  $1.118 \text{ mm}$  pour les enrobés bitumineux.

Comme illustré dans la figure 2.1, nous supposons que la matrice est constituée du liant et des inclusions de petites tailles, autrement dit, le liant et les grains appartenant à la première classe.

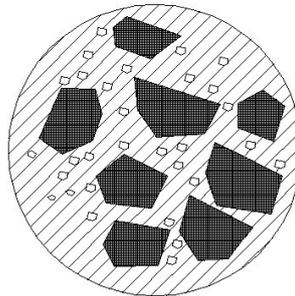


FIG. 2.1 – Constitution du mélange : (1) Les "grosses" inclusions (2) La matrice, elle-même constituée des "petites" inclusions et du liant (le bitume).

Quant à la deuxième classe d'inclusions, celles ayant un rayon équivalent supérieur à  $r_{min}$ , elles seront modélisées par des régions polyédriques convexes. Nous avons choisi d'utiliser la mosaïque de Voronoï pour les générer.

Deux méthodes de génération de microstructures numériques sont détaillées dans ce chapitre. On traite tout d'abord des géométries les plus classiques utilisées dans la littérature (cellule de Voronoï, section 2.2). Les limites de cette méthode sont également abordées. Des microstructures plus diversifiées et adaptées à ce matériau sont proposées au cours de la section 2.3 après avoir exposé la méthode des plans

radicaux.

## 2.2 Tessellation de Voronoï pour un ensemble de points

### 2.2.1 Principe

C'est une technique de partition du plan ou de l'espace introduite par P.G.L. Dirichlet en 1850. Elle est aujourd'hui associée au nom de G.F. Voronoï qui a établi en 1905 une généralisation aux espaces à  $n$  dimensions. Ce procédé est à l'origine de la plupart des méthodes communément utilisées pour réaliser des microstructures.

Dans ce travail, on s'intéresse aux microstructures périodiques générées par la méthode de Voronoï. Afin de définir la mosaïque périodique de Voronoï d'un ensemble de points, considérons une population de sites (ou de points de  $\mathbb{R}^3$ )  $E = \{p^1, \dots, p^n\}$  contenus dans une cellule parallélépipédique  $V$ .  $(\underline{\mathbf{a}}_1, \underline{\mathbf{a}}_2, \underline{\mathbf{a}}_3)$  les trois vecteurs de translation permettant de générer par périodicité toute la microstructure (cf. Fig. 2.2).

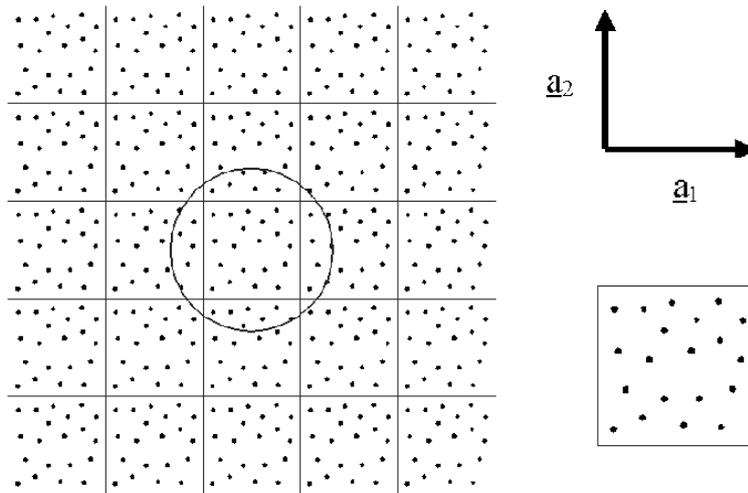


FIG. 2.2 – La microstructure est constituée par la répétition d'un ensemble de points contenus dans une cellule de base  $V$ .

Notons  $E^\alpha$  l'image de  $E$  par une certaine composition des vecteurs de translation  $(\underline{\mathbf{a}}_1, \underline{\mathbf{a}}_2, \underline{\mathbf{a}}_3)$ . Ici,  $\underline{\alpha}$  est un triplet d'entiers repérant  $E^\alpha$  :

$$E^\alpha = \{p^{\alpha,j} = p^j + \alpha_1 \cdot \underline{\mathbf{a}}_1 + \alpha_2 \cdot \underline{\mathbf{a}}_2 + \alpha_3 \cdot \underline{\mathbf{a}}_3, \quad \underline{\alpha} \in \mathbb{Z}^3, j = 1..n\}$$

La mosaïque périodique de Voronoï de  $E$  est l'ensemble des régions polyédriques convexes  $\{Vor(p^1), \dots, Vor(p^n)\}$ . La région  $Vor(p^i)$  associée au point  $p^i$  est constituée des points de l'espace ayant la plus courte distance à  $p^i$  que tous les autres sites de  $E$ , ainsi que de leurs images respectives par périodicité.

$$Vor(p^i) = \{\underline{x} \in / d(p^i, \underline{x}) \leq d(p^{\alpha,j}, \underline{x}) \forall j, \forall \alpha \in \mathbb{Z}^3\} \quad (2.0)$$

Par construction, la frontière de chaque région est la plus petite enveloppe des médiatrices en 2D (des plans médiateurs en 3D) des segments reliant le centre à tous les autres points. La figure 2.3 illustre ce principe en 2D par la construction de la cellule associée au site central.

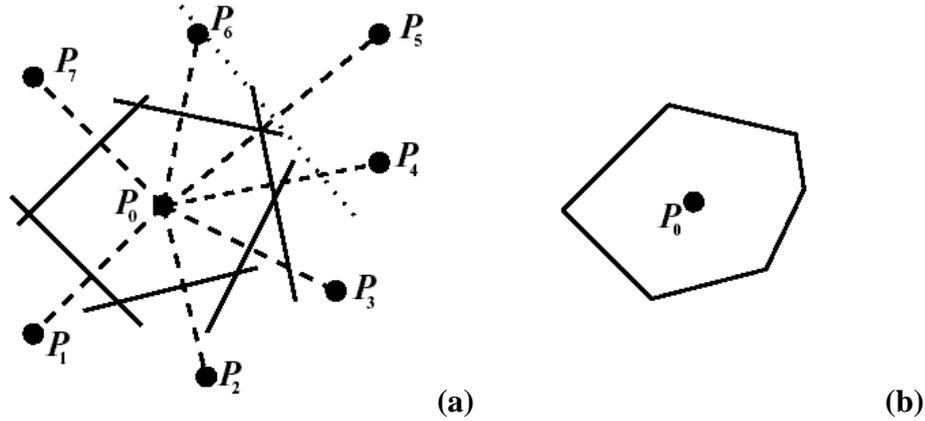


FIG. 2.3 – Construction de la cellule de Voronoï du point  $P_0$  à partir des médiatrices des segments  $P_0P_j$  avec  $j \in [1, 7]$ . Le point  $P_5$  n'est pas voisin de  $P_0$  au sens de Voronoï. La médiatrice joignant ces deux points ne coupe pas le plus petit polygone convexe formé par les autres médiatrices. La cellule correspondante est représentée en (b).

Une partition périodique du plan en polygones convexes bornés est obtenue en répétant l'opération précédente pour chaque centre. Cette construction peut être étendue à une assemblée de disques (ou sphères en 3D) monotailles qui ne s'interpénètrent pas ; il suffit de faire la même construction en utilisant les centres des sphères à la place des points.

De façon générale, une tessellation de Voronoï d'une assemblée de sphères monotailles (ou d'un ensemble de points) doit vérifier les relations de valence suivantes :

- chaque face est commune à deux polyèdres,

- chaque arête est commune à trois faces,
- les sommets sont communs à quatre arêtes.

Quelques structures pathologiques, dites dégénérées, peuvent cependant exister. C'est notamment le cas pour la cellule de Voronoï des empilements Cubique Simple (*CS*), Cubique Centré (*CC*) et Cubique à Faces Centrées (*CFC*) où des sommets sont communs à huit arêtes. Ces cas sont cependant fortement instables, et un déplacement infinitésimal des noeuds du réseau suffit à lever cette dégénérescence (Troadek et al. (1998)). Nous présenterons un peu plus en détail les cas des structures *CS*, *CC* et *CFC* dans la section 2.2.3.

La triangulation duale de Delaunay est obtenue en joignant les paires de points ayant une facette de Voronoï commune. Ainsi la détermination des régions de Voronoï nous permet de situer précisément la forme de toutes les surfaces communes entre chaque paire de points qui interagissent. Un exemple d'une tessellation périodique de Voronoï et la triangulation duale de Delaunay est représenté en deux dimensions dans la figure 2.4.

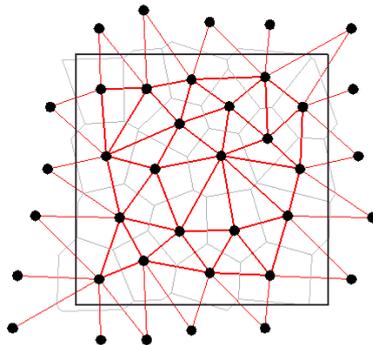


FIG. 2.4 – Diagramme périodique de Voronoï et triangulation duale de Delaunay d'un ensemble de points en 2D.

## 2.2.2 Quelques algorithmes de construction du diagramme de Voronoï

*Soit  $E = \{p^1, \dots, p^n\}$  un ensemble de  $n$  points. On dit que tous les points de  $E$  sont en position générale si, et seulement si, il n'existe pas plus de cinq points co-sphériques*

Un tétraèdre  $T = (p^i; p^j; p^k; p^l)$  où  $p^i, p^j, p^k$  et  $p^l$  sont dans  $E$  est un tétraèdre de Delaunay si, et seulement si, l'intérieur de la sphère circonscrite à  $T$  ne contient aucun point de  $E$ .

Nous avons vu dans la section précédente que lorsque les points initialement générés sont en position générale, la triangulation duale de Delaunay est obtenue en joignant tous les centres de points ayant une face de Voronoï commune.

Inversement, le pavage de Voronoï peut-être obtenu à partir d'une triangulation de Delaunay. En effet, les sommets des polyèdres de Voronoï sont déduits à partir des centres de gravité des tétraèdres de Delaunay. Les arêtes de Voronoï sont déduites en déterminant les deux tétraèdres adjacents à chacun des faces (triangles) de Delaunay. Les polygones de Voronoï sont déduits en regardant tous les tétraèdres adjacents à chacune des arêtes de Delaunay. Enfin, chaque polyèdre de Voronoï est déduit en déterminant toutes les arêtes de Delaunay contenant le point considéré. La figure 2.5 illustre cette dualité entre le pavage de Voronoï et la triangulation de Delaunay.

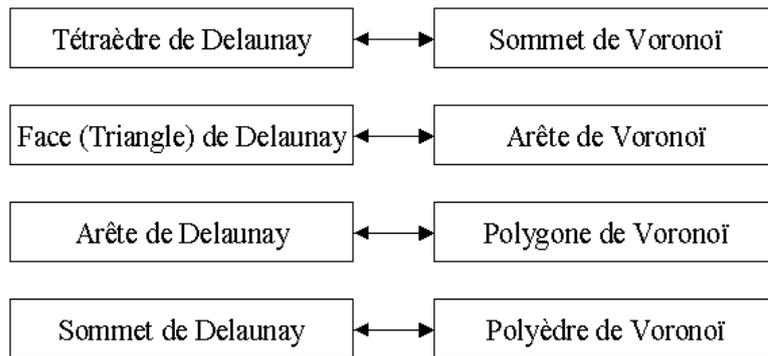


FIG. 2.5 – Dualité entre le pavage de Voronoï et la triangulation de Delaunay.

Dans la littérature on trouve des nombreuses méthodes de construction du diagramme de Voronoï dans le plan (Aurenhammer et Klein (2000)). Dans l'espace (3D) et en dimension  $d$ , les articles sont moins nombreux. Les méthodes utilisées sont essentiellement de deux types :

1. Méthodes globales,
2. Méthodes incrémentales.

Les méthodes seront dites globales si tous les points sont nécessaires au démarrage de la construction du diagramme de Voronoï.

Les méthodes seront dites incrémentales si cette donnée préalable n'est pas nécessaire. Contrairement aux méthodes globales, les méthodes incrémentales sont intrinsèquement dynamiques. Ces deux types de méthodes sont donc fondamentalement différentes et leur utilisation dépend entièrement des applications envisagées.

Pour ce qui nous concerne, nous avons choisi d'implémenter une méthode incrémentale pour la construction de la tessellation de Delaunay. L'algorithme utilisé est celui de Watson (D.F. Watson (1981)).

On peut brièvement décrire l'algorithme de Watson en 3D de la manière suivante. Supposons qu'on ait construit le diagramme de Delaunay pour  $n$  sites. L'ajout d'un nouveau site  $p_{n+1}$  dans la structure se fait comme suit (D.F. Watson (1981)) :

1. Chercher un tétraèdre  $T$  de Delaunay ( $E$ ) dont la sphère circonscrite contient le nouveau site.
2. Chercher tous les tétraèdres dont la sphère circonscrite contient le nouveau site, L'ensemble de ces tétraèdres forme le polyèdre étoilé  $PE(p_{n+1})$ ,
3. Retétraédriiser le polyèdre étoilé.

Dans l'étape 1, le tétraèdre  $T$  existe bien, mais sa recherche n'est pas locale. Cette recherche peut se faire par un algorithme de descente en gradient.

L'étape 2 se fait par un parcours (local en général) dans la structure de données. Les tétraèdres trouvés ne sont plus des tétraèdres de Delaunay. Ces tétraèdres sont donc à supprimer et forment le polyèdre étoilé associé au nouveau site inséré.

Pour l'étape 3, on démontre que retétraédriiser le polyèdre étoilé  $PE(p_{n+1})$  revient à supprimer toutes les arêtes intérieures à  $PE(p_{n+1})$ , et à créer toutes les arêtes liant le nouveau site à tous les sommets de  $PE(p_{n+1})$ .

## 2.2.3 Disposition des centres

### 2.2.3.1 Structures régulières

Il est possible de créer des structures spécifiques en disposant les germes régulièrement.

Plusieurs polyèdres permettent de réaliser une partition régulière de l'espace. En positionnant les points de germination suivant un réseau cubique simple ( $SC$ ), on génère un assemblage de cubes (cf. figure 2.6).

Placer les centres sur un réseau cubique centré ( $CC$ ), on génère un assemblage de tétrakaïdécaèdres. Ces polyèdres comptent quatorze faces (huit hexagonales et six

carrées), vingt quatre sommets et trente-six arêtes (cf. figure 2.7).

Placer les centres sur un réseau cubique à faces centrées (*CFC*) permet de générer une partition en dodécaèdres rhomboïdaux, polyèdres à douze faces losanges (cf. figure 2.8).

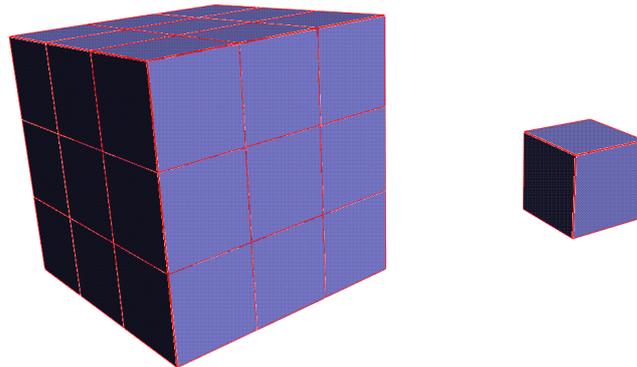


FIG. 2.6 – Disposition "cubique simple" des sites de germination et structure en cube correspondante générée par la méthode de Voronoï.

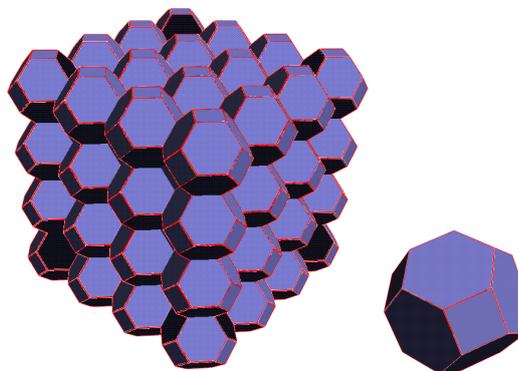


FIG. 2.7 – Disposition "cubique centrée" des sites de germination et structure en tétrakaïdécaèdres correspondante générée par la méthode de Voronoï.

### 2.2.3.2 Structures aléatoires :

Ce terme désigne des microstructures créées à partir d'une disposition aléatoire des centres. Quelle que soit la dimension de l'espace et la manière dont on génère les coordonnées des points, le principe reste le même.

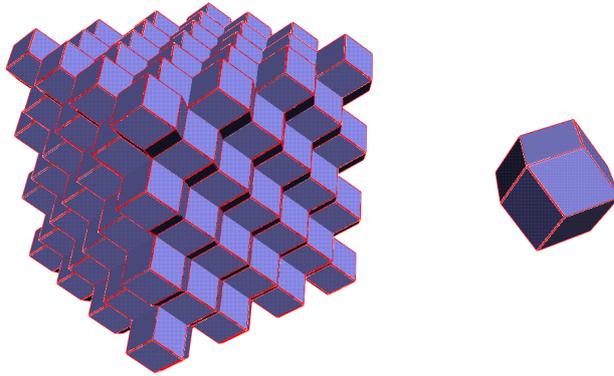


FIG. 2.8 – Disposition "cubique à faces centrées" des sites de germination et structure en dodécaèdres rhomboïdaux correspondante générée par la méthode de Voronoï.

Plusieurs processus de génération aléatoire de points peuvent être envisagés. On distingue parmi eux :

**Le processus de Poisson :** Un processus de Poisson est un processus ponctuel homogène isotrope pour lequel la disposition des points est complètement aléatoire à chaque réalisation.

La probabilité de présence d'un point dans une région donnée est, en particulier, indépendante de la position des autres points du processus. Le processus de Poisson est à la fois un processus ponctuel très utile et très simple à simuler.

Pour simuler une réalisation d'un processus de Poisson homogène d'intensité  $\rho$  ( le nombre moyen de points par unité de volume ) dans un domaine de volume  $V$ , on calcule d'abord le nombre de points  $n(V)$  contenus dans le volume  $V$ . Ce nombre,  $n(V)$ , suit une loi de Poisson de paramètre égal à  $\rho |V|$  (cf. Fig. 2.9).

$$Prob \{n(V) = n\} = e^{-\rho V} \frac{(\rho V)^n}{n!}$$

Le nombre de points  $n(V)$  peut être simulé de la manière suivante : Répéter la génération d'une variable aléatoire uniforme  $u$  dans l'intervalle  $[0, 1]$  jusqu'à ce que la propriété suivante (Eq. 2.1) soit vérifiée :

$$\sum_{i=0}^{i=n} -\log(u_i) < \rho |V| < \sum_{i=0}^{i=n+1} -\log(u_i) \quad (2.1)$$

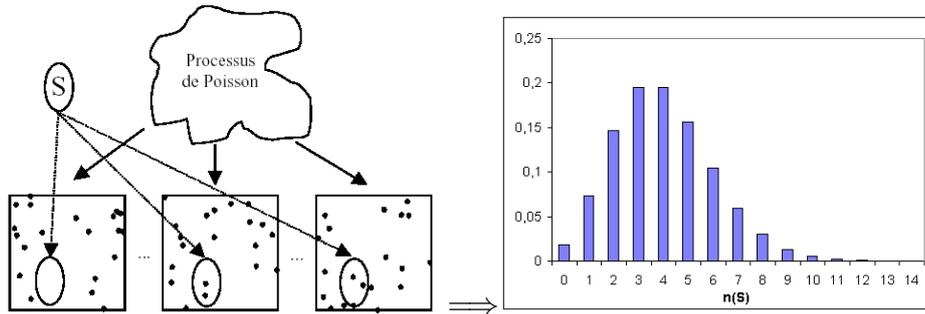


FIG. 2.9 – Le nombre de points contenus dans une surface  $S$  quelconque pour différentes réalisations d'un processus de Poisson suit une loi de Poisson de paramètre  $\rho S$ .

Une fois le nombre de points est déterminé, les coordonnées  $(x_i, x_i, z_i)$  sont ensuite définis à l'aide de trois nombres aléatoires tirés dans une loi uniforme.

Si on étudie un échantillon de points pour lequel le nombre de points  $n$  est parfaitement connu, on peut choisir de simuler des réalisations comportant le même nombre de points  $n$  ( $= \rho |V|$ ).

**Le processus de Neyman-Scott :** Le processus de Neyman-Scott est construit à partir d'un processus de Poisson "père", dont les points servent de centres pour des agrégats. Chaque agrégat est constitué d'un nombre aléatoire de points fils dont les positions sont indépendantes et identiquement distribuées autour du point père.

D'après Goreaud (2000), le processus de Neyman-Scott simple peut être le suivant : dans chaque agrégat les points fils sont répartis dans un disque de rayon  $r$  centré sur le point père, selon un autre processus de Poisson de paramètre  $\rho_{fils} = n_{fils} / (\pi r^2)$  (ou  $\rho_{fils} = n_{fils} / (\pi r^3)$  en 3D), où  $n_{fils}$  est donc le nombre moyen de points dans un agrégat.

Pour simuler une réalisation d'un tel processus, on simule d'abord un semis de Poisson père (conditionnel au nombre d'agrégats désiré  $n_{ag}$ ). Autour de chaque point père  $A_i$ , on crée un agrégat dont le nombre de points,  $n_i$ , résulte d'un tirage pseudo-aléatoire selon une loi de Poisson de paramètre  $n_{fils}$ . Pour chaque point  $B_j$  de l'agrégat, les coordonnées  $dx_j, dy_j, dz_j$  (relatives au point père  $A_i$ ) résultent d'un tirage pseudo-aléatoire dans une loi uniforme sur  $[-r, r]$ , effectué jusqu'à ce que le point soit effectivement dans le disque de rayon  $r$ .

Notons que pour les points pères trop près de la limite du domaine d'étude, certains points fils sont en dehors du domaine. Dans ce cas, ils sont simplement

éliminés. La figure 2.10 présente deux semis agrégés.

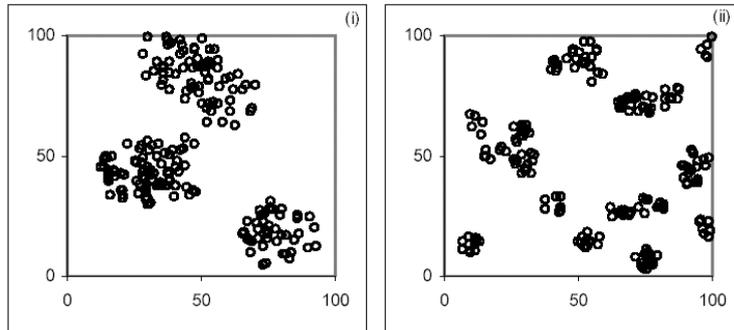


FIG. 2.10 – Deux exemples de simulations de processus de Neyman-Scott d’après Goreaud (2000).

**Le Processus de Gibbs :** La classe générale des processus de Gibbs permet d’obtenir des structures variées et complexes. L’idée du processus de Gibbs est de répartir les points du semis selon des relations d’attraction ou de répulsion avec des portées variables. Par exemple, avec une répulsion de 0 (mm) à  $x$  (mm), les points du semis seront répartis de façon à avoir le moins de voisins possibles à moins de  $x$  (mm). Inversement, une attraction à  $x$  (mm) se traduira par un nombre de voisins à  $x$  (mm) élevé. Il est possible de combiner plusieurs effets.

Un tel processus peut être défini par une fonction de coût  $f(r)$ <sup>1</sup>, qui représente en quelque sorte le coût associé à la présence dans le semis de deux points séparés par une distance  $r$ . Pour un semis de points donné, on peut calculer un coût total, égal à la somme des coûts associés à chaque paire de points (Eq. 2.2).

$$\begin{aligned} \text{coût total} &= \sum_{\text{paires de points}} f(\text{distance}(A_i, A_j)) \\ &= \sum_{\text{paires de points}} f(r) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Par définition, la probabilité qu’un semis soit une réalisation du processus de Gibbs considéré est d’autant plus forte que le coût total obtenu sur ce semis est faible. Ainsi, à  $r$  fixé, si la fonction de coût  $f(r)$  est positive, il est peu probable de trouver

<sup>1</sup>Cette fonction de coût  $f(r)$  est souvent appelée potentiel d’interaction de paire, par analogie avec les interactions entre particules en physique.

deux points à distance  $r$  (on dira qu'il y a répulsion à distance  $r$ ). Inversement, si la fonction de coût  $f(r)$  est négative, il est très probable de trouver deux points à distance  $r$  (on dira qu'il y a attraction à distance  $r$ ).

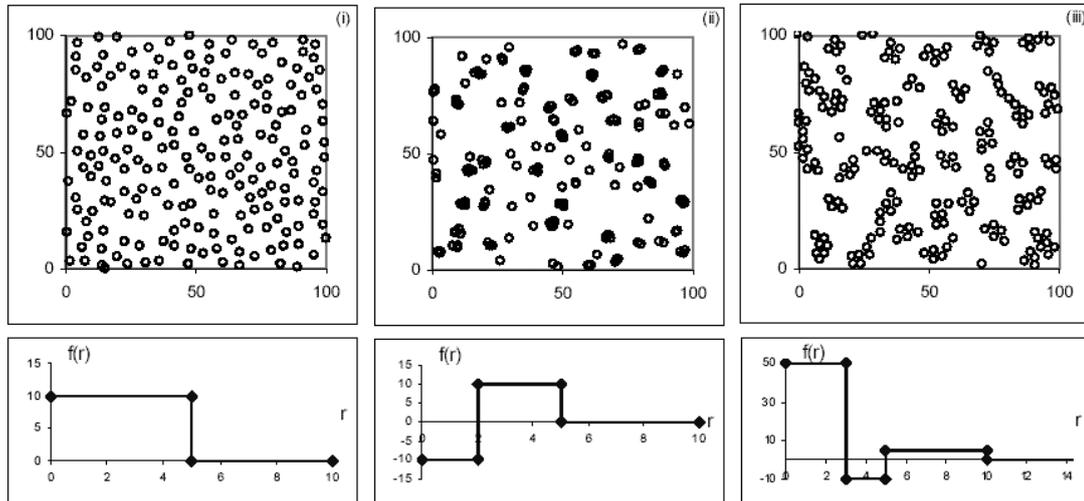


FIG. 2.11 – Exemple de trois semis obtenus par un processus de Gibbs, avec les fonctions de coût associées : un semis régulier (i) ; et deux structures mixtes (ii) et (iii) constituées de petits agrégats répartis régulièrement dans l'espace. ( D'après Goreaud (2000))

Pour obtenir les réalisations les plus probables du processus, on cherche donc à simuler des semis dont le coût total est suffisamment faible, c'est-à-dire à se rapprocher d'un minimum de la fonction de coût total. De tels semis de points peuvent être obtenus par un algorithme de type "depletions and replacements" : partant par exemple d'un semis de Poisson, on itère un grand nombre de fois une modification du semis, qui consiste à déplacer aléatoirement un point arbitraire. Si ce déplacement augmente le coût total, l'ancienne configuration est conservée. Sinon la nouvelle position est retenue. Ainsi, les attractions et répulsions entre points entraînent la réorganisation progressive du semis vers un semis plus agrégé ou plus régulier. D'après Goreaud (2000), cet algorithme converge assez rapidement vers une réalisation probable du processus. Selon la forme de la fonction de coût, ce processus peut être utilisé pour simuler des agrégats de taille variable, des semis plus ou moins réguliers, ou des structures mixtes (figure 2.11).

**Choix d'un processus et construction du diagramme de Voronoï** En raison de sa simplicité, nous avons choisi le processus de Poisson pour la génération aléatoire de points.

Un exemple de construction de Voronoï à partir d'un ensemble de points générés par

le processus de Poisson est montré sur la figure 2.12.

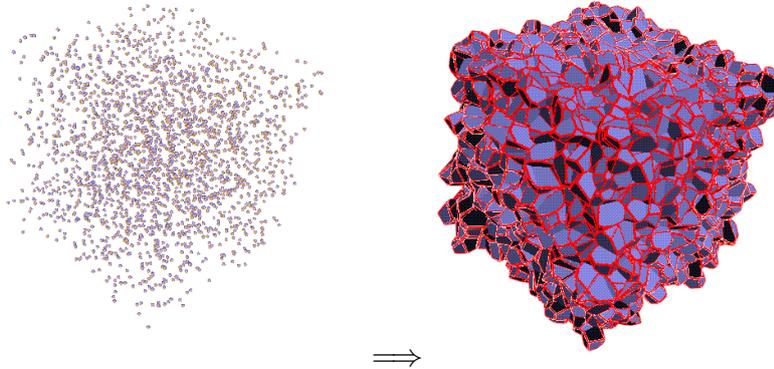


FIG. 2.12 – Disposition aléatoire des sites de germination et structure en polyèdres convexes correspondante générée par la méthode de Voronoï.

En complément de ces visualisations, une caractérisation microstructurale sommaire a été effectuée, dans la section 2.4.2, en analysant la distribution des tailles des cellules de Poisson-Voronoï.

## 2.3 Généralisations de la tessellation de Voronoï à des systèmes polydisperses

### 2.3.1 Principe

Dans le cas d'un système de sphères de différentes tailles, utiliser la tessellation de Voronoï n'a plus de sens. En effet, prenons par exemple le cas d'une sphère de rayon  $r_1$  et d'une sphère de rayon  $r_2$  dont les centres sont séparés par une distance  $d$  (cf. Fig 2.13).

Dans le cas où les deux sphères sont en contact ( $d = r_1 + r_2$ ), le plan médiateur coupe la sphère de rayon  $r_2$  (cf. Fig 2.13).

La tessellation de Voronoï telle qu'elle a été définie, ne convient pas à l'étude de systèmes polydisperses.

Afin de palier aux inconvénients de la tessellation de Voronoï, une généralisation à un ensemble de sphères a été introduite ( voir Aurenhammer et Klein (2000)). Son principe de construction est schématisée sur la figure 2.14.

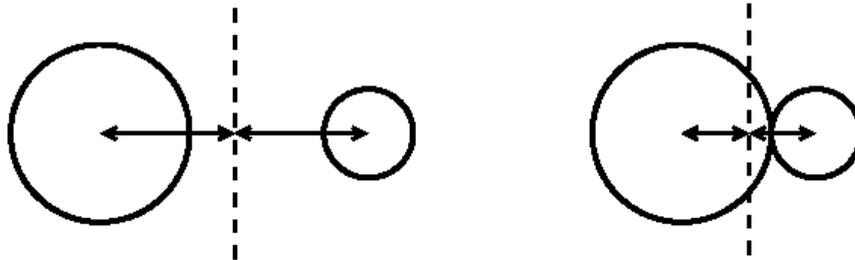


FIG. 2.13 – Le plan médiateur entre deux sphères de rayons différents peut couper une des sphères.

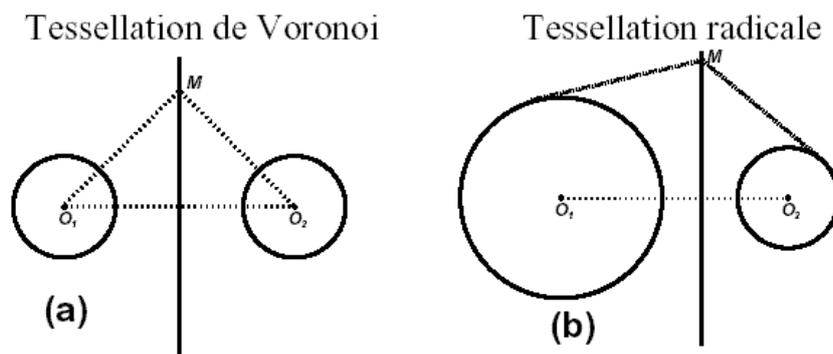


FIG. 2.14 – Généralisation de la tessellation de Voronoï. (a) Tessellation de Voronoï pour un système monodisperse (b) Tessellation radicale.

La tessellation radicale, encore appelée tessellation de Laguerre, consiste à pondérer la position des plans en fonction de la taille des sphères (Aurenhammer et Klein (2000)). Cette pondération est faite de façon à ce que le plan médiateur soit remplacé par le plan d'égle tangence aux deux sphères, appelé plan radical (cf. figure 2.15). La distance entre le plan et le centre de la sphère de rayon  $r_1$  est alors :

$$d_1 = \frac{d}{2} + \frac{r_1^2 - r_2^2}{2d}$$

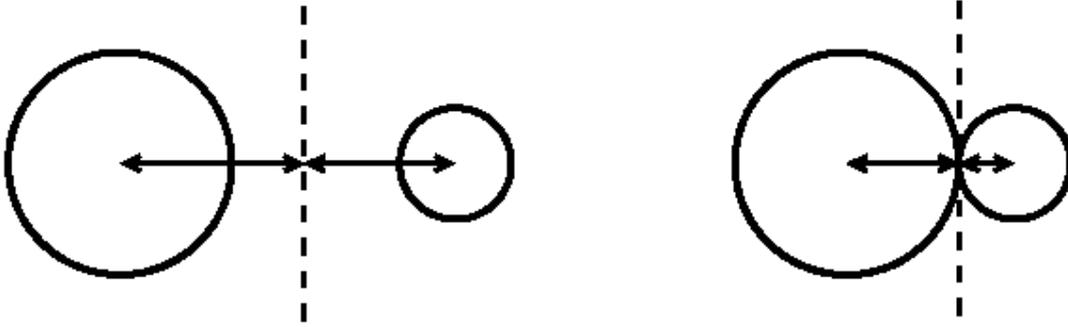


FIG. 2.15 – Lorsque les sphères sont en contact, le plan radical passe par le point de contact.

Comme le montre la figure 2.15, lorsque deux particules de tailles différentes sont en contact, le plan radical, contrairement au plan médian, passe par le point de contact.

Ainsi, à partir d'une population de sphères polydisperses  $E = \{s^1, \dots, s^n\}$  contenues dans une cellule de base  $V$  ( $\underline{\mathbf{c}}^j$  est le centre de la sphère  $s^j$  et  $r^j$  son rayon), il est possible de réaliser une partition périodique de l'espace en régions polyédriques convexes  $\{Vor(s^1), \dots, Vor(s^n)\}$ . Pour ce faire, notons  $(\underline{\mathbf{a}}_1, \underline{\mathbf{a}}_2, \underline{\mathbf{a}}_3)$  trois vecteurs de translation permettant de générer la microstructure par la répétition spatiale de la cellule de base  $V$  (cf. Fig. 2.16).

Comme pour le cas d'un ensemble de points, notons  $E^\alpha$  l'image de  $E$  par une certaine composition des vecteurs de translations  $(\underline{\mathbf{a}}_1, \underline{\mathbf{a}}_2, \underline{\mathbf{a}}_3)$  :

$$E^\alpha = \left\{ s^{\alpha,j} = (\underline{\mathbf{c}}^{\alpha,j}, r^{\alpha,j}), \left\{ \begin{array}{l} \underline{\mathbf{c}}^{\alpha,j} = \underline{\mathbf{c}}^j + \alpha_1 \cdot \underline{\mathbf{a}}_1 + \alpha_2 \cdot \underline{\mathbf{a}}_2 + \alpha_3 \cdot \underline{\mathbf{a}}_3, \\ r^{\alpha,j} = r^j \end{array} \right. \quad \underline{\alpha} \in \mathbb{Z}^3, j = 1..n \right\}$$

La région  $Vor(s^i)$  associée à la sphère  $s^i$  est constituée des points de l'espace ayant la plus courte tangente à  $s^i$  que tous les autres sphères de  $E$  ainsi que de leurs

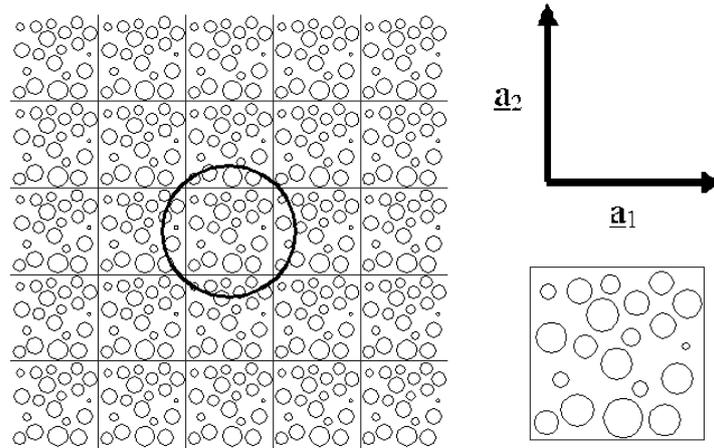


FIG. 2.16 – La structure est constituée par la répétition bidimensionnelle (spatiale) d'un ensemble de cercles (sphères).

images respectives par périodicité.

$$Vor(s^i) = \{ \underline{\mathbf{x}} \in / \sigma(s^{\alpha,i}, \underline{\mathbf{x}}) \leq \sigma(s^{\alpha,j}, \underline{\mathbf{x}}) \forall i \neq j, \forall \alpha \in \mathbb{Z}^3 \} \quad (2.2)$$

Comme le montre la figure 2.17,  $\sigma(s^i, \underline{\mathbf{x}})$  est la puissance du point  $\underline{\mathbf{x}}$  par rapport à la sphère  $s^i$  définie par :

$$\sigma(s^i, \underline{\mathbf{x}}) = d(\underline{\mathbf{c}}^i, \underline{\mathbf{x}})^2 - r^{i2} \quad (2.3)$$

Comme pour le cas de la tessellation de Voronoï pour un système monodisperse, il est possible d'obtenir la triangulation duale de Delaunay en joignant les paires des centres de sphères ayant une face de Voronoï commune.

## 2.3.2 Assemblage de sphères

### 2.3.2.1 Empilements RSA (Random Sequential Adsorption)

Le principe de cet algorithme consiste à placer aléatoirement des sphères une à une dans une boîte sans que ces dernières ne s'interpénètrent (Widom (1966)). C'est la méthode la plus naturelle et la plus simple pour générer des assemblages de sphères.

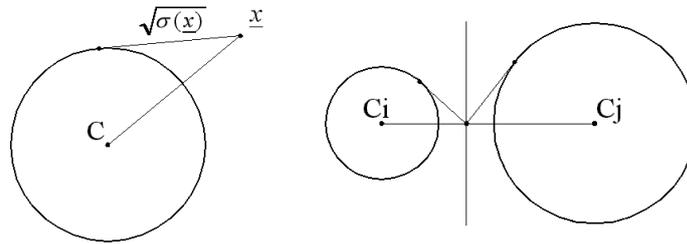


FIG. 2.17 – Méthode des plans radicaux.

Le nombre ainsi que les rayons des sphères sont fixés à l'avance. Les coordonnées cartésiennes de la sphère que nous cherchons à placer sont tirées au sort. Nous vérifions alors que cette sphère ne chevauche aucune autre sphère déjà en place. Si tel est le cas, elle est définitivement placée et, dans le cas contraire, nous recommençons le tirage de la position.

La procédure s'arrête lorsque plus aucune sphère supplémentaire ne peut être placée ("jumping limit") ou quand la compacité souhaitée a été atteinte. De façon pratique, on considère que l'assemblage est terminé après  $n$  tentatives avortées de nouveau positionnement. La valeur effectuée à ce nombre d'échecs successifs fixe la densité finale d'empilement. Elle ne peut dépasser 0.382 en  $3D$  et 0.547 en  $2D$  avec des sphères de même tailles (Richard (2000)). Le choix de  $n$  est un compromis entre la densité d'empilement et le temps de calcul.

Nous avons utilisé ce procédé pour un système polydisperse. Les sphères les plus grosses sont d'abord toutes placées, puis les petites. Le rapport entre le rayon de la plus grosse sphère et le rayon de la plus petite sphère est égale à 24 pour le système considéré. La compacité maximale qui a été atteinte, avec ce type de procédé, est proche de 50%.

Ainsi, un inconvénient majeur de ce type de procédé est sa faible densité d'empilement.

### 2.3.2.2 Empilements RSA densifiés

Afin de palier au défaut principal des assemblages RSA, une étape ultérieure de densification peut être réalisée.

On utilise un algorithme de type Méthodes des Éléments Distincts ( ou Dynamique particulière). À partir d'un empilement RSA, il simule l'évolution d'une population de particules soumises à des forces données : attraction répulsion ("force centrale") et non pénétration ( par exemple loi de Hertz). Les mouvements des particules doivent également assurer la conservation des conditions aux limites périodiques à la

périphérie.

En ce qui nous concerne, l'étape de densification a été effectuée à l'aide d'un programme réalisé par Jean Noël Roux, Chercheur au Laboratoire des Matériaux et Structures de Génie Civil. L'algorithme de résolution est schématisé dans la figure 2.18.

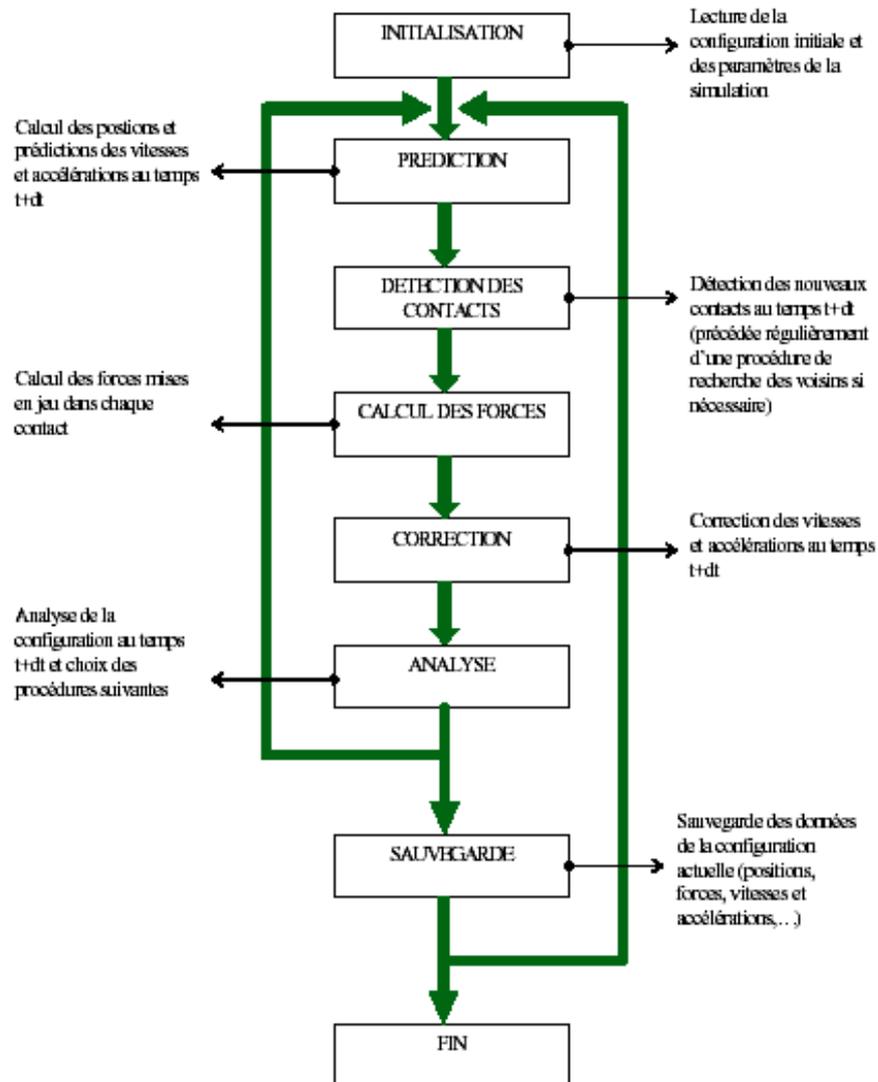


FIG. 2.18 – Dynamique moléculaire : Algorithme de prédiction-correction d'ordre 3 d'après Emam (2002).

La valeur de la densité finale est proche des classiques 64% dans le cas des empilements monodisperses aléatoires compacts en 3D et 80% pour les assemblages poly-

disperses.

## 2.4 Génération de microstructures contrôlées

Dans cette section, nous nous intéressons à la génération de microstructures, par la méthode de Voronoï, dont la distribution granulométrique est fixée à l'avance. Pour ce faire, la distribution granulométrique des régions de Voronoï a été comparée à celle des sphères initialement générées pour plusieurs densités.

Nous commençons, tout d'abord, par définir la fonction de répartition des rayons, aussi bien pour les régions de Voronoï que pour les sphères initialement générées. Ensuite, nous rappelons le principe de la méthode de Monte-Carlo. Enfin, nous présentons les résultats de nos simulations.

### 2.4.1 Caractérisation d'une distribution granulométrique par la fonction de répartition des rayons

#### 2.4.1.1 La tessellation de Voronoï

Afin de décrire la distribution granulométrique des régions de Voronoï, nous associons à chaque région de Voronoï de volume  $V^i$ , un rayon  $r^i$ . Ce rayon est calculé comme étant le rayon de la sphère ayant le même volume  $V^i$  :

$$r^i = \left( \frac{3}{4\pi} V^i \right)^{\frac{1}{3}}$$

Nous introduisons aussi la fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Voronoï  $P_V(R < r)$  :

$$\begin{aligned} P_V^R(r) &= \text{Probabilité } \{R < r\} \\ &= \int_{r_{min}}^r \text{Probabilité } \left\{ R \in \left[ r' - \frac{dr'}{2}, r' + \frac{dr'}{2} \right] \right\} dr' \end{aligned} \quad (2.4)$$

où  $R$  est la variable aléatoire dont les  $r^i$  sont les réalisations indépendantes.

Dans la limite du nombre total de réalisations,  $N$ , tendant vers l'infini,  $P_V^R(r)$  n'est autre que :

$$P_V^R(r) = \frac{\text{Nombre de } r^i < r}{N} \quad (2.5)$$

À partir de la variable aléatoire  $R$  portant sur les rayons  $r^i$ , nous définissons la variable aléatoire adimensionnelle  $X$  comme suit :

$$X \equiv \frac{R}{r_{moy}}, \quad \text{avec } P_V^R(r_{moy}) = \frac{1}{2}$$

Nous avons utilisé la méthode de Monte-Carlo pour déterminer la fonction de répartition  $P_V^X(x)$  des tessellations de Voronoï générées à partir des trois types d'empilement suivants :

1. Processus de Poisson,
2. Empilement de sphères RSA,
3. Empilement de sphères RSA densifié,

#### 2.4.1.2 Calcul de la fonction de répartition à partir de la courbe granulométrique

En ce qui concerne les sites générés à partir du processus de Poisson, la densité  $\rho$  est fixée à 0.15. Ainsi, pour des réalisations dans un domaine de volume  $|V| = 5^3$ , le nombre moyen de points par réalisation est égal à  $\rho \cdot |V| = 19$ .

Pour les empilement de sphères polydisperses, on introduit la courbe granulométrique  $g$  exprimant le pourcentage volumique (ou massique) des tamisats cumulées en fonction des rayons comme suit :

$$g(r) = \frac{\text{Volume des sphères dont le rayon est } < r}{\text{Volume total des sphères}}$$

soit  $dr > 0$ , on a alors :

$$g\left(r + \frac{dr}{2}\right) - g\left(r - \frac{dr}{2}\right) = \frac{\text{Volume des sphères dont le rayon } \in \left[r - \frac{dr}{2}, r + \frac{dr}{2}\right]}{\text{Volume total des sphères}} \quad (2.6)$$

si on note :

- $n(r)$  le nombre de sphères équivalentes dont le rayon est compris entre  $r - \frac{dr}{2}$  et  $r + \frac{dr}{2}$ ,
  - $V_S$  le volume total des sphères équivalentes,
  - $N$  le nombre total des sphères équivalentes,
- alors, lorsque  $dr$  tend vers zéro :

$$g\left(r + \frac{dr}{2}\right) - g\left(r - \frac{dr}{2}\right) = \frac{n(r) \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3}{V_S} \quad (2.7)$$

$$= g'(r) dr \quad (2.8)$$

$$(2.9)$$

d'où  $n(r)$  s'exprime de la manière suivante :

$$n(r) = \frac{g'(r) \cdot V_S}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3} \cdot dr \quad (2.10)$$

et le nombre de sphères dont le rayon est inférieur à  $r$  :

$$(\text{Nombre de sphères de rayon } < r) = \int_{r_{\min}}^r n(r) dr \quad (2.11)$$

Le nombre total de sphères,  $N$ , s'exprime comme suit :

$$N = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} n(r) dr \quad (2.12)$$

Pour  $N$  tendant vers l'infini, nous en déduisons la fonction de répartition des rayons,  $P^R(r)$ , définie par l'équation 2.5 de la manière suivante :

$$P_S^R(r) = \int_{r_{\min}}^r \frac{g'(t)}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot t^3} dt \cdot \frac{1}{\int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{g'(t)}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot t^3} dt} \quad (2.13)$$

Comme pour le cas des régions de Voronoï, nous introduisons la fonction de répartition des rayons normalisés  $P_S^X(x)$  :

$$X \equiv \frac{R}{r_{\text{moy}}}, \quad \text{avec } P_S^R(r_{\text{moy}}) = \frac{1}{2}$$

## 2.4.2 Étude paramétrique de la distribution granulométrique des régions de Voronoï par la méthode de Monte-Carlo

Dans cette section, nous allons étudier l'allure de la fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Voronoï en fonction de la compacité des sphères initialement générées ( $f = 0.1, 0.3, 0.5, 0.75$ ). Nous utilisons la méthode de Monte-Carlo pour déterminer la courbe moyenne de la fonction de répartition  $P_V^X(x)$  sur plusieurs réalisations.

Nous commençons, tout d'abord, par rappeler le principe de la méthode de Monte-Carlo. Nous exposons, ensuite, une méthode d'inversion de la fonction de répartition des rayons des sphères qu'on s'est donnée. Enfin, nous présentons les résultats des simulations.

### 2.4.2.1 Rappel sur le principe de la méthode de Monte-Carlo

Rappelons que la méthode de Monte-Carlo a pour but d'estimer l'espérance d'une variable aléatoire  $Z$ ,  $E(Z)$ , à partir de la moyenne arithmétique  $\bar{Z}$  sur  $N$  réalisations indépendantes de  $Z$ . Notons :

$$\bar{Z}_N = \frac{1}{N} (Z_1 + \dots + Z_N) \quad (2.14)$$

$$\sigma_N^2 = \frac{1}{N-1} \sum_i (Z_i - \bar{Z}_N)^2 \quad (2.15)$$

$$\varepsilon_N = 1.96 \frac{\sigma_N}{\bar{Z}_N \sqrt{N}} \quad (2.16)$$

Alors, quand  $N$  tend vers l'infini, et avec une probabilité de 95%,  $E(Z)$  se trouve dans l'intervalle :

$$E(Z) \in [\bar{Z}_N - \varepsilon_N \bar{Z}_N, \bar{Z}_N + \varepsilon_N \bar{Z}_N] \quad (2.17)$$

Dans cette étude, l'erreur relative  $\varepsilon_N$  est inférieure à 0.5%. Les sites initialement générées sont supposés à l'intérieur d'un cube de volume  $5 \times 5 \times 5$ .

### 2.4.2.2 Génération d'un ensemble de sphères à partir d'une fonction de répartition des rayons

La division MSC du Laboratoire Central des Ponts et Chaussées (LCPC) à Nantes nous a fourni un exemple de distribution granulométrique utilisée dans la

formulation des enrobés bitumineux. Cette courbe exprime le pourcentage massique (ou volumique) des tamisats cumulés en fonctions des rayons équivalent des tamis (cf. Tab. 2.1).

tamis en <i>mm</i>	0.08	0.315	1.00	2.00	4.00	6.30	8.00	10.00	12.00
% passant	11.8	22.6	25.0	33.0	58.2	77.0	82.0	92.0	100.0

TAB. 2.1 – La distribution granulométrique non tronquée du mélange : pourcentage du passant en fonction des dimensions des tamis.

Le rayon minimal de cette courbe,  $g_0$ , est égal à  $0.08\text{mm}$ . Nous avons choisi de fixer le rayon de troncature,  $r_{min}$ , à  $0.5\text{mm}$ , le rayon maximal  $r_{max}$  est égal à  $12\text{mm}$ .

La distribution granulométrique tronquée, noté  $g$ , est déduite de la distribution granulométrique non tronquée,  $g_0$ , de la manière suivante :

Notons  $r_1^0, \dots, r_t^0$  les rayons des  $t$  tamis considérés (ici 9 tamis). Le rayon de troncature  $r_{min} = 0.5\text{mm}$  étant compris entre  $r_2^0$  et  $r_3^0$  (i.e.  $0.315\text{mm}$  et  $1\text{mm}$  cf. Tab 2.1). On suppose que la courbe  $g_0$  varie linéairement entre  $r_2^0$  et  $r_3^0$ , d'où :

$$g_0(r_{min}) = \frac{g_0(r_2^0) - g_0(r_1^0)}{r_2^0 - r_1^0} (r_{min} - r_1^0) + g_0(r_1^0)$$

Ainsi pour  $r_i > r_{min}$ , la valeur de  $g(r^i)$  s'exprime comme suit :

$$\forall r_i \geq r_{min} \quad g(r_i) = \frac{g_0(r_i) - g_0(r_{min})}{1 - g_0(r_{min})} \quad (2.18)$$

La courbe tronquée,  $g$ , est présentée dans le tableau 2.2. Cette courbe tronquée a été transformée en terme de fonction de répartition des rayons normalisés des sphères en utilisant la méthode exposée au paragraphe 2.4.1.2 (cf. Fig. 2.19).

tamis en <i>mm</i>	0.50	1.00	2.00	4.00	6.30	8.00	10.00	12.00
% passant	0.00	1.88	12.35	45.32	69.91	76.45	89.53	100.0

TAB. 2.2 – La distribution granulométrique tronquée utilisée dans les simulations :  $r_{min} = 0.5\text{mm}$ .

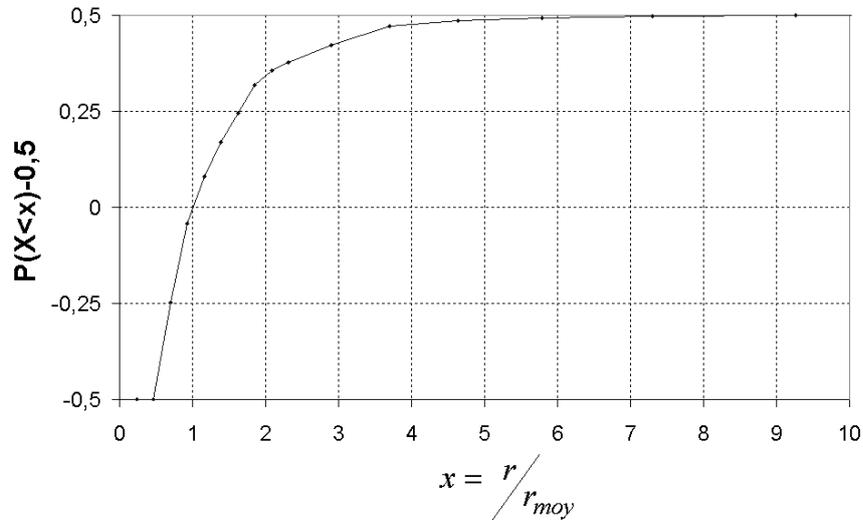


FIG. 2.19 – La fonction de répartition des rayons normalisés des sphères.

Une fois que la fonction de répartition des rayons des sphères a été choisie, plusieurs réalisations d'ensembles de sphères obéissant à cette fonction de répartition doivent être générés.

Pour ce faire, nous utilisons une méthode d'inversion de la fonction de répartition basée sur la proposition suivante (voir Bouleau86) :

*Si la fonction de répartition de la loi est  $P$  et  $U$  une variable aléatoire de loi uniforme sur  $[0, 1]$  alors la loi de  $X = P^{-1}(U)$  a comme fonction de répartition  $P$ .  $P^{-1}$  est ici l'inverse à droite de  $P$  ; c'est-à-dire que :*

$$P^{-1}(\alpha) = \inf \{x; P(x) \leq \alpha\}$$

Ainsi, connaissant le volume  $V$  du domaine à l'intérieur duquel les sphères seront placées ainsi que la compacité globale  $f$  des granulats, un algorithme simple d'inversion de la fonction de répartition  $P_S$  serait le suivant :

```

C_tmp=0;
n_sphere=0;
tanque (c_tmp<C) faire
    n_sphere++;

```

```

u=rand_uniforme();
r[n_sphere]=P_inverse(u);
C_tmp+=(4/3)*pi()*r[n_sphere]^3/V;
fin tanque;

```

Une fois que le nombre ainsi que les rayons des sphères sont déterminés, nous utilisons la méthode d'empilement RSA, exposée au paragraphe 2.3.2.1, pour les densités assez faible ( $< 50\%$ ), et la méthode d'empilement de sphères RSA densifiés, exposée au paragraphe 2.3.2.2, pour les densités assez fortes.

### 2.4.2.3 Résultats des simulations

Quatre fractions volumiques des sphères sont considérées :  $f = 10\%$ ,  $f = 30\%$ ,  $f = 50\%$  et  $f = 75\%$ . Nous avons utilisés l'empilement RSA pour les compacités  $f = 10\%$ ,  $f = 30\%$  et  $f = 50\%$ . Pour la densité  $f = 75\%$ , nous avons utilisé la méthode d'empilement de sphères RSA densifié. L'étape de densification à été réalisée à l'aide du logiciel de dynamique moléculaire développé par Jean Noël Roux, chercheur au Laboratoire des Matériaux et des Structures du Génie Civil.

La taille des échantillons ainsi que le nombre de réalisations nécessaire pour avoir convergence de la méthode de Monte-Carlo avec une erreur relative inférieure à 1% sont présentés dans le tableau 2.3 pour les quatre densités de sphères envisagées et aussi pour les ensembles de points générés à partir du processus de Poisson ( $\rho = 0.15\%$ ).

	Nombre moyen de sites	Nombre de réalisations
Processus de Poisson ( $\rho = 0.15$ )	507	20
Sphères densifiées à $f = 10\%$	802	20
Sphères densifiées à $f = 30\%$	960	20
Sphères densifiées à $f = 50\%$	1150	20
Sphères densifiées à $f = 75\%$	1520	20

TAB. 2.3 – Les tailles des échantillons et les nombres de réalisations.

La fonction de répartition des sphères initialement générées ainsi que les fonction de répartitions des régions de Voronoï associées, pour différentes fractions volumique de sphères, sont tracées sur la figure 2.20. À partir de cette figure, on constate que la courbe granulométrique des régions de Voronoï est très proche de celle des sphères initialement générées lorsque les rayons sont inférieurs à  $r_{moy}$  ( $x < 1$ ). L'écart se

creuse pour les rayons supérieurs à  $r_{moy}$  ( $x > 1$ ).

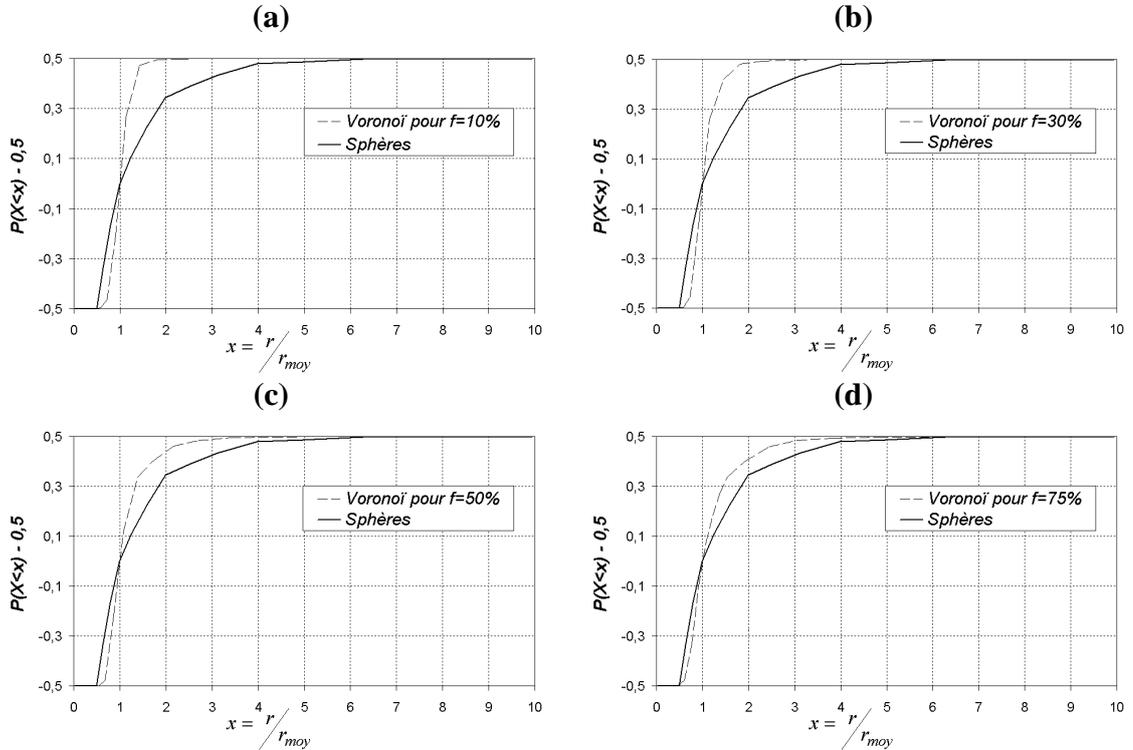


FIG. 2.20 – Comparaisons entre la fonction de répartition des rayons des sphères initialement générées et la fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Voronoï associées. **(a)** RSA avec  $f = 10\%$ , **(b)** RSA avec  $f = 30\%$ , **(c)** RSA avec  $f = 50\%$ , **(d)** RSA densifié avec  $f = 75\%$ .

La fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Voronoï obtenue à partir d'un ensemble de points générés par le processus de Poisson, appelés régions de Poisson-Voronoi, est tracée sur la figure 2.21.

Afin de comparer tous les résultats, toutes les fonctions de répartition des rayons équivalents normalisées sont tracées sur la figure 2.22. À partir de cette figure, on constate que quelque soit la fraction volumique, toutes les courbes des fonctions de répartition sont très proche lorsque les rayons normalisés  $x = \frac{r}{r_{moy}}$  sont inférieurs à 1 ( $x < 1$ ). Les sphères de "faible" rayon ( $r < r_{moy}$ ) ont donc peu d'influence sur la fonction de répartition de l'ensemble.

Pour les sphères de rayon  $r > r_{moy}$  (i.e.  $x > 1$ ), il est clair que la fonction de répartition des régions de Voronoï admet deux limites :

1. Lorsque la fraction volumique des sphères initialement générées tends vers zéro ( $f \rightarrow 0\%$ ), la fonction de répartition des rayons équivalents des régions

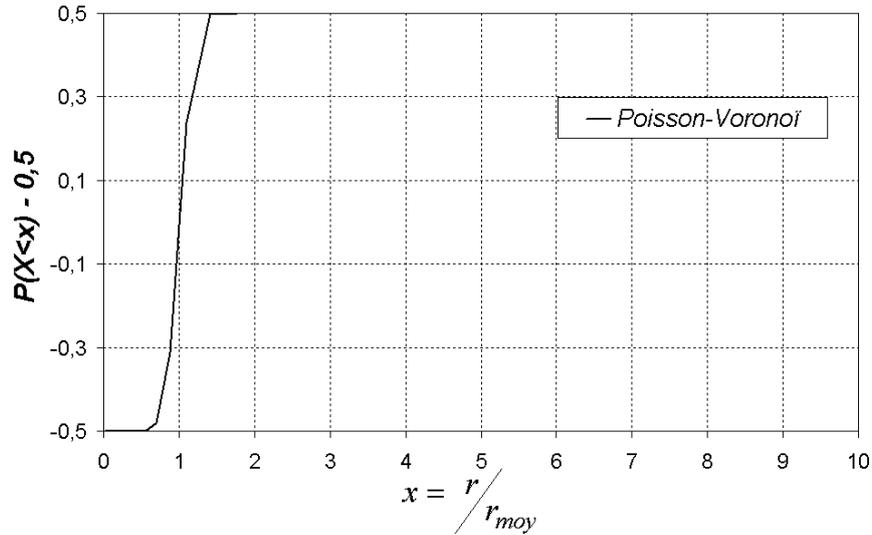


FIG. 2.21 – Fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Poisson-Voronoi.

de Voronoï tend vers celles des régions de Voronoï obtenues avec des points générées par le processus de Poisson,

2. Lorsque la fraction volumique des sphères initialement générées tend vers la compacité maximale pouvant être atteinte par densification, la fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Voronoï est proche de celles des sphères initialement générées.

En pratique, la densité maximale des sphères ne peut pas excéder 75%. Afin de quantifier l'écart entre la distribution granulométrique des régions de Voronoï et celles des sphères initialement générées et densifiées à 75%, nous avons défini l'erreur relative en un point  $x$ ,  $\varepsilon_r(x)$  comme suit :

$$\varepsilon_r(x) = \frac{P_V^X(x) - P_S^X(x)}{P_S^X(x)}$$

L'écart relatif,  $\varepsilon_r(x)$ , est tracé sur la figure 2.23 pour les rayons normalisés  $x = \frac{r}{r_{min}} > 1$ . La valeur maximale est proche de 15%.

Ainsi, à partir d'un empilement de sphères, il est possible de générer une mosaïque de Voronoï dont la fonction de répartition des rayons équivalents (ou des volumes),  $P_V(X < x)$ , est fixée à l'avance, à condition que :

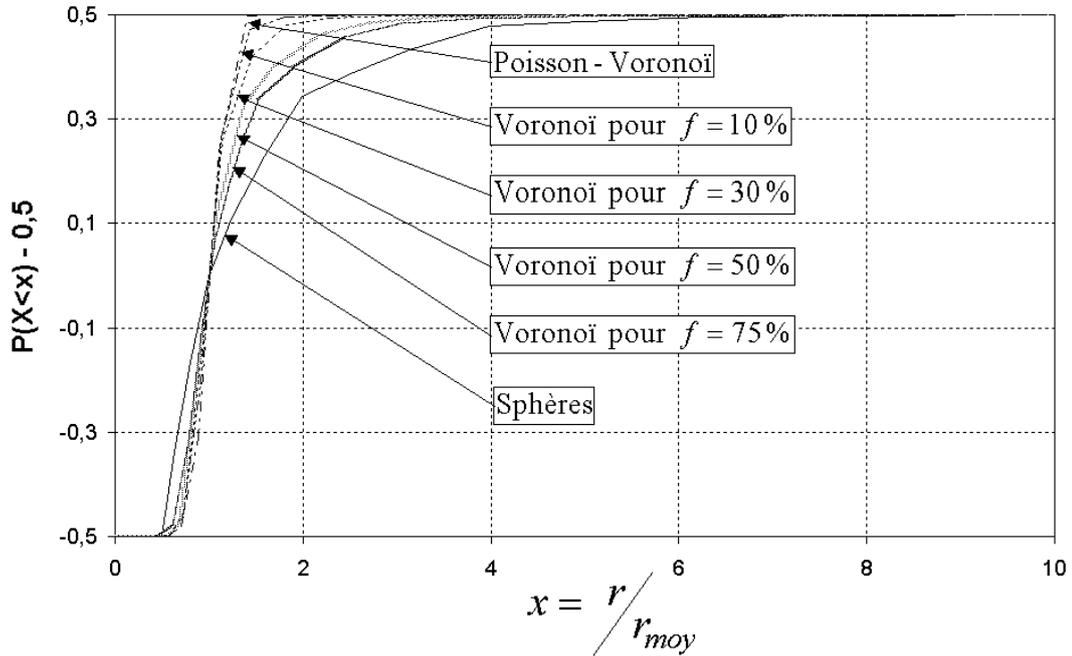


FIG. 2.22 – Comparaisons entre la fonction de répartition des rayons équivalents des régions de Voronoï et celle des rayons des sphères initialement générées pour différentes fractions volumiques.

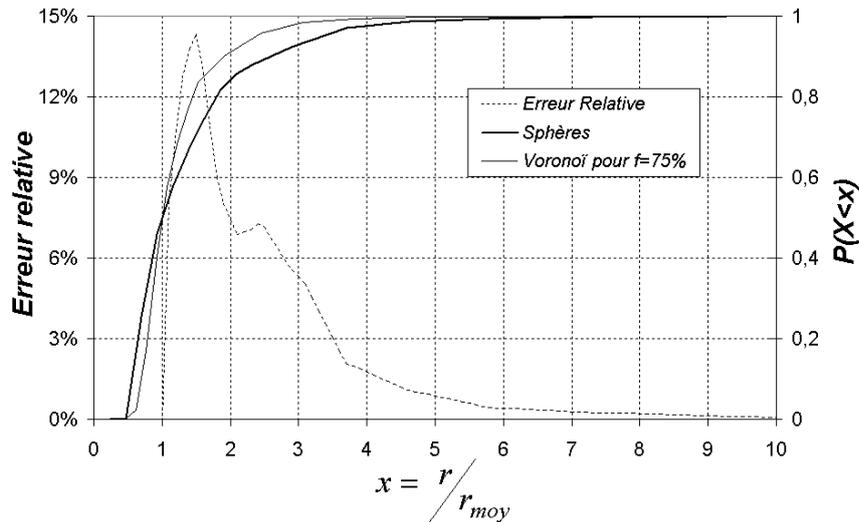


FIG. 2.23 – Écart relatif entre la fonction de répartition des rayons des sphères et celle des rayons équivalents des régions de Voronoï : Densité des sphères 75%.

1. La fonction de répartition des rayons des sphères,  $P_S(X < x)$ , soit égale à la fonction de répartition initialement fixée ( $P_V^X(x)$ ),
2. L'empilement de sphères soit densifié à la densité maximale possible (ici 75%).

Dans ce cas, l'écart relatif entre la fonction de répartition fixée et la fonction de répartition réelle est inférieur à 15%.

Avec un RSA densifié, on peut générer des polyèdres convexes (Voronoi) dont la granulométrie est fixée à l'avance. Pour cela, on génère des sphères, on les densifie selon cette granulométrie, puis on partitionne l'espace par Voronoi, on obtient les polyèdres convexes qui ont une granulométrie homothétique de celle des sphères.

## 2.5 Le modèle géométrique proposé

Les inclusions sont modélisées par les régions de Voronoi auxquelles on applique une homothétie. Ainsi, on introduit le concept de la Fraction Volumique Locale *FVL* des inclusions. En effet, soit  $Vor(S^i)$  la région de Voronoi associée au site  $S^i$  (point ou sphère de centre  $C^i$ ), la région homothétique associée à  $Vor(S^i)$ ,  $P^i$ , est définie de la manière suivante (Équation 2.19) :

$$P^i = \left\{ M' / \underline{C^i M'} = (k^i)^{1/3} \underline{C^i M}, M \in Vor(S^i) \right\} \quad (2.19)$$

où  $k^i$  est la fraction volumique de l'inclusion  $i$  (*FVL*). Plusieurs choix du *FVL* sont possibles :

1. La *FVL* est uniforme :

$$k^i = f \quad \forall i = 1..n \quad (2.20)$$

2. Lorsque la fraction volumique des sphères générées est égale à la fraction volumique des agrégats ( $f$ ), un autre choix possible de la *FVL* est :

$$k^i = \frac{\text{Volume}(S^i)}{\text{Volume}(Vor(S^i))} \quad (2.21)$$

3. La *FVL* varie en fonction du rayon équivalent de la région de Voronoï associée :

$$k^i = g(r_{eq}^i) \quad (2.22)$$

Le rayon équivalent  $r_{eq}^i$  pourrait être défini comme étant le rayon de la sphère ayant le même volume que la région  $Vor(S^i)$ .

Une étude paramétrique sur l'influence de la répartition de la *FVL* sur le comportement macroscopique sera menée dans le chapitre 6.

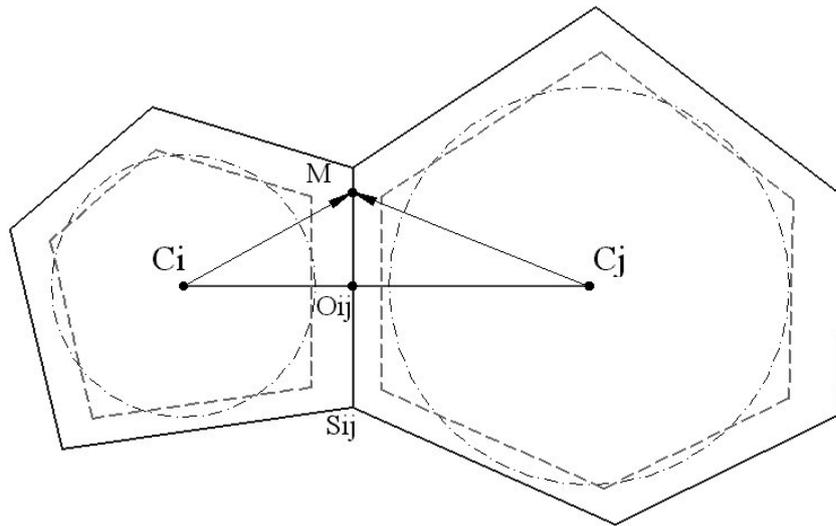


FIG. 2.24 – Configuration des particules.

La figure 2.24 montre deux cellules voisines, la matrice est située dans l'interface entre ces deux cellules, notons  $S^{ij}$  la face commune à  $Vor(S^i)$  et  $Vor(S^j)$ , l'épaisseur de la couche du liant  $e^{ij}$  est calculée de la manière suivante :

$$e^{ij} = (1 - k^i) \left\| \underline{\mathbf{C}^i \mathbf{O}^{ij}} \right\| + (1 - k^j) \left\| \underline{\mathbf{C}^j \mathbf{O}^{ij}} \right\| \quad (2.23)$$

La microstructure numérique est constituée d'un assemblage cohésif d'inclusions rigides modélisées par les régions de Voronoï homothétiques. Le liant (ou la matrice) est situé dans l'interface mince entre deux régions voisines.

Signalons que les microstructures numériques générées à partir de la tessellation de Voronoï ont été largement utilisées dans plusieurs travaux de recherche. Nous citons, en particulier, Fazekas (2003) et Fazekas et al. (2002) qui ont utilisé ce type de microstructures pour étudier l'influence des dispersions microstructurales sur les propriétés effectives des matériaux cellulaires.

Afin générer, numériquement, la microstructure, nous avons développé un programme en langage C permettant la détermination du pavage de Voronoï et de la triangulation duale de Delaunay d'un ensemble de sphères polydisperses. Ce logiciel est nommé DVP (Delaunay Voronoï Pondéré).

Ainsi, à partir d'un ensemble de sphères polydisperses densifiées avec le logiciel de dynamique moléculaire développé par Jean Noël Roux, chercheur au Laboratoire des Matériaux et des Structures du Génie Civil, il est possible de générer des régions polyédriques dont la granulométrie est fixée à l'avance, en utilisant le logiciel DVP. Une homothétie est, par la suite, appliquée à chacune des régions selon la loi de répartition des *FVL* des inclusions.

Dans le chapitre suivant, Nous nous intéresserons à la modélisation mécanique de interfaces. Nous montrerons en particulier que le système est équivalent à un réseau de "poutres" encastées et uniquement chargé en ses noeuds.



# Chapitre 3

## Modélisation mécanique des connexions inter-particulaires

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>64</b>
<b>3.2</b>	<b>Écriture de l'équilibre du système de particules</b>	<b>65</b>
<b>3.3</b>	<b>Écriture du comportement du système de particules</b>	<b>68</b>
3.3.1	Interactions inter-particulaires : Une loi d'interface en élasticité endommageable	68
3.3.2	Comportement élastique linéaire du système de particules	74
3.3.3	Récapitulatif	78
<b>3.4</b>	<b>Du micro au macro : Homogénéisation discrète</b>	<b>79</b>
3.4.1	Principe	79
3.4.2	Développement de la démarche	79
<b>3.5</b>	<b>Mise en oeuvre numérique</b>	<b>81</b>
3.5.1	Position du problème	82
3.5.2	Méthode du Lagrangien augmenté	83
<b>3.6</b>	<b>Conclusions</b>	<b>89</b>

---

### 3.1 Introduction

Nous avons vu au chapitre précédent que la mosaïque périodique tridimensionnelle de Voronoï a été choisie pour approcher la géométrie du matériau étudié. Chaque inclusion est modélisée par une région de Voronoï à laquelle on applique une contraction uniforme. Le liant est situé dans l'interface entre deux régions voisines. Une illustration bidimensionnelle est montrée sur la figure 3.1.

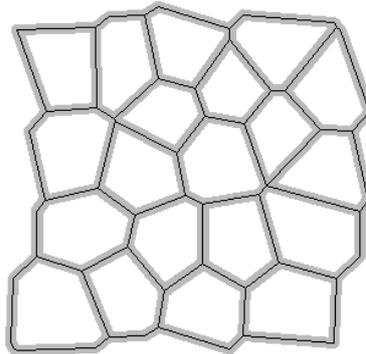


FIG. 3.1 – Les inclusions sont modélisées par les régions de Voronoï contractées. La matrice se situe dans l'interface entre deux régions voisines. L'ensemble forme une cellule élémentaire périodique.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la modélisation du comportement mécanique du matériau modèle.

Les inclusions sont infiniment rigides et l'épaisseur des interfaces est faible par rapport aux dimensions des inclusions. Ainsi, tout comme Klarbring (1991), Avila-Pozos et al. (1999) et Cecchi et Sab (2002), un développement asymptotique est utilisé pour modéliser le comportement linéaire élastique de ces interfaces. Nous montrerons que le matériau continu tridimensionnel modèle est équivalent à un réseau tridimensionnel de "poutres" encastrées et uniquement chargé en ses noeuds.

Nous utilisons, par la suite, une méthode de passage d'un milieu discret formé par un réseau de "poutres" à un milieu homogène équivalent (Pradel (1998) et Pradel et Sab (1998)). Nous en déduisons, ainsi, le comportement élastique linéaire homogénéisé.

## 3.2 Écriture de l'équilibre du système de particules

Le système,  $E$ , est constitué d'un ensemble de  $N$  particules en interaction entre elles :  $E = \{P^1, P^2, \dots, P^N\}$ . À chaque particule  $P^i$ , on associe un nombre la repérant de façon univoque. Sa position dans l'espace est notée  $\underline{x}^i$ .

Chaque particule est douée de mouvement de solide rigide. Ainsi, six degrés de liberté,  $(\underline{u}^i, \underline{\phi}^i)$  3 en translations et 3 en rotations, sont associés à chaque  $P^i$ .

Afin de décrire les efforts intérieurs, pour chaque couple de particules  $c = (P^i, P^j) \in E \times E, i \neq j$ , on définit la force,  $\underline{f}^c$  et le moment en  $P^i$ ,  $\underline{m}^c$ , exercés par la particule  $P^j$  sur la particule  $P^i$  (cf. Fig. 3.2).

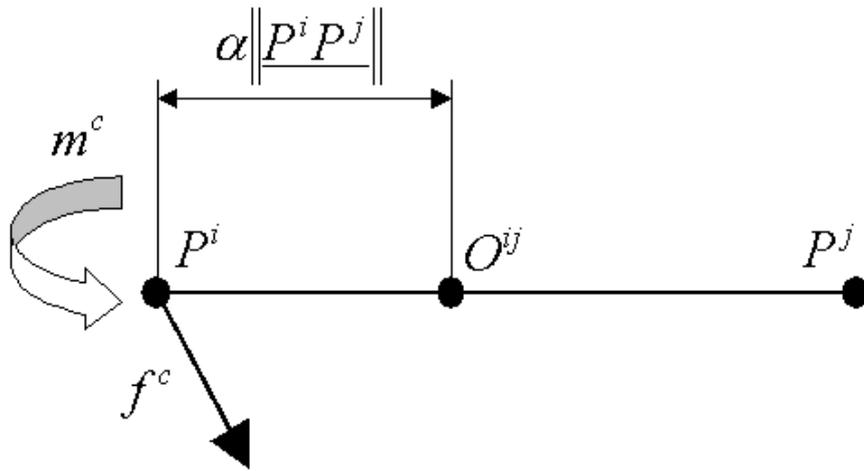


FIG. 3.2 – Les efforts exercés par la particule  $P^j$  sur la particule  $P^i$ .

Les actions mécaniques sont représentées par des torseurs, avec un vecteur résultant  $\underline{f}^c$  et un vecteur moment résultant en un certain point. Ici, nous choisissons  $P^i$  comme point d'application. on peut définir, ainsi, un torseur  $\mathcal{T}^c$  comme suit :

$$\mathcal{T}^c = \left\{ \begin{array}{c} \underline{f}^c \\ \underline{m}^c \end{array} \right\}_{P^i}$$

Pour simplifier les notations, on introduit un opérateur de transposition,  ${}^t$ , sur les couples de particules défini par :

$$\forall e = (P^i, P^j) \in E \times E, \quad {}^t e = (P^j, P^i) \in E \times E$$

Par ailleurs, l'action de l'extérieur du système  $E$  sur la particule  $P^i$  est un torseur dont les éléments de réduction  $P^i$  sont la force  $\underline{\mathbf{f}}_{ext}^i$  et le moment  $\underline{\mathbf{m}}_{ext}^i$ .

$$\mathcal{T}_{ext}^c = \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{f}}_{ext}^c \\ \underline{\mathbf{m}}_{ext}^c \end{array} \right\}_{P^i}$$

Un tel système peut modéliser un assemblage de barres encastrées aux noeuds et chargées en ces noeuds. Les noeuds sont alors doués d'une cinématique de translation et de rotation. Ainsi, tout comme Pradel (1998) et Salençon (1988), nous pouvons obtenir les équations d'équilibre pour un système de points ayant des degrés de liberté en translation et en rotation. Elles se traduisent par deux lois :

- 1. La loi des actions mutuelles :** Elle exprime que le torseur des efforts exercés par la particule  $P^j$  sur la particule  $P^i$  sont opposés :

$$\forall e = (P^i, P^j), i \neq j, \tau^c + \tau^{t e} = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \underline{\mathbf{f}}^c + \underline{\mathbf{f}}^{t c} = 0 \\ \underline{\mathbf{m}}^c + \underline{\mathbf{m}}^{t c} + \underline{\mathbf{f}}^c \wedge \underline{\mathbf{l}}^c = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

Notons  $\underline{\mathbf{O}}^{ij}$  le point d'intersection de la droite  $(P^i P^j)$  ( $= (C^i C^j)$ ) avec la surface de Voronoï  $S^{ij}$  et  $\underline{\mathbf{l}}^c$  le vecteur  $\underline{\mathbf{P}}^i \underline{\mathbf{P}}^j$  ( $= \underline{\mathbf{C}}^i \underline{\mathbf{C}}^j$ ) (cf. Figs. 2.24, 3.2) :

$$\underline{\mathbf{O}}^{ij} = (1 - \alpha) \underline{\mathbf{x}}^i + \alpha \underline{\mathbf{x}}^j, \quad \alpha = \frac{\| \underline{\mathbf{C}}^i \underline{\mathbf{O}}^{ij} \|}{\| \underline{\mathbf{l}}^c \|}$$

Nous introduisons une fonction indicatrice  $\chi_i$  définie par :

$$\begin{aligned} \chi_i(c) &= 1 \quad \text{si } c = (P^i, P^j) \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned} \quad (3.2)$$

- 2. La loi fondamentale de la statique :** Elle stipule que le torseur de tous les efforts s'exerçant sur la particule  $P^i$  est nul :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{f}}_{ext}^i + \sum_c \chi_i(c) \underline{\mathbf{f}}^c = 0 \\ \underline{\mathbf{m}}_{ext}^i + \sum_c \chi_i(c) \underline{\mathbf{f}}^c = 0 \end{cases} \quad \forall P^i \in E \quad (3.3)$$

Les éléments de réduction du torseur  $\mathcal{T}^c$  au point  $O^{ij}$  s'écrivent sous la forme :

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{T}}^c &= \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{f}}^c \\ \underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c \end{array} \right\}_{O^{ij}} \\ &= \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{f}}^c \\ \underline{\mathbf{m}}^c + \alpha \underline{\mathbf{f}}^c \wedge \underline{\mathbf{l}}^c \end{array} \right\}_{O^{ij}}\end{aligned}\quad (3.4)$$

De la même manière, les éléments de réduction du torseur  $\mathcal{T}'^c$  au point  $O^{ij}$  s'écrivent sous la forme :

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{T}}'^c &= \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{f}}'^c \\ \underline{\tilde{\mathbf{m}}}'^c \end{array} \right\}_{O^{ij}} \\ &= \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{f}}'^c \\ \underline{\mathbf{m}}'^c + (1 - \alpha) \underline{\mathbf{f}}'^c \wedge \underline{\mathbf{l}}'^c \end{array} \right\}_{O^{ij}}\end{aligned}\quad (3.5)$$

En utilisant les éléments de réduction au point  $O^{ij}$  du torseur des efforts exercés par  $P^j$  sur  $P^i$ , la loi des actions mutuelles (Eq. 3.1) s'écrit :

$$\tilde{\mathcal{T}}^c + \tilde{\mathcal{T}}'^c = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} \underline{\mathbf{f}}^c + \underline{\mathbf{f}}'^c = 0 \\ \underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c + \underline{\tilde{\mathbf{m}}}'^c = 0 \end{array} \right. \quad (3.6)$$

$\underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c$  (respectivement  $\underline{\tilde{\mathbf{m}}}'^c$ ) est le moment défini dans l'équations 3.4 (respectivement Eq. 3.5).

Nous allons maintenant étudier la puissance des efforts intérieurs en exploitant la loi des actions mutuelles (Eq. 3.1). On considère le sous-système  $E' = \{P^i, P^j\} \subset E$ . Le travail des efforts intérieurs du système  $E'$ ,  $\mathcal{P}_{int}(E')$  est égale à l'opposé du travail des déformations, il vient :

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{int}(E') &= -\mathcal{P}_{def}(E') \\ &= \underline{\mathbf{f}}^c \underline{\mathbf{u}}^i + \underline{\mathbf{f}}'^c \underline{\mathbf{u}}^j + \underline{\mathbf{m}}^c \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i + \underline{\mathbf{m}}'^c \underline{\boldsymbol{\varphi}}^j \\ &= \underline{\mathbf{f}}^c (\underline{\mathbf{u}}^i - \underline{\mathbf{u}}^j) + (\underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c - \alpha \underline{\mathbf{f}}^c \wedge \underline{\mathbf{l}}^c) \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i + (\underline{\tilde{\mathbf{m}}}'^c - (1 - \alpha) \underline{\mathbf{f}}'^c \wedge \underline{\mathbf{l}}'^c) \underline{\boldsymbol{\varphi}}^j \\ &= \underline{\mathbf{f}}^c (\underline{\mathbf{u}}^i - \underline{\mathbf{u}}^j + (\alpha \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i + (1 - \alpha) \underline{\boldsymbol{\varphi}}^j) \wedge \underline{\mathbf{l}}^c) + \underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c (\underline{\boldsymbol{\varphi}}^i - \underline{\boldsymbol{\varphi}}^j) \\ &= -(\underline{\mathbf{f}}^c \underline{\mathbf{d}}^c + \underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c \underline{\boldsymbol{\delta}}^c)\end{aligned}$$

Ainsi, on fait apparaître deux déplacements généralisés  $\underline{\mathbf{d}}^c$  et  $\underline{\delta}^c$  définis par :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{d}}^c = \underline{\mathbf{u}}^j - \underline{\mathbf{u}}^i - \left( \alpha \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i + (1 - \alpha) \underline{\boldsymbol{\varphi}}^j \right) \wedge \underline{\mathbf{I}}^c \\ \underline{\delta}^c = \underline{\boldsymbol{\varphi}}^j - \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i \end{cases} \quad (3.7)$$

les relations suivantes sont évidentes :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{d}}^c = -\underline{\mathbf{d}}^{t c} \\ \underline{\delta}^c = -\underline{\delta}^{t c} \end{cases} \quad (3.8)$$

### 3.3 Écriture du comportement du système de particules

Il a été supposé que chaque région  $P^i$  est doué d'un mouvement de solide rigide  $(\underline{\mathbf{u}}(C^i), \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i)$ . L'épaisseur de la couche du liant  $e^{ij}$  est supposée faible par rapport aux dimensions des particules  $P^i$  et  $P^j$ . Ainsi le comportement mécanique de cette connexion pourrait être modélisé par une loi d'interface reliant le saut de déplacement  $[[\underline{\mathbf{u}}]]$  à la contrainte au voisinage de la surface  $S^{ij}$   $(\underline{\boldsymbol{\sigma}}, \underline{\mathbf{n}})$ .

Dans le paragraphe suivant, nous allons exposer les grandes lignes de la formulation de la loi d'interface utilisée dans ce travail.

#### 3.3.1 Interactions inter-particulaires : Une loi d'interface en élasticité endommageable

##### 3.3.1.1 Modélisation asymptotique d'une interface mince entre solides rigides en élasticité linéaire

Considérons deux corps élastiques  $\Omega_1^e$  et  $\Omega_2^e$  séparés par une couche de "mastic"  $\Omega_0^e$  d'épaisseur  $e$  (cf. Fig. 3.3).

Dans la suite, on adoptera le terme d'inclusions pour les deux corps déformables occupés par les domaines  $\Omega_0^e$  et  $\Omega_1^e$ . Celui occupé par le domaine  $\Omega_0^e$  sera appelé matrice. Pour simplifier l'exposé, on suppose que le comportement des inclusions et de la matrice est linéaire isotrope. On notera  $E^M$  le module d'Young de la matrice et  $E^I$  celui des inclusions.

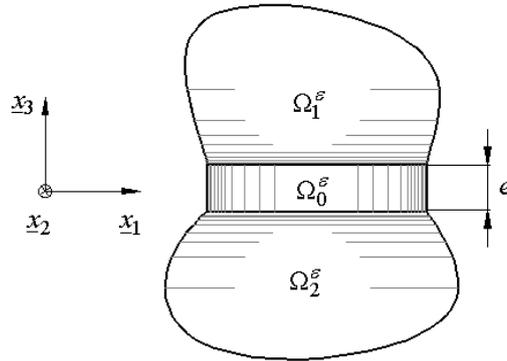


FIG. 3.3 – Géométrie du problème tridimensionnel.

En outre, on supposera que l'épaisseur  $e$  est faible par rapport aux dimensions des inclusions (**Hypothèse H1**), et que la matrice est beaucoup plus souple que les inclusions (**Hypothèse H2**).

On notera  $\alpha$  le rapport entre le module d'Young de la matrice et celui des inclusions.

$$\alpha = \frac{E^M}{E^I}$$

et  $\beta$  le rapport entre l'épaisseur  $e$  et une dimension caractéristique des inclusions  $h$ ,

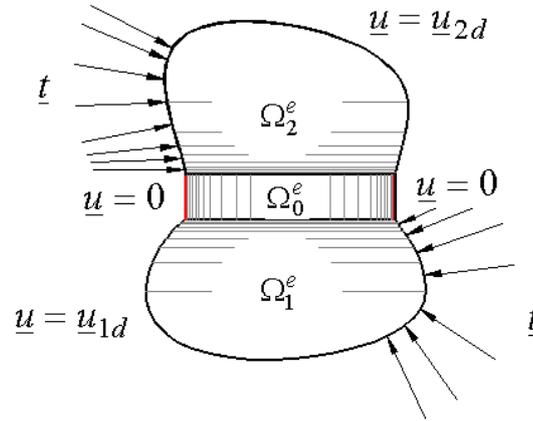
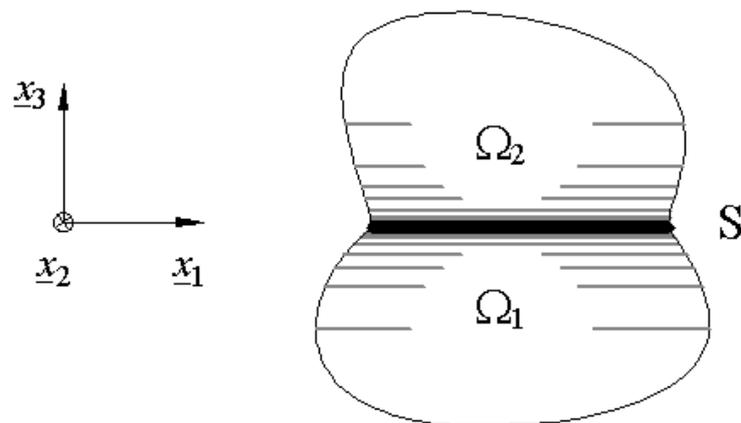
$$\beta = \frac{e}{h}$$

La figure 3.4 illustre le domaine  $\Omega^e = \Omega_0^e \cup \Omega_1^e \cup \Omega_2^e$  et les conditions aux limites appliquées.

Le problème ( $P$ ) consiste à trouver le champs de déplacement  $\underline{\mathbf{u}} = (u_i)$  et de contraintes  $\underline{\underline{\sigma}} = (\sigma_{ij})$  des trois corps déformables occupés par les domaines  $\Omega_0^e$ ,  $\Omega_1^e$  et  $\Omega_2^e$ .

La solution du problème dépend des deux paramètres  $\alpha$  et  $\beta$ . Klarbring (1991), Avila-Pozos et al. (1999) et Cecchi et Sab (2002) ont étudié la solution lorsque les deux paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  tendent vers zero.

Lorsque le paramètre  $\beta$ , qui traduit le rapport entre l'épaisseur  $e$  et les dimensions des inclusions, tend vers zéro, le domaine  $\Omega_0$  occupé par la matrice est assimilé à une surface  $S$  (cf. Fig. 3.5).

FIG. 3.4 – Le chargement appliqué à la structure  $\Omega^e$ .FIG. 3.5 – Le domaine occupé par la matrice est assimilé à une surface  $S$ .

Il a été montré par Klarbring (1991), Avila-Pozos et al. (1999) et Cecchi et Sab (2002), que, lorsque le rapport  $\alpha$  est de même ordre de grandeur que le rapport  $\beta$  et que tous les deux sont proche de zéro, le comportement asymptotique en élasticité linéaire de la matrice est piloté par une loi élastique linéaire d'interface reliant le saut de déplacement  $[[\mathbf{u}]]^{12}$  à la contrainte  $\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}}^{12}$  au voisinage de la surface  $S$  via une matrice de rigidité locale  $\underline{\underline{\mathbf{K}}}$ .

$$\text{si } \alpha \ll 1, \beta \ll 1 \text{ et } \frac{\alpha}{\beta} \sim 1 \text{ alors}$$

$$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}} = \underline{\underline{\mathbf{K}}} \cdot [[\mathbf{u}]] \quad (3.9)$$

Où :

- $\underline{\mathbf{n}}$  est la normale à la surface  $S$  (dirigée de  $\Omega_1$  vers  $\Omega_2$ )
- $[[\mathbf{u}]] = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-$ ,  $\mathbf{u}^+$  (resp.  $\mathbf{u}^-$ ) est le déplacement en un point de la surface  $S$  du côté de  $\Omega_2$  (resp.  $\Omega_1$ )
- $\underline{\underline{\mathbf{K}}}$  est la matrice de rigidité locale de l'interface. Elle s'exprime en fonction des coefficients de Lamé de la matrice ( $\lambda^M$  et  $\mu^M$ ) et de la normale  $\underline{\mathbf{n}}^{12}$  comme suit :

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}} = \frac{1}{e} (\mu^M \underline{\underline{\mathbf{1}}} + (\mu^M + \lambda^M) (\underline{\mathbf{n}}^{12} \otimes \underline{\mathbf{n}}^{12})) \quad (3.10)$$

$\underline{\underline{\mathbf{1}}}$  est la matrice identité d'ordre 3.

Dans le cas où le comportement de la matrice est anisotrope, la matrice de rigidité locale de l'interface s'écrit alors sous la forme :

$$(K^{ij})_{kl} = \frac{1}{e} a_{kmnl}^M (\underline{\mathbf{n}}^{12})_m (\underline{\mathbf{n}}^{12})_n \quad (3.11)$$

$\underline{\underline{\mathbf{a}}}^M = (a_{kmnl}^M)$  est le tenseur de souplesse de la matrice.

L'énergie de déformation de cette interface s'écrit en fonction du saut de déplacement  $[[\mathbf{u}]]$  et de la matrice de rigidité locale  $\underline{\underline{\mathbf{K}}}$  comme suit :

$$w = \frac{1}{2} \int_S [[u]] \cdot \underline{\underline{\mathbf{K}}} \cdot [[u]] dS \quad (3.12)$$

Le déplacement d'un point à l'intérieur de la matrice ( le domaine  $\Omega_0$ ) est supposé être linéaire en  $x_3$ . Il s'exprime donc en fonction de  $\underline{\mathbf{u}}^+ = \underline{\mathbf{u}}(x_1, x_2, +\frac{e}{2})$ ,

$\underline{\mathbf{u}}^- = \underline{\mathbf{u}}(x_1, x_2, -\frac{e}{2})$  et de  $x_3$  comme suit :

$$\forall M(x_1, x_2, x_3) \in \Omega_0^e \quad \underline{\mathbf{u}}(M) = \frac{x_3}{e} (\underline{\mathbf{u}}^+ - \underline{\mathbf{u}}^-) + \frac{\underline{\mathbf{u}}^+ + \underline{\mathbf{u}}^-}{2} \quad (3.13)$$

Ainsi la déformation à l'intérieur de la matrice s'exprime de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \forall M(x_1, x_2, x_3) \in \Omega_0 \quad \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(M) = & \frac{\underline{\mathbf{n}} \otimes^S [[\underline{\mathbf{u}}]]}{e} \\ & + \left( \frac{1}{2} + \frac{x_3}{e} \right) \underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^+) \\ & + \left( \frac{1}{2} - \frac{x_3}{e} \right) \underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^-) \end{aligned} \quad (3.14)$$

où :

- $\otimes^S$  désigne le produit tensoriel symétrisé,
- $\underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^+)$  (resp.  $\underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^-)$ ) est le gradient symétrisé par rapport aux variables  $x_1$  et  $x_2$  de  $\underline{\mathbf{u}}^+$  (resp.  $\underline{\mathbf{u}}^-$ ). Il s'exprime de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^+) = \begin{pmatrix} u_{1,1}^+ & \frac{1}{2}(u_{1,2}^+ + u_{2,1}^+) & 0 \\ \frac{1}{2}(u_{1,2}^+ + u_{2,1}^+) & u_{2,2}^+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$u_{i,j}^+$  est la dérivé de la composante  $u_i^+$  par rapport à la variable  $x_j$  ( $i, j \in \{1, 2\}$ ).

Et idem pour  $\underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^-)$ .

En pratique, les corps  $\Omega_1^e$  et  $\Omega_2^e$  seront considérés infiniment rigides. Dans ce cas, les quantités  $\underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^+)$  et  $\underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^-)$  peuvent être exprimés en fonction des rotations des centres des deux corps rigides (les inclusions). Or, il est bien connu que, contrairement aux milieux de Cosserat, la cinématique des milieux de Cauchy est uniquement décrites par des translations. Ainsi, les termes  $\underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^+)$  et  $\underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\mathbf{u}}^-)$  qui interviennent dans l'expression de la déformation à l'intérieur de l'interface considérée seront négligés par la suite. L'expression retenue de  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(M)$  est donc la suivante :

$$\forall M(x_1, x_2, x_3) \in \Omega_0^e \quad \underline{\underline{\varepsilon}}(M) = \frac{\mathbf{n} \otimes^S [\mathbf{u}]}{e} \quad (3.16)$$

### 3.3.1.2 Extension à l'élasticité endommageable

Le présent modèle discret sera dédié à la modélisation des enrobés bitumineux. Ce type de matériau est bien entendu largement utilisé dans les structures de chaussées. Sous l'effet du passage répété des charges roulantes, ce matériau subit une dégradation progressive de sa rigidité allant jusqu'à sa rupture. La prise en compte de l'endommagement dans les interactions entre particules rigides s'avère donc nécessaire pour la modélisation de ce type de matériau.

#### Aperçu sur la théorie de l'endommagement :

Dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles, la théorie de l'endommagement permet de rendre compte de cette dégradation. Son domaine d'application couvre aussi bien le domaine des premières détériorations, la prise en compte des effets de cumul du dommage, ainsi que la prévision de l'amorçage ou l'initiation d'une microfissure.

À travers un concept d'homogénéisation, l'évolution du dommage est décrite d'une façon macroscopique à l'aide d'une variable  $D$ . Cette dernière représente la variation du tenseur d'élasticité par rapport à l'état vierge (non endommagé). Dans une théorie isotrope,  $D$  est le scalaire défini par :

$$D = 1 - \frac{E}{E_0} \quad (3.17)$$

où  $E$  est le module d'young actuel et  $E_0$  le module d'Young à l'état vierge.

La théorie de l'endommagement continu est basée sur les hypothèses de la mécanique des milieux continus. L'élément de volume est considéré assez grand par rapport aux hétérogénéités du milieu et assez petit pour qu'on puisse le considérer comme un point matériel. Les relations de comportement sont décrites pour cet élément de volume considéré continu et homogène et dans lequel on peut définir des contraintes et des déformations. Les modèles locaux proposent de relier le dommage au point  $\underline{\mathbf{x}}$ ,  $D(\underline{\mathbf{x}})$ , à l'état de déformation qui règne en ce point.

$$D(\underline{\mathbf{x}}) = f\left(\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\mathbf{x}})\right) \quad (3.18)$$

$f$  est la loi d'évolution du dommage  $D$ .

L'endommagement par fatigue correspond à la naissance et la croissance de microfissures sous l'effet de sollicitations cycliques jusqu'à l'amorçage d'une fissure macroscopique (Lemaitre et Chaboche (1985)).

Les lois classiques d'évolution s'expriment en fonction de grandeurs définies sur un cycle :

- amplitude de contrainte ou de déformation,
- valeur moyenne (sur un cycle) de contrainte ou de déformation,
- rapport de la contrainte (ou de la déformation) minimale à la contrainte (ou la déformation) maximale.

En ce qui nous concerne, nous nous intéressons uniquement à l'endommagement par fatigue.

### **Prise en compte de l'endommagement dans les interactions entre particules :**

Pour chaque couple de particules connectées, nous introduisons un paramètre  $D$  traduisant l'état du dommage de la matrice se trouvant dans l'interface entre ces deux particules.

Dans ce cas, la loi d'interface de l'équation 3.9 se réécrit sous la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{n}} = (1 - D) \underline{\underline{K}} \cdot \llbracket \underline{\underline{u}} \rrbracket \quad (3.19)$$

Nous nous intéresserons à l'endommagement par fatigue. Dans ce cas, un problème en élasticité linéaire doit être résolu à chaque étape de chargement (On se référera à la section 5.4.2 du chapitre 5 pour plus de détails sur la prise en compte de l'endommagement et l'algorithme de résolution).

Dans la section suivante, nous allons écrire le comportement du système de particules en élasticité linéaire.

### **3.3.2 Comportement élastique linéaire du système de particules**

Nous avons vu dans la section 3.3.1.1 que l'énergie de déformation élastique d'une interface  $c = (i, j)$ ,  $w_c$ , s'écrit en fonction du saut du déplacement,  $\llbracket \underline{\underline{u}} \rrbracket$  et de la matrice de rigidité de de  $c$ ,  $\underline{\underline{K}}^c$ , comme suit :

$$w_c = \frac{1}{2} \int_{S^c} {}^T \llbracket \mathbf{u} \rrbracket \underline{\underline{\mathbf{K}}} \llbracket \mathbf{u} \rrbracket dS^c \quad (3.20)$$

Dans le cas où le comportement de la matrice est élastique et isotrope ( $\lambda^M$ , et  $\mu^M$  les coefficient de Lamé),  $\underline{\underline{\mathbf{K}}}$  s'écrit sous la forme :

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}} = \frac{1}{e} (\mu^M \underline{\underline{\mathbf{1}}} + (\mu^M + \lambda^M) (\underline{\mathbf{n}}^{12} \otimes \underline{\mathbf{n}}^{12}))$$

Soit  $M$ , un point de la surface  $S^c$ , le saut de déplacement en  $M$ ,  $\llbracket \mathbf{u} \rrbracket$ , peut s'écrire de la façon suivante :

$$\llbracket \mathbf{u} \rrbracket (M) = \underline{\mathbf{u}}(M^+) - \underline{\mathbf{u}}(M^-)$$

Compte tenu du fait que  $M^+$ , respectivement  $M^-$ , appartient à la particule  $P^j$ , respectivement  $P^i$ , et que les particules  $P^i$  et  $P^j$  sont douées de mouvement de solide rigide, le saut de déplacement en  $M$ ,  $\llbracket \mathbf{u} \rrbracket$ , peut se réécrire de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{u} \rrbracket (M) &= (\underline{\mathbf{u}}^j + \underline{\boldsymbol{\varphi}}^j \wedge \underline{\mathbf{O}}^j \underline{\mathbf{M}}) - (\underline{\mathbf{u}}^i + \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i \wedge \underline{\mathbf{O}}^i \underline{\mathbf{M}}) \\ &= \underline{\mathbf{u}}^j - \underline{\mathbf{u}}^i + \underline{\boldsymbol{\varphi}}^j \wedge \underline{\mathbf{O}}^j \underline{\mathbf{O}}^{ij} - \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i \wedge \underline{\mathbf{O}}^i \underline{\mathbf{O}}^{ij} + (\underline{\boldsymbol{\varphi}}^j - \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i) \wedge \underline{\mathbf{O}}^{ij} \underline{\mathbf{M}} \\ &= \underline{\mathbf{d}}^c + \underline{\boldsymbol{\delta}}^c \wedge \underline{\mathbf{O}}^{ij} \underline{\mathbf{M}} \end{aligned} \quad (3.20)$$

$\underline{\mathbf{d}}^c$  et  $\underline{\boldsymbol{\delta}}^c$  sont les déplacements généralisés définis dans l'équation 3.7.

En désignant par  $\underline{\underline{\mathbf{M}}}$  la matrice antisymétrique définie par :

$$\underline{\underline{\mathbf{M}}} \cdot \underline{\mathbf{a}} = \underline{\mathbf{a}} \wedge \underline{\mathbf{O}}^{ij} \underline{\mathbf{M}} \quad \forall \underline{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^3$$

Le saut du déplacement  $\llbracket \mathbf{u} \rrbracket$  au point  $M$  s'écrit alors :

$$\llbracket \mathbf{u} \rrbracket (M) = \underline{\mathbf{d}}^c + \underline{\underline{\mathbf{M}}} \underline{\boldsymbol{\delta}}^c$$

Ainsi l'énergie élastique de déformation de l'interface  $c$  s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
2w_c &= {}^T \underline{\mathbf{d}}^c \cdot \left( \int_{S^c} \underline{\underline{\mathbf{K}}} dS^c \right) \cdot \underline{\mathbf{d}}^c + {}^T \underline{\delta}^c \cdot \left( \int_{S^c} {}^T \underline{\underline{\mathbf{M}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{K}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{M}}} dS^c \right) \cdot \underline{\mathbf{d}}^c \\
&= + \underline{\mathbf{d}}^c \cdot \left( \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \cdot \int_{S^c} \underline{\underline{\mathbf{M}}} dS^c \right) \cdot \underline{\delta}^c + \underline{\mathbf{d}}^c \cdot {}^T \left( \underline{\delta}^c \cdot \int_{S^c} \underline{\underline{\mathbf{M}}} dS^c \right) \cdot \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c
\end{aligned}$$

Ou encore :

$$2w_c = \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{d}}^c \\ \underline{\delta}^c \end{array} \right\}^T \underline{\underline{\tilde{\mathbf{K}}}}^c \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{d}}^c \\ \underline{\delta}^c \end{array} \right\} \quad (3.21)$$

$\underline{\underline{\tilde{\mathbf{K}}}}^c$  est une matrice  $6 \times 6$  définie par :

$$\underline{\underline{\tilde{\mathbf{K}}}}^c = \left[ \begin{array}{cc} \underline{\underline{\mathbf{A}}}^c & \underline{\underline{\mathbf{B}}}^c \\ \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{cT} & \underline{\underline{\mathbf{D}}}^c \end{array} \right] \quad (3.22)$$

avec :

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\mathbf{A}}}^c &= \text{mes}(S^c) \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \\
\underline{\underline{\mathbf{B}}}^c &= \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \cdot \int_{S^c} \underline{\underline{\mathbf{M}}} dS^c \\
\underline{\underline{\mathbf{D}}}^c &= \int_{S^c} \underline{\underline{\mathbf{M}}}^T \cdot \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \cdot \underline{\underline{\mathbf{M}}} dS^c
\end{aligned}$$

$\underline{\underline{\mathbf{A}}}^c$  sera appelée la matrice de rigidité de l'effort normal.

$\underline{\underline{\mathbf{D}}}^c$  sera appelée la matrice de rigidité des moments.

$\underline{\underline{\mathbf{B}}}^c$  sera appelée la matrice de rigidité du couplage entre les moments et l'effort normal.

La résultante des forces,  $\underline{\mathbf{f}}^c$ , exercées par la particule  $P^j$  sur  $P^i$  s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned}
\underline{\mathbf{f}}^c &= \int_{S^c} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\mathbf{n}}^c dS^c \\
&= \int_{S^c} \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \cdot [[\underline{\mathbf{u}}]] dS^c \\
&= \int_{S^c} \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \cdot (\underline{\mathbf{d}}^c + \underline{\underline{\mathbf{M}}} \cdot \underline{\delta}^c) dS^c \\
&= \underline{\underline{\mathbf{A}}}^c \cdot \underline{\mathbf{d}}^c + \underline{\underline{\mathbf{B}}}^c \cdot \underline{\delta}^c
\end{aligned}$$

La résultante des moments  $\underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c$  exercés par la particule  $P^j$  sur  $P^i$  et définie au point  $O^{ij}$  s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c &= \int_{S^c} \underline{\mathbf{O}}^c \underline{\mathbf{M}} \wedge \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}}^c dS^c \\ &= \int_{S^c} \underline{\mathbf{O}}^{ij} \underline{\mathbf{M}} \wedge \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \cdot [\underline{\mathbf{u}}] dS^c \\ &= \int_{S^c} \underline{\mathbf{M}}^T \cdot \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \cdot (\underline{\mathbf{d}}^c + \underline{\mathbf{M}} \cdot \underline{\underline{\delta}}^c) dS^c \\ &= \underline{\underline{\mathbf{D}}}^c \cdot \underline{\underline{\delta}}^c + \underline{\underline{\mathbf{B}}}^{cT} \cdot \underline{\mathbf{d}}^c\end{aligned}$$

Ainsi, on en déduit une autre expression de l'énergie de déformation (cf. Eq. 3.21) :

$$2w_c = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{f}}^c \\ \underline{\tilde{\mathbf{m}}}^c \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{d}}^c \\ \underline{\underline{\delta}}^c \end{bmatrix}$$

Plaçons-nous dans la base locale  $(\underline{\mathbf{n}}, \underline{\mathbf{t}}, \underline{\mathbf{b}})$  de l'interface  $(i, j)$ .  $\underline{\mathbf{n}}$  étant la normale à  $(i, j)$ . Les coordonnées du vecteur  $\underline{\mathbf{O}}^{ij} \underline{\mathbf{M}}$  dans cette base sont  $(0, x_2, x_3)$ . La matrice  $\underline{\underline{\mathbf{M}}}$  s'écrit sous la forme :

$$\underline{\underline{\mathbf{M}}} = \begin{bmatrix} 0 & x_2 & -x_3 \\ -x_3 & 0 & 0 \\ x_2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

et la matrice de rigidité élémentaire tridimensionnelle  $\underline{\underline{\mathbf{K}}}^c$  s'écrit sous la forme :

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}^c = \frac{1}{e^c} \begin{bmatrix} \lambda^M + 2\mu^M & 0 & 0 \\ 0 & \mu^M & 0 \\ 0 & 0 & \mu^M \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

$\lambda^M$  et  $\mu^M$  sont les coefficients de Lamé de la matrice.

La matrice de rigidité généralisée des moments dans la base locale  $(\underline{\mathbf{n}}, \underline{\mathbf{t}}, \underline{\mathbf{b}})$  s'écrit sous la forme :

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}^c = \begin{bmatrix} K_{22}^c I_3^c + K_{33}^c I_2^c & 0 & 0 \\ 0 & K_{11}^c I_3^c & -K_{11}^c I_{23}^c \\ 0 & -K_{11}^c I_{23}^c & K_{11}^c I_2^c \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

$I_2^c$ ,  $I_3^c$  et  $I_{23}^c$  sont les moments d'inertie de la section  $S^c$  définis par :

$$\begin{aligned} I_2^c &= \int_{S^c} (x_2)^2 dS^c \\ I_3^c &= \int_{S^c} (x_3)^2 dS^c \\ I_{23}^c &= \int_{S^c} x_2 \cdot x_3 dS^c \end{aligned}$$

La matrice de rigidité élémentaire du couplage entre forces et moments dans la base locale  $(\underline{\mathbf{n}}, \underline{\mathbf{t}}, \underline{\mathbf{b}})$  s'écrit sous la forme :

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}}^c = \underline{\underline{\mathbf{K}}}^c \begin{bmatrix} 0 & S_3^c & -S_2^c \\ -S_3^c & 0 & 0 \\ S_2^c & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

$S_2^c$  et  $S_3^c$  sont les moments statique de la section  $S^c$  :

$$S_2^c = - \int_{S^c} x_2 dS^c \quad (3.25a)$$

$$S_3^c = - \int_{S^c} x_3 dS^c \quad (3.25b)$$

### 3.3.3 Récapitulatif

Sous les hypothèses H1 (épaisseurs faibles par rapport aux dimensions des particules) et H2 (inclusions infiniment rigides), nous avons pu montrer que la microstructure continue est équivalente à un réseau périodique de "poutres" encastées. Les noeuds du réseau coïncident avec les centres des particules rigides ; ainsi, la géométrie du réseau est complètement déterminée par la donnée des centres des particules et de leur connectivité (cf. Fig 3.6).

Le comportement mécanique élastique de chaque liaison (ou poutre) est caractérisé par les données géométriques de l'interface (l'épaisseur et la forme géométrique de la surface) et les propriétés élastiques de la matrice.

En outre, la périodicité de la microstructure impose que le réseau de poutres soit, lui aussi, périodique. Ainsi, une méthode d'homogénéisation périodique discrète sera appliquée au réseau périodique afin d'identifier le comportement macroscopique.

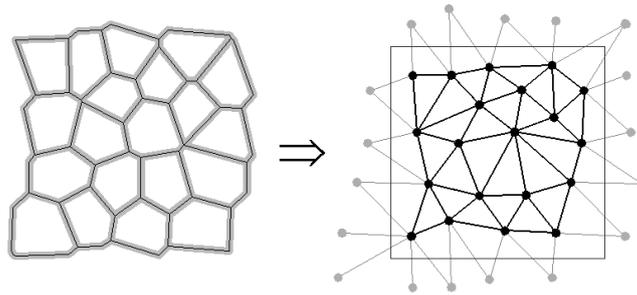


FIG. 3.6 – La microstructure continue et périodique est équivalente à un réseau de "poutres" encastrées.

## 3.4 Du micro au macro : Homogénéisation discrète

### 3.4.1 Principe

Les modélisations mécaniques existantes des matériaux bitumineux se situent dans le cadre des milieux continus et les lois de comportement sont déterminées à partir d'expériences macroscopiques qui masquent, par conséquent, le comportement à l'échelle microscopique. Une alternative à cette approche macroscopique est de déduire la loi de comportement des matériaux bitumineux à partir du comportement des connexions entre particules et de leur organisation géométrique, c'est-à-dire d'homogénéiser le réseau de liaisons. Cette démarche d'homogénéisation est développée dans cette section.

Le point de départ de l'homogénéisation est la modélisation mécanique du milieu étudié au niveau microscopique, ici le réseau de liaisons assimilées à des "poutres". Nous avons choisi de modéliser le matériau comme un milieu discret périodique ayant une cinématique de translation et de rotations, le cadre est celui de l'élasticité linéaire. Pour homogénéiser le réseau de liaisons, nous avons adapté, à la modélisation choisie, la méthode d'homogénéisation discrète développée dans Pradel et Sab (1998), Pradel (1998).

### 3.4.2 Développement de la démarche

Un milieu 3D discret périodique est généré à partir d'une cellule unitaire et 3 vecteurs de translation ( $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ ). Deux noeuds (ou atomes) du réseau sont du même type s'ils peuvent être obtenus l'un de l'autre par une certaine composition des vecteurs translations.

Comme illustré dans le réseau bi-dimensionnel tri-atomique de la figure 3.7,

la cellule de base n'est pas définie d'une façon unique. Cependant, les modules élastiques effectifs ne sont pas sensibles au choix de la cellule unitaire à condition que la même microstructure soit produite.

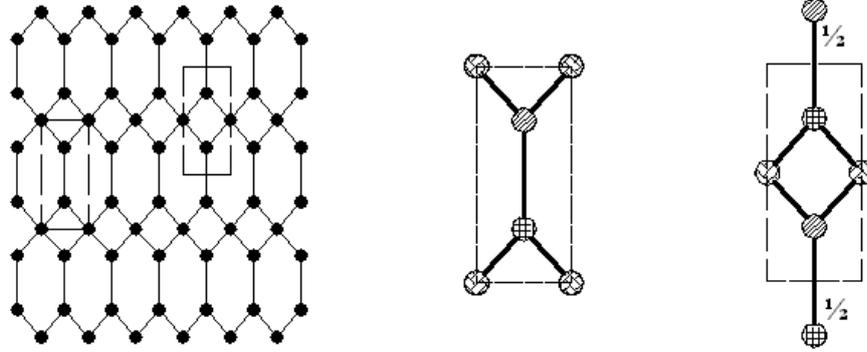


FIG. 3.7 – Le même réseau périodique de liaisons est produit avec deux cellules unitaires différentes.

On considère un réseau périodique de poutres encastrées et chargées en leurs extrémités qui occupent l'espace. Chaque extrémité est une particule ayant six degrés de liberté : Trois en translation et trois en rotation ( $\underline{\varphi}$ ).  $\underline{\mathbf{x}}^{\alpha,i}$  est la position géométrique de la particule  $P^{\alpha,i}$  où  $\underline{\alpha}$  est un triplet d'entiers repérant la cellule  $Y^{\alpha}$  (cf. Eq. 3.26) dans le repère  $(\underline{\mathbf{a}}_1, \underline{\mathbf{a}}_2, \underline{\mathbf{a}}_3)$ , et  $i$  est le numéro de la particule dans cette cellule.

$$Y^{\alpha} = \{ \underline{\mathbf{x}} = x_1 \cdot \underline{\mathbf{a}}_1 + x_2 \cdot \underline{\mathbf{a}}_2 + x_3 \cdot \underline{\mathbf{a}}_3 \quad x_k \in [\alpha_k, \alpha_k + 1] \} \quad (3.26)$$

La cinématique de ce milieu est décrite par l'équation 3.27 :

$$(\underline{\mathbf{u}}, \underline{\varphi}) = \left\{ \left( \underline{\mathbf{u}}^{\alpha,i}, \underline{\varphi}^{\alpha,i} \right), \quad i = 1..n, \quad \underline{\alpha} \in \mathbb{Z} \right\} \quad (3.27)$$

Où  $(\underline{\mathbf{u}})$ ,  $(\underline{\varphi})$  désignent les translations et les rotations respectivement.

Pour chaque couple de noeuds connectés  $c = (P^{\alpha,i}, P^{\beta,j})$ , l'énergie de déformation  $w_c(\underline{\mathbf{d}}^c, \underline{\delta}^c)$  est donnée par l'équation 3.21. L'énergie totale de la cellule unitaire  $Y^{\gamma}$  est donnée par l'équation suivante :

$$W(\underline{\mathbf{u}}, \underline{\varphi}) = \sum_c \chi_{\gamma}(c) \cdot w_c(\underline{\mathbf{d}}^c, \underline{\delta}^c) \quad (3.28)$$

La fonction indicatrice  $\chi_Y(c)$  du couple  $c$  représente la moitié du nombre de particules du couple  $c$  appartenant à la cellule  $Y^Y$  :

$$\chi_Y(e) = \frac{1}{2} \text{Card} \left( \left\{ P^{\alpha,i}, P^{\beta,j} \right\} \cap Y^Y \right) \quad (3.29)$$

L'objectif de la démarche initialement proposée par Pradel et Sab (1998) est de remplacer le milieu discret par un milieu continu de Cosserat. Nous nous limitons ici au cas où le milieu homogène équivalent est de type "Cauchy".

Afin d'identifier le comportement homogénéisé, une procédure de localisation qui lie les grandeurs cinématiques macroscopique à la cinématique discrète doit être identifiée. Pour cela, on introduit l'ensemble des champs cinématiquement admissibles avec la déformation macroscopique  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$  comme suit :

$$K(\underline{\underline{\mathbf{E}}}) = \left\{ \left( \underline{\mathbf{u}}, \underline{\boldsymbol{\varphi}} \right), \quad \forall \left( \underline{\boldsymbol{\beta}}, \underline{\boldsymbol{\alpha}}, i \right) \left\{ \begin{array}{l} \underline{\mathbf{u}}^{\alpha,i} - \underline{\mathbf{u}}^{\beta,i} = \underline{\underline{\mathbf{E}}}. \left( \underline{\mathbf{x}}^{\alpha,i} - \underline{\mathbf{x}}^{\beta,i} \right) \\ \underline{\boldsymbol{\varphi}}^{\alpha,i} - \underline{\boldsymbol{\varphi}}^{\beta,i} = \underline{\mathbf{0}} \end{array} \right. \right\} \quad (3.30)$$

L'énergie de déformation associée au chargement macroscopique périodique  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$ ,  $W(\underline{\underline{\mathbf{E}}})$  d'une cellule  $Y^Y$  se calcule de la manière suivante :

$$W(\underline{\underline{\mathbf{E}}}) = \min_{(\underline{\mathbf{u}}, \underline{\boldsymbol{\varphi}}) \in K(\underline{\underline{\mathbf{E}}})} \sum_c \chi_Y(c) \cdot w_c(\underline{\mathbf{d}}^c, \underline{\boldsymbol{\delta}}^c) \quad (3.31)$$

La solution du problème de minimisation précédent (cf. Eq. 3.31) dépend linéairement en fonction du paramètre de chargement  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$ .

Le comportement du milieu homogène équivalent est défini de la manière suivante :

$$W(\underline{\underline{\mathbf{E}}}) = \frac{1}{2} \underline{\underline{\mathbf{E}}}. \underline{\underline{\mathbf{A}}}^{Hom}. \underline{\underline{\mathbf{E}}} \quad (3.32)$$

$\underline{\underline{\mathbf{A}}}^{Hom}$  représente les modules linéaires effectifs du réseau.

### 3.5 Mise en oeuvre numérique

Dans cette section, on développe les techniques numériques les plus couramment utilisées pour la résolution des problèmes en élasticité linéaire.

### 3.5.1 Position du problème

Le problème physique consiste en la détermination de la position d'équilibre finale de chaque particule  $P$  du système  $E$  occupant une certaine position  $\underline{\mathbf{x}}$  dans sa configuration initiale. On se restreindra au cas où le mode de chargement auquel le système  $E$  est soumis est de type translations (et/ou rotations) imposées sur les particules se trouvant sur les bords :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{u}}^i = \underline{\mathbf{E}} \cdot \underline{\mathbf{x}}^i \\ \text{et/ou} \\ \underline{\varphi}^i = 0 \end{cases} \quad \forall i \in \text{bord}$$

ou de type chargement périodique en translations et rotations :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{u}}^i - \underline{\mathbf{u}}^j = \underline{\mathbf{E}} \cdot (\underline{\mathbf{x}}^i - \underline{\mathbf{x}}^j) \\ \underline{\varphi}^i - \underline{\varphi}^j = 0 \end{cases} \quad \forall (i, j) \text{ en vis-à-vis}$$

Dans tous les cas, les conditions aux limites en translations et/ou en rotations peuvent être écrites comme suit :

$$\underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{y}} = \underline{\mathbf{c}}$$

où :

- $\underline{\mathbf{y}} = [\underline{\mathbf{u}}^1, \underline{\varphi}^1, \dots, \underline{\mathbf{u}}^N, \underline{\varphi}^N]$  est le vecteur des déplacements et des rotations de tous les noeuds,
- $\underline{\mathbf{B}}$  est une matrice  $M \times N$ .  $M$  est le nombre total d'équation linéairement indépendantes traduisant les conditions aux limites,
- $\underline{\mathbf{c}}$  est un vecteur d'ordre  $M$ .

Ainsi, la détermination de la solution du problème se ramène à la résolution du problème de minimisation sous contraintes d'une fonctionnelle quadratique :

$$\min_{\{\underline{\mathbf{y}}, \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{y}} = \underline{\mathbf{c}}\}} \frac{1}{2} \underline{\mathbf{y}} \cdot \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{y}} \quad (3.32)$$

où  $\underline{\mathbf{A}}$  est la matrice  $N \times N$  de la rigidité globale.

Ce problème peut être résolu par diverses méthodes d'optimisation telles que la méthode de pénalisation, la méthode des multiplicateurs de Lagrange et la méthode du lagrangien augmenté (voir Glowinski (1984)).

Dans le cas où les conditions aux limites sont périodiques, Michel et al. (1999) ont développé une méthode de résolution basée sur la Transformé de Fourier Rapide (TFR).

Nous avons choisie d'utiliser la méthode du lagrangien augmenté pour la résolution de (3.32).

Dans le paragraphe suivant, on donne les principaux résultats (théorèmes de convergence et d'équivalence). On se référera à Glowinski (1984) pour plus de détails.

## 3.5.2 Méthode du Lagrangian augmenté

### 3.5.2.1 Principe de la méthode

Soit  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$  une matrice  $N \times N$  symétrique, définie positive et  $\underline{\underline{\mathbf{b}}} \in \mathbb{R}^N$ , on associe à  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$  et  $\underline{\underline{\mathbf{b}}}$  la fonctionnelle quadratique  $J : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  définie par :

$$J(\underline{\underline{\mathbf{v}}}) = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\mathbf{A}}}. \underline{\underline{\mathbf{v}}}, \underline{\underline{\mathbf{v}}}) - (\underline{\underline{\mathbf{b}}}, \underline{\underline{\mathbf{v}}}) \quad (3.33)$$

où dans l'équation 3.33,  $(.,.)$  désigne le produit scalaire canonique de  $\mathbb{R}^N$ .

Soit  $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$  une application linéaire de  $\mathbb{R}^N$  à  $\mathbb{R}^M$ , donc identifiable à une matrice  $M \times N$ . on introduit également  $\underline{\underline{\mathbf{c}}} \in \mathbb{R}^M$  tel que :

$$\underline{\underline{\mathbf{c}}} \in \{ \underline{\underline{\mathbf{q}}} \in \mathbb{R}^M, \exists \underline{\underline{\mathbf{v}}} \in \mathbb{R}^N \text{ tel que } \underline{\underline{\mathbf{q}}} = \underline{\underline{\mathbf{B}}}. \underline{\underline{\mathbf{v}}} \} \quad (3.34)$$

On considère le problème de minimisation suivant :

$$\begin{cases} \text{Trouver } \underline{\underline{\mathbf{u}}} \in H \text{ tel que} \\ J(\underline{\underline{\mathbf{u}}}) \leq J(\underline{\underline{\mathbf{v}}}) \quad \forall \underline{\underline{\mathbf{v}}} \in H \end{cases} \quad (3.35)$$

avec

$$H = \{ \underline{\underline{\mathbf{v}}} \in \mathbb{R}^N, \underline{\underline{\mathbf{B}}}. \underline{\underline{\mathbf{v}}} = \underline{\underline{\mathbf{c}}} \} \quad (3.36)$$

l'ensemble  $H$  est non-vide ( $H \neq \emptyset$ ), ce qui signifie que le problème (3.35) admet une solution unique.

Suivant une technique bien connue, on introduit un multiplicateur de Lagrange  $\underline{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^M$  qui transforme le problème de l'équation 3.35 en un problème sans contrainte, soit :

$$\min_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^N} \{ J(\mathbf{v}) + (\underline{\mathbf{p}}, \mathbf{v} - \underline{\mathbf{c}}) \} \quad (3.37)$$

Le multiplicateur de Lagrange  $\underline{\mathbf{p}}$  apparaît comme une inconnue supplémentaire qui peut être obtenue moyennant la résolution d'un problème de point-selle. De façon précise on définit le Lagrangien  $\mathcal{L} : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$  par :

$$\mathcal{L}(\mathbf{v}, \underline{\mathbf{q}}) = J(\mathbf{v}) + (\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{v}) \quad (3.38)$$

On rappelle que  $\{\underline{\mathbf{u}}, \underline{\mathbf{v}}\}$  sera point-selle de  $\mathcal{L}$  sur  $\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^M$ , si

$$\mathcal{L}(\underline{\mathbf{u}}, \underline{\mathbf{q}}) \leq \mathcal{L}(\mathbf{v}, \underline{\mathbf{q}}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^N, \underline{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^M \quad (3.39)$$

et l'équation précédente implique

$$\min_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^N} \max_{\underline{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^M} \mathcal{L}(\mathbf{v}, \underline{\mathbf{q}}) = \max_{\underline{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^M} \min_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^N} \mathcal{L}(\mathbf{v}, \underline{\mathbf{q}}) = \mathcal{L}(\underline{\mathbf{u}}, \underline{\mathbf{p}}) \quad (3.40)$$

D'après Glowinski (1984), le point-selle solution,  $\{\underline{\mathbf{u}}, \underline{\mathbf{p}}\}$  sur  $\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^M$ , est unique si et seulement si la matrice  $\underline{\mathbf{B}}$  est surjective, i.e.  $\text{Rang}(\underline{\mathbf{B}}) = M$ . Ceci implique que *les conditions aux limites traduites par  $\underline{\mathbf{B}}$ , doivent être linéairement indépendantes.*

Le résultat classique suivant est essentiel pour la suite :

**Théorème 3.1** *La solution  $\underline{\mathbf{u}}$  du problème de (3.35) est caractérisée par l'existence de  $\underline{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^M$  telque*

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{A}} & {}^T \underline{\mathbf{B}} \\ \underline{\mathbf{B}} & \underline{\mathbf{0}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{u}} \\ \underline{\mathbf{p}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}} \\ \underline{\mathbf{c}} \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

Le lagrangien augmenté  $\mathcal{L}_r$  pour  $r > 0$  est défini comme suit :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_r(\underline{\mathbf{v}}, \underline{\mathbf{q}}) &= J(\underline{\mathbf{v}}) + (\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{c}}) + \frac{r}{2} |\underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{c}}|^2 \\ &= \mathcal{L}(\underline{\mathbf{v}}, \underline{\mathbf{q}}) + \frac{r}{2} |\underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{c}}|^2\end{aligned}\quad (3.42)$$

$|\cdot|$  désigne la norme euclidienne canonique de  $\mathbb{R}^M$ . On démontre facilement que tout point-selle de  $\mathcal{L}_r$  est point-selle de  $\mathcal{L}$  et réciproquement. Ceci tient au fait que  $r \cdot |\underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{c}}|$  s'annule quand la contrainte  $\underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} = \underline{\mathbf{c}}$  est satisfaite. Ainsi, la solution de 3.35 est caractérisée par l'existence de  $\underline{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^M$  telque :

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{A}}_r & {}^T \underline{\mathbf{B}} \\ \underline{\mathbf{B}} & \underline{\mathbf{0}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{u}} \\ \underline{\mathbf{p}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{b}}_r \\ \underline{\mathbf{c}} \end{bmatrix}\quad (3.43)$$

avec :

$$\begin{aligned}- \underline{\mathbf{A}}_r &= \underline{\mathbf{A}} + r \cdot {}^T \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{B}} \\ - \underline{\mathbf{b}}_r &= \underline{\mathbf{b}} + r \cdot {}^T \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{c}}\end{aligned}$$

Il convient de remarquer que pour  $\underline{\mathbf{q}} = 0$  on a :

$$\mathcal{L}_r(\underline{\mathbf{v}}, 0) = J(\underline{\mathbf{v}}) + \frac{r}{2} |\underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{c}}|^2\quad (3.44)$$

Soit la **fonctionnelle pénalisée** classique relative à la contrainte  $\underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} = \underline{\mathbf{c}}$ .

L'avantage du Lagrangien augmenté est que, par suite de la présence du terme  $(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{c}})$ , la solution exacte du problème 3.35 peut être déterminée sans faire tendre  $r$  vers l'infini, contrairement aux méthodes de pénalisation ordinaires où cela a pour effet de détériorer le conditionnement des systèmes à résoudre.

En outre, le fait d'ajouter le terme quadratique  $\frac{r}{2} |\underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{c}}|^2$  au Lagrangien  $\mathcal{L}$ , améliorera les propriétés de convergence des algorithmes décrits dans la suite.

### 3.5.2.2 Algorithmes de détermination de point-selle

À partir de l'équation 3.43, il est clair que  $\underline{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^M$  est solution du système linéaire suivant :

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{A}}}_r^{-1.T}\underline{\underline{\mathbf{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{p}}} = \underline{\underline{\mathbf{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{A}}}_r^{-1}\cdot\underline{\underline{\mathbf{b}}}_r - \underline{\underline{\mathbf{c}}} \quad (3.45)$$

D'après Glowinski (1984), la matrice  $\underline{\underline{\mathbf{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{A}}}_r^{-1.T}\underline{\underline{\mathbf{B}}}$  est symétrique semi-définie positive. Ainsi, deux algorithmes itératifs peuvent être appliqués pour la résolution du système linéaire (3.45) :

1. Algorithme du gradient à pas fixe (gradient standard). Dans ce cas la méthode est désignée sous le nom d'algorithme de Uzawa avec gradient standard.
2. Algorithme du gradient conjugué. Dans ce cas la méthode est désignée sous le nom d'algorithme de Uzawa avec gradient conjugué.

Nous avons choisi l'algorithme du gradient conjugué. Les étapes de cet algorithme sont décrites dans le paragraphe suivant.

### Algorithme de Uzawa avec gradient conjugué

Introduisons la matrice  $M \times M$   $\underline{\underline{\mathcal{B}}}$ , et le vecteur  $\underline{\underline{\beta}}$  de  $\mathbb{R}^M$  comme suit :

$$\underline{\underline{\mathcal{B}}} = \underline{\underline{\mathbf{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{A}}}_r^{-1.T}\underline{\underline{\mathbf{B}}}, \quad \underline{\underline{\beta}} = \underline{\underline{\mathbf{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{A}}}_r^{-1}\cdot\underline{\underline{\mathbf{b}}}_r - \underline{\underline{\mathbf{c}}}$$

Lorsque la matrice  $\underline{\underline{\mathcal{B}}}$  est (semi) définie positive, le système linéaire  $\underline{\underline{\mathcal{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{p}}} = \underline{\underline{\beta}}$  peut être résolu par l'algorithme du gradient conjugué suivant :

*Étape 0 : initialisation*

$$\underline{\underline{\mathbf{p}}}^0 \in \mathbb{R}^M \text{ arbitrairement donné} \quad (3.46a)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{g}}}^0 = \underline{\underline{\mathcal{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{p}}}^0 - \underline{\underline{\beta}} \quad (3.46b)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{w}}}^0 = \underline{\underline{\mathbf{g}}}^0 \quad (3.46c)$$

Pour  $n > 0$ ,  $\underline{\underline{\mathbf{p}}}^{n+1}$ ,  $\underline{\underline{\mathbf{g}}}^{n+1}$ ,  $\underline{\underline{\mathbf{w}}}^{n+1}$  se calculent en fonction de  $\underline{\underline{\mathbf{p}}}^n$ ,  $\underline{\underline{\mathbf{g}}}^n$  et  $\underline{\underline{\mathbf{w}}}^n$  comme suit :

*Étape 1 : la descente*

$$\rho_n = \frac{(\underline{\underline{\mathbf{g}}}^n, \underline{\underline{\mathbf{w}}}^n)}{(\underline{\underline{\mathcal{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{w}}}^n, \underline{\underline{\mathbf{w}}}^n)} = \frac{|\underline{\underline{\mathbf{g}}}^n|^2}{(\underline{\underline{\mathcal{B}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{w}}}^n, \underline{\underline{\mathbf{w}}}^n)} \quad (3.47a)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{p}}}^{n+1} = \underline{\underline{\mathbf{p}}}^n - \rho_n \cdot \underline{\underline{\mathbf{w}}}^n \quad (3.47b)$$

*Étape 2 : la nouvelle direction de descente*

$$\underline{\mathbf{g}}^{n+1} = \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{p}}^{n+1} - \underline{\boldsymbol{\beta}} \quad (3.48a)$$

$$\gamma_n = \frac{|\underline{\mathbf{g}}^{n+1}|^2}{|\underline{\mathbf{g}}^n|^2} \quad (3.48b)$$

$$\underline{\mathbf{w}}^{n+1} = \underline{\mathbf{g}}^{n+1} + \gamma_n \cdot \underline{\mathbf{w}}^n \quad (3.48c)$$

Une fois que  $\{\underline{\mathbf{p}}^n\}_{n \geq 0}$  a convergé vers la solution  $\underline{\mathbf{p}}$ , le vecteur  $\underline{\mathbf{u}}$  est obtenu via la relation :

$$\underline{\mathbf{u}} = \underline{\mathbf{A}}_r^{-1} \cdot (\underline{\mathbf{b}}_r - {}^T \underline{\mathbf{B}}) \quad (3.49)$$

Compte tenu du fait que  $\underline{\mathbf{B}} = \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{A}}_r^{-1} \cdot {}^T \underline{\mathbf{B}}$ , l'implémentation pratique du précédent algorithme est la suivante :

*Étape 0 : initialisation*

$$\underline{\mathbf{p}}^0 \in \mathbb{R}^M \text{ arbitrairement donné} \quad (3.50a)$$

$$\underline{\mathbf{x}}^0 = \underline{\mathbf{A}}_r^{-1} \cdot (\underline{\mathbf{b}}_r - {}^T \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{p}}^0) \quad (3.50b)$$

$$\underline{\mathbf{g}}^0 = \underline{\mathbf{c}} - \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{x}}^0, \quad \underline{\mathbf{w}}^0 = \underline{\mathbf{g}}^0 \quad (3.50c)$$

Pour  $n > 0$ ,  $\underline{\mathbf{p}}^{n+1}$ ,  $\underline{\mathbf{g}}^{n+1}$ ,  $\underline{\mathbf{w}}^{n+1}$  se calculent en fonction de  $\underline{\mathbf{p}}^n$ ,  $\underline{\mathbf{g}}^n$  et  $\underline{\mathbf{w}}^n$  comme suit :

*Étape 1 : la descente*

$$\underline{\boldsymbol{\xi}}^n = \underline{\mathbf{A}}_r^{-1} \cdot {}^T \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{w}}^n \quad (3.51a)$$

$$\underline{\boldsymbol{\eta}}^n = \underline{\mathbf{B}} \underline{\boldsymbol{\xi}}^n (= \underline{\mathbf{B}} \underline{\mathbf{w}}^n) \quad (3.51b)$$

$$\rho_n = \frac{|\underline{\mathbf{g}}^n|^2}{\underline{\boldsymbol{\eta}}^n \cdot \underline{\mathbf{w}}^n} \quad (3.51c)$$

$$\underline{\mathbf{p}}^{n+1} = \underline{\mathbf{p}}^n - \rho_n \underline{\mathbf{w}}^n \quad (3.51d)$$

*Étape 2 : la nouvelle direction de descente*

$$\underline{\mathbf{g}}^{n+1} = \underline{\mathbf{g}}^n - \rho_n \underline{\eta}^n \quad (3.52a)$$

$$\gamma_n = \frac{|\underline{\mathbf{g}}^{n+1}|^2}{|\underline{\mathbf{g}}^n|^2} \quad (3.52b)$$

$$\underline{\mathbf{w}}^{n+1} = \underline{\mathbf{g}}^{n+1} + \gamma_n \underline{\mathbf{w}}^n \quad (3.52c)$$

Chaque itération de l'algorithme précédent nécessite la résolution d'un système linéaire faisant intervenir la matrice symétrique définie positive  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}_r$  (cf. Eqs 3.51a et 3.51a). Il est donc possible d'utiliser la même factorisation de Cholesky de  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}_r = \underline{\underline{\mathbf{L}}}_r \cdot^T \underline{\underline{\mathbf{L}}}_r$  pour toutes les itérations.

Nous avons choisi d'utiliser la méthode du gradient conjugué pour la résolution du système linéaire dans chaque itération. En effet la méthode du gradient conjugué est spécialement attrayante car théoriquement, i.e. si on néglige les erreurs d'arrondis, elle converge en un nombre fini d'itérations ( $\leq M$ ).

## 3.6 Conclusions

Dans ce chapitre, une modélisation mécanique discrète de la microstructure continue constituée par un assemblage cohésif d'inclusions a été proposée. L'assemblage est constitué par deux phases : Les inclusions, modélisées par les régions de Voronoï contractées, et la matrice occupant les interfaces entre inclusions voisines.

Au prix de deux hypothèses : **H1** (épaisseurs faibles par rapport aux dimensions des inclusions) et **H2** (inclusions infiniment rigides), nous avons pu montrer que la microstructure continue est équivalente à un réseau périodique de "poutres" encastrées. Les noeuds du réseau coïncident avec les centres des particules rigides ; ainsi, la géométrie du réseau est complètement déterminée par la donnée des centres des particules et des leur connectivité.

Le comportement mécanique élastique de chaque liaison (ou poutre) est caractérisé par les données géométriques de l'interface (l'épaisseur et la forme géométrique de la surface) et les propriétés élastiques de la matrice.

En outre, la périodicité de la microstructure continue, impose que le réseau de poutres soit, lui aussi, périodique. Ainsi, une méthode d'homogénéisation périodiques discrète a été appliquée au réseau périodique afin d'identifier le comportement macroscopique.

Le modèle proposé a fait l'objet d'une publication dans un congrès international (Lachihab et al. (2002)).

Un outil numérique a été développé en langage C/C++, permettant le calcul et l'assemblage des matrices des rigidités élémentaires ainsi que la résolution numérique du problème de minimisation par la méthode du lagrangien augmenté en utilisant l'algorithme de Uzawa avec gradient conjugué.

Dans le chapitre suivant, la validité et les limitations du modèle discret proposé seront étudiées à travers des comparaisons avec la méthode des éléments finis sur deux microstructures régulières : le réseau cubique simple et le réseau cubique centré.



## **Troisième partie**

### **Validation et exploitation du modèle**



# Chapitre 4

## Comparaisons et validation en élasticité linéaire

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>94</b>
<b>4.2</b>	<b>Limitations de l'hypothèse H2 "inclusions infiniment rigides"</b>	<b>95</b>
4.2.1	Homogénéisation périodique par la méthode des éléments finis des réseaux <i>CS</i> et <i>CC</i>	95
4.2.2	Une borne supérieure des coefficients élastiques homogénéisés pour le réseau <i>CS</i>	104
4.2.3	Conclusions	115
<b>4.3</b>	<b>Comparaisons éléments finis-modèle discret</b>	<b>117</b>
4.3.1	Homogénéisation discrète des réseaux <i>CS</i> et <i>CC</i>	117
4.3.2	Comparaisons avec la méthode des éléments finis	121
<b>4.4</b>	<b>Conclusions</b>	<b>125</b>

---

## 4.1 Introduction

Rappelons que la microstructure du matériau modèle étudié ici, consiste en un assemblage cohésif d'inclusions douées de mouvement de solide rigide. Les inclusions sont modélisées par les régions de Voronoï contractées. La matrice se situe dans l'interface entre deux régions voisines.

Dans le chapitre précédent, il a été montré que dans le cas limite où les épaisseurs des interfaces sont faibles par rapport aux dimensions des inclusions (**hypothèse H1**), et les inclusions sont infiniment rigides (**hypothèse H2**), un tel système est équivalent à un réseau de "poutres" encastrées et chargées aux noeuds. Le réseau de "poutres" est alors homogénéisé via une méthode d'homogénéisation discrète (cf. Fig. 4.1).

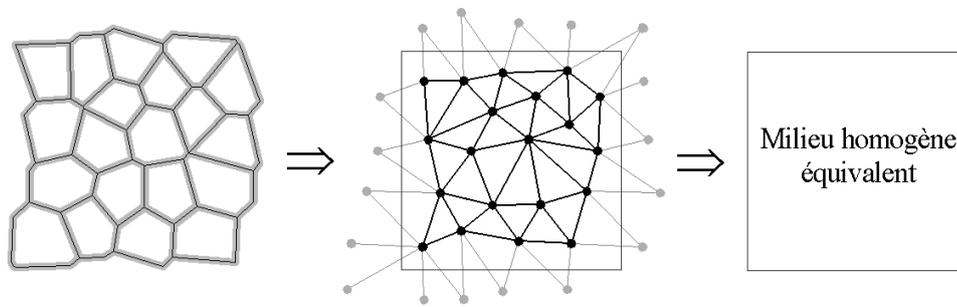


FIG. 4.1 – La microstructure modèle est équivalente à un réseau périodique de "poutres" encastrées. Le milieu homogène équivalent est déduit en appliquant une méthode d'homogénéisation discrète.

Dans ce chapitre, les prédictions du modèle discret proposé sont comparées à celles données par la méthode des éléments finis. Deux structures régulières ont été choisies : le réseau Cubique Simple (CS) et le réseau Cubique Centré (CC).

Nous avons, tout d'abord, étudié l'influence de l'hypothèse **H2** sur les résultats obtenus. Pour ce faire, les estimations par la méthode des éléments finis des propriétés effectives dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides ont été comparées à celles prenant en compte la rigidité des inclusions pour trois fractions volumiques d'agrégats ( $f = 61\%$ ,  $73\%$  et  $80\%$ ).

Afin d'améliorer le modèle pour le réseau CS, un modèle analytique prenant en compte la déformation des inclusions a été, ensuite, développé. Les estimations du modèle analytique ont été comparées à celles obtenues par la méthode des éléments finis. Les propriétés effectives du modèle analytique dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides ont été comparées aussi à celles prenant en compte

les déformations des inclusions.

Enfin, les prédictions du modèle discret proposé ont été comparées avec les estimations obtenues par la méthode des éléments finis dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides pour les deux réseaux *CS* et *CC*.

## 4.2 Limitations de l'hypothèse **H2** "inclusions infiniment rigides"

Dans la modélisation discrète proposée, les inclusions sont supposées infiniment rigides (hypothèse **H2**). La première question que nous nous sommes posée est "quelle est l'erreur commise par le modèle due à la déformation des agrégats ?".

Pour répondre à cette question, nous avons fait appel à la méthode d'homogénéisation périodique des milieux continus. Deux microstructures périodiques ont été choisies : (1) les inclusions sont disposées suivant un réseau Cubique Simple (*CS*) et (2) les inclusions sont disposées suivant un réseau Cubique Centré (*CC*).

Dans un premier temps, les problèmes auxiliaires d'homogénéisation périodiques sont résolus numériquement par la méthode des éléments finis. Ainsi, les propriétés effectives dans le cas limite d'inclusions rigides sont comparées à celles tenant compte de la déformation des inclusions pour les deux microstructures choisies.

Dans un second temps, nous proposons une solution analytique approchée des problèmes auxiliaires d'homogénéisation périodique pour le réseau *CS*. Ainsi, une borne supérieure des modules effectifs faisant intervenir la déformation des inclusions est déduite.

Afin de valider le modèle analytique proposé, une comparaison avec la méthode des éléments finis a été effectuée dans le cas limite d'inclusions infiniment rigides.

Enfin, ce modèle analytique est utilisé pour l'estimation de l'erreur induite par l'hypothèse **H2**.

### 4.2.1 Homogénéisation périodique par la méthode des éléments finis des réseaux *CS* et *CC*

#### 4.2.1.1 Géométries et problèmes à résoudre

Nous avons vu dans le chapitre 2 qu'une structure en cubes est générée par la méthode de Voronoï en plaçant les sites suivant un réseau cubique. En plaçant les sites suivant un réseau Cubique Centré (*CC*), une structure en tétraèdres tronquées

(appelés encore tétrakaïdécaèdres) est générée par la méthode de Voronoï (cf. Fig. 4.2).

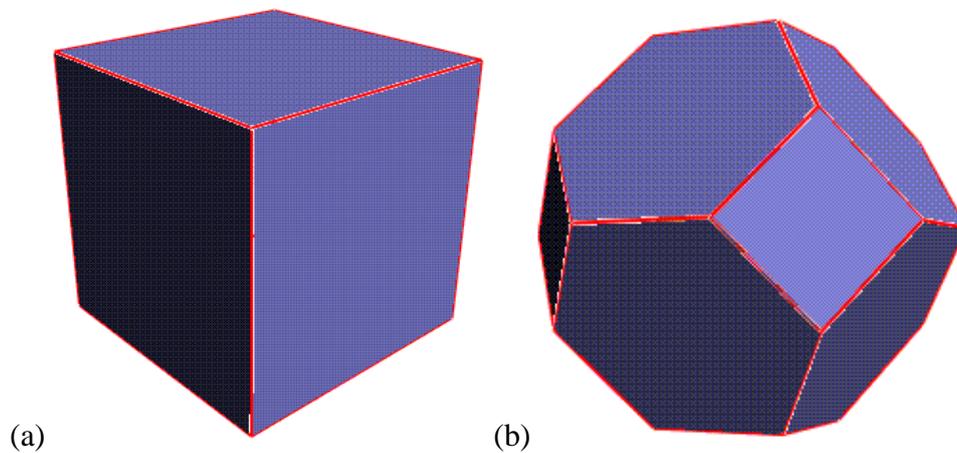


FIG. 4.2 – (a) région de Voronoï pour le réseau *CS* (b) région de Voronoï pour le réseau *CC*.

Les inclusions sont, alors, modélisées par les régions de Voronoï contractées (des cubes pour le réseau *CS*, et des tétrakaïdécaèdres pour le réseau *CC*). Le rapport de l'homothétie appliquée à ces structures est égal à  $f^{1/3}$  ( $f$  est la fraction volumique des inclusions).

Ces structures régulières présentent l'avantage d'être périodique. En effet, à partir d'une cellule élémentaire et de trois vecteurs de translations, il est possible de générer des structures en cubes ou en tétrakaïdécaèdres. Plusieurs choix de la cellule de base sont possibles, toutefois, le comportement effectif est insensible au choix de la cellule de base.

Pour déterminer les propriétés linéaires effectives, il est possible d'utiliser la méthode d'homogénéisation périodique des matériaux continus. Dans la suite, nous présentons quelques rappels sur la méthode d'homogénéisation périodique en élasticité linéaire.

### **Quelques rappels sur l'homogénéisation périodique des matériaux continus en élasticité linéaire**

Soit un matériau composite dont la microstructure est formée par la répétition spatiale d'un motif élémentaire constitué de différents matériaux comme le montre la figure 4.3. Pour la simplicité de l'exposé, on se limite à des représentations bidimensionnelles. Ce motif élémentaire, qui se répète de proche en proche, est

généralement désigné sous le vocable de *cellule de base* du matériau.

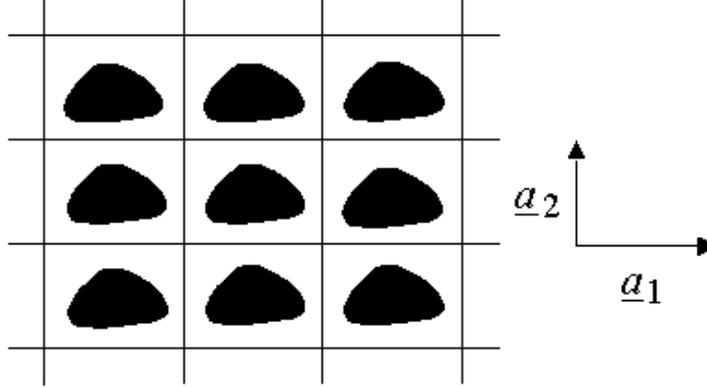


FIG. 4.3 – Microstructure périodique d'un matériau composite.

En premier lieu, il s'agit de définir le processus de chargement auquel est soumis la cellule de base.

Pour ce faire, on introduit deux espaces :

1. Espace des champs de contraintes **statiquement admissibles** ( $\mathcal{SA}$ ) :

$$\underline{\underline{\sigma}} \in \mathcal{SA} \Leftrightarrow \begin{cases} \operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\mathbf{x}})) & = 0 & (4.1a) \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\mathbf{x}} + \underline{\mathbf{a}}_i) \cdot \underline{\mathbf{n}} & = \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\mathbf{x}}) \cdot (-\underline{\mathbf{n}}) & (4.1b) \end{cases}$$

L'équation 4.1a traduit l'équation d'équilibre.

L'équation 4.1b représente la condition dite d'antipériodicité entre deux points en vis-à-vis du bord de la cellule de base (l'un se déduit de l'autre par périodicité).

2. Espace des champs de déplacements **cinématiquement admissibles** ( $\mathcal{CA}$ ) :

$$\underline{\underline{\mathbf{u}}} \in \mathcal{CA} \Leftrightarrow \begin{cases} \underline{\underline{\mathbf{u}}}(\underline{\mathbf{x}}) & = \underline{\underline{\mathbf{E}}} \cdot \underline{\mathbf{x}} + \underline{\underline{\mathbf{u}}}_{per}(\underline{\mathbf{x}}) & (4.2a) \\ \underline{\underline{\mathbf{u}}}_{per}(\underline{\mathbf{x}} + \underline{\mathbf{a}}_i) & = \underline{\underline{\mathbf{u}}}_{per}(\underline{\mathbf{x}}) & (4.2b) \end{cases}$$

Les équations 4.2a et 4.2b expriment que le champs des déplacements est égal à la somme d'une fluctuation périodique  $\underline{\underline{\mathbf{u}}}_{per}$  et d'un champs de déplacement linéaire caractérisé par son gradient symétrique  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$ .

L'énergie des déformations calculée sur la cellule de base, d'un champ de déplacement  $\mathcal{CA}$  dans un champ de contraintes  $\mathcal{SA}$ , s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
\forall \underline{\mathbf{u}} \in \mathcal{CA}, \forall \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \in \mathcal{SA} \quad W(\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}, \underline{\mathbf{u}}) &= \int_{\Omega} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} : \underline{\underline{\mathbf{grad}^S}}(\underline{\mathbf{u}}) d\Omega \\
&= \int_{\Omega} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} : \left( \underline{\mathbf{E}} + \underline{\underline{\mathbf{grad}^S}}(\underline{\mathbf{u}}_{per}) \right) d\Omega \\
&= \langle \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \rangle_{\Omega} : \underline{\mathbf{E}} + \int_{\Omega} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} : \underline{\underline{\mathbf{grad}^S}}(\underline{\mathbf{u}}_{per}) d\Omega \\
&= \langle \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \rangle_{\Omega} : \underline{\mathbf{E}} + \int_{\partial\Omega} (\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\mathbf{n}}) \cdot \underline{\mathbf{u}}_{per} dS \quad (4.3)
\end{aligned}$$

$\langle \cdot \rangle_{\Omega}$  désigne l'opérateur de moyenne volumique sur la cellule de base  $\Omega$ .

Du fait que la fluctuation  $\underline{\mathbf{u}}_{per}$  est périodique et  $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\mathbf{n}}$  est antipériodique, on peut montrer que (lemme de Hill-Mandel) :

$$\forall \underline{\mathbf{u}} \in \mathcal{CA}, \forall \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \in \mathcal{SA} \quad \begin{cases} \int_{\partial\Omega} (\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\mathbf{n}}) \cdot \underline{\mathbf{u}}_{per} dS = 0 & (4.4a) \\ \langle \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} : \underline{\underline{\mathbf{grad}^S}}(\underline{\mathbf{u}}) \rangle_{\Omega} = \langle \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \rangle_{\Omega} : \langle \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}} \rangle_{\Omega} & (4.4b) \\ = \underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}} : \underline{\mathbf{E}} \end{cases}$$

$\underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}}$  est la contrainte macroscopique homogène et  $\underline{\mathbf{E}}$  est la déformation macroscopique homogène.

L'équation précédente (Eq. 4.4b) exprime que la cellule de base est soumise à un mode de chargement à six paramètres (les six composantes de  $\underline{\mathbf{E}}$ ). La contrainte  $\underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}}$  apparaît comme le paramètre statique en dualité dans l'expression de l'énergie de déformations.

Ainsi, pour chaque déformation imposée  $\underline{\mathbf{E}}$ , le problème auxiliaire d'homogénéisation à résoudre est le suivant (pour plus de détails cf. Sanchez-Hubert et Sanchez-Palencia (1992)) :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{div}} \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\mathbf{0}} \\ \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\underline{\mathbf{a}}}(\underline{\mathbf{x}}) \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\underline{\mathbf{x}}) \\ \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\underline{\mathbf{grad}^S}}(\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}})) \\ \underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\mathbf{E}} \cdot \underline{\mathbf{x}} + \underline{\mathbf{u}}^{per}(\underline{\mathbf{x}}) \\ \underline{\mathbf{u}}^{per}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\mathbf{u}}^{per}(\underline{\mathbf{x}}') \quad \forall (\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{x}}') \quad \text{en vis-à-vis} \\ \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\mathbf{n}}(\underline{\mathbf{x}}) + \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\mathbf{n}}(\underline{\mathbf{x}}') = 0 \quad \forall (\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{x}}') \quad \text{en vis-à-vis} \end{cases} \quad (4.5)$$

Les modules homogénéisés  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}^{Hom}$  sont définis de la manière suivante :

$$\begin{aligned} W(\underline{\underline{\mathbf{E}}}) &= \min_{\underline{\underline{\mathbf{u}}} \in \mathcal{CA}} \int_{\Omega} \left( \underline{\underline{\mathbf{E}}} + \underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\underline{\mathbf{u}}}_{per}) \right) : \underline{\underline{\mathbf{a}}} : \left( \underline{\underline{\mathbf{E}}} + \underline{\underline{\mathbf{grad}}}^S(\underline{\underline{\mathbf{u}}}_{per}) \right) d\Omega \\ &= \underline{\underline{\mathbf{E}}} : \underline{\underline{\mathbf{A}}}^{Hom} : \underline{\underline{\mathbf{E}}} \end{aligned} \quad (4.6)$$

et la contrainte macroscopique  $\underline{\underline{\Sigma}}$  par :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \left\langle \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{\mathbf{x}}}) \right\rangle_{\Omega} = \underline{\underline{\mathbf{A}}}^{Hom} : \underline{\underline{\mathbf{E}}} \quad (4.7)$$

### Retour aux structures CS et CC

Les structures CS et CC possèdent trois plan de symétrie. On parle, alors, d'une symétrie cubique. Le comportement linéaire élastique homogénéisé de ce type de structures est modélisé par trois constantes indépendantes : les deux coefficients de Lamé  $\lambda^{Hom}$  et  $\mu^{Hom}$  et un coefficient  $\delta\mu^{Hom}$  qui mesure l'anisotropie cubique (cf. Eq. 4.8) :

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = \lambda^{Hom} Tr(\underline{\underline{\epsilon}}) + 2(\mu^{Hom} + \delta\mu^{Hom}) \epsilon_{ij} & \forall i = j \\ \sigma_{ij} = 2\mu^{Hom} \epsilon_{ij} & \forall i \neq j \end{cases} \quad (4.8)$$

Il est aussi possible de définir le module de compressibilité homogénéisé  $k^{Hom}$  et le coefficient de Poisson homogénéisé  $\nu^{Hom}$  comme suit :

$$k^{Hom} = \frac{1}{3} (3\lambda^{Hom} + 2(\mu^{Hom} + \delta\mu^{Hom})) \quad (4.9)$$

$$\nu^{Hom} = \frac{3k^{Hom} - 2(\mu^{Hom} + \delta\mu^{Hom})}{6k^{Hom} + 2(\mu^{Hom} + \delta\mu^{Hom})} \quad (4.10)$$

Ainsi, la détermination des propriétés élastiques linéaires effectives ( $k^{Hom}$ ,  $\mu^{Hom}$  et  $\delta\mu^{Hom}$ ) nécessitent la résolution de trois problèmes auxiliaires  $P^{(1)}$ ,  $P^{(2)}$  et  $P^{(3)}$  posés sur le huitième de la cellule élémentaire périodique. Les trois déformations homogènes appliquées sont :

1. *Déformation (1)* : Allongement dans la direction 1 :

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

2. *Déformation (2)* : Une dilatation isotrope :

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

3. *Déformation (3)* : Cisaillement dans le plan (1,2) :

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Chaque problème  $P^{(j)}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) est résolu à l'aide du code de calcul par éléments finis *CASTEM2000*. Les éléments finis utilisés sont des tétraèdres à 4 noeuds (cf. Fig. 4.4).

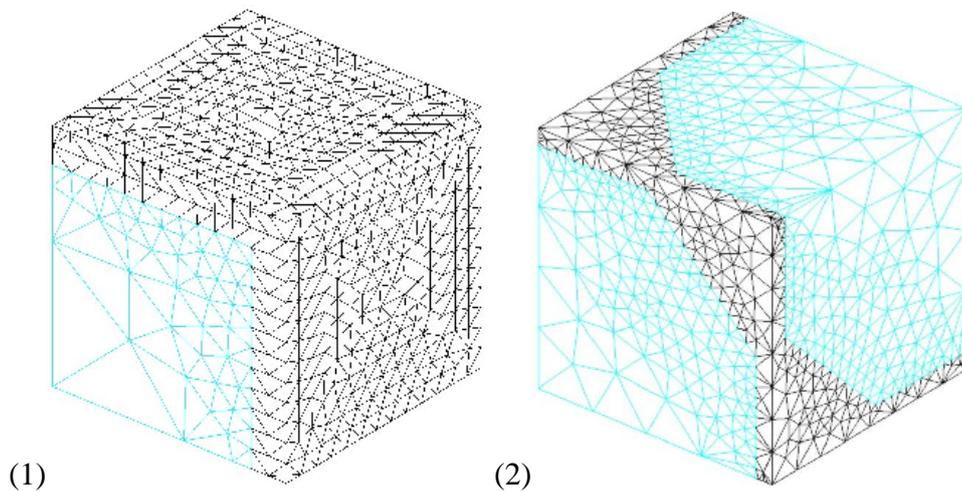


FIG. 4.4 – Maillage du huitième de la cellule élémentaire périodique : (1) réseau CS ; (2) réseau CC.

À partir des énergies des déformations  $W^{(j)}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) correspondant aux déformations macroscopiques  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(j)}$  ( $j = 1, 2, 3$ ), les propriétés linéaires élastiques

homogénéisées (module de compressibilité  $k^{Hom}$ , module de cisaillement  $\mu^{Hom}$  et coefficient d'anisotropie cubique  $\delta\mu^{Hom}$ ) se calculent de la manière suivante :

$$k^{Hom} = \frac{2}{3} \frac{W^{(2)}}{V} \quad (4.14a)$$

$$\mu^{Hom} = \frac{1}{2} \frac{W^{(3)}}{V} \quad (4.14b)$$

$$\delta\mu^{Hom} = \frac{1}{V} \left( \frac{3}{2} W^{(1)} - \frac{1}{6} W^{(2)} - \frac{1}{2} W^{(3)} \right) \quad (4.14c)$$

$V$  est le volume de la cellule élémentaire.

#### 4.2.1.2 Résultats des simulations par éléments finis

Le coefficient de Poisson de la matrice et celui des inclusions sont fixés à 0.25. Une étude paramétrique sur le rapport entre le module de Young de la matrice  $E^M$  et celui des inclusions  $E^I$  a été menée pour trois fractions volumique d'inclusions ( $f = 61\%$ ,  $73\%$  et  $80\%$ ).

Les résultats des simulations numériques sont tracées sur la figure 4.5 pour le réseau cubique centré et sur la figure 4.6 pour le réseau cubique centré.

À partir de ces courbes, on constate que chacun des modules élastiques effectifs ( $k^{Hom}$ ,  $\mu^{Hom}$  et  $\delta\mu^{Hom}$ ) converge vers une valeur asymptotique ( $k_\infty^{Hom}$ ,  $\mu_\infty^{Hom}$  et  $\delta\mu_\infty^{Hom}$ ) lorsque le rapport entre le module d'Young des inclusions et celui de la matrice tend vers l'infini :

$$\begin{aligned} \lim_{\frac{E^I}{E^M} \rightarrow \infty} k^{Hom} &= k_\infty^{Hom} \\ \lim_{\frac{E^I}{E^M} \rightarrow \infty} \mu^{Hom} &= \mu_\infty^{Hom} \\ \lim_{\frac{E^I}{E^M} \rightarrow \infty} \delta\mu^{Hom} &= \delta\mu_\infty^{Hom} \end{aligned}$$

Afin de quantifier l'écart entre les modules élastiques prenant en compte la déformation des inclusions et ceux dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides, pour chaque module élastique effectif  $Z_x^{Hom}$  obtenu avec un contraste  $x = \frac{E^I}{E^M}$ , on définit l'erreur relative comme suit :

$$\varepsilon_X(x) = \frac{Z_x^{Hom} - Z_\infty^{Hom}}{Z_\infty^{Hom}} \quad (4.15)$$

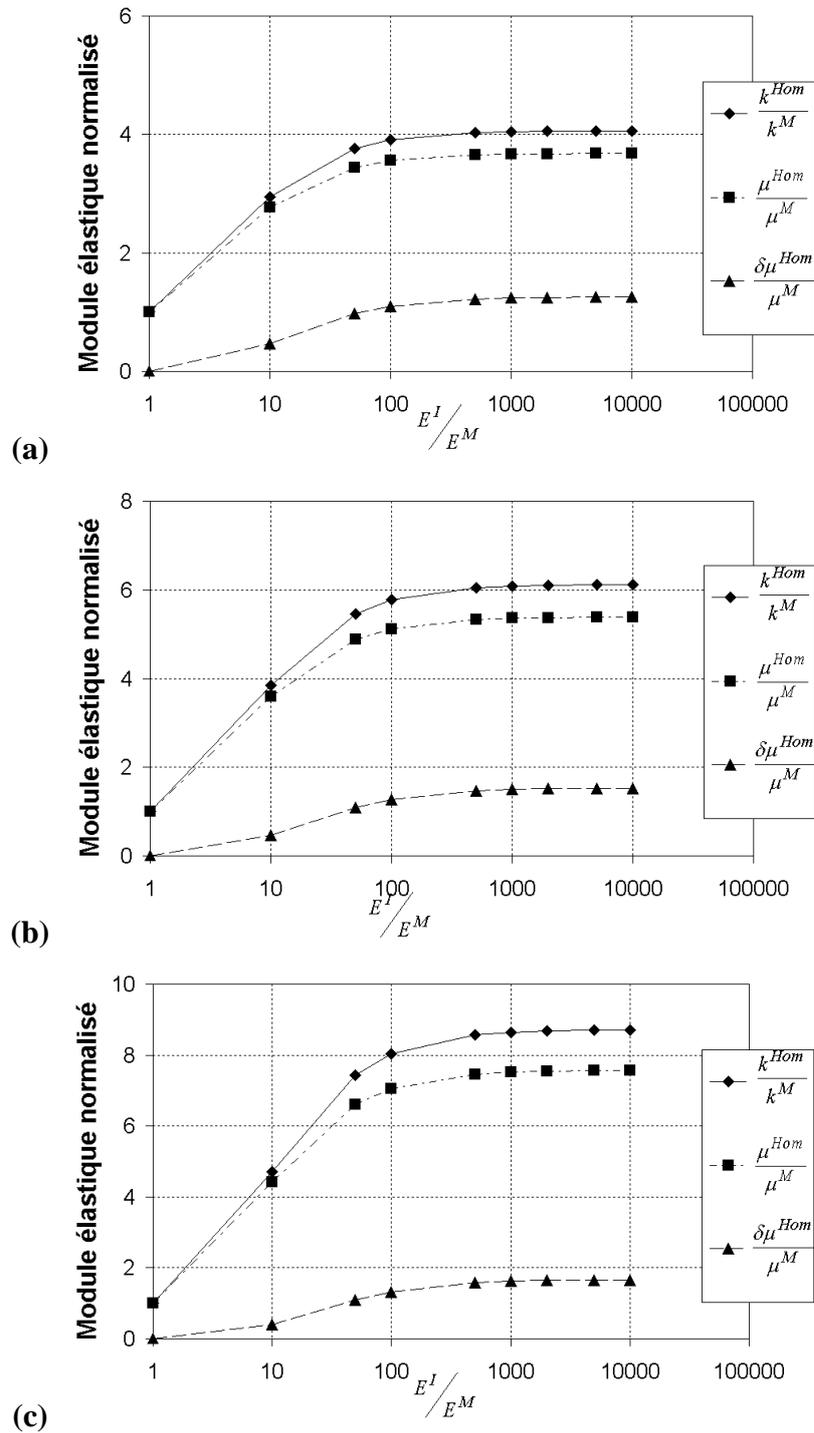


FIG. 4.5 – Variation des propriétés effectives en fonction du rapport  $\frac{E^I}{E^M}$  pour le réseau cubique simple : (a)  $f = 61\%$ , (b)  $f = 73\%$  et (c)  $f = 80\%$ .

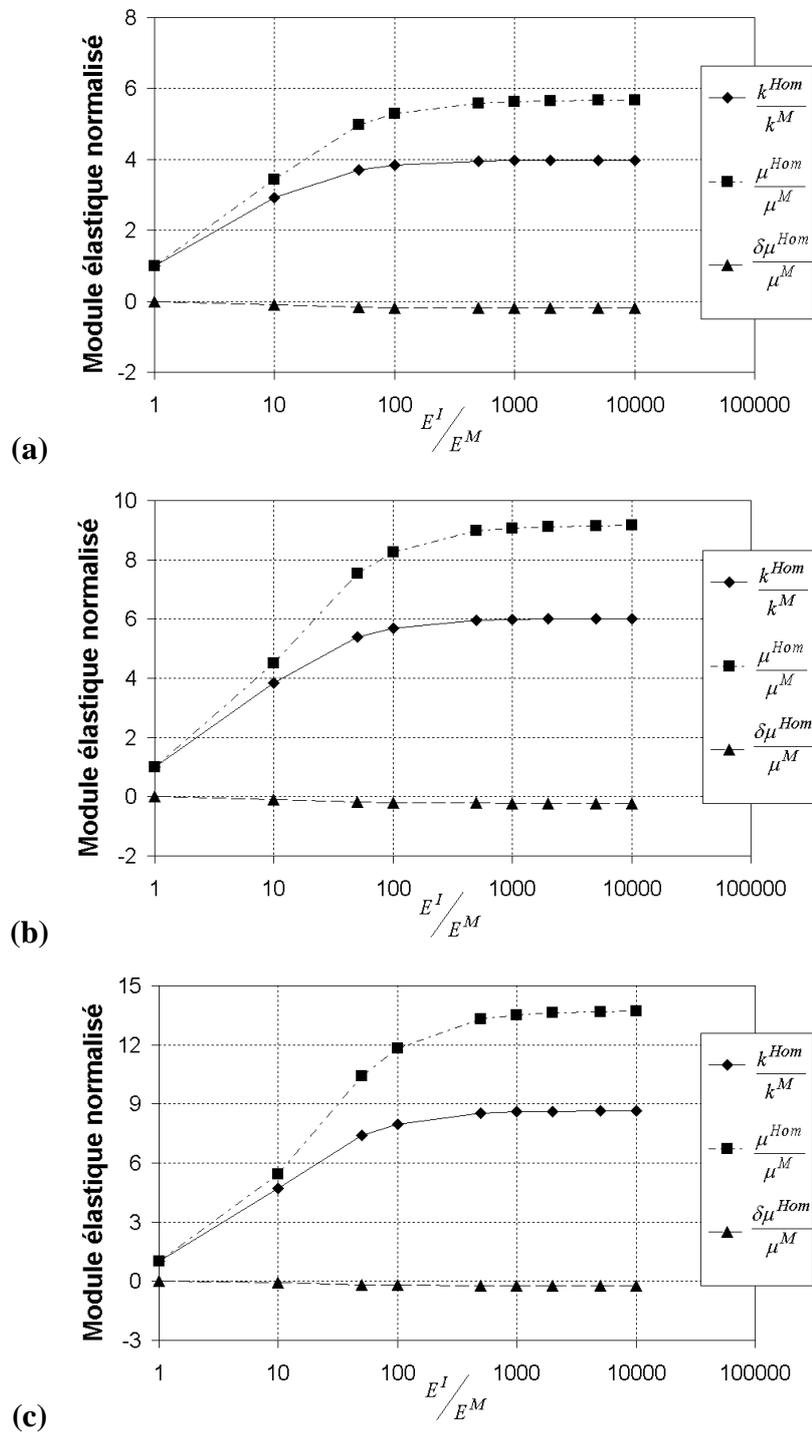


FIG. 4.6 – Variation des propriétés effectives en fonction du rapport  $\frac{E^I}{E^M}$  pour le réseau cubique centré : (a)  $f = 61\%$ , (b)  $f = 73\%$  et (c)  $f = 80\%$ .

$Z_\infty^{Hom}$  est la valeur asymptotique de  $Z_x^{Hom}$  lorsque  $x$  tend vers l'infini ( $\approx 10^4$ ).

Les erreurs relatives sur les trois modules élastiques pour le réseau *CS* sont tracées sur la figure 4.7. Celles du réseau *CC* sont tracées sur la figure 4.7.

À partir des figures 4.7 et 4.8, on peut conclure qu'un contraste minimal de 100 entre la rigidité de la matrice et celle des inclusions est nécessaire pour avoir des écart relatifs acceptables. Les écart relatifs pour un contraste égal à 100 sur les modules de compressibilité et les modules de cisaillement des deux réseaux *CS* et *CC* sont inférieurs à 15% (cf. Tab. 4.1 pour le réseau *CS* et 4.2 pour le réseau *CC*).

	$f = 61\%$	$f = 73\%$	$f = 80\%$
Module de compressibilité	-4%	-6%	-8%
Module de cisaillement	-3%	-5%	-7%
coefficient d'anisotropie cubique	-13%	-16%	-21%

TAB. 4.1 – Récapitulatif des erreurs relatives pour un contraste de 100. Cas du réseau *CS* (calculs par éléments finis).

	$f = 61\%$	$f = 73\%$	$f = 80\%$
Module de compressibilité	-4%	-5%	-8%
Module de cisaillement	-7%	-10%	-14%
coefficient d'anisotropie cubique	-8%	-10%	-13%

TAB. 4.2 – Récapitulatif des erreurs relatives pour un contraste de 100. Cas du réseau *CC* (calculs par éléments finis).

## 4.2.2 Une borne supérieure des coefficients élastiques homogénéisés pour le réseau *CS*

La détermination des modules élastiques effectifs du réseau *CS* nécessite la résolution de trois problèmes auxiliaires ( $P^j$  pour  $j = 1, 2, 3$ ) correspondant aux trois déformations homogènes appliquées  $E^{(j)}$  pour  $j = 1, 2, 3$  (cf. Eqs. 4.11, 4.12 et 4.13).

Dans la section précédente, la résolution des  $P^{(j)}$  (pour  $j = 1, 2, 3$ ) a été menée numériquement à l'aide du code de calcul *CASTEM2000*. Une alternative à cette approche, serait de proposer une solution analytique approchée de chacun de ces problèmes auxiliaires. Dans cette section, une solution approchée en déformation sera proposée pour le réseau Cubique Simple. Ainsi, une borne supérieure des énergies

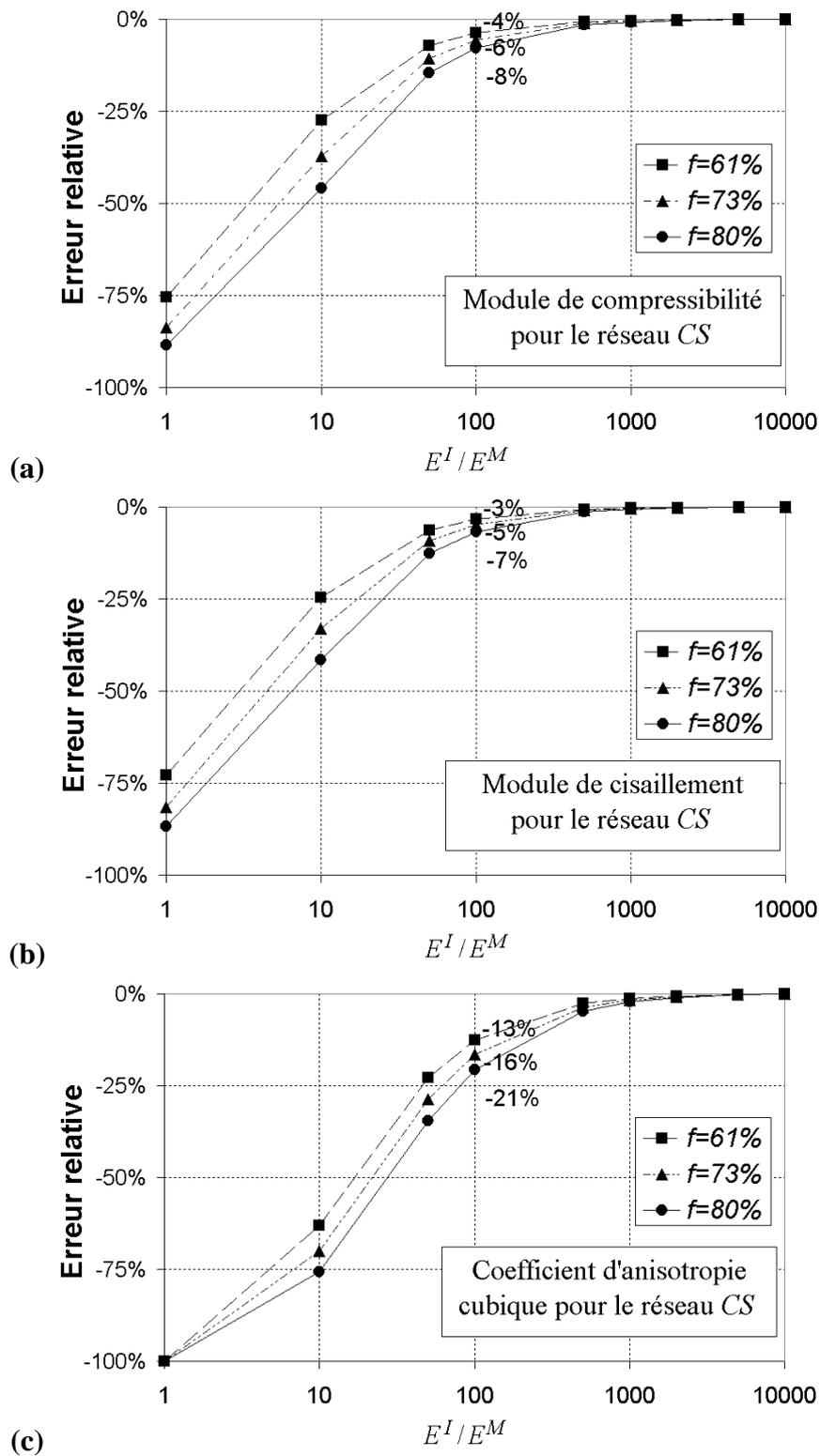


FIG. 4.7 – Estimation, **par la méthode des éléments finis**, de l'erreur relative sur les modules élastiques effectifs induite par l'hypothèse "inclusions infiniment rigides" pour le **réseau cubique simple** : (a) module de compressibilité, (b) module de cisaillement et (c) coefficient d'anisotropie cubique.

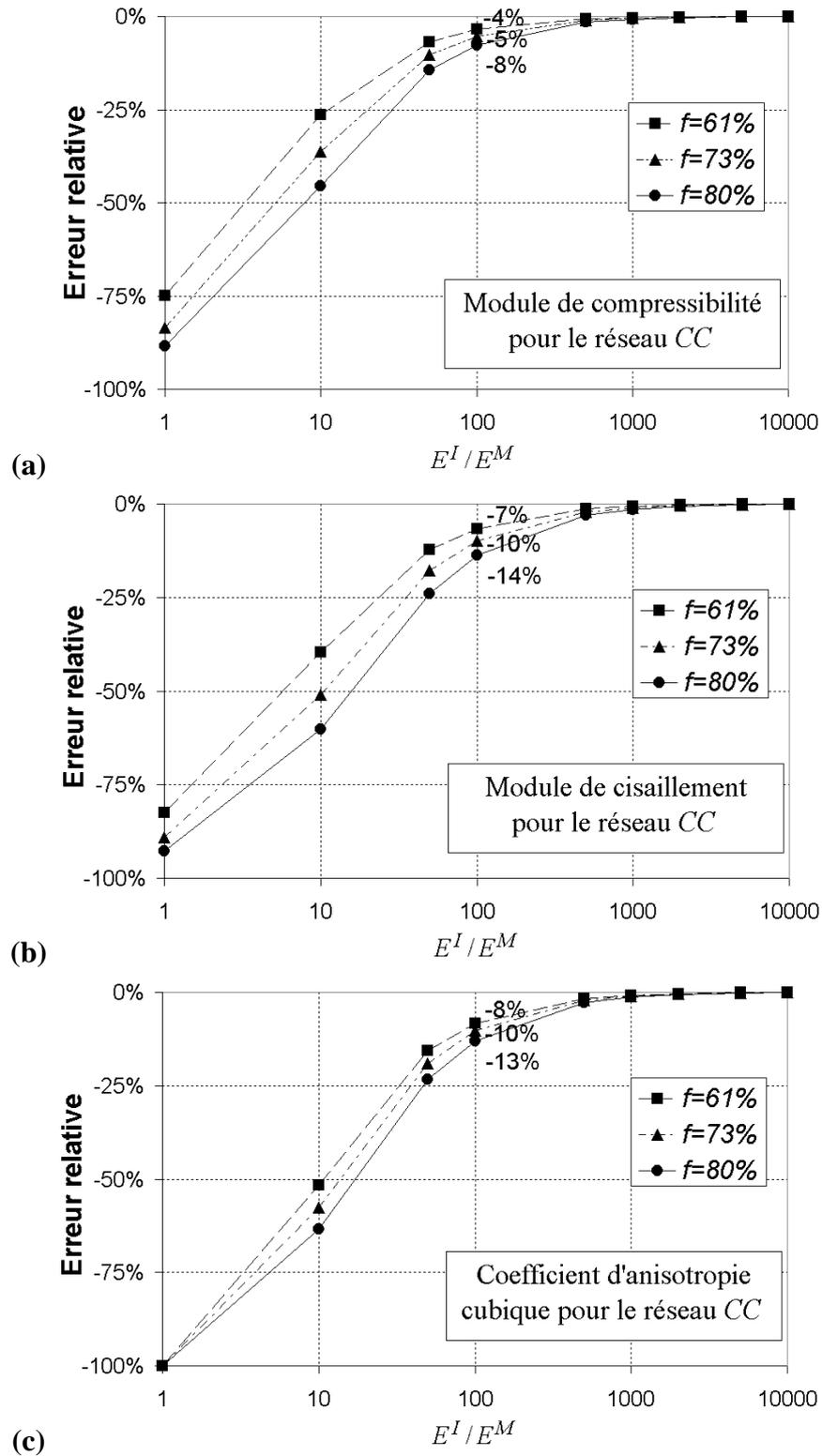


FIG. 4.8 – Estimation, par la méthode des éléments finis, de l'erreur relative sur les modules élastiques effectifs induite par l'hypothèse "inclusions infiniment rigides" pour le réseau cubique centré : (a) module de compressibilité, (b) module de cisailment et (c) coefficient d'anisotropie cubique.

$W^{(j)}$  (pour  $j = 1, 2, 3$ ) associées, respectivement, aux problèmes  $P^{(j)}$  (pour  $j = 1, 2, 3$ ) du réseau  $CS$  sera déduite.

Cette borne supérieure sera, par la suite, utilisée pour étudier l'écart relatif entre les modules élastiques homogénéisés tenant compte des déformations des inclusions et ceux dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides.

#### 4.2.2.1 Développement de la démarche

Les inclusions sont disposées suivant un réseau cubique simple. Elles sont, périodiquement séparées par une couche de matrice.

Une solution approchée du problème d'homogénéisation  $P$  (cf. Eq. 4.5) consiste à supposer que :

1. les déformations sont homogènes par morceau. La figure 4.9 montre une illustration en  $2D$  des différentes zones,

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^k(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^k \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in \text{région}(k), \quad \forall k = 1..n \quad (4.16)$$

2. les régions en vis-à-vis doivent avoir une même déformation,

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^i = \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^j \text{ pour chaque couple de régions } (i, j) \text{ en vis-à-vis} \quad (4.17)$$

3. la moyenne volumique de toutes les déformations  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^k$  ( $k = 1..n$ ) doit être égale à la déformation homogène macroscopique imposée  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$  :

$$\langle \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^k \rangle_V = \underline{\underline{\mathbf{E}}} \quad (4.18)$$

En outre, la continuité du déplacement à l'interface entre deux domaines voisins  $i$  et  $j$  doit être satisfaite, d'où :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{t}}^1 \cdot (\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^i - \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^j) \cdot \underline{\mathbf{t}}^1 = 0 \\ \underline{\mathbf{t}}^2 \cdot (\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^i - \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^j) \cdot \underline{\mathbf{t}}^2 = 0 \\ \underline{\mathbf{t}}^1 \cdot (\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^i - \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^j) \cdot \underline{\mathbf{t}}^2 = 0 \end{cases} \quad (4.19)$$

$(\underline{\mathbf{n}}, \underline{\mathbf{t}}^1, \underline{\mathbf{t}}^2)$  est la base locale de l'interface entre les deux domaines voisins  $i$  et  $j$ .

Notons  $\mathcal{CA}(\underline{\underline{\mathbf{E}}})$  l'ensemble des champs de déformation  $\{\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^k, k = 1..n\}$  compatibles avec les conditions des équations 4.16, 4.17 et 4.19 et vérifiant la relation de moyenne associée à la déformation macroscopique  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$  (cf. Eq. 4.18). L'énergie des

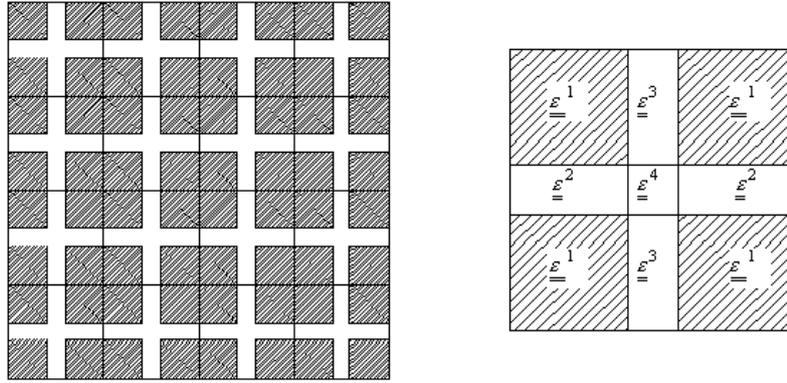


FIG. 4.9 – En 2D, les inclusions sont disposées suivant un réseau carré. Les déformations sont homogènes par morceau.

déformations élastiques associée à la déformation  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$  se calcule de la manière suivante :

$$W(\underline{\underline{\mathbf{E}}}) = \min_{\{\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^k}, k=1..n\} \in \mathcal{CA}(\underline{\underline{\mathbf{E}}})} \sum_{i=1}^{i=n} \frac{1}{2} \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^i} \cdot \mathbf{R}^i \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^i} \quad (4.20)$$

$\mathbf{R}^i$  est la matrice des raideurs du domaine  $i$ .

Le réseau cubique simple possède une symétrie matérielle cubique. Ainsi, la résolution du problème de minimisation de l'équation 4.20 pour les trois chargement  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(1)}$ ,  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(2)}$  et  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(3)}$  (cf. Eqs 4.11, 4.12 et 4.13 respectivement), nous permet de déduire *une borne supérieure des coefficients élastiques homogénéisés*.

En outre, seul le huitième de cellule de base est considéré. Dans ce cas, comme le montre la figure 4.10, le nombre total de zones s'élève à huit :

- une zone correspondant au huitième de l'inclusion. Son volume est noté  $V_i = f$  et la déformation correspondante est notée  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_1$ ,
- trois zones associées aux faces  $(AA'B'B)$ ,  $(AA'D'D)$  et  $(ABCD)$ . Les déformations correspondantes sont notées, respectivement,  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_2$ ,  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_3$  et  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_4$ . Le volume de chacune est  $V_f = f^{2/3} \cdot (1 - f^{1/3})$ ,
- trois zones associées aux arêtes  $(AB)$ ,  $(AA')$  et  $(AD)$ . Les déformations correspondantes sont notées, respectivement,  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_5$ ,  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_6$  et  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_7$ . Le volume de chaque zone

$$\text{est } V_a = f^{1/3} \cdot (1 - f^{1/3})^2,$$

- une zone associée au point A. La déformation correspondante est notée  $\underline{\underline{\epsilon}}_5$ . Le volume de cette zone est  $V_p = (1 - f^{1/3})^3$ ,

Il est facile de vérifier que :

$$V_i + 3 \cdot (V_f + V_a) + V_p = 1$$

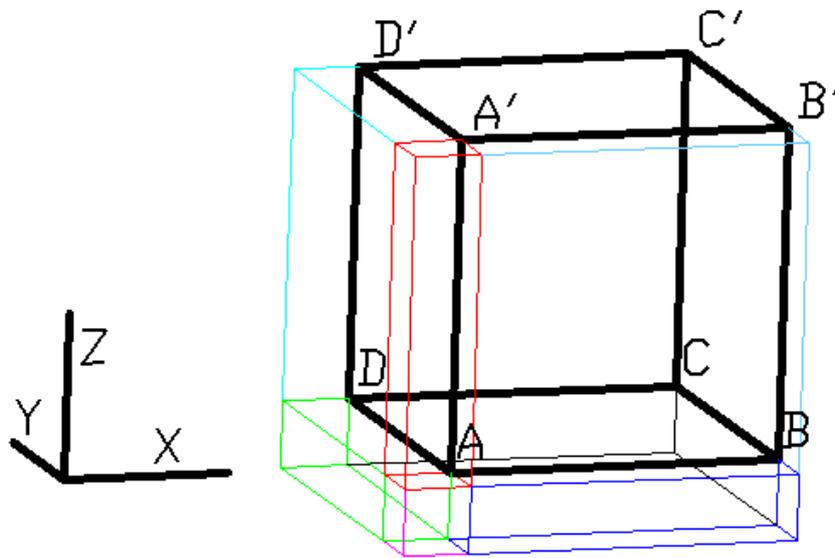


FIG. 4.10 – Un huitième de la cellule de base tridimensionnelle. Les déformations sont homogènes par morceau. Le nombre total de zones est huit.

#### 4.2.2.2 Résultats des calculs analytiques et comparaison avec les simulations par *EF* dans le cas limite d'inclusions infiniment rigides

##### Résultats des calculs analytiques :

La résolution des trois problèmes de minimisation (Eq. 4.20) associés aux trois chargement  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(1)}$ ,  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(2)}$  et  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(3)}$  a été menée à l'aide du logiciel de calcul formel *MalpeVII*. Une borne supérieure des coefficients élastiques homogénéisés a été ainsi déduite :

$$\mu^{sup} = \frac{\mu^M \left( (\mu^I - \mu^M) f^{1/3} + \mu^M \right)}{(-\mu^I + \mu^M) f + (\mu^I - \mu^M) f^{1/3} + \mu^M} \quad (4.21)$$

$$k^{sup} = \frac{-2(2\mu^M - k^M) f - 3f^{2/3} k^M + \frac{k^M(k^M + 4\mu^M)}{k^M - k^I}}{3f - 3f^{2/3} + \frac{k^M + 4\mu^M}{k^M - k^I}} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \delta\mu^{sup} = & -\frac{1}{4} \frac{(18(k^M - k^I)(-\mu^I + \mu^M) f^{4/3} (f^{1/3} - 1) - 2(k^M + 4\mu^M)(\mu^M - \mu^I - k^I + k^M) f)}{18 \frac{(k^M - k^I)(-\mu^I + \mu^M) f^{4/3} (f^{1/3} - 1)^2}{k^M + 4\mu^M} + 3(2\mu^M - k^I - 2\mu^I + k^M)(f - f^{2/3}) + k^M + 4\mu^M} \\ & -\frac{1}{4} \frac{(3(k^M + 4\mu^M)(2\mu^M - k^I - 2\mu^I + k^M) f^{2/3} - (k^M + 4\mu^M)^2)}{18 \frac{(k^M - k^I)(-\mu^I + \mu^M) f^{4/3} (f^{1/3} - 1)^2}{k^M + 4\mu^M} + 3(2\mu^M - k^I - 2\mu^I + k^M)(f - f^{2/3}) + k^M + 4\mu^M} \\ & -\frac{1}{4} \frac{-2(2\mu^M - k^M) f - 3f^{2/3} k^M + \frac{k^M(k^M + 4\mu^M)}{k^M - k^I}}{3f - 3f^{2/3} + \frac{k^M + 4\mu^M}{k^M - k^I}} + \frac{\mu^M((f^{1/3} - 1)\mu^M - \mu^I f^{1/3})}{(-f + f^{1/3})\mu^I + (-f^{1/3} + f + 1)\mu^M} \end{aligned} \quad (4.23)$$

avec :

- $f$  est la fraction volumique des inclusions,
- $\mu^M, k^M$  sont, respectivement, le module de cisaillement et le module de compressibilité de la matrice,
- $\mu^I, k^I$  sont, respectivement, le module de cisaillement et le module de compressibilité des inclusions,
- $\mu^{sup}, k^{sup}$  et  $\delta\mu^{sup}$  sont, respectivement, le module de cisaillement, le module de compressibilité et le coefficient d'anisotropie cubique estimés par la borne supérieure.

Il est à noter que, contrairement au coefficient d'anisotropie cubique  $\delta\mu^{sup}$ , les coefficients  $\mu^{upper}$  et  $k^{upper}$  sont des limites supérieures des modules "exacts"  $\mu^{Hom}$  et  $k^{Hom}$  estimés par la méthode des éléments finis. En outre, les estimations des équations 4.21-4.22 sont exactes pour  $f = 0\%$  et  $f = 100\%$ .

Lorsque les inclusions sont infiniment rigides, un passage à la limite des équations 4.21-4.23 lorsque  $k^I$  et  $\mu^I$  tendent vers l'infini, nous permet de déduire une estimation des coefficients élastiques homogénéisés dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides :

$$\mu_{\infty}^{sup} = \frac{\mu^M}{1 - f^{2/3}} \quad (4.24)$$

$$k_{\infty}^{sup} = \frac{1}{3} \frac{(4\mu^M - 2k^M) f^{1/3} + 3k^M}{1 - f^{1/3}} \quad (4.25)$$

$$\delta\mu_{\infty}^{sup} = \frac{1}{6} \frac{(-2\mu^M + k^M) f^{2/3} + (k^M + 4\mu^M) f^{1/3}}{1 - f^{2/3}} \quad (4.26)$$

### Comparaisons avec les simulations par $EF$ dans le cas limite d'inclusions infiniment rigides :

Afin de valider le modèle analytique proposé, les prédictions  $k_{\infty}^{sup}$ ,  $\mu_{\infty}^{sup}$  et  $\delta\mu_{\infty}^{sup}$  dans le cas limite d'inclusions infiniment rigides sont comparées, respectivement, aux coefficients "exacts" obtenus par la méthode des éléments finis ( $k_{\infty}^{EF}$ ,  $\mu_{\infty}^{EF}$  et  $\delta\mu_{\infty}^{EF}$ ). Pour ce faire, nous introduisons l'erreur relative sur un module  $Z_{\infty}^{sup}$  par rapport au module "exact" obtenu par éléments finis  $Z_{\infty}^{EF}$  comme suit :

$$\varepsilon_r = \frac{Z_{\infty}^{sup} - Z_{\infty}^{EF}}{Z_{\infty}^{EF}} \text{ pour } Z_{\infty}^{EF} \neq 0$$

Signalons que, lorsque la fraction volumique des inclusions est nulle, on a :

$$\delta\mu_{\infty}^{EF} = \delta\mu_{\infty}^{sup} = 0 \text{ d'ou, } \varepsilon_r = 0\%$$

Les résultats des comparaisons sont tracés dans les figures 4.11, 4.12 et 4.13 respectivement, pour le module de compressibilité normalisé ( $\frac{k^{Hom}}{k^M}$ ), le module de cisaillement normalisé ( $\frac{\mu^{Hom}}{\mu^M}$ ) et le coefficient d'anisotropie cubique normalisé ( $\frac{\delta\mu^{Hom}}{\mu^M}$ ).

Une courbe récapitulative des différentes erreurs relatives est tracée sur la figure 4.14.

À partir de cette figure, il est clair que les prédictions de la borne supérieure sont en accord avec les estimations par la méthode des éléments finis des coefficients élastiques homogénéisés aussi bien, pour les très faibles fractions volumiques ( $f < 10\%$ ) que pour les fortes fractions volumiques ( $f > 50\%$ ).

L'erreur relative sur le module de cisaillement est inférieure à 5% pour toutes les fractions volumiques. Les valeurs négatives des erreurs relatives qui apparaissent dans la courbe de la figure 4.12 (et aussi dans la figure 4.14) lorsque la fraction volumique

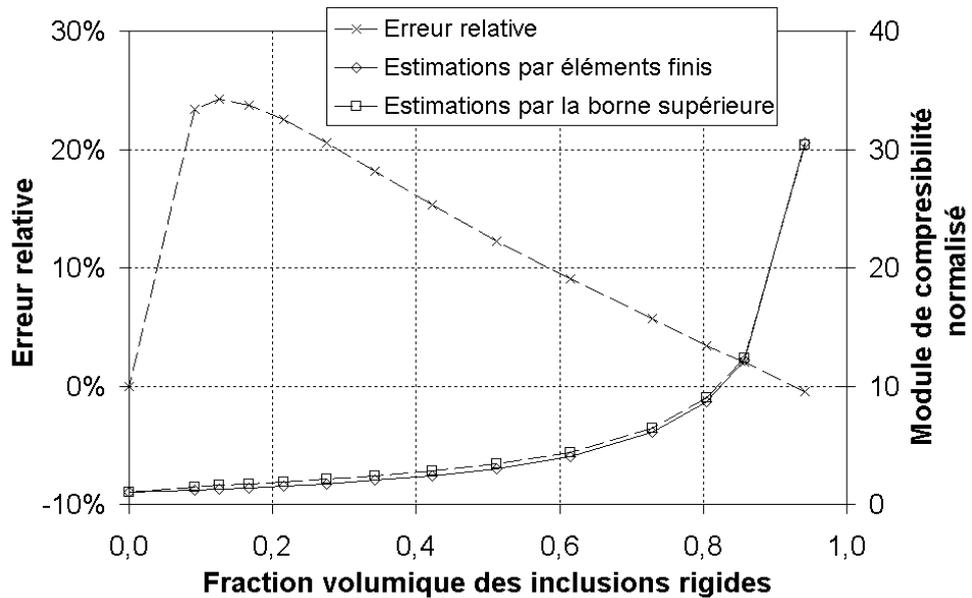


FIG. 4.11 – Comparaisons entre le **module de compressibilité** normalisé obtenue par la méthode des éléments finis ( $\frac{k_{\infty}^{EF}}{k_M}$ ) et celui estimé par la borne supérieure ( $\frac{k_{\infty}^{SUP}}{k_M}$ ).

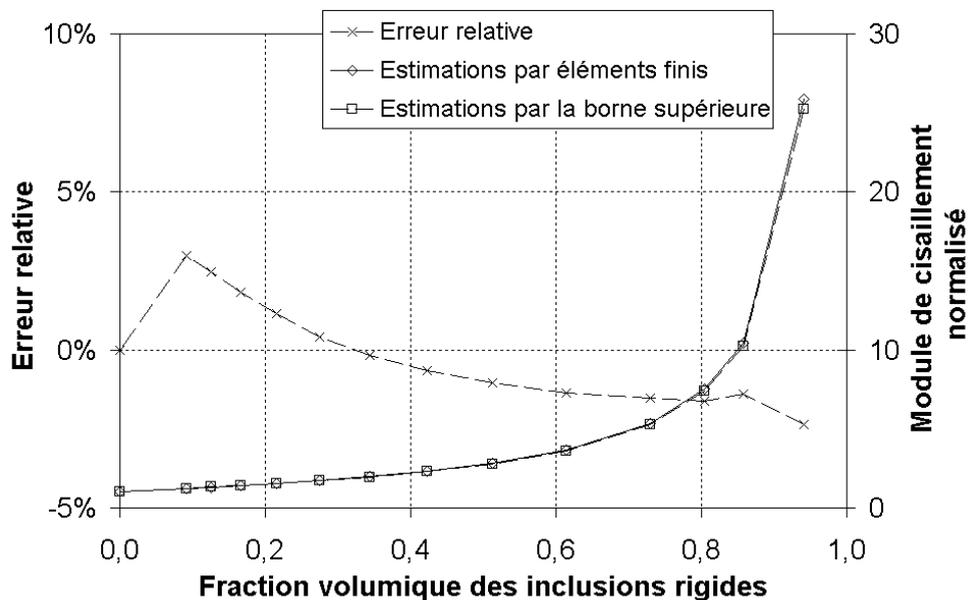


FIG. 4.12 – Comparaisons entre le **module de cisaillement** normalisé obtenue par la méthode des éléments finis ( $\frac{\mu_{\infty}^{EF}}{\mu_M}$ ) et celui estimé par la borne supérieure ( $\frac{\mu_{\infty}^{SUP}}{\mu_M}$ ).

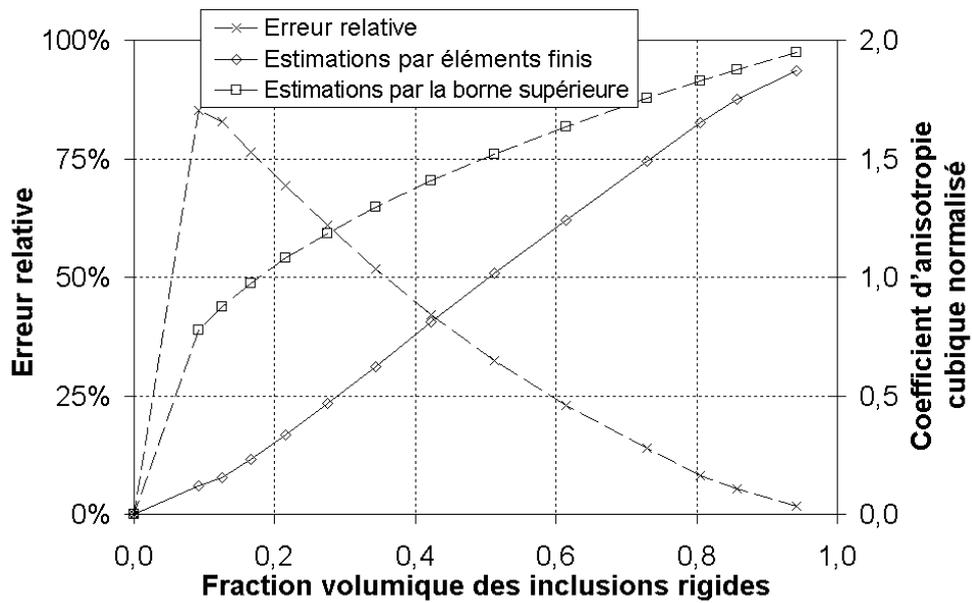


FIG. 4.13 – Comparaisons entre le **coefficient d'anisotropie cubique** normalisé obtenue par la méthode des éléments finis ( $\frac{\delta\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par la borne supérieure ( $\frac{\delta\mu_{\infty}^{sup}}{\mu^M}$ ).

des inclusions est importante, sont dues à un raffinement insuffisant du maillage de la structure. En effet, pour les fortes fractions volumiques d'inclusions, le raffinement du maillage dans l'épaisseur de la couche de liant (la matrice) rend la résolution numérique par la méthode des éléments finis très coûteuse en terme de temps de calcul et de capacité de stockage.

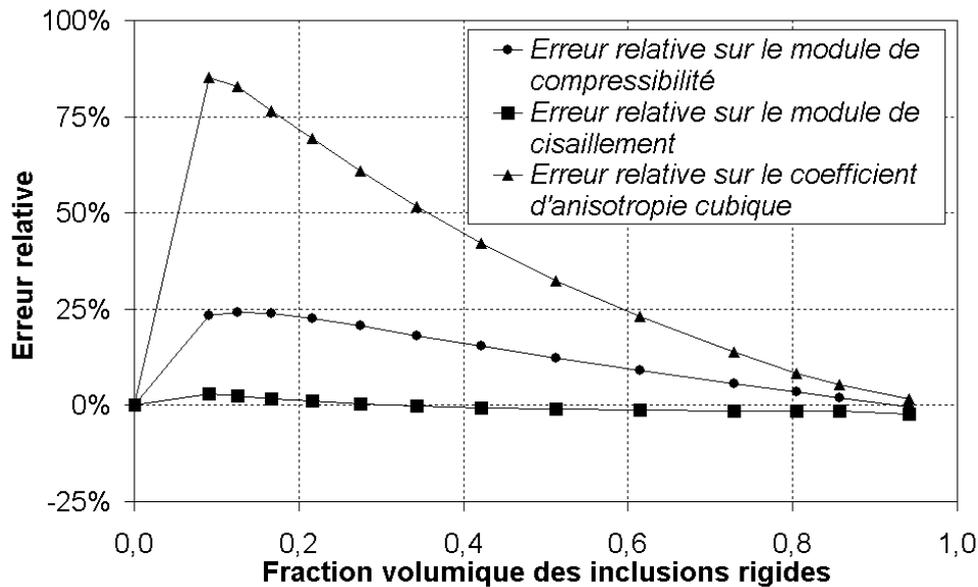


FIG. 4.14 – Récapitulatif des erreurs relatives sur **les trois coefficients élastiques** : comparaisons entre les coefficients élastiques "exactes" obtenus par **la méthode des éléments finis** et les estimations de **la borne supérieure**.

#### 4.2.2.3 Application à l'estimation de l'erreur induite par l'hypothèse "inclusions infiniment rigides"

Le modèle analytique qui a été proposé pour le réseau *CS* nous fournit une assez bonne approximation des propriétés effectives. Ces coefficients effectifs (Eqs. 4.21, 4.22 et 4.23) tiennent compte des déformations des inclusions.

Afin d'estimer l'erreur induite par l'hypothèse **H2** (inclusions infiniment rigides), les estimations des modules effectifs dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides (Eqs. 4.21, 4.22 et 4.23) sont comparées aux coefficients effectifs des équations 4.21, 4.22 et 4.23.

Par analogie avec ce qui a été fait avec la méthode des éléments finis (§4.2.1.2), nous avons défini l'erreur relative sur le module *Z* comme suit :

$$\varepsilon_r(x) = \frac{Z_x^{sup} - Z_{rig}^{sup}}{Z_{rig}^{upper}}, \quad x = \frac{E^I}{EM}$$

Les variations des erreurs relative sur les trois coefficients effectifs en fonction du rapport  $x = \frac{E^I}{EM}$  sont tracées sur la figure 4.15 pour les trois fractions volumique ( $f = 61\%$ ,  $73\%$  et  $80\%$ ).

Les écart relatifs pour un contraste égal à 100 sur les modules de compressibilité et les modules de cisaillement sont inférieurs à 15% (cf. Tab. 4.3).

	$f = 61\%$	$f = 73\%$	$f = 80\%$
Module de compressibilité	-8%	-3%	-12%
Module de cisaillement	-11%	-4%	-15%
coefficient d'anisotropie cubique	-15%	-6%	-20%

TAB. 4.3 – Récapitulatif des erreurs relatives pour un contraste de 100. Cas du réseau CS (calculs par la borne supérieure proposée).

### 4.2.3 Conclusions

Les comparaisons entre les propriétés effectives des microstructures choisies (réseau CS et réseau CC) dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides avec celles prenant en compte les déformations des agrégats ont montré que le contraste minimal entre les rigidités des deux constituants du matériau (les inclusions et la matrice) pour lequel les coefficients élastiques homogénéisés sont peu sensibles à la rigidité des inclusions (avec une erreur relative inférieure à 15%) est égale à 100.

Un modèle analytique prenant en compte les déformations des inclusions a été développé pour estimer les propriétés élastiques effectives du réseau cubique simple CS. Les limitations de cette approximation ont été discutées à travers des comparaisons avec la méthode des éléments finis dans le cas limite où les déformations des inclusions sont nulles.

L'approximation proposée ainsi validée a été utilisée pour estimer le contraste minimal entre la rigidité des inclusions et celle de la matrice avec lequel les propriétés élastique effective du réseau CS sont peu sensibles à la raideur des inclusions.

Le résultat précédemment établi par éléments finis a été confirmé. En effet, avec un contraste minimal de 100, les erreurs relatives sur le module de cisaillement et le module de compressibilité homogénéisés est inférieur à 15%.

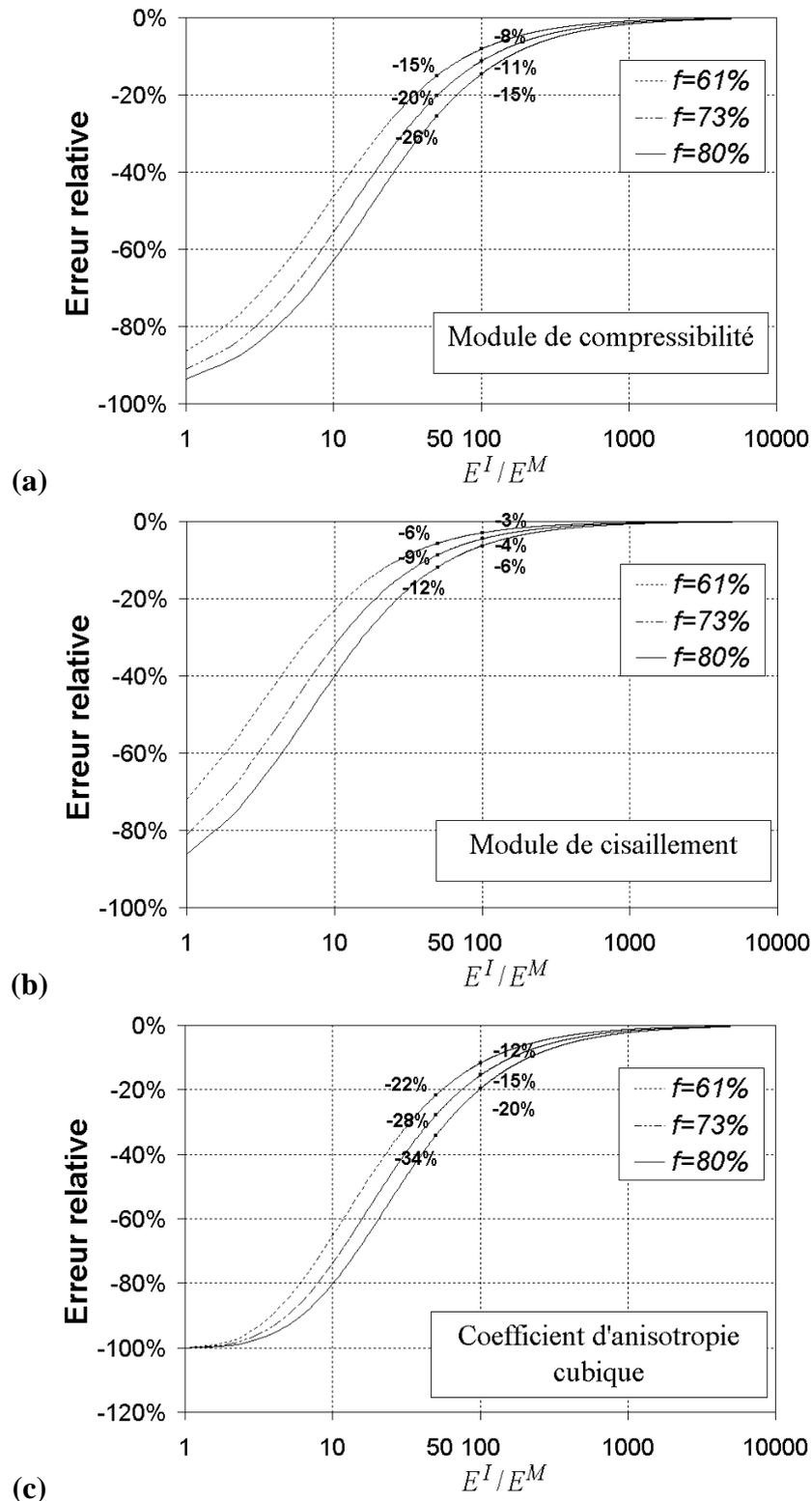


FIG. 4.15 – Estimation, par la borne supérieure proposée, de l'erreur relative sur les modules élastiques effectifs induite par l'hypothèse "inclusions infiniment rigides" pour le réseau cubiques simple : (a) module de compressibilité, (b) module de cisaillement et (c) coefficient d'anisotropie cubique.

### 4.3 Comparaisons éléments finis-modèle discret

Dans cette section, le modèle discret proposé dans le chapitre précédent sera appliqué aux réseaux *CS* et *CC*. La méthode d'homogénéisation discrète sera utilisée pour calculer les coefficients élastiques effectifs des deux réseaux discrets choisis. Les résultats seront confrontés à ceux obtenus par éléments finis sur les structures tridimensionnelles continues dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides.

#### 4.3.1 Homogénéisation discrète des réseaux *CS* et *CC*

##### 4.3.1.1 Géométrie et problèmes à résoudre

Rappelons que la région de Voronoï associée au réseau *CS* est un cube. À chaque face du cubique est associée une connexion (cf. Fig. 4.16).

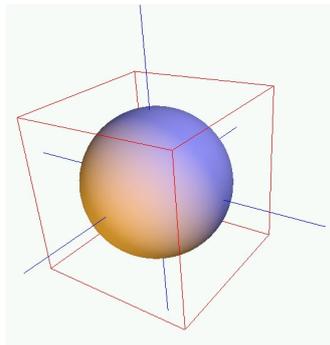


FIG. 4.16 – Cellule de base périodique du **réseau discret CS**. La région de Voronoï est un cube : **6 connexions identiques** sont associées aux 6 faces (carrés) du cube.

Celle du réseau *CC* est un tétrakaïdécaèdre. Ce polyèdre compte six carrés et huit hexagones (cf. Fig. 4.17).

Rappelons, aussi, que ces microstructures possèdent trois plans de symétrie. Ainsi, tout comme le cas de l'homogénéisation périodique de microstructures continues, trois chargements sont nécessaires pour la détermination des coefficients élastiques effectifs  $k^{dis}$  (module de compressibilité),  $\mu^{dis}$  (module de cisaillement),  $\delta\mu^{dis}$  (coefficient d'anisotropie cubique).

Nous considérons les déformations homogènes  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(1)}$ ,  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(2)}$  et  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}^{(3)}$  définies, respectivement dans les équations 4.11, 4.12 et 4.13.

La cellule de base aussi bien pour le réseau *CS* que pour le réseau *CC* contient un seul

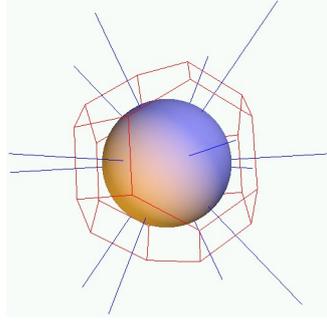


FIG. 4.17 – Cellule de base périodique du **réseau discret CS**. La région de Voronoï est un tétrakaidécaèdres : 8 connections identiques associées aux 8 hexagones et 6 connections identiques associées aux 6 carrés (**14 connections**) .

noeud. On parle alors d'une *structure mono-atomique*.

Le noeud central de la cellule de base pour le réseau *CS* est connecté à huit autres noeuds se trouvant dans les cellules voisines. Celui du réseau *CC* est connecté à quatorze autres noeuds se trouvant dans les cellules voisines. Ainsi, seule la moitié des énergies de déformation élastiques associées à ces connections seront considérées dans le calcul de l'énergie de déformation élastique totale.

La résolution de chaque problème auxiliaire  $P^{(j)}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) est unique à un mouvement de translation près. En annulant la partie périodique du mouvement de translation du noeud central ( $\underline{\mathbf{u}}_{per}^1 = 0$ ), les conditions aux limites appliquées à tous les noeuds seront de la forme :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{u}}^i = \underline{\mathbf{E}}^{(j)} \cdot \underline{\mathbf{x}}^i \\ \underline{\boldsymbol{\varphi}}^i = \underline{\boldsymbol{\varphi}}^{(j)} \end{cases} \quad \forall i = 1..n \quad \forall j = 1..3 \quad (4.27)$$

$n$  est le nombre total de noeuds (8 pour le réseau *CS* et 14 pour le réseau *CC*).

$E^{(j)}$  est la déformation macroscopique homogène associée au problème auxiliaire  $P^{(j)}$  pour  $j = 1, 2, 3$ .  $\underline{\boldsymbol{\varphi}}^{(j)}$  sont les trois rotations inconnues associées à  $P^{(j)}$ .

#### 4.3.1.2 Résultats des calculs analytiques

La résolution de chaque problème auxiliaire  $P^{(j)}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) nous permet de calculer les trois rotations inconnues  $\underline{\boldsymbol{\varphi}}^{inconnu}$ . Cette résolution a été menée à l'aide du logiciel de calcul formel *MapleVII*.

Les propriétés élastiques effectives du réseau discret se calculent en fonction des

énergies élastiques de déformation  $W^{(j)}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) respectivement, associées aux problèmes  $P^{(j)}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) (cf. Eqs. 4.14a, 4.14b et 4.14c).

Les résultats des calculs sont :

$$k^{Discret} = \frac{1}{3} \frac{\lambda^M + 2\mu^M}{1 - f^{1/3}} \quad (4.28a)$$

$$\mu^{Discret} = \frac{1}{2} \frac{\mu^M}{1 - f^{1/3}} \quad (4.28b)$$

$$\delta\mu^{Discret} = -\frac{1}{2} \frac{\lambda^M + 3\mu^M}{1 - f^{1/3}} \quad (4.28c)$$

pour le réseau *CS*, et :

$$k^{Discret} = \frac{1}{3} \frac{\lambda^M + 2\mu^M}{1 - f^{1/3}} \quad (4.29a)$$

$$\mu^{Discret} = \frac{1}{4} \frac{\lambda^M + 3\mu^M}{1 - f^{1/3}} \quad (4.29b)$$

$$\delta\mu^{Discret} = \frac{1}{8} \frac{\lambda^M + \mu^M}{1 - f^{1/3}} \quad (4.29c)$$

pour le réseau *CC*.

$f$  est la fraction volumique des inclusions.

À partir des équations 4.28c et 4.29c, on remarque que les réseaux *CS* et *CC* ont le même module de compressibilité homogénéisé. Nous verrons dans le chapitre 5 que cette expression reste aussi valable pour les microstructures aléatoires lorsque la *FVL* (Fraction Volumique Locale) des inclusions est uniforme.

Il est bien connu que le coefficient de Poisson pour les matériaux isotropes tridimensionnels ( $\nu$ ) est encadré par  $-1 < \nu < 0.5$ . Rappelons que pour les microstructures à symétrie cubique, la formule pour le coefficient de Poisson est :

$$\nu = \frac{3k - 2(\mu + \delta\mu)}{6k + 2(\mu + \delta\mu)}$$

Ainsi, à partir des équations 4.28 et 4.29, il est possible de calculer le coefficient de Poisson homogénéisé pour les deux microstructures. Ce qui donne :

$$\nu^{Discret} = 0 \quad (4.30)$$

pour le réseau *CS*, et :

$$\nu^{Discret} = \frac{\lambda^M + \mu^M}{3\lambda^M + 7\mu^M} = \frac{1}{7 - 8\nu^M} < \frac{1}{3} \quad (4.31)$$

pour le réseau *CC*. Remarquons que ces coefficients de Poisson homogénéisés ne dépendent pas de la fraction volumique des inclusions. Nous verrons dans le chapitre 5 que cette indépendance reste aussi valable pour les microstructure aléatoire lorsque la *FVL* des inclusions est uniforme.

Le coefficient de Poisson homogénéisé  $\nu^{Discret}$  est toujours nul pour le réseau *CS*. Cependant, pour le réseau *CC*, la gamme des combinaisons possibles du coefficient de Poisson qui peuvent être couverts par le modèle discret admet deux limites :

$$\begin{cases} \nu^{Discret} = \frac{1}{3} & \text{if } \nu^M \longrightarrow 0.5^- \\ \nu^{Discret} = \frac{1}{15} & \text{if } \nu^M \longrightarrow -1^+ \end{cases} \quad (4.32)$$

Les moments statiques  $S_2^{ij}$  et  $S_3^{ij}$  (cf. Eq. 3.25 du chapitre 3) de toutes les connexions, pour les deux réseaux considérées, sont nuls. Ainsi, pour ce type de réseau, toutes les connexions sont équivalentes à un ressort avec force normale, force de cisaillement et moments de flexion et sans couplage entre les forces et les moments. Comme illustré par Ostoja-Starzewski et al. (1996) et Schlangen et Garboczi (1996), ce genre de réseau réguliers peuvent seulement représenter un milieu continu avec un coefficient de Poisson inférieur à 1/3.

Selon Schlangen et Garboczi (1996), Day et al. (1992) ont développé une méthode pour modéliser des matériaux avec un coefficient de Poisson supérieur à 1/3.

Le modèle courant sera appliqué aux enrobés bitumineux. Le coefficient de Poisson pour ce type de matériaux est inférieur à 1/3. Ainsi le réseau *CC* pourrait modéliser ce type de matériaux ; cependant, le désordre n'est pas pris en considération et les propriétés élastiques effectives du réseau ne sont pas isotropes. Les réseaux aléatoires sont réellement plus appropriés à ce type de matériaux.

### 4.3.2 Comparaisons avec la méthode des éléments finis

Les prédictions du modèle discret sur les propriétés effectives  $k^{Discret}$ ,  $\mu^{Discret}$  et  $\delta\mu^{Discret}$  des deux réseaux choisis (cf. Eq. 4.28 pour le réseau *CS* et Eq. 4.28 pour le réseau *CC*) sont confrontées aux modules "exacts"  $k_{\infty}^{EF}$ ,  $k_{\infty}^{EF}$  et  $\delta\mu_{\infty}^{EF}$  obtenus par éléments finis dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides.

Les comparaisons, pour le réseau *CS*, sont tracées sur les figures 4.18, 4.19 et 4.20 respectivement pour le module de compressibilité ( $k$ ), le module de cisaillement ( $\mu$ ) et le coefficient d'anisotropie cubique ( $\delta\mu$ ).

Celles du réseau *CC* sont tracés sur les figures 4.21, 4.22 et 4.23 respectivement pour le module de compressibilité ( $k$ ), le module de cisaillement ( $\mu$ ) et le coefficient d'anisotropie cubique ( $\delta\mu$ ).

À partir de ces courbes, On remarque que l'erreur relative converge vers zéro lorsque la fraction volumique des inclusions tend vers un. Les prédictions du modèle discret proposé sont donc meilleures lorsque la fraction volumique des inclusions rigides est élevée. En effet, lorsque la fraction volumique des inclusions est supérieure à 50%, l'erreur relative sur le module de cisaillement et le module de compressibilité, pour les deux microstructures *CS* et *CC*, est inférieure à 15%.

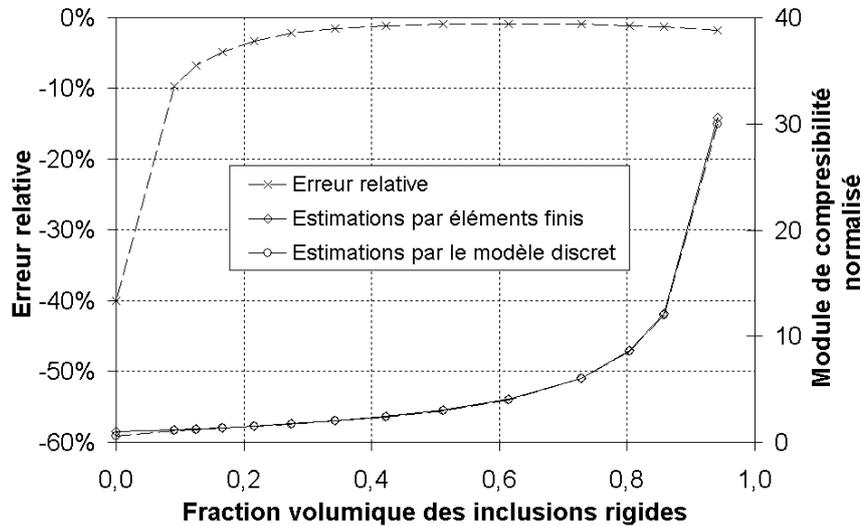


FIG. 4.18 – Comparaisons entre le **module de compressibilité** normalisé obtenu par la méthode des éléments finis ( $\frac{k_{\infty}^{EF}}{k^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{k^{Discret}}{k^M}$ ) : Cas du **réseau cubique simple**.

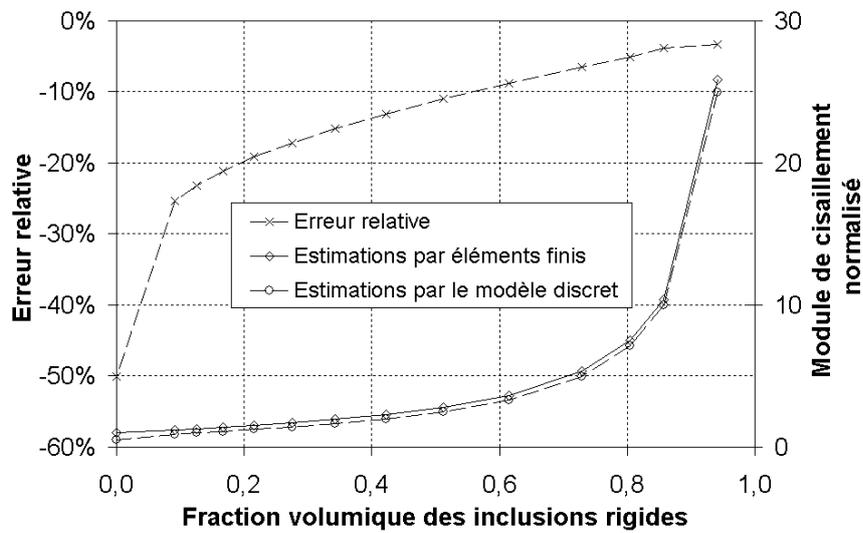


FIG. 4.19 – Comparaisons entre le **module de cisaillement** normalisé obtenu par la méthode des éléments finis ( $\frac{\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{\mu^{discet}}{\mu^M}$ ) : Cas du réseau cubique simple.

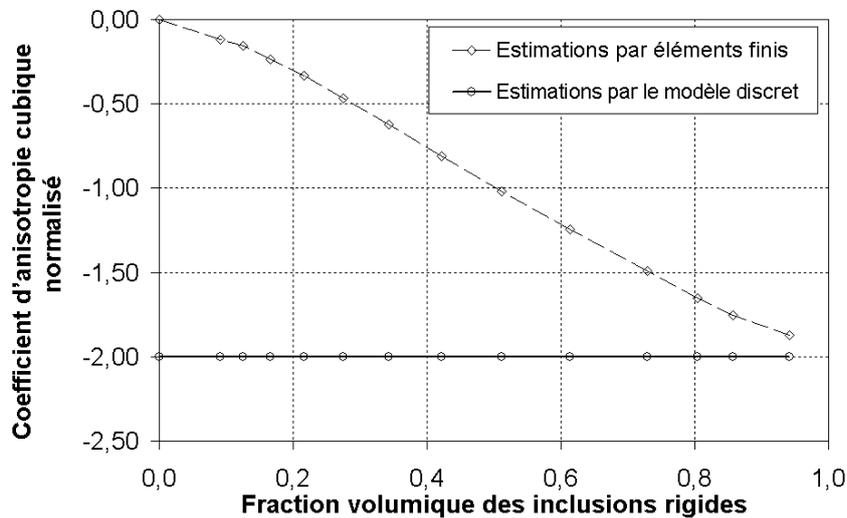


FIG. 4.20 – Comparaisons entre le **coefficient d'anisotropie cubique** normalisé obtenu par éléments finis ( $\frac{\delta\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{\delta\mu^{discet}}{\mu^M}$ ) : Cas du réseau cubique simple.

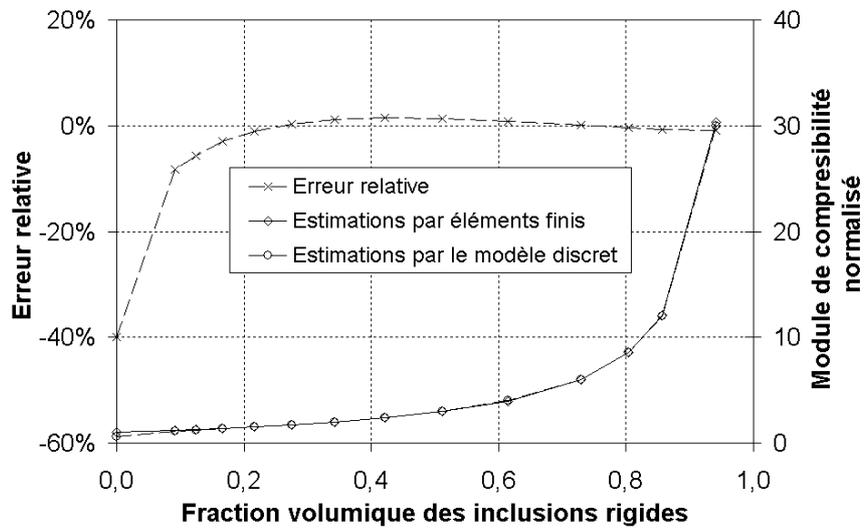


FIG. 4.21 – Comparaisons entre le **module de compressibilité** normalisé obtenue par la méthode des éléments finis ( $k_{\infty}^{EF}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $k_{\infty}^{Discret}$ ) : Cas du réseau cubique centré.

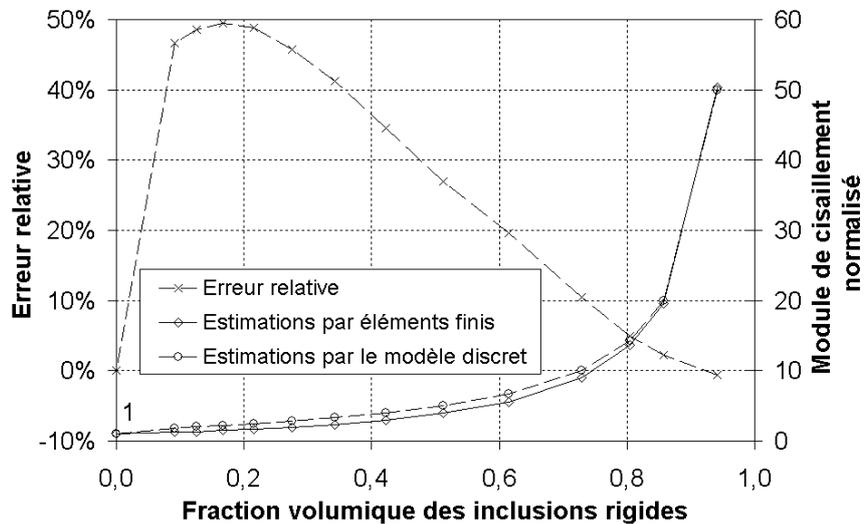


FIG. 4.22 – Comparaisons entre le **module de cisaillement** normalisé obtenu par la méthode des éléments finis ( $\mu_{\infty}^{EF}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\mu_{\infty}^{discret}$ ) : Cas du réseau cubique centré.

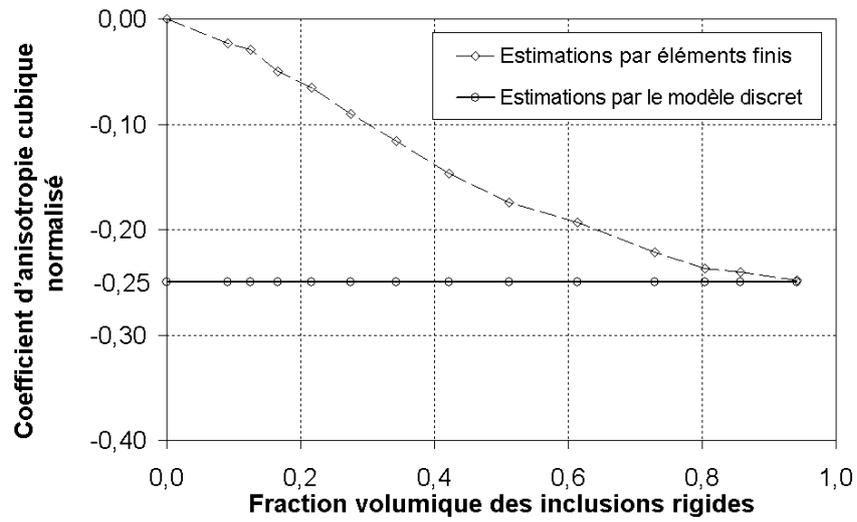


FIG. 4.23 – Comparaisons entre **le coefficient d'anisotropie cubique** normalisé obtenu éléments finis ( $\frac{\delta\mu_{\infty}^{EF}}{\mu^M}$ ) et celui estimé par le modèle discret ( $\frac{\delta\mu^{discret}}{\mu^M}$ ) : Cas du **réseau cubique centré**.

## 4.4 Conclusions

Dans ce chapitre, la validité et les limitations du modèle sont discutées à travers des comparaisons avec des simulations par la méthode des éléments finis sur des cellules unitaires périodiques régulières dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides. Les microstructures choisies sont le réseau cubique simple (CS) et le réseau cubique centré (CC). Les résultats des comparaisons montrent que les estimations du modèle discret proposé sont acceptables (erreur < 15%) pour des densités volumiques d'inclusions assez élevées ( $f > 50\%$ ).

Les estimations par la méthode des éléments finis des propriétés effectives dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides ont été comparées à celles prenant en compte la rigidité des inclusions pour trois fractions volumiques d'agrégats ( $f = 61\%$ ,  $73\%$  et  $80\%$ ). Les résultats des comparaisons pour  $f = 61\%$  montrent que l'erreur est significative ( $> 15\%$ ) lorsque le rapport entre le module d'Young de la matrice et celui des inclusions ( $E^I/E^M$ ) est inférieur à 100.

Concernant les enrobés bitumineux,  $E^I/E^M$  est de l'ordre de 50. Dans ce cas, les erreurs commises sur le module de compressibilité et le module de cisaillement pour une fraction volumique d'inclusions égale à 80% sont résumées dans le tableau 4.4. Ce dernier montre que l'erreur sur le module de cisaillement peut atteindre  $-24\%$  pour le réseau CC.

	CS	CC
Module de compressibilité	-15%	-14%
Module de cisaillement	-13%	-24%

TAB. 4.4 – Récapitulatif des erreurs relatives commises par le modèle discret pour un contraste  $\frac{E^I}{E^M} = 50$  dans le cas où  $f = 80\%$ .

Afin d'améliorer le modèle pour le réseau CS, un modèle analytique prenant en compte la déformation des inclusions a été développé. Les estimations du modèle analytiques ont été comparées à celles obtenues par la méthode des éléments finis. Les résultats montrent que l'erreur relative est acceptable aussi bien pour les faibles que pour les fortes fractions volumiques d'inclusions. Les propriétés effectives du modèle analytique dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides ont été comparées aussi à celles prenant en compte les déformations des inclusions. Les résultats montrent que l'erreur relative est un peu inférieure quand le rapport entre la rigidité des inclusions et celle de la matrice augmente. Il a été conclu encore une fois que le modèle discret proposé doit être réservé au cas  $E^I/E^M > 100$ .

Cependant, afin de tenir compte de la déformation des grains, on pourrait s'inspirer du modèle analytique développé pour *CS* : On enrichit le modèle discret en introduisant des degrés de liberté supplémentaires décrivant une déformation homogène dans chaque grain. On aurait alors trois translations, trois rotations et six déformations associées à chaque grain, multipliant par deux le nombre de d.d.l.

# Chapitre 5

## Volume Élémentaire Représentatif en élasticité linéaire et en fatigue

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>128</b>
<b>5.2</b>	<b>Notion de <i>VER</i> et étude bibliographique</b>	<b>129</b>
5.2.1	Les conditions aux limites	129
5.2.2	Les modules élastiques apparents et effectifs	131
5.2.3	Détermination de la taille du <i>VER</i> par une approche statistique	133
<b>5.3</b>	<b>Détermination de la taille du <i>VER</i> en élasticité linéaire</b>	<b>139</b>
5.3.1	Génération des microstructures et conditions aux limites	139
5.3.2	Les modules élastiques homogénéisés	141
5.3.3	Résultats des simulations par le modèle discret	142
5.3.4	Application de l'approche utilisant les fonctions de corrélation	146
<b>5.4</b>	<b>Détermination de la taille du <i>VER</i> en fatigue</b>	<b>151</b>
5.4.1	Quelques rappels sur la fatigue	151
5.4.2	Prise en compte de la fatigue des interfaces inter-granulaires	154
5.4.3	Résultats des simulations pour la détermination de la taille du <i>VER</i>	158
5.4.4	Influence des paramètres de la loi de fatigue considérée	162
<b>5.5</b>	<b>Conclusions</b>	<b>165</b>

---

## 5.1 Introduction

Estimer les propriétés effectives des matériaux hétérogènes aléatoires à partir de la donnée des lois de comportement et de la distribution spatiale des différentes composantes de la microstructure est une tâche capitale dans la mécanique des matériaux aléatoires. Des méthodes d'homogénéisation ont été développées à cette égard. Parmi les méthodes les plus connues en élasticité linéaire, on cite le modèle des cylindres composites (Composite Cylinder Model, CCM) par Hashin (1962), la méthode auto-cohérente proposée par le Hill (1965), la méthode auto-cohérente généralisée (General Self-Consistent Method, GSCM) par Christensen et Lo (1969, 1979). D'autres sophistications et extensions aux cas non-linéaires ont été proposées par Willis (1981), Sanchez-Palencia et Zaoui (1987), Nemat-Nasser et Hori (1993) et plus récemment Suquet (1997), Castaneda et Suquet (1998), Bornert et al. (2001), Besson et al. (2001) et Jeulin et Ostoja-Starzewski (2001)

Par ailleurs, les mécaniciens des enrobés bitumineux supposent depuis longtemps que le comportement d'un matériau bitumineux peut être assimilé à celui d'un milieu homogène dont le comportement est défini par une loi macroscopique en contrainte-déformation. Ils considèrent généralement que ceci n'est vrai que si l'on s'intéresse à un volume comportant un nombre de grains suffisant. Vient alors un problème de définition : Qu'entend-on par "suffisant" ?

On introduit généralement dans ce cas la notion de Volume Élémentaire Représentatif (*VER*). Ce dernier a été largement étudié ces dernières années et des méthodes numériques et statistiques ont été développées afin de donner une définition quantitative du *VER*. (Sab (1992), Drugan et Willis (1996), Gusev (1997), Kanit et al. (2003), Kanit (2003), Sab et Nedjar (2004)).

Dans ce chapitre, le modèle proposé est appliqué à la détermination de la taille minimale du *VER* des matériaux bitumineux en élasticité linéaire et en fatigue. Pour ce faire, nous utilisons la méthode de Monte-Carlo pour estimer les propriétés effectives d'une microstructure générée par la tessellation de Poisson-Voronoi. Des simulations sont effectuées sur des tailles du *VER* croissantes. Pour chaque taille, plusieurs réalisations indépendantes sont considérées.

Le plan de ce chapitre est le suivant : Après une étude bibliographique sommaire sur le *VER* dans la section 2, vient l'application du modèle proposé à la détermination de la taille minimale du *VER* en élasticité linéaire (section 3) et en fatigue (section 4). Enfin la section 5 est dédiée à la conclusion.

## 5.2 Notion de *VER* et étude bibliographique

Lors de la détermination des propriétés du composite, il n'est pas raisonnable ni encore possible de prendre directement en compte l'influence de l'ensemble des hétérogénéités sur la réponse du composant. On cherche donc à remplacer le matériau hétérogène par un milieu dit *homogène équivalent* caractérisé par des propriétés mécaniques effectives. Ces dernières résultent de l'interaction des constituants entre eux au sein d'un volume élémentaire  $V$  du matériau considéré. L'objectif est donc, par exemple dans le cas des enrobés bitumineux, de déterminer aussi bien les modules d'élasticité effectifs que le nombre de cycles à la rupture du matériau à partir de la connaissance des propriétés élastiques et en fatigue des constituants, de leur fraction volumique et de leur arrangement.

On parle alors d'homogénéisation du composite. Le volume sur lequel les propriétés sont moyennées est appelé Volume Élémentaire Représentatif (*VER*).

Les propriétés effectives du milieu homogène équivalent recherchées peuvent être obtenues en résolvant un problème aux limites sur le volume élémentaire  $V$ , à condition que celui-ci soit suffisamment grand pour être représentatif de la microstructure du matériau hétérogène. Ce volume doit pour cela contenir suffisamment d'hétérogénéité. Si la distribution des constituants est périodique, le volume nécessaire se réduit à une cellule élémentaire permettant de reconstituer l'ensemble de la microstructure par simple translation (pavage). On soumet alors le volume retenu à des sollicitations élémentaires pour déterminer la réponse résultante.

### 5.2.1 Les conditions aux limites

Une difficulté réside dans le choix des conditions aux limites à appliquer au volume considéré pour imposer une déformation ou contrainte globale moyenne donnée (dite macroscopique). On mentionne ici trois types de conditions aux limites permettant d'imposer au volume considéré une déformation ou une contrainte moyenne :

#### 1. Conditions de déformation homogènes au contour :

$$\mathbf{u} = \underline{\underline{\mathbf{E}}}\cdot\mathbf{x} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial V \quad (5.1)$$

avec  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$  champ de tenseur de déformation donné et uniforme,  
 $\partial V$  contour du volume  $V$ ,  
 $\mathbf{u}$  déplacement du point matériel.



pas analytique. On a recours à des simulations numériques, par exemple, par la méthode des éléments finis.

Dans le cas élastique linéaire, la solution unique dépend linéairement du chargement macroscopique ( $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$  ou  $\underline{\underline{\Sigma}}$ ) imposé.

Pour les conditions de déformation homogène au contour et les conditions de périodicité, il existe donc un tenseur unique dit de concentration permettant d'exprimer la déformation en un point  $\underline{\mathbf{x}}$  au sein du *VER* en fonction de la déformation macroscopique appliquée.

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\underline{\mathbf{A}}}(\underline{\mathbf{x}}) : \underline{\underline{\mathbf{E}}} \quad (5.7)$$

De même, si le *VER* est soumis au tenseur de contraintes macroscopiques  $\underline{\underline{\Sigma}}$ , il existe un tenseur de localisation  $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$  donnant le tenseur des contraintes en chaque point du *VER* en fonction de la charge imposée :

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\underline{\mathbf{B}}}(\underline{\mathbf{x}}) : \underline{\underline{\Sigma}} \quad (5.8)$$

Les deux tenseurs de concentration  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$  et  $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$  vérifient :

$$\left\langle \underline{\underline{\mathbf{A}}} \right\rangle_V = \left\langle \underline{\underline{\mathbf{B}}} \right\rangle_V = \underline{\underline{\mathbf{1}}} \quad (5.9)$$

$\underline{\underline{\mathbf{1}}}$  est le tenseur identité d'ordre 4.

### 5.2.2 Les modules élastiques apparents et effectifs

Notons  $\underline{\underline{\mathbf{c}}}(\underline{\mathbf{x}})$  le tenseur de rigidité du matériau hétérogène qui occupe  $V$  et  $\underline{\underline{\mathbf{s}}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\underline{\mathbf{c}}}^{-1}(\underline{\mathbf{x}})$  le tenseur de souplesse.

Les modules de souplesse apparents  $\underline{\underline{\mathbf{S}}}$  et les modules de rigidité apparents  $\underline{\underline{\mathbf{C}}}$  s'expriment alors de la manière suivante :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\mathbf{E}}} = \underline{\underline{\mathbf{S}}}^{app} : \underline{\underline{\Sigma}} & \text{avec } \underline{\underline{\mathbf{S}}}^{app} = \left\langle \underline{\underline{\mathbf{B}}} : \underline{\underline{\mathbf{s}}}(\underline{\mathbf{x}}) \right\rangle_V \\ \underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\mathbf{C}}}^{app} : \underline{\underline{\mathbf{E}}} & \text{avec } \underline{\underline{\mathbf{C}}}^{app} = \left\langle \underline{\underline{\mathbf{A}}} : \underline{\underline{\mathbf{c}}}(\underline{\mathbf{x}}) \right\rangle_V \end{cases} \quad (5.10)$$

Les modules apparents  $\underline{\underline{\mathbf{C}}}^{app}$  et  $\underline{\underline{\mathbf{S}}}^{app}$  sont des moyennes pondérées par les tenseurs de concentration  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$  et  $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$  respectivement.

Les tenseurs d'élasticité apparents peuvent aussi être définis à l'aide d'une définition énergétique de la forme :

$$\begin{aligned} w &= \left\langle \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}(\mathbf{x}) : \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\mathbf{x}) \right\rangle_V \\ &= \underline{\underline{\mathbf{E}}} : \underline{\underline{\mathbf{C}}}^{app} : \underline{\underline{\mathbf{E}}} \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$= \underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}} : \underline{\underline{\mathbf{S}}}^{app} : \underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}} \quad (5.12)$$

Les modules apparents s'expriment alors de la façon suivante à l'aide des tenseurs de concentration  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$  et  $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$  précédents :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\mathbf{C}}}^{app}_{\underline{\underline{\mathbf{E}}}} = \left\langle \underline{\underline{\mathbf{A}}} : \underline{\underline{\mathbf{c}}}(\mathbf{x}) : \underline{\underline{\mathbf{A}}} \right\rangle_V \\ \underline{\underline{\mathbf{S}}}^{app}_{\underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}}} = \left\langle \underline{\underline{\mathbf{B}}} : \underline{\underline{\mathbf{s}}}(\mathbf{x}) : \underline{\underline{\mathbf{B}}} \right\rangle_V \end{cases} \quad (5.13)$$

On montre, à l'aide des relations de symétrie et du lemme de Hill-Mandel, que les définitions directe (Eq. 5.10) et énergétique (Eq. 5.13) sont équivalentes (cf. Sanchez-Palencia et Zaoui (1987)).

Lorsque le volume  $V$  est suffisamment grand, les modules apparents ne dépendent plus des conditions aux limites et ils coïncident avec les modules effectifs recherchés du matériau aléatoire (cf. Sab (1992)) :

$$\underline{\underline{\mathbf{C}}}^{app}_{\underline{\underline{\mathbf{E}}}} \xrightarrow{V \rightarrow +\infty} \underline{\underline{\mathbf{C}}}^{eff}_{\underline{\underline{\mathbf{E}}}} \quad (5.14a)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{S}}}^{app}_{\underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}}} \xrightarrow{V \rightarrow +\infty} \underline{\underline{\mathbf{S}}}^{eff}_{\underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}}} = \underline{\underline{\mathbf{C}}}^{eff-1}_{\underline{\underline{\mathbf{E}}}} \quad (5.14b)$$

Pour des volumes intermédiaires  $V$ , les modules effectifs  $\underline{\underline{\mathbf{C}}}^{eff}_{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}$  sont encadrés par la moyenne statistique des modules apparents comme suit (Huet (1990), Sab (1992)) :

$$\overline{\underline{\underline{\mathbf{S}}}^{app-1}_{\underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}}}} \leq \underline{\underline{\mathbf{C}}}^{eff}_{\underline{\underline{\mathbf{E}}}} \leq \overline{\underline{\underline{\mathbf{C}}}^{app}_{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}} \quad (5.15)$$

Les inégalités précédentes sont écrites au sens des formes quadratiques.

### 5.2.3 Détermination de la taille du VER par une approche statistique

Dans ces dernières années, la taille du VER a été étudiée et déterminée par des approches numériques et statistiques. En particulier, il a été montré dans Gusev (1997), Terada et al. (1998) et Kanit et al. (2003), que les propriétés linéaires effectives des matériaux aléatoires peuvent être calculées en utilisant la méthode de Monte-Carlo sur des petites tailles du VER avec des conditions aux limites périodiques, à condition que le nombre de réalisations indépendantes soit suffisant.

Les modules effectifs peuvent donc être calculés en moyennant les coefficients apparents obtenus avec des conditions aux limites périodiques sur  $N$  réalisations indépendante  $(Z_1, Z_2, \dots, Z_N)$  de la microstructure dans un volume  $V$ . Asymptotiquement, pour  $N$  tendant vers l'infini, l'espérance du module  $Z$ ,  $E(Z)$ , se trouve dans l'intervalle  $[\bar{Z}_N - \varepsilon_r \bar{Z}_N, \bar{Z}_N + \varepsilon_r \bar{Z}_N]$  avec une probabilité de 95% où  $\bar{Z}_N$  et  $\sigma_N^2$  sont, respectivement, la moyenne arithmétique et la variance de  $(Z_1, Z_2, \dots, Z_N)$  et  $\varepsilon_r = 1.96 \frac{\sigma_N}{\bar{Z}_N \sqrt{N}}$ .

Inversement, pour une précision fixée  $\varepsilon_r$ , le nombre de réalisations nécessaires est déterminé en fonction de  $\sigma_N^2$  et de  $\varepsilon_r$  ( $N = \sigma_N^2 \left( \frac{1.96}{\bar{Z}_N \varepsilon_r} \right)^2$ ).

D'une part, une approche basée sur la notion de la *portée integrale* (integral range), a été proposée dans Kanit et al. (2003) pour l'estimation de la variance du module  $Z$  ( $\sigma_N^2$ ), et donc la détermination du nombre de réalisations nécessaires pour  $\varepsilon_r$  fixée.

D'autre part, un critère basé sur les fonctions de corrélation a été proposé par Sab et Nedjar (2004) pour déterminer si  $V$  est un VER ou non dans le cas des conditions périodiques.

Dans la suite, nous présentons un aperçu des deux approches.

#### 5.2.3.1 Rappel sur la covariance et notions de "portée intégrale"

La dispersion géométrique d'une microstructure aléatoire peut-être décrite par une fonction traduisant l'état de deux points  $x_1$  et  $x_2$  séparés par une distance  $h$  comme suit (Matheron (1971), Serra (1982), Jeulin (2001)) :

$$C_X(h) = \int \chi_X(x) \chi_X(x+h) dx = Mes(X \cap X_{-h}) \quad (5.16)$$

où  $\chi_X$  est la fonction indicatrice de la phase  $X$  :

$$\chi_X(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in X \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$C_X$  est appelée covariance de  $X$ .

Pour  $h$  tendant vers l'infini, la covariance tend vers le carré du volume occupé par la phase  $X$  ( $V_V(X)$ ) :

$$\lim_{h \rightarrow \infty} C_X(h) = (V_V(X))^2$$

Dans le cas où cette limite est atteinte pour une valeur finie de  $h = A$ , les points de la microstructure séparés par une distance supérieure à  $A$  ne sont plus corrélés (Matheron (1971), Serra (1982), Jeulin (2001)). Cette distance peut représenter le support de la covariance (ou encore la gamme dans laquelle la variance est non-nulle).

Il est aussi possible de définir un intervalle  $[0, A_n]$  qui contient des informations statistiques assez représentatifs de la microstructure. cette gamme est appelé *la portée integrale* (integral range) (Matheron (1971), Jeulin (2001), Kanit (2003) Kanit et al. (2003)). Dans l'espace  $\mathbb{R}^n$ ,  $A_n$  est défini comme suit :

$$A_n = \frac{1}{C_X(0) - C_X(0)^2} \int_{\mathbb{R}^n} (C_X(h) - C_X(0)^2) dh \quad (5.16)$$

Cette notion permet de prédire la variabilité des propriétés du matériau en fonction de la géométrie d'une partie de la microstructure. Par exemple, la variance  $\sigma^2(V_V^*)$  de la fraction volume de la phase  $X$ ,  $V_V^* = \text{Mes}(X \cup V) / V$  dans une réalisation d'une microstructure de volume  $V$ , de covariance  $C_X$ , est donnée par (Matheron (1971)) :

$$\sigma^2(V_V^*) = \frac{1}{V^2} \int_V \int_V (C_X(x-y) - P^2) dx dy \quad (5.17)$$

$P$  étant la fraction volumique de la microstructure "infinie".

Pour un volume  $V$  suffisamment grand ( $V \gg A_n$ ),  $\sigma^2(V_V^*)$  s'exprime en fonction de  $A_n$  :

$$\sigma^2(V_V^*) = \frac{P(1-P)A_n}{V} \quad (5.18)$$

Ainsi, statistiquement, la microstructure  $V$  est équivalente à  $N \simeq V/A_n$  parties non-corrélées.

Concernant la variance des propriétés élastiques linéaires,  $\sigma_Z^2(V)$ , Kanit et al. (2003) ont proposé une loi de puissance :

$$\sigma_Z^2(V) = \sigma_Z^2 \left( \frac{A_3}{V} \right)^\alpha \quad (5.19)$$

où  $\alpha$  est un paramètre différent de 1,  $\sigma_Z^2$  est la variance ponctuelle de  $Z(x)$  et  $A_3$  le rang intégrale de la variable aléatoire  $Z(x)$  (sur différents réalisations). Dans le cas des matériaux contenant deux phases avec deux propriétés élastiques  $Z_1$  et  $Z_2$ ,  $\sigma_Z^2$  est donné par (Kanit et al. (2003)) :

$$\sigma_Z^2 = P(1 - P) (Z_1 - Z_2)^2 \quad (5.20)$$

Dans le cas où l'une des deux phases est infiniment rigide, la relation précédente (Eq. 5.20) ne peut plus s'appliquer.

### 5.2.3.2 Les fonctions de corrélation

Afin d'expliquer le fait que les propriétés linéaires effectives des matériaux aléatoires puissent être déterminées sur des petites tailles soumises à des conditions aux limites périodiques, Sab et Nedjar (2004) ont proposé d'utiliser le cadre théorique adapté à l'homogénéisation des milieux aléatoires. Ils ont en plus déduit un critère de convergence basé sur l'analyse des fonctions de corrélation.

Le milieu infini est décrit par un espace de probabilité  $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$  où  $\Omega$  représente l'ensemble des réalisations possibles  $\omega \in \Omega$ ,  $\tau_{\mathbf{t}}\omega$  est la translatée de  $\omega$  par  $\mathbf{t}$ . Pour assurer l'homogénéité statistique du milieu, on suppose que  $\tau_{\mathbf{t}}\omega$  a les deux propriétés suivantes :

$$\tau_0 = \text{Identité}, \quad \forall \mathbf{t}, \mathbf{u} \in \mathbb{R}^d, \quad \tau_{\mathbf{t}} \circ \tau_{\mathbf{u}} = \tau_{\mathbf{t}+\mathbf{u}} \quad (5.21 \text{ a})$$

$$\forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^d, \forall A \in \mathcal{A}, \mathbb{P}(A) = \mathbb{P}(\tau_{\mathbf{t}}A), \quad \tau_{\mathbf{t}} = \{\omega, \tau_{-\mathbf{t}}\omega \in A\} \quad (5.21 \text{ b})$$

À chaque variable aléatoire réelle  $X : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$  est associé le processus statistiquement homogène (s.h.)  $\tilde{X}$  défini par :

$$\forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^d, \forall \omega \in \Omega, \tilde{X}(\omega, \mathbf{t}) = X(\tau_{-\mathbf{t}}\omega) = \tilde{X}(\tau_{-\mathbf{t}}\omega, 0) \quad (5.22)$$

La fonction de corrélation entre deux processus s.h. de carré intégrable est donnée par :

$$\forall Y, Z \in L^2(\Omega), \langle YZ \rangle(\mathbf{t}) = \mathbb{E} \left( \tilde{\delta Y}(\omega, 0) \tilde{\delta Z}(\omega, \mathbf{t}) \right), \quad \delta X = X - \mathbb{E}X \quad (5.23)$$

$\mathbb{E}$  étant l'opérateur espérance mathématique.

L'élasticité du milieu est décrite par  $\tilde{\mathbf{c}}(\omega, \mathbf{t})$ , le processus s.h. des tenseurs de rigidité.

Pour un bi-phasé  $\mathbf{c}(\omega)$  est défini come suit :

$$\mathbf{c}(\omega) = \chi(\omega) \mathbf{c}^I + (1 - \chi(\omega)) \mathbf{c}^{II}$$

où  $\tilde{\chi}(\omega, \mathbf{t}) = \chi(\tau_{-\mathbf{t}}\omega)$  est la fonction caractéristique de la phase  $I$  :

$$\tilde{\chi}(\omega, \mathbf{t}) = \chi(\tau_{-\mathbf{t}}\omega) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{t} \text{ est dans la phase } I \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$S_k$  est la probabilité de trouver  $\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_k$  dans la phase  $I$  (cf. Eq. 5.23) :

$$S_k(\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_k) = \mathbb{E} \tilde{\chi}(\omega, \mathbf{t}_1) \cdots \tilde{\chi}(\omega, \mathbf{t}_k) \quad (5.23)$$

La détermination du tenseur d'élasticité homogénéisé  $\mathbf{C}^{\text{hom}}$  se fait par la résolution du problème auxiliaire (cf. Eqs. 5.24-5.25) :

$$\sigma \in \mathcal{S}, \mathbf{e}^* \in \mathcal{K}^*, \sigma(\omega) = \mathbf{c}(\omega) : (\mathbf{e}^*(\omega) + \mathbf{E}) \text{ a.s., } \mathbb{E}\sigma = \mathbf{C}^{\text{hom}} : \mathbf{E} \quad (5.24)$$

où  $\mathbf{E}$  est la déformation macroscopique ;  $\mathcal{K}^*$ , l'ensemble de champs de déformation s.h avec une espérance nulle, et  $\mathcal{S}$ , l'ensemble de champs de contrainte s.h statiquement compatibles, est défini par :

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^* &= \{ \mathbf{e}^* = (e_{ij}^*), e_{ij}^* = e_{ji}^* \in L^2(\Omega), \mathbb{E}e_{ij}^* = 0, \tilde{\mathbf{e}}^*(\omega, \mathbf{t}) \text{ compatible a.s.} \} \\ \mathcal{S} &= \{ \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_{ij}), \sigma_{ij} = \sigma_{ji} \in L^2(\Omega), \operatorname{div} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\omega, \mathbf{t}) = 0 \text{ a.s.} \} \end{aligned} \quad (5.25)$$

En introduisant un milieu de comparaison homogène,  $\mathbf{C}^0$ , le tenseur de polarisation  $\mathbf{p} = \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{C}^0 : (\mathbf{e}^* + \mathbf{E})$  est solution de (5.26) :

$$\mathbf{p} = (\mathbf{c} - \mathbf{C}^0) : (-\Gamma^0 * \delta \mathbf{p} + \mathbf{E}) \quad (5.26)$$

et rend stationnaire la fonctionnelle (5.27). Voir Willis (1977).

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}') = \mathbb{E} \left( 2\mathbf{p}' : \mathbf{E} - \mathbf{p}' : (\mathbf{c} - \mathbf{C}^0)^{-1} : \mathbf{p}' - \mathbf{p}' : \Gamma^0 * \mathbf{p}' \right) \quad (5.27)$$

Ici, l'opérateur  $\Gamma^0$  est défini par (5.28) :

$$(-\Gamma^0 * \mathbf{p}') \in \mathcal{K}^*, (\mathbf{C}^0 : (-\Gamma^0 * \mathbf{p}') + \mathbf{p}') \in \mathcal{S} \quad (5.28)$$

Il s'exprime en fonction du noyau de Green du milieu de comparaison lorsque les corrélations  $\langle c_{ijmn} p_{kl} \rangle(\mathbf{t})$  sont dans  $L^2(\mathbb{R}^d)$ .

Dans ce cas,  $\mathbf{C}^{\text{hom}}$  est aussi donné par (5.29-5.30).

$$\mathbf{C}^{\text{hom}} : \mathbf{E} = \mathbb{E} \mathbf{c} : \mathbf{E} - \mathbb{E} (\delta \mathbf{c} : \Gamma^0 * \delta \mathbf{p}) \quad (5.29)$$

$$[\mathbb{E} (\delta \mathbf{c} : \Gamma^0 * \delta \mathbf{p})]_{ij} = \int_{\mathbf{t} \in \mathbb{R}^d} \Gamma_{mnkl}^0(-\mathbf{t}) \langle c_{ijmn} p_{kl} \rangle(\mathbf{t}) \, d\mathbf{t} \quad (5.30)$$

En fait,  $-\mathbf{C}^0 : \mathbf{e}^*$  peut remplacer  $\delta \mathbf{p}$  dans (5.29-5.30) de manière équivalente.

On se restreint dans la suite aux matériaux bi-phasés. L'idée de la périodisation est de construire une suite  $(\Omega^L, \mathcal{A}^L, \mathbb{P}^L)_{L>0}$  d'espaces de probabilité statistiquement homogènes sur le sous-ensemble  $\Omega^L \subset \Omega$  des réalisations  $L$ -périodiques, c'est à dire

que (cf. Eq. 5.31) :

$$\omega^L \in \Omega^L \iff \tau_{\mathbf{u}} \omega^L = \omega^L, \forall \mathbf{u} \in \{L\mathbf{e}_1, \dots, L\mathbf{e}_d\} \quad (5.31)$$

où  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d\}$  est la base canonique de  $\mathbb{R}^d$ .

Cette suite doit vérifier (cf. Eq. 5.32) :

$$\begin{aligned} \forall k, \forall \mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_k, S_k^L(\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_k) &= \mathbb{E}^L \tilde{\chi}(\omega^L, \mathbf{t}_1) \cdots \tilde{\chi}(\omega^L, \mathbf{t}_k), \\ \lim_{L \rightarrow +\infty} S_k^L(\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_k) &= S_k(\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_k) \end{aligned} \quad (5.32)$$

Le tenseur effectif  $\mathbf{C}^{\text{hom},L}$  relatif au milieu périodisé est donné par (cf. Eq.5.33) :

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^L(\omega^L) &= (\mathbf{c}(\omega^L) - \mathbf{C}^0) : (-\Gamma^{0,L} * \delta \mathbf{p}^L + \mathbf{E}) \\ \mathbf{C}^{\text{hom},L} : \mathbf{E} &= \mathbb{E}^L \mathbf{c} : \mathbf{E} - \int_{\mathbf{t} \in V^L} \Gamma_{mnkl}^{0,L}(-\mathbf{t}) \langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle(\mathbf{t}) \, d\mathbf{t} \end{aligned} \quad (5.33)$$

où l'opérateur  $\Gamma^{0,L}$  est celui de l'homogénéisation périodique classique sur la cellule de base cubique de taille  $L$ ,  $V^L$ .

Introduisons  $\langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle^\infty$  comme suit :

$$\langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle^\infty(\mathbf{t}) = \begin{cases} \langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle(\mathbf{t}) & \forall \mathbf{t} \in V^L \\ 0 & \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^d \setminus V^L \end{cases} \quad (5.34)$$

Une analyse de Fourier (Suquet (1990)) montre que l'opérateur  $\Gamma^{0,L}$  a la propriété suivante :

$$\int_{\mathbf{t} \in V^L} \Gamma_{mnkl}^{0,L}(-\mathbf{t}) \langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle(\mathbf{t}) \, d\mathbf{t} = \int_{\mathbf{t} \in \mathbb{R}^d} \Gamma_{mnkl}^0(-\mathbf{t}) \langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle^\infty(\mathbf{t}) \, d\mathbf{t} \quad (5.35)$$

Comparant les équations (5.29-5.30) et (5.33-5.35), on s'attend à la convergence suivante :

$$\langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle^\infty(\mathbf{t}) \xrightarrow{L \rightarrow +\infty} \langle c_{ijmn} p_{kl} \rangle(\mathbf{t}) \text{ dans } L^2(\mathbb{R}^d) \quad (5.36)$$

et à la convergence de  $\mathbf{C}^{\text{hom},L}$  vers  $\mathbf{C}^{\text{hom}}$  pour  $L$  croissant.

$$\mathbf{C}^{\text{hom},L} \xrightarrow{L \rightarrow +\infty} \mathbf{C}^{\text{hom}}$$

Autrement dit, à la convergence  $\langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle^\infty$  et  $\langle c_{ijmn} p_{kl} \rangle$  doivent coïncider. Une condition nécessaire est que la fonction  $\langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle$  présente un plateau sur le bord du volume  $V^L$ . On obtient ainsi le critère suivant à la convergence :

$$\int_{\mathbf{t} \in \mathbb{R}^d} \Gamma_{mnkl}^{0,L}(-\mathbf{t}) \langle c_{ijmn} p_{kl}^L \rangle(\mathbf{t}) \, d\mathbf{t} = \mathbb{E} \mathbf{c} : \mathbf{E} - \mathbf{C}^{\text{hom},L} : \mathbf{E} \quad (5.36)$$

$$\approx \int_{\mathbf{t} \in \mathbb{R}^d} \Gamma_{mnkl}^0(-\mathbf{t}) \langle c_{ijmn} p_{kl} \rangle^\infty(\mathbf{t}) \, d\mathbf{t} \quad (5.37)$$

## 5.3 Détermination de la taille du *VER* en élasticité linéaire

Dans cette section, le modèle discret proposé est utilisé pour la détermination de la taille minimale du *VER*. Pour ce faire, les propriétés apparentes sont étudiées en fonction de la taille de la cellule élémentaire. Les microstructures considérées sont générées par la tessellation de Voronoï d'un ensemble de points. Le processus de Poisson est utilisée pour la génération des points en  $3D$ .

Nous utilisons la méthode de Monte-Carlo pour estimer les propriétés apparentes pour chaque taille du *VER*. Ainsi, plusieurs réalisations sont considérées pour chaque taille. Comme l'indique la méthode de Monte-Carlo, les propriétés apparentes sont ensuite calculées en moyennant les modules apparents sur les différentes réalisations.

### 5.3.1 Génération des microstructures et conditions aux limites

#### 5.3.1.1 Génération des microstructures

Des points en  $3D$  dans une cellule de taille  $V$  sont générées par le processus de Poisson. La tessellation périodique de Voronoï est appliquée à cette ensemble de points. Ainsi, une microstructure aléatoire périodisée formée par les régions de Voronoï est

générée (cf. Fig. 5.1). La fraction volumique locale des inclusions est supposée uniforme (égale à 75% dans notre cas).

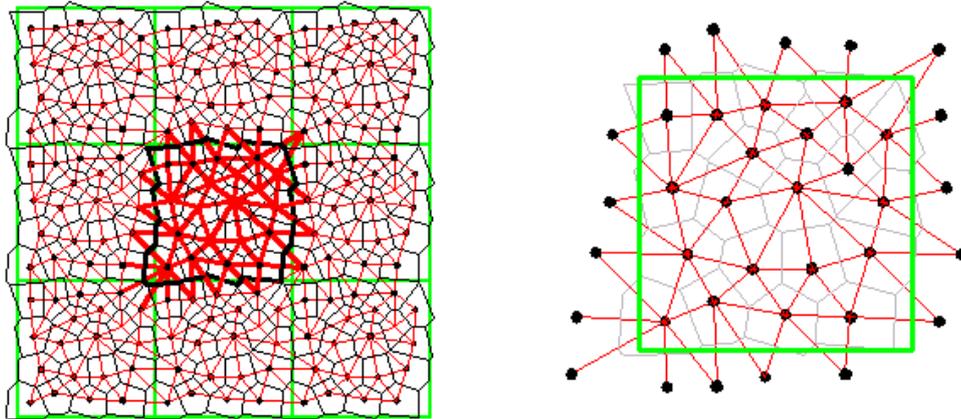


FIG. 5.1 – Illustration de la microstructure aléatoire périodisée en 2D.

### 5.3.1.2 Conditions aux limites

Nous avons vu au début de ce chapitre que trois chargements sont possibles pour la détermination des modules apparents des milieux continus aléatoires, à savoir conditions de périodicité et les deux conditions de contrainte ou de déformation homogène au contour.

Concernant les réseaux discrets ayant une cinématique de translations et de rotations, les chargements imposés peuvent être soit en terme de translations et/ou rotations, ce qui traduit une déformation homogène imposée, ou soit encore en terme de forces et/ou moments imposés aux nœuds, ce qui traduit une contrainte homogène imposée.

Nous nous limitons ici au cas où les translations et/ou rotations sont imposées sur le bord. Dans ce cas, trois conditions aux limites sont possibles.

Notons  $E^0 = \{p^1, \dots, p^n\}$  l'ensemble de  $n$  particules en interaction,  $\underline{\mathbf{x}}^i$  les coordonnées du centre de la particule  $p^i$  et  $(\underline{\mathbf{a}}_1, \underline{\mathbf{a}}_2, \underline{\mathbf{a}}_3)$  trois vecteurs de translation permettant de reconstituer la microstructure "infinie" par répétition spatiale de  $E^0$ . Pour un chargement macroscopique en déformation,  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$ , les trois conditions aux limites évoquées précédemment peuvent être écrites de la manière suivante :

### 1. Chargement périodique :

$$\forall p^i \in E^0 \begin{cases} \underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}^i + \underline{\mathbf{a}}_j) - \underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}^i) &= \underline{\underline{\mathbf{E}}}. \underline{\mathbf{a}}_j & (5.38a) \\ \underline{\underline{\varphi}}(\underline{\mathbf{x}}^i + \underline{\mathbf{a}}_j) - \underline{\underline{\varphi}}(\underline{\mathbf{x}}^i) &= 0 & (5.38b) \end{cases}$$

Dans la suite ce chargement sera noté *PERIODIC*.

### 2. Chargement cinématique uniforme en translation : Les translations des points $\underline{\mathbf{x}}^i$ se trouvant sur les bords de la cellule de calcul sont imposées.

$$\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}^i) = \underline{\underline{\mathbf{E}}}. \underline{\mathbf{x}}^i \quad \forall p^i \in \{ \text{Bord de } E^0 \} \quad (5.39)$$

Un point  $p^i$  est sur le bord de  $E^0$  si, et seulement si, il est connecté à un point  $p^j$  n'appartenant pas à  $E^0$ .

Dans la suite ce chargement sera noté *KUBC1*.

### 3. Chargement cinématique uniforme en translations et en rotations : Les translations et les rotations des points $\underline{\mathbf{x}}^i$ se trouvant sur le bord de la cellule de calcul sont imposées.

$$\forall p^i \in \{ \text{Bord de } E^0 \} \begin{cases} \underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}^i) &= \underline{\underline{\mathbf{E}}}. \underline{\mathbf{x}}^i & (5.40a) \\ \underline{\underline{\varphi}}(\underline{\mathbf{x}}^i) &= 0 & (5.40b) \end{cases}$$

Dans la suite ce chargement sera noté *KUBC2*.

## 5.3.2 Les modules élastiques homogénéisés

Pour chaque taille fixée,  $V$ , nous avons utilisé la méthode de Monte-Carlo pour estimer les modules élastiques apparents. Ainsi plusieurs réalisations indépendantes doivent être envisagées. Rappelons que, selon la méthode de Monte-Carlo, l'espérance

du module  $Z$ ,  $E(Z)$ , se calcul à partir de la moyenne arithmétique de  $N$  réalisations indépendante de  $Z$ . Pour  $N$  tendant vers l'infini, et avec une probabilité de 95%,  $E(Z)$  est encadré par :

$$E(Z) \in [\bar{Z}_N - \varepsilon_N \bar{Z}_N, \bar{Z}_N + \varepsilon_N \bar{Z}_N]$$

où :

$$\begin{aligned}\bar{Z}_N &= \frac{1}{N} (Z_1 + \dots + Z_N) \\ \sigma_N^2 &= \frac{1}{N-1} \sum_i (Z_i - \bar{Z}_N)^2 \\ \varepsilon_N &= 1.96 \frac{\sigma_N}{\bar{Z}_N \sqrt{N}}\end{aligned}$$

Dans notre exemple, l'erreur relative  $\varepsilon_N$  est fixée à 0.5%, le coefficient de Poisson et le module d'Young de la matrice sont, respectivement fixés à 0.25 et 1. Le nombre moyen de point par unité de volume (i.e. l'intensité du processus de poisson) est fixé à  $\rho = 0.15$ . La *FVL* des inclusions est supposé uniforme et est fixée à 75%.

A priori, le comportement macroscopique des matériaux aléatoires occupant un volume  $V$  dont la taille est "petite" n'est pas isotrope. En revanche, il est clair que les microstructures aléatoires périodiques considérées possèdent une symétrie matérielle cubique. Ainsi, tout comme les réseaux réguliers *CS* et *CC*, trois modules élastiques sont à déterminer : le module de compressibilité ( $k^{Hom}$ ), le module de cisaillement ( $\mu^{Hom}$ ) et un coefficient d'anisotropie cubique ( $\delta\mu^{Hom}$ ).

Pour chaque type de chargement considéré, trois déformations macroscopiques sont nécessaires pour la détermination des modules apparents  $k^{Hom}$ ,  $\mu^{Hom}$  et  $\delta\mu^{Hom}$ .

Le nombre de réalisations indépendantes pour chaque volume (ce qui est équivalent au nombre moyen de particules) est tracé sur la figure 5.2. Ce nombre est choisi de manière à ce que l'erreur relative sur les modules apparents,  $\varepsilon_N$ , ne dépasse pas 0.5%. À partir de cette figure, on constate que le nombre de réalisations nécessaires diminue lorsque la taille du *VER* augmente.

### 5.3.3 Résultats des simulations par le modèle discret

#### 5.3.3.1 Les propriétés élastiques moyennes

Afin de vérifier l'isotropie, nous avons tracé sur la figure 5.3 la variation de la valeur moyenne et de l'intervalle de confiance (dispersion) du coefficient d'anisotropie cubique normalisé ( $\frac{\delta\mu^{Hom}}{\mu^M}$ ) en fonction de la taille du *VER* pour les trois chargements *PERIODIC*, *KUBC1* et *KUBC2*.

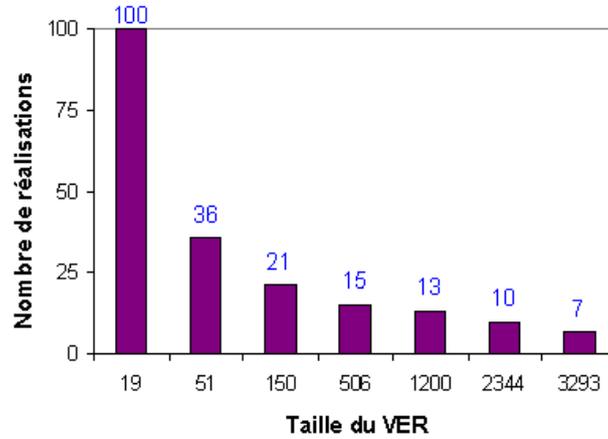


FIG. 5.2 – Nombre de réalisations en fonction du nombre moyen de particule  $\rho|V|$  (équivalent à la taille du *VER*) pour la détermination des modules élastiques apparents.

Il est clair que la valeur moyenne de  $\frac{\delta\mu^{Hom}}{\mu^M}$  est proche de zéro pour les trois type de chargement. Toutefois, la dispersion des résultats est d'autant plus importante que le volume est petit.

Ceci implique que les modules élastiques homogénéisés moyens sont isotropes quelque soit la taille du *VER*.

Concernant les modules élastiques  $k^{Hom}$  et  $\mu^{Hom}$ , les variations de la valeur moyenne et de l'intervalle de confiance en fonction de la taille du *VER* sont tracées sur les figures 5.4 et 5.5, respectivement pour  $k^{Hom}$  et  $\mu^{Hom}$ .

En raison de l'hypothèse d'uniformité des fractions volumiques locales des inclusions ( $FVL^i = 75\%$ ,  $\forall i$ ), la valeur du module de compressibilité homogénéisé est presque constante pour les trois conditions aux limites. Aussi, la dispersion est quasi nulle et l'expression de  $k^{Hom}$  établie pour le réseau *CS* et *CC* (cf. Eqs. 4.28a et 4.29a du chapitre 4) reste valable dans ce cas.

La figure 5.5 représente le module de cisaillement. Elle montre que la dispersion des valeurs moyennes diminue lorsque la taille du *VER* augmente pour les trois conditions aux limites. Les valeurs moyennes avec les conditions aux limites *PERIODIC* sont presque constantes (avec une erreur relative inférieure à 1%) pour une taille du *VER* supérieure à 19 particules.

D'autre part, les valeurs moyennes obtenues avec les conditions aux limites *KUBC1* et *KUBC2* dépendent fortement de la taille du *VER*. Cependant, elles

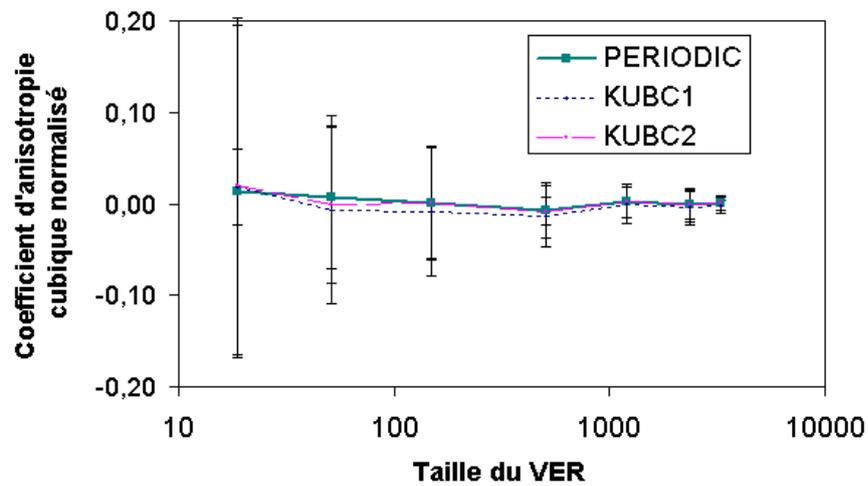


FIG. 5.3 – La valeur moyenne et l'intervalle de confiance du **coefficient d'anisotropie cubique normalisé** ( $\frac{\delta\mu^{Hom}}{\mu^M}$ ) en fonction de la taille du volume élémentaire.

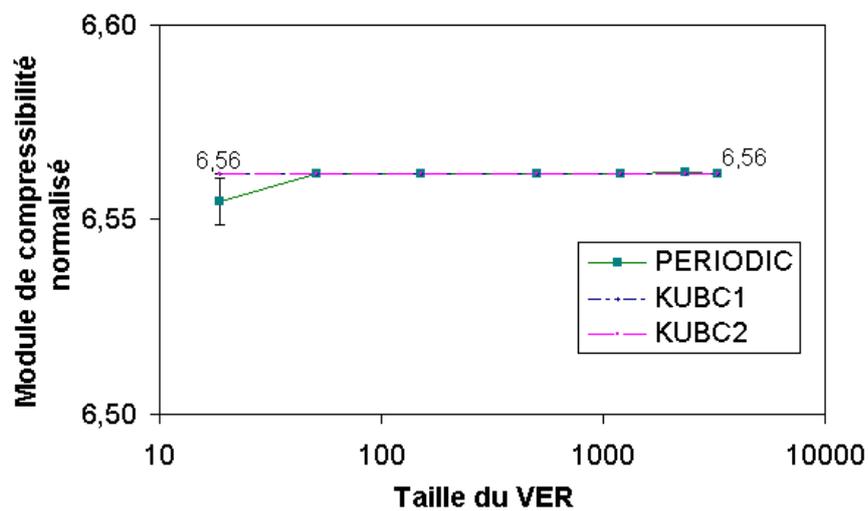


FIG. 5.4 – La valeur moyenne et l'intervalle de confiance du **module de compressibilité normalisé** ( $\frac{k^{Hom}}{k^M}$ ) en fonction de la taille du volume élémentaire.

convergent vers la valeur obtenue avec *PERIODIC*.

Du fait que les rotations sont libres avec *KUBC1*, le module de cisaillement obtenu avec *KUBC2* est une borne supérieure de celui obtenu avec *KUBC1*.

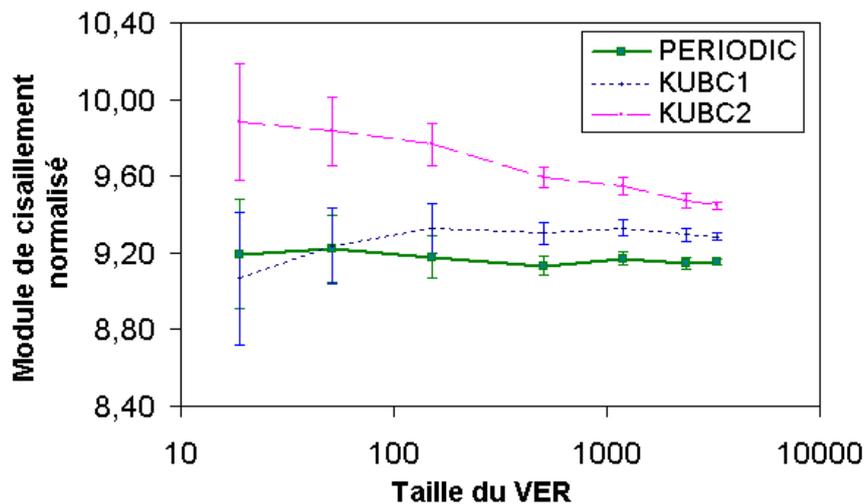


FIG. 5.5 – La valeur moyenne et l'intervalle de confiance du **module de cisaillement normalisé** ( $\frac{\mu^{Hom}}{\mu^M}$ ) en fonction de la taille du volume élémentaire.

### 5.3.3.2 Dispersion des modules élastiques effectifs

Tout comme Kanit et al. (2003), dans cette section, la dispersion des résultats est étudiée en fonction de la taille du *VER*.

Pour la fraction volumique, nous avons vu dans la section 5.2.3.1 que la dispersion varie linéairement en fonction de l'inverse de la taille du *VER* (cf. Eq 5.18) :

$$\sigma^2(V_V^*) = \frac{P(1-P)A_n}{V}$$

En ce qui nous concerne, la fraction volumique locale des inclusions est supposée uniforme dans nos simulations. De ce fait, il n'y a pas d'aléa sur la fraction volumique globale.

Nous nous intéressons seulement à la variation de la dispersion sur les propriétés effectifs du matériau. Kanit et al. (2003) ont proposé la loi en puissance reliant la

dispersion sur le module linéaire effective  $Z$  et l'inverse de la taille du  $VER$  décrite dans les équations 5.19 et 5.20. Dans notre cas, la rigidité des inclusions étant infinie, cette loi ne peut s'appliquer.

En fait, les propriétés apparentes moyennées sur suffisamment de réalisations avec les conditions aux limites périodiques sont très proches des valeurs asymptotiques à partir d'une taille du  $VER$  supérieure à 19 grains. On peut supposer qu'à partir de cette taille critique, la distribution des contraintes dans l'échantillon est la réalisation du même processus aléatoire quelque soit le volume considéré. Dans ce cas, tout comme la dispersion sur les fractions volumiques (cf. Eq. 5.17), la dispersion sur les modules devraient varier linéairement en fonction de l'inverse du volume  $V$ .

Pour le vérifier, nous avons tracé sur la figure 5.6 la variation de la dispersion du module de cisaillement en fonction de la taille du  $VER$ . Il est clair que la dispersion varie linéairement en  $\frac{1}{V}$  avec un coefficient de détermination,  $R^2$  (au sens des moindres carrés), égale à 0.9992.

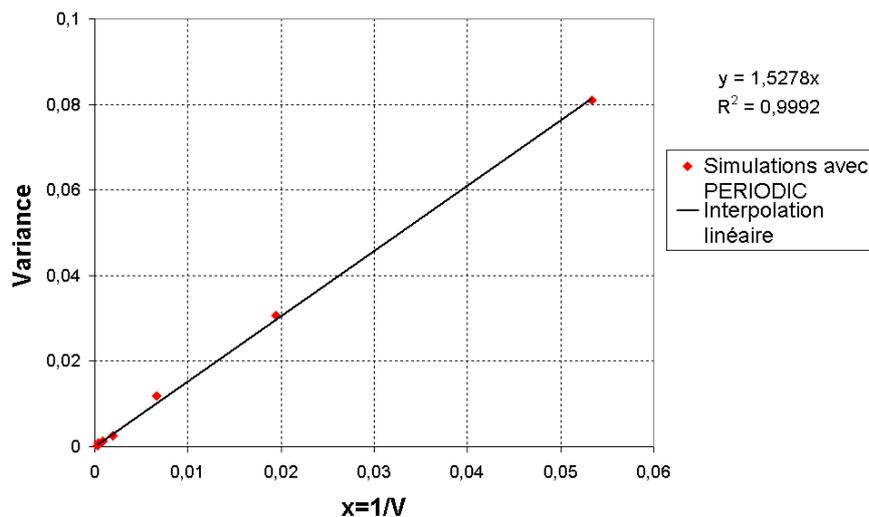


FIG. 5.6 – Variation de la variance ( $\sigma_{\mu}^2$ ) sur le module de cisaillement normalisé en fonction de l'inverse de taille du  $VER$ .

### 5.3.4 Application de l'approche utilisant les fonctions de corrélation

Dans cette section, nous utilisons l'approche proposée par Sab et Nedjar (2004) (cf. §5.2.3.2) pour l'estimation de la taille du  $VER$  en élasticité linéaire. On se restreint

au cas où le chargement périodique est en traction suivant l'axe  $x$  ( $\underline{\mathbf{E}} = \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$ ).

Notons  $V_m$  et  $V_i$  le volume occupé, respectivement, par la matrice et les inclusions,  $V = V_i + V_m$  le total du *VER* et  $f_m$  (resp.  $f_i = 1 - f_m$ ) la fraction volumique de la matrice (resp. des inclusions). D'après l'équation 5.23, la fonction de corrélation entre la déformation  $\varepsilon_{11}$  et la fonction indicatrice de la matrice  $\chi_m$  est définie comme suit :

$$\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle (\mathbf{h}) = \frac{1}{V} \int_V (\chi_m(\mathbf{x}) - f_m) (\varepsilon_{11}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - \langle \varepsilon_{11} \rangle_V) d\mathbf{x} \quad (5.39)$$

$$= \frac{1}{V} \int_V \chi_m(\mathbf{x}) \varepsilon_{11}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) d\mathbf{x} - f_m \langle \varepsilon_{11} \rangle_V \quad (5.40)$$

Pour  $\mathbf{h} = 0$  on a :

$$\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle (0) = \frac{1}{V} \int_V \chi_m(\mathbf{x}) \varepsilon_{11}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (5.41)$$

$$= f_m \langle \varepsilon_{11} \rangle_{V_m} - f_m \langle \varepsilon_{11} \rangle_V \quad (5.42)$$

$$(5.43)$$

Or, pour une déformation macroscopique imposée  $\underline{\mathbf{E}} = \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$ , on sait que :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{11} \rangle_V &= (1 - f_i) \langle \varepsilon_{11} \rangle_{V_m} + f_i \langle \varepsilon_{11} \rangle_{V_i} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (5.44)$$

Les inclusions étant infiniment rigides, ainsi  $\langle \varepsilon_{11} \rangle_{V_i} = 0$ . Il vient donc :

$$\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle (0) = 1 - f_m = f_i \quad (5.45)$$

Pour  $\mathbf{h}$  tendant vers l'infini (i.e  $|\mathbf{h}| \rightarrow \infty$ ) on a :

$$\lim_{|\mathbf{h}| \rightarrow \infty} \langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle = 0 \quad (5.46)$$

$\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$  sera étudiée pour trois tailles du *VER* (cf. Tab. 5.1). La fraction volumique des inclusions est fixée à 90%. Le module d'Young et le coefficients de Poisson de la

Nombre moyen de sites	Diamètre moyen ( $D$ )	$\frac{L}{D}$	Nombre de réalisations
4	2.335	1.285	300
19	2.335	2.141	100
150	2.335	4.282	20

TAB. 5.1 – Nombre de réalisations pour chaque taille du *VER* considérée (intensité du processus de Poisson  $\rho = 0.15$ ).

matrice sont, respectivement, fixés à 1 et 0.25.

Rappelons que les déformations à l'intérieur des inclusions sont nulles du fait que ces dernières sont infiniment rigides. La déformation d'un point  $\underline{\mathbf{x}}$  à l'intérieur de l'interface  $c$ ,  $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^c(\underline{\mathbf{x}})$ , s'exprime en fonction du saut du déplacement  $[[\underline{\mathbf{u}}]]^c(\underline{\mathbf{x}})$  comme suit (cf. Eq. 3.16) :

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^c(\underline{\mathbf{x}}) = \frac{\underline{\mathbf{n}}^c \otimes^S [[\underline{\mathbf{u}}]]^c(\underline{\mathbf{x}})}{e^c}$$

où  $e^c$  est l'épaisseur de l'interface  $c$ , et  $\underline{\mathbf{n}}^c$  est la normale à  $c$ .

Il est possible d'utiliser les techniques de transformée de Fourier rapide pour le calcul de  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$ . Cependant, vue la forte compacité des inclusions (90%), les épaisseurs des couches de liant sont très faibles. Il est donc nécessaire d'effectuer un quadrillage très fin du *VER* pour tenir compte de toutes les hétérogénéités (en particulier les couches de liant se trouvant dans les interfaces). Ceci est très coûteux en terme de capacité de stockage et en temps de calcul. C'est pour cette raison que nous avons choisi de calculer la fonction tridimensionnelle  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle(\underline{\mathbf{h}})$  uniquement suivant quelques axes en utilisant la méthode de Monte-carlo pour le calcul des intégrales.

À titre d'exemple, le calcul de  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$  suivant l'axe des  $x$  (axe  $\underline{\mathbf{e}}_1$ ) se fait de la manière suivante :

Suivant l'axe  $\underline{\mathbf{e}}_1$ , le vecteur  $\underline{\mathbf{h}}$  s'écrit  $\underline{\mathbf{h}} = h \underline{\mathbf{e}}_1$ . Pour  $h$  fixé, l'intégrale suivante :

$$\begin{aligned} I(h) &= \frac{1}{V} \int_V \chi_m(\underline{\mathbf{x}}) \varepsilon_{11}(\underline{\mathbf{x}} + h \underline{\mathbf{e}}_1) d\underline{\mathbf{x}} \\ &= \frac{1}{V} \int_V i(\underline{\mathbf{x}}, h) d\underline{\mathbf{x}} \end{aligned}$$

se calcule en moyennant  $i(\underline{\mathbf{x}}, h)$  sur  $N$  points  $(\underline{\mathbf{x}}_1, \underline{\mathbf{x}}_2, \dots, \underline{\mathbf{x}}_N)$  aléatoirement distribués de manière uniforme à l'intérieur du VER :

$$I_N(h) = \frac{i(\underline{\mathbf{x}}_1, h) + i(\underline{\mathbf{x}}_2, h) + \dots + i(\underline{\mathbf{x}}_N, h)}{N}$$

Le nombre de points  $N$  se calcule en fonction de la précision,  $\varepsilon_r$ , fixée à l'avance et de la dispersion sur  $\{i(\underline{\mathbf{x}}_1, h) + i(\underline{\mathbf{x}}_2, h) + \dots + i(\underline{\mathbf{x}}_N, h)\}$ . Dans notre cas,  $\varepsilon_r$  est fixée à 5%. La fonction de corrélation  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$  se calcule en fonction de  $I_N$  et  $f_m$  :

$$\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle (h) = I_N(h) - f_m$$

Les résultats des calculs des fonctions de corrélation suivant l'axe  $x$  ( $\underline{\mathbf{h}} = h\mathbf{e}_1$ ) pour les trois tailles  $\frac{L}{D} = 4.282$ ,  $\frac{L}{D} = 2.141$  et  $\frac{L}{D} = 1.285$  sont tracés sur la figure 5.7.

D'une part, cette figure (Fig. 5.7) montre que la fonction de corrélation  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$  suivant l'axe  $x$  pour la taille  $\frac{L}{D} = 4.282$  est négligeable en dehors d'un intervalle  $[-D, D]$ .

De même, pour la taille  $\frac{L}{D} = 2.141$  la fonction de corrélation  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$  est nulle en dehors de  $[-D, D]$ .

Quant à la taille  $\frac{L}{D} = 1.285 < 2$ ,  $\varepsilon_{11}$  et  $\chi_m$  sont toujours corrélés.

Tout comme Sab et Nedjar (2004), ceci nous amène à conclure que la taille minimale du VER est  $2D$ . Les valeurs des énergies élastiques moyennes pour les trois tailles considérées est tracée sur la figure 5.8. Pour la taille  $\frac{L}{D} = 1,285$ , l'erreur commise sur l'énergie élastique moyenne par rapport à la valeur asymptotique, correspondant à la taille  $\frac{L}{D} = 4.282$ , est proche de 5%.

D'autre part, la valeur théorique de  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$  au point  $\underline{\mathbf{h}} = 0$  vaut  $f_i$  (la fraction volumique des inclusions, cf. Eq. 5.45). Dans notre cas  $f_i = 90\%$ . Or la valeur numérique trouvée est proche de 86%. On commet donc une erreur de 5% sur la valeur théorique.

Il s'agit d'une erreur de modélisation. En effet, et comme nous l'avons vu au chapitre 4, l'erreur induite par le modèle discret dépend de la fraction volumique des inclusions. Lorsque cette dernière est proche de 100% (asymptotiquement), l'erreur du modèle est proche de 0. C'est pour cette raison que nous avons considérée une fraction volumique d'inclusions assez élevée.

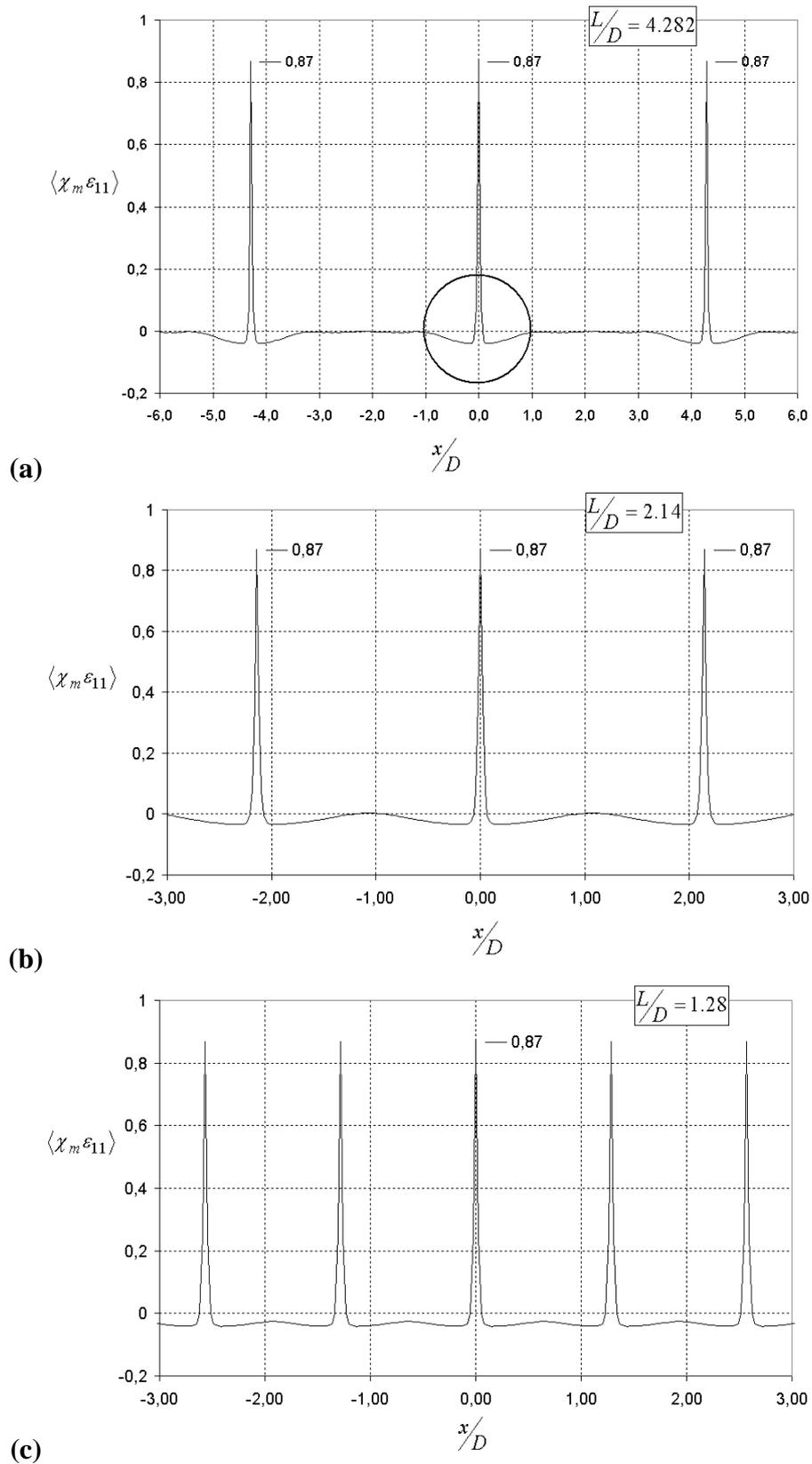


FIG. 5.7 – Fonctions de corrélation  $\langle \chi_m \varepsilon_{11} \rangle$  suivant l'axe  $x$  pour trois différentes tailles du VER : (a)  $L/D = 4.282$ , (b)  $L/D = 2.141$  et (c)  $L/D = 1.285$ .

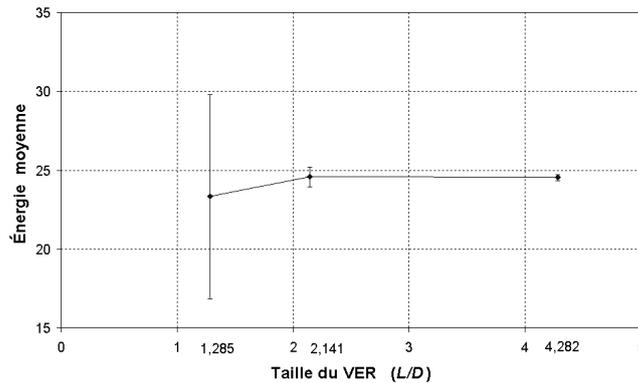


FIG. 5.8 – Énergies élastiques moyennes et intervalles de confiance pour les trois tailles du *VER* considérées.

Pour la taille  $\frac{L}{D} = 2.14$ , nous avons aussi étudié la fonction de corrélation  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$  suivant les deux diagonales  $(\underline{e}_1 + \underline{e}_2)$  et  $(\underline{e}_1 + \underline{e}_2 + \underline{e}_3)$  (cf. Fig. 5.9).

Cette figure (Fig. 5.9) montre que les corrélations  $\langle \varepsilon_{11} \chi_m \rangle$  sont négligeables pour une distance plus grande que  $D$ . A noter aussi que ces courbes sont légèrement différentes de celles correspondant à un axe de la cellule de base traduisant une légère anisotropie qui s'estompe lorsque la taille de cette cellule augmente.

## 5.4 Détermination de la taille du *VER* en fatigue

Dans cette section, une loi de fatigue est introduite dans le comportement des interfaces. Un chargement cyclique en déformation est appliqué aux microstructures générées. La règle de cumul linéaire de Miner est utilisée pour calculer le niveau de dégradation de chaque connexion et à chaque étape de calcul. La variation de l'énergie de déformation sera donc étudiée en fonction du nombre de cycles appliqués.

Plusieurs tailles du *VER* seront considérées. Pour chaque taille, le nombre conventionnel de cycles à la rupture (i.e. diminution de 50% de la rigidité initiale) est déterminé.

### 5.4.1 Quelques rappels sur la fatigue

Le phénomène de fatigue d'un matériau se caractérise par sa rupture après application répétée d'un grand nombre de sollicitations dont l'amplitude est inférieure à la résistance à la rupture du matériau.

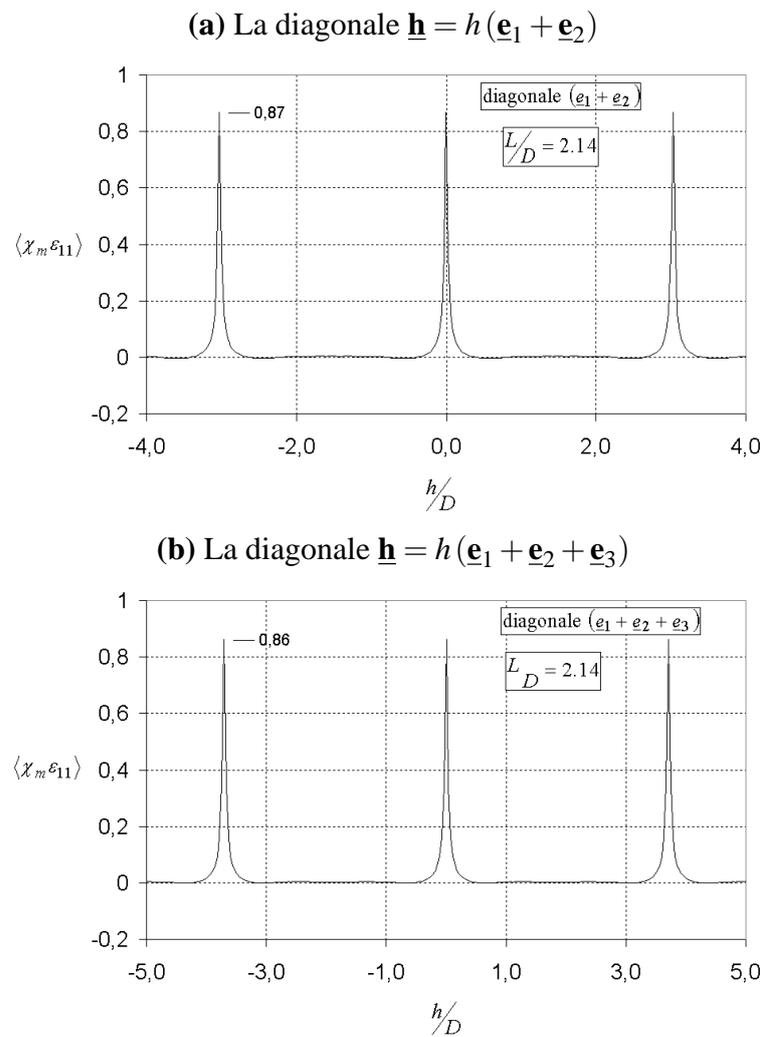


FIG. 5.9 – Fonctions de corrélation  $\langle \chi_m \varepsilon_{11} \rangle$  pour la taille  $\frac{L}{D} = 2.14$  suivant différents axes.

Ce phénomène est rencontré fréquemment dans de nombreux domaines qui mettent en jeu des sollicitations cycliques :

1. Sollicitation par flexion alternée d'une pièce tournante (essieu),
2. Sollicitation par vibrations (avions, ouvrage d'art),
3. Sollicitation de la carlingue des avions par des cycles de pressurisation, dépressurisations à chaque vol.

Les premières études fondamentales du phénomène de fatigue en laboratoire ont été entreprises en 1852 par Wöhler sur les métaux.

L'essai classique, permettant de caractériser le phénomène de fatigue consiste à soumettre une éprouvette du matériau à étudier à des sollicitations répétées et à noter le nombre de cycles entraînant la rupture de l'éprouvette, appelé *durée de vie*.

La représentation classique des résultats de l'essai est la courbe de fatigue ou la courbe de Wöhler (cf. Fig. 5.10). Cette courbe fait correspondre une durée de vie à la sollicitation exercée, qui peut être une contrainte ou une déformation imposée.

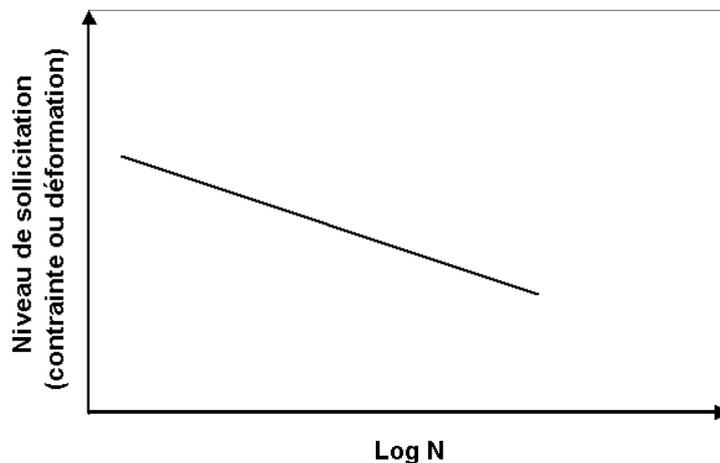


FIG. 5.10 – Courbe de Wöhler d'après Baaj (2002).

L'équation de la courbe obtenue est souvent considérée de la forme :

$$S = A.N^{-\beta}$$

ou

$$\log(S) = \alpha - \beta \log(N)$$

où  $S$  est la sollicitation imposée (contrainte ou déformation),  $N$  la durée de vie correspondante et  $A, B$  ( $\alpha, \beta$ ) sont deux paramètres.

#### Dispersion des durées de vie et détermination du $VER$ :

Les essais de fatigue sur divers matériaux montrent qu'il existe une dispersion importante dans les résultats des durées de vie. Cela est dû à l'hétérogénéité du matériau et au phénomène de fatigue lui-même.

Pour les matériaux bitumineux, la durée de vie peut varier dans un rapport de 1 à 30 (Baaj (2002), Soliman (1976)) et même de 1 à 100 pour certains matériaux traités aux liants hydrauliques.

Il faut donc tester un grand nombre d'échantillons pour obtenir un ensemble de valeurs de nombre de cycles représentatif du phénomène réel.

### 5.4.2 Prise en compte de la fatigue des interfaces inter-granulaires

Comme nous l'avons mentionné au chapitre 3, l'endommagement d'une connexion entre deux grains est modélisé par une variable  $D$  traduisant le taux de diminution de la rigidité macroscopique du liant se trouvant à l'interface.

Pour un chargement cyclique, nous utilisons une loi de fatigue pour l'interface  $c = (i, j)$  définie de la manière suivante :

$$\frac{\delta D^c}{\delta N} = D^{c\alpha} \left( \frac{\varepsilon_{eq}}{a} \right)^\beta \quad (5.45)$$

où  $\alpha$  et  $\beta$  sont deux paramètres.  $\varepsilon_{eq}^c$  est une quantité scalaire évaluée à chaque cycle en fonction de la déformation à l'interface  $c$ .

Pour un chargement périodique en traction,  $\underline{\underline{\mathbf{E}}} = E_{11}\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$ , nous supposons que  $\varepsilon_{eq}$  est l'extension principale maximale :

$$\varepsilon_{eq}^c = \max_{\underline{\underline{\mathbf{x}}} \in c} \left( \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^c(\underline{\underline{\mathbf{x}}}) \right)^+ \quad (5.46)$$

Rappelons que la déformation d'un point  $\underline{\underline{\mathbf{x}}}$  à l'intérieur de l'interface  $c$ ,  $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^c(\underline{\underline{\mathbf{x}}})$ , s'exprime en fonction du saut du déplacement  $\llbracket \underline{\underline{\mathbf{u}}} \rrbracket^c(\underline{\underline{\mathbf{x}}})$  comme suit (cf. Eq. 3.16) :

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^c(\mathbf{x}) = \frac{\underline{\mathbf{n}}^c \otimes^S \llbracket \underline{\mathbf{u}} \rrbracket^c(\mathbf{x})}{e^c}$$

où  $e^c$  est l'épaisseur de l'interface  $c$ , et  $\underline{\mathbf{n}}^c$  est la normale à  $c$ .

La durée de vie de l'interface  $c$  peut être modélisée par le nombre de cycles  $N_f^c$  pour lequel  $D^c < 1$  d'où :

$$\delta N = D^{c-\alpha} \left( \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{eq}}{a} \right)^{-\beta} \delta D^c \quad \Rightarrow \quad N_f^c = \int_0^1 D^{c-\alpha} \left( \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{eq}}{a} \right)^{-\beta} dD^c \quad (5.46)$$

$$= \frac{1}{1-\alpha} \left( \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{eq}}{a} \right)^{-\beta} \quad (5.47)$$

Pour les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  qui interviennent dans l'équation 5.45, dans un premier temps, nous adoptons les valeurs proposées par Alimami (1987) :

$$\begin{cases} \beta = 3.8 \\ \alpha = 1 - 2.42 * 10^3 \boldsymbol{\varepsilon}_{eq} \end{cases} \quad (5.48)$$

Dans un second temps, une étude paramétrique est menée pour étudier l'influence de ces deux paramètres sur le nombre de cycle à la rupture de la microstructure.

Le paramètre  $a$  sera pris égal à 0.038 et le niveau de chargement,  $E_{11}$ , sera pris égal à  $10^{-4}$

#### 5.4.2.1 Cumul des dommages

L'amplitude des sollicitations à l'intérieur de chaque interface n'est pas constante. Il faut donc disposer d'un moyen pour permettre d'additionner les dommages provoqués par différents niveaux de sollicitations et de prévoir la durée de vie dans ce cas.

La loi la plus connue est celle proposée par **Miner** en 1945. Ses travaux font suite à ceux de **Palmgren** en 1924, exploitant des essais en fatigue en traction-compression sur l'aluminium. Une analyse de ses résultats par une approche énergétique a été effectuée par Miner (cf. Baaj (2002)).

On considère d'abord le cas d'application successive de deux sollicitations : soit  $N_1$  la durée de vie sous la sollicitation  $S_1$  et  $N_2$  la durée de vie de vie sous la

sollicitation  $S_2$  ( Dans le cas d'un chargement en déformation, les sollicitations  $S_1$  et  $S_2$  sont équivalentes aux  $\varepsilon_{eq}^1$  et  $\varepsilon_{eq}^2$ ).

Si la connexion a déjà subit  $n_1$  fois la sollicitation  $S_1$ , le problème sera de trouver le nombre  $n_2$  que peut encore supporter la sollicitation d'amplitude  $S_2$  avant sa rupture.

D'après la loi de cumul linéaire de Miner, le nombre  $n_2$  est tel que :

$$\frac{n_1}{N_1} + \frac{n_2}{N_2} = 1$$

Cette loi se généralise pour plusieurs séquences de sollicitations aux diverses amplitudes :

$$\sum \frac{n_i}{N_i} = 1 \quad (5.48)$$

Pour chaque interface, deux modes de rupture peuvent être envisagés :

1. Chaque connexion subit une dégradation progressive de sa rigidité allant jusqu'à la rupture (**Rupture progressive de chaque connexion**). Ainsi, à l'étape  $k$  du calcul, le dommage  $D_k^c$  de la connexion  $c$  vaut :

$$D_k^c = \sum_{i=1}^{i=k} \frac{N_k}{N_{fk}^c} \quad (5.49)$$

où :

- $N_k$  est le nombre de cycles appliqués à l'étape  $k$ ,
  - $N_{fk}^c$  est la durée de vie de la connexion  $c$  à l'étape  $k$
2. la rupture de chaque connexion est de type brutal : le dommage  $D^c$  vaut 0 ou 1 (**Rupture brutale de chaque connexion**)

$$\begin{cases} D^c = 0 & \text{si } \sum_{i=1}^{i=k} \frac{N_k}{N_{fk}^c} < 1 \\ D^c = 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.50)$$

Dans les deux cas, l'algorithme de résolution peut-être comme celui schématisé sur la figure 5.11.

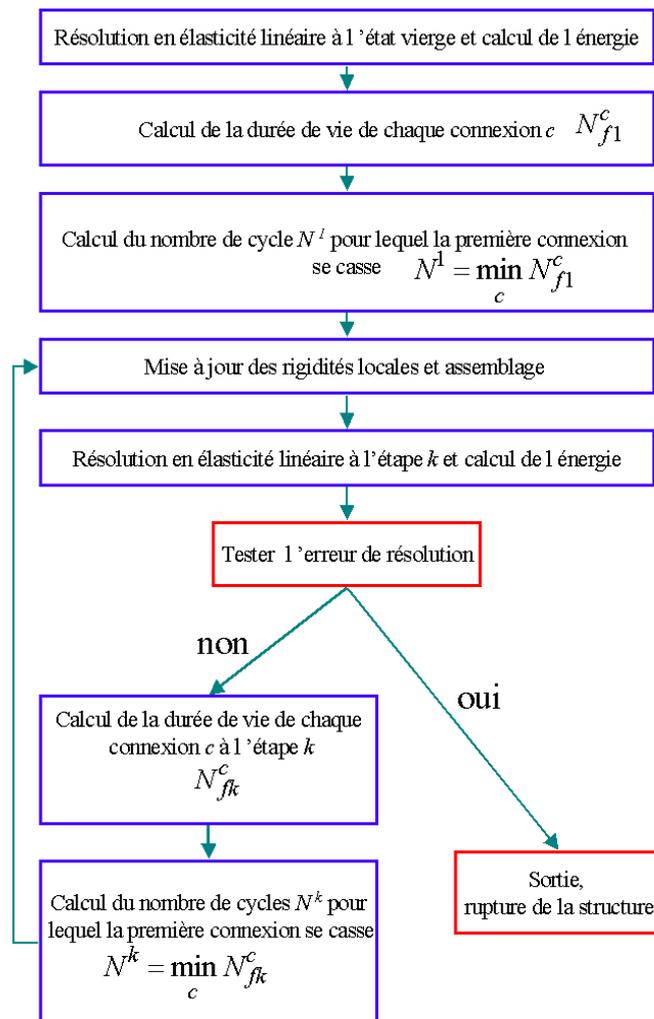


FIG. 5.11 – Algorithme de résolution en élasticité endommageable par fatigue.

#### 5.4.2.2 Génération des microstructures et conditions aux limites

Nous avons considéré les mêmes microstructures générées pour la détermination de la taille du *VER* en élasticité linéaire.

Le chargement imposé est cyclique et périodique. Nous avons considéré le cas d'une traction suivant l'axe  $x$  :

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}} = E_{11}\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$$

Pour chaque taille, plusieurs réalisations sont considérées. La courbe moyenne de variation de l'énergie de déformations associée à  $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$  est étudiée en fonction du nombre de cycles imposés.

Le nombre de réalisations pour chaque taille du *VER* est tracé sur la figure 5.12 pour une erreur relative fixée à 5%.

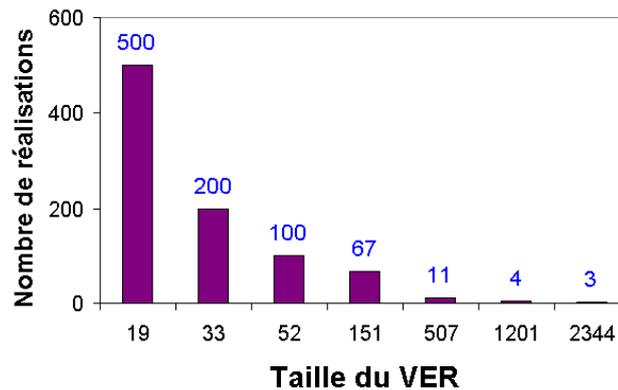


FIG. 5.12 – Nombre de réalisations en fonction du nombre moyen de particule  $\rho|V|$  (équivalent à la taille du *VER*) pour la détermination du *VER* en fatigue. (Erreur relative de Monte-Carlo est fixée à 5%).

Les deux modes de rupture mentionnés dans la section précédente ont été envisagées :

1. **rupture progressive** de chaque connexion,
2. **rupture brutale** de chaque connexion.

### 5.4.3 Résultats des simulations pour la détermination de la taille du *VER*

Un exemple de variation de l'énergie élastique en fonction du nombre de cycles d'une réalisation contenant 154 grains est tracé sur la figure 5.13. À partir de cette courbe, il est clair que la fracture de la structure se produit lorsque le rapport entre l'énergie actuelle et l'énergie initiale est proche de 40%, pour les deux modes de rupture des connexions.

En outre, la rigidité globale de la structure diminue plus rapidement lorsque la rupture des connexions est progressive.

Contrairement à la courbe avec rupture progressive, la variation de l'énergie avec un rupture brutale des connexion présente un palier horizontal au début de l'essai.

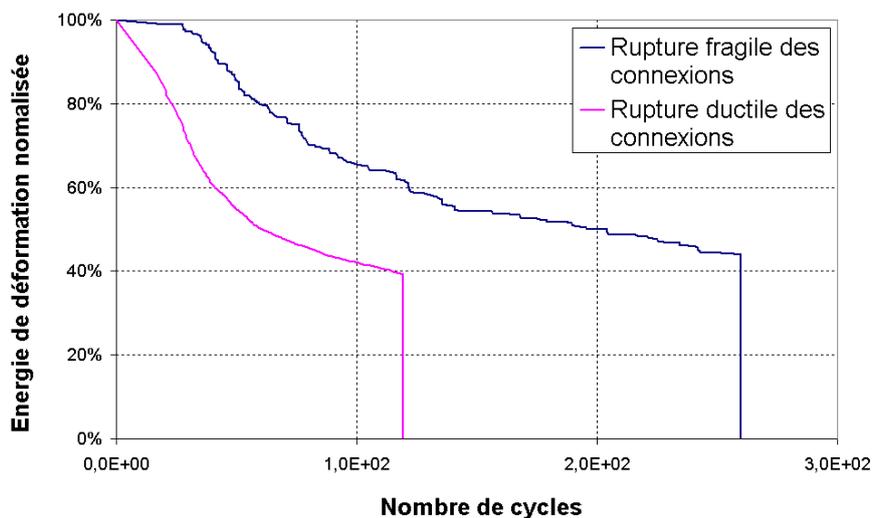


FIG. 5.13 – Exemple d'évolution de l'endommagement en fonction du nombre de cycles imposés pour les deux modes de ruptures envisagés. Taille de la réalisation 154 grains.

La courbe moyenne et l'intervalle de confiance de l'énergie normalisée par rapport à l'état initiale en fonction du nombre de cycles pour différentes tailles du *VER* est tracé sur la figure 5.14 pour le calcul avec une rupture progressive des connexions et sur la figure 5.15 pour le calcul avec une rupture brutale des connexions.

Ces deux figures (Figs 5.14 et 5.15) montrent que les résultats dépendent de la taille du *VER* : Plus la taille du *VER* augmente et plus la dégradation de la structure

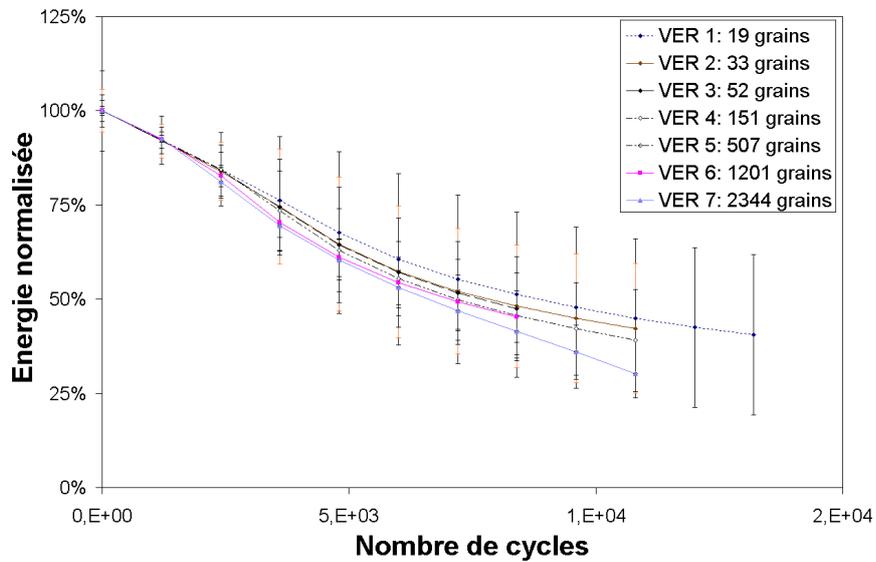


FIG. 5.14 – Courbe moyenne et écart type de l'énergie normalisée (par rapport à l'état vierge) en fonction du nombre de cycles pour différentes tailles du VER : **Rupture progressive** de chaque connexion.

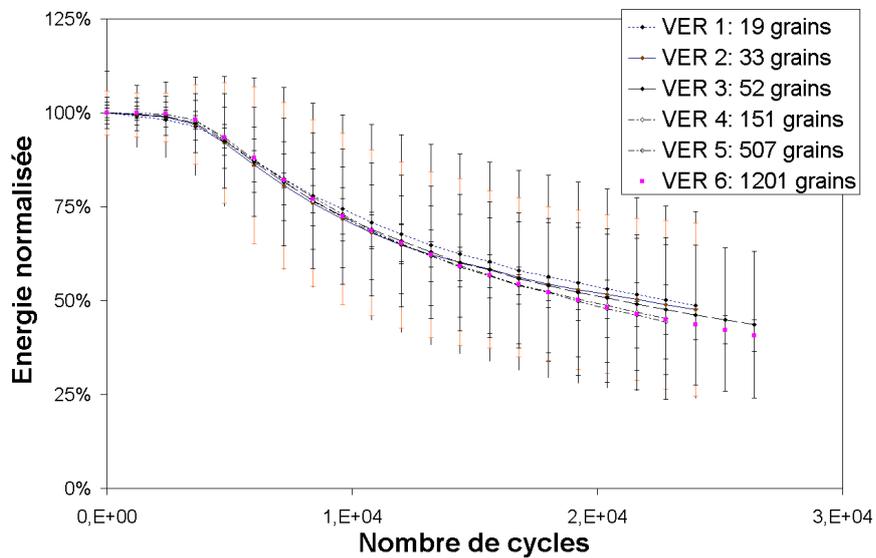


FIG. 5.15 – Courbe moyenne et écart type de l'énergie normalisée (par rapport à l'état vierge) en fonction du nombre de cycles pour différentes tailles du VER : **Rupture brutale** de chaque connexion.

est rapide.

Afin de quantifier la durée de vie d'une structure soumise à un chargement cyclique, un nombre conventionnel de cycles à la rupture est défini lorsque la structure perd 50% de sa rigidité initiale.

Ainsi, nous avons tracé la valeur moyenne et l'écart type du nombre de cycles à la rupture en fonction de la taille du *VER* sur les figures 5.16 et 5.17 respectivement pour le calcul avec rupture progressive des connexion et celui avec une rupture brutale.

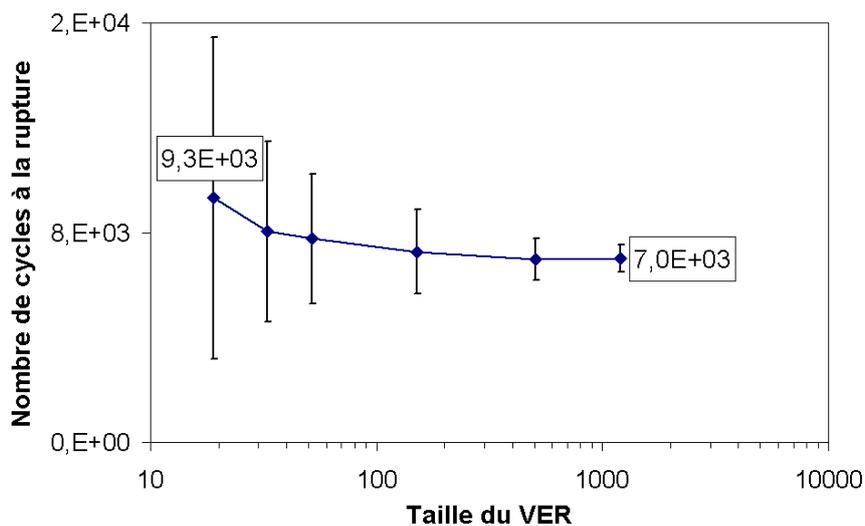


FIG. 5.16 – Valeur moyenne et écart type du nombre de cycles à la rupture (diminution de 50% de la rigidité initiale) en fonction de la taille du *VER* : **Rupture progressive** de chaque connexion.

À partir de ces courbes (Figs. 5.16 et 5.17), il est clair que le nombre de cycles à la rupture dépend de la taille du *VER*. Il décroît lorsque la taille du *VER* augmente. Pour les valeurs suffisamment grandes, la durée de vie moyenne tend asymptotiquement vers une valeur constante.

Afin d'estimer l'erreur commise sur la détermination de la durée de vie en fonction de la taille du *VER*, nous avons définie  $\varepsilon(x)$  comme suit :

$$\varepsilon(x) = \frac{N(x) - N_{\infty}}{N_{\infty}}$$

où :

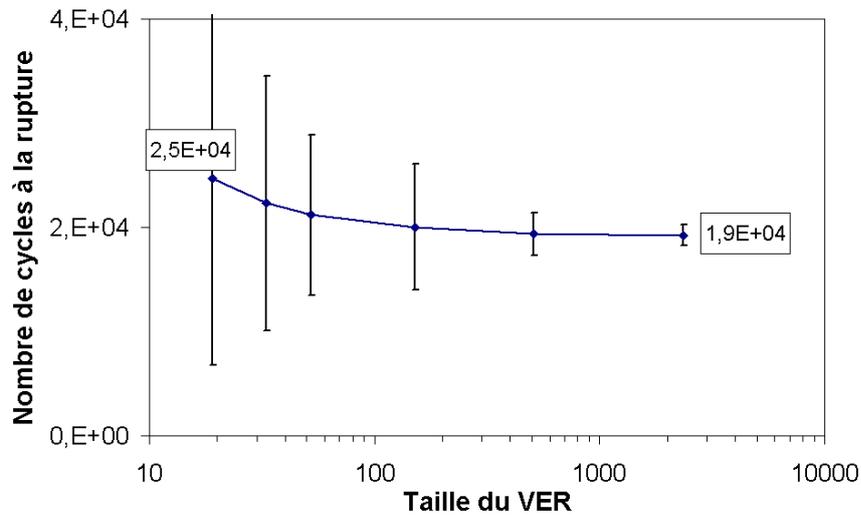


FIG. 5.17 – Valeur moyenne et écart type du nombre de cycles à la rupture (diminution de 50% de la rigidité initiale) en fonction de la taille du *VER* : **Rupture brutale** de chaque connexion.

- $N(x)$  est le nombre de cycles à la rupture pour une taille  $x$ ,
- $N_\infty$  est le nombre de cycles à la rupture lorsque la taille du *VER* devient suffisamment grande. Ici, 1201 grains.

La courbe de variation de l'erreur commise est tracée sur la figure 5.18. On observe que l'erreur relative par rapport à la valeur asymptotique varie entre 28% pour une taille de 19 grains et 0.5% pour une taille de 507 grains. La taille qui a été retenue est de 151 grains (erreur relative 5%).

#### 5.4.4 Influence des paramètres de la loi de fatigue considérée

On rappelle que la loi utilisée pour la détermination du *VER* en fatigue, nous avons utilisé une loi en puissance permettant de modéliser le nombre de cycles à la rupture de chaque connexion. Cette loi est de la forme (cf. Eq. 5.47) :

$$N_f^c = \frac{1}{1 - \alpha} \left( \frac{\varepsilon_{eq}^c}{a} \right)^\beta$$

Les valeurs des paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  proposées par Alimami (1987) ont été utilisées.

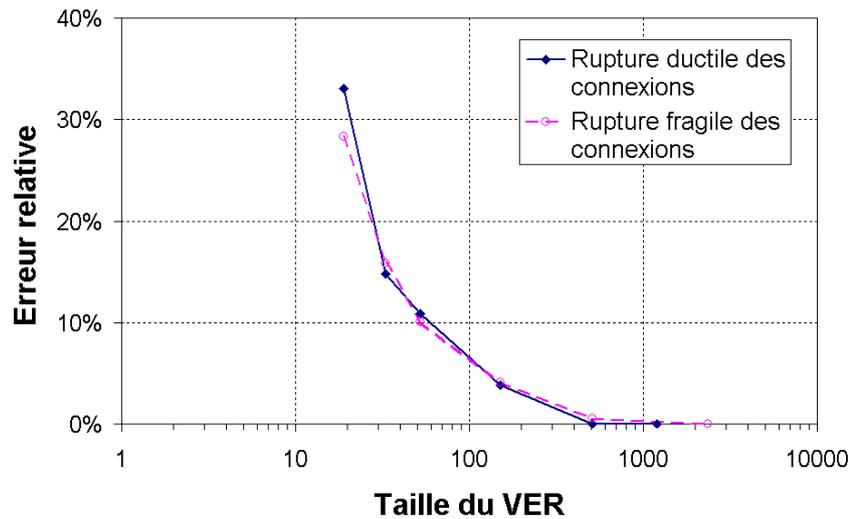
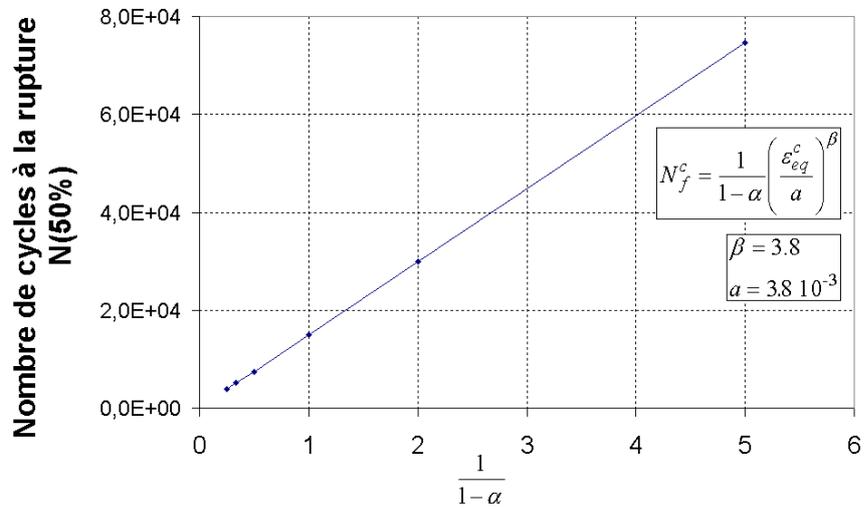
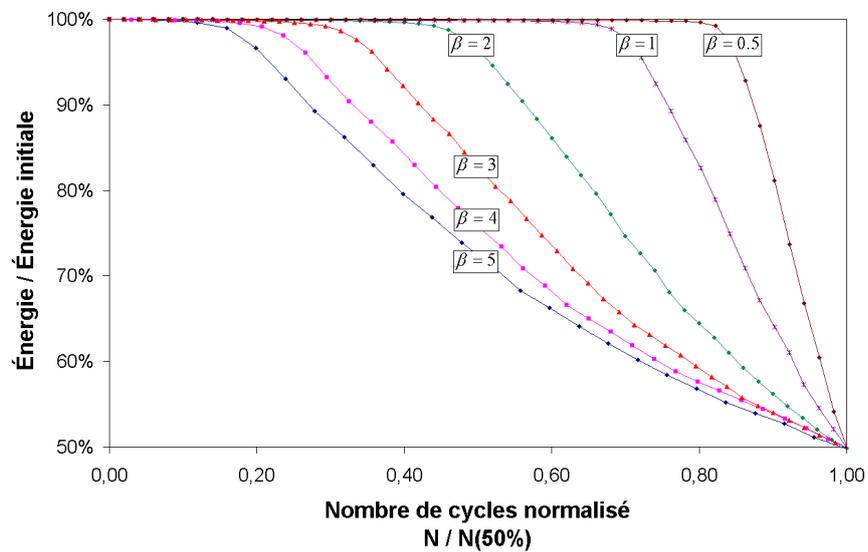


FIG. 5.18 – Estimation de l’erreur commise sur la détermination de la durée de vie de la microstructure en fonction de la taille du *VER*.

Dans cette section, une étude paramétrique sur ces deux paramètres est effectuée. Pour cela, la taille du *VER* considérée est celle déterminée dans la section précédente (i.e. 151 grains).

Pour  $\beta$  fixé, il est clair que la durée de vie ( $N(50\%)$ ) varie linéairement en fonction de  $\frac{1}{1-\alpha}$  (cf. Fig. 5.19). Ainsi,  $\alpha$  est un paramètre de calage et n’a pas d’influence sur la forme de la courbe d’évolution de l’endommagement.

En revanche, l’évolution de l’énergie de déformation en fonction du nombre de cycles normalisé ( $\frac{N}{N(50\%)}$ ) dépend du paramètre  $\beta$ . La figure 5.20 montre que pour des valeurs de  $\beta$  tendant vers 0, la rupture du matériau est presque brutale. Inversement, la rupture du matériau est d’autant plus progressive que la valeur de  $\beta$  augmente.

FIG. 5.19 – Influence du paramètre  $\alpha$ .FIG. 5.20 – Influence du paramètre  $\beta$ .

## 5.5 Conclusions

Dans ce chapitre, le modèle discret proposé est appliqué à la détermination de la taille minimale du *VER* en élasticité linéaire et en fatigue.

Dans un premier temps, les résultats des simulations en élasticité linéaire montrent que les propriétés effectives peuvent être déterminées sur des petites tailles de *VER* en utilisant des conditions périodiques à condition que le nombre de réalisations soit suffisant. Cette observation est en accord avec plusieurs études numériques existantes, Gusev (1997), Terada et al. (1998) et Kanit et al. (2003),

Les simulations avec les fonctions de corrélation entre la fonction indicatrice de la matrice et la déformation à l'intérieur des interfaces ont montré que la taille minimale du *VER* ne peut être inférieure à deux fois le diamètre moyen des inclusions (Sab et Nedjar (2004)).

Dans le cas de la microstructure considérée, la taille retenue pour la détermination des propriétés linéaires effectives est de 19 grains ( $2.14 \times D$ ).

Dans un second temps, une loi de fatigue a été introduite dans les interfaces. Le nombre de cycles avant rupture de chacune des interfaces est calculé en utilisant la règle de cumul de Miner. Deux modes de rupture ont été envisagés (1) chaque interface subit une dégradation continue de sa rigidité (variant de 0 à 1) et (2) la rupture de chaque interface est brutale (la dégradation vaut 0 ou 1). Les résultats des simulations montrent que la valeur moyenne du nombre de cycles à la rupture,  $N(50\%)$  (dégradation de 50% de la rigidité initiale) diminue lorsque la taille du *VER* augmente. L'erreur relative par rapport à la valeur asymptotique varie entre 28% pour une taille de 19 grains et 0.5% pour une taille de 507 grains.

La taille qui a été retenue pour la détermination de  $N(50\%)$  est de 151 grains (erreur relative 4%). Cette taille est plus grande que celle déterminée dans le cas élastique linéaire. Il est donc clair que la taille minimale du *VER* dépend du comportement mécanique du matériau considéré.

En pratique, le nombre de cycles à la rupture des enrobés bitumineux est déterminé à partir d'un essai de fatigue réalisé sur une éprouvette trapézoïdale dont la dimension de la plus petite arête est égale à 25 mm. Ainsi, en comparant le nombre moyen de grains se trouvant sur cette arête avec celui se trouvant dans une arête du *VER* dont la taille est minimale (i.e.  $151^{\frac{1}{3}} \simeq 5.3 > 5$ ), il est possible de donner une première estimation du nombre des essais nécessaire et l'erreur commise sur  $N(50\%)$ .

À titre d'exemple, supposons que la courbe granulométrique de l'enrobé est celle donnée par le tableau 2.2 (Chapitre 2). Dans ce cas, le diamètre moyen des granulats (correspondant à 50% du passant) est égal à 5 mm. Pour une arête de dimension

25 mm, le nombre moyen de grains est 5. Ce nombre est légèrement inférieur à  $151^{\frac{1}{3}} \simeq 5.3$ . L'erreur commise dans ce cas est proche de 8% et le nombre d'essais nécessaires est supérieur à 70.

Ces estimations doivent être complétées par une étude plus détaillée sur la taille minimale du *VER* des enrobés bitumineux. Plusieurs courbes granulométriques avec diverses compacités de granulats doivent être considérées.

Ces résultats ont fait l'objet de deux publications Lachihab et Sab (2004a) et Lachihab et Sab (2004b).

Dans le chapitre suivant, le modèle discret proposé sera appliqué à l'étude de l'influence des caractéristiques morphologiques sur les propriétés effectives du matériau.

# Chapitre 6

## Influence des caractéristiques morphologiques sur les propriétés effectives du matériau

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>168</b>
<b>6.2</b>	<b>Génération des microstructures</b>	<b>169</b>
<b>6.3</b>	<b>Résultats des simulations</b>	<b>175</b>
6.3.1	Élasticité linéaire	175
6.3.2	Élasticité endommageable par fatigue	178
<b>6.4</b>	<b>Conclusions</b>	<b>182</b>

---

## 6.1 Introduction

Rappelons que la Fraction Volumique Locale d'une inclusion ( $FVL$ ) est définie comme étant le rapport entre le volume de l'inclusion et celui de sa région de Voronoï.

Jusqu'à présent, nous avons toujours considéré que la répartition des  $FVL$  des inclusions est uniforme et est égale à la fraction volumique globale des granulats.

Dans ce chapitre, nous proposons d'autres lois de répartition des  $FVL$  et nous étudions l'influence des paramètres des  $FVL$  sur le comportement effectif du matériau.

Deux lois de répartition sont proposées : une première loi logarithmique ( $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$ ) inspirée des résultats obtenus avec les essais d'analyse d'images sur les enrobés bitumineux (Bonnet (2002), Hammoum et al. (2003), Hammoum et Hornych (2004)) et une seconde de la forme  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right)^\gamma}$ .

Pour les deux fonctions considérées, une étude paramétrique sur  $\gamma$  est menée sur deux types de microstructures : la microstructure de Poisson-Voronoï et une microstructure générée à partir du pavage du Voronoï d'un ensemble de sphères.

La procédure de génération des microstructures est présentée dans la section 2. Les résultats des simulations en élasticité linéaire et en fatigue sont ensuite présentés dans la section 3. Enfin, la section 4 est dédiée à la conclusion de ce chapitre.

## 6.2 Génération des microstructures

Deux types de microstructures sont considérés : la microstructure de Poisson-Voronoi et une microstructure générée à partir du pavage du Voronoï d'un ensemble de sphères. La fonction de répartition des volumes des régions de Voronoï de cette dernière a été fixée à l'avance. Nous avons utilisé pour cela la méthode exposée au chapitre 2 (§2.4) pour la génération de microstructures contrôlées. En effet, des sphères dont la granulométrie est donnée par le tableau 2.2 (chapitre 2) sont générées. Celles-ci sont ensuite densifiées à 75% en utilisant le programme de dynamique moléculaire. Enfin, en partitionnant l'espace par Voronoï, on obtient les polyèdres convexes qui ont une granulométrie presque homothétique de celle des sphères.

La fraction volumique globale des inclusions étant fixée (dans notre cas à 75%), les Fractions Volumiques Locales (*FVL*) des inclusions doivent satisfaire deux conditions :

1. La *FVL* de chaque inclusion *i* doit être comprise entre 0 et 1.
2. La fraction volumique globale (*f*) doit être conservée :

$$\begin{aligned}
 f &= \frac{\sum_i V_g^i}{\sum_i V_v^i} \\
 &= \frac{\sum_i (FVL^i V_v^i)}{\sum_i V_v^i}
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

où  $V_g^i$  est le volume de l'inclusion *i* et  $V_v^i$  est le volume de sa région de Voronoï.

Nous avons choisies deux lois de répartition : Une première loi logarithmique dépendant de deux paramètres  $\gamma$  et  $\eta$  :

$$\begin{aligned}
 FVL^i &= \frac{V_g^i}{V_v^i} \\
 &= \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

Où  $\langle V_g \rangle = \frac{1}{N} (V_g^1 + \dots + V_g^N) = f \frac{1}{N} \sum_i V_v^i$  est le volume moyen des inclusions.

Celle-ci a été inspirée des résultats des études de la morphologie des enrobés bitumineux par analyse d'images réalisées au LCPC.

En effet, Bonnet (2002), Hammoum et al. (2003), Hammoum et Hornyh (2004) ont observé que les *FVL* des granulats varient linéairement en fonction du logarithme des rayons.

Et une deuxième loi dépendant aussi de deux paramètres  $\gamma$  et  $\eta$ . Elle est de la forme :

$$FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_v^i}{\langle V_v \rangle} \right)^\gamma} \quad (6.3)$$

Où  $\langle V_v \rangle = \frac{1}{N} (V_v^1 + \dots + V_v^N)$  est le volume moyen des régions de Voronoï. Remarquons que pour les deux lois, lorsque  $\gamma$  est nul, on se ramène au cas où les *FVL* sont uniformes. Dans ce cas,  $\eta = f$  pour la première loi et  $\eta = \left( \frac{1-f}{f} \right)^{1/2}$  pour la seconde.

Pour les deux lois, une étude paramétrique sur  $\gamma$  a été effectuée. Ainsi, pour  $\gamma$  fixé, il est nécessaire de déterminer la valeur de  $\eta$  pour laquelle la fraction volumique globale des inclusions vaut  $f$ . Pour cela, il est possible d'utiliser une méthode itérative pour la résolution de (6.1). La méthode du point fixe a été utilisée pour la première loi et la méthode de Newton-Raphson a été utilisée pour la seconde loi. Nous présentons dans l'annexe A les grandes lignes de ces deux méthodes.

Les valeurs des couples  $(\gamma, \eta)$  utilisées dans nos simulations pour lesquelles  $f$  vaut 75% sont présentées dans le tableau 6.1 pour la microstructure de Poisson-Voronoï et la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux.

Sur la figure 6.1, nous avons tracé la variation des *FVL* en fonction des volumes normalisés des inclusions  $\left( \frac{V_g}{\langle V_g \rangle} \right)$  pour différentes valeurs des paramètres  $\gamma$  et  $\eta$ . À partir de cette figure, il est clair que, pour des valeurs positives de  $\gamma$ , les deux lois de répartition considérées sont des fonctions croissantes. Et, inversement, pour des valeurs négatives de  $\gamma$ , elles sont décroissantes.

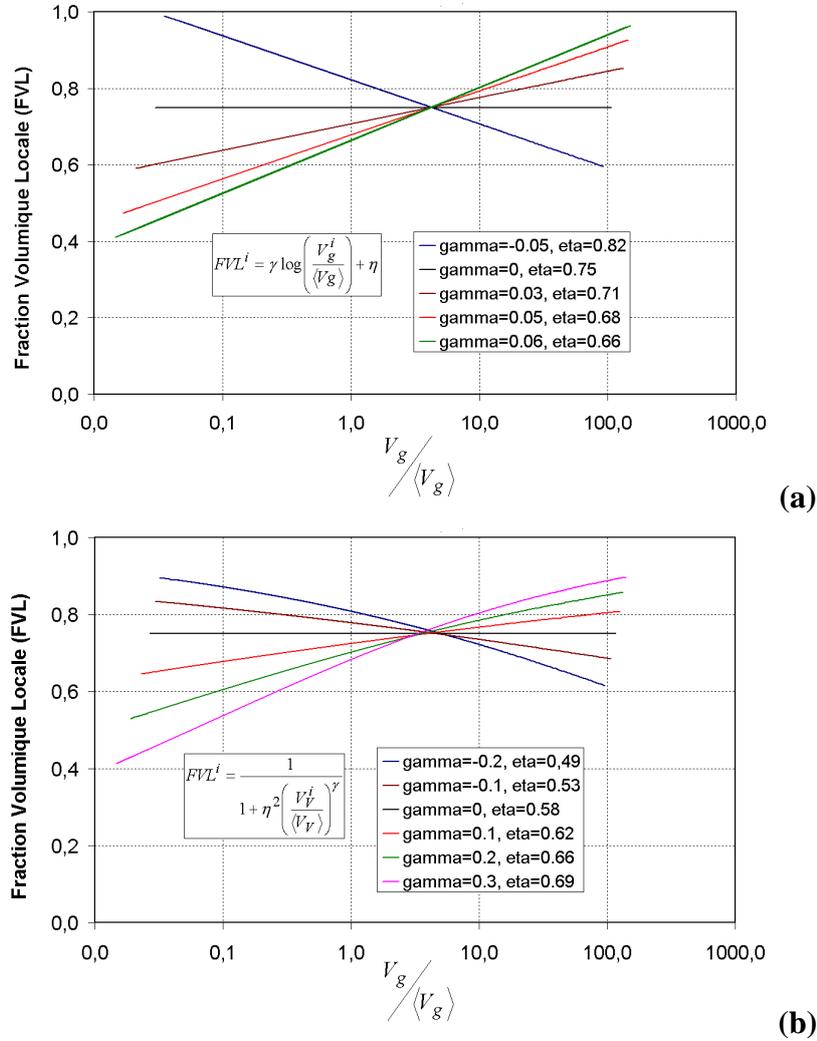


FIG. 6.1 – Variation des  $FVL$  en fonction des volumes normalisés des inclusions ( $\frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle}$ ) pour différentes valeurs des paramètres  $\gamma$  et  $\eta$ . La microstructure est générée à partir de la méthode des plans radicaux et la fraction volumique globale des inclusions est fixée à 75% : (a)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$  et (b)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right)^\gamma}$ .

Microstructure de Poisson-Voronoi				Microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux			
Première loi		Deuxième loi		Première loi		Deuxième loi	
$FVL^i = \gamma \log\left(\frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle}\right) + \eta$		$FVL^i = \frac{1}{1 + \eta^2 \left(\frac{V_v^i}{\langle V_v \rangle}\right)^\gamma}$		$FVL^i = \gamma \log\left(\frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle}\right) + \eta$		$FVL^i = \frac{1}{1 + \eta^2 \left(\frac{V_v^i}{\langle V_v \rangle}\right)^\gamma}$	
$\gamma$	$\eta$	$\gamma$	$\eta$	$\gamma$	$\eta$	$\gamma$	$\eta$
-0.10	0.760	-0.05	0.82	-0.20	0.49	-1.0	0.536
0	0.750	0	0.75	-0.10	0.53	-0.5	0.560
0.05	0.745	0.03	0.71	0	0.58	0	0.58
0.10	0.740	0.05	0.68	0.10	0.62	0.25	0.584
0.12	0.738	0.06	0.66	0.20	0.66	0.50	0.589
-	-	-	-	0.30	0.69	1.0	0.593

TAB. 6.1 – Les valeurs des couples  $(\gamma, \eta)$  utilisées dans les simulations et pour lesquelles  $f = 75\%$

Nous avons vu au chapitre 4 que, pour des  $FVL$  uniformes, les erreurs de modélisation sont acceptables à partir d'une fraction volumique globale des inclusions supérieure à 50%. Dans le cas non uniforme, chacune des  $FVL$  des inclusions doit être donc aussi supérieure à 0.5. Afin de le vérifier, nous avons tracé sur les figures 6.2 et 6.3 les fonctions de répartition des  $FVL$  pour les deux lois considérées respectivement pour la microstructure de Poisson-Voronoi et la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux. La proportion du nombre de particules ayant une  $FVL < 50\%$  est inférieure à 5%.

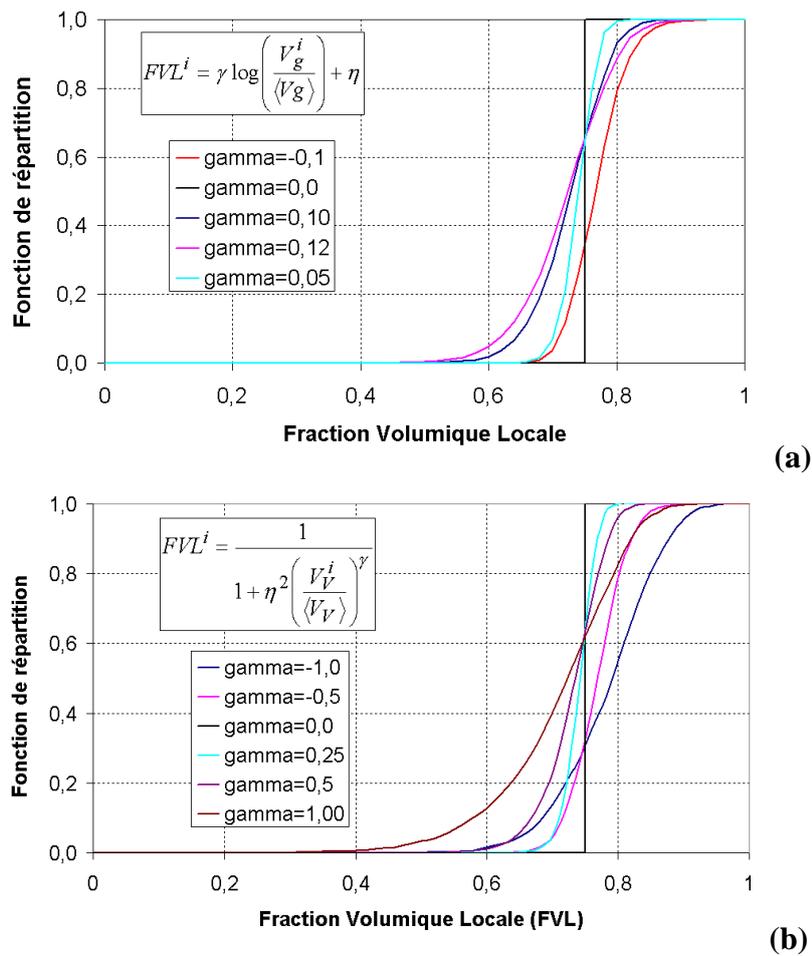


FIG. 6.2 – Fonction de répartition des  $FVL$  pour la microstructure de Poisson-Voronoi :

(a)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_g} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$  et (b)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ .

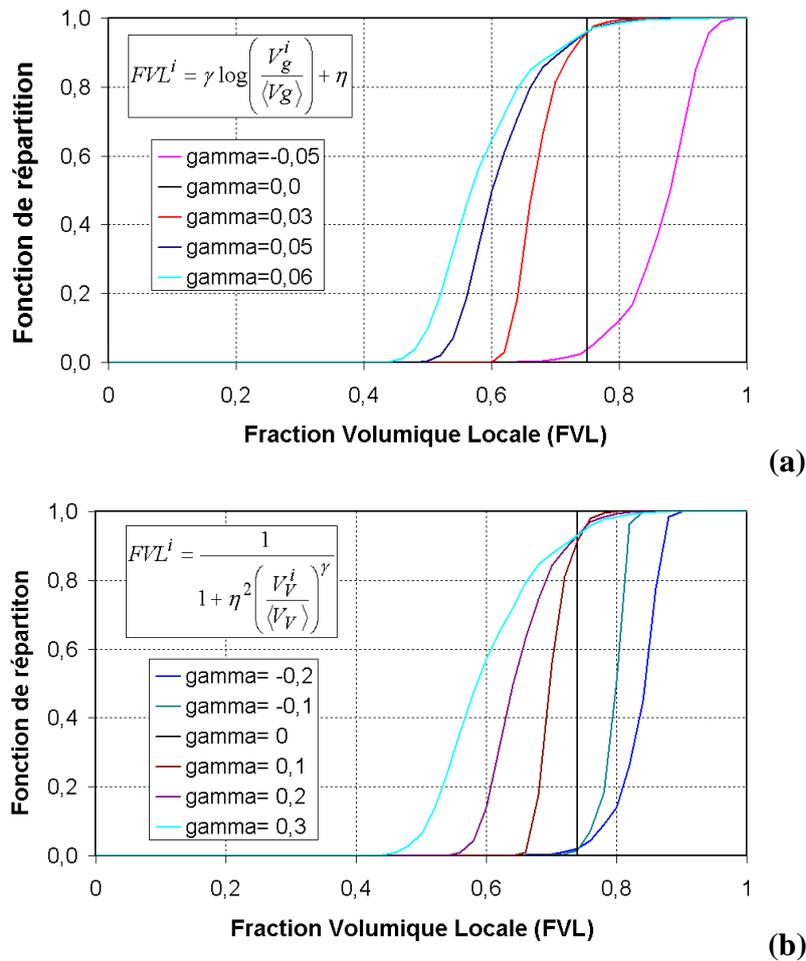


FIG. 6.3 – Fonction de répartition des  $FVL$  pour la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux : (a)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$  et (b)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ .

## 6.3 Résultats des simulations

Nous avons utilisé la méthode de Monte-Carlo pour déterminer les propriétés effectives en élasticité linéaire et en fatigue du matériau. Le module d'Young et le coefficient de Poisson de la matrice sont, respectivement, fixés à 1 et 0.25.

### 6.3.1 Élasticité linéaire

Pour la microstructure de Poisson de Voronoï, le nombre moyen de particules par unité de volume est fixé à 0.15. La taille minimale du *VER* en élasticité linéaire est 19 particules (correspondant à un cube de dimension  $5^3$ ) et le nombre de réalisations nécessaires est égal à 100. (erreur relative sur les modules effectifs inférieure à 0.5%).

Concernant la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux, 9 réalisations ont été considérées. Le nombre moyen de particules par réalisation est égal à 1520 (erreur relative sur les modules effectifs inférieure à 1%).

La variation des modules élastiques effectifs en fonction du paramètre  $\gamma$  pour les deux lois de répartition des *FVL* est tracée sur les figures 6.4 et 6.5 respectivement pour la microstructure de Poisson-Voronoï et la microstructure générée par la méthode des plans radicaux.

Il est clair que, contrairement à la microstructure de Poisson-Voronoï, les modules élastiques de la microstructure générée par la méthode des plans radicaux sont très sensibles au paramètre  $\gamma$  pour les deux lois considérées. La variation des modules élastiques par rapport au cas où  $\gamma = 0$  (*FVL* uniformes) peut atteindre 30% pour certaines valeurs de  $\gamma$  (0.06 pour la première loi et 0.3 pour la seconde).

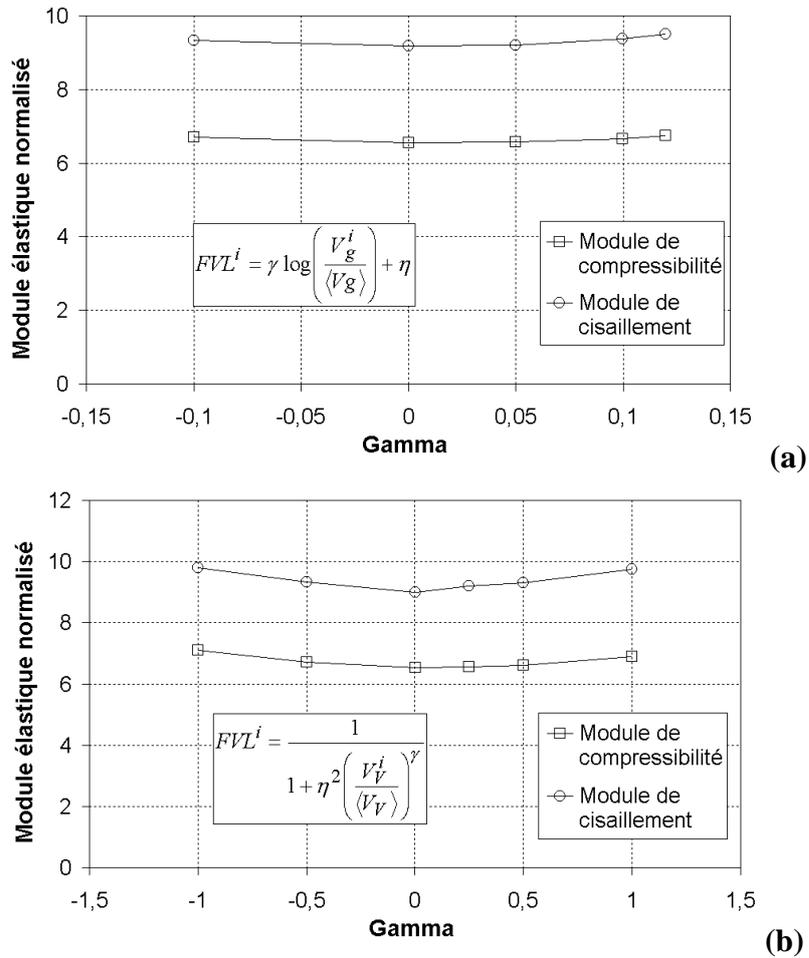


FIG. 6.4 – Variation des modules élastiques effectifs en fonction du paramètre  $\gamma$  pour la microstructure de Poisson-Voronoi : **(a)**  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$  et **(b)**  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ .

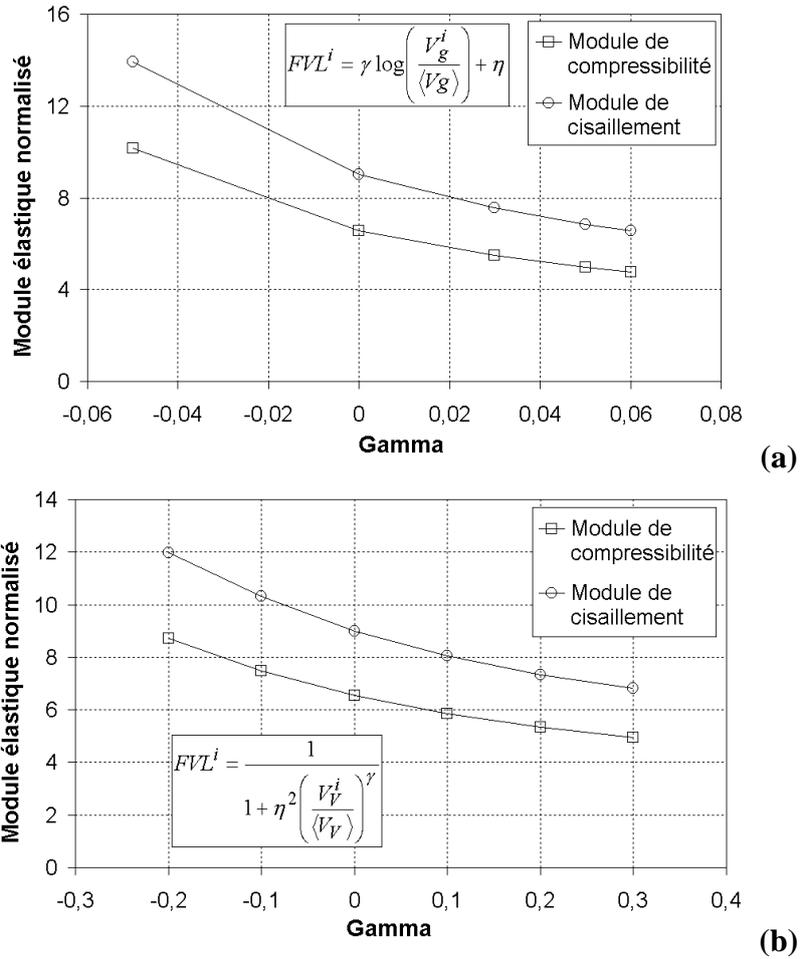


FIG. 6.5 – Variation des modules élastiques effectifs en fonction du paramètre  $\gamma$  pour la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux : (a)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$  et (b)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ .

### 6.3.2 Élasticité endommageable par fatigue

Tout comme le cas des simulations pour la détermination de la taille minimale du *VER* en fatigue (chapitre 5), une loi de fatigue est introduite dans les interfaces.

La microstructure est soumise à un chargement macroscopique cyclique en extension simple ( $\underline{\underline{\mathbf{E}}} = E_{11}\underline{\underline{\mathbf{e}}}_1 \otimes \underline{\underline{\mathbf{e}}}_1$ ). La règle de cumul linéaire de Miner est utilisée et le nombre de cycles avant rupture de chacune des interfaces ( $N^c$ ) suit la loi suivante :

$$N^c = \frac{1}{1 - \alpha} \left( \frac{\varepsilon_{eq}^c}{a} \right)^{-\beta}$$

Le niveau de chargement  $E_{11}$  est fixé à  $10^{-4}$  et les valeurs des paramètres  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $a$  sont fixées à :

$$\alpha = 0.5, \quad \beta = 3 \quad \text{et} \quad a = 0.0038$$

Nous supposons que  $\varepsilon_{eq}^c$  est l'extension principale maximale :

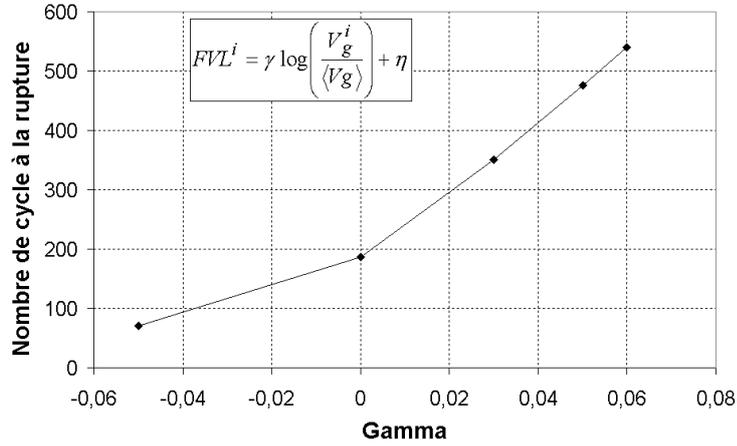
$$\varepsilon_{eq}^c = \max_{\underline{\underline{\mathbf{x}}} \in c} \underline{\underline{\mathbf{x}}}^c$$

Pour la microstructure de Poisson-Voronoi, le nombre moyen de particules par unité de volume a été fixé à 0.15. La taille minimale du *VER* en fatigue est 151 particules (correspondant à un cube de dimension  $10^3$ ) et le nombre de réalisations nécessaires est égal à 67. Dans ce cas, l'erreur sur le nombre de cycles à la rupture ( $N(50\%)$ ) est proche de 5%.

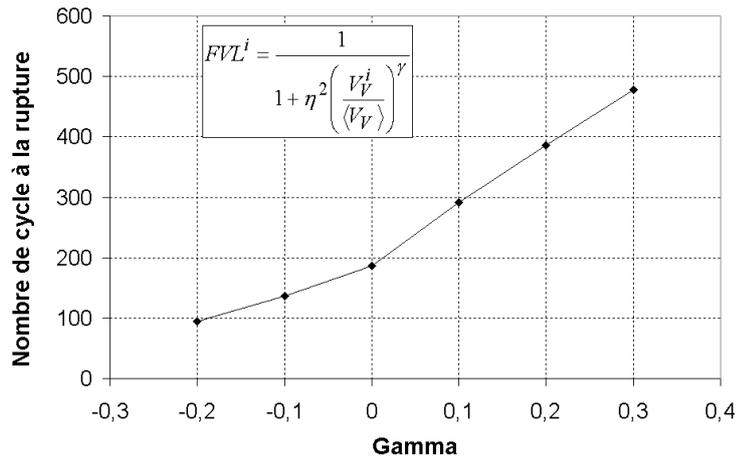
Concernant la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux, 12 réalisations ont été considérées. Le nombre moyen de particules par réalisation est égal à 1520.

La variation du nombre de cycles à la rupture ( $N(50\%)$ ) de la microstructure des plans radicaux en fonction du paramètre  $\gamma$  est tracée sur la figure 6.6. Cette figure montre que  $N(50\%)$  est très sensible à la valeur de  $\gamma$ . Une augmentation de 150% sur  $N(50\%)$  par rapport au cas où les *FVL* seraient uniformes ( $\gamma = 0$ ) est observée pour les valeurs maximales de  $\gamma$  (0.06 pour la première loi et 0.3 pour la seconde). Puisque le nombre de cycles avant rupture de chaque interface  $c$  est proportionnel à  $(\varepsilon_{eq}^c)^\beta$  ( $\beta > 0$ ), cette augmentation de  $N(50\%)$  devrait s'accompagner d'une modification de la répartition des  $\varepsilon_{eq}^c$ . En particulier, compte tenu du fait que  $\beta > 0$ , les valeurs de  $\varepsilon_{eq}^c$  devraient augmenter pour des  $\gamma$  croissants. Pour le vérifier, nous avons tracé sur la

figure 6.7 les fonctions de répartition des  $\varepsilon_{eq}^c$  pour différentes valeurs de  $\gamma$ . Cette figure confirme que, en moyenne, les valeurs des déformations équivalentes ont tendance à augmenter pour des valeurs croissantes de  $\gamma$ .



(a)



(b)

FIG. 6.6 – Variation du nombre de cycles à la rupture ( $N(50\%)$ ) en fonction du paramètre  $\gamma$  pour la microstructure générée à partir de la méthode des plans radicaux :

(a)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$  et (b)  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ .

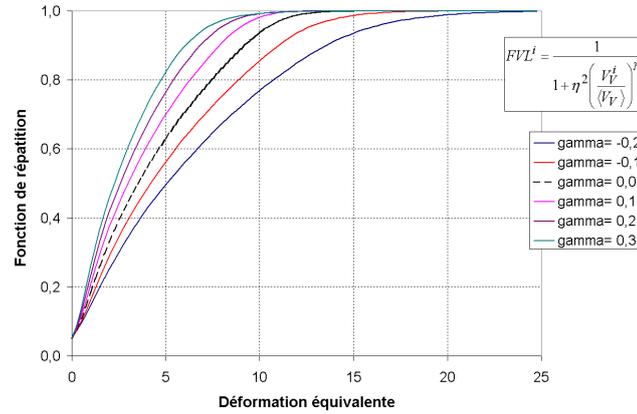


FIG. 6.7 – Fonction de répartition de la déformation équivalente ( $\varepsilon_{eq}$ ) pour différentes valeurs de  $\gamma$ . La microstructure est générée à partir de la méthode des plans radicaux et  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1+\eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ .

Concernant la microstructure de Poisson-Voronoi, la variation de  $N(50\%)$  en fonction de  $\gamma$  pour la deuxième loi ( $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1+\eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ ) est tracée sur la figure 6.8. Cette figure montre que, tout comme les modules élastiques effectifs,  $N(50\%)$  est très peu sensible au choix de  $\gamma$ . Les fonctions de répartition de  $\varepsilon_{eq}$  pour différentes valeurs de  $\gamma$  sont aussi très proches (cf. Fig. 6.9).

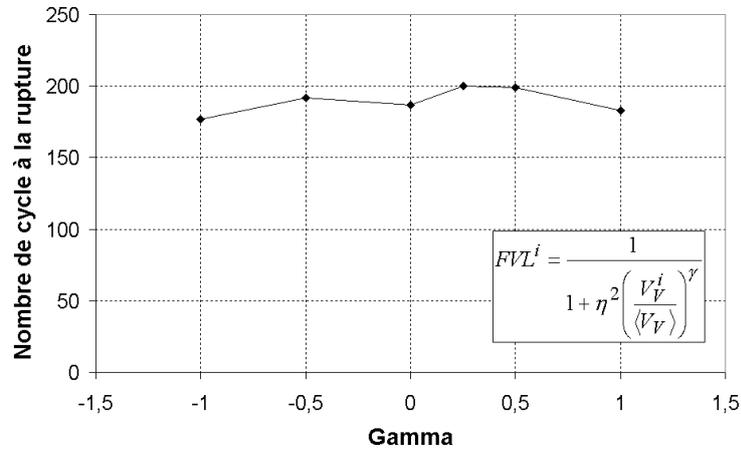


FIG. 6.8 – Variation du nombre de cycles à la rupture ( $N(50\%)$ ) en fonction du paramètre  $\gamma$  pour la microstructure de Poisson-Voronoi :  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ .

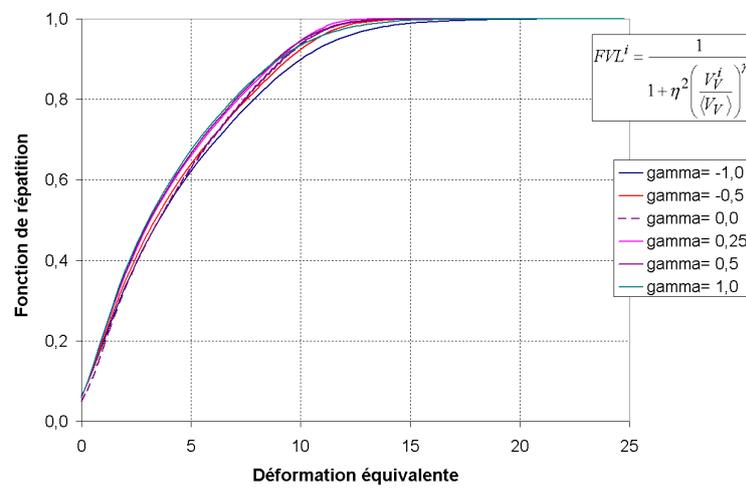


FIG. 6.9 – Fonction de répartition de la déformation équivalente ( $\epsilon_{eq}$ ) pour différentes valeurs de  $\gamma$  pour la microstructure de Poisson-Voronoi :  $FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_V^i}{\langle V_V \rangle} \right)^\gamma}$ .

## 6.4 Conclusions

Dans ce chapitre, l'influence de la répartition des *FVL* des inclusions sur le comportement effectif du matériau en élasticité linéaire et en fatigue est étudiée pour deux types de microstructures. Une première générée par la méthode de Poisson-Voronoi et une seconde générée en appliquant la méthode des plans radicaux à un ensemble de sphères polydisperses densifiées selon une granulométrie fixée à l'avance. La répartition des volumes des régions de Voronoi obtenues est alors homothétique à celle des sphères.

Deux lois de répartition des *FVL* dépendant de deux paramètres  $\gamma$  et  $\eta$  ont été considérées.  $\eta$  se calcule en fonction de la fraction volumique globale des inclusions et une étude paramétrique sur  $\gamma$  a été menée.

Dans un premier temps, les simulations ont été réalisées en élasticité linéaire. Il a été observé que, pour la microstructure de Poisson-Voronoi, les modules linéaires effectifs sont très peu sensibles à  $\gamma$ . En revanche, pour la microstructure générée par la méthode des plans radicaux, les propriétés effectives sont beaucoup plus sensibles à  $\gamma$ . Une diminution de 30% par rapport au cas des *FVL* serait uniforme a été observée pour certaines valeurs de  $\gamma$ .

Dans un second temps, une loi de fatigue a été introduite dans le comportement des interfaces. Le nombre de cycle à la rupture,  $N(50\%)$  (correspondant à une diminution de 50% de l'énergie élastique à l'état vierge) a été étudié en fonction de  $\gamma$ . Pour la microstructure de Poisson-Voronoi, et tout comme le cas linéaire élastique,  $N(50\%)$  est très peu sensible au choix de  $\gamma$ . En revanche, pour la microstructure générée par la méthode des plans radicaux, une augmentation de 150% par rapport au cas des *FVL* uniformes a été observée pour certaines valeurs de  $\gamma$ .

Il est donc conclu que, dans le cas général, les propriétés effectives dépendent à la fois de la répartition des volumes des régions de Voronoi et des *FVL* des inclusions. Il est donc nécessaire de compléter cette étude par des simulations sur d'autres microstructures en faisant varier la répartition des volumes des régions de Voronoi.

## **Conclusions et perspectives**



# Conclusions et perspectives

Dans ce travail de thèse, un modèle discret tridimensionnel dédié à la prédiction des propriétés élastiques linéaires et endommageables des matériaux granulaires cohésifs (matrice+inclusions) tel que les bétons bitumineux est présenté. Le matériau est considéré comme un assemblage d'inclusions cohésives infiniment rigides. La mosaïque de Voronoï pour un ensemble de sphères et sa triangulation duale de Delaunay sont utilisées pour modéliser les aspects géométriques du problème. Le comportement mécanique des contacts entre particules est modélisé par une loi d'interface. Une méthode d'homogénéisation discrète est employée pour l'estimation des propriétés effectives du matériau.

La validité et les limitations du modèle sont discutées à travers des comparaisons avec des simulations par la méthode des éléments finis sur des cellules unitaires périodiques régulières dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides. Les microstructures choisies sont le réseau cubique simple (CS) et le réseau cubique centré (CC). Les résultats des comparaisons montrent que les estimations du modèle discret proposé sont acceptables (erreur < 15%) pour des densités volumiques d'inclusions assez élevées ( $f > 50\%$ ).

Les estimations par la méthode des éléments finis des propriétés effectives dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides ont été comparées à celles prenant en compte la rigidité des inclusions pour trois fractions volumiques d'agrégats ( $f = 61\%$ ,  $73\%$  et  $80\%$ ). Les résultats des comparaisons pour  $f = 61\%$  montrent que l'erreur est significative ( $> 15\%$ ) lorsque le rapport entre le module d'Young de la matrice et celui des inclusions ( $E^I/E^M$ ) est inférieur à 100.

Afin d'améliorer le modèle pour le réseau CS, un modèle analytique prenant en compte la déformation des inclusions a été développé. Les estimations du modèle analytique ont été comparées à celles obtenues par la méthode des éléments finis. Les résultats montrent que l'erreur relative est acceptable aussi bien pour les faibles que pour les fortes fractions volumiques des inclusions. Les propriétés effectives du modèle analytique dans le cas limite où les inclusions sont infiniment rigides ont été comparées aussi à celles prenant en compte les déformations des inclusions. Les résultats montrent que l'erreur relative est un peu inférieure quand le rapport entre la

rigidité des inclusions et celle de la matrice augmente. Il a été conclu encore une fois que le modèle discret proposé doit être réservé au cas  $E^I/E^M > 100$ .

Après les comparaisons et l'étude des limitations, le modèle proposé est utilisé dans deux applications : la détermination de la taille minimale du *VER* en élasticité linéaire et en fatigue, et l'étude de l'influence des caractéristiques morphologiques sur le comportement effectif.

La détermination de la taille du *VER* est effectuée sur des microstructures aléatoires générées par la méthode de Voronoï. Le processus de Poisson a été utilisé pour générer un ensemble de points à l'intérieur d'un volume *V*. La fraction volumique locale des inclusions est supposée uniforme.

Dans un premier temps, des simulations numériques en élasticité linéaire, ont été menées sur plusieurs tailles du volume élémentaire *V*. Pour chaque taille, plusieurs réalisations et trois conditions aux limites sont considérées : (1) conditions aux limites périodiques (*PERIODIC*), (2) uniformes en translations (*KUBC1*) et (3) uniformes en translations et rotations (*KUBC2*). Les résultats montrent que, pour des tailles croissantes de *V*, les valeurs moyennes obtenues avec *KUBC1* et *KUBC2* convergent vers *PERIODIC*. En outre, les conditions aux limites de type *PERIODIC* mènent à une convergence plus rapide : les propriétés élastiques effectives peuvent être déterminées non seulement par des simulations numériques sur des éléments de volume de grandes tailles, mais également en tant que valeurs moyennes des propriétés élastiques de volumes plus petits, à condition que le nombre de réalisations considérées soit suffisant. La taille minimale du *VER* est environ 19 grains dans le matériau considéré.

Dans un second temps, une loi de fatigue a été introduite dans les interfaces. Le nombre de cycles avant rupture de chacune des interfaces est calculé en utilisant la règle de cumul de Miner. Deux modes de rupture ont été envisagés (1) chaque interface subit une dégradation continue de sa rigidité (variant de 0 à 1) et (2) la rupture de chaque interface est brutale (la dégradation vaut 0 ou 1). Les résultats des simulations montrent que la valeur moyenne du nombre de cycles à la rupture de  $N(50\%)$  (50% de la rigidité initiale) diminue lorsque la taille du *VER* augmente. L'erreur relative par rapport à la valeur asymptotique varie entre 28% pour une taille de 19 grains et 0.5% pour une taille de 507 grains. La taille qui a été retenue est de 151 grains (erreur relative 4%). Cette taille est plus grande que celle déterminée dans le cas élastique linéaire.

Enfin le modèle proposé a été appliqué à l'étude de l'influence des caractéristiques morphologiques sur les propriétés effectives du matériau. Une étude paramétrique qui porte sur la répartition des fractions volumiques locales des inclusions (*FVL*) a été menée.

Les simulations en élasticité linéaire ont montré que, à fraction volumique globale d'inclusions constante, la rigidité linéaire effective des matériaux aléatoires considérés dépend de la distribution de la fraction volumique locale des inclusions. Deux fonctions des  $FVL$  ont été considérées : (1) la  $FVL$  de l'inclusion  $i$  est une fonction logarithmique de son volume  $V_g^i$  ( $FVL^i = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$ ) et (2) la  $FVL$  de l'inclusions  $i$  est de la forme  $FVL^i = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_v^i}{\langle V_v \rangle} \right)^\gamma}$ .

Une étude paramétrique sur  $\gamma$  a été menée pour les deux fonctions proposées. Deux types de microstructures ont été considérés : La microstructure de Poisson-Voronoi et une microstructure générée à partir du pavage du Voronoï d'un ensemble de sphères.

Il a été observé que, pour la microstructure de Poisson-Voronoi, les modules linéaires effectifs sont très peu sensibles à  $\gamma$ . En revanche, pour la microstructure générée par la méthode des plans radicaux, les propriétés effectives sont beaucoup plus sensibles à  $\gamma$ . Une diminution de 30% par rapport au cas des  $FVL$  uniformes a été observée pour certaines valeurs de  $\gamma$ .

En fatigue, tout comme le cas élastique linéaire, le nombre de cycles à la rupture ( $N(50\%)$ ) pour la microstructure de Poisson-Voronoi est très peu sensible au choix de  $\gamma$ . Par contre, pour la microstructure générée par la méthode des plans radicaux, une augmentation de 150% par rapport au cas des  $FVL$  uniformes a été observée pour certaines valeurs de  $\gamma$ .

Il a été donc conclu que les propriétés effectives en élasticité linéaire et en fatigue dépendent à la fois des  $FVL$  des inclusions et de la morphologie de la microstructure (granulométrie des inclusions).

Les perspectives de ce travail sont vastes. En effet il est possible d'introduire plusieurs améliorations aussi bien sur les aspects géométriques que sur les aspects mécaniques de la modélisation.

Pour les aspects géométriques de la microstructure, il est possible d'introduire des sophistications basées sur les études morphologiques des enrobés bitumineux par analyse d'images réalisées à la division MSC du Laboratoire Central des Ponts et Chaussées (LCPC) à Nantes (Bonnet (2002), Hammoum et al. (2003), Hammoum et Hornych (2004)). On pourrait, pour cela, utiliser d'autres processus de génération aléatoire de points tels que le processus de Neyman-Scott ou le processus de Gibbs. On pourrait aussi utiliser la tessellation de Voronoï généralisée à un ensemble d'objets tels que des segments de droite ou des ellipsoïdes.

La répartition des  $FVL$  des inclusions pourrait être déduite à partir de ces essais.

Concernant les aspects mécaniques, d'une part, il est possible de tenir compte de la déformation des inclusions en introduisant des degrés de libertés supplémentaires décrivant une déformation homogène dans chaque grain. On aurait alors trois translations, trois rotations et six déformations associées à chaque grain, multipliant par deux le nombre de d.d.l.

D'autre part, il est aussi possible d'introduire d'autres lois de comportement dans les interfaces inter-granulaires. En particulier, une loi thermo-visco-élastique endommageable ou encore une loi thermo-visco-élasto-plastique endommageable pour tenir compte du phénomène de l'orniérage et des effets de la température et de la viscosité du bitume. Ces lois pourraient être identifiées à partir de l'essai de rupture locale répétée du bitume réalisé à la division MSC-Nantes du LCPC (De La Roche et al. (1999)), ou encore inspirées des lois proposées par Bodin (2002).

# Bibliographie

- Alimami, M. (1987). *Contribution à l'étude de l'endommagement par fatigue des enrobés bitumineux*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris 6, Paris.
- Aurenhammer, F. and Klein, R. (2000). Voronoi diagrams. In *Handbook of Computational Geometry*, pages 201–290. Elsevier Science Publishing, North-Holland, Amsterdam.
- Avila-Pozos, O., Klarbring, A., and Movchan, A. B. (1999). Asymptotic model of orthotropic highly inhomogeneous layered structure. *Mechanics of Materials*, 31(2) :101–116.
- Baaj, H. (2002). *Comportement à la fatigue des matériaux granulaires traités aux liants hydrocarbonés*. PhD thesis, Institut National des des sciences appliquées de Lyon, Lyon.
- Bagi, K. (1996). Stress and strain in granular assemblies. *Mechanics of Materials*, 22(3) :165–177.
- Besson, J., Cailletaud, G., Chaboche, J., and Forest, S. (2001). *Mécanique non linéaire des matériaux*. Hermès.
- Bodin, D. (2002). *Modèle d'endommagement par fatigue : Application aux enrobés bitumineux*. PhD thesis, École Centrale de Nantes, Nantes.
- Bonnet, P. (2002). Étude morphologique des enrobés bitumineux par analyse d'images. Rapport de stage ingénieur de l'École Polytechnique de l'Université de Nantes.
- Bornert, M., Breteau, T., and Gilormini, P. (2001). *Homogénéisation en mécanique des matériaux*. Hermès.
- Cambou, B. (1989). Forme global to local variables in granular materials. In *Powders and Grains*, pages 73–86. Thomson (ed), Balkema, Rotterdam.
- Cambou, B., Dubujet, P., Emeriault, F., and Sidoroff, F. (1995). Homogenization for granular materials. *European Journal of Mechanics A/Solids*, (14) :255–276.

- Castaneda, D. P. and Suquet, P. (1998). Nonlinear composites. *Advances in Applied Mechanics*, 34 :171–302.
- Castenada, E., Such, C., and Hammoum, F. (2004). Evaluating the moisture sensitivity of bituminous mixtures : complex modulus approach. In *3ème congrès Euroasphalt & Eurobitume*, Vienne, Autriche.
- Cecchi, A. and Sab, K. (2002). A multi-parameter homogenization study for modeling elastic masonry. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 21(2) :136–146.
- Christensen, R. M. and Lo, K. H. (1969). Viscoelastic properties of heterogeneous media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 17 :23–41.
- Christensen, R. M. and Lo, K. H. (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.
- Christoffersen, J. (1983). Bonded granulates. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 31(1) :55–83.
- Day, A., Snyder, K., Garboczi, E., and thorpe, M. (1992). The elastic moduli of a sheet containing circular holes. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40(5) :1031–1051.
- De La Roche, C., Piau, J., and Stefani, C. (1999). Étude du comportement du bitume au pseudo-contact entre granulats - description et premiers résultats de l'essai de rupture locale répétée du bitume. In *Atelier Eurobitume 99*, Luxembourg.
- D.F. Watson (1981). Computing the n-dimensional Delaunay tessellation with application to Voronoi polytopes. *Computer Journal*, 24 :167–172.
- Drugan, W. and Willis, J. (1996). A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(4) :497–524.
- Emam, S. (2002). Assemblées denses et aléatoires de disques sous sollicitations quasi-statiques. Étude par simulations numériques. Rapport de stage de DEA de Modélisation et Simulation des Matériaux Université de Marne-La-Vallée.
- Fazekas, A. (2003). *Étude de l'influence des dispersions microstructurales sur les propriétés effectives des matériaux cellulaires*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, Grenoble.
- Fazekas, A., Dendievel, R., Salvo, L., and Bréchet, Y. (2002). Effect of microstructure topology upon the stiffness and strength of 2D cellular structures. *International Journal of Mechanical Sciences*, 44 :2047–2066.

- Glowinski, R. (1984). *Numerical methods for non linear variational problems*. Springer, New York.
- Goreaud, F. (2000). *Apports de l'analyse de la structure spatiale en forêt tempérée à l'étude et la modélisation des peuplements complexes*. PhD thesis, École Nationale du Génie Rural des Eaux et des Forêts, Nancy.
- Gusev, A. A. (1997). Representative volume element size for elastic composites : a numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45(9) :1449–1459.
- Hammoum, F. (2000). Micromécanique des enrobés bitumineux. In *Actes des journées scientifiques du LCPC : Approches multiéchelles pour les matériaux et les structures du génie civil*, pages 71–77, Nantes. LCPC-ENPC.
- Hammoum, F., Bertaud, V., and Bonnet, P. (2003). Identification de la structure interne des matériaux routiers par analyse d'images. In *Journées des Sciences de l'Ingénieur 2003*, Dourdan.
- Hammoum, F., de La Roche, C., and Boutin, C. (1999). A self-consistent estimate of bituminous mixes complex modulus. In *Eurobitume Workshop 99, paper 38*, Luxembourg.
- Hammoum, F. and Horny, P. (2004). Quantitative study of bituminous materials microstructure by digital image analysis. In *3ème congrès Euroasphalt & Eurobitume*, Vienne, Autriche.
- Hashin, Z. (1962). The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29 :143–150.
- Hervé, A. and Zaoui, A. (1990). Modelling the effective behavior of nonlinear matrix-inclusion composites. *European Journal of Mechanics, A/Solids*, 9(6) :505–515.
- Hill, R. (1965). A self consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(4) :213–222.
- Huet, C. (1990). Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38 :813–841.
- Jeulin, D. (2001). Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoires. *Extrait de : Homogénéisation en mécanique des matériaux (tome1)*. Hermès, France.
- Jeulin, D. and Ostoja-Starzewski, M. (2001). *Mechanics of random and multiscale microstructures*. Springer.
- Kanit, T. (2003). *Notion of Representative Volume Element for Heterogeneous Materials : Statistical and Numerical Approach*. PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris.

- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., and Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40(13-14) :3647–3679.
- Klarbring, A. (1991). Derivation of a model of adhesively bonded joints by the asymptotic expansion method. *International Journal of Engineering Science*, 29(4) :493–512.
- Lachihab, A. and Sab, K. (2004a). Aggregate composites : a contact based modeling. *accepté dans Computational Materials sciences*.
- Lachihab, A. and Sab, K. (2004b). Aggregate composites : a discrete micromechanics model. In *Engineering Mechanics Today*, Ho-Chi-Minh City, Vietnam.
- Lachihab, A., Sab, K., Bary, B., and Sellier, A. (2002). A micro-mechanical modeling of bituminous materials. In *BCRA 2002. 6th International Conference on the Bearing Capacity of Railways and Airfields. Workshop 2 on Modelling of flexible pavements*, pages 51–56, IST, Lisbon.
- Lemaitre, J. and Chaboche, J. (1985). *Mécanique des matériaux solides*. Dunod.
- Love, A. E. H. (1929). Étude morphologique des enrobés bitumineux par analyse d'images. A treatise of the mathematical theory of elasticity.
- Mahboubi, A., Ghaouti, A., and Cambou, B. (1996). La simulation numérique discrète du comportement des matériaux granulaires. *Revue Française de Géotechnique*, 76 :45–61.
- Martin, C. and Bouvard, D. (2004). Isostatic compaction of bimodal powder mixtures and composites. *International Journal of Mechanical Sciences*, 46(6) :907–927.
- Martin, C., Bouvard, D., and Shima, S. (2003). Study of particle rearrangement during powder compaction by the Discrete Element Method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51(4) :667–693.
- Matheron, G. (1971). The theory of regionalized variables and its applications. *Publications de l'École des Mines Paris*.
- Michel, J., Molinec, H., and Suquet, P. (1999). Effective properties of composite material with periodic microstructure : a computational approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172 :109–143.
- Nemat-Nasser, S. and Hori, M. (1993). *Micromechanics : Overall properties of heterogeneous materials*.

- Oda, M., Nemat-Nasser, S., and Mehrabadi, M. (1982). A statistical study of fabric in a random assembly of spherical granules. *International Journal for Numerical and analytical methods in Geomechanics*, 6 :77–94.
- Ostoja-Starzewski, M., Sheng, P., and Alzebedeh, K. (1996). Spring network models in elasticity and fracture of composites and polycrystals. *Computational Materials Science*, 7(1-2) :82–93.
- Pradel, F. (1998). *Homogénéisation des milieux discrets périodiques orientés. Une application aux mousses*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Paris.
- Pradel, F. and Sab, K. (1998). Cosserat modelling of elastic periodic lattice structures. *C. R. Acad. Sc. Paris*, 326(II b) :699–704.
- Richard, P. (2000). *Étude de la géométrie de milieux granulaires modèles tridimensionnels par simulations numériques*. PhD thesis, Université de Rennes I, Rennes.
- Rothenburg, L., Bathurst, R., and Dusseault, M. (1989). Micromechanical ideas in constitutive modelling of granular matter. In *Powders and Grains*, pages 355–363. Thomson (ed), Balkema, Rotterdam.
- Roux, J. N. (1997). Contact disorder and nonlinear elasticity of granular packing : A simple model. In *Powders & Grains*, pages 215–218. Behringer & Jenkins (eds), Balkema, Rotterdam.
- Sab, K. (1992). On the homogenization and the simulation of random materials. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 11(5) :585–607.
- Sab, K. (1996). Déformation microscopique et macroscopique dans un assemblage dense de particules rigides. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 322(Série II) :715–721.
- Sab, K. and Nedjar, B. (2004). Periodization of random media and representative volume element size for linear composites. *À paraître dans C.R.A.S.*
- Salençon, J. (1988). *Mécanique des milieux continus, I. concepts généraux*. Ellipses.
- Sanchez-Hubert, J. and Sanchez-Palencia, E. (1992). *Introduction aux méthodes asymptotiques et à l'homogénéisation*. Masson, Paris.
- Sanchez-Palencia, E. and Zaoui, A. (1987). Homogenisation techniques for composite media. *Advances in Applied Mechanics*, 272 :122–189.
- Satake, M. (1978). Constitution of mechanics of granular materials through the graph theory. In *Continuum mechanical and statistical approaches in the mechanics of granular materials.*, Gakujutsu Bunken Fukyu-Kai, Tokyo.

- Schlangen, E. and Garboczi, E. (1996). New method for simulating fracture using an elastically uniform random geometry lattice. *International Journal of Engineering Science*, 34(10) :1131–1144.
- Serra, J. (1982). Image analysis and mathematical morphology. *Presse académique*.
- Shafabakhsh, G. A. (1999). *Simulation numérique discrète des matériaux de chaussées non traités*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rennes, Rennes.
- Shashidhar, N. and Shenoy, A. (2002). On using micromechanical models to describe dynamic mechanical behavior of asphalt mastics. *Mechanics of Materials*, 34(10) :657–669.
- Sidoroff, F., Cambou, B., and Mahboubi, A. (1993). Contact force in granular media. *Mechanics of Materials*, 16 :83–89.
- Soliman, S. (1976). Influence des paramètres de formulation sur le comportement à la fatigue d'un enrobé bitumineux. *Rapport de recherche LPC*, 58.
- Storakers, B., Fleck, N., and McMeeking, R. (1999). The viscoplastic compaction of composite powders. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47(4) :785–815.
- Suquet, P. (1990). Une méthode simplifiée pour le calcul des propriétés élastiques de matériaux hétérogènes à structure périodique. *C. R. Acad. Sci Paris*, II(311) :769–774.
- Suquet, P. (1997). *CISM Courses and Lectures*. 377. Springer.
- Terada, K., Ito, T., and Kikuchi, N. (1998). Characterization of the mechanical behaviors of solid-fluid mixture by the homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 153(3-4) :223–257.
- Trodec, J., Gervois, A., and Oger, L. (1998). Statistics of Voronoï cells of slightly perturbed face centered cubic and hexagonal close packed lattices. *Europhysics Letters*, 42 :167–172.
- Weber, J. (1966). Recherches concernant les contraintes intergranulaires dans les milieux pulvérulents. *Bulletin de liaison des LPC*, 20 :3.1–3.20.
- Widom, B. (1966). Random sequential addition of hard sphere to a volume. *The Journal of Chemical Physics*, (4) :3888–3894.
- Willis, J. (1977). Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 44 :185–202.

- Willis, J. (1981). Variational and related methods for the overall properties of composites. *Advances in Applied Mechanics*, 21 :1–78.
- Zhu, H., Chang, C. S., and RISH, J. W. (1996a). Normal and tangential compliance for conforming binder contact I : Elastic binder. *Inf. J. Solids Structures*, 33(29) :4337–4349.
- Zhu, H., Chang, C. S., and RISH, J. W. (1996b). Normal and tangential compliance for conforming binder contact II : Visco-elastic binder. *Int. J. Solids Structures*, 33(29) :4351–4363.
- Zhu, H. and Nodes, J. E. (2000). Contact based analysis of asphalt pavement with the effect of aggregate angularity. *Mechanics of Materials*, 32 :193–202.



# **Annexe**



# Annexe A :

## Quelques méthodes itératives pour la résolution des équations non linéaires

Dans cette annexe, nous présentons les grandes lignes des deux méthodes itératives utilisées pour la détermination du paramètre  $\eta$  dans l'étude paramétrique sur l'influence de la répartition des *FVL* des inclusions sur le comportement effectif du matériau.

On rappelle que les deux lois de répartition des *FVL* que nous avons considérées sont :

$$FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \gamma \log \left( \frac{V_g^i}{\langle V_g \rangle} \right) + \eta$$

et

$$FVL^i = \frac{V_g^i}{V_V^i} = \frac{1}{1 + \eta^2 \left( \frac{V_v^i}{\langle V_v \rangle} \right)^\gamma}$$

Les deux fonctions précédentes dépendent de deux paramètres  $\gamma$  et  $\eta$ . On notera  $k^i(\gamma, \eta)$  la *FVL* de l'inclusion  $i$ . Pour  $\gamma$  fixé,  $k^i$  ne dépend plus que de  $\eta$  :

$$k^i(\gamma, \eta) = k^i(\eta) \quad \forall i = 1..N$$

Pour une fraction volumique globale des inclusions ( $f$ ) fixée,  $\eta$  doit vérifier :

$$f - \frac{\sum_i (k^i(\eta) V_v^i)}{\sum_i V_v^i} = 0 \quad (\text{A.1})$$

où  $(V_v^i, i = 1..N)$  sont les volumes des régions de Voronoï.

On se ramène donc à la résolution d'une équation de la forme :

$$h(x) = 0$$

où  $h$  est une fonction non linéaire.

Pour la première loi de répartition des *FVL*, nous avons utilisé la méthode du point fixe pour la résolution de (A.1). Concernant la deuxième loi de répartition, la méthode de Newton-Raphson a été choisie.

Dans la suite, nous présentons les grandes lignes de ces deux méthodes.

## A.1 Méthode du point fixe

Cette méthode très simple à implanter repose sur la transformation suivante. On transforme l'équation  $h(x) = 0$  en l'équation  $x + h(x) = x$  et en nommant  $g(x) = x + h(x)$ , le problème  $h(x) = 0$  revient à  $x = g(x)$ .

La méthode repose sur les étapes suivantes :

On se donne  $x_0$  (proche de la solution si possible)

On calcule  $x_1 = g(x_0)$

Puis  $x_2 = g(x_1)$

Puis  $x_3 = g(x_2)$

.

.

.

$x_k = g(x_k)$

Et on espère que, au bout de plusieurs (éventuellement beaucoup) itérations  $k$ ,  $x_k$  converge vers une valeur  $x^*$ . S'il y a convergence, on a la relation :

$$x^* = g(x^*)$$

D'après la définition de la fonction  $g$ , il s'ensuit que :

$$g(x^*) = x^* + h(x^*)$$

et

$$x^* = x^* + h(x^*)$$

$$0 = h(x^*)$$

Il s'ensuit que si les itérations sur la fonction  $g$  convergent, la valeur obtenue par convergence correspond à une solution de l'équation  $h(x) = 0$ .

**Définition :**  $x^*$  est un point fixe d'une fonction  $g$  si  $x^* = g(x^*)$ .

S'il y a convergence, le point fixe de  $g$  est une solution de  $h(x) = 0$ .

La convergence (succès) de la méthode du point fixe dépend de la forme de  $h$  et de l'estimé de départ  $x_0$ .

**Théorème 1 :** Si la fonction  $g(x)$  construite à partir de la fonction  $h(x)$ , telle que  $g(x) = x + h(x)$  a une dérivée  $g'(x)$  telle que  $|g'(x)| < 1$  pour tous les points  $x$ , alors la méthode du point fixe converge vers le point fixe  $x^*$  avec  $h(x^*) = 0$ .

Ce théorème est une condition suffisante pour assurer le succès (convergence) de la méthode du point fixe. Elle n'est pas nécessaire (indispensable) pour assurer le succès.

## A.2 Méthode de Newton-Raphson

La méthode du point fixe n'est pas très rapide et demande plusieurs itérations avant d'obtenir une bonne approximation de la solution. Il existe donc des méthodes plus efficaces comme la méthode de Newton-Raphson pour résoudre l'équation  $h(x) = 0$ .

La formule de la méthode de Newton-Raphson est la suivante

$$x_{k+1} = x_k - \frac{h(x_k)}{h'(x_k)}$$

C'est une méthode itérative qui fait intervenir la fonction  $h(x)$ , la dérivée  $h'$  de la fonction  $h(x)$  et un estimé de départ. Cette méthode est de la forme générale

$$x_{k+1} = g(x_k) \text{ où}$$

$$g(x_k) = x_k - \frac{h(x_k)}{h'(x_k)}$$

C'est donc une méthode de type point fixe. Lorsque cette méthode converge vers le point fixe  $x^*$ ,  $x^* = g(x^*)$  ce qui signifie que  $h(x^*)/h'(x^*) = 0$  et donc que  $h(x^*) = 0$  (en supposant que  $h'(x^*) \neq 0$ ) . il s'ensuit que si la méthode converge, elle converge vers la solution de l'équation  $h(x) = 0$ .

Pour que cette méthode fonctionne bien, il faut que la fonction  $f$  ait une dérivée  $h'$  et que cette dérivée ne soit pas nulle à la solution  $x^*$  car la méthode fait une division par  $h'(x)$ .

Cette méthode converge vers une solution de l'équation  $h(x) = 0$ . Même avec le même estimé de départ que la méthode du point fixe, elle n'a pas conduit à la même solution que la méthode du point fixe. On peut noter qu'en trois itérations, on obtient une très bonne approximation de la solution. Cette méthode est en général plus rapide que la méthode du point fixe mais elle est très sensible à l'estimé de départ.

**Théorème 2 :** Si la fonction  $h(x)$  est telle que  $\left| \frac{h(x)h''(x)}{h'(x)^2} \right| < 1$  pour tous les  $x$ , la méthode de Newton Raphson converge.

**Démonstration :**

On a vu que cette méthode est une méthode du point fixe avec  $g(x) = x - \frac{h(x)}{h'(x)}$ . Si on calcule la dérivée  $g'(x)$ , on obtient :

$$g'(x) = \frac{h(x)h''(x)}{h'(x)^2}$$

D'après le théorème de la section précédente, il suffit que  $|g'(x)| < 1$  ; il s'ensuit que

$$\left| \frac{h(x)h''(x)}{h'(x)^2} \right| < 1$$

Il n'est pas toujours facile d'utiliser ce théorème dans la pratique car l'inégalité précédente n'est pas facile à traiter.