HAL
open science

Influence of structural morphology on the mechanical properties of building materials : applications to gypsum and cement pastes

Julien Sanahuja

To cite this version:

Julien Sanahuja. Influence of structural morphology on the mechanical properties of building materials : applications to gypsum and cement pastes. Engineering Sciences [physics]. Ecole des Ponts ParisTech, 2008. English. NNT : . pastel-00004039

HAL Id: pastel-00004039

https://pastel.hal.science/pastel-00004039

Submitted on 18 Jul 2008

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.

ECOLE NATIONALE
DES PONTS ET CHAUSSEES

THÈSE
présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTEUR
DE
L'ÉCOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSÉES

Spécialité : Structures et Matériaux

par

Julien SANAHUJA

Sujet de la thèse :

Impact de la morphologie structurale sur les performances mécaniques des matériaux de construction : application au plâtre et à la pâte de ciment

soutenue à Champs-sur-Marne le 3 mars 2008

devant le jury composé de :

A.	ZAOUI	*Président*
C.	HELLMICH	*Rapporteur*
S.	MAGHOUS	*Rapporteur*
G.	CHANVILLARD	*Examinateur*
Y.	LE PAPE	*Examinateur*
P.	LEVITZ	*Examinateur*
L.	DORMIEUX	*Directeur*

À Xavier Grenier

Remerciements

Les prémices de cette thèse remontent en 2002, lorsque j'étais étudiant à l'ENPC. En suivant le cours de « mécanique numérique », j'ai été profondément marqué par le sens de la pédagogie et le dynamisme intellectuel de Luc DORMIEUX. Ainsi, en 2004, lorsque je me suis senti prêt à me lancer dans l'aventure de la thèse, c'est tout naturellement vers lui que je me suis tourné. À peu près au même moment, je fis la connaissance, grâce à Olivier COUSSY, de Paul ACKER, actuel directeur scientifique du LCR, Lafarge centre de recherche. Après une discussion passionnante, Paul ACKER accepta de m'accueillir en thèse CIFRE. Les acteurs étaient alors réunis.

Quelques trois ans et demi plus tard, Monsieur André ZAOUI m'a fait l'immense honneur de présider mon jury de thèse. Je lui en suis d'autant plus reconnaissant que j'ai eu la chance de découvrir la micromécanique en suivant son cours de « matériaux hétérogènes et composites ». Je remercie vivement Messieurs Christian HELLMICH et Samir MAGHOUS d'avoir accepté la lourde tâche de rapporter sur ce mémoire de thèse. Merci également à Messieurs Gilles CHANVILLARD, Yann LE PAPE et Pierre LEVITZ d'avoir participé à l'évaluation de ce travail.

J'ai donc eu le privilège de travailler sous la direction de Luc DORMIEUX. Sa rigueur scientifique, son sens de la pédagogie et de la persévérance resteront pour moi des références, de même que ses grandes qualités humaines. Son enthousiasme et sa disponibilité ont été sans failles. Il m'a témoigné sa confiance en me proposant de rejoindre son équipe d'enseignement, mais aussi en lançant des collaborations fructueuses avec plusieurs membres de son équipe de recherche. Je tiens à lui exprimer ma plus sincère gratitude. J'espère que nous aurons encore maintes occasions de travailler ensemble.

Je souhaite remercier Patrick DE BUHAN, qui m'a accueilli au sein de son équipe, dans laquelle bonne humeur rime avec rigueur scientifique. Cette alchimie particulière a largement contribué à l'accomplissement de ma thèse.

Merci donc à tous les collègues cotoyés dans cette équipe : Andréas (pour notre fructueuse collaboration sur les matériaux fragiles à cristaux en aiguilles, preuve qu'il peut être porteur d'établir des rapprochements entre domaines à première vue éloignés), Yamen (pour nos tout aussi fructueux échanges sur les milieux à interfaces), Sébastien (pour les discussions sur la morphologie des C-S-H), Jeff (pour les tuyaux sur Maple et LaTeX), Denis (pour les discussions en matière d'enseignement), Éric, Sophie, Ghazi, Sami, Bernhard, Quang, Sy Tuan. Sans oublier N.P. LOCISO, fidèle compagnon d'aventures micromécaniques.

En thèse CIFRE, on a la chance d'évoluer dans deux environnements de travail différents. Ainsi, cette thèse s'est principalement déroulée au LCR. Je tiens à remercier Paul ACKER, Gilles CHANVILLARD et Bruno ZUBER pour leur accueil et les nombreux et enrichissants échanges que nous avons eu sur les matériaux. De plus, j'ai particulièrement apprécié la confiance et la grande latitude de liberté qu'ils m'ont accordé lors de la conduite du projet. Je tiens aussi à vivement remercier Sylvain MEILLE, qui m'a tout appris sur le plâtre. En effet, c'est en premier lieu au cours de discussions « de café » que nous nous sommes rendus compte que le plâtre constituait le cobaye idéal des approches micro-macro que je développais pour le ciment. À présent, le matériau plâtre occupe une bonne partie de ma thèse.

Enfin, merci à la joyeuse équipe du « pôle matériaux structurés », animée par Gilles, notre maître à penser, et en particulier à : Fred, Béatrice (pour m'avoir supporté aux débuts), Hamouda, Blandine, Stéphane, les deux Manu, Jean-Philippe (pour les nombreux tuyaux sur LaTeX, Python et le fabuleux système GNU/Linux), Fabrice (pour nos discussions sur le plâtre), Samuel (pour les passionnantes séances de MEB), Mariette, Fabienne, Karine, Hervé, Michel, Xavier, Éric, Rémi, Andréas, Céline, Jia, Marie-Louise. Je ne peux ici citer toute l'équipe, mais le cœur y est.

Ces années ont certes été une aventure scientifique, mais aussi et surtout une aventure humaine. La découverte de l'enseignement en a bien sûr été un bel exemple. Par ailleurs, j'ai eu la chance de vivre un autre moment fort en m'évadant en trek au Népal : dépaysement le plus complet. En pleine période de rédaction, cela aura été salvateur. Merci donc à tous les camarades de trek, et en particulier à Annie, Jean-Luc et Jean-Mi. Merci à Sylvie et Jean-Mi d'être une fois encore sortis des sentiers battus en venant me soutenir le 3 mars.

Enfin, je ne terminerai pas sans exprimer ma grande reconnaissance envers ceux à qui je dois tout : mes grands-parents et mes parents. Merci également à mon frère Guillaume et à Nathalie et Philippe d'être venus me soutenir.

Résumé

Malgré une mise en œuvre en apparence très simple, le béton manifeste une grande complexité, provenant de ses caractères multiéchelle et multiphysique. Le plâtre pris présente des traits de complexité similaires.

Cette étude a pour principal but d'évaluer si l'homogénéisation des milieux aléatoires est pertinente pour appréhender de façon prédictive le comportement mécanique du plâtre pris et de la pâte de ciment. Les phénomènes explorés incluent et vont au delà de l'élasticité : rupture, endommagement, fluage.

La raideur et la limite élastique du plâtre pris sont d'abord modélisées et validées. Le comportement post-pic est aussi abordé. Un modèle morphologique de pâte de ciment est ensuite itérativement mis au point, et validé en élasticité. On considère également la limite élastique des C-S-H et on aborde le fluage de ceux-ci et de la pâte. Enfin, on explore l'impact de phénomènes intergranulaires sur la rupture (en vue d'applications aux grès) et le fluage de polycristaux poreux.

Mots-clés :
homogénéisation, plâtre, pâte de ciment, microstructure, élasticité, non linéaire, résistance, fluage, endommagement

Abstract

Despite its widespread use, concrete is a genuinely complex material, exhibiting a multiscale and multiphysics nature. Gypsum also presents such a complexity, although in a somewhat less pronounced way.

The main objective of this study is to evaluate the applicability of Eshelby-based homogenization of random media to investigate the mechanical behaviour of gypsum and cement pastes. We explore mechanical phenomena such as elasticity, as well as failure, damage and creep.

Firstly, the stiffness and the elastic limit of gypsum are modelled and validated. A micro-to-macro damage model is also proposed to investigate the post-peak behaviour. Secondly, a simplified morphological model of cement paste is developed to estimate the stiffness. The elastic limit of C-S-H is also investigated. A preliminary model of creep of C-S-H and cement paste is proposed. Thirdly, we investigate the influence of interfacial phenomena on failure (having sandstones in mind) and creep of a porous polycrystal.

Keywords:
homogenization, gypsum, cement paste, microstructure, elasticity, nonlinear, strength, creep, damage

Table des matières

Introduction **1**

I Homogénéisation des milieux aléatoires et polycristaux **7**

1 Introduction à l'homogénéisation des milieux aléatoires **9**

2 Homogénéisation des polycristaux poreux **13**
2.1 Schéma auto-cohérent avec inhomogénéité sphérique 14
2.1.1 Mise en œuvre du schéma auto-cohérent 14
2.1.2 Estimations issues du schéma auto-cohérent 16
2.1.3 Mise en œuvre d'une méthode d'homogénéisation périodique 16
2.1.4 Comparaison des résultats d'homogénéisation périodique aux estimations auto-cohérentes 18
2.2 Schéma AC avec inhomogénéité ellipsoïdale de révolution 19
2.2.1 Mise en œuvre du schéma auto-cohérent 19
2.2.2 Confrontation numérique (ellipsoïdes allongés) 23
2.2.3 Porosité critique 25
2.2.4 Remarque : influence de la forme représentant l'espace poreux 27
2.3 Conclusion 27

II Plâtre pris (matériaux à particules allongées) **29**

3 Introduction au plâtre pris **31**
3.1 Réaction d'hydratation 31
3.2 Description morphologique 35
3.2.1 Observations 35
3.2.2 Description morphologique multiéchelle 35
3.3 Synthèse des données expérimentales utilisées 37

4 Élasticité du plâtre pris **39**
4.1 Rigidité de la phase solide 40
4.1.1 Rigidité du cristal de gypse 40
4.1.2 Axe du cristal dans la maille élémentaire 40
4.2 Estimation de la rigidité du plâtre pris 42
4.2.1 Modèle morphologique 42
4.2.2 Schéma auto-cohérent 42
4.2.3 Validation expérimentale 44
4.3 Applications 44
4.3.1 Effet du rapport d'aspect des particules solides 44
4.3.2 Effet des bulles 46

4.4 Détermination d'une rigidité isotrope équivalente pour le solide 48

5 Limite élastique du plâtre pris 51
5.1 Critère à l'échelle des cristaux 52
5.2 Forme du critère macroscopique de limite élastique 53
5.2.1 Localisation des contraintes en moyenne dans les cristaux 54
5.2.2 Cas d'une contrainte macroscopique isotrope 54
5.2.3 Cas d'une contrainte macroscopique quelconque 55
5.3 Cas d'un critère local portant seulement sur la traction 56
5.3.1 Localisation : détermination de σ_N 56
5.3.2 Recherche de l'orientation critique 56
5.3.3 Détermination du critère macroscopique de limite élastique 57
5.3.4 Cas de la traction / compression simple 59
5.4 Cas du critère local complet 60
5.4.1 Localisation : détermination de σ_T 60
5.4.2 Recherche de l'orientation critique 61
5.4.3 Détermination du critère macroscopique de limite élastique 61
5.4.4 Cas de la traction / compression simple 63
5.5 Conclusion 66

6 Comportement post-limite élastique du plâtre pris 67
6.1 Distribution isotrope transverse de cristaux : rigidité estimée 68
6.1.1 Schéma auto-cohérent utilisé 69
6.1.2 Résultats 70
6.2 Modélisation d'un essai de traction simple 72
6.2.1 Définition du chargement imposé 72
6.2.2 Repérage du cristal critique 73
6.2.3 Détermination du comportement au delà de la limite élastique 74
6.3 Modélisation d'un essai de compression simple 76
6.3.1 Définition du chargement imposé 76
6.3.2 Repérage du cristal critique 76
6.3.3 Détermination du comportement au delà de la limite élastique 77
6.4 Remarques de conclusion 79

III Silicates de calcium hydratés (matériaux à particules aplaties) 81

7 Introduction sur les C-S-H et pâtes de ciment 83
7.1 Réaction d'hydratation du ciment : quelques éléments 84
7.1.1 Description de la réaction 84
7.1.2 Évolution des fractions volumiques 85
7.2 Morphologie des pâtes de ciment 88
7.2.1 À l'échelle de la pâte 88
7.2.2 À l'échelle des C-S-H 89
7.3 Synthèse des données expérimentales utilisées 90
7.3.1 Élasticité 90
7.3.2 Résistance 92
7.3.3 Prise 92
7.3.4 Fluage 93

8 Élasticité des C-S-H et des pâtes de ciment 95

8.1 Première tentative de modèle de pâte de ciment . . . 97
8.1.1 Modélisation . . . 97
8.1.2 Résultats . . . 102
8.1.3 Introduction de deux familles de particules de taille initiale contrastée . . 104
8.2 Modélisation . . . 107
8.2.1 Observations morphologiques . . . 107
8.2.2 Modèle morphologique . . . 109
8.2.3 Modèle micromécanique . . . 110
8.2.4 Données d'entrée . . . 112
8.3 Mise en œuvre et confrontation expérimentale . . . 115
8.3.1 Calibration de la forme des ellipsoïdes des hydrates basse densité . . . 116
8.3.2 Évolution du module de Young de la pâte en cours d'hydratation . . . 117
8.3.3 Module de Young de la pâte en fin d'hydratation . . . 118
8.4 Quelques remarques sur le modèle . . . 119
8.4.1 Module de Young des hydrates basse densité . . . 119
8.4.2 Schéma d'homogénéisation alternatif à l'échelle de la pâte . . . 120
8.4.3 Influence de la forme des particules d'hydrates basse densité . . . 120
8.4.4 Retour sur la rigidité des briquettes élémentaires . . . 121
8.4.5 Module de Young de la pâte au très jeune âge . . . 123
8.5 Conclusion . . . 129

9 Résistance des C-S-H et pâtes de ciment 131
9.1 Premier modèle de résistance de pâte . . . 132
9.1.1 Introduction . . . 132
9.1.2 Homogénéisation linéaire et niveau de déformation moyen des hydrates . . 132
9.1.3 Estimation du critère de rupture de la pâte . . . 134
9.1.4 Application : résistance à la compression simple . . . 138
9.2 Limite élastique d'un amas de plaquettes . . . 138
9.2.1 Critère à l'échelle de la plaquette . . . 139
9.2.2 Localisation : détermination de σ'_n . . . 140
9.2.3 Recherche de la famille de plaquettes critiques . . . 140
9.2.4 Détermination du critère macroscopique de limite élastique . . . 143
9.2.5 Cas de la traction / compression simple . . . 145

10 Effets différés (fluage) des C-S-H et pâtes de ciment 147
10.1 Glissement visqueux feuillet sur feuillet . . . 149
10.2 Glissement visqueux et raideur normale . . . 150
10.2.1 Fluage à court terme . . . 152
10.2.2 Fluage à long terme . . . 153
10.2.3 Simulation numérique de la déformation de fluage . . . 155
10.2.4 Effet du rapport d'aspect des particules solides . . . 157
10.3 Glissement visqueux et raideur isotrope . . . 158
10.3.1 Fluage à court terme . . . 160
10.3.2 Fluage à long terme . . . 160
10.3.3 Simulation numérique de la déformation de fluage . . . 162
10.3.4 Effet du rapport d'aspect des particules solides . . . 164
10.4 Estimation du fluage de la pâte . . . 164
10.4.1 Modèle . . . 164
10.4.2 Confrontation expérimentale . . . 164
10.4.3 Questions et perspectives d'amélioration . . . 166

IV Effets d'interface (cas de particules sphériques) 167

11 Introduction 169

12 Résistance impliquant des mécanismes d'interface 171
12.1 Préliminaires indépendants de la morphologie . . . 173
12.1.1 Déformations moyennes en élasticité linéaire . . . 173
12.1.2 Critère de rupture macroscopique . . . 175
12.2 Morphologies envisagées . . . 179
12.2.1 Lien entre les raideurs d'interface . . . 180
12.2.2 Estimation de la surface spécifique de contacts . . . 181
12.2.3 Estimation de moyennes . . . 183
12.2.4 Grains isotropes et interface non parfaite . . . 184
12.2.5 Grains isotropes transverses et interface non parfaite . . . 187
12.3 Estimation de critères de rupture d'assemblages de grains . . . 189
12.3.1 Rupture intragranulaire . . . 189
12.3.2 Rupture intergranulaire . . . 193
12.3.3 Rupture intra et intergranulaire . . . 199
12.4 Conclusion . . . 203

13 Effets différés (fluage) par mécanisme d'interface 205
13.1 Préliminaire en élasticité . . . 206
13.2 Grains élastiques et joints visqueux . . . 206
13.3 Grains visqueux et joints élastiques . . . 208

V Annexes 211

A Notation de Voigt pour les tenseurs symétriques 213

B Schéma AC avec particules isotropes transverses 215
B.1 Cas général : comportement isotrope transverse quelconque . . . 216
B.2 Cas particulier : feuillets rigides . . . 218
B.2.1 Principe de détermination des modules effectifs . . . 218
B.2.2 Développements limités . . . 219
B.3 Cas particulier : souplesse isotrope et souplesse de glissement . . . 220
B.3.1 Principe de détermination des modules effectifs . . . 220
B.3.2 Développements limités . . . 221

C Résolution de problèmes auxiliaires d'élasticité 223
C.1 Sphère composite à deux phases isotropes concentriques . . . 224
C.1.1 Déformation auxiliaire sphérique . . . 224
C.1.2 Déformation auxiliaire déviatorique . . . 226
C.1.3 Moyenne sur la calotte de la contrainte moyenne . . . 227
C.2 Sphère isotrope entourée d'une interface . . . 227
C.2.1 Déformation auxiliaire sphérique . . . 228
C.2.2 Déformation auxiliaire déviatorique . . . 230
C.3 Sphère feuilletée entourée d'une interface . . . 231
C.3.1 Déformation auxiliaire sphérique . . . 232
C.3.2 Déformations auxiliaires déviatoriques . . . 233
C.3.3 Tenseurs de localisation . . . 235

C.3.4 Ensemble d'inhomogénéités d'orientation répartie de façon isotrope 236

Conclusion et perspectives **237**

Bibliographie **243**

Principales notations **251**

Liste des tableaux **253**

Table des figures **255**

Introduction

Le béton est un matériau de construction extrêmement répandu. Bien que sa fabrication et sa mise en œuvre soient en apparence très simples, il fait preuve d'une grande complexité, dont on n'est a priori loin d'avoir percé tous les secrets. Il tire principalement sa complexité de son caractère multiéchelles et des processus multiphysiques qui se produisent au sein de la microstructure. Parmi tous les constituants du béton, la pâte de ciment est celui qui évolue le plus dans le temps ; comparativement, les granulats sont relativement inertes. Ainsi, la pâte de ciment mérite une attention particulière. Elle manifeste en fait le même niveau de complexité que le béton. Son caractère multiéchelles suggère la mise à profit de la micromécanique pour mieux comprendre comment des mécanismes ayant lieu à l'échelle microscopique voire nanoscopique se traduisent en comportement mécanique macroscopique.

Le plâtre pris est un matériau très répandu également, même s'il est non structurel. Il s'agit d'un matériau multiéchelles mais nettement moins complexe que les pâtes de ciment. En effet, la microstructure est bien identifiée et les mécanismes locaux (microscopiques) sont relativement bien connus. Ainsi, le plâtre pris peut être considéré comme un matériau modèle dans la perspective de confrontation expérience - théorie en sciences des matériaux.

Ce travail est consacré à l'analyse par méthode de changement d'échelle du comportement des pâtes de ciment et du plâtre pris. Dans toute la suite, on fait appel à l'homogénéisation des milieux aléatoires basée sur le résultat de l'inhomogénéité d'Eshelby, afin d'éviter des développements numériques trop lourds. En effet, il serait difficilement acceptable, dans une perspective de conception de matériaux, impliquant donc des processus d'optimisation, de devoir attendre plusieurs jours le résultat d'une simulation. La première étape est de rassembler suffisamment d'information sur la microstructure, en particulier l'arrangement géométrique des phases, et sur les mécanismes ayant cours à l'échelle microscopique voire nanoscopique. Ces informations représentent les données d'entrée de nos modèles. On met ensuite en œuvre des techniques de changement d'échelle afin de déterminer le comportement résultant de ces données d'entrée à l'échelle macroscopique, pour explorer aussi bien le domaine élastique que celui du comportement irréversible. Enfin, la confrontation expérimentale nous éclaire sur la validité du modèle. Nous voyons donc un premier usage de la micromécanique comme un outil susceptible de nous aider à appréhender la façon dont les paramètres de nature microscopique (entrées) influent sur le comportement macroscopique d'un matériau (sortie).

Malheureusement, en ce qui concerne le ciment, le cheminement que nous venons de présenter est relativement idéaliste dans le sens où ni la microstructure, ni les mécanismes locaux à l'origine des comportements macroscopiques ne sont bien connus. Il s'agit d'une réelle difficulté. Nous avons ainsi été contraints de détourner l'approche micromécanique de sa finalité initiale pour en faire un outil de test de validité de différentes hypothèses sur la microstructure ou les micromécanismes, dans le cadre d'une démarche essai - erreur.

La **partie I** rappelle brièvement les bases de l'homogénéisation des milieux aléatoires en élasticité linéaire, puis propose une application aux polycristaux poreux, en mettant l'accent sur l'influence de la forme des particules solides.

Le chapitre 1 rappelle très brièvement, dans un cadre élastique linéaire, le principe de la méthode de changement d'échelle que nous avons adoptée : l'homogénéisation des milieux aléatoires basée sur le résultat de l'inhomogénéité d'Eshelby.

Le chapitre 2 propose une application de l'homogénéisation des milieux aléatoires aux polycristaux poreux. Plus précisément, il s'agit de confronter des estimations issues du schéma auto-cohérent, à des résultats numériques issus de calculs par éléments finis. L'objectif de cette approche essentiellement pragmatique est de tenter d'identifier des familles de microstructures pour lesquelles le schéma auto-cohérent offre une approximation intéressante de l'élasticité effective. L'accent est mis en particulier sur l'influence de la forme des particules solides.

La **partie II** est consacrée à l'étude du plâtre pris, modélisé comme un matériau formé de particules allongées. La microstructure de ce dernier se présente en effet comme un enchevêtrement de cristaux de gypse élancés.

Le chapitre 3 introduit cette partie II en proposant quelques informations de base sur le matériau plâtre pris. Après avoir rappelé la réaction chimique qui permet de passer d'un mélange de poudre de plâtre et d'eau à un ensemble de cristaux de gypse, on propose un modèle de description de la morphologie du matériau, basé sur des observations au microscope. Cette description de la morphologie sera mise à profit aux chapitres suivants pour bâtir des modèles de comportement par changement d'échelle. Ce chapitre se termine par une synthèse de données expérimentales sur le comportement mécanique macroscopique du plâtre pris, qui seront utilisées aux chapitres suivants.

Le chapitre 4 s'appuie sur le modèle morphologique mis au point au chapitre précédent pour proposer un schéma d'homogénéisation prédisant l'élasticité du plâtre pris. L'estimation du module de Young d'un plâtre pris sans bulles est d'abord validée avec succès vis-à-vis de nombreux résultats expérimentaux disponibles dans la littérature. On propose ensuite deux applications, visant à étudier l'influence de la forme des particules solides et de la présence de bulles sur l'élasticité effective. Enfin, on évalue une rigidité isotrope « équivalente » à conférer aux particules solides en remplacement de la rigidité anisotrope du gypse, ceci afin de simplifier les développements présentés dans les deux chapitres suivants. On vérifie que cette approximation ne modifie que très peu les prédictions réalisées en élasticité.

Le chapitre 5 est consacré au développement d'un modèle de limite élastique du plâtre pris. L'idée est de partir d'un critère de rupture fragile des cristaux, exprimé sur la contrainte moyenne dans le cristal et dépendant de l'orientation de ce dernier, pour aboutir à un critère de limite d'élasticité du plâtre pris sans bulles. On montre que le critère obtenu est un cône dans l'espace des contraintes principales. Les prédictions issues du modèle sont alors comparées aux résistances en traction ou compression simple mesurées, et ce sur une large gamme de porosités.

Dans le chapitre 6, nous proposons d'aller plus loin en examinant ce qui se produit lorsque la déformation macroscopique imposée lors d'un essai de traction ou de compression simple dépasse la déformation correspondant à la limite élastique. Les cristaux sont toujours supposés élastiques fragiles. Il s'agit de mettre au point un modèle d'endommagement en suivant pour chaque niveau de déformation macroscopique la population de cristaux qui n'a pas encore atteint son critère de rupture, et qui est par conséquent à même de reprendre les efforts intérieurs.

Dans la **partie III**, on se tourne vers les matériaux cimentaires, et plus précisément les silicates de calcium hydratés (C-S-H, pricipaux hydrates des pâtes de ciment Portland), modélisés comme un matériau constitué de particules aplaties. Ceux-ci assurent la cohésion des pâtes en jouant le rôle de colle. Outre la question de la forme des particules, les pâtes de ciment se distinguent du plâtre pris notamment par l'extrême complexité de leur microstructure. Aussi, une part importante de notre travail sera de mettre au point un modèle morphologique simplifié mais offrant des estimations satisfaisantes des caractéristiques élastiques.

Le chapitre 7 introduit cette partie III en proposant d'abord quelques informations sur la réaction d'hydratation du ciment, permettant de passer d'une suspension de grains dans de l'eau à un matériau solide, la pâte de ciment. Force est de dresser le constat du manque de consensus de la communauté scientifique sur la morphologie des pâtes de ciment et ce à plusieurs échelles (pâte et C-S-H). Enfin, on réalise une synthèse des données expérimentales sur la mécanique des pâtes de ciment, issues de la littérature, et utilisées tout au long de cette partie III.

Le chapitre 8 a un double objectif : concevoir un modèle morphologique de pâte de ciment descendant jusqu'à l'échelle des particules de C-S-H (de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres), et valider expérimentalement ce modèle vis-à-vis de l'élasticité. Comme on l'a déjà dit, cette partie de notre travail est essentiellement de nature « essai - erreur », le critère nous permet-

tant de juger de la pertinence d'un modèle morphologique étant la confrontation des estimations issues de ce modèle aux résultats expérimentaux. Nous présentons d'abord dans ce chapitre une première idée sur la morphologie, fréquemment rencontrée dans la littérature, mais sur laquelle nous avons subi quelques déconvenues. Les difficultés rencontrées nous ont amené à formuler un modèle alternatif. Ce dernier offre des prédictions intéressantes de l'élasticité d'une pâte en cours d'hydratation.

Le chapitre 9 est constitué de deux parties. La première partie reprend le premier modèle de pâte exposé dans le chapitre précédent, et s'en nourrit pour estimer le critère de rupture macroscopique par homogénéisation non linéaire. Les inconvénients rencontrés en élasticité sont encore présents. Ainsi, dans une deuxième partie, nous cherchons à profiter à la fois du modèle morphologique alternatif présenté dans le chapitre précédent et des travaux sur la limite élastique du plâtre pris, pour proposer un modèle de limite élastique des C-S-H. Ce dernier reprend l'idée de rupture fragile des particules employée sur le plâtre pris. La différence provient de la forme des particules, à présent aplaties au lieu d'allongées.

Le chapitre 10 s'intéresse au fluage des C-S-H et pâtes de ciment matures. Il s'agit de partir du mécanisme local responsable des déformations différées observées à l'échelle macroscopique. Ici encore, la communauté scientifique ne semble pas avoir atteint un consensus précis, mais parmi les hypothèses émises, le glissement feuillet sur feuillet au sein des C-S-H semble fréquemment revenir. Sur cette base, nous avons construit plusieurs modèles de fluage macroscopique de C-S-H. Dans une dernière partie, nous réalisons une étape d'homogénéisation supplémentaire pour atteindre l'échelle de la pâte de ciment, afin de pouvoir comparer nos estimations à des résultats expérimentaux de fluage.

La **partie IV** est consacrée à l'influence de la présence d'interfaces ou de joints entre les particules solides au sein d'un assemblage de type polycristal poreux.

Le chapitre 11 commence en effet par dresser le constat qu'en ce qui concerne les deux matériaux étudiés dans les parties précédentes, plâtre pris et pâte de ciment, plusieurs comportements macroscopiques mettent en jeu des mécanismes interfaciaux. On peut par exemple citer le fluage du plâtre pris, souvent associé à un glissement relatif des cristaux de gypse. La prise en compte de tels effets d'interface autour de particules de forme aplatie ou allongée dans le cadre de l'homogénéisation des milieux aléatoires, sans recourir à des calculs numériques relativement lourds, n'a pas été effectuée dans le cadre de ce travail. Néanmoins, afin d'appréhender l'impact de ces effets d'interface sur le comportement effectif, nous proposons de nous restreindre aux particules sphériques, cas particulier traitable sans développements lourds. Il s'agit donc d'une partie un peu plus académique dans la mesure où l'application au plâtre pris ou aux pâtes de ciment n'est plus possible que de façon qualitative.

Le chapitre 12 propose des estimations de critères de rupture, par homogénéisation non linéaire, de polycristaux poreux présentant des interfaces non parfaites entre les grains. On envisage d'abord une rupture intragranulaire, le contact entre les grains étant soit infiniment résistant, soit lisse (aucune résistance au cisaillement). On passe ensuite à un mécanisme de rupture intergranulaire, les grains étant supposés soit infiniment résistants, soit constitués de feuillets pouvant librement glisser les uns sur les autres. On envisage enfin un mécanisme de rupture impliquant à la fois les grains et les joints.

Le chapitre 13 s'intéresse au fluage de polycristaux présentant des joints non parfaitement adhérents entre les grains. On envisage successivement le cas de grains élastiques séparés par des joints visqueux, et le cas de grains visqueux séparés par des joints élastiques. Le premier cas correspond au mécanisme de fluage couramment admis pour le plâtre pris.

La **partie V** rassemble en annexe des éléments et développements utiles mais qui nous semblent un peu trop techniques pour intégrer le texte principal.

L'annexe A rappelle la notation de Voigt, bien pratique pour représenter les composantes des tenseurs d'ordre deux symétriques et d'ordre quatre présentant les symétries mineures.

L'annexe B établit quelques résultats sur le comportement élastique effectif de polycristaux poreux formés de particules feuilletées. Ces résultats sont mis à profit au chapitre 10, consacré au fluage des C-S-H et pâtes de ciment.

L'annexe C propose enfin la résolution de quelques problèmes d'élasticité qui sont des généralisations du problème de l'inhomogénéité d'Eshelby. Ces résultats sont exploités pour bâtir des schémas d'homogénéisation dans les chapitres 8, 9, 12 et 13.

Première partie

Homogénéisation des milieux aléatoires et polycristaux

Chapitre 1

Introduction à l'homogénéisation des milieux aléatoires en élasticité

Ce chapitre ne propose qu'une très brève introduction à l'homogénéisation des milieux aléatoires en élasticité linéaire. Pour plus de détails, on pourra se reporter à [133] ou [30].

Les approches de changement d'échelle ont pour but de déterminer le comportement effectif d'un matériau composite à partir des comportements élémentaires des différentes phases le constituant, et de sa morphologie (arrangement géométrique des différentes phases). Parmi ces approches, on peut distinguer l'homogénéisation périodique, partant d'une hypothèse de périodicité de la morphologie, et l'homogénéisation des milieux aléatoires, a priori adaptée aux matériaux dont la microstructure n'est caractérisée que de façon statistique. Ainsi, par exemple dans le cas d'un béton, il est hors de question de décrire précisément la position de chaque granulat. Le comportement effectif, dit homogénéisé, peut ensuite être mis à profit pour réaliser des calculs à l'échelle de la structure (figure 1.1).

Avant toutes choses, il est nécessaire de définir un volume élémentaire représentatif (VER) dont la taille l (ordre de grandeur de ses dimensions) doit satisfaire deux conditions :

- suffisamment petite vis-à-vis de la taille L de la structure (volume *élémentaire*),
- suffisamment grande devant la taille caractéristique d des hétérogénéités de la microstructure (volume *représentatif*).

Ainsi la condition de séparation des échelles $d \ll l \ll L$ est une condition nécessaire pour que la notion de VER soit valide [133]. Il faut de plus ajouter la condition $l \ll \lambda$ où λ est la longueur caractéristique de variation du chargement mécanique appliqué à la structure [133].

La variable d'espace est notée $\underline{x}^M$ à l'échelle de la structure (M comme « macro »), si bien que la microstructure du VER dépend a priori de $\underline{x}^M$. À l'échelle de la microstructure, la variable d'espace est notée $\underline{x}$.

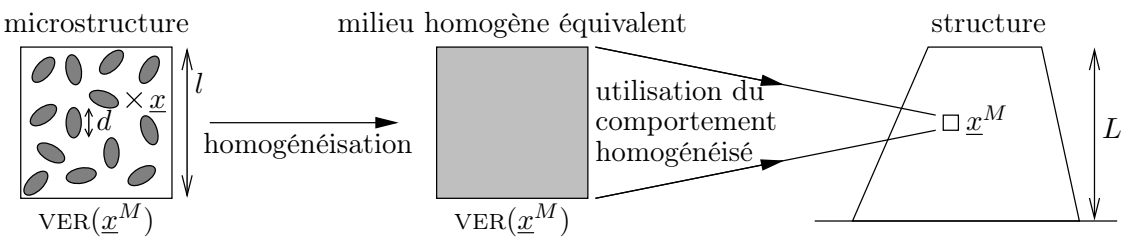


FIG. 1.1 – Différentes échelles caractérisant une structure et son matériau constitutif

Dans l'ensemble de ce document, on se place dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations [104].

Dans le cadre de l'homogénéisation des matériaux composites à morphologie aléatoire en élasticité linéaire [134], pour des conditions de déformation homogène au contour du VER (figure 1.2), le tenseur de rigidité effectif s'écrit :

$$\mathbb{C}^{hom} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} f_i \mathbb{C}_i : \langle \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_i \tag{1.1}$$

où $\mathcal{N}$ est le nombre de phases différentes, f_i la fraction volumique de la phase i, $\mathbb{C}_i$ le tenseur de rigidité de la phase i, $\mathbb{A}(\underline{x})$ le tenseur de localisation des déformations dans le VER (défini sur la figure 1.2), et $\langle a \rangle_i$ la moyenne du champ a sur le domaine occupé par la phase i.

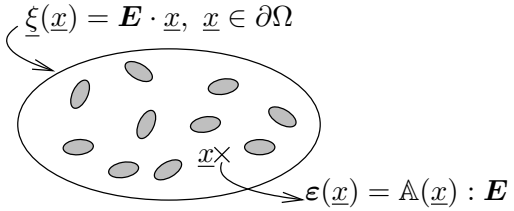


FIG. 1.2 – Représentation schématique d'un VER soumis à des conditions aux limites de déformation homogène au contour

Dans le cas particulier d'un milieu poreux dont la phase solide est homogène, désignée par l'indice s, l'expression (1.1) devient :

$$\mathbb{C}^{hom} = (1 - \varphi)\mathbb{C}_s : \langle \mathbb{A} \rangle_s \tag{1.2}$$

avec φ la porosité et $\mathbb{C}_s$ le tenseur de rigidité de la phase solide.

Il est illusoire de chercher à déterminer de façon exacte le champ $\mathbb{A}(\underline{x})$ de tenseur de localisation des déformations, d'autant plus que la morphologie n'est en général connue que de façon statistique. De plus, (1.1) indique que la connaissance de moyennes est en fait suffisante. On a donc recours à des *estimations* de la moyenne de $\mathbb{A}(\underline{x})$ sur les différentes phases. Pour cela, on construit un « schéma d'homogénéisation » intégrant des informations sur la morphologie. Dans le cadre de l'approche basée sur les travaux d'Eshelby [36], la moyenne du tenseur de localisation des déformations $\langle \mathbb{A} \rangle_i$ est estimée par la déformation uniforme qui s'établit dans une inhomogénéité ellipsoïdale plongée dans un milieu de référence infini de rigidité $\mathbb{C}_0$ soumis à des conditions aux limites de déformation homogène à l'infini, de la forme $\underline{\xi}(\underline{x}) = \boldsymbol{E}_0 \cdot \underline{x}$ (problème auxiliaire d'élasticité, voir figure 1.3). Cette déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ est ensuite reliée à la déformation $\boldsymbol{E}$ appliquée au contour du VER en écrivant la règle de moyenne des déformations $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \boldsymbol{E}$. Les informations dont on dispose sur la morphologie conduisent à choisir une rigidité de référence $\mathbb{C}_0$ particulière et une forme particulière d'ellipsoïde représentant chaque phase [132]. Par exemple, pour le schéma auto-cohérent [60, 17] classiquement employé dans le cas des microstructures de nature polycristalline, le milieu homogénéisé recherché est utilisé comme milieu de référence : $\mathbb{C}_0 = \mathbb{C}^{hom}$. Lorsqu'il existe une phase connexe (matrice) entourant toutes les autres, le schéma de Mori-Tanaka [85] l'exploite comme milieu de référence.

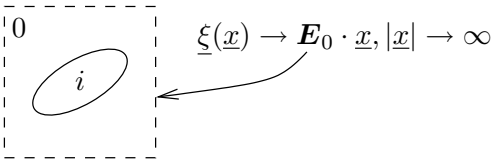


FIG. 1.3 – Problème auxiliaire d'élasticité à résoudre en vue d'estimer la moyenne du tenseur de localisation des déformations sur la phase i

Chapitre 2

Homogénéisation des polycristaux poreux

On considère des polycristaux poreux, c'est-à-dire des matériaux poreux dont la phase solide est constituée d'un ensemble de grains. Pour estimer l'élasticité effective d'un tel milieu poreux, dont la morphologie est désordonnée, et pour lequel le concept de matrice solide entourant les pores n'a pas de sens, il semble naturel de recourir à un schéma auto-cohérent. Or ce dernier représente la morphologie de façon implicite, ce qui fait qu'il est difficile de préciser clairement la microstructure qu'il modélise. En revanche, les techniques d'homogénéisation périodique, par calcul numérique, se basent sur des représentations très explicites de la morphologie. Ces deux méthodes s'opposent du point de vue du caractère désordonné de la morphologie : désordre parfait pour le schéma auto-cohérent ; représentation très ordonnée pour l'homogénéisation périodique. Néanmoins, on compare, de façon très pragmatique, les estimations de caractéristiques élastiques effectives issues de ces deux méthodes. Cette confrontation aide à préciser des types de microstructures sur lesquelles le schéma auto-cohérent fournit des approximations intéressantes. On étudie en particulier l'effet de la forme utilisée pour représenter la phase solide : sphère ou ellipsoïde de révolution. Les estimations issues du schéma auto-cohérent avec formes sphériques peuvent être rapprochées d'une morphologie de type « assemblage de sphères tronquées ». Un schéma auto-cohérent avec formes solides ellipsoïdales de révolution allongées semble quant à lui offrir une approximation intéressante pour modéliser un enchevêtrement de particules élancées.

Sommaire

2.1 Schéma auto-cohérent avec inhomogénéité sphérique **14**
2.1.1 Mise en œuvre du schéma auto-cohérent 14
2.1.2 Estimations issues du schéma auto-cohérent 16
2.1.3 Mise en œuvre d'une méthode d'homogénéisation périodique 16
2.1.4 Comparaison des résultats d'homogénéisation périodique aux estimations auto-cohérentes 18
2.2 Schéma AC avec inhomogénéité ellipsoïdale de révolution **19**
2.2.1 Mise en œuvre du schéma auto-cohérent 19
2.2.2 Confrontation numérique (ellipsoïdes allongés) 23
2.2.3 Porosité critique 25
2.2.4 Remarque : influence de la forme représentant l'espace poreux 27
2.3 Conclusion **27**

On considère ici des matériaux poreux dont la phase solide est constituée d'un ensemble de grains. Le solide ne forme donc pas a priori une matrice connexe entourant les pores : la morphologie est plutôt de nature polycristalline. Le comportement de tous les grains est identique et élastique linéaire isotrope. Intuitivement, on pressent que les caractéristiques élastiques effectives d'un tel milieu poreux dépendent non seulement de la rigidité du solide et de la porosité mais aussi de la forme des grains.

La morphologie étant de nature polycristalline, le schéma auto-cohérent semble être le mieux placé (parmi tous les schémas usuels d'homogénéisation des milieux aléatoires faisant appel au résultat de l'inhomogénéité d'Eshelby) pour estimer les caractéristiques élastiques effectives des matériaux poreux envisagés ici. La théorie systématique de Kröner indique que le schéma auto-cohérent fournit la rigidité effective d'un milieu « parfaitement désordonné » [69]. Néanmoins, il ne semble pas facile de mettre une répartition géométrique de phases bien précise derrière ce concept de désordre parfait. À l'opposé, les approches d'homogénéisation périodique se nourrissent de représentations très explicites de la morphologie, puisqu'il s'agit de réaliser des calculs numériques sur une maille élémentaire de la microstructure périodique. Dans ce chapitre, on propose de confronter les caractéristiques élastiques effectives issues de ces deux méthodes : schéma auto-cohérent et homogénéisation périodique. Comparer les résultats d'un modèle supposant le désordre parfait avec ceux de l'homogénéisation périodique, modélisant des milieux éminemment ordonnés, semble relever du « grand écart ». Nous en sommes conscients : nous souhaitons ici mettre en œuvre une démarche essentiellement pragmatique, visant à tenter de préciser les microstructures sur lesquelles le schéma auto-cohérent offre une approximation intéressante de l'élasticité effective.

Nous considérons ici deux cas, selon la forme employée dans le problème auxiliaire visant à estimer la déformation moyenne de la phase solide. Le premier cas est celui du schéma auto-cohérent à forme sphérique (section 2.1). On souhaite en particulier le positionner vis-à-vis d'un assemblage de particules de granulométrie plutôt monodisperse ou plutôt étalée. Le second cas cherche à étudier l'influence de la forme de l'inhomogénéité solide, employée dans le problème auxiliaire visant à estimer la déformation moyenne de la phase solide, sur l'élasticité effective (section 2.2). On compare les résultats à des calculs numériques sur microstructures artificielles constituées d'un enchevêtrement de particules allongées.

2.1 Schéma auto-cohérent avec inhomogénéité sphérique

On commence par envisager le cas où les inhomogénéités mises en jeu dans les problèmes auxiliaires sont des sphères (figure 2.1). Les indices s et p se rapportent respectivement à la phase solide et à l'espace poreux. La porosité est notée φ, la fraction solide étant le complémentaire $f_s = 1 - \varphi$. Le tenseur de rigidité des grains, supposé isotrope, s'écrit $\mathbb{C}_s = 3k_s\mathbb{J} + 2\mu_s\mathbb{K}$, en notant k_s le module de compression et μ_s le module de cisaillement. L'estimation auto-cohérente de la rigidité effective est également isotrope. Elle est notée $\mathbb{C}^{AC} = 3k^{AC}\mathbb{J} + 2\mu^{AC}\mathbb{K}$.

2.1.1 Mise en œuvre du schéma auto-cohérent

Bien que l'approche soit classique (voir par exemple [60, 17, 133, 30]), on rappelle brièvement le principe de mise en œuvre du schéma auto-cohérent en vue d'estimer la rigidité effective. Les déformations moyennes de la phase solide et de l'espace poreux sont estimées en résolvant les problèmes auxiliaires d'élasticité linéaire représentés sur la figure 2.1. Ces derniers sont des cas particuliers du problème de l'inhomogénéité d'Eshelby [36].

La déformation moyenne de l'espace poreux est estimée par la déformation uniforme d'une cavité sphérique plongée dans le milieu de référence infini, dont l'élasticité est caractérisée par la

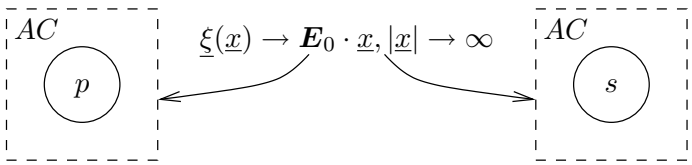


FIG. 2.1 – Problèmes auxiliaires d'élasticité à résoudre pour mettre en œuvre le schéma auto-cohérent envisagé (forme sphérique pour représenter l'espace poreux p et le solide s)

rigidité $\mathbb{C}^{AC}$ recherchée, et soumis à la déformation homogène auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ à l'infini :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1} : \boldsymbol{E}_0 \tag{2.1}$$

avec $\mathbb{S}_{sph}^{AC}$ le tenseur d'Eshelby [36] d'une sphère dans le milieu de rigidité $\mathbb{C}^{AC}$. Ce milieu de référence étant isotrope, le tenseur d'Eshelby a pour expression :

$$\mathbb{S}_{sph}^{AC} = \alpha^{AC}\mathbb{J} + \beta^{AC}\mathbb{K} \quad \text{avec} \quad \alpha^{AC} = \frac{3k^{AC}}{3k^{AC} + 4\mu^{AC}} \quad \text{et} \quad \beta^{AC} = \frac{6}{5}\frac{k^{AC} + 2\mu^{AC}}{3k^{AC} + 4\mu^{AC}} \tag{2.2}$$

La déformation moyenne de la phase solide est estimée par la déformation uniforme qui s'établit dans une sphère constituée de cette même phase solide, plongée dans le milieu de référence infini, de rigidité $\mathbb{C}^{AC}$, et soumis à la déformation homogène $\boldsymbol{E}_0$ à l'infini :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s = \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} : \boldsymbol{E}_0 \tag{2.3}$$

avec $\mathbb{P}_{sph}^{AC}$ le tenseur de Hill d'une sphère dans le milieu de rigidité $\mathbb{C}^{AC}$. Ce dernier est relié au tenseur d'Eshelby correspondant par $\mathbb{S}_{sph}^{AC} = \mathbb{P}_{sph}^{AC} : \mathbb{C}^{AC}$.

La déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ est reliée à la déformation $\boldsymbol{E}$ imposée au contour du VER par la règle de moyenne $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \boldsymbol{E}$, où $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \varphi \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p + (1-\varphi) \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s$, soit :

$$\boldsymbol{E} = \left[\varphi(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1} + (1-\varphi)\left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1}\right] : \boldsymbol{E}_0 \tag{2.4}$$

La contrainte moyenne dans le VER s'écrit $\boldsymbol{\Sigma} = (1-\varphi)\mathbb{C}_s : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s$, soit, en rappelant (2.3) :

$$\boldsymbol{\Sigma} = (1-\varphi)\mathbb{C}_s : \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} : \boldsymbol{E}_0 \tag{2.5}$$

Finalement, l'estimation auto-cohérente de la rigidité homogénéisée est le tenseur reliant la contrainte moyenne $\boldsymbol{\Sigma}$ à la déformation $\boldsymbol{E}$ imposée au contour du VER, selon $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^{AC} : \boldsymbol{E}$, ce qui donne, en faisant appel à (2.4) et (2.5) :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}^{AC} \quad = \quad & (1-\varphi)\mathbb{C}_s : \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} : \\ & \left[\varphi(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1} + (1-\varphi)\left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1}\right]^{-1} \end{aligned} \tag{2.6}$$

Le membre de droite de cette dernière équation est un tenseur isotrope, puisqu'il ne fait intervenir que des tenseurs isotropes. En particulier, il s'agit d'un tenseur symétrique. Remarquons que (2.6) peut se mettre sous la forme plus classique [133] :

$$\begin{aligned} (1-\varphi)(\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} + \varphi(-\mathbb{C}^{AC})(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1} \quad &= \\ \left\langle \delta\mathbb{C} : (\mathbb{I} + \mathbb{P} : \delta\mathbb{C})^{-1} \right\rangle \quad &= \quad 0 \end{aligned} \tag{2.7}$$

en notant $\delta\mathbb{C} = \mathbb{C}(\underline{x}) - \mathbb{C}^{AC}$, et avec $\mathbb{C}(\underline{x})$ le tenseur de rigidité rencontré au point $\underline{x}$ du VER.

L'équation tensorielle (2.6) peut alors être projetée sur $\mathbb{J}$ et $\mathbb{K}$ pour donner naissance à deux équations non linéaires dont k^{AC} et μ^{AC} sont les solutions positives. Ces équations peuvent se mettre sous la forme :

$$k^{AC} = \frac{4(1-\varphi)k_s\mu^{AC}}{3\varphi k_s + 4\mu^{AC}} \tag{2.8}$$

$$8{\mu^{AC}}^2 + \left[3(3-\varphi)k_s + 4(5\varphi-2)\mu_s\right]\mu^{AC} + 9(2\varphi-1)k_s\mu_s = 0 \tag{2.9}$$

2.1.2 Estimations issues du schéma auto-cohérent

Le module de Young auto-cohérent rapporté au module de Young du solide (E^{AC}/E_s) et le coefficient de Poisson auto-cohérent (ν^{AC}) dépendent à la fois de la porosité φ et du coefficient de Poisson ν_s du solide. La porosité est le seul paramètre morphologique de ce modèle. La figure 2.2 gauche montre qu'en pratique le module de Young effectif est quasiment indépendant du coefficient de Poisson du solide, du moins tant que ce dernier reste compris entre 0 et 0.5. Il apparaît une porosité critique $\varphi^c = 1/2$, au dessus de laquelle le module de Young auto-cohérent s'annule. On constate que lorsque la porosité tend vers cette porosité critique par valeurs inférieures, le coefficient de Poisson auto-cohérent tend vers 1/5, indépendamment du coefficient de Poisson du solide[1] (figure 2.2 droite).

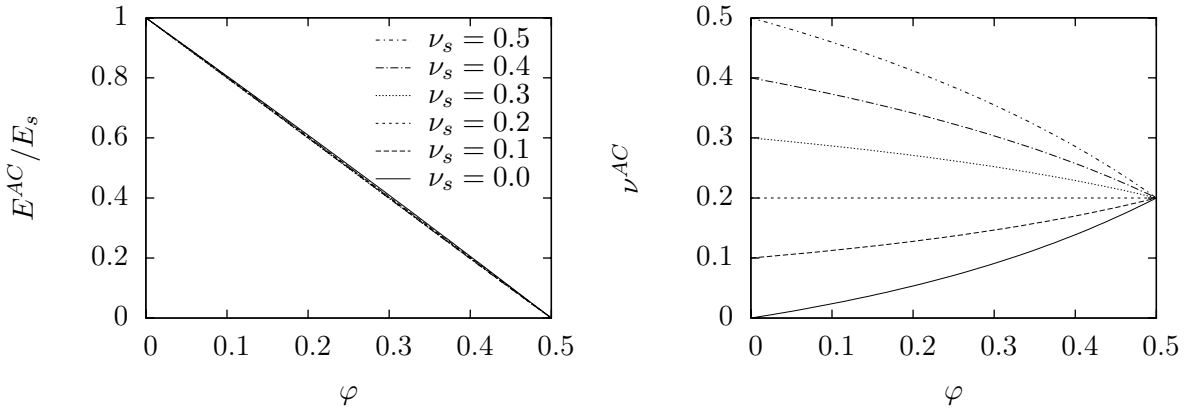


FIG. 2.2 – Module de Young et coefficient de Poisson effectifs estimés par schéma auto-cohérent (pour différentes valeurs du coefficient de Poisson ν_s du solide) en fonction de la porosité φ

Considérons un assemblage de sphères solides pour tenter d'interpréter la porosité critique $\varphi^c = 0.5$. Cette valeur suggère un assemblage de sphères de diamètres similaires, plutôt qu'une granulométrie très étalée. Dans ce dernier cas, on attendrait a priori une porosité critique bien plus faible, les petites sphères pouvant se loger dans l'espace laissé libre entre les grosses.

2.1.3 Mise en œuvre d'une méthode d'homogénéisation périodique

La morphologie modélisée par le schéma auto-cohérent est implicite, dans le sens où on ne la maîtrise pas vraiment. Pour tenter de clarifier ce point, on propose de comparer les estimations auto-cohérentes à des calculs numériques par homogénéisation périodique. Même si ces calculs sont relativement lourds, cette dernière méthode présente l'avantage d'exploiter une morphologie clairement définie.

Nous souhaitons confronter les estimations auto-cohérentes à l'élasticité effective d'un assemblage *monodisperse* de sphères. Évidemment, il est nécessaire que ces sphères soient pénétrables,

[1] Cette tendance se manifeste également dans le cas d'un schéma incrémental, cette fois pour $\varphi \to 1$.

c'est-à-dire non disjointes, sinon les plus faibles porosités (et la limite $\varphi \to 0$) ne pourront être réalisées. Dans ces conditions, nous avons retenu la morphologie la plus simple envisageable : un réseau cubique simple de sphères solides pénétrables. Chaque nœud d'un réseau cubique (d'arête L) est occupé par le centre d'une sphère solide. Toutes les sphères ont le même rayon R. On peut choisir comme maille élémentaire un cube (d'arête L) dont chaque sommet est occupé par un huitième de sphère (de rayon R) : voir figure 2.3, sur laquelle s désigne le solide, apparaissant en grisé, et p l'espace poreux, apparaissant en blanc. La microstructure, périodique, est alors complètement décrite par cette maille élémentaire. Tant que $R < L/2$, les sphères ne se touchent pas (dessin de gauche sur la figure 2.3). Lorsque $R = L/2$, les sphères entrent en contact ponctuel. La fraction volumique de solide correspondante vaut $f_s = \pi/6 \approx 0.52$. Pour $R > L/2$, les sphères se sont interpénétrées (dessin de droite sur la figure 2.3). Les objets élémentaires ne sont plus des sphères mais des sphères tronquées par des plans, les surfaces de contact entre ces objets étant des disques dont le rayon augmente avec la fraction solide (ces surfaces de contact sont représentées en pointillés sur la figure 2.3). Lorsque $R = L\sqrt{3}/2$, le solide occupe tout l'espace et les objets sont devenus des cubes d'arête L. Du point de vue mécanique, les surfaces de contact entre les objets sont des interfaces parfaites (continuité du vecteur déplacement).

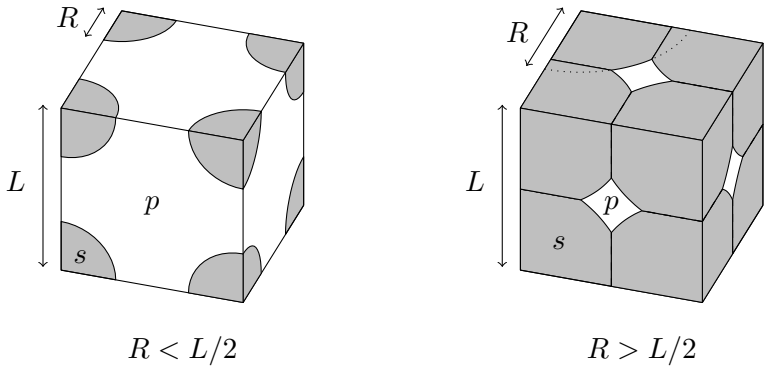


FIG. 2.3 – Maille élémentaire dans deux configurations différentes, selon que les sphères sont disjointes ou se sont interpénétrées

On met en œuvre une procédure d'homogénéisation périodique [111] sur la morphologie ainsi définie, pour en déterminer l'élasticité effective. Il s'agit d'exploiter un code éléments finis sur la maille élémentaire décrite au paragraphe précédent. Cette dernière admet trois plans de symétrie perpendiculaires. La microstructure présentant la symétrie cubique, le tenseur de rigidité effectif présente aussi cette symétrie : il est caractérisé par trois constantes élastiques. En particulier, ce dernier n'est pas isotrope. Il semble donc a priori difficile de comparer le comportement effectif d'un tel matériau avec celui, isotrope, obtenu par schéma auto-cohérent en section 2.1.2. Il est néanmoins possible de définir un module de compression effectif apparent. On se donne ainsi une déformation macroscopique sphérique $\boldsymbol{E} = E_0\mathbf{1}$. Les symétries admises à la fois par la géométrie de la maille élémentaire et par le chargement qui vient d'être envisagé conduisent à ne considérer qu'un huitième de la maille élémentaire (voir figure 2.4 gauche : les surfaces de contact avec les sphères tronquées voisines apparaissent en gris). La figure 2.4 droite représente un exemple de maillage utilisé. La déformation macroscopique $\boldsymbol{E} = E_0\mathbf{1}$ est traduite en conditions aux limites sur les champs de déplacement et de vecteur contrainte, compte tenu du caractère périodique de la morphologie et des trois plans de symétrie. La portion de sphère représentée en blanc sur la figure 2.4 gauche reste libre de contraintes. Le calcul est réalisé à l'aide du code éléments finis CAST3M [19]. On évalue ensuite en post-traitement la contrainte moyenne $\boldsymbol{\Sigma}$ dans le huitième de maille élémentaire. On détermine enfin le module de compression apparent $k^{num} = \mathrm{tr}\,\boldsymbol{\Sigma}/3/\mathrm{tr}\,\boldsymbol{E}$.

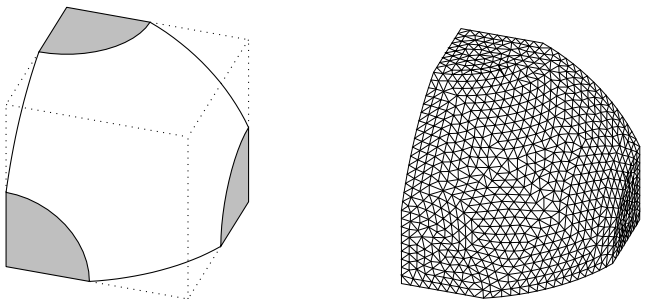


FIG. 2.4 – Huitième de maille élémentaire (huitième de sphère tronquée : les surfaces de contact avec les sphères tronquées voisines apparaissent en gris) et maillage correspondant

2.1.4 Comparaison des résultats d'homogénéisation périodique aux estimations auto-cohérentes

On réalise plusieurs calculs, par homogénéisation périodique, de k^{num} en faisant varier la porosité (par le biais du rapport R/L compris entre $1/2$ et $\sqrt{3}/2$) et le coefficient de Poisson du solide (points sur la figure 2.5). On représente également sur cette figure, par des courbes, les estimations obtenues par schéma auto-cohérent (voir section 2.1.2). Pour chacun des points représentés sur la figure 2.5, l'écart relatif entre calcul numérique et estimation auto-cohérente ne dépasse pas 22 %. Ceci suggère que le schéma auto-cohérent fournit une *estimation* (à 22 % d'écart, il n'est raisonnable de parler que d'estimation) relativement satisfaisante du module de compression d'un assemblage de sphères pénétrables monodisperses.

Ceci nous amène à penser que le schéma auto-cohérent utilisé ici peut être rapproché d'un assemblage de sphères solides de diamètres similaires, plutôt que d'un ensemble de sphères de granulométrie très étalée. De plus, lorsque la fraction solide dépasse 0.5, si on reste sur une image de type « assemblage de sphères », l'apparition d'une rigidité effective non nulle conduit à imaginer que les sphères se sont interpénétrées. Autrement dit, les sphères tronquées sont en contact selon des disques.

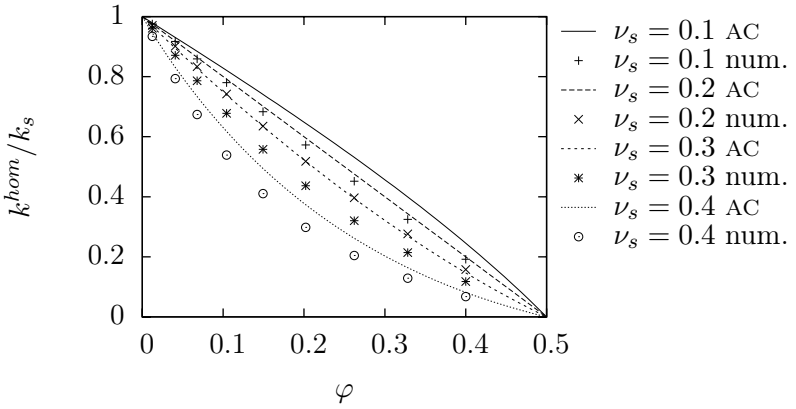


FIG. 2.5 – Module de compression effectif rapporté au module de compression du solide, estimé par schéma auto-cohérent (courbes) et calculé numériquement (points)

2.2 Schéma auto-cohérent avec inhomogénéité ellipsoïdale de révolution

La section précédente a mis en œuvre un schéma auto-cohérent à formes sphériques dans les problèmes auxiliaires. On a comparé les estimations issues de ce schéma avec des résultats de calculs numériques en homogénéisation périodique, pour laquelle la morphologie est clairement définie. Ceci a permis de mettre en évidence une morphologie explicite vis-à-vis de laquelle le schéma auto-cohérent à formes sphériques fournit une approximation intéressante. Bien sûr, ce rapprochement n'est que pragmatique (il ne concerne que les estimations issues des modèles), puisque tout oppose le désordre parfait modélisé par le schéma auto-cohérent et le caractère très ordonné des morphologies périodiques. L'objet de cette section est de réaliser une étude similaire lorsque le schéma auto-cohérent est développé en faisant appel à une inhomogénéité solide ellipsoïdale de révolution (allongée ou aplatie).

2.2.1 Mise en œuvre du schéma auto-cohérent

Le schéma auto-cohérent usuel, dont la mise en œuvre a été rappelée en section 2.1.1, exploite des inhomogénéités sphériques dans les problèmes auxiliaires d'Eshelby pour estimer la déformation moyenne de l'espace poreux et celle de la phase solide (voir figure 2.1). On propose ici de modifier le problème auxiliaire visant à estimer la déformation moyenne de la phase solide, en remplaçant la forme sphérique par un ellipsoïde de révolution (voir figure 2.6). En fait, on considère une famille infinie d'ellipsoïdes de révolution qui ne diffèrent que par leur orientation, avec une distribution isotrope. La forme utilisée pour représenter l'espace poreux reste une sphère. Sur le plan théorique, comme on exploite des formes différentes, la question de la symétrie du tenseur de rigidité auto-cohérent n'est pas a priori réglée. Néanmoins, les calculs numériques présentés ci-après indiquent qu'il est possible d'exhiber une solution isotrope.

La phase solide a toujours un comportement élastique linéaire isotrope, de rigidité $\mathbb{C}_s = 3k_s\mathbb{J} + 2\mu_s\mathbb{K}$. Le rapport d'aspect des ellipsoïdes de révolution, rapport entre le diamètre sur l'axe de révolution et le diamètre sur le plan de symétrie perpendiculaire à l'axe de révolution, est noté r_s (voir figure 2.7). Il s'agit d'un paramètre morphologique dont on étudiera l'influence sur la rigidité auto-cohérente $\mathbb{C}^{AC}$. Faisant l'hypothèse d'une rigidité auto-cohérente isotrope, on note $\mathbb{C}^{AC} = 3k^{AC}\mathbb{J} + 2\mu^{AC}\mathbb{K}$. On utilise ici les coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) et la base sphérique $(\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi)$ associée (figure 2.8).

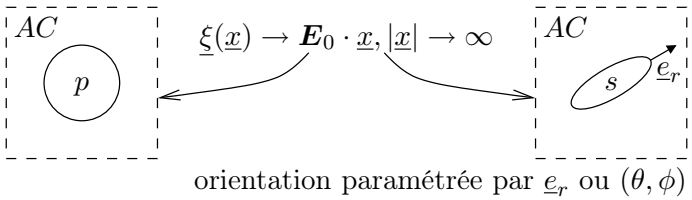


FIG. 2.6 – Problèmes auxiliaires d'élasticité à résoudre pour mettre en œuvre le schéma auto-cohérent envisagé (sphère pour représenter l'espace poreux p et ellipsoïdes de révolution pour représenter le solide s)

La déformation moyenne $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p$ de l'espace poreux est à nouveau estimée par la déformation uniforme d'une cavité sphérique plongée dans un milieu infini, de rigidité $\mathbb{C}^{AC}$, soumis à une déformation homogène $\boldsymbol{E}_0$ à l'infini (figure 2.6 gauche) :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p = \mathbb{A}_p : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \mathbb{A}_p = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1} \tag{2.10}$$

où $\mathbb{S}_{sph}^{AC}$ est le tenseur d'Eshelby [36] d'une sphère dans un milieu de rigidité $\mathbb{C}^{AC}$.

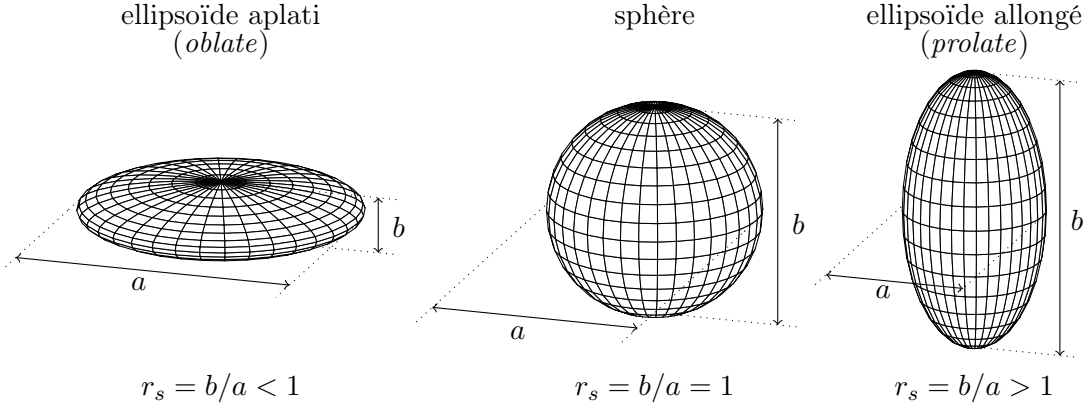


FIG. 2.7 – Définition du rapport d'aspect r_s d'un ellipsoïde de révolution et appellation selon la valeur de ce rapport d'aspect

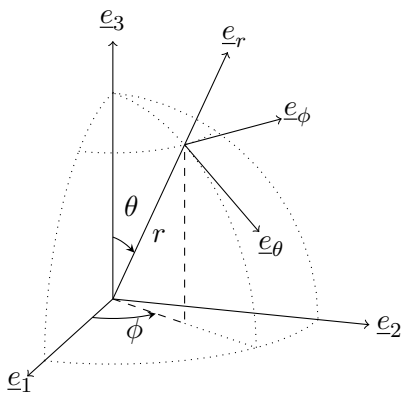


FIG. 2.8 – Base sphérique $(\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi)$ définie par rapport à la base fondamentale $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$

La phase solide est représentée par une famille infinie d'ellipsoïdes de révolution, dont l'orientation est répartie de façon isotrope (figure 2.6 droite). La déformation moyenne de la phase solide est donc estimée par la moyenne des déformations des ellipsoïdes :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \boldsymbol{\varepsilon}_s(\theta, \phi) \frac{\sin\theta}{4\pi} \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \tag{2.11}$$

en tenant compte du caractère isotrope de la répartition de l'orientation. Dans cette expression, $\boldsymbol{\varepsilon}_s(\theta, \phi)$ représente la déformation qui s'établit dans l'ellipsoïde de révolution d'axe $\underline{e}_r$ (paramétré par les angles θ et ϕ). Cette dernière est obtenue par résolution du problème d'Eshelby [36] élémentaire représenté sur la figure 2.6 droite :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_s(\theta, \phi) = \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{AC}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} : \boldsymbol{E}_0 \tag{2.12}$$

où $\mathbb{P}_{ell}^{AC}(\theta, \phi)$ est le tenseur de Hill d'un ellipsoïde de révolution dont l'axe est $\underline{e}_r$, plongé dans un milieu isotrope. Ce tenseur de Hill dépend des angles θ et ϕ, des modules élastiques k^{AC} et μ^{AC}, et du rapport d'aspect r_s de l'ellipsoïde. Il s'agit d'un tenseur isotrope transverse symétrique d'axe $\underline{e}_r$. Son expression est explicitée dans [30] par exemple. Finalement, en combinant (2.11) et (2.12), la déformation moyenne de la phase solide est estimée par :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s = \mathbb{A}_s : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \mathbb{A}_s = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{AC}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{4\pi} \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \tag{2.13}$$

La déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ est classiquement reliée à la déformation $\boldsymbol{E}$ au contour du VER en utilisant la règle de moyenne :

$$\boldsymbol{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \varphi \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p + (1 - \varphi) \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s \tag{2.14}$$

où φ est la porosité. La contrainte moyenne dans le VER est $\boldsymbol{\Sigma} = (1-\varphi) \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_s = (1-\varphi)\mathbb{C}_s : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s$. La rigidité auto-cohérente $\mathbb{C}^{AC}$ est alors définie comme le tenseur reliant déformation au contour et contrainte moyenne, soit $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^{AC} : \boldsymbol{E}$. Compte tenu de (2.10), (2.13) et (2.14), cette dernière s'écrit :

$$\mathbb{C}^{AC} = (1 - \varphi)\mathbb{C}_s : \mathbb{A}_s : [\varphi \mathbb{A}_p + (1 - \varphi)\mathbb{A}_s]^{-1} \tag{2.15}$$

En substituant les expressions de $\mathbb{A}_s$ et $\mathbb{A}_p$ dans (2.15), on obtient finalement :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}^{AC} &= (1 - \varphi)\mathbb{C}_s : \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{AC}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{4\pi} \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \\ &: \left[\varphi(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1} + (1 - \varphi) \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{AC}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{4\pi} \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi\right]^{-1} \end{aligned} \tag{2.16}$$

En supposant $\mathbb{C}^{AC}$ isotrope et en projetant sur $\mathbb{J}$ et $\mathbb{K}$ l'équation tensorielle (2.16), on établit deux équations scalaires polynomiales en k^{AC} et μ^{AC}. On constate numériquement que ces équations présentent toujours un couple solution $k^{AC} \geq 0$, $\mu^{AC} \geq 0$. Ainsi, on est capable de produire une solution $\mathbb{C}^{AC}$ isotrope de (2.16). En particulier, ce tenseur de rigidité est symétrique.

Les deux équations scalaires issues de (2.16) ne prennent une expression simple que dans le cas particulier de formes sphériques ($r_s \to 1$) : on retrouve (2.8) et (2.9).

Dans le cas général $r_s \neq 1$, les modules auto-cohérents dépendent des modules élastiques k_s et μ_s du solide, de la porosité φ et du rapport d'aspect r_s des ellipsoïdes. Ce dernier est un paramètre morphologique supplémentaire par rapport au cas des formes sphériques traité en section 2.1. Sur la figure 2.9, on représente en fonction de la porosité, les modules auto-cohérents de compression, de cisaillement, de Young et le coefficient de Poisson auto-cohérent pour 5 valeurs

différentes du rapport d'aspect des ellipsoïdes. Le rapport d'aspect a une influence notable sur les caractéristiques élastiques effectives, dès que la porosité dépasse 0.2. Lorsque $r_s > 1$, plus les ellipsoïdes sont élancés (r_s grand), plus le module de Young auto-cohérent est important à porosité fixe. Il en est de même lorsque $r_s < 1$: plus les ellipsoïdes sont aplatis (r_s petit), plus le module de Young auto-cohérent est elevé. Notons que les caractéristiques élastiques effectives obtenues avec des plaquettes ($r_s \to 0$) et avec des aiguilles ($r_s \to \infty$) sont différentes, les modules les plus élevés étant obtenus pour des plaquettes. Intuitivement, on sent que les plaquettes, de grande extension selon toutes les directions d'un plan, jouent un rôle morphologique différent des aiguilles, de grande extension selon une seule direction. Notons encore qu'à porosité donnée, les modules effectifs les plus faibles sont obtenus pour $r_s = 1$.

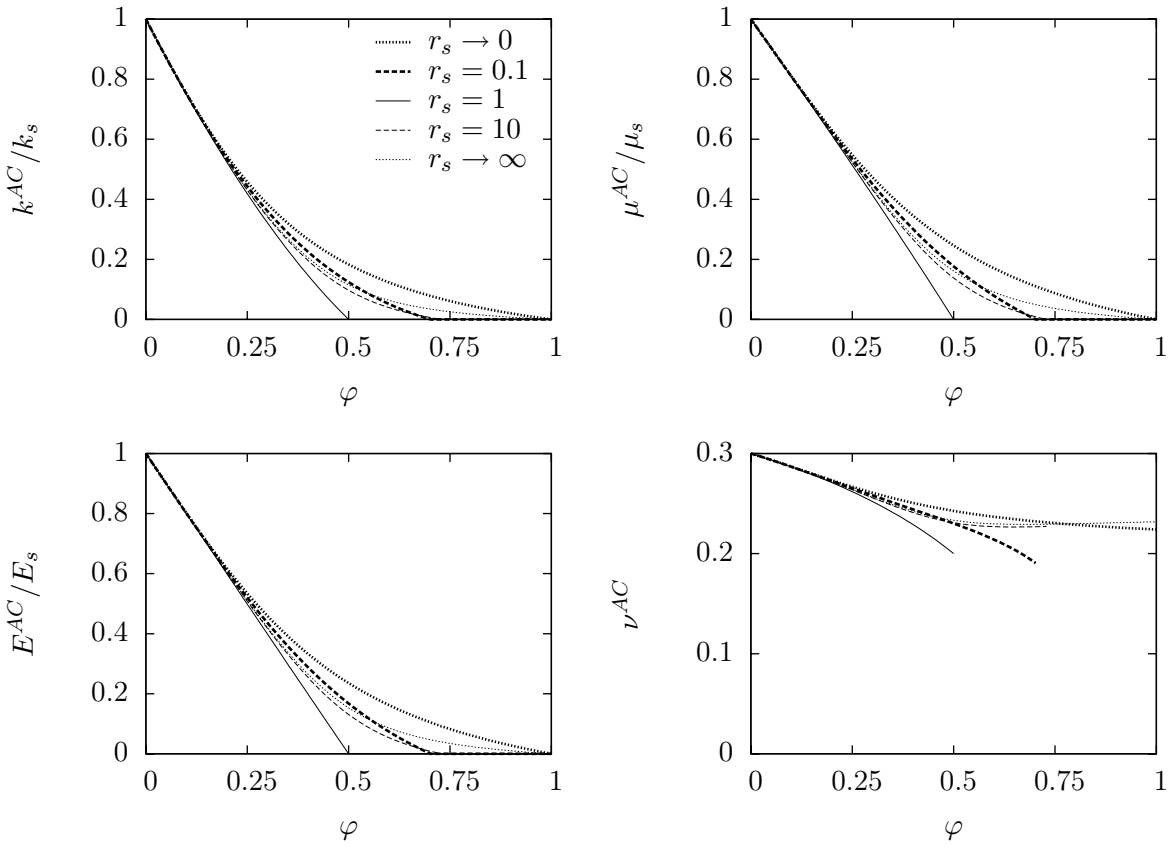


FIG. 2.9 – Modules de compression, de cisaillement, de Young et coefficient de Poisson estimés par schéma auto-cohérent en fonction de la porosité, pour quelques valeurs du rapport d'aspect des ellipsoïdes solides ($\nu_s = 0.3$) : les courbes correspondant à $r_s < 1$ apparaissent en gras

Lorsque $\varphi < 0.2$, la forme des ellipsoïdes n'a quasiment pas d'influence sur les modules homogénéisés (comme déjà mis en évidence dans [41] pour le cas $r_s > 1$). La dépendance des modules effectifs vis-à-vis de la porosité se rapproche de celle obtenue pour un milieu poreux dont la phase solide constitue une matrice (modélisé par un schéma différentiel par exemple).

La porosité critique φ_c, au dessus de laquelle les modules auto-cohérents s'annulent, ne vaut plus 1/2 (cas des formes sphériques, voir section 2.1.2), mais dépend du rapport d'aspect r_s. Celle-ci sera étudiée en section 2.2.3.

Dans le chapitre 5, nous serons amenés à exploiter les modules auto-cohérents dans le cas d'aiguilles ($r_s \to \infty$). Les deux équations polynomiales issues de (2.16) adoptent dans ce cas une

expression « relativement simple » :

$$\sum_{i_k=0}^{2}\sum_{i_\mu=0}^{2} a_{i_k,i_\mu}(m_s,\varphi)\left(\frac{k^{AC}}{k_s}\right)^{i_k}\left(\frac{\mu^{AC}}{\mu_s}\right)^{i_\mu}=0 \tag{2.17}$$

$$\sum_{i_k=0}^{2}\sum_{i_\mu=0}^{6} b_{i_k,i_\mu}(m_s,\varphi)\left(\frac{k^{AC}}{k_s}\right)^{i_k}\left(\frac{\mu^{AC}}{\mu_s}\right)^{i_\mu}=0 \tag{2.18}$$

avec $m_s = 4\mu_s/3/k_s$ et les polynômes $a_{i_k,i_\mu}(m_s,\varphi)$ et $b_{i_k,i_\mu}(m_s,\varphi)$ respectivement explicités dans les tables 2.1 et 2.2.

i_μ \ i_k	0	1	2
0	0	0	$(m_s+4)\varphi$
1	$m_s^2(\varphi-1)$	$m_s(m_s+8\varphi-4)$	$m_s(4-\varphi)$
2	$3m_s^2(\varphi-1)$	$3m_s^2$	0

TAB. 2.1 – Polynômes $a_{i_k,i_\mu}(m_s,\varphi)$ intervenant dans (2.17)

i_μ \ i_k	0	1
0	0	0
1	0	$116m_s(1-\varphi)$
2	$56m_s^2(1-\varphi)$	$m_s[m_s(312-587\varphi)+4(207-482\varphi)]$
3	$m_s^2[m_s(144-319\varphi)+20(18-53\varphi)]$	$m_s[35m_s(16-51\varphi)-4(299\varphi+101)]$
4	$m_s^2[m_s(224-949\varphi)-8(69\varphi+31)]$	$m_s[-m_s(869\varphi+456)+20(2\varphi-27)]$
5	$m_s^2[-5m_s(77\varphi+48)+4(17\varphi-42)]$	$m_s^2(41\varphi-416)$
6	$m_s^3(53\varphi-128)$	0

i_μ \ i_k	2
0	$48(1-\varphi)$
1	$4m_s(36-61\varphi)+16(27-52\varphi)$
2	$4m_s(84-209\varphi)-16(47\varphi+3)$
3	$-4m_s(139\varphi+36)+16(2\varphi-27)$
4	$12m_s(3\varphi-28)$
5	0
6	0

TAB. 2.2 – Polynômes $b_{i_k,i_\mu}(m_s,\varphi)$ intervenant dans (2.18)

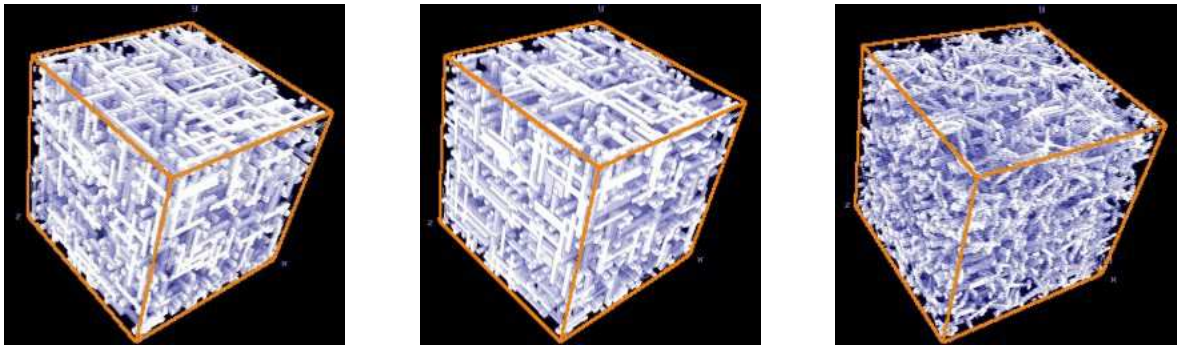
2.2.2 Confrontation numérique (ellipsoïdes allongés)

On a déjà mentionné le fait que la morphologie modélisée par le schéma auto-cohérent est implicite. De plus, il n'est clairement pas évident de directement relier la forme de l'ellipsoïde solide utilisé dans le problème auxiliaire à la forme des grains constituant la microstructure d'un matériau. On propose alors, comme en section 2.1, de comparer les estimations auto-cohérentes à des calculs numériques sur morphologies bien maîtrisées. Les résultats numériques sont issus de

simulations par éléments finis (réalisées par Meille *et al.* [81]) du comportement élastique effectif de microstructures artificielles. Ces microstructures sont des images 3D construites en disposant de manière aléatoire des parallélépipèdes de $21*3*3$ voxels dans un cube initialement vide, selon trois algorithmes différents (figure 2.10) :

- (a) : les parallélépipèdes sont parallèles aux axes du cube et pénétrables ;
- (b) : les parallélépipèdes sont parallèles aux axes du cube et renferment un cœur impénétrable, de dimensions $19*1*1$ voxels ;
- (c) : les parallélépipèdes sont orientés de façon aléatoire et pénétrables.

Les calculs détaillés dans [81] et repris sur la figure 2.11 sont réalisés avec des particules solides de comportement élastique linéaire isotrope, caractérisé par le module de Young $E_s = 46$ GPa et le coefficient de Poisson $\nu_s = 0.33$. Les points semblent dessiner une courbe unique donnant le module de Young en fonction de la porosité : l'algorithme de positionnement des parallélépipèdes n'influe que très peu sur le module de Young effectif. Autrement dit, la porosité est le paramètre de premier ordre. Ainsi, nous ne distinguerons plus les trois algorithmes de positionnement (a), (b) et (c) : nous nous contenterons de rassembler tous les points sous la désignation « calculs numériques ».



(a) (b) (c)

FIG. 2.10 – Microstructures 3D construites en implantant des parallélépipèdes dans un cube [81]

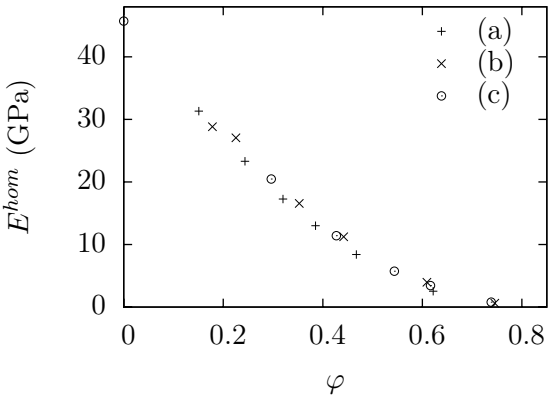


FIG. 2.11 – Module de Young calculé numériquement [81] en fonction de la porosité et selon la méthode de construction des microstructures numériques 3D (voir figure 2.10) ($E_s = 46$ GPa et $\nu_s = 0.33$)

La partie gauche de la figure 2.12 confronte les calculs par éléments finis qui viennent d'être synthétisés aux estimations issues du schéma auto-cohérent. Ces dernières ont été réalisées avec

des ellipsoïdes de révolution allongés (*prolates*), pour trois valeurs du rapport d'aspect r_s, soit 7, 10 et 15.

On constate un excellent accord. Aux faibles porosités ($\varphi \leq 0.4$), et dans la gamme de rapports d'aspect explorée, les estimations auto-cohérentes semblent quasi indépendantes du rapport d'aspect, comme déjà mis en évidence sur la figure 2.9. Les courbes suggèrent un rapport d'aspect de l'ordre de 15 (au lieu du rapport 7 des parallélépipèdes) pour obtenir un bon accord entre estimations auto-cohérentes et simulations par éléments finis.

La bonne concordance entre estimations auto-cohérentes et simulations par éléments finis est confirmée en étudiant le coefficient de Poisson effectif ν^{hom}. Ce dernier est tracé sur la partie droite de la figure 2.12 en fonction de la porosité pour trois valeurs différentes du coefficient de Poisson du solide : 0, 0.2 et 0.33 (voir ordonnée à l'origine en $\varphi = 0$). Ces trois valeurs sont dictées par les résultats des simulations par éléments finis disponibles [81].

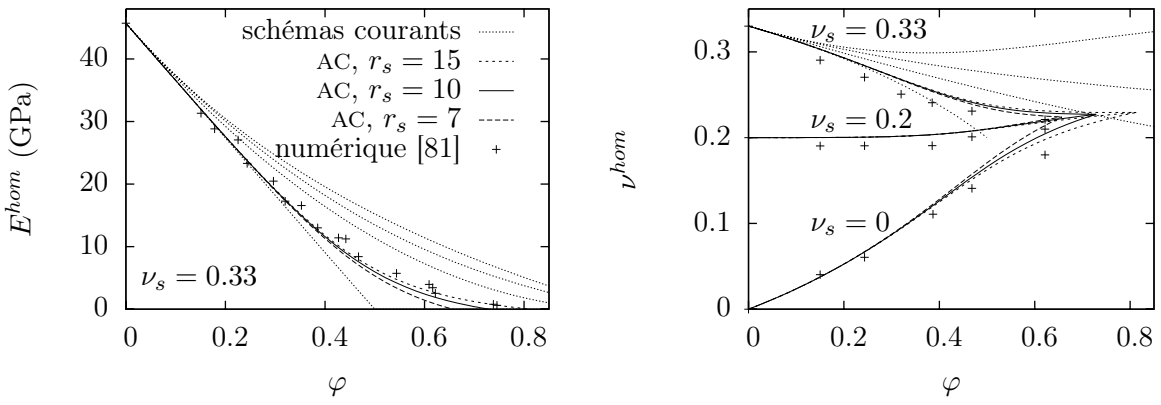


FIG. 2.12 – Module de Young et coefficient de Poisson effectifs estimés par schéma auto-cohérent (pour différentes valeurs du rapport d'aspect r_s) et calculés numériquement [81] ; et en pointillés fins les estimations obtenues par les schémas d'homogénéisation usuels

On a représenté sur la figure 2.12 en pointillés fins les résultats issus des schémas d'homogénéisation les plus courants (par ordre croissant de module de Young effectif : auto-cohérent avec formes sphériques tel que décrit en section 2.1, différentiel, Christensen et Lo, Mori Tanaka), toujours avec $E_s = 46$ GPa et $\nu_s = 0.33$. Clairement, ces derniers sont incapables d'estimer correctement les caractéristiques élastiques effectives de polycristaux à grains allongés.

Cette confrontation des caractéristiques élastiques effectives issues du schéma auto-cohérent avec celles calculées numériquement sur des microstructures bien identifiées permet de mettre en évidence un type de morphologie sur lequel le schéma auto-cohérent offre une approximation raisonnable de la rigidité effective. Ainsi, un schéma auto-cohérent avec ellipsoïdes solides allongés (*prolates*) fournit des estimations très correctes des caractéristiques élastiques effectives d'un polycristal poreux constitué de grains allongés. On suppose qu'il en est de même lorsque les grains sont aplatis (en faisant alors intervenir des *oblates*, ellipsoïdes aplatis), faute de résultats numériques de référence dans ce cas. La section suivante va préciser encore la comparaison en confrontant les porosités critiques φ^c, déjà mises en évidence sur la figure 2.9 gauche, à des résultats de calculs géométriques.

2.2.3 Porosité critique

Le schéma auto-cohérent usuel représente la phase solide et l'espace poreux par une même inhomogénéité sphérique (voir section 2.1). La porosité critique $\varphi^c = 1/2$, définie comme la valeur de la porosité au dessus de laquelle le module de Young effectif s'annule, apparaît alors. Avec

des ellipsoïdes de révolution pour représenter le solide, cette porosité critique dépend du rapport d'aspect r_s des inhomogénéités solides. La dépendance de φ^c en r_s a déjà été observée pour des ellipsoïdes de révolution allongés (*prolates*) dans [41]. On confirme ici cette dépendance pour des *oblates*. En fait, φ^c ne dépend même *que* de r_s : la porosité critique est indépendante des caractéristiques élastiques de la phase solide.

Plus précisément, lorsque $r_s \to 1$, cas limite de la forme sphérique, on retrouve la valeur classique $\varphi^c = 1/2$. Sur la figure 2.13, on représente en trait plein la variation de la fraction solide critique $f_s^c = 1 - \varphi^c$ issue du schéma auto-cohérent en fonction du rapport d'aspect r_s des particules solides. Cette dernière diminue lorsque les particules sont allongées ou aplaties : intuitivement, il faut moins de solide pour atteindre une raideur effective donnée.

Comme mis en évidence dans [41], la porosité critique disparaît ($\varphi^c \to 1$) lorsque $r_s \to \infty$ (table 2.3). C'est également vrai lorsque $r_s \to 0$. Le tableau 2.3 donne par ailleurs le coefficient de Poisson effectif obtenu à la porosité critique : $\nu^c = \lim_{\varphi \to \varphi^c} \nu^{AC}$. Ce dernier ne dépend que du rapport d'aspect r_s. Autrement dit, il est indépendant du coefficient de Poisson ν_s du solide. On a déjà constaté cela avec des formes sphériques (voir figure 2.2 droite). On retrouve d'ailleurs ici la valeur $\nu^c = 1/5$ dans le cas $r_s \to 1$.

Le fait que la porosité critique ne dépende que du rapport d'aspect r_s, seul autre paramètre morphologique du modèle (hormis la porosité, donc), laisse penser qu'il s'agit d'un concept purement géométrique. D'ailleurs, avec des sphères non plus homogènes mais composites (un cœur entouré d'une calotte de matériau différent), on retrouve la même porosité critique $\varphi^c = 1/2$ (voir section 8.1.2).

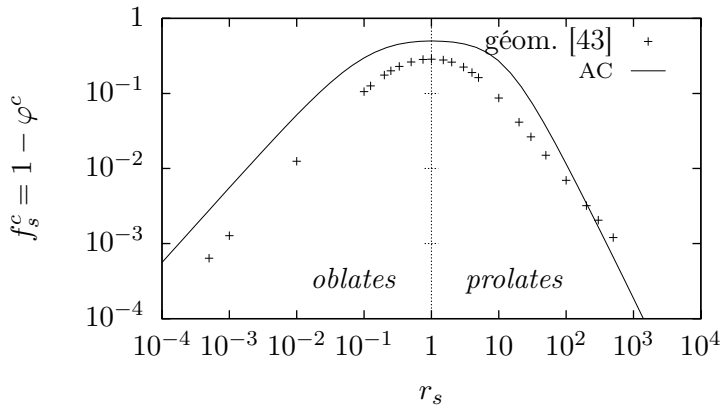


FIG. 2.13 – Fraction solide critique en fonction du rapport d'aspect des particules solides, estimée par schéma auto-cohérent, et seuil de percolation calculé numériquement de façon géométrique [43] (représentation en échelles logarithmiques pour bien mettre en évidence les variations aux très faibles et très grands rapports d'aspect)

r_s	0	1	∞
φ^c	1	1/2	1
ν^c	≈ 0.173	1/5	$\frac{17-\sqrt{79}}{35} \approx 0.232$

TAB. 2.3 – Porosité critique et coefficient de Poisson associé pour quelques valeurs limites du rapport d'aspect des ellipsoïdes de révolution

Garboczi *et al.* [43] ont réalisé des simulations numériques de seuils de percolation d'ellipsoïdes de révolution interpénétrables (c'est-à-dire avec possibilité d'intersection entre les objets). Ces seuils, obtenus de façon purement géométrique, sont représentés par des points sur la figure 2.13.

On constate que les seuils de percolation de nature géométrique et les porosités critiques de nature mécanique reproduisent la même tendance.

2.2.4 Remarque : influence de la forme représentant l'espace poreux

Jusqu'ici, on a exploité une forme sphérique dans le problème auxiliaire d'élasticité visant à estimer la déformation moyenne de l'espace poreux (partie gauche de la figure 2.6). On peut se demander quelle est l'influence de cette forme sur les caractéristiques élastiques auto-cohérentes. Ainsi, on considère, comme pour le solide, un ensemble d'ellipsoïdes de révolution, d'orientation distribuée de façon isotrope. Le rapport d'aspect de ces ellipsoïdes est noté r_p. On représente sur la figure 2.14 l'influence de r_p sur le module de Young auto-cohérent, les autres paramètres étant maintenus constants (notamment le rapport d'aspect des ellipsoïdes représentant le solide, fixé à $r_s = 15$, et la porosité $\varphi = 0.6$).

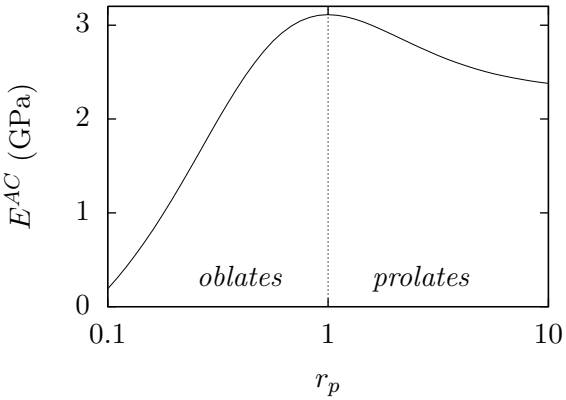


FIG. 2.14 – Influence du rapport d'aspect des ellipsoïdes utilisés pour représenter l'espace poreux sur le module de Young auto-cohérent ($E_s = 46$ GPa, $\nu_s = 0.33$, $r_s = 15$, $\varphi = 0.6$)

Pour $r_p = 1$ (forme sphérique), on retrouve évidemment le résultat déjà obtenu sur la figure 2.12. Plus les ellipsoïdes représentant l'espace poreux ont une forme éloignée de la sphère, plus le module de Young auto-cohérent est faible. Les *oblates* ont un impact plus important que les *prolates* sur cette diminution. Ceci est conforme à l'intuition : on s'attend à ce que des pores aplatis soient plus pénalisants que des pores allongés.

Ainsi, la forme représentant l'espace poreux a un impact sur la rigidité effective, impact plus important dans le cas d'*oblates* que dans le cas de *prolates*. Néanmoins, le problème de la détermination du rapport d'aspect judicieux, en lien avec la morphologie réelle, reste, à notre connaissance, très ouvert. Dans toute la suite, on continue à exploiter une sphère pour représenter l'espace poreux, puisqu'on a constaté que cette forme particulière donne des résultats satisfaisants vis-à-vis des simulations numériques (voir figure 2.12).

2.3 Conclusion

La morphologie modélisée par le schéma auto-cohérent est implicite. Celle employée dans une approche d'homogénéisation numérique par éléments finis est au contraire parfaitement définie. Ces deux approches s'opposent également dans le sens où le schéma auto-cohérent suppose un désordre parfait de la morphologie, alors qu'une approche d'homogénéisation périodique considère une microstructure parfaitement ordonnée. Néanmoins, d'un point de vue purement pragmatique, la confrontation de caractéristiques élastiques effectives issues de ces deux méthodes permet de

préciser la morphologie pour laquelle un schéma d'homogénéisation donné produit des estimations raisonnables des caractéristiques élastiques effectives. On a ainsi relevé que :

- le schéma auto-cohérent avec formes sphériques est intéressant pour rendre compte du module de compression apparent d'une morphologie de type « assemblage monodisperse de sphères tronquées en contact selon des disques » (section 2.1) ;
- le schéma auto-cohérent avec forme sphérique pour représenter l'espace poreux et un ensemble infini d'ellipsoïdes de révolution d'orientation répartie de façon isotrope pour représenter la phase solide rend compte assez correctement des caractéristiques élastiques d'une morphologie de type « polycristal poreux à grains allongés » (section 2.2).

Évidemment, des écarts subsistent entre les résultats obtenus par schéma auto-cohérent et par calcul numérique. En effet, il est difficile de « mettre sur le même plan » le désordre parfait et des microstructures périodiques. Par ailleurs, il faut rester conscient qu'en homogénéisation des milieux aléatoires, un schéma ne fournit pas un résultat ultra précis mais plutôt une *estimation*.

Les caractéristiques élastiques effectives des milieux poreux étudiés en section 2.2 dépendent des modules élastiques de la phase solide k_s, μ_s et de deux paramètres morphologiques : la porosité φ et le rapport d'aspect r_s des ellipsoïdes de révolution. Ce dernier paramètre a une influence notable sur les modules élastiques effectifs du polycristal. La figure 2.13 illustre en particulier l'influence de r_s sur la fraction solide critique, c'est-à-dire la fraction de solide nécessaire pour que le milieu poreux présente un module de Young effectif non nul. De plus, les ellipsoïdes allongés et aplatis ne jouent pas le même rôle morphologique : la figure 2.13 n'est pas symétrique vis-à-vis de $r_s = 1$. On se propose, dans la suite, d'étudier plus en détail (c'est-à-dire au delà du simple comportement élastique) le cas de matériaux dont la microstructure présente des cristaux allongés ($r_s > 1$, partie II), puis aplatis ($r_s < 1$, partie III). Le gypse et certaines mousses d'hydroxyapatite forment deux exemples de matériaux dont la microstructure est constituée d'un enchevêtrement de cristaux allongés [64], [57]. Les argiles et les silicates de calcium hydratés (C-S-H, principaux hydrates rencontrés dans les pâtes de ciment Portland) semblent plutôt formés de feuillets [84, 86, 74], [25, 88]. De plus, ces feuillets peuvent s'assembler pour former, à une échelle supérieure, des particules de plus grandes dimensions (aplaties selon [46], allongées selon [93]), ce qui constitue une difficulté supplémentaire. C'est pourquoi on se penche d'abord sur les matériaux ayant pour éléments de base des particules allongées.

Par ailleurs, certains comportements de matériaux sont régis par des mécanismes interfaciaux se jouant *entre* les grains solides. Cela semble être le cas du fluage du gypse, le mécanisme souvent évoqué étant un glissement relatif des cristaux les uns sur les autres [80]. Le traitement de ces comportements dans le cadre de l'homogénéisation des milieux aléatoires requiert la résolution du problème auxiliaire de la figure 2.6 droite en considérant un ellipsoïde solide *entouré d'une interface*. Dans le cadre de ce travail, nous ne nous sommes pas lancés dans une telle résolution. C'est pourquoi les comportements mettant en jeu des mécanismes interfaciaux entre les grains ne seront abordés que dans le cas de particules sphériques ($r_s \to 1$) : c'est l'objet de la partie IV.

Deuxième partie

Plâtre pris
(matériaux à particules allongées)

Chapitre 3

Introduction au plâtre pris

Sommaire

3.1 Réaction d'hydratation **31**
3.2 Description morphologique **35**
3.2.1 Observations 35
3.2.2 Description morphologique multiéchelle 35
3.3 Synthèse des données expérimentales utilisées **37**

Le plâtre pris est un matériau très commun. Dans le domaine de la construction, il est utilisé en enduits ou pour bâtir des cloisons légères. Dans le domaine des céramiques, il est employé pour réaliser des moules.

Le plâtre pris est un matériau très facile à obtenir. Il suffit de mélanger (gâcher) de la poudre de plâtre et de l'eau pour obtenir, après quelques instants, un matériau solide. Au contact de l'eau, les grains de poudre de plâtre se dissolvent progressivement. Les ions précipitent pour former des cristaux de gypse. Le mécanisme d'hydratation du plâtre est donc de type « dissolution - précipitation ». La réaction chimique correspondante est rappelée en section 3.1. Ici, on ne s'intéresse qu'à l'état final, lorsque toute la poudre de plâtre s'est transformée en gypse. Le matériau ainsi obtenu est appelé plâtre pris. On ne considère ici que l'état « sec », lorsque toute l'eau résiduelle s'est évaporée. Observé au microscope, le plâtre pris révèle une microstructure poreuse formée d'un enchevêtrement d'aiguilles (section 3.2). Pour terminer cette introduction, on rassemble (en section 3.3) les résultats expérimentaux qui vont être exploités dans cette seconde partie du document, c'est-à-dire dans les chapitres 3 à 6.

Cette partie de notre travail fait suite à la thèse de S. Meille [80], qui a, en pionnier, cherché à relier les caractéristiques mécaniques du plâtre pris avec sa microstructure. Les outils utilisés dans [80] relèvent de l'homogénéisation numérique, et sont par conséquent relativement lourds à mettre en œuvre. Nous privilégions les approches semi-analytiques offertes par l'homogénéisation des milieux aléatoires. Néanmoins, indépendamment de la technique utilisée, les travaux présentés ici bénéficient grandement de l'étude réalisée par S. Meille, d'autant plus que le plâtre pris ne fait l'objet que de peu de recherche.

3.1 Réaction d'hydratation

La poudre de plâtre est constituée de semihydrate $CaSO_4$, $^1\!/_2H_2O$. Au contact de l'eau, le semihydrate se dissout sous forme d'ions Ca^{2+} et SO_4^{2-}. Les ions précipitent pour former du gypse $CaSO_4$, $2H_2O$. L'hydratation de la poudre de plâtre se traduit donc par un mécanisme de dissolution-précipitation, synthétisé par l'équation chimique suivante :

$$CaSO_4,\ ^1\!/_2H_2O \quad + \quad 3/2\ H_2O \quad \longrightarrow \quad CaSO_4,\ 2H_2O \tag{3.1}$$

Les proportions du mélange initial (semihydrate et eau) sont caractérisées le rapport e/p, égal au rapport massique entre eau et poudre de plâtre (semihydrate). Une fois la réaction (3.1) arrivée à son terme, nous avons, si la quantité d'eau est suffisante (c'est toujours le cas en pratique), du gypse et de l'eau. Ensuite, une fois l'eau résiduelle évaporée, nous sommes en présence d'un matériau poreux, considéré comme sec, dont le solide est constitué de cristaux de gypse. La porosité φ est contrôlée par le rapport e/p : plus celui-ci est élevé, plus la porosité sera elle-même importante.

La porosité est une variable de description directe de la morphologie. Elle représente donc un paramètre d'entrée naturel des modèles d'homogénéisation. Cependant, lors du gâchage, on ne contrôle pas directement la porosité, mais le rapport e/p. Ainsi, dans la pratique, ce rapport est plus habituel pour décrire la densité d'un plâtre pris. Par conséquent, il est nécessaire, avant toutes choses, de relier la porosité φ au rapport e/p, par le simple bilan matière que nous rappelons ici.

On note respectivement le semihydrate $CaSO_4$, $1/2H_2O$ (plâtre), l'eau et le gypse $CaSO_4$, $2H_2O$ par les indices p, e et g. On considère un système initialement constitué de n_p^0 et n_e^0 moles de semihydrate et d'eau. On note respectivement M_i et ρ_i la masse molaire et la masse volumique du constituant i. En supposant qu'en fin de réaction tout le semihydrate a été consommé (c'est toujours le cas en pratique), un simple bilan de matière permet de déterminer le nombre de moles final de gypse n_g et d'eau n_e dans le système :

$$\begin{array}{lccccc} & \text{p} & + & \alpha\ \text{e} & \longrightarrow & \text{g} \\ \text{état initial :} & n_p^0 & & n_e^0 & & 0 \\ \text{état final :} & 0 & & n_e = n_e^0 - \alpha n_p^0 & & n_g = n_p^0 \end{array} \tag{3.2}$$

$\alpha = 3/2$ étant un paramètre stœchiométrique.

Le rapport des quantités d'eau et de plâtre initiales est déterminé par le rapport massique e/p :

$$\frac{n_e^0}{n_p^0} = \frac{e}{p}\frac{M_p}{M_e} \tag{3.3}$$

Le rapport e/p stœchiométrique, pour lequel eau et plâtre sont présents initialement en quantités stœchiométriques, est alors obtenu en annulant la quantité d'eau finale n_e :

$$(e/p)^{st} = \alpha\frac{M_e}{M_p} \tag{3.4}$$

soit $(e/p)^{st} = 0.186$ avec les valeurs numériques du tableau 3.1. Pour $e/p < (e/p)^{st}$, le plâtre ne pourra pas s'hydrater complètement. En pratique, le gâchage à des e/p aussi bas est très difficilement réalisable. On est donc largement au dessus, si bien qu'à la fin il reste de l'eau non liée chimiquement. On considère que le domaine occupé par cette eau résiduelle constitue exactement l'espace poreux du matériau à l'état final. Cette hypothèse sera évidemment à valider. Pour évaluer la porosité φ à l'état final, il faut réaliser quelques calculs de volumes. Les volumes initiaux d'eau et de plâtre s'écrivent :

$$V_e^0 = \frac{M_e}{\rho_e}n_e^0 = \frac{M_p}{\rho_e}\frac{e}{p}n_p^0 \quad \text{et} \quad V_p^0 = \frac{M_p}{\rho_p}n_p^0 \tag{3.5}$$

Les volumes finaux d'eau et de gypse s'écrivent :

$$V_e = \frac{M_e}{\rho_e}n_e = \frac{M_e}{\rho_e}\left(\frac{e}{p}\frac{M_p}{M_e} - \alpha\right)n_p^0 \quad \text{et} \quad V_g = \frac{M_g}{\rho_g}n_g = \frac{M_g}{\rho_g}n_p^0 \tag{3.6}$$

On obtient alors la porosité finale :

$$\varphi = \frac{V_e}{V_e + V_g} = \frac{\dfrac{e}{p} - \alpha \dfrac{M_e}{M_p}}{\dfrac{e}{p} - \alpha \dfrac{M_e}{M_p} + \dfrac{M_g}{M_p}\dfrac{\rho_e}{\rho_g}} \tag{3.7}$$

En introduisant les valeurs numériques[1] du tableau 3.1, on obtient l'expression :

$$\varphi = \frac{e/p - 0.186}{e/p + 0.326} \tag{3.8}$$

et la courbe représentée sur la figure 3.1. Sur cette figure, on a également reporté des mesures de porosité de plâtres pris [80]. Ces mesures ont été obtenues en comparant la masse volumique apparente d'un échantillon de plâtre pris à la masse volumique du gypse ($\rho_g = 2.32$ g/cm^3). On constate que la formule (3.7) qui vient d'être réétablie donne des résultats tout à fait satisfaisants.

	$CaSO_4$, $\frac{1}{2}H_2O$ (p)	H_2O (e)	$CaSO_4$, $2H_2O$ (g)
M (g/mol)	145	18.0	172
ρ (g/cm^3)	2.76 (α) ou 2.63 (β)	1.00	2.32

Tab. 3.1 – Masse molaire et masse volumique des réactifs et produits de l'équation (3.1) d'hydratation du plâtre

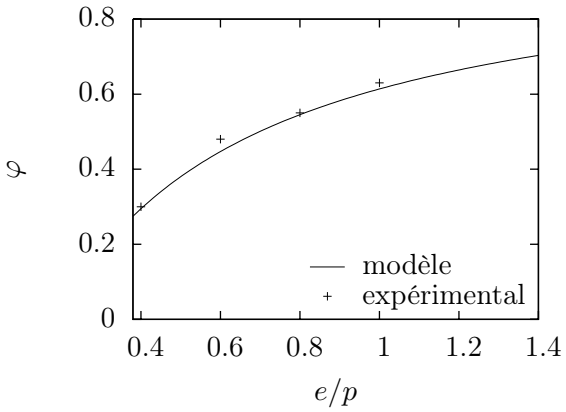


Fig. 3.1 – Porosité du plâtre pris en fonction du rapport massique eau sur poudre de plâtre

On peut s'intéresser à la variation relative de volume entre produits (à l'état final) et réactifs (à l'état initial) :

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{V_e + V_g - (V_e^0 + V_p^0)}{V_e^0 + V_p^0} = \frac{\dfrac{M_g}{\rho_g} - \dfrac{M_p}{\rho_p} - \alpha \dfrac{M_e}{\rho_e}}{\dfrac{M_p}{\rho_p} + \dfrac{e}{p}\dfrac{M_p}{\rho_e}} \tag{3.9}$$

[1] La masse volumique du semihydrate dépend des conditions de préparation. En effet, le semihydrate est obtenu par cuisson du gypse à une température comprise entre 115° C et 140° C, et selon les conditions de pression de vapeur d'eau, deux types peuvent être formés :

- pression inférieure à 0.1 MPa (voie sèche) : semihydrate de type β, de densité 2.63 g/cm^3 ;
- pression supérieure à 0.1 MPa (voie humide) : semihydrate de type α, de densité 2.76 g/cm^3.

Néanmoins, ces valeurs n'ont aucun impact sur la porosité finale du plâtre pris, puisque ρ_p n'intervient pas dans (3.7).

ce qui donne, compte tenu des valeurs numériques de la table 3.1, la courbe tracée sur la figure 3.2. Le volume du système ne varie que de quelques % dans le sens d'une réduction. Cela peut se traduire dans un premier temps par une réduction effective de volume (retrait) du système plâtre+eau+gypse, tant que ce dernier n'a pas un comportement de solide, soit avant la prise. Au moment de la prise, l'échantillon (ou l'éprouvette) adopte un comportement de solide, et donc son volume apparent se fige une fois pour toutes. Dans un second temps, après la prise, on peut observer une entrée d'air dans l'échantillon, pour compenser la réduction de volume du système plâtre+eau+gypse. La figure 3.3 représente de façon très schématique l'évolution des volumes des différents constituants entre l'état initial et l'état final, en passant par l'instant de prise. La prise est symbolisée par le fait que le rectangle représentant le gypse atteint toute la hauteur du rectangle global.

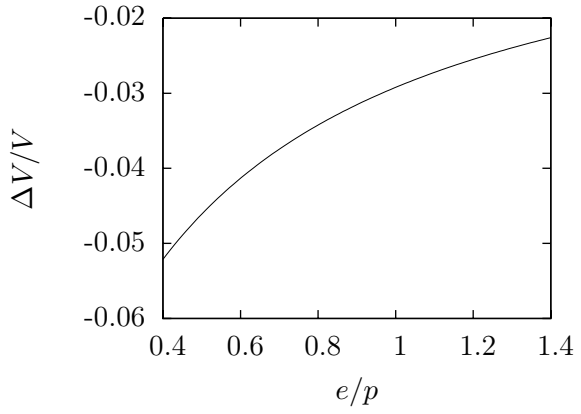


FIG. 3.2 – Variation relative de volume définie par (3.9), en fonction du rapport massique eau sur poudre de plâtre

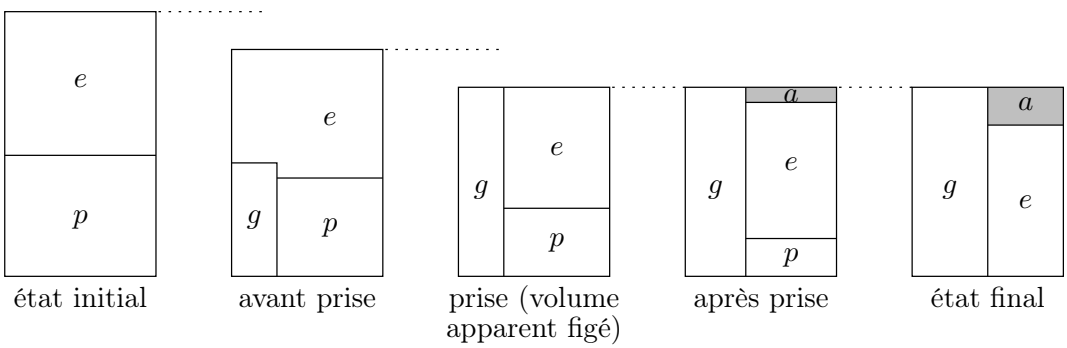


FIG. 3.3 – Représentation schématique (les ratios entre volumes ne sont pas respectés) de l'évolution des volumes de plâtre p, eau e, gypse g et air a lors de l'hydratation d'un mélange de plâtre et d'eau (l'air, en grisé, ne fait pas partie du système fermé plâtre+eau+gypse)

Pour évaluer précisément la porosité à l'état final, il conviendrait de tenir compte du volume d'air entré dans l'échantillon. Néanmoins, la confrontation expérimentale reportée sur la figure 3.1 montre que le calcul simplifié (3.8) fournit une bonne approximation de la porosité finale. En tenant compte du volume d'air, nous obtiendrions une valeur plus grande de la porosité finale, ce qui est bien conforme avec le fait que l'approximation actuelle sous-estime les porosités expérimentales. Pour déterminer le volume final d'air, il nous faudrait évaluer l'instant

de prise (en termes de degré d'avancement de la réaction (3.1)), ce qui nécessiterait un modèle morphologique qui suit le matériau tout au long de son hydratation. Nous ne souhaitons pas entrer dans ce niveau de détail : nous ne nous intéressons ici qu'à l'état final, lorsque tout le plâtre s'est hydraté.

3.2 Description morphologique

3.2.1 Observations

L'observation au microscope électronique à balayage d'un échantillon de plâtre pris révèle une microstructure poreuse formée d'un enchevêtrement de cristaux allongés (figure 3.4). L'orientation de ces cristaux peut raisonnablement être supposée comme aléatoire. Le plâtre pris semble donc représenter un bon exemple de polycristal poreux à grains allongés.

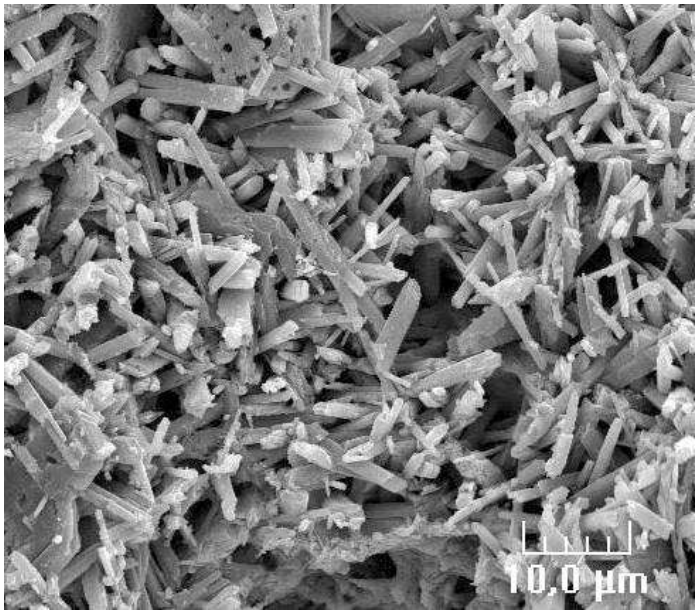


FIG. 3.4 – Photo MEB d'un échantillon de plâtre pris

Notons néanmoins qu'il est possible, dans certains cas *très* particuliers, d'observer des cristaux aplatis. Ainsi, en ajoutant de l'acide citrique au mélange de poudre de plâtre et d'eau, S. Meille a obtenu la microstructure représentée sur la figure 3.5. Le rapport d'aspect moyen des cristaux est mesuré à $r_s = 0.5$.

Dans le cas général, les cristaux ont une forme allongée. Les conditions de gâchage, autres que le rapport e/p, (comme la température, l'ajout d'additifs, ...) influent sur l'élancement des cristaux obtenus. On le verra en section 4.3.1.

En pratique, le plâtre pris présente souvent des bulles de diamètre supérieur aux dimensions des cristaux. La figure 3.6 présente une observation MEB d'un matériau dans lequel on a intentionnellement introduit une grande quantité de bulles. Ainsi, il convient de distinguer plusieurs échelles dans la description morphologique.

3.2.2 Description morphologique multiéchelle

Les observations nous conduisent à distinguer trois échelles dans la microstructure du matériau « plâtre pris avec bulles » (figure 3.7) :

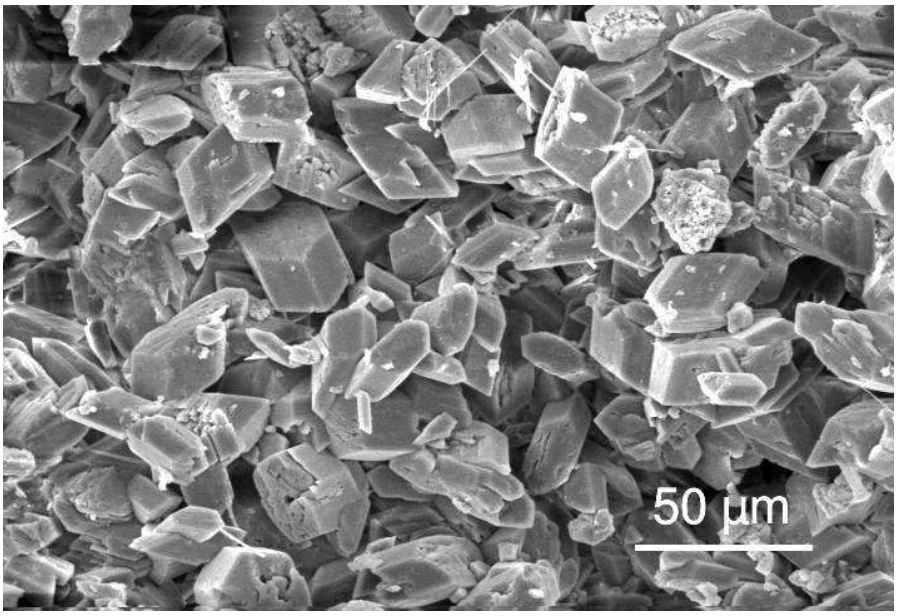


FIG. 3.5 – Photo MEB d'un échantillon de plâtre pris issu d'un gâchage avec de l'acide citrique [80]

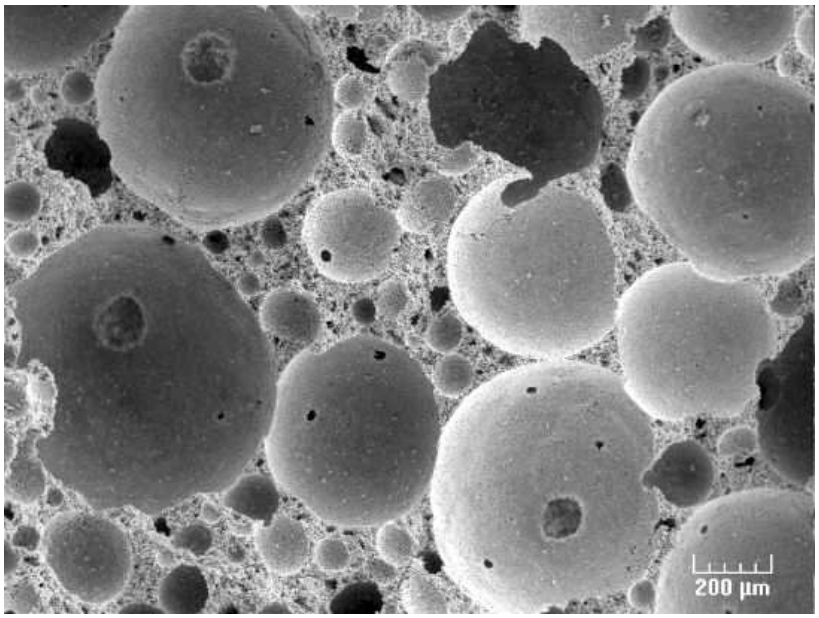


FIG. 3.6 – Photo MEB d'un échantillon de plâtre pris présentant des bulles

– L'échelle macroscopique est celle du plâtre pris avec bulles (noté *pb*). Un VER de ce matériau révèle le premier niveau d'hétérogénéité, en faisant apparaître les bulles et le plâtre pris (considéré à cette échelle comme un milieu continu).
– L'échelle mésoscopique est celle du plâtre pris (noté *pp*). Un VER de ce matériau révèle un second niveau d'hétérogénéité, en distinguant les cristaux de gypse des pores intercristallins.
– L'échelle microscopique est celle du cristal de gypse (noté *g*), que l'on considère comme homogène.

Ainsi, par exemple, lorsque nous parlerons de comportement homogénéisé à l'échelle mésoscopique, il s'agira du comportement effectif du plâtre pris, obtenu par homogénéisation du VER à cette échelle. Ce comportement effectif pourra être utilisé dans l'étape d'homogénéisation suivante, à l'échelle macroscopique.

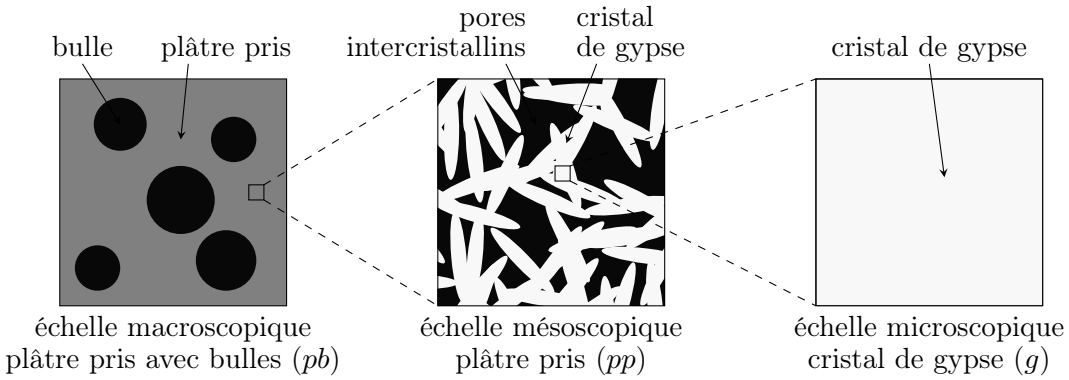


FIG. 3.7 – Représentation de la microstructure multiéchelle d'un plâtre pris avec bulles : un VER est schématisé à chacune des trois échelles introduites

Les cristaux présentent une longueur de l'ordre de la vingtaine de µm. Les bulles ont un diamètre de plusieurs centaines de µm. On peut donc considérer comme acquise la séparation d'échelles, ce qui permet d'envisager une homogénéisation en deux étapes afin d'obtenir les caractéristiques mécaniques effectives du plâtre pris avec bulles. Autrement dit, le plâtre pris avec bulles est ici considéré comme un matériau à double porosité, en distinguant deux espaces poreux : les bulles et les pores intercristallins.

Notons que cette partie II du mémoire est consacrée aux matériaux constitués de particules allongées, donc ne concernant a priori que l'échelle mésoscopique (plâtre pris). Néanmoins, nous irons jusqu'à l'échelle macroscopique (plâtre pris avec bulles) dans le cas de l'élasticité (chapitre 4).

3.3 Synthèse des données expérimentales utilisées

On dispose de données expérimentales, issues de la littérature, sur le comportement mécanique du plâtre pris sec (donc à l'échelle mésoscopique). Celles-ci seront exploitées pour valider les modèles micromécaniques. La porosité intercristalline, fraction volumique d'espace poreux rencontré dans un VER à l'échelle mésoscopique, est notée f_p.

De nombreux résultats de mesures de module de Young sur plâtre pris sont disponibles [80, 21, 2, 92, 120]. Dans ces études, les échantillons ont été préparés par hydratation de semihydrate avec différents rapports eau sur plâtre, afin d'obtenir une gamme très étendue de porosités. Le module de Young a été mesuré par ultrasons dans [80, 21], ou par essais mécaniques en compression simple dans [120]. Les mesures du module de Young en fonction de la porosité sont reprises sur la figure 3.8. Conformément à l'intuition, plus le plâtre est poreux, c'est-à-dire peu dense, plus le module de Young est faible.

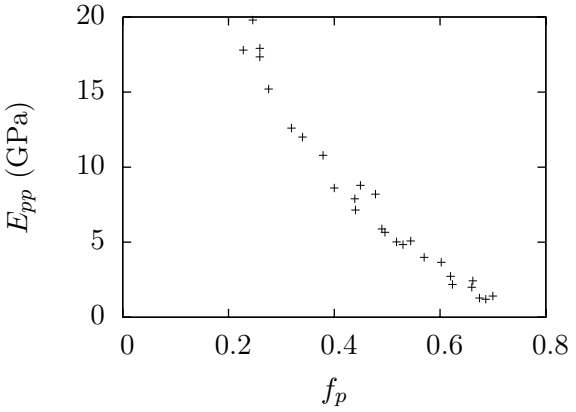


FIG. 3.8 – Module de Young mesuré sur plâtre pris [80, 21, 2, 92, 120]

Sur la figure 3.9, on représente en fonction de la porosité les mesures de résistance en traction (partie gauche) et compression (partie droite) simple, toujours issues de plusieurs sources bibliographiques indépendantes. À l'image du module de Young, les résistances sont d'autant plus faibles que la porosité est élevée. De plus, à porosité donnée, la résistance en traction est largement inférieure à celle en compression.

On note une certaine dispersion des données expérimentales, en particulier sur la résistance à la compression (figure 3.9 droite). Cette dispersion est liée à la variabilité des matériaux et conditions expérimentales, d'autant plus que l'on a réalisé une compilation de données issues de multiples sources. Par ailleurs, nous avons représenté les caractéristiques mécaniques en fonction d'un seul paramètre décrivant la morphologie : la porosité. Même si on peut probablement considérer celui-ci comme le paramètre de premier ordre, il semble évident que d'autres paramètres doivent intervenir, tels que l'élancement des cristaux...

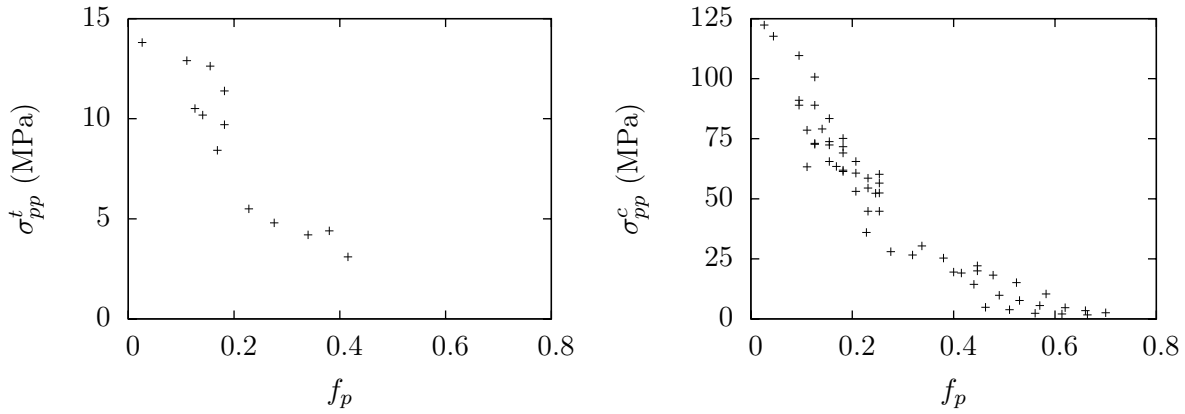


FIG. 3.9 – Résistances en traction [2, 3, 66, 105] et compression [2, 3, 66, 105, 50, 120, 21, 112, 38] simples mesurées sur plâtre pris

Chapitre 4

Élasticité du plâtre pris

Dans ce chapitre, on cherche à modéliser l'élasticité du plâtre pris. La microstructure étant constituée d'un ensemble de cristaux allongés enchevêtrés, on propose de mettre en œuvre un schéma auto-cohérent dont les particules solides sont des ellipsoïdes de révolution allongés. L'élasticité de ces particules solides est caractérisée par le tenseur de rigidité anisotrope du cristal de gypse. On considère une répartition isotrope de l'orientation de ces particules. La confrontation du module de Young estimé et mesuré expérimentalement est satisfaisante, ce qui crédite le modèle morphologique envisagé. Deux applications sont ensuite proposées. La première se concentre sur l'effet de la forme des particules solides sur la rigidité effective. Par ailleurs, le plâtre pris renferme fréquemment des bulles dans la pratique, de taille bien supérieure à celle des cristaux. La seconde application propose d'étudier l'impact de ces bulles sur la rigidité effective.

Sommaire

4.1 Rigidité de la phase solide **40**
4.1.1 Rigidité du cristal de gypse 40
4.1.2 Axe du cristal dans la maille élémentaire 40
4.2 Estimation de la rigidité du plâtre pris **42**
4.2.1 Modèle morphologique 42
4.2.2 Schéma auto-cohérent 42
4.2.3 Validation expérimentale 44
4.3 Applications **44**
4.3.1 Effet du rapport d'aspect des particules solides 44
4.3.2 Effet des bulles 46
4.4 Détermination d'une rigidité isotrope équivalente pour le solide **48**

Le plâtre pris est ici assimilé à un polycristal poreux dont les grains solides sont des cristaux de gypse, de forme allongée. Ainsi, les caractéristiques élastiques du plâtre pris dépendent de la forme des particules (caractérisée par le rapport d'aspect), de la porosité et de la rigidité élémentaire des particules. Cette dernière correspond au tenseur de rigidité complet et anisotrope du cristal de gypse (donné en section 4.1), chaque particule étant un cristal de gypse. En section 4.2, on valide le modèle morphologique de plâtre pris en confrontant les estimations du module de Young à des données expérimentales disponibles dans la littérature. La section 4.3 est ensuite consacrée à deux applications : d'une part l'influence du rapport d'aspect des particules solides, et d'autre part l'impact des bulles fréquemment présentes en pratique. Enfin, la section 4.4 propose un modèle simplifié pour lequel l'élasticité des particules ellipsoïdales est isotrope. Cette simplification évitera d'alourdir les modèles proposés dans les deux chapitres suivants.

4.1 Rigidité de la phase solide

4.1.1 Rigidité du cristal de gypse

Dans le plâtre pris vu comme un polycristal poreux, chaque grain est en fait un cristal de gypse. Le cristal de gypse a un comportement élastique anisotrope. Son tenseur de rigidité a été mesuré par ultrasons [55]. Les composantes non nulles de ce dernier sont reprises dans le tableau 4.1, qui est à compléter par symétrie ($c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}$).

$ijkl$	1111	2222	3333	1122	1133	2233	
c_{ijkl} (GPa)	78.59	62.74	72.59	41.01	26.85	24.24	
$ijkl$	2323	1313	1212	1113	2213	3313	2312
c_{ijkl} (GPa)	9.10	26.41	10.44	−7.0	3.1	−17.4	−1.55

TAB. 4.1 – Composantes non nulles du tenseur de rigidité du cristal de gypse [55]

Ces composantes sont exprimées dans une base bien précise, définie à partir de la maille cristalline élémentaire de De Jong et Bouman [28] (figure 4.1) :

$$\underline{e}_1 = \frac{\underline{a}}{|\underline{a}|} \ , \quad \underline{e}_2 = \frac{\underline{b}}{|\underline{b}|} \quad \text{et} \quad \underline{e}_3 = \underline{e}_1 \wedge \underline{e}_2 \tag{4.1}$$

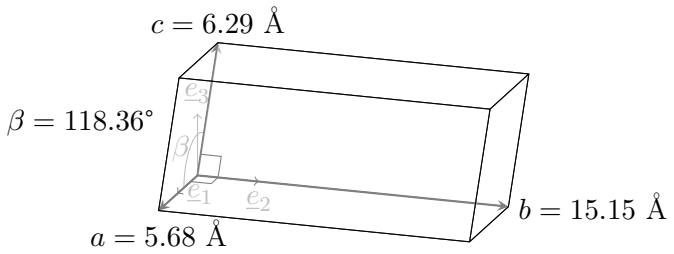


FIG. 4.1 – Maille de De Jong et Bouman [28] et définition de la base $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ dans laquelle le tenseur de rigidité du gypse est exprimé (voir table 4.1)

4.1.2 Axe du cristal dans la maille élémentaire

Il reste à déterminer l'orientation de la base dans laquelle le tenseur de rigidité est exprimé, vis-à-vis de l'ellipsoïde de révolution modélisant un cristal allongé. Autrement dit, il faut placer

la maille de De Jong et Bouman dans le cristal allongé. L'ellipsoïde considéré étant de révolution, il nous suffit de connaître l'orientation de l'axe de l'ellipsoïde (plus grande dimension du cristal de gypse) vis-à-vis de la maille de De Jong et Bouman. Une revue de la bibliographie mène à deux possibilités contradictoires.

Klima [67] a observé puis mesuré la croissance de cristaux de gypse (figure 4.2). Il a observé que $l_{meas} \gg w_{meas}$. Ainsi, la direction dans lequel les cristaux présentent leur plus grande dimension est l'intersection des plans (010) et (011)[1], soit $\underline{a}$. Dans ce cas, nous prendrons le vecteur $\underline{a}$ de la maille de De Jong et Bouman comme axe des ellipsoïdes de révolution représentant le solide.

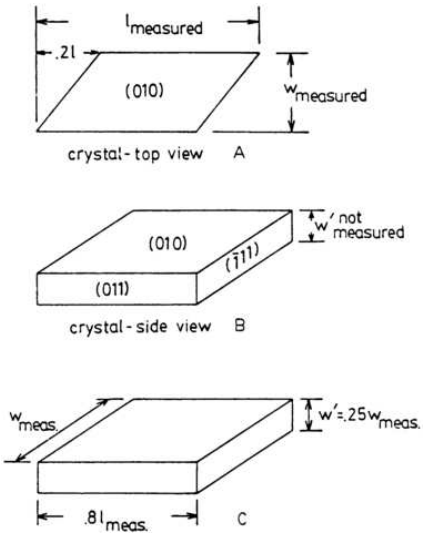


FIG. 4.2 – Représentation schématique des cristaux observés durant leur croissance par Klima [67]

Reprenant les travaux de Simon et Bienfait [113], S. Meille indique [80] que le cristal de gypse croît préférentiellement dans la direction $\underline{c}$ de la maille de De Jong et Bouman (voir figure 4.3). Dans ce cas, nous prendrons le vecteur $\underline{c}$ de la maille de De Jong et Bouman comme axe de révolution des ellipsoïdes de révolution solides.

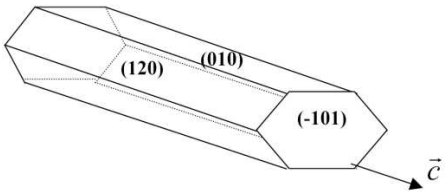


FIG. 4.3 – Représentation schématique d'un cristal de gypse, de ses faces et de la direction de plus grande dimension [80]

Nous ne débattrons pas sur la pertinence de l'une ou l'autre des directions préférentielles de croissance, ceci sortant du cadre de ce travail. Nous allons considérer les deux orientations possibles et nous comparerons les résultats obtenus, en termes d'élasticité effective.

[1] En cristallographie, la notation $(n_a n_b n_c)$ définit l'orientation d'un plan par celle de sa normale ; dans ce cas la normale au plan est $n_a\underline{a} + n_b\underline{b} + n_c\underline{c}$.

4.2 Estimation de la rigidité du plâtre pris

4.2.1 Modèle morphologique

Le plâtre pris présente une microstructure formée de cristaux allongés et enchevêtrés. Ainsi, le schéma auto-cohérent avec particules solides allongées proposé et validé en section 2.2 semble particulièrement prometteur pour estimer les caractéristiques élastiques effectives d'un tel matériau. Ces dernières dépendent de la porosité f_p, du rapport d'aspect r_g (l'indice g se rapporte aux cristaux de gypse) des particules solides et de la rigidité des particules. Pour cette dernière, on emploie le tenseur donné dans le tableau 4.1 et les deux possibilités d'orientation de ce tenseur vis-à-vis de l'axe des particules évoquées dans la section 4.1.2. Le caractère anisotrope du comportement des particules modifie le développement du schéma auto-cohérent présenté en section 2.2. En effet, les inhomogénéités ne sont plus invariantes par rotation autour de leur axe de révolution (même si elles le sont toujours du point de vue géométrique). Il faut par conséquent introduire le troisième angle d'Euler, noté ψ, et caractérisant justement cette rotation (figure 4.4).

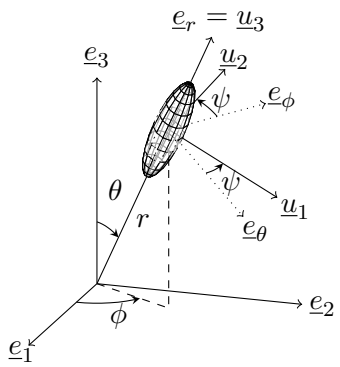


FIG. 4.4 – Caractérisation de l'orientation d'un cristal par les trois angles d'Euler θ, ϕ, ψ : la base $(\underline{u}_1, \underline{u}_2, \underline{u}_3)$ attachée au cristal est définie par rapport à la base fondamentale $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ (la base sphérique $(\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi)$ apparaît en pointillés)

4.2.2 Schéma auto-cohérent

On note $\mathbb{C}_g(\theta, \phi, \psi)$ le tenseur de rigidité des cristaux dont l'orientation est définie par θ, ϕ, ψ. Ce tenseur présente dans la base $(\underline{u}_1, \underline{u}_2, \underline{u}_3)$ les composantes données dans le tableau 4.1. Les problèmes auxiliaires d'élasticité envisagés pour estimer la déformation moyenne de l'espace poreux et de la famille des cristaux orientés par θ, ϕ, ψ sont représentés sur la figure 4.5. On note $\mathbb{C}_{pp}$ la rigidité estimée du plâtre pris.

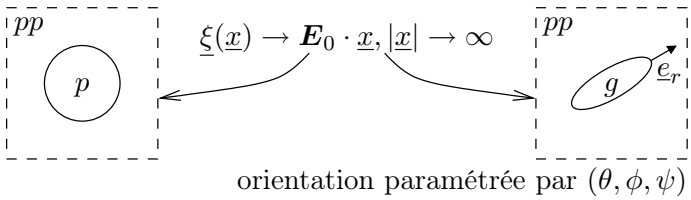


FIG. 4.5 – Problèmes auxiliaires d'élasticité à résoudre pour mettre en œuvre le schéma auto-cohérent envisagé (sphère pour représenter l'espace poreux p et ellipsoïdes de révolution pour représenter le solide g)

Comme déjà mentionné à plusieurs reprises, la déformation moyenne de l'espace poreux est

estimée par la déformation uniforme d'une cavité sphérique plongée dans le milieu de référence infini, dont l'élasticité est caractérisée par la rigidité $\mathbb{C}_{pp}$ recherchée, et soumis à la déformation homogène auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ à l'infini (figure 4.5 gauche) :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{pp})^{-1} : \boldsymbol{E}_0 \tag{4.2}$$

avec $\mathbb{S}_{sph}^{pp}$ le tenseur d'Eshelby [36] d'une sphère dans le milieu de rigidité $\mathbb{C}_{pp}$.

La déformation moyenne de la famille de cristaux d'orientation (θ, ϕ, ψ) est estimée par la déformation uniforme d'un ellipsoïde de révolution allongé, d'axe $\underline{e}_r$ (décrit par θ, ϕ), constitué du même matériau que ces cristaux, plongé dans un milieu infini, de rigidité $\mathbb{C}_{pp}$, soumis à la déformation homogène $\boldsymbol{E}_0$ au contour (figure 4.5 droite). Il s'agit d'un cas particulier du problème de l'inhomogénéité d'Eshelby [36] :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\theta,\phi,\psi} = \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{pp}(\theta,\phi) : (\mathbb{C}_g(\theta,\phi,\psi) - \mathbb{C}_{pp})\right]^{-1} : \boldsymbol{E}_0 \tag{4.3}$$

avec $\mathbb{P}_{ell}^{pp}(\theta,\phi)$ le tenseur de Hill d'un ellipsoïde de révolution, dont la direction de l'axe est caractérisé par θ, ϕ, dans le milieu de rigidité $\mathbb{C}_{pp}$. Ce tenseur est indépendant de ψ puisque la forme de l'ellipsoïde est par nature invariante par rotation autour de son axe. Il est relié au tenseur d'Eshelby correspondant par $\mathbb{P}_{ell}^{pp}(\theta,\phi) : \mathbb{C}_{pp} = \mathbb{S}_{ell}^{pp}(\theta,\phi)$.

La déformation moyenne dans l'ensemble du domaine solide est alors obtenue par moyenne angulaire, la distribution d'orientation étant isotrope :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s &= \int_{\psi=0}^{2\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\theta,\phi,\psi} \frac{\sin\theta}{8\pi^2}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\psi \\ &= \int_{\psi=0}^{2\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{pp}(\theta,\phi) : (\mathbb{C}_g(\theta,\phi,\psi) - \mathbb{C}_{pp})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{8\pi^2}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\psi : \boldsymbol{E}_0 \end{aligned} \tag{4.4}$$

La contrainte moyenne dans la phase solide est obtenue de façon similaire :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_s &= \int_{\psi=0}^{2\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{C}_g(\theta,\phi,\psi) : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\theta,\phi,\psi} \frac{\sin\theta}{8\pi^2}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\psi \\ &= \int_{\psi=0}^{2\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{C}_g(\theta,\phi,\psi) : \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{pp}(\theta,\phi) : (\mathbb{C}_g(\theta,\phi,\psi) - \mathbb{C}_{pp})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{8\pi^2}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\psi : \boldsymbol{E}_0 \end{aligned} \tag{4.5}$$

On détermine ensuite le tenseur de déformation $\boldsymbol{E}$ imposé au contour du VER et le tenseur de contrainte moyen $\boldsymbol{\Sigma}$ dans le VER par :

$$\boldsymbol{E} = f_p \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p + (1 - f_p) \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\Sigma} = (1 - f_p) \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_s \tag{4.6}$$

L'estimation auto-cohérente de la rigidité effective est alors définie comme le tenseur reliant déformation au contour et contrainte moyenne :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_{pp} &= (1 - f_p) \\ &\quad \int_{\psi=0}^{2\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{C}_g(\theta,\phi,\psi) : \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{pp}(\theta,\phi) : (\mathbb{C}_g(\theta,\phi,\psi) - \mathbb{C}_{pp})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{8\pi^2}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\psi \\ &: \left[(1 - f_p)\int_{\psi=0}^{2\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^{pp}(\theta,\phi) : (\mathbb{C}_g(\theta,\phi,\psi) - \mathbb{C}_{pp})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{8\pi^2}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\psi \right. \\ &\qquad \left. + f_p(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{pp})^{-1}\right]^{-1} \end{aligned} \tag{4.7}$$

Supposant $\mathbb{C}_{pp}$ isotrope, donc écrit sous la forme $\mathbb{C}_{pp} = 3k_{pp}\mathbb{J} + 2\mu_{pp}\mathbb{K}$, on tire de l'équation tensorielle (4.7) deux équations scalaires non linéaires dont k_{pp} et μ_{pp} sont solutions. Numériquement, on constate qu'on arrive toujours à obtenir un couple solution $k_{pp} \geq 0$, $\mu_{pp} \geq 0$.

4.2.3 Validation expérimentale

La validation est réalisée vis-à-vis de nombreux résultats de mesures de module de Young sur plâtre pris disponibles dans la littérature (voir section 3.3).

Les mesures expérimentales et les estimations (pour trois valeurs du rapport d'aspect des *prolates* : $r_g = 7$, 10 et 15) sont représentées sur la figure 4.6. On trace deux graphes, chacun correspondant à une hypothèse sur l'axe du cristal dans la maille élémentaire de De Jong et Bouman : à gauche l'axe du cristal est $\underline{a}$, alors qu'à droite l'axe du cristal est $\underline{c}$ (voir section 4.1.2).

On obtient un accord satisfaisant pour un rapport d'aspect d'environ 15, sur toute la gamme de porosités sur laquelle des données sont disponibles. Remarquons que le choix de l'axe des *prolates*, $\underline{a}$ ou $\underline{c}$, n'influe quasiment pas sur l'évolution du module de Young en fonction de la porosité intercristalline (voir figure 4.7 : les deux courbes sont quasiment superposées). Finalement, l'indécision sur l'orientation de l'axe n'a que peu d'impact sur le module de Young effectif, ce qui est une bonne nouvelle. Dans la suite, nous retenons de façon arbitraire le second choix, à savoir l'axe $\underline{c}$.

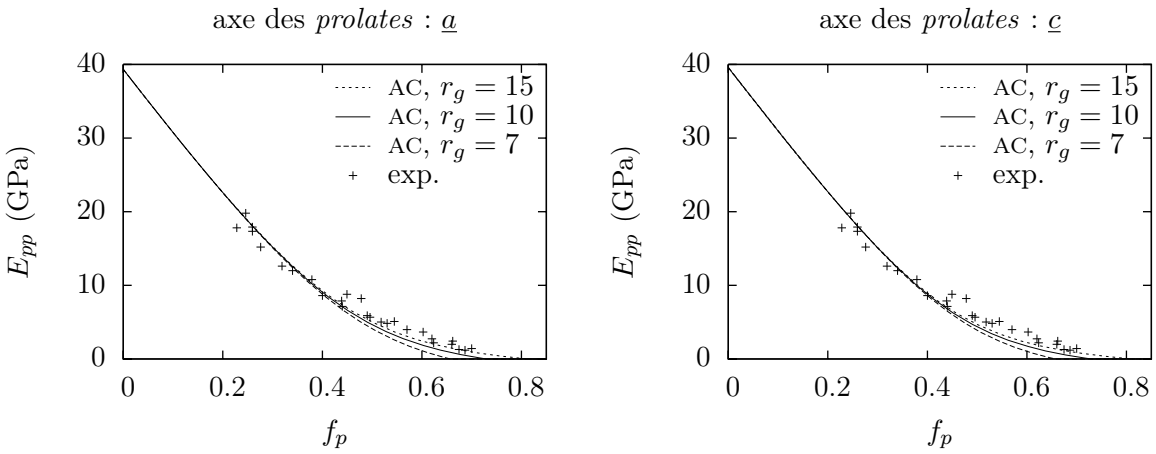


FIG. 4.6 – Module de Young mesuré sur plâtre pris [80, 21, 2, 92, 120] et estimé par schéma auto-cohérent, selon l'orientation de l'axe des *prolates* dans la maille de De Jong et Bouman, et pour trois valeurs du rapport d'aspect des ellipsoïdes solides

Le schéma auto-cohérent avec inhomogénéités solides ellipsoïdales de révolution allongées semble donc fournir une représentation morphologique adaptée aux matériaux constitués de cristaux allongés, comme le gypse, du moins en ce qui concerne l'estimation du module de Young effectif. Fritsch *et al.* ont appliqué avec succès cette même approche à l'hydroxyapatite [41, 57], constituant des tissus osseux, en considérant le cas limite des aiguilles ($r_g \to \infty$).

4.3 Applications

Le modèle permettant l'estimation de l'élasticité du plâtre pris étant validé, on propose deux applications : l'étude de l'impact du rapport d'aspect des particules sur le module de Young effectif, et la prise en compte des bulles.

4.3.1 Effet du rapport d'aspect des particules solides

Les conditions de gâchage (préparation du mélange de poudre de plâtre et d'eau) influent sur la forme des cristaux obtenus en fin d'hydratation. En travaillant à rapport e/p fixe et en

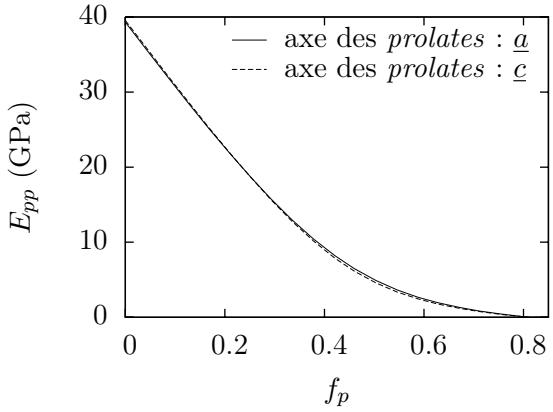


FIG. 4.7 – Module de Young estimé par schéma auto-cohérent, selon l'orientation de l'axe des *prolates* dans la maille de De Jong et Bouman ($r_g = 15$)

mettant en œuvre différentes conditions de gâchage, Meille [80] a réalisé des échantillons de plâtre pris présentant tous la même porosité intercristalline $f_p = 0.55$ mais dont les cristaux diffèrent par leur rapport d'aspect (voir table 4.2). Notons que le rapport d'aspect « moyen » des cristaux a été estimé à partir d'observations au MEB. On observe expérimentalement que le rapport d'aspect des cristaux influe sur le module de Young effectif. On cherche à évaluer si le schéma auto-cohérent précédemment développé est capable de reproduire une telle tendance.

condition de gâchage	rapport d'aspect	module de Young (GPa)
référence	12.5	5.1
gypse broyé	13.3	4.5
70° C	9.8	4.2
acide citrique	0.5	1.3

TAB. 4.2 – Impact expérimental du rapport d'aspect moyen des cristaux sur le module de Young du plâtre pris [80]

On prend comme référence les conditions de gâchage standard (première ligne du tableau 4.2), et on normalise les résultats par la valeur du module de Young obtenu dans ce cas de référence (c'est-à-dire par $E_{pp}^{ref} = E_{pp}(r_g = 12.5)$). La confrontation entre les données expérimentales et les estimations issues du modèle est relativement satisfaisante compte tenu des imprécisions de mesure à la fois du module de Young et du rapport d'aspect (figure 4.8). La courbe modèle présente trois parties, séparées par les deux rapports d'aspect particuliers tels que $\varphi^c(r_g) = f_p$, φ^c étant la porosité critique détaillée en section 2.2.3. Afin de visualiser ces rapports d'aspect particuliers, on a tracé en trait interrompu sur la figure 4.8 la courbe $\varphi^c(r_g)$, ainsi qu'en pointillés fins, la droite horizontale $f_p = 0.55$, et les deux droites verticales correspondant aux rapports d'aspect particuliers. Les trois parties de la courbe $E_{pp}(r_g)/E_{pp}^{ref}$ distinguées sur la figure 4.8 sont :

- Lorsque $r_g < 1$, on a affaire à des particules aplaties (*oblates*), et le module de Young est d'autant plus élevé que les particules sont plates (r_g petit). Lorsque r_g est tel que $\varphi^c(r_g) = f_p$, la rigidité effective s'annule.
- Tant que r_g est tel que $\varphi > \varphi^c(r_g)$, la fraction solide $f_s = 1 - f_p = 0.45$ est insuffisante pour obtenir un matériau doué d'une rigidité non nulle.
- Lorsque $r_g > 1$, les particules sont allongées (*prolates*), et le module de Young est d'autant plus élevé que les particules sont élancées (r_g grand). La rigidité effective s'annule lorsque

$\varphi^c(r_g) = f_p$.

Par exemple, pour $r_g = 5$, le module de Young ne vaut plus que 45 % de la valeur de référence. Le modèle suggère que l'on a tout intérêt pour optimiser la rigidité effective à essayer d'obtenir des particules les plus élancées possibles. Toutefois, le module de Young effectif plafonne à 120 % de la valeur de référence lorsque $r_g \to \infty$, ce qui signifie que le cas de référence est déjà assez bien positionné. De plus, il est difficile dans la pratique d'obtenir des cristaux de très grand élancement.

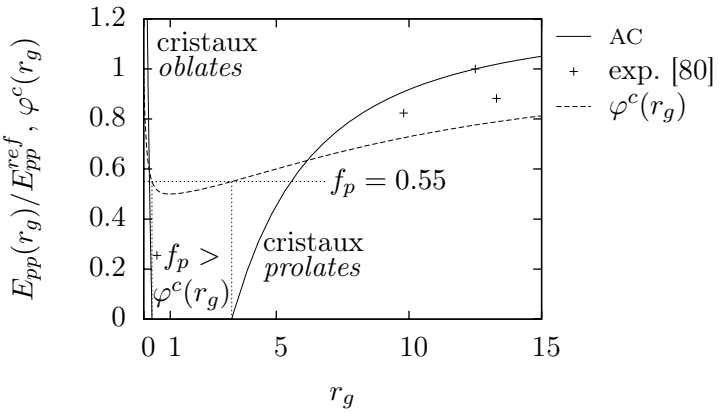


FIG. 4.8 – Module de Young normalisé en fonction du rapport d'aspect des cristaux, mesuré [80] et estimé par schéma auto-cohérent ($f_p = 0.55$)

Il convient de souligner le fait que pour tracer la courbe continue de la figure 4.8, on a donné le rapport d'aspect r_g aux inhomogénéités solides intervenant dans le schéma auto-cohérent. L'abscisse de chaque point expérimental (croix sur la figure 4.8) correspond à un rapport d'aspect moyen mesuré sur la microstructure réelle. Il convient de prendre garde au fait qu'il n'est pas acquis du point de vue théorique que le rapport d'aspect des inhomogénéités du schéma auto-cohérent soit comparable au rapport d'aspect des particules formant la microstructure. Nous nous sommes néanmoins permis ce rapprochement.

Terminons cette partie sur l'élancement des cristaux par un commentaire sur la forme des cristaux obtenus expérimentalement. Il y a très peu de chance que *tous* les cristaux d'un échantillon de plâtre pris présentent *exactement* la même forme. On s'attend plutôt à une distribution de formes plus ou moins étalée, qu'il faudrait introduire dans notre modèle par le biais d'une distribution de rapports d'aspect. Il s'agit d'une extension aisément réalisable en discrétisant la distribution, sous l'hypothèse d'une répartition isotrope des cristaux correspondant à chaque classe élémentaire de rapport d'aspect. En revanche, la détermination expérimentale de cette distribution de rapports d'aspect, à partir d'images MEB par exemple, nécessiterait probablement des outils avancés d'analyse d'image.

4.3.2 Effet des bulles

En pratique, le plâtre pris présente souvent des bulles de diamètre pouvant atteindre plusieurs centaines de microns. Les travaux réalisés jusqu'à présent supposaient l'absence de telles bulles (et les essais auxquels on a fait référence ont évidemment pris les précautions nécessaires pour minimiser la présence de bulles). Comme décrit dans le chapitre d'introduction (section 3.2.2), on modélise le plâtre pris avec bulles comme un milieu à double porosité, en distinguant deux espaces poreux : les bulles et les pores intercristallins. On note φ la porosité totale (bulles et pores intercristallins) du matériau et χ_b la fraction volumique de bulles dans l'espace poreux total.

On peut alors s'intéresser à l'influence relative des deux espaces poreux sur les caractéristiques élastiques effectives. En effet, pour augmenter la rigidité, à porosité totale constante (donc à densité constante), vaut-il mieux augmenter ou diminuer le volume relatif de bulles ? Les calculs numériques de [80] suggèrent d'ores et déjà qu'il vaut mieux privilégier les bulles plutôt que les pores intercristallins. Cependant, ces calculs par éléments finis ont été réalisés en 2D afin de maintenir un temps de calcul raisonnable. Cette étude peut à présent être réalisée en 3D en mettant à profit l'homogénéisation des milieux aléatoires.

On reprend la description multiéchelle du plâtre pris avec bulles présentée en section 3.2.2 et schématisée sur la figure 3.7. Du point de vue technique, on exploite deux schémas d'homogénéisation successifs :

- À l'échelle macroscopique, les bulles voient le plâtre pris comme un milieu continu. Si les bulles peuvent être considérées comme des inclusions dans ce milieu continu, ce dernier formant alors une matrice, on peut faire appel à un schéma de type Mori Tanaka (MT) pour estimer la rigidité effective à l'échelle macroscopique (plâtre pris avec bulles). À cette échelle, la fraction volumique de pores à prendre en compte est $\chi_b\varphi$, puisque les pores intercristallins sont intégrés au plâtre pris et donc invisibles.
- À l'échelle mésoscopique, on met en œuvre le schéma auto-cohérent présenté en section 4.2, pour estimer la rigidité effective du plâtre pris. À cette échelle, la fraction volumique de pores à prendre en compte vaut $f_p = (1 - \chi_b)\varphi/(1 - \chi_b\varphi)$.

On a ainsi construit un modèle estimant l'élasticité d'un plâtre pris avec bulles en fonction de l'élasticité des cristaux et de trois paramètres morphologiques :

- un paramètre global : la porosité totale φ,
- un paramètre scindant l'espace poreux total en pores intercristallins et bulles : χ_b défini comme la fraction volumique de bulles dans l'espace poreux total,
- un paramètre décrivant la forme des cristaux : l'élancement r_g.

Les résultats de la figure 4.9 gauche confirment le fait qu'il vaut mieux privilégier les bulles (χ_b élevé) pour optimiser la rigidité effective, à porosité totale φ (et donc à densité) constante. Évidemment, il faut garder à l'esprit le fait qu'il n'est pas toujours possible d'atteindre en pratique sur des matériaux réels toutes les valeurs de φ et χ_b. De plus, si les bulles sont amenées à coalescer (c'est-à-dire que l'on ne peut plus considérer chaque bulle comme entièrement entourée de solide ; c'est le cas sur la photo de la figure 3.6), les performances mécaniques peuvent se dégrader sensiblement. Pour appréhender cet effet, on peut proposer l'utilisation d'un schéma auto-cohérent (AC) pour homogénéiser à l'échelle macroscopique les bulles et le plâtre pris, au lieu du schéma de Mori Tanaka (voir figure 4.9 droite). En effet, le schéma auto-cohérent suppose non pas que toutes les bulles sont entièrement entourées de solide, mais que bulles et solide sont répartis de façon parfaitement aléatoire dans l'espace. En particulier, cette vision polycristalline considère qu'une bulle peut très bien cotoyer une autre bulle. On constate sur le graphique de droite de la figure 4.9 que les estimations issues du schéma auto-cohérent sont inférieures à celles du schéma de Mori Tanaka.

Par ailleurs, le modèle qui vient d'être développé pour rendre compte de la présence de bulles n'est qu'une première ébauche à améliorer. Ainsi, par exemple, les observations révèlent souvent la présence d'une fine couche plus dense autour des bulles, donc constituée de cristaux assemblés de manière plus compacte qu'ailleurs. Pour rendre compte de ce type d'observation, on peut proposer le schéma à n couches de Hervé-Zaoui [59], en exploitant $3 + 1$ couches, soit du centre vers la périphérie : la bulle, la fine couche plus dense, le plâtre pris et le milieu effectif.

Enfin, notons que ce schéma à double porosité a été utilisé avec succès pour modéliser le comportement des mousses d'hydroxyapatite, constituant des tissus osseux [42].

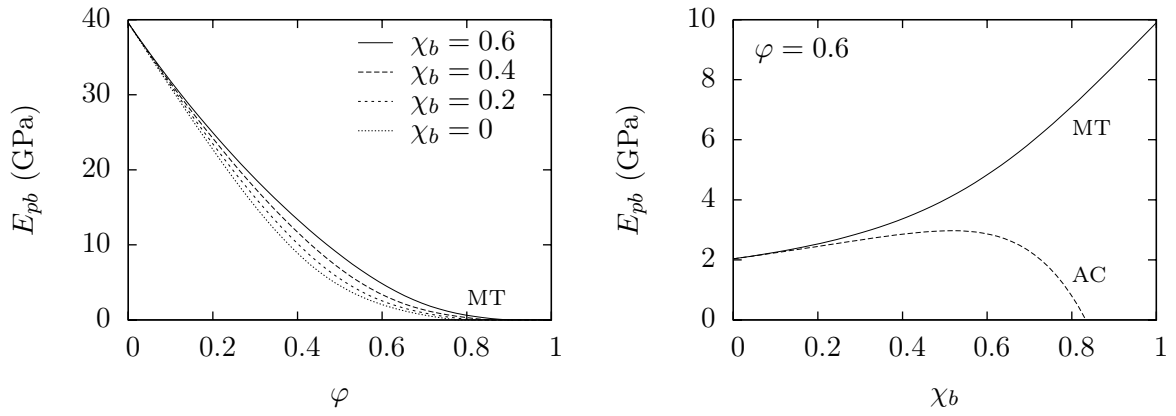


FIG. 4.9 – Module de Young effectif de plâtre pris avec bulles : impact de la fraction de bulles χ_b (partie gauche, avec $r_g = 12.5$), et impact du type de schéma employé pour introduire les bulles (partie droite, avec $r_g = 12.5$ et $\varphi = 0.6$)

4.4 Détermination d'une rigidité isotrope équivalente pour le solide

Les calculs élastiques présentés dans les sections 4.2 et 4.3 ont été réalisés en tenant compte de la rigidité anisotrope des cristaux de gypse. En revanche, les modèles développés pour estimer le domaine élastique (chapitre 5) et le comportement une fois sorti de ce domaine (chapitre 6) deviendraient extrêmement lourds du point de vue technique s'il fallait donner aux particules un comportement anisotrope. Ainsi, on cherche dans cette section à déterminer une rigidité isotrope « équivalente » qui sera affectée par la suite à la phase solide du polycristal poreux. Notons que cette approche a déjà été employée par [80]. Dans le cas de l'hydroxyapatite, l'utilisation du tenseur de rigidité anisotrope ou du tenseur de rigidité isotrope mène à des modules élastiques effectifs quasiment identiques [41].

On propose de retenir la rigidité isotrope du plâtre pris extrapolée à porosité nulle, (voir figure 4.6), ce qui donne : $E_{pp}(f_p \to 0^+) = 40$ GPa et $\nu_{pp}(f_p \to 0^+) = 0.34$. Afin d'évaluer la pertinence de cette approximation, on compare sur la figure 4.10 le module de Young obtenu en fonction de la porosité intercristalline, avec des ellipsoïdes de rigidité anisotrope (calculs effectués en section 4.2, trait continu) et avec des ellipsoïdes de rigidité isotrope (comme en section 2.2.1, trait interrompu). Les différences sont assez minimes.

Ainsi, dans toute la suite, on supposera que les cristaux de gypse (échelle microscopique) ont un comportement élastique isotrope, caractérisé par le module de Young $E_g = 40$ GPa et le coefficient de Poisson $\nu_g = 0.34$.

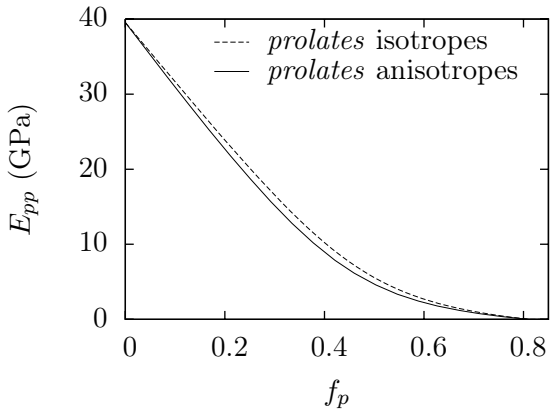


FIG. 4.10 – Module de Young du plâtre pris, obtenu soit à partir d'ellipsoïdes de révolution anisotropes, soit à partir d'ellipsoïdes de révolution isotropes ($r_g = 15$)

Chapitre 5

Limite élastique du plâtre pris

Dans ce chapitre, on cherche à modéliser la limite élastique du plâtre pris. Le modèle morphologique reste celui qui a été validé en élasticité au chapitre précédent : un schéma auto-cohérent dont les particules solides sont allongées et d'orientation uniformément répartie. On se donne un critère de rupture fragile des cristaux, portant sur les contraintes dans ceux-ci. On détermine alors par voie micromécanique le critère de limite d'élasticité macroscopique, en considérant que celui-ci est atteint dès lors que l'un des cristaux a rejoint son critère de rupture. Plus précisément, la forme qualitative du critère de limite d'élasticité macroscopique est d'abord recherchée. Ensuite, on détermine cette forme pour deux critères locaux différents. Dans ces deux cas, on compare les limites élastiques modélisées à des valeurs de résistance mesurées en traction et compression simple.

Sommaire

5.1 Critère à l'échelle des cristaux **52**
5.2 Forme du critère macroscopique de limite élastique **53**
5.2.1 Localisation des contraintes en moyenne dans les cristaux 54
5.2.2 Cas d'une contrainte macroscopique isotrope 54
5.2.3 Cas d'une contrainte macroscopique quelconque 55
5.3 Cas d'un critère local portant seulement sur la traction **56**
5.3.1 Localisation : détermination de σ_N 56
5.3.2 Recherche de l'orientation critique 56
5.3.3 Détermination du critère macroscopique de limite élastique 57
5.3.4 Cas de la traction / compression simple 59
5.4 Cas du critère local complet **60**
5.4.1 Localisation : détermination de σ_T 60
5.4.2 Recherche de l'orientation critique 61
5.4.3 Détermination du critère macroscopique de limite élastique 61
5.4.4 Cas de la traction / compression simple 63
5.5 Conclusion **66**

Le module de Young du plâtre pris a été modélisé avec succès par approche de changement d'échelle. On envisage à présent d'aller plus loin en proposant un modèle de limite d'élasticité du plâtre pris, sans bulles, donc à l'échelle mésoscopique telle que définie sur la figure 3.7. Ceci étant dit, nous nous permettrons de parler de « limite élastique macroscopique » ou de « contraintes macroscopiques » même si, d'après les trois échelles définies sur la figure 3.7, nous devrions qualifier limite élastique et contraintes de « mésoscopiques ». Souhaitant à nouveau mettre en œuvre une démarche micromécanique, il faut commencer par se donner un mécanisme local de rupture à l'échelle des cristaux (section 5.1). La rupture du plâtre pris semble survenir par décohésion des cristaux [80]. Cependant, la prise en compte d'un tel mécanisme soulève des difficultés d'ordre technique, pour le moment non résolues. On part donc d'une hypothèse ne présentant pas cette limitation. On se donne ainsi un critère portant sur les contraintes *dans* les cristaux et intégrant le caractère élancé de ces derniers. On imagine une rupture fragile : dès que le critère est atteint, le cristal correspondant ne reprend plus aucun effort.

Dans ce chapitre, on recherche la limite élastique d'un polycristal à grains en aiguilles dont les cristaux présentent un comportement élastique fragile. La limite élastique macroscopique est atteinte dès lors que l'un des cristaux rencontre son critère de rupture. On établit d'abord qualitativement la forme du domaine élastique macroscopique (section 5.2). On détermine ensuite précisément cette forme dans deux cas, correspondant à deux critères locaux différents (sections 5.3 et 5.4). À la fin de chacune de ces sections, on compare les limites élastiques modélisées en traction et compression simple à des résistances mesurées sur plâtre pris.

Il convient de noter que contrairement à un raisonnement de calcul à la rupture, l'approche de rupture fragile envisagée ici mène à des résistances macroscopiques qui dépendent des caractéristiques élastiques des cristaux et de l'état initial de ceux-ci [103]. Rappelons que l'état initial correspond ici à du plâtre pris complètement hydraté. On fait dans toute la suite l'hypothèse d'un état initial naturel, c'est-à-dire une déformation et une contrainte nulles dans tous les cristaux lorsque la déformation ou la contrainte macroscopique est nulle. Dans la réalité, l'état initial peut très bien ne pas être naturel : une précontrainte peut apparaître dans les cristaux, comme conséquence des mécanismes d'hydratation qui ont donné naissance à la microstructure. Dans ce cas, il faudra modifier les résistances fragiles obtenues pour tenir compte du caractère non naturel de l'état initial.

5.1 Critère à l'échelle des cristaux

La rupture du plâtre pris semble survenir par un mécanisme de « déchaussement » des cristaux [80]. Ce mécanisme fait donc intervenir les interfaces entre les cristaux. Il s'agirait donc de considérer chaque cristal comme entouré d'une interface imparfaite, c'est-à-dire supposant l'existence d'une discontinuité de déplacement. Le modèle auto-cohérent exploité en élasticité (chapitre 4) devrait ainsi être modifié en considérant une inhomogénéité ellipsoïdale de révolution *entourée d'une interface imparfaite*, plongée dans un milieu infini (voir partie droite de la figure 2.6 : l'ellipsoïde de révolution serait à entourer d'une interface imparfaite). Ce faisant, le nouveau problème auxiliaire à résoudre ne serait plus un problème d'inhomogénéité d'Eshelby, ce qui nécessiterait des développements techniques relativement lourds que nous n'avons pas envisagés dans le cadre de ce travail. Afin de pallier cette difficulté d'ordre purement technique, on propose de recourir à un critère portant sur les contraintes régnant *dans* les cristaux.

Il s'agit donc de se doter d'un moyen de relier les contraintes dans les cristaux au chargement macroscopique (en contraintes). On a typiquement affaire à un problème de localisation. En section 2.2.1, la construction du schéma auto-cohérent mis ensuite à profit pour estimer l'élasticité du plâtre pris a justement nécessité d'estimer la déformation moyenne de chaque famille de cristaux, définie par son orientation. Comme cette approche a donné des résultats satisfaisants en élasticité (sections 2.2.2 et 4.2.3), il semble envisageable d'exploiter ici une estimation similaire

de la contrainte moyenne dans les cristaux.

Une hypothèse supplémentaire consiste à considérer un critère local de rupture portant sur la contrainte moyenne ainsi estimée. Cette dernière est notée $\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}}$ pour rappeler la dépendance en l'orientation du cristal, $\underline{N}$ désignant l'axe de révolution du cristal (de la même façon que la déformation moyenne dépend de l'orientation du cristal, voir (2.12)). Les cristaux étant fortement allongés, il semble raisonnable de faire intervenir cette anisotropie de forme dans l'écriture du critère local de rupture. Ainsi, on s'intéresse au vecteur contrainte sur une facette perpendiculaire à l'axe du cristal, soit $\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{N}$ (voir figure 5.1). Ce vecteur peut être décomposé en une partie dans l'axe, $\sigma_N = \underline{N} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{N}$, et une partie normale à l'axe, $\underline{\sigma}_T = \boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{N} - \sigma_N \underline{N}$. On envisage un critère local de type Mohr-Coulomb portant sur les deux grandeurs σ_N et $\sigma_T = |\underline{\sigma}_T|$:

$$\sigma_T = \beta(\sigma_{cr} - \sigma_N) \tag{5.1}$$

avec deux paramètres caractérisant la résistance à l'échelle microscopique, σ_{cr} et β (voir figure 5.2). On se place dans le cas d'une rupture fragile : le critère de rupture macroscopique est supposé atteint dès lors que, dans *l'un* des cristaux, le critère local est atteint. Le comportement des cristaux est élastique fragile, le domaine élastique étant décrit par $\sigma_T < \beta(\sigma_{cr} - \sigma_N)$.

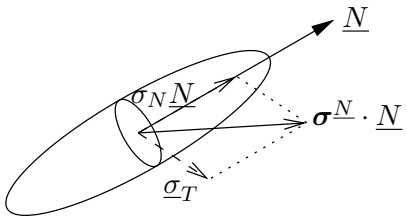


FIG. 5.1 – Décomposition du vecteur contrainte sur une facette perpendiculaire à l'axe d'un cristal

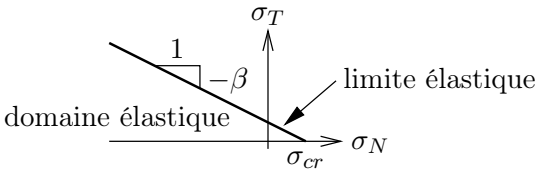


FIG. 5.2 – Domaine d'élasticité local propre aux cristaux de gypse, dans le plan (σ_N, σ_T)

5.2 Forme du critère macroscopique de limite élastique

On cherche à déterminer qualitativement la forme du domaine élastique macroscopique obtenu lorsque le critère de limite d'élasticité propre aux cristaux est défini par (5.1). Le domaine élastique macroscopique peut être écrit sous la forme :

$$\left\{ \boldsymbol{\Sigma} \text{ tel que } \sup_{(\underline{N},\underline{T}) \text{ tq } \underline{N}\cdot\underline{T}=0, |\underline{N}|=|\underline{T}|=1} \beta\sigma_N + \sigma_{NT} < \beta\sigma_{cr} \right\} \tag{5.2}$$

avec $\underline{N}$ colinéaire à l'axe de révolution du cristal, $\sigma_N = \underline{N} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{N}$ et $\sigma_{NT} = \underline{N} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{T}$. En considérant tous les $\underline{N}$ possibles, on balaye toutes les orientations de cristaux possibles.

5.2.1 Localisation des contraintes en moyenne dans les cristaux

Pour obtenir une inégalité portant explicitement sur le tenseur des contraintes macroscopiques $\mathbf{\Sigma}$, il est nécessaire de relier la contrainte $\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}}$ dans les cristaux à ce dernier (localisation). Pour cela, on propose de réutiliser la démarche détaillée dans la section 2.2.1, et notamment (2.12) qui fournit une estimation de la déformation moyenne dans une famille de cristaux d'orientation donnée. Du point de vue formel, ceci mène au tenseur de localisation des contraintes $\mathbb{B}$ tel que :

$$\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} = \mathbb{B}(\underline{N}, \nu_g, r_g, f_p) : \mathbf{\Sigma} \tag{5.3}$$

avec $\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}}$ l'estimation de la moyenne du tenseur des contraintes dans le cristal d'axe $\underline{N}$. Le tenseur de localisation $\mathbb{B}$ dépend de l'orientation du cristal et, conformément à l'analyse dimensionnelle, du coefficient de Poisson des cristaux de gypse ν_g, du rapport d'aspect des cristaux r_g et de la porosité f_p. Dans la suite, nous ommettons la dépendance en ν_g, r_g, f_p, en notant simplement $\mathbb{B}(\underline{N})$. En écrivant $\underline{N} = \underline{e}_r$ (orientation caractérisée par (θ, ϕ)), l'expression de $\mathbb{B}(\underline{N})$ peut être déduite de (2.12) et (2.13) :

$$\begin{aligned} \mathbb{B}(\underline{N}) &= \frac{1}{1-f_p}\mathbb{C}_g : \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}^{pp}_{ell}(\theta,\phi) : (\mathbb{C}_g - \mathbb{C}_{pp})\right]^{-1} \\ &: \left[\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}^{pp}_{ell}(\theta,\phi) : (\mathbb{C}_g - \mathbb{C}_{pp})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{4\pi}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\right]^{-1} : {\mathbb{C}_g}^{-1} \end{aligned} \tag{5.4}$$

Rappelons que le tenseur de rigidité du gypse $\mathbb{C}_g$ est maintenant considéré comme isotrope (section 4.4). Dans l'expression (5.4), tous les tenseurs sont isotropes, à l'exception de $\mathbb{P}^{pp}_{ell}(\theta,\phi)$ qui est symétrique isotrope transverse d'axe $\underline{e}_r$. Ainsi, $\mathbb{B}(\underline{N})$ est isotrope transverse d'axe $\underline{e}_r$. Dans la base $(\underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi, \underline{e}_r)$, les composantes de $\mathbb{P}^{pp}_{ell}(\theta,\phi)$ sont indépendantes de (θ,ϕ). Il en est donc de même pour $\mathbb{B}(\underline{N})$.

5.2.2 Cas d'une contrainte macroscopique isotrope

On commence par considérer un tenseur de contraintes macroscopique isotrope de la forme $\mathbf{\Sigma} = h\mathbf{1}$. $\mathbb{B}(\underline{N})$ étant un tenseur isotrope transverse d'axe $\underline{e}_r = \underline{N}$, on peut écrire[1] :

$$\mathbb{B}(\underline{N}) : \mathbf{1} = b_N \underline{N} \otimes \underline{N} + b_T(\underline{T}_1 \otimes \underline{T}_1 + \underline{T}_2 \otimes \underline{T}_2) \tag{5.5}$$

avec $\underline{T}_1 \cdot \underline{N} = 0$, $\underline{T}_2 \cdot \underline{N} = 0$ et $\underline{T}_1 \cdot \underline{T}_2 = 0$. On note que b_N et b_T sont indépendants de l'orientation $\underline{N}$ du cristal. De $\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} = h\mathbb{B}(\underline{N}) : \mathbf{1}$, il vient $\sigma_N = hb_N$ et $\sigma_{NT} = 0$. De ce fait, l'inégalité caractérisant dans (5.2) les états de contrainte du domaine d'élasticité macroscopique devient, lorsque $\mathbf{\Sigma}$ est isotrope :

$$\sup_{(\underline{N},\underline{T}) \text{ tq } \underline{N}\cdot\underline{T}=0, |\underline{N}|=|\underline{T}|=1} \beta\sigma_N + \sigma_{NT} = \beta h b_N < \beta\sigma_{cr} \tag{5.6}$$

Autrement dit, la valeur du critère local est la même dans tous les cristaux, quelle que soit l'orientation. Ce résultat est lié au caractère isotrope à la fois du chargement et de la distribution d'orientation des cristaux. L'inégalité (5.6) signifie que $\mathbf{\Sigma} = h^{max}\mathbf{1}$, avec $h^{max} = \sigma_{cr}/b_N$, est, parmi tous les états de contrainte sphériques de la forme $\mathbf{\Sigma} = h\mathbf{1}$, celui qui se trouve dans le domaine élastique macroscopique et présente la valeur de h la plus élevée. Dans le cas limite de cristaux en forme d'aiguille (rapport d'aspect r_g tendant vers l'infini), l'expression de h^{max} devient très simple :

$$h^{max} = \frac{(1-f_p)k_g(3k_{pp} + 3\mu_{pp} + \mu_g)}{3k_g(k_{pp} + \mu_{pp}) + \mu_g(3k_g - 2k_{pp})}\sigma_{cr} \tag{5.7}$$

[1] Pour s'en convaincre, il suffit d'écrire le produit doublement contracté $\mathbb{B}(\underline{N}) : \mathbf{1}$ dans la base $(\underline{T}_1, \underline{T}_2, \underline{N})$: le tenseur d'ordre 2 obtenu est diagonal dans cette base.

avec $h^{max} < \sigma_{cr}$ puisque $k_{pp} < k_g$. Les modules k_{pp} et μ_{pp} peuvent être numériquement calculés à partir de k_g, μ_g et f_p en résolvant le système d'équations constitué de (2.17) et (2.18).

En particulier, remarquons que h^{max}/σ_{cr} ne dépend que de f_p et de ν_g. Ce rapport est représenté en fonction de la porosité intercristalline sur la figure 5.3.

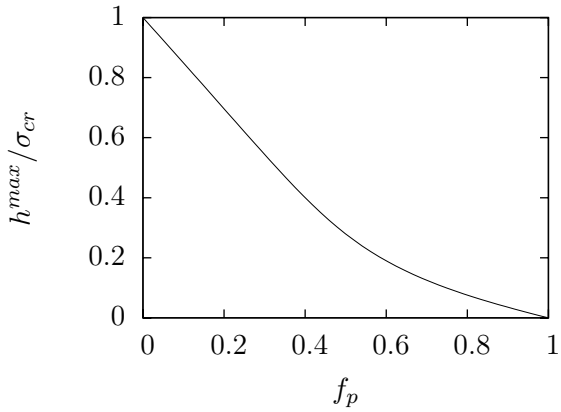


FIG. 5.3 – Pointe du cône formant le critère macroscopique en fonction de la porosité ($\nu_g = 0.34$), dans le cas limite de cristaux en aiguilles ($r_g \to \infty$)

5.2.3 Cas d'une contrainte macroscopique quelconque

Revenant au cas général du rapport d'aspect r_g quelconque, on montre à présent que dans l'espace des contraintes macroscopiques, le domaine élastique est un cône de sommet $\mathbf{\Sigma} = h\mathbf{1}$. Pour cela, supposons que $\mathbf{\Sigma} = h^{max}\mathbf{1}+\boldsymbol{S}$ appartienne au domaine élastique du plâtre pris ($\boldsymbol{S}$ étant un tenseur symétrique du deuxième ordre quelconque). Il nous faut montrer que $\mathbf{\Sigma} = h^{max}\mathbf{1}+\lambda\boldsymbol{S}$ (avec $\lambda > 0$) appartient lui aussi au domaine élastique macroscopique. Par hypothèse, l'inégalité caractérisant dans (5.2) les états de contrainte du domaine d'élasticité macroscopique est vérifiée pour $\mathbf{\Sigma} = h^{max}\mathbf{1} + \boldsymbol{S}$:

$$\begin{aligned} \forall(\underline{N},\underline{T}) \quad \text{tq} \quad & \underline{N}\cdot\underline{T} = 0 \text{ et } |\underline{N}| = |\underline{T}| = 1, \\ & \beta\underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : (h^{max}\mathbf{1} + \boldsymbol{S})]\cdot\underline{N} + \underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : (h^{max}\mathbf{1} + \boldsymbol{S})]\cdot\underline{T} < \beta\sigma_{cr} \end{aligned} \tag{5.8}$$

Or h^{max} a été défini de telle sorte que $\underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : h^{max}\mathbf{1}]\cdot\underline{N} = \sigma_{cr}$. De plus, $\underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : h^{max}\mathbf{1}]\cdot\underline{T} = 0$ d'après (5.5), ce qui fait que (5.8) devient :

$$\forall(\underline{N},\underline{T}) \text{ tq } \underline{N}\cdot\underline{T} = 0 \text{ et } |\underline{N}| = |\underline{T}| = 1,\ \beta\underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : \boldsymbol{S}]\cdot\underline{N} + \underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : \boldsymbol{S}]\cdot\underline{T} < 0 \tag{5.9}$$

En multipliant (5.9) par $\lambda > 0$ et en y ajoutant $\beta\underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : h^{max}\mathbf{1}]\cdot\underline{N} = \beta\sigma_{cr}$ et $\underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : h^{max}\mathbf{1}]\cdot\underline{T} = 0$, on obtient finalement :

$$\begin{aligned} \forall(\underline{N},\underline{T}) \quad \text{tq} \quad & \underline{N}\cdot\underline{T} = 0 \text{ et } |\underline{N}| = |\underline{T}| = 1, \\ & \beta\underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : (h^{max}\mathbf{1} + \lambda\boldsymbol{S})]\cdot\underline{N} + \underline{N}\cdot[\mathbb{B}(\underline{N}) : (h^{max}\mathbf{1} + \lambda\boldsymbol{S})]\cdot\underline{T} < \beta\sigma_{cr} \end{aligned} \tag{5.10}$$

Cette inégalité signifie que l'état de contraintes macroscopique $\mathbf{\Sigma} = h^{max}\mathbf{1}+\lambda\boldsymbol{S}$ se trouve lui aussi dans le domaine élastique. On a ainsi montré que le domaine élastique du plâtre pris (ensemble des tenseurs $\mathbf{\Sigma}$ tel que le comportement macroscopique reste élastique) est un cône de sommet $h^{max}\mathbf{1}$. On cherche maintenant à déterminer la forme de ce cône dans l'espace des contraintes principales.

5.3 Cas d'un critère local portant seulement sur la traction

On se place d'abord, d'une part pour simplifier l'exposé et d'autre part parce que cela a été notre première idée, dans le cas d'un domaine élastique propre aux cristaux limité uniquement en traction ($\beta \to \infty$) :

$$\sigma_N < \sigma_{cr} \tag{5.11}$$

On cherche à déterminer le domaine d'élasticité du plâtre pris, toujours sans bulles. Le matériau étant isotrope, on peut se contenter de rechercher le domaine élastique dans l'espace des contraintes principales $(\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$. On se donne donc un tenseur de contraintes macroscopique de la forme :

$$\mathbf{\Sigma} = \Sigma_1 \underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \Sigma_2 \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2 + \Sigma_3 \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \tag{5.12}$$

Pour alléger le calcul, on considère dans toute la suite le cas d'aiguilles ($r_g \to \infty$).

5.3.1 Localisation : détermination de σ_N

La première étape est d'estimer la contrainte $\sigma_N = \underline{N} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{N}$ dans l'axe de chaque cristal, en fonction notamment de l'orientation $\underline{N} = \underline{e}_r$. Cette contrainte s'écrit, en faisant intervenir le tenseur de localisation des contraintes $\mathbb{B}$ (voir équation (5.3)) :

$$\sigma_N = \underline{N} \cdot [\mathbb{B}(\underline{N}) : \mathbf{\Sigma}] \cdot \underline{N} \tag{5.13}$$

En exploitant (5.4), on montre après quelques calculs que la contrainte de traction σ_N peut se mettre sous la forme :

$$\sigma_N = a_0(\Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3) + a_1[(\Sigma_1 \cos^2\phi + \Sigma_2 \sin^2\phi)\sin^2\theta + \Sigma_3 \cos^2\theta] \tag{5.14}$$

où a_0 et a_1 ne dépendent que de ν_g et f_p, et avec $a_1 > 0$. Les expressions de a_0 et a_1 sont malheureusement trop lourdes pour être explicitées ici. Rappelons que dans (5.14), les angles θ et ϕ décrivent l'orientation de l'axe $\underline{N} = \underline{e}_r$ du cristal.

5.3.2 Recherche de l'orientation critique

On recherche, pour un état de contrainte macroscopique $(\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$ donné, l'orientation critique. Il s'agit de l'orientation (θ, ϕ) de la famille de cristaux dans lesquels σ_N est maximisé. Pour cela, comme $a_1 > 0$, il suffit de maximiser sur $[0, \pi] \times [0, 2\pi[$ la fonction f définie par :

$$f : (\theta, \phi) \mapsto (\Sigma_1 \cos^2\phi + \Sigma_2 \sin^2\phi)\sin^2\theta + \Sigma_3 \cos^2\theta \tag{5.15}$$

Le maximum de f dépend de la façon dont s'ordonnent les contraintes principales (résultat en table 5.1). Les cristaux critiques sont ceux qui se trouvent dans l'axe de la contrainte principale la plus élevée (figure 5.4), et la valeur maximale de f est justement égale à cette contrainte principale.

	maximum de f		
cas	θ	ϕ	valeur de f
$\Sigma_1 > \Sigma_2$ et $\Sigma_1 > \Sigma_3$	$\pi/2$	0	Σ_1
$\Sigma_2 > \Sigma_1$ et $\Sigma_2 > \Sigma_3$	$\pi/2$	$\pi/2$	Σ_2
$\Sigma_3 > \Sigma_1$ et $\Sigma_3 > \Sigma_2$	0		Σ_3

TAB. 5.1 – Maximisation de la fonction f définie par (5.15)

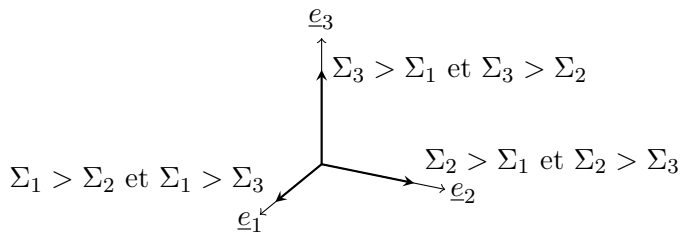


FIG. 5.4 – Axe de la famille des cristaux critiques (représenté par une flèche en trait gras) selon la façon dont s'ordonnent les contraintes principales

5.3.3 Détermination du critère macroscopique de limite élastique

Ordonnons sous la forme $\Sigma_I \geq \Sigma_{II} \geq \Sigma_{III}$ les contraintes principales. Dans ce cas, le maximum, sur toutes les orientations possibles, de σ_N (5.14) s'écrit :

$$\max_{0\leq\theta\leq\pi,\ 0\leq\phi<2\pi} \sigma_N = a_0(\Sigma_I + \Sigma_{II} + \Sigma_{III}) + a_1\Sigma_I \tag{5.16}$$

Ainsi, le critère de limite d'élasticité du plâtre pris est obtenu, à partir de (5.11), sous la forme :

$$a_0(\Sigma_I + \Sigma_{II} + \Sigma_{III}) + a_1\Sigma_I = \sigma_{cr} \tag{5.17}$$

ou encore :

$$b_1\Sigma_I + b_2(\Sigma_{II} + \Sigma_{III}) = \sigma_{cr} \tag{5.18}$$

où $b_1 = a_0 + a_1$ et $b_2 = a_0$ ne dépendent que de ν_g et f_p (voir figure 5.5). On note que lorsque $f_p \to 0$, $b_1 \to 1$ et $b_2 \to 0$ ce qui fait que le critère macroscopique devient à porosité nulle le critère de Rankine $\Sigma_I = \sigma_{cr}$ (Σ_I étant la plus élevée des contraintes principales). Ceci est cohérent avec le critère microscopique $\sigma_N = \sigma_{cr}$, en considérant l'ensemble des orientations des cristaux. Revenons au cas général $f_p \neq 0$. Dans l'espace des contraintes principales, le critère est un cône dont la base est un triangle équilatéral (figure 5.6). Remarquons qu'à partir d'un critère local unidirectionnel $\sigma_N < \sigma_{cr}$ (selon l'axe du cristal), on obtient un critère macroscopique en forme de cône, donc frottant : le critère dépend de la contrainte moyenne $\Sigma_m = \mathrm{tr}\,\mathbf{\Sigma}/3$.

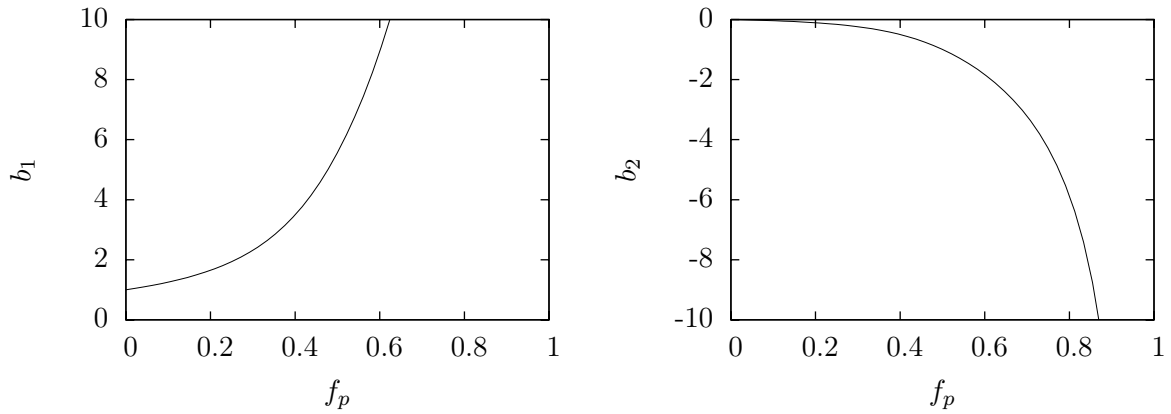


FIG. 5.5 – Évolution des paramètres b_1 et b_2 définissant le critère macroscopique (5.18), en fonction de la porosité intercristalline ($\nu_g = 0.34$)

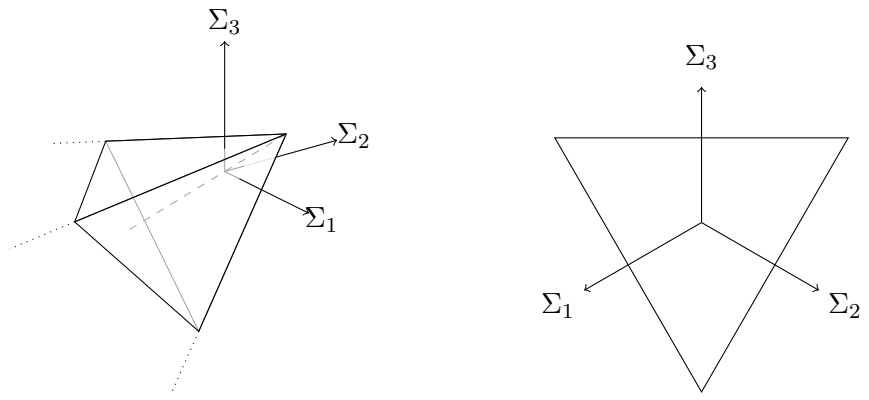


FIG. 5.6 – Critère macroscopique obtenu dans l'espace des contraintes principales, et coupe par un plan à $\Sigma_m = \operatorname{tr} \mathbf{\Sigma}/3$ constant

Pour appréhender la variation de l'ouverture du cône avec la porosité, on peut déterminer les deux critères de Drucker-Prager (définis par $\Sigma_d = \alpha(h^{max} - \Sigma_m)$ et matérialisés par des cônes à base circulaire dans l'espace des contraintes principales) respectivement inscrit et circonscrit au critère (5.18) obtenu. En écrivant $\Sigma_I = \Sigma_{II} = \Sigma_{III} = h^{max}$, on retrouve l'expression (5.7) de la pointe du cône sous la forme $h^{max} = \sigma_{cr}/(b_1 + 2b_2)$. Les cônes inscrit et circonscrit coïncident avec le critère sur des demi-droites pour lesquelles deux contraintes principales sont égales. Le cône inscrit est obtenu lorsque $\Sigma_I \geq \Sigma_{II} = \Sigma_{III}$, alors que le cône circonscrit est obtenu lorsque $\Sigma_I = \Sigma_{II} \geq \Sigma_{III}$. Il suffit d'écrire le fait que le critère macroscopique (5.18) et celui de Drucker-Prager coïncident sur ces demi-droites pour établir les paramètres α des cônes inscrit (α_i) et circonscrit (α_c) :

$$\alpha_i = \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{b_1 + 2b_2}{b_1 - b_2} \quad \text{et} \quad \alpha_c = \sqrt{3}\frac{b_1 + 2b_2}{b_1 - b_2} \tag{5.19}$$

On remarque que $\alpha_c = 2\alpha_i$. Ces deux paramètres sont représentés sur la figure 5.7 en fonction de la porosité. Le cône du critère macroscopique est d'autant plus fermé que la porosité est grande.

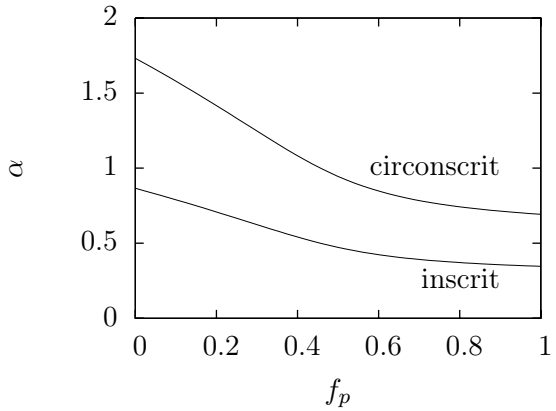


FIG. 5.7 – Paramètres α des critères de Drucker-Prager inscrit et circonscrit ($\nu_g = 0.34$)

5.3.4 Cas de la traction / compression simple

Les essais triaxiaux sur plâtre pris semblant délicats à réaliser, on cherche à valider le critère obtenu dans le cas d'un chargement de traction ou compression simple.

Limite élastique uniaxiale

Lors d'un essai de traction simple, l'état de contraintes macroscopique est défini par $\Sigma_I = \Sigma_t$, $\Sigma_{II} = \Sigma_{III} = 0$, avec $\Sigma_t > 0$. Lors d'un essai de compression simple, l'état de contraintes macroscopique est défini par $\Sigma_I = \Sigma_{II} = 0$, $\Sigma_{III} = -\Sigma_c$, avec $\Sigma_c > 0$. Par conséquent, le critère (5.18) donne les contraintes limites suivantes :

$$\Sigma_t^{lim} = \frac{\sigma_{cr}}{b_1} \quad \text{et} \quad \Sigma_c^{lim} = -\frac{\sigma_{cr}}{b_2} \tag{5.20}$$

Il ne reste qu'un seul paramètre à déterminer : la résistance σ_{cr} en traction des cristaux. Comme il semble quasi impossible de le mesurer directement, d'autant plus que l'on a contourné la physique de la ruine à l'échelle des cristaux, on propose d'exploiter l'un des points expérimentaux dont on dispose (et représentés sur la figure 3.9 gauche). À porosité quasi-nulle, la résistance en traction mesurée est d'environ 15 MPa. Or, comme $b_1 \to 1$ lorsque $f_p \to 0$, $\Sigma_t^{lim}(f_p \to 0) = \sigma_{cr}$. On retient donc $\sigma_{cr} = 15$ MPa. Les estimations sont comparées à des données expérimentales provenant de plusieurs sources bibliographiques (voir section 3.3) sur la figure 5.8 gauche. En partie droite de la figure 5.8, on représente la déformation d'extension macroscopique dans la direction 3 atteinte à la limite élastique, simplement calculée à partir du module de Young effectif (estimé en section 4.2) : $E_{33}^{lim} = \Sigma^{lim}/E_{pp}$. En effet, tant que la limite élastique n'est pas atteinte, le comportement macroscopique reste élastique linéaire.

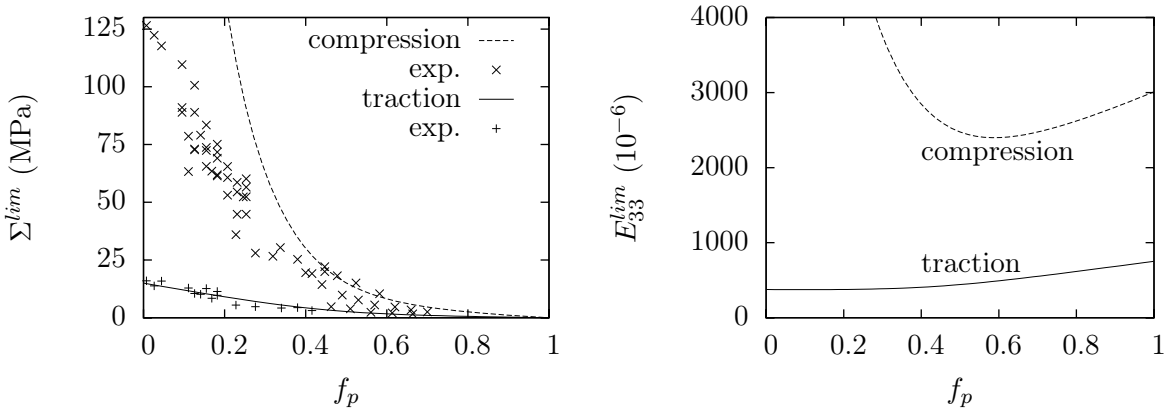


FIG. 5.8 – Résistances en traction et compression simple estimées ($\nu_g = 0.34$, $\sigma_{cr} = 15$ MPa) et mesurées expérimentalement (données expérimentales issues de [2, 3, 66, 105] pour la traction et de [2, 3, 66, 105, 50, 120, 21, 112, 38] pour la compression), et déformation à la limite élastique

Autant le modèle reproduit correctement les résistances en traction simple, autant l'accord en compression simple n'est pas bon aux faibles porosités. En effet, ce modèle prévoit à porosité nulle une résistance macroscopique en compression simple infinie, ce qui est hautement rédhibitoire. Ceci est clairement imputable à l'hypothèse d'un critère local ne portant que sur la contrainte σ_N dans l'axe des cristaux, qui ne semble donc pas satisfaisante.

Dans ce chapitre, nous nous limitons à déterminer la limite élastique macroscopique, atteinte lorsque le premier cristal atteint son critère de rupture. On peut se demander ce qui se passe ensuite (comportement « post-pic »), lorsque la déformation macroscopique augmente au delà

du seuil de limite élastique. Pour cela, on cherchera au chapitre 6 à déterminer la suite, après la limite élastique, de la courbe représentant la contrainte macroscopique Σ_{33} en fonction de la déformation macroscopique E_{33}.

Étude des cristaux critiques

On a déjà vu en section 5.3.2 que l'orientation de la famille des cristaux critiques (c'est-à-dire les premiers cristaux à atteindre le critère local) dépend de l'état de contrainte macroscopique. En traction simple, les cristaux critiques se trouvent être parallèles à l'axe de traction. En compression simple, les cristaux critiques sont perpendiculaires à l'axe de compression (il s'agit donc en fait d'une infinité d'orientations critiques, caractérisées par $\theta = \pi/2$, $0 \leq \phi < 2\pi$). Notons que ce constat peut apporter une piste pour interpréter la fissuration en colonnettes observée sur des éprouvettes de roches en compression simple. Ces orientations sont schématisées sur la figure 5.9.

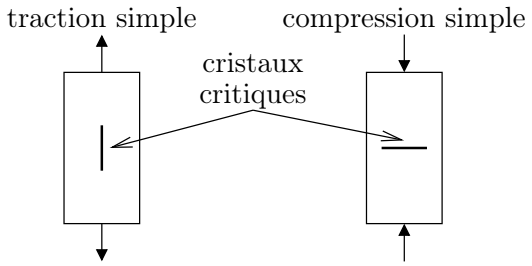


FIG. 5.9 – Orientation des cristaux critiques dans le cas d'essais de traction et de compression simple

5.4 Cas du critère local complet

À présent, on reprend le critère local (5.1) complet :

$$\sigma_N + \frac{1}{\beta}\sigma_T = \sigma_{cr} \tag{5.21}$$

avec β fini. Comme en section 5.3, on considère le cas d'aiguilles ($r_s \to \infty$). On recherche le domaine d'élasticité macroscopique dans l'espace des contraintes principales. Le chargement en contraintes est donc toujours donné par (5.12). L'expression (5.14) de σ_N reste valable.

5.4.1 Localisation : détermination de σ_T

On a maintenant besoin de la composante de cisaillement, $\sigma_T = |\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{N} - \sigma_N \underline{N}|$, du vecteur contrainte $\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{N}$. On montre après quelques calculs que cette dernière peut se mettre sous la forme :

$$\sigma_T = a_2 a_1 \sin\theta \sqrt{[\Sigma_3 - \Sigma_2 + (\Sigma_2 - \Sigma_1)\cos^2\phi]^2 \cos^2\theta + (\Sigma_2 - \Sigma_1)^2 \cos^2\phi \sin^2\phi} \tag{5.22}$$

avec le paramètre $a_1 > 0$ intervenant déjà dans σ_N (5.14), et :

$$a_2 = \frac{4\mu_g\mu_{pp}}{\mu_g + \mu_{pp}} \frac{3k_g + \mu_g + 3\mu_{pp}}{8\mu_g\mu_{pp} + 9k_g\mu_g - 3k_g\mu_{pp}} > 0 \tag{5.23}$$

5.4.2 Recherche de l'orientation critique

La recherche du cristal critique revient à maximiser $\sigma_N + \sigma_T/\beta$, le triplet $(\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$ étant donné. En faisant appel à (5.14) et (5.22), on écrit :

$$\sigma_N + \frac{\sigma_T}{\beta} = a_0(\Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3) + a_1 g(\theta, \phi) \tag{5.24}$$

avec :

$$\begin{aligned} g(\theta,\phi) &= (\Sigma_1 \cos^2\phi + \Sigma_2 \sin^2\phi)\sin^2\theta + \Sigma_3\cos^2\theta \\ &+ A\sin\theta\sqrt{[\Sigma_3 - \Sigma_2 + (\Sigma_2 - \Sigma_1)\cos^2\phi]^2\cos^2\theta + (\Sigma_2 - \Sigma_1)^2\cos^2\phi\sin^2\phi} \end{aligned} \tag{5.25}$$

où $A = a_2/\beta > 0$. Comme $a_1 > 0$, il suffit de maximiser la fonction g pour identifier l'orientation de la famille des cristaux critiques. Par symétrie, il suffit de restreindre la recherche sur $[0, \pi/2] \times [0, \pi/2]$ c'est-à-dire sur 1/8 de la sphère unité. On montre que la fonction g n'admet pas de maximum sur $]0, \pi/2[\times]0, \pi/2[$. On cherche donc d'abord le maximum local sur chacun des « côtés » du 1/8 de sphère, $\theta = \pi/2$, $\phi = 0$ ou $\phi = \pi/2$. Les résultats sont synthétisés dans la table 5.2. On détermine ensuite le maximum global de g. Finalement, l'orientation du cristal critique dépend à la fois de $\gamma_c = (\arctan A)/2$ et de la façon dont les contraintes principales sont ordonnées, ce qui donne six cas de figure à distinguer (voir figure 5.10).

$\theta = \pi/2$	maximum local de g	
cas	ϕ	valeur de g
$\Sigma_1 > \Sigma_2$	$(\arctan A)/2$	$[\Sigma_1 + \Sigma_2 + (\Sigma_1 - \Sigma_2)\sqrt{1+A^2}]/2$
$\Sigma_2 > \Sigma_1$	$(\pi - \arctan A)/2$	$[\Sigma_1 + \Sigma_2 + (\Sigma_2 - \Sigma_1)\sqrt{1+A^2}]/2$

$\phi = 0$	maximum local de g	
cas	θ	valeur de g
$\Sigma_3 > \Sigma_1$	$(\arctan A)/2$	$[\Sigma_1 + \Sigma_3 + (\Sigma_3 - \Sigma_1)\sqrt{1+A^2}]/2$
$\Sigma_1 > \Sigma_3$	$(\pi - \arctan A)/2$	$[\Sigma_1 + \Sigma_3 + (\Sigma_1 - \Sigma_3)\sqrt{1+A^2}]/2$

$\phi = \pi/2$	maximum local de g	
cas	θ	valeur de g
$\Sigma_3 > \Sigma_2$	$(\arctan A)/2$	$[\Sigma_2 + \Sigma_3 + (\Sigma_3 - \Sigma_2)\sqrt{1+A^2}]/2$
$\Sigma_2 > \Sigma_3$	$(\pi - \arctan A)/2$	$[\Sigma_2 + \Sigma_3 + (\Sigma_2 - \Sigma_3)\sqrt{1+A^2}]/2$

TAB. 5.2 – Maximisation locale de la fonction g définie par (5.25)

5.4.3 Détermination du critère macroscopique de limite élastique

On ordonne sous la forme $\Sigma_I \geq \Sigma_{II} \geq \Sigma_{III}$ les contraintes principales. On montre à partir du tableau 5.2 que le maximum global de g s'écrit dans tous les cas :

$$\max_{0\leq\theta\leq\pi,\ 0\leq\phi<2\pi} g(\theta,\phi) = \frac{\Sigma_I + \Sigma_{III}}{2} + \frac{\Sigma_I - \Sigma_{III}}{2}\sqrt{1+A^2} \tag{5.26}$$

Le domaine d'élasticité macroscopique s'écrit alors, en rappelant (5.24) et la définition de A :

$$a_0\left(\Sigma_I + \Sigma_{II} + \Sigma_{III}\right) + a_1\left(\frac{\Sigma_I + \Sigma_{III}}{2} + \frac{\Sigma_I - \Sigma_{III}}{2}\sqrt{1+(a_2/\beta)^2}\right) < \sigma_{cr} \tag{5.27}$$

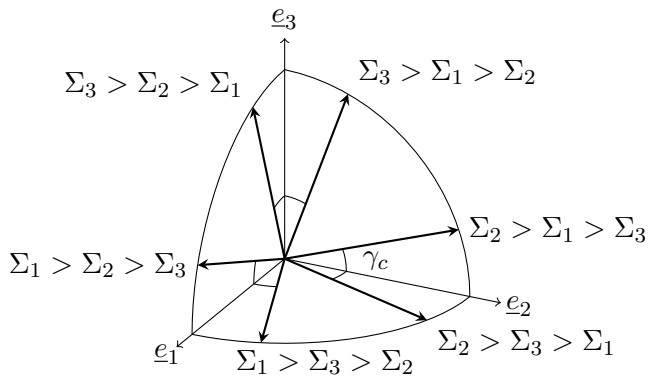


FIG. 5.10 – Axe du cristal critique (représenté par une flèche en trait gras) selon la façon dont s'ordonnent les contraintes principales

Cette inégalité peut se réécrire sous la forme :

$$c_1\Sigma_I + c_2\Sigma_{II} + c_3\Sigma_{III} < \sigma_{cr} \tag{5.28}$$

avec :

$$c_1 = a_0 + a_1\frac{1+\sqrt{1+(a_2/\beta)^2}}{2}\ , \quad c_2 = a_0 \quad \text{et} \quad c_3 = a_0 + a_1\frac{1-\sqrt{1+(a_2/\beta)^2}}{2} \tag{5.29}$$

où a_0, a_1, a_2 restent définis par (5.14) et (5.23). Notons que c_1, c_2, c_3 ne dépendent que de ν_g, f_p et β (voir figure 5.11). Dans l'espace des contraintes principales, le critère est un cône à base hexagonale non régulière (figure 5.12). Le cône est d'autant plus ouvert que le paramètre local β est élevé.

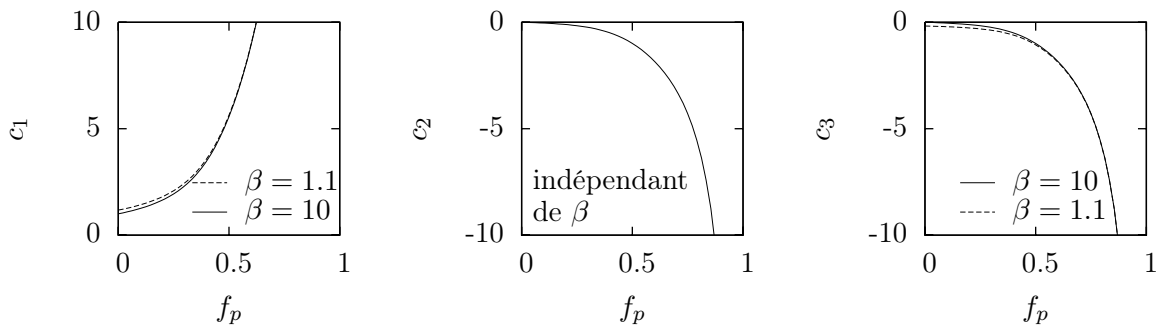


FIG. 5.11 – Évolution des paramètres c_1, c_2 et c_3 intervenant dans le domaine d'élasticité macroscopique (5.28) en fonction de la porosité et pour deux valeurs de β ($\nu_g = 0.34$)

On détermine les critères de Drucker-Prager ($\Sigma_d = \alpha(h^{max} - \Sigma_m)$) inscrit et circonscrit au critère défini par (5.28). En écrivant $\Sigma_I = \Sigma_{II} = \Sigma_{III} = h^{max}$, on retrouve l'expression (5.7) de la pointe du cône sous la forme $h^{max} = \sigma_{cr}/(3a_0 + a_1)$. Le cône inscrit est tangent aux six plans formant le critère. Le cône circonscrit est celui contenant la demi-droite $\Sigma_I = \Sigma_{II} \geq \Sigma_{III}$ du critère. On obtient ainsi :

$$\alpha_i = \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{c_1+c_2+c_3}{\sqrt{c_1^2+c_2^2+c_3^2-c_2c_3-c_1c_3-c_1c_2}} \quad \text{et} \quad \alpha_c = \sqrt{3}\frac{c_1+c_2+c_3}{c_1+c_2-2c_3} \tag{5.30}$$

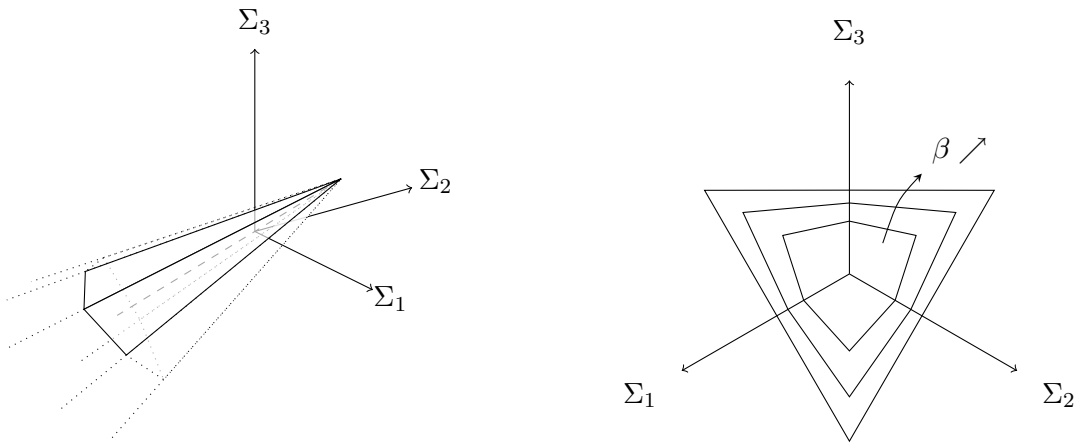


FIG. 5.12 – Critère de limite élastique macroscopique dans l'espace des contraintes principales, et coupe par un plan à Σ_m constant (visualisation de l'influence du paramètre β : trois critères sont représentés, correspondant à trois valeurs différentes du paramètre β)

Ces deux paramètres sont représentés en fonction de la porosité intercristalline f_p sur la figure 5.13 pour trois valeurs de β : 1.1, 10 et l'infini (ce qui permet de retrouver le critère local ne portant que sur la traction, étudié en section 5.3). On note que $\beta = 10$ permet déjà de quasiment retrouver les résultats établis à partir du critère local ne portant que sur la traction ($\beta \to \infty$). Aux porosités élevées ($f_p > 0.6$), les paramètres α_i et α_c ne dépendent que très peu de β.

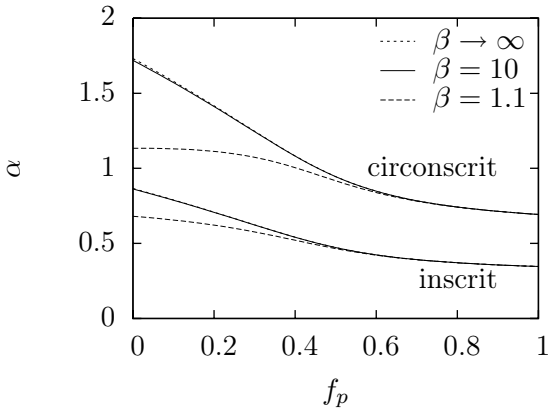


FIG. 5.13 – Paramètres α des critères de Drucker-Prager inscrit et circonscrit ($\nu_g = 0.34$)

5.4.4 Cas de la traction / compression simple

Limite élastique uniaxiale

Le critère (5.28) donne les contraintes de limite élastique macroscopiques suivantes, respectivement en traction et compression simple :

$$\Sigma_t^{lim} = \frac{\sigma_{cr}}{c_1} \quad \text{et} \quad \Sigma_c^{lim} = -\frac{\sigma_{cr}}{c_3} \tag{5.31}$$

avec les mêmes notations qu'au début de la section 5.3.4. Les paramètres σ_{cr} et β sont déterminés à partir des résistances extrapolées à porosité nulle. Le modèle donne :

$$\Sigma_t^{lim}(f_p \to 0) = \frac{2\sigma_{cr}}{\sqrt{1+1/\beta^2}+1} \quad \text{et} \quad \Sigma_c^{lim}(f_p \to 0) = \frac{2\sigma_{cr}}{\sqrt{1+1/\beta^2}-1} \tag{5.32}$$

À porosité quasi-nulle, les résistances en traction et compression simple sont respectivement mesurées à 15 MPa et 125 MPa (voir données expérimentales représentées sur la figure 3.9). Ceci donne $\sigma_{cr} = 17$ MPa et $\beta = 1.3$. Les estimations sont alors comparées aux mesures expérimentales en partie gauche de la figure 5.14. À présent, le modèle reproduit assez correctement les résistances en traction et compression simple, compte tenu de la dispersion déjà relativement importante des données expérimentales.

La partie droite de la figure 5.14 représente la déformation macroscopique obtenue lorsque la limite élastique est tout juste atteinte ($E_{33}^{lim} = \Sigma_t^{lim}/E_{pp}$ par exemple en traction simple). Il est intéressant de constater que cette déformation de sortie du domaine élastique dépend relativement peu de la porosité (on reste dans l'intervalle $6.2 * 10^{-4} \pm 39\%$ en traction et $3.0 * 10^{-3} \pm 12\%$ en compression), comparativement à la dépendance observée sur la contrainte de limite élastique. Cette relative indépendance est confirmée par les résultats expérimentaux issus de [27, 98] sur la déformation de rupture du plâtre pris en traction simple. Ces résultats sont représentés par des points sur la figure 5.14 droite. Compte tenu du caractère délicat de ce genre de mesure, il est intéressant de constater que les prévisions du modèle et les résultats expérimentaux sont du même ordre de grandeur.

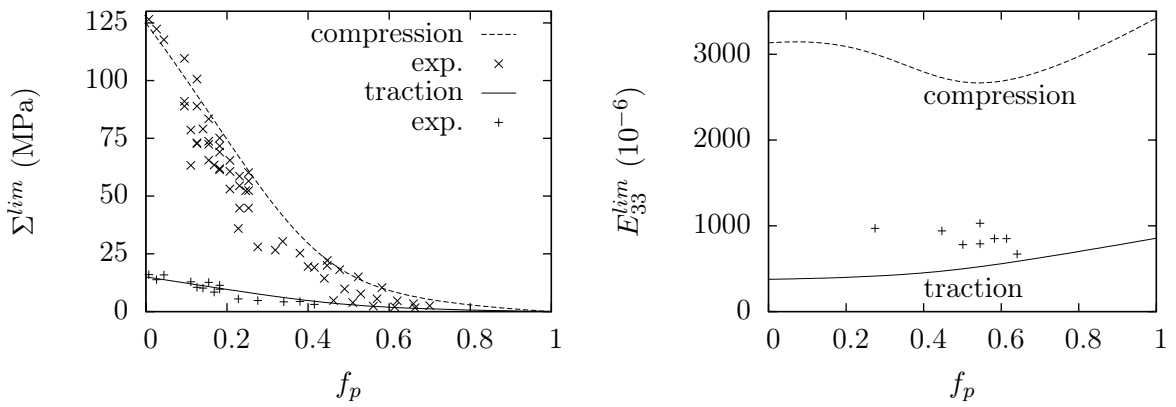


FIG. 5.14 – Résistances en traction et compression simple estimées ($\nu_g = 0.34$, $\sigma_{cr} = 17$ MPa, $\beta = 1.3$) et mesurées expérimentalement (données expérimentales issues de [2, 3, 66, 105] pour la traction et de [2, 3, 66, 105, 50, 120, 21, 112, 38] pour la compression), et déformation à la limite élastique (données expérimentales issues de [27, 98])

Étude de l'orientation critique

Lorsque l'état de contrainte macroscopique est uniaxial (de type $\Sigma_1 = \Sigma_2 = 0$, Σ_3), microstructure *et* chargement sont invariants par rotation autour de $\underline{e}_3$. Ainsi l'orientation critique, qui, rappelons-le, est l'orientation du cristal dans lequel le critère local est maximisé, est indépendante de ϕ : elle n'est définie que par l'angle θ. En traction (θ_t^{cr}) et compression (θ_c^{cr}) simple, l'orientation critique s'écrit, en faisant référence aux résultats du tableau 5.2 :

$$\theta_t^{cr} = \frac{\arctan A}{2} \quad \text{et} \quad \theta_c^{cr} = \frac{\pi - \arctan A}{2} \tag{5.33}$$

Ces deux angles dépendent de β par le biais de $A = a_2/\beta$. Aux porosités les plus élevées, le cristal critique se trouve dans l'axe de traction ou perpendiculaire à l'axe de compression (figure 5.15).

On cherche à déterminer les contraintes σ_N et σ_T dans le cristal critique juste au moment de la sortie du domaine élastique macroscopique, toujours en compression et traction simple (donc lorsque l'état de contraintes macroscopique atteint $\Sigma_3 = \Sigma_t^{lim}$ en traction ou $\Sigma_3 = -\Sigma_c^{lim}$ en compression). Lorsque l'état de contraintes macroscopique est uniaxial de la forme $\Sigma_1 = \Sigma_2 = 0$, Σ_3, (5.14) et (5.22) deviennent :

$$\sigma_N = \Sigma_3(a_0 + a_1 \cos^2\theta) \quad \text{et} \quad \sigma_T = |\Sigma_3| a_1 a_2 |\cos\theta| \sin\theta \tag{5.34}$$

En injectant $\theta = \theta_t^{cr}$ ou θ_c^{cr} dans ces deux expressions, on obtient les courbes représentées sur la figure 5.16. À porosité élevée ($f_p > 0.6$), le cristal critique n'est quasiment soumis qu'à de la traction pure : $\sigma_T^{cr} \approx 0$. Ainsi, on se retrouve quasiment dans le premier cas (section 5.3), à savoir celui du critère $\sigma_N < \sigma_{cr}$.

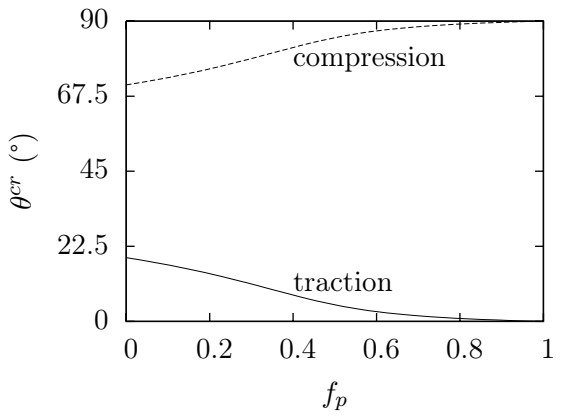


FIG. 5.15 – Orientation du cristal critique en traction et compression simple ($\nu_g = 0.34$, $\sigma_{cr} = 17$ MPa, $\beta = 1.3$)

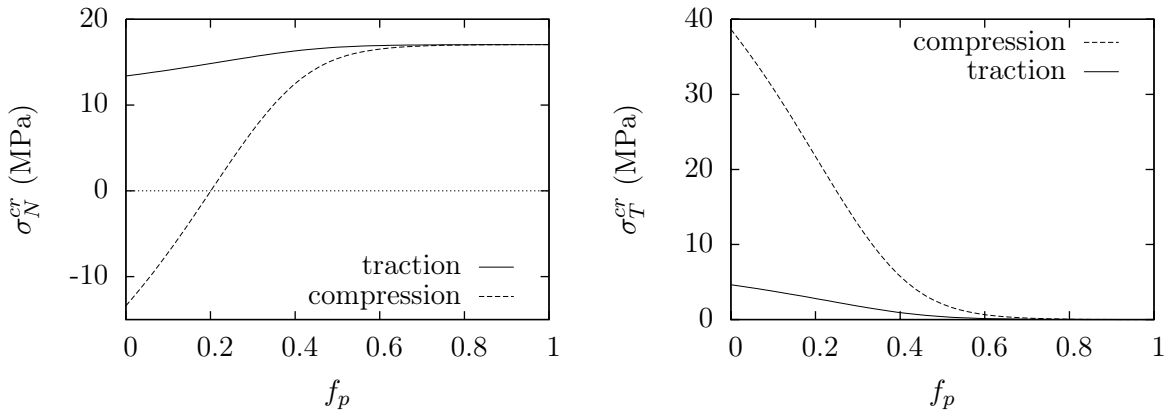


FIG. 5.16 – Contraintes σ_N et σ_T dans le cristal critique à la limite élastique en traction et compression simple ($\nu_g = 0.34$, $\sigma_{cr} = 17$ MPa, $\beta = 1.3$)

Remarquons qu'en traction simple, lorsque $f_p \to 0$ (donc dans le cas d'un matériau « plein » pour lequel on ne distingue pas les cristaux), on pourrait croire que le critère devrait s'écrire

$\sigma_N < \sigma_{cr}$ car la composante de cisaillement du vecteur contrainte σ_T tend vers 0 sur une facette perpendiculaire à l'axe de traction $\underline{N} = \underline{e}_3$. En fait, il n'en est rien, puisque la facette horizontale n'est pas la plus défavorable : sur la figure 5.15, on note que l'angle θ^{cr} de la facette critique vaut environ 20°.

5.5 Conclusion

On a construit un critère de limite élastique du plâtre pris (sans bulles), dans l'espace des contraintes principales, à partir d'un critère de rupture local donné sur les contraintes moyennes dans les cristaux. Il faut rester conscient du fait que ce choix de critère local ne décrit pas précisément le micromécanisme de rupture réel du plâtre pris. Il s'agit d'un compromis assurant la faisabilité dans l'immédiat, du point de vue technique, du développement du modèle. La mise en place d'un critère d'interface entre les cristaux nous semble en effet hors de portée sans calculs numériques relativement lourds, du moins dans le cadre de ce travail. Cependant, il paraît évident qu'une meilleure description du mécanisme local ne peut qu'améliorer le critère de rupture macroscopique.

Par ailleurs, nous nous sommes limités au cas d'aiguilles ($r_g \to \infty$), ce qui a grandement simplifié le développement du modèle. Les calculs sont techniquement réalisables pour des cristaux d'élancement fini (r_g fini), mais au prix d'une plus grande lourdeur. Il s'agit d'une autre voie d'amélioration du modèle, cette fois en mettant l'accent sur la description de la morphologie. Cette voie semble à première vue tout à fait accessible du point de vue technique.

Chapitre 6

Comportement post-limite élastique du plâtre pris

Dans ce chapitre, on cherche à déterminer le comportement d'un matériau de type « plâtre pris » au delà de sa limite élastique. On met en œuvre un raisonnement micro-macro pour suivre l'état d'endommagement de la microstructure au fur et à mesure de l'augmentation du chargement macroscopique en déformation. La microstructure est constituée d'un enchevêtrement d'aiguilles. Le critère de rupture fragile de chaque aiguille porte sur la contrainte dans l'axe de l'aiguille. Dès ce critère atteint, l'aiguille est « désactivée » : elle ne reprend plus les efforts dans le VER. L'état d'endommagement est caractérisé par l'ensemble des aiguilles subsistantes. Pour des raisons techniques, on ne considère que des chargements correspondant à des essais de traction ou compression simples. On commence par déterminer la rigidité effective d'un polycristal poreux constitué d'aiguilles dont la distribution d'orientation présente la symétrie de révolution. Ceci permet d'obtenir le comportement du matériau pour un état d'endommagement donné. Ensuite, on détermine pour chaque valeur de la déformation macroscopique l'état d'endommagement. Enfin, on en déduit la contrainte macroscopique résultante. En traction simple, le modèle donne une rupture fragile stable : il est possible de contrôler par la déformation macroscopique la chute de la contrainte une fois la limite élastique dépassée. En compression simple, la rupture est fragile et instable : dès la limite élastique atteinte, la contrainte macroscopique chute jusqu'à une valeur extrêmement faible.

Sommaire

6.1 Distribution isotrope transverse de cristaux : rigidité estimée **68**
6.1.1 Schéma auto-cohérent utilisé 69
6.1.2 Résultats 70
6.2 Modélisation d'un essai de traction simple **72**
6.2.1 Définition du chargement imposé 72
6.2.2 Repérage du cristal critique 73
6.2.3 Détermination du comportement au delà de la limite élastique 74
6.3 Modélisation d'un essai de compression simple **76**
6.3.1 Définition du chargement imposé 76
6.3.2 Repérage du cristal critique 76
6.3.3 Détermination du comportement au delà de la limite élastique 77
6.4 Remarques de conclusion **79**

Après avoir traité l'élasticité (chapitre 4) et le critère de limite d'élasticité (chapitre 5), on examine dans ce chapitre ce qui se produit lorsqu'on continue à charger le matériau au delà de sa limite élastique, toujours dans le cadre d'un modèle micro-macro. Le chargement est contrôlé en déformation. On suppose toujours valable le critère local propre à chaque cristal. Une fois qu'un cristal donné a atteint son critère, on le considère comme rompu ou désolidarisé de ses voisins. Peu importe la dénomination, toujours est-il que le cristal en question ne participe plus à la reprise des efforts dans le VER. De ce fait, les contraintes vont se redistribuer dans les cristaux subsistants, et de nouveaux cristaux vont atteindre leur critère :

- Soit immédiatement, sans augmentation du chargement : on parlera de « progression instable » de l'endommagement.
- Soit après une certaine augmentation du chargement : on parlera de « progression stable ».

On construit ainsi un modèle d'endommagement, les micro-défauts n'étant pas des micro-fissures mais étant caractérisés par la décohésion ou la rupture des cristaux.

Au fur et à mesure de la désactivation des cristaux, la distribution des orientations des cristaux subsistants varie. En particulier, cette distribution n'est plus isotrope dès la limite élastique dépassée. Par conséquent, le comportement macroscopique n'est plus isotrope. Ceci signifie que la mise en œuvre du schéma auto-cohérent pour estimer la rigidité effective (voir figure 2.6) requiert la résolution du problème auxiliaire présentant un *prolate* isotrope dans un milieu d'anisotropie a priori quelconque. Il est donc nécessaire de déterminer le tenseur de Hill d'un *prolate* dans un milieu anisotrope quelconque. Plutôt que de se lancer dans cette voie, qui pose des difficultés d'ordre principalement technique, on propose de se restreindre à un cas particulier défini par :

- des particules de forme « aiguille » plutôt que « *prolate* » (rapport d'aspect $r_g \to \infty$) ;
- un mode de chargement en traction ou compression simple, en particulier respectant la symétrie de révolution, ce qui conduit à une distribution de cristaux respectant elle même la symétrie de révolution et par conséquent à un milieu effectif isotrope transverse.

Ce cas, bien que particulier, offre des perspectives intéressantes dans la mesure où les essais les plus courants sont uniaxiaux. Ainsi on commence par mettre en place un schéma auto-cohérent avec des particules solides en forme d'aiguilles et dont les axes présentent une distribution symétrique de révolution (section 6.1).

Dans ce chapitre, on ne considère que le cas du critère local limité en traction $\sigma_N < \sigma_{cr}$. Lors d'un essai de traction simple, on a vu qu'initialement, alors que la microstructure est encore saine, les cristaux critiques sont dans l'axe de traction. Dès que la limite élastique macroscopique est atteinte, ces cristaux critiques sont désactivés, c'est-à-dire soit rompus, soit désolidarisés de leurs voisins. Ces cristaux sont considérés ne plus reprendre aucun effort interne. Pour modéliser cela, la première idée est évidemment de réduire en conséquence le domaine des orientations des cristaux sains. On verra en section 6.1 que cela ne suffit pas, et qu'il faudra en outre transférer la fraction volumique des cristaux désactivés à la porosité. On détermine en section 6.2 la succession des cristaux désactivés, en traction simple. Puis on suit en fonction de la déformation macroscopique l'ensemble des cristaux subsistants, ce qui revient à déterminer la loi d'évolution de l'état d'endommagement. Cela permet de représenter l'évolution de la contrainte macroscopique en fonction de la déformation appliquée. Enfin, on conduit le même travail de modélisation sur un essai de compression simple en section 6.3.

Comme dans le chapitre précédent, nous nous permettons d'appeler « échelle macroscopique » l'échelle du plâtre pris sans bulles.

6.1 Distribution isotrope transverse de cristaux : rigidité estimée

Dans les chapitres 4 et 5, on a considéré une distribution isotrope d'orientation des cristaux. Ceci a conduit à une rigidité effective isotrope. Ici, on envisage une distribution d'orientation

des cristaux symétrique de révolution (autour de $\underline{e}_3$), qui conduit à une rigidité effective isotrope transverse. L'orientation des cristaux n'est donc caractérisée que par l'angle θ des coordonnées sphériques (voir figure 2.8). On considère ici une distribution uniforme dans le cône $\theta \in [\theta_0, \theta_1]$ avec $0° \leq \theta_0 < \theta_1 \leq 90°$. Les axes des cristaux présents sont représentés en grisé sur la figure 6.1. Cette distribution particulière sera réutilisée plus tard pour suivre l'état d'endommagement de la microstructure en traction ou compression simple. Précisons d'emblée que nous allons désigner, par abus de langage, une famille de cristaux d'orientation donnée, par « orientation » ou simplement « cristal ».

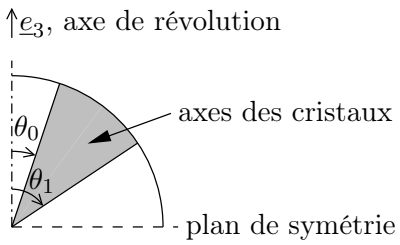


FIG. 6.1 – Distribution isotrope transverse de cristaux envisagée : les cristaux sont représentés en grisé

On sait déjà qu'en traction simple, les premiers cristaux à atteindre leur critère sont ceux qui se trouvent dans l'axe de traction : $\theta = 0$ (voir section 5.3.2). Si la déformation macroscopique continue à augmenter au delà de la limite élastique, ces cristaux $\theta = 0$ ne participent plus à la reprise des efforts. On pressent intuitivement que les prochains cristaux critiques seront ceux situés « juste après $\theta = 0$ ». On montrera en section 6.2.2 que les cristaux subsistants sont caractérisés par $\theta_0 \leq \theta \leq 90°$ et que le cristal critique se trouve en $\theta = \theta_0$. Ainsi, en traction simple, la variable d'endommagement identifiée est θ_0. Elle caractérise complètement l'état d'endommagement du matériau, dans le cas précis de la traction simple.

En compression simple, les premiers cristaux à atteindre leur critère sont perpendiculaires à l'axe de compression : $\theta = 90°$ (voir section 5.3.2). Si la déformation de compression macroscopique poursuit son augmentation (en valeur absolue) au delà de la limite élastique, les cristaux $\theta = 90°$ se rompent. On montrera en section 6.3.2 que les cristaux subsistants sont caractérisés par $0 \leq \theta \leq \theta_1$ et que le cristal critique se trouve en $\theta = \theta_1$. En compression simple, la variable d'endommagement identifiée est θ_1.

Ainsi, le choix d'une distribution uniforme de cristaux dans un cône $\theta \in [\theta_0, \theta_1]$ permet de traiter indifféremment les deux types de chargement. On considère ici le cas limite d'aiguilles : le rapport d'aspect $r_g \to \infty$.

6.1.1 Schéma auto-cohérent utilisé

On considère un polycristal poreux dont la phase solide est constituée d'un enchevêtrement d'aiguilles. Contrairement au schéma auto-cohérent décrit en section 2.2.1, l'orientation des cristaux n'est plus uniformément répartie de façon isotrope mais suit une distribution invariante par rotation autour de l'axe $\underline{e}_3$. Ceci conduit à une rigidité effective isotrope transverse d'axe $\underline{e}_3$. Ce schéma auto-cohérent numérique et itératif a été présenté dans Fritsch *et al.* [41]. On se place dans le cas particulier d'une distribution d'orientations uniforme dans le cône $\theta \in [\theta_0, \theta_1]$, $\phi \in [0, 2\pi[$.

6.1.2 Résultats

Revenons quelques instants au cas d'une distribution isotrope (ici définie par $\theta_0 = 0°$ et $\theta_1 = 90°$). Pour une porosité $f_p = 0.7$, on obtient un module de Young effectif $E_{pp} = 1.9$ GPa et un coefficient de Poisson effectif $\nu_{pp} = 0.23$. La rigidité effective est évidemment isotrope, mais elle peut être interprétée comme un tenseur isotrope transverse : voir les cinq composantes données dans le tableau 6.1. Cette référence pourra être comparée aux limites obtenues dans le cas d'une distribution conique de cristaux, lorsque cette dernière tend vers une distribution isotrope.

$ijkl$	1111	1122	1133	3333	2323
C^{pp}_{ijkl} (GPa)	2.2	0.67	0.67	2.2	0.76

TAB. 6.1 – Composantes du tenseur de rigidité effectif pour une distribution isotrope d'orientations ($E_g = 40$ GPa, $\nu_g = 0.34$, $f_p = 0.7$)

Distribution de cristaux selon $\theta_0 \leq \theta \leq 90°$

On considère d'abord le cas $\theta_1 = 90°$, ce qui correspond à une distribution uniforme dans le cône $\theta \in [\theta_0, 90°]$. La distribution est donc caractérisée par le seul paramètre morphologique θ_0. Ces résultats seront réutilisés dans le cas de la traction simple (section 6.2), où θ_0 sera vu comme une variable d'endommagement. On recherche le tenseur de rigidité effectif $\mathbb{C}_{pp}$ pour un état d'endommagement donné. On détermine également le module de Young apparent E^{app}_{pp} dans la direction $\underline{e}_3$, c'est-à-dire le rapport Σ_{33}/E_{33} lorsque $\mathbf{\Sigma} = \Sigma_{33}\underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3$:

$$E^{app}_{pp} = C^{pp}_{3333} - \frac{2{C^{pp}_{1133}}^2}{C^{pp}_{1111} + C^{pp}_{1122}} \tag{6.1}$$

Dans un premier temps, supposons la porosité fixe, en particulier indépendante de θ_0. On la note f^0_p : $f_p = f^0_p = 0.7$. On représente alors sur le graphe de gauche de la figure 6.2 les cinq composantes définissant le tenseur isotrope transverse de rigidité effective et le module de Young apparent dans la direction $\underline{e}_3$ (donné par (6.1)). La légende, située en bas de la figure, est commune aux deux graphes. Comme attendu, on démarre à $\theta_0 = 0°$ avec la rigidité isotrope déjà calculée par le modèle du chapitre 4 (valeurs numériques données dans la table 6.1). Lorsque $\theta_0 = 90°$, seules les composantes C^{pp}_{1111} et C^{pp}_{1122} prennent une valeur numérique non négligeable. Dans ce cas, tous les cristaux ont leur axe dans le plan $(\underline{e}_1, \underline{e}_2)$. Cette orientation préférentielle et la fraction solide $f_s = 0.3$, suffisamment élevée, conduisent à une rigidité auto-cohérente dont les composantes 1111 et 1122 sont non nulles. En outre, on remarque que certaines composantes n'apparaissent pas comme des fonctions monotones décroissantes de θ_0 : c'est le cas, à nouveau, de C^{pp}_{1111} et C^{pp}_{1122}. Il faut dire que la fraction volumique de cristaux dont l'orientation est $\theta \in [\theta', \theta' + \mathrm{d}\theta']$, avec $\theta' > \theta_0$, *dépend* de θ_0. En particulier, plus θ_0 est grand, plus la fraction volumique de cristaux d'orientation proche de 90° est importante. Dans ces conditions, il n'est guère étonnant d'obtenir des composantes non monotones décroissantes de θ_0. En particulier, on remarque que C^{pp}_{1111} est plus élevée en $\theta_0 = 90°$ qu'en $\theta_0 = 0°$: du point de vue de l'optimisation de C^{pp}_{1111}, les cristaux sont mieux orientés dans le premier cas (axes perpendiculaires à $\underline{e}_3$) que dans le second (isotropie).

La situation qui vient d'être présentée n'est pas représentative d'un VER qui s'endommage par ruptures successives des cristaux. En effet, il faudrait pour cela que la fraction volumique de cristaux d'orientation $\theta \in [\theta', \theta' + \mathrm{d}\theta']$ avec $\theta' > \theta_0$ soit indépendante de θ_0. Un moyen très simple de réaliser cela est d'augmenter la porosité initiale f^0_p de la fraction volumique de cristaux « absents » (on dira bientôt, en section 6.2, « qui ont été désactivés » et donc qui ne

reprennent plus les efforts), c'est-à-dire caractérisés par $\theta \in [0, \theta_0]$. Ainsi, on écrit la porosité $f_p = f_p^0 + (1 - f_p^0)(1 - \cos\theta_0)$. On obtient alors le graphe de droite de la figure 6.2. À présent, toutes les composantes sont des fonctions décroissantes de θ_0, et elles tendent vers 0 lorsque $\theta_0 \to 90°$ (dans ce cas, la porosité $f_p \to 1$). Dans toute la suite, on ne fait référence qu'à ce second modèle (porosité augmentée de la fraction volumique de cristaux absents). Ces résultats seront réutilisés en section 6.2.

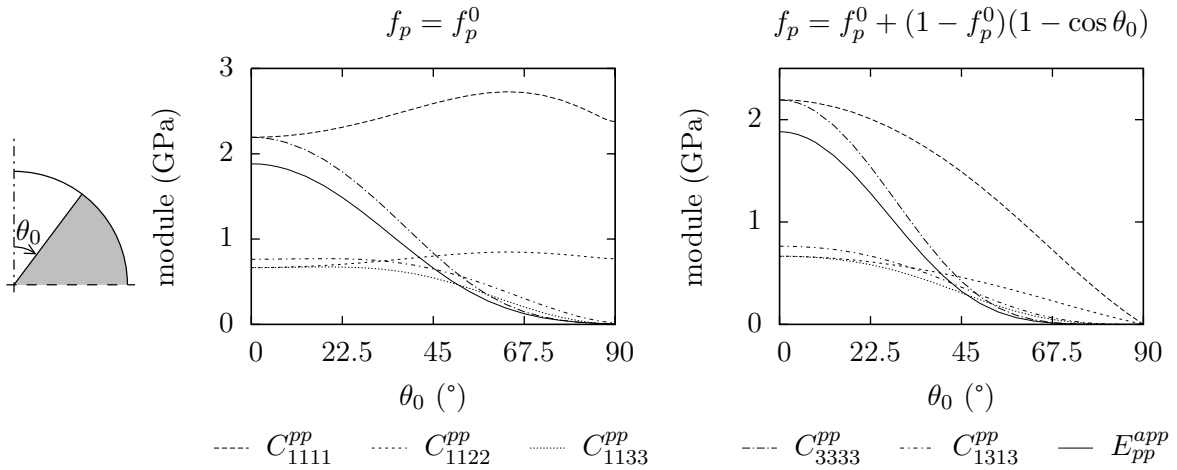


FIG. 6.2 – Composantes du tenseur de rigidité homogénéisé et module de Young apparent selon $\underline{e}_3$ en fonction de θ_0 ($E_g = 40$ GPa, $\nu_g = 0.34$, $f_p^0 = 0.7$)

Distribution de cristaux selon $0 \leq \theta \leq \theta_1$

On considère maintenant le cas $\theta_0 = 0°$, ce qui correspond à une distribution uniforme d'orientation dans le cône $\theta \in [0, \theta_1]$. Ces résultats seront réutilisés dans le cas de la compression simple (section 6.3), où θ_1 sera vue comme une variable d'endommagement. On envisage à nouveau deux situations :

- la porosité est indépendante de θ_1 : $f_p = f_p^0$ (graphe de gauche de la figure 6.3) ;
- la porosité est augmentée de la fraction volumique de cristaux absents, c'est-à-dire dont l'axe est dans le cône $\theta \in [\theta_1, 90°]$: $f_p = f_p^0 + (1 - f_p^0)\cos\theta_1$ (graphe de droite de la figure 6.3).

Toutes les composantes de la rigidité auto-cohérente sont monotones croissantes de θ_1 dans le second cas, alors qu'elles ne le sont pas dans le premier cas. Dans toute la suite, on ne fait référence qu'à la seconde situation. Ces résultats seront réutilisés en section 6.3.

Comparaison des modules de Young apparents dans les deux situations

Il est difficile de confronter les « performances mécaniques » des deux morphologies étudiées en observant les seuls graphes de droite des figures 6.2 et 6.3. On se propose de comparer le module de Young apparent dans la direction $\underline{e}_3$. Afin de réaliser une comparaison objective, il faut se placer à fraction solide identique (plus précisément, à fraction volumique de cristaux subsistants identique). Dans le premier cas, cristaux orientés entre θ_0 et 90°, la fraction solide s'écrit :

$$f_s = (1 - f_p^0)\cos\theta_0 \tag{6.2}$$

Dans le second cas, cristaux entre 0 et θ_1, la fraction solide s'écrit :

$$f_s = (1 - f_p^0)(1 - \cos\theta_1) \tag{6.3}$$

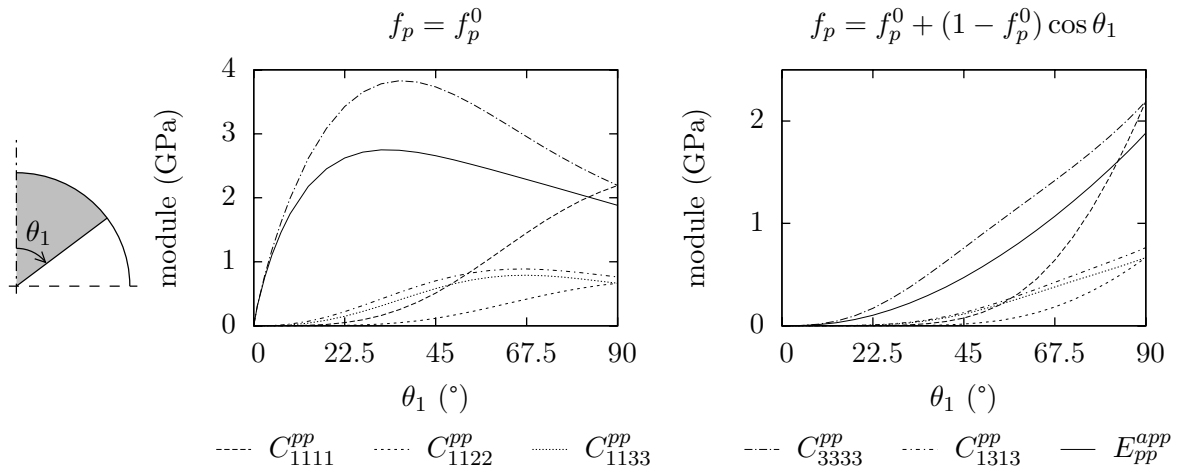


FIG. 6.3 – Composantes du tenseur de rigidité homogénéisé et module de Young apparent selon $\underline{e}_3$ en fonction de θ_1 ($E_g = 40$ GPa, $\nu_g = 0.34$, $f_p^0 = 0.7$)

À partir des résultats tracés en partie droite des figures 6.2 et 6.3, on représente en figure 6.4 l'évolution du module de Young apparent en fonction de la fraction solide. Pour une fraction solide nulle, le module de Young est évidemment nul. Lorsque $f_s = 0.3$, on retrouve dans les deux cas une distribution isotrope de cristaux et le module de Young vaut 1.9 GPa. Conformément à l'intuition, c'est lorsque les cristaux sont placés autour de l'axe de sollicitation (c'est-à-dire $\underline{e}_3$) que le module de Young est le plus élevé (courbe tracée en trait plein sur la figure 6.4).

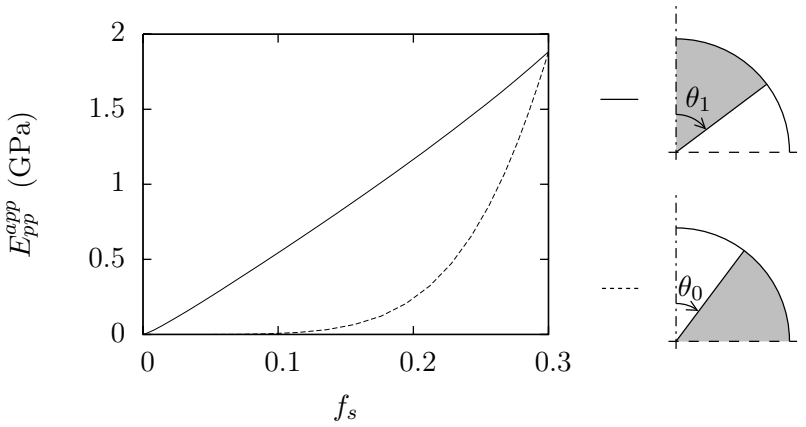


FIG. 6.4 – Module de Young apparent en fonction de la fraction solide pour les deux morphologies envisagées ($E_g = 40$ GPa, $\nu_g = 0.34$, $f_p^0 = 0.7$)

6.2 Modélisation d'un essai de traction simple

6.2.1 Définition du chargement imposé

On cherche à modéliser un essai de traction simple contrôlé en déformation. On impose donc une déformation homogène au contour du VER, de la forme :

$$\boldsymbol{E} = E_{33}\left[\underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 - \rho(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2)\right] \tag{6.4}$$

où ρ est un paramètre qu'il faut ajuster de sorte que le tenseur de contraintes macroscopique $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}_{pp} : \boldsymbol{E}$ soit effectivement uniaxial :

$$\rho = \frac{C^{pp}_{1133}}{C^{pp}_{1111} + C^{pp}_{1122}} \tag{6.5}$$

On modélise ainsi un essai de traction simple contrôlé en déformation par la variable E_{33}, à laquelle on impose une évolution croissante à partir de 0. Il faut néanmoins prendre garde au fait que le paramètre ρ défini par (6.5) n'est pas constant au cours de l'essai, puisqu'il dépend de l'état d'endommagement de la microstructure. Ainsi, ρ s'apparente davantage à un paramètre subi, si bien que l'on ne peut en fait parler d'« essai piloté en déformation par E_{33} » que par abus de langage.

6.2.2 Repérage du cristal critique

On rappelle que l'on considère le cas du critère local en traction : $\sigma_N < \sigma_{cr}$. Initialement, lorsque la distribution de cristaux est isotrope, l'orientation qui maximise σ_N est $\theta_0 = 0$, ce qui correspond à l'axe de traction simple (section 5.3.2). La première orientation critique est donc $\theta_0 = 0$. Les cristaux présentant cette orientation vont ainsi être « désactivés » dès lors que la limite élastique macroscopique va être atteinte. Puis une autre orientation va devenir critique et les cristaux correspondants vont être désactivés, et ainsi de suite... La question est ici de déterminer la succession d'orientations critiques, c'est-à-dire de cristaux désactivés.

L'intuition conduit à supposer que les orientations critiques successives sont caractérisées par un angle θ_0 croissant à partir de 0. Les cristaux subsistants (non désactivés) occupent alors le cône $\theta_0 \leq \theta \leq 90°$ (figure 6.5). La variable θ_0 est donc identifiée comme une variable d'endommagement.

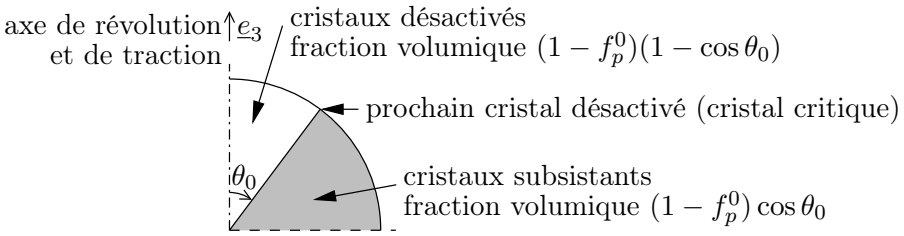


FIG. 6.5 – Cristaux désactivés et subsistants, et prochain cristal désactivé, dans le cas de la traction simple

On vérifie maintenant cette hypothèse. Il s'agit de déterminer la contrainte σ_N dans tous les cristaux subsistants. Cette dernière dépend à la fois de l'état de la microstructure (caractérisé par la variable d'endommagement θ_0), et de l'orientation considérée (définie par le paramètre θ). On la note $\sigma_N(\theta_0, \theta)$ avec $\theta \in [\theta_0; 90°]$. Le comportement des cristaux avant rupture étant élastique linéaire, σ_N est proportionnel à la déformation macroscopique E_{33}. On normalise σ_N/E_{33} par le module de Young E_s des cristaux, pour former :

$$\sigma_N^*(\theta_0, \theta) = \frac{\sigma_N(\theta_0, \theta)}{E_s E_{33}} \tag{6.6}$$

En d'autres termes, $E_s\sigma_N^*(\theta_0, \theta)$ représente la contrainte mobilisée dans le cristal d'orientation θ lorsque la variable d'endommagement prend la valeur θ_0, et pour une déformation macroscopique axiale unité. La grandeur σ_N^* est sans dimension et indépendante de la valeur du chargement E_{33}. Néanmoins, σ_N^* dépend de θ_0, qui est tributaire du niveau de chargement. Les calculs sont

réalisés de façon similaire à la section 5.3, en considérant cette fois un milieu effectif isotrope transverse et non isotrope. Sur la figure 6.6, on représente en trait plein l'évolution de $\sigma_N^*(\theta_0, \theta)$ en fonction de θ pour quelques valeurs de θ_0. Pour chaque θ_0, l'angle θ qui maximise $\sigma_N^*(\theta_0, \theta)$ est $\theta = \theta_0$. L'orientation critique est bien $\theta = \theta_0$. On représente aussi sur la figure 6.6 en pointillés le lieu des maxima, c'est-à-dire la fonction $\theta_0 \to \sigma_N^*(\theta_0, \theta_0)$, qui est décroissante.

On remarque que sur les quatre courbes tracées en trait plein, la fonction $\theta \to \sigma_N^*(\theta_0, \theta)$ passe par 0 puis atteint son minimum en $\theta = 90°$, minimum qui est négatif. Les cristaux perpendiculaires à l'axe de traction subissent donc une contrainte de compression le long de leur axe. Ceci peut s'interpréter en invoquant l'effet Poisson à l'échelle de l'éprouvette, qui conduit à une réduction (puisque $\nu_{pp} > 0$) de la section de l'éprouvette à mesure que E_{33} augmente. Cette réduction de section tend à mettre en compression les cristaux perpendiculaires à $\underline{e}_3$.

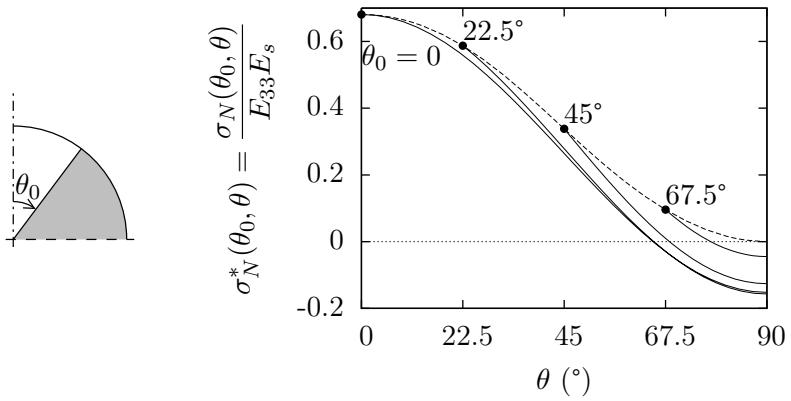


FIG. 6.6 – Contrainte σ_N dans l'axe du cristal d'orientation θ pour quelques valeurs de θ_0, et en pointillés la contrainte σ_N dans le cristal d'orientation θ_0 pour tout θ_0 ($\nu_g = 0.34$, $f_p^0 = 0.7$), en traction simple

6.2.3 Détermination du comportement au delà de la limite élastique

Jusqu'à maintenant, on ne s'est pas préoccupé de la valeur prise par E_{33}. On a déterminé l'orientation critique en maximisant la fonction $\theta \to \sigma_N^*(\theta_0, \theta)$. On a établi l'évolution de cette orientation critique θ_0 en considérant le fait qu'un cristal devenu critique est rompu. Il reste à déterminer la loi d'évolution de la variable d'endommagement, c'est-à-dire relier θ_0 à la déformation macroscopique. E_{33} subit une évolution monotone croissante dans le temps, supposée donnée. Supposons que la microstructure ait atteint un état d'endommagement caractérisé par θ_0. Le cristal critique, qui maximise σ_N, est $\theta = \theta_0$. Ce cristal est désactivé lorsque sa contrainte σ_N atteint σ_{cr}, c'est-à-dire $\sigma_N(\theta_0, \theta_0) = \sigma_{cr}$. Ceci assure le lien entre l'orientation courante θ_0 du cristal désactivé et la déformation macroscopique courante E_{33} :

$$E_s E_{33} \sigma_N^*(\theta_0, \theta_0) = \sigma_{cr} \tag{6.7}$$

La nature de l'essai que nous sommes en train de modéliser impose E_{33} croissant au cours du temps. Ainsi, d'après (6.7), $\sigma_N^*(\theta_0, \theta_0)$ est assujettie à décroître dans le temps. Or nous avons montré dans la section précédente que, par le mécanisme de désactivation successive des cristaux, la fonction $\theta_0 \to \sigma_N^*(\theta_0, \theta_0)$ est nécessairement décroissante, ce qui signifie que θ_0 croît dans le temps. Ainsi, à mesure que E_{33} croît, θ_0 croît lui aussi, de façon *stable*. On représente l'orientation θ_0 des cristaux désactivés en fonction de E_{33} sur la figure 6.7 pour quelques valeurs de la porosité intercristalline f_p^0, en reprenant le paramètre $\sigma_{cr} = 15$ MPa identifié en section 5.3.4. Tant que

E_{33} n'a pas dépassé le seuil de limite élastique macroscopique, tous les cristaux subsistent et $\theta_0 = 0$. Dès ce seuil dépassé, θ_0 augmente avec E_{33} de façon *stable* : θ_0 n'augmente que si E_{33} augmente lui même.

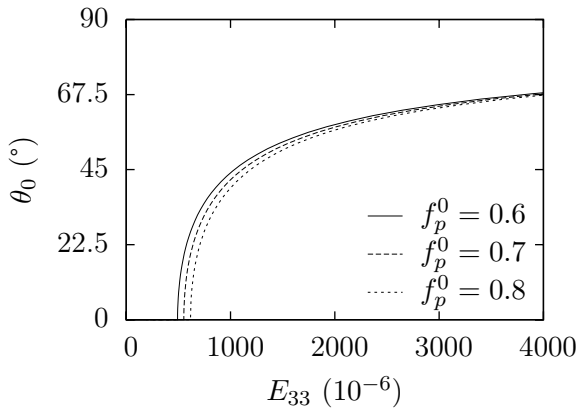


FIG. 6.7 – Loi d'évolution de la variable d'endommagement θ_0 en fonction de la déformation macroscopique ($E_g = 40$ GPa, $\nu_g = 0.34$, $\sigma_{cr} = 15$ MPa)

La loi d'évolution de la variable d'endommagement θ_0 étant connue, on peut déterminer la rigidité effective $\mathbb{C}_{pp}$ puis le module de Young apparent E_{pp}^{app} (voir (6.1)) correspondants. On en déduit la contrainte de traction macroscopique $\Sigma_{33} = E_{pp}^{app} E_{33}$. Le sens de variation de cette dernière est a priori indéterminé, puisque E_{33} augmente alors que E_{pp}^{app} diminue (dans la mesure où θ_0 augmente, voir figure 6.2). Par ailleurs, la déformation macroscopique $E_{11} = -\rho E_{33}$ peut être déterminée à l'aide de l'expression (6.5) de ρ. La figure 6.8 représente l'évolution de E_{33}, Σ_{33} et E_{11} au cours d'une expérience de traction simple modélisée pour quelques valeurs de la porosité f_p^0. On observe d'abord une phase élastique. Dès la limite élastique atteinte et le premier cristal désactivé, la contrainte Σ_{33} décroît. À l'échelle macroscopique, on obtient donc une rupture fragile stable. En particulier, la résistance (valeur maximale atteinte par Σ_{33}) est égale à la limite élastique. Ceci autorise la comparaison, effectuée en section 5.3.4, de la limite élastique modélisée avec la résistance expérimentale.

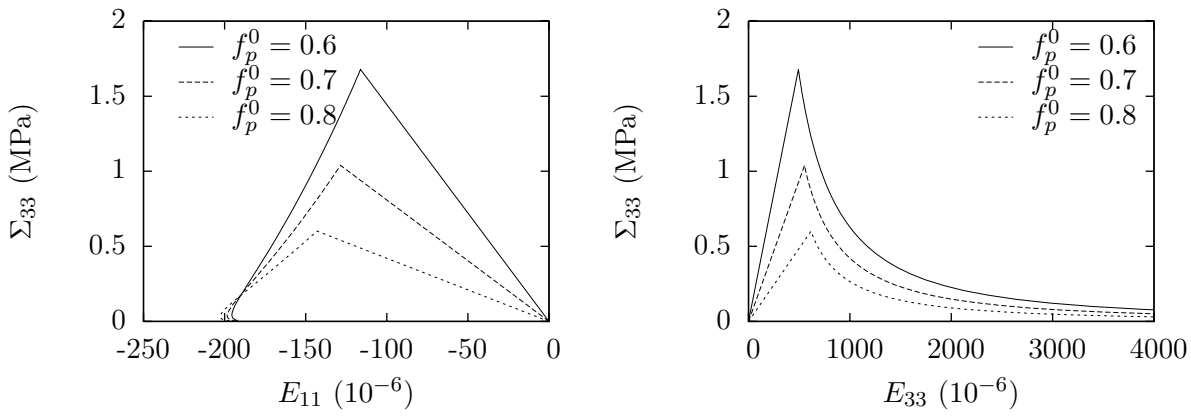


FIG. 6.8 – Comportement obtenu en traction simple pour quelques valeurs de la porosité ($E_g = 40$ GPa, $\nu_g = 0.34$, $\sigma_{cr} = 15$ MPa)

Les essais en traction simple avec contrôle en déformation sont très délicats à réaliser sur le

plâtre pris. Ainsi, nous n'avons trouvé dans la littérature que des essais (avec parfois la proposition d'un modèle purement macroscopique de comportement) sur plâtre pris fibré, en traction simple [99, 2, 79] ou en flexion [16, 37]. Il faudrait donc, pour valider l'approche développée ici, envisager soit la modélisation d'un essai de flexion, soit l'incorporation de fibres par une étape d'homogénéisation supplémentaire.

6.3 Modélisation d'un essai de compression simple

6.3.1 Définition du chargement imposé

On se place à présent dans le cas d'un essai de compression simple, contrôlé en déformation. On impose donc une déformation homogène au contour du VER, de la forme :

$$\boldsymbol{E} = -E_{33}^c \left[\underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 - \rho(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2)\right] \tag{6.8}$$

où on a noté $E_{33} = -E_{33}^c$ avec $E_{33}^c > 0$. Le paramètre ρ est identique à celui introduit en section 6.2.1, son expression reste donnée par (6.5). On modélise ainsi un essai de compression simple « piloté » en déformation par la variable E_{33}^c, à laquelle on impose une évolution croissante à partir de 0. Il faut ici prendre les mêmes précautions qu'en section 6.2.1 concernant le « pilotage en déformation ».

6.3.2 Repérage du cristal critique

On a vu qu'en compression simple, le premier cristal critique est orienté selon $\theta = 90°$. On fait donc à présent l'hypothèse que les cristaux subsistants se trouvent dans un cône $\theta \in [0; \theta_1]$, θ_1 caractérisant le prochain cristal critique (figure 6.9). La variable θ_1 est identifiée comme une variable d'endommagement.

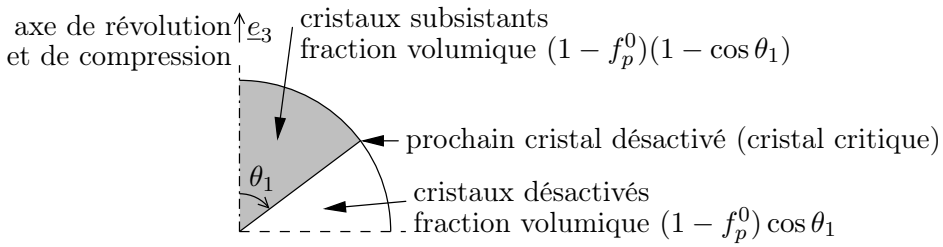


FIG. 6.9 – Cristaux désactivés et subsistants, et prochain cristal désactivé, dans le cas de la compression simple

On note $\sigma_N(\theta_1, \theta)$ la contrainte de traction dans l'axe du cristal d'orientation θ lorsque les cristaux subsistants se trouvent dans le cône $\theta \in [0; \theta_1]$. On normalise par E_s et on divise par E_{33}^c pour obtenir :

$$\sigma_N^*(\theta_1, \theta) = \frac{\sigma_N(\theta_1, \theta)}{E_s E_{33}^c} \tag{6.9}$$

soit une fonction sans dimension et indépendante de E_{33}^c (tant que, pour le moment, θ_1 est indépendant du niveau de chargement). On représente en trait plein sur la figure 6.10 la fonction $\theta \to \sigma_N^*(\theta_1, \theta)$, pour quelques valeurs de θ_1. Conformément à l'intuition, cette contrainte est une contrainte de compression ($\sigma_N < 0$) pour les cristaux dans l'axe du chargement macroscopique ($\theta = 0$). La contrainte σ_N augmente avec θ pour devenir positive (traction) et atteindre son maximum en $\theta = \theta_1$. Contrairement au cas de la traction simple, ici la contrainte maximale $\theta_1 \to \sigma_N^*(\theta_1, \theta_1)$ représentée en pointillés ne présente pas une évolution monotone.

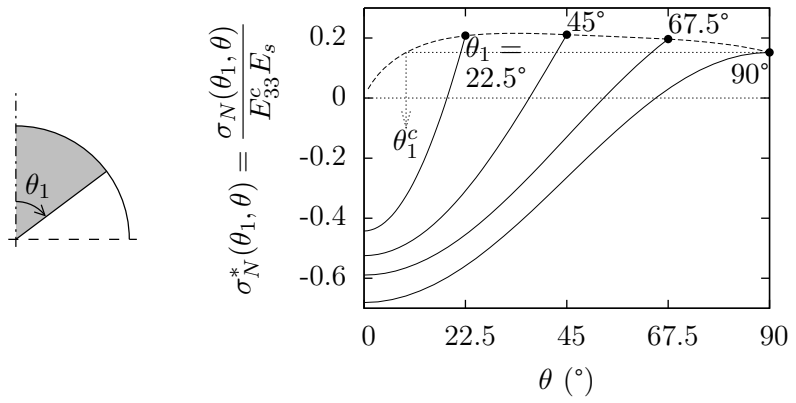


FIG. 6.10 – Contrainte de traction dans l'axe du cristal d'orientation θ pour quelques valeurs de θ_1, et en pointillés la contrainte de traction dans l'axe du cristal d'orientation θ_1 pour tout θ_1 ($\nu_g = 0.34$, $f_p^0 = 0.7$), en compression simple

6.3.3 Détermination du comportement au delà de la limite élastique

On impose une évolution croissante de E_{33}^c. Initialement, $E_{33}^c = 0$ et tous les cristaux sont présents ($\theta_1 = 90°$). Durant une première phase d'évolution, élastique, la distribution de cristaux reste isotrope. Cette phase prend fin lorsque la déformation macroscopique E_{33}^c atteint la limite élastique $E_{33}^{c,lim}$ définie par :

$$E_s E_{33}^{c,lim} \sigma_N^*(90°, 90°) = \sigma_{cr} \tag{6.10}$$

À ce moment là, les cristaux $\theta_1 = 90°$ sont désactivés. Supposons donc que les cristaux critiques suivants soient ceux dont l'orientation est juste en dessous de 90°. Comme $\theta_1 \to \sigma_N^*(\theta_1, \theta_1)$ commence par croître lorsque θ_1 decroît, la contrainte $\sigma_N(\theta_1, \theta_1) = E_s E_{33}^{c,lim} \sigma_N^*(\theta_1, \theta_1)$ croît également. En particulier, elle *dépasse* σ_{cr} (qui a déjà été atteinte pour $\theta_1 = 90°$). Ce scénario n'est pas possible. Ceci signifie qu'avant même que E_{33}^c n'ait eu le temps d'augmenter, tout un ensemble de cristaux sont désactivés, de façon instantanée. Cette rupture « en chaîne » des cristaux s'arrête lorsque θ_1 atteint un angle critique θ_1^c défini par :

$$\sigma_N^*(\theta_1^c, \theta_1^c) = \sigma_N^*(90°, 90°) \tag{6.11}$$

Cet angle critique est représenté graphiquement sur la figure 6.10, par un tracé en pointillés fins. Durant cette deuxième phase, de rupture instable des cristaux successifs, la déformation macroscopique reste $E_{33}^c = E_{33}^{c,lim}$ et le paramètre d'endommagement θ_1 passe de 90° à θ_1^c.

Ensuite, on « reprend le contrôle » des cristaux désactivés. Pendant cette troisième et dernière phase, l'orientation des cristaux désactivés θ_1 décroît à mesure que E_{33}^c augmente, les deux grandeurs étant reliées par :

$$E_s E_{33}^c \sigma_N^*(\theta_1, \theta_1) = \sigma_{cr} \quad \text{lorsque} \quad \theta_1 < \theta_1^c \tag{6.12}$$

Ces trois phases sont représentées sur la figure 6.11, qui schématise l'évolution de l'orientation des cristaux désactivés θ_1 en fonction de la déformation de compression macroscopique E_{33}^c. On représente la même évolution, mais cette fois calculée, sur la figure 6.12 pour différentes porosités f_p^0.

Revenons un instant sur la stabilité de l'évolution de θ_1. Le chargement étant « piloté » en déformation E_{33}^c par la condition $\dot{E}_{33}^c > 0$, la stabilité passe nécessairement par le caractère croissant de la fonction $\theta_1 \to \sigma_N^*(\theta_1, \theta_1)$. En effet, E_{33}^c et $\sigma_N^*(\theta_1, \theta_1)$ étant reliés par (6.12),

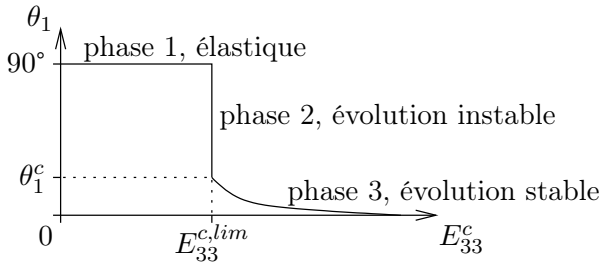


FIG. 6.11 – Schématisation de la loi d'évolution de la variable d'endommagement θ_1, en fonction de la déformation de compression macroscopique

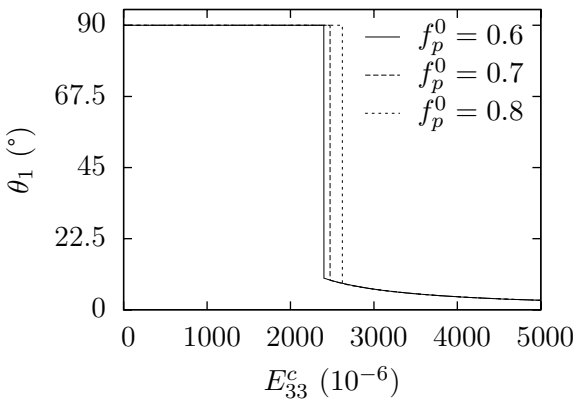


FIG. 6.12 – Loi d'évolution de la variable d'endommagement θ_1, en fonction de la déformation de compression E_{33}^c ($E_g = 40$ GPa, $\nu_g = 0.34$, $\sigma_{cr} = 15$ MPa)

$\sigma_N^*(\theta_1, \theta_1)$ est assujettie à diminuer. Comme on part de $\theta_1 = 90°$, ceci ne peut se produire que si la fonction $\theta_1 \to \sigma_N^*(\theta_1, \theta_1)$ est croissante. La stabilité n'est donc effective que lorsque $\theta_1 < \theta_1^c$, comme nous venons de le voir.

La variable d'endommagement θ_1 étant connue pour chaque valeur de E_{33}^c, on peut déterminer la rigidité effective $\mathbb{C}_{pp}$ puis la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}_{pp} : \boldsymbol{E}$. On représente alors sur la figure 6.13 la déformation E_{33}^c et la contrainte $\Sigma_{33}^c = -\Sigma_{33}$, tout au long de l'essai de compression simple modélisé. La phase d'évolution instable (phase 2 de la figure 6.11) se traduit ici par une chute brutale de la contrainte de compression macroscopique Σ_{33}^c de $\Sigma_{33}^{c,lim}$ à une valeur très faible. La phase stable ($\theta_1 < \theta_1^c$) qui suit, semble négligeable en pratique tant la contrainte macroscopique mobilisée est faible, du moins pour une porosité située entre 0.6 et 0.8 (voir figure 6.13). La limite élastique $\Sigma_{33}^{c,lim}$ coïncide avec la contrainte maximale atteinte au cours de l'expérience de compression simple ainsi modélisée. Ceci autorise la comparaison, effectuée en section 5.3.4, de la limite élastique modélisée avec la résistance expérimentale.

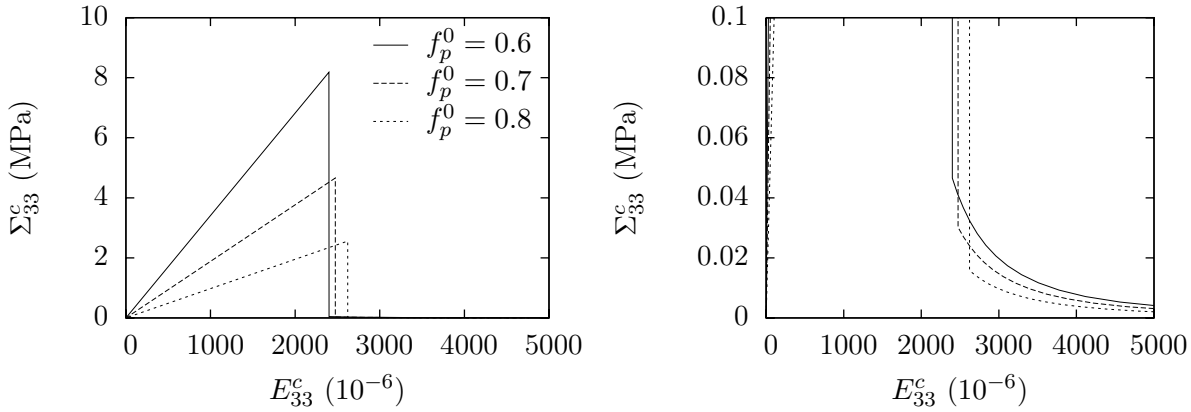


FIG. 6.13 – Comportement obtenu en compression simple pour quelques valeurs de la porosité ($E_g = 40$ GPa, $\nu_g = 0.34$, $\sigma_{cr} = 15$ MPa), avec un grossissement en partie droite sur une partie du graphe de gauche

6.4 Remarques de conclusion

On peut s'interroger sur le caractère réaliste des courbes obtenues au delà de la limite élastique sur les figures 6.8 en traction simple et 6.13 en compression simple. En effet, on s'attendrait intuitivement à observer :

- en traction, une rupture instable,
- en compression, une rupture stable avec une contrainte de compression qui peut éventuellement croître juste après la limite élastique.

Il faut garder à l'esprit le fait que le modèle développé ici suppose un endommagement diffus dans tout le VER, alors qu'en pratique, à l'échelle de l'éprouvette, la déformation peut être localisée.

De plus, le critère propre aux cristaux considéré ici n'est peut-être pas le plus adapté. Nous avons déjà souligné les limites d'un critère ne portant que sur la traction. Enrichir ce critère a permis d'obtenir de meilleurs résultats du point de vue de la limite élastique en compression (voir la section 5.4, et en particulier comparer les figures 5.8 et 5.14). Pour aller plus loin, on peut envisager d'imposer une limite basse à la contrainte dans l'axe du cristal, afin de rendre compte d'une éventuelle ruine par flambement des cristaux.

Par ailleurs, rappelons que l'on s'est orienté vers un critère local portant sur la contrainte moyenne dans les cristaux pour des raisons purement techniques. Pour rendre compte correcte-

ment du micromécanisme de rupture (déchaussement des cristaux), il faudrait être capable de gérer un critère d'interface entre les cristaux. Ce dernier sera traité dans le cadre de particules sphériques au chapitre 12.

Le comportement au delà de la limite élastique n'a été abordé que dans le cas d'aiguilles $r_g \to \infty$. En effet, la procédure de calcul du tenseur de Hill d'un cylindre incliné dans un milieu isotrope transverse [41] n'est disponible que dans ce cas limite. Pour rendre compte de façon plus réaliste de la morphologie du plâtre pris, il serait nécessaire de considérer des cristaux d'élancement fini (r_g fini), et donc de calculer le tenseur de Hill d'un *prolate* incliné dans un milieu isotrope transverse

Troisième partie

Silicates de calcium hydratés (matériaux à particules aplaties)

Chapitre 7

Introduction sur les C-S-H et pâtes de ciment

Sommaire

7.1 Réaction d'hydratation du ciment : quelques éléments **84**
7.1.1 Description de la réaction 84
7.1.2 Évolution des fractions volumiques 85
7.2 Morphologie des pâtes de ciment **88**
7.2.1 À l'échelle de la pâte 88
7.2.2 À l'échelle des C-S-H 89
7.3 Synthèse des données expérimentales utilisées **90**
7.3.1 Élasticité 90
7.3.2 Résistance 92
7.3.3 Prise 92
7.3.4 Fluage 93

Cette partie de notre travail est consacrée aux matériaux constitués de plaquettes. Les C-S-H, principaux hydrates du ciment Portland, semblent rentrer dans cette catégorie, du moins à petite échelle [83, 48, 87]. On aborde, par une approche micromécanique, l'élasticité, la résistance et le fluage (effets différés) de matériaux constitués de plaquettes. Pour valider ces modèles, il conviendrait de disposer de données expérimentales sur des C-S-H. Or les données sur les C-S-H purs sont extrêmement rares dans la littérature. Celles sur les pâtes de ciment sont en revanche beaucoup plus abondantes. Ainsi, les modèles proposés dans cette partie de notre travail ne s'arrêteront souvent pas à l'échelle des C-S-H, mais tendront vers la pâte de ciment en incorporant les grains anhydres résiduels et les pores capillaires.

Comme nous venons de l'évoquer, de nombreuses études expérimentales sont consacrées aux propriétés mécaniques des pâtes de ciment au jeune âge (dont [122, 52]). Celles-ci fournissent des mesures de l'élasticité et de la résistance mécanique de pâtes de ciment. Par ailleurs, la prise et le développement de la rigidité d'une pâte ont été simulées avec succès par éléments finis. Le modèle d'hydratation CEMHYD3D [9] a ainsi été utilisé pour construire des images numériques 3D approchant la microstructure réelle d'une pâte. Les caractéristiques élastiques effectives de ces images numériques ont ensuite été déterminées par éléments finis, en considérant ces images comme des structures [114]. Cependant, ces approches numériques tridimensionnelles requièrent des moyens de calcul assez lourds, et il semble difficile pour le moment de descendre en dessous d'une résolution de l'ordre du micromètre (cela signifie qu'à cette échelle, la phase C-S-H est traitée comme un milieu homogène), si bien que les techniques classiques d'homogénéisation des milieux aléatoires représentent une alternative intéressante. Cette partie de notre travail a pour

but d'évaluer si une approche micromécanique basée sur ces théories est capable de produire des prévisions réalistes des caractéristiques mécaniques d'une pâte de ciment en cours d'hydratation.

La première étape du processus de modélisation micromécanique est la conception d'un modèle morphologique. Ce dernier peut être validé par confrontation des estimations de caractéristiques mécaniques qui en sont issues avec des résultats expérimentaux. Il est courant de réaliser cette comparaison dans le cadre de l'élasticité, puisqu'il s'agit d'un des comportements les plus simples à modéliser par changement d'échelle. Nous nous proposons de réaliser un tel travail au chapitre 8. Les résultats obtenus vis-à-vis de l'élasticité d'une pâte de ciment en cours d'hydratation sont assez satisfaisants, ce qui nous pousse ensuite à envisager des phénomènes plus complexes comme la rupture (chapitre 9) ou les déformations différées (chapitre 10).

Dans ce chapitre, on propose d'abord quelques éléments d'information sur la réaction d'hydratation du ciment (section 7.1). Ensuite, on évoque le fait que malgré le caractère courant et l'apparente simplicité de mise en œuvre des matériaux cimentaires, la morphologie des pâtes de ciment est loin d'être clairement connue (section 7.2). Ceci constitue un obstacle à l'utilisation des méthodes de changement d'échelle. Nous verrons au chapitre 8 comment le contourner par une approche de type « essai - erreur ». Enfin, on réalise en section 7.3 une synthèse des résultats expérimentaux utilisés dans cette partie III du texte, c'est-à-dire les chapitres 7 à 10.

7.1 Réaction d'hydratation du ciment : quelques éléments

7.1.1 Description de la réaction

Le ciment Portland est principalement constitué de silicate tricalcique (C_3S)[1], silicate dicalcique (C_2S), aluminate tricalcique (C_3A), aluminoferrite tetracalcique (C_4AF), et de gypse. Au contact de l'eau, ces composés, dits anhydres, se dissolvent. Les ions précipitent sous forme d'hydrates : silicates de calcium hydratés (C-S-H), et portlandite (CH) pour les silicates, et C_2AH_8, C_3AH_6 et C_4AH_{13} pour les aluminates. Les C-S-H sont les principaux (en volume) hydrates formés, dans le cas des ciments Portland. La réaction d'hydratation peut s'écrire, de façon schématique :

$$\text{anhydre} \quad + \quad \text{eau} \quad \longrightarrow \quad \text{hydrates} \tag{7.1}$$

Dans ce travail (qui constitue une première approche évidemment perfectible), nous ne détaillons pas toutes les phases anhydres, nous évoquons simplement l'« anhydre ». De même, nous ne différentions pas toutes les phases hydratées, nous parlerons d'« hydrates », en prenant comme référence les C-S-H, prépondérants dans les pâtes de ciment Portland. L'espace complémentaire au domaine occupé par l'anhydre et les hydrates est formé des pores capillaires, initialement remplis d'eau.

Les proportions du mélange initial sont caractérisées par le rapport e/c, entre la masse d'eau et la masse de ciment (anhydre). Contrairement au cas du plâtre pris traité dans la partie II, pour lequel nous ne nous intéressions qu'à l'état complètement hydraté, nous allons ici suivre le matériau tout au long de son hydratation. En effet, l'hydratation du ciment se déroule sur une échelle de temps bien plus étendue que celle du gypse : elle ne se stabilise qu'au bout de plusieurs mois. On caractérise l'avancement de la réaction (7.1) par le degré d'hydratation, noté α, égal au rapport entre le volume d'anhydre déjà hydraté et le volume d'anhydre initial. Ainsi, le rapport e/c caractérise le mélange initial de ciment et d'eau, alors que le degré d'hydratation α caractérise l'état du matériau. Il est possible de relier le volume des différentes phases au degré d'hydratation : c'est l'objet de la section suivante.

[1] On emploie ici la notation cimentière : C=CaO, S=SiO_2, H=H_2O, A=Al_2O_3 , F=Fe_2O_3.

7.1.2 Évolution des fractions volumiques

Modèle d'hydratation de Powers

Bien que proposé dans les années 1940, le modèle d'hydratation de Powers [97] est encore d'actualité et reste utilisé aujourd'hui, du fait de sa simplicité de mise en œuvre. Il fournit les fractions volumiques dans la pâte d'anhydre (a), d'hydrates (h), de pores capillaires (pc) et d'eau (e) sous la forme de fonctions très simples du rapport massique eau sur ciment e/c et du degré d'hydratation α. Les données requises sont le volume d'hydrates κ_h formés et le volume d'eau consommé κ_e lorsqu'un volume unité de ciment anhydre est consommé par la réaction (7.1). Ce sont des caractéristiques stœchiométriques dépendant de la réaction d'hydratation du ciment. On note ρ_a la densité de l'anhydre. On se propose de réétablir rapidement le modèle de Powers.

Tout d'abord, considérons le mélange eau + anhydre dans son état initial, occupant un volume total noté V^0. Initialement, les volumes d'anhydre et d'eau s'écrivent respectivement :

$$V_a^0 = \frac{1}{1+\rho_a e/c} V^0 \quad \text{et} \quad V_e^0 = \frac{\rho_a e/c}{1+\rho_a e/c} V^0 \tag{7.2}$$

À présent, plaçons nous à l'instant caractérisé par le degré d'hydratation α. Les volumes d'anhydre, d'eau et d'hydrates sont :

$$V_a = (1-\alpha)V_a^0 \ , \quad V_e = V_e^0 - \kappa_e \alpha V_a^0 \quad \text{et} \quad V_h = \kappa_h \alpha V_a^0 \tag{7.3}$$

Le modèle de Powers fait l'hypothèse que le volume total d'anhydre, d'hydrates et de pores capillaires (complémentaire de l'anhydre et des hydrates) reste constant tout au long de l'hydratation. Nous reviendrons sur cette hypothèse dans le paragraphe « commentaires » ci-dessous. Initialement, alors que le mélange anhydre et eau se présente comme un fluide, les pores capillaires n'existent évidemment pas encore. Néanmoins, nous désignons par abus de langage « pores capillaires » le domaine alors occupé par l'eau. Ces derniers occupent donc le volume $V_{pc} = V^0 - V_a - V_h$. Ils sont a priori partiellement saturés d'eau. Les fractions volumiques d'anhydre, hydrates, pores capillaires et d'eau s'écrivent alors, selon le modèle de Powers :

$$f_a = \frac{(1-\alpha)}{1+\rho_a e/c} \ , \quad f_h = \frac{\kappa_h \alpha}{1+\rho_a e/c} \ , \quad f_{pc} = \frac{\rho_a e/c + (1-\kappa_h)\alpha}{1+\rho_a e/c} \quad \text{et} \quad f_e = \frac{\rho_a e/c - \kappa_e \alpha}{1+\rho_a e/c} \tag{7.4}$$

La mise en œuvre numérique de ces relations, avec $\rho_a = 3.13$, $\kappa_h = 2.13$ et $\kappa_e = 1.31$, donne les formules usuelles :

$$f_a = \frac{0.32(1-\alpha)}{e/c+0.32} \ , \quad f_h = \frac{0.68\alpha}{e/c+0.32} \ , \quad f_{pc} = \frac{e/c-0.36\alpha}{e/c+0.32} \quad \text{et} \quad f_e = \frac{e/c-0.4175\alpha}{e/c+0.32} \tag{7.5}$$

Remarquons que $f_e < f_{pc}$: les pores capillaires sont partiellement saturés. Par ailleurs, la fraction volumique de pores f_p dans la pâte de ciment est plus élevée que f_{pc} puisque les hydrates incorporent un espace poreux de dimension caractéristique plus petite que les pores capillaires, et souvent appelé porosité de gel. Le modèle de Powers estime cette porosité de gel dans les hydrates à 0.28, si bien que la porosité totale prend la forme :

$$f_p = \frac{e/c-0.17\alpha}{e/c+0.32} \tag{7.6}$$

Les évolutions en fonction du degré d'hydratation α des fractions volumiques d'anhydre, hydrates et pores capillaires sont représentées sur la figure 7.1 pour des rapports $e/c = 0.3$ et 0.5. Sur les graphiques de cette figure, la distance verticale entre deux courbes successives représente la fraction volumique de la phase indiquée entre ces deux courbes. La réaction d'hydratation est

supposée se terminer à $\alpha = \alpha^{ult}$ lorsqu'un des réactifs est épuisé. Selon la valeur du e/c, ceci correspond à $f_a = 0$ ou $f_e = 0$:

$$\alpha^{ult} = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad e/c > \kappa_e/\rho_a \\ \dfrac{e/c}{\kappa_e/\rho_a} & \text{si} \quad e/c < \kappa_e/\rho_a \end{cases} \tag{7.7}$$

Le e/c séparant les deux cas de figure se trouve à $\kappa_e/\rho_a \approx 0.42$: dans ce cas, eau et ciment sont présents en quantités stœchiométriques. En dessous (par exemple à $e/c = 0.3$), l'hydratation s'arrête pour $\alpha < 1$ par épuisement de l'eau : il subsiste de l'anhydre. Au dessus ($e/c = 0.5$ par exemple), l'hydratation s'arrête pour $\alpha = 1$ par épuisement de l'anhydre. Dans ce cas, la phase solide n'est constituée que d'hydrates à la fin. Évidemment, ces degrés d'hydratation ultimes ne sont pas nécessairement atteignables dans la pratique, même au bout d'un temps très long. En particulier, des questions de cinétique seraient à prendre en compte, afin de relier le degré d'hydratation au temps.

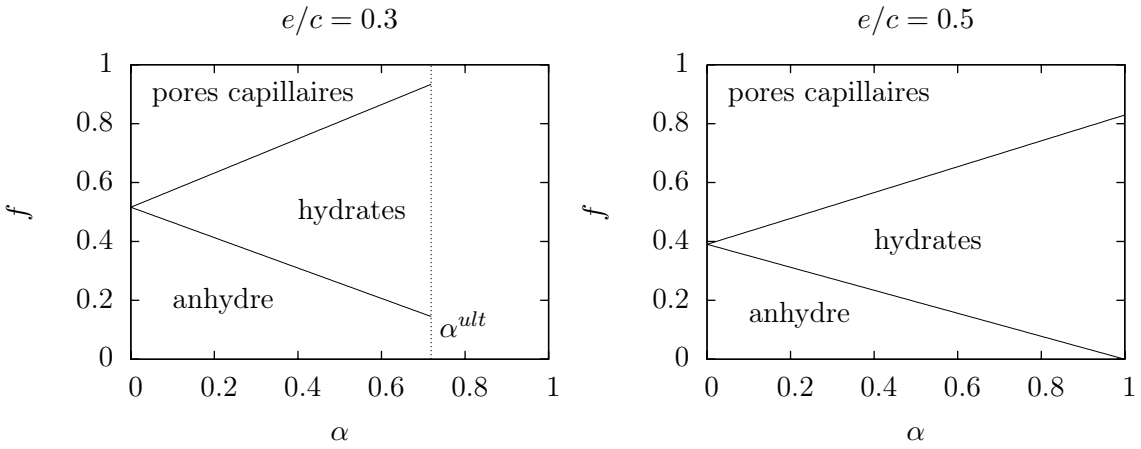


FIG. 7.1 – Répartition volumique de l'anhydre, des hydrates et des pores capillaires estimée par le modèle de Powers, comme fonctions du degré d'hydratation

Commentaires

Revenons sur l'hypothèse de volume constant occupé par l'ensemble anhydre + hydrates + pores capillaires. Cette hypothèse est recevable après la prise, c'est-à-dire une fois que la pâte de ciment présente un comportement de solide. En effet, le volume apparent du milieu poreux ainsi obtenu, dont le squelette constitué d'anhydre et d'hydrates est solide, reste constant, du moment que les déformations de retrait liées aux effets capillaires restent négligeables. Par contre, avant prise, la pâte est fluide. Or il est bien connu que le volume total d'anhydre, d'hydrates et d'eau diminue au cours du temps. Il s'agit du retrait Le Chatelier [71] : le volume d'hydrates formé est inférieur à la somme des volumes d'anhydre et d'eau consommés. Après la prise, ce phénomène a évidemment toujours lieu : il se traduit par l'apparition d'air dans le réseau poreux, puisque le volume apparent est figé. On schématise sur la figure 7.2 les volumes d'anhydre, eau, hydrates et air obtenus à plusieurs étapes de l'hydratation, dans deux cas selon la position du rapport e/c vis-à-vis de la valeur stœchiométrique 0.42. Sur cette figure, la prise est symbolisée par le fait que le rectangle représentant les hydrates occupe toute la hauteur du rectangle global. Le domaine occupé par l'eau et l'air est appelé « pores capillaires », même avant prise. L'hypothèse

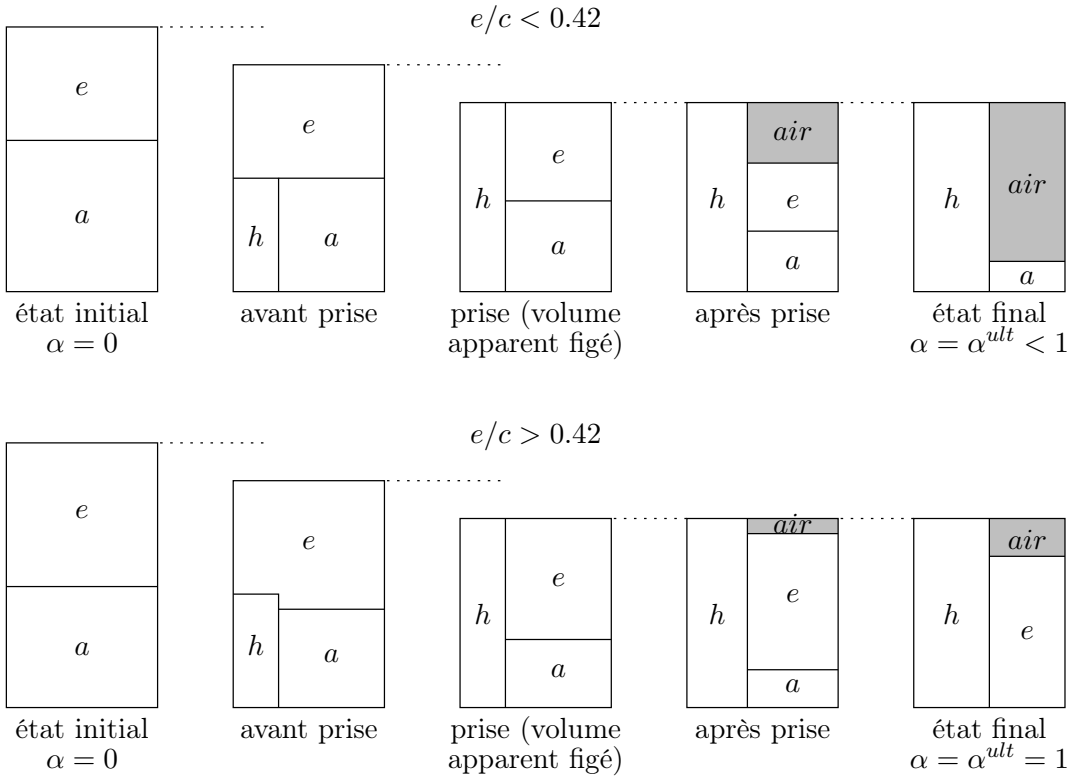


FIG. 7.2 – Représentation schématique (les ratios entre volumes ne sont pas respectés) de l'évolution des volumes d'anhydre a, hydrates h, eau e et air air tout au long de la réaction d'hydratation du ciment (l'air, en grisé, ne fait pas partie du système fermé anhydre+eau+hydrates)

de volume constant consiste à ne pas tenir compte de la réduction de volume du système entre l'état initial et la prise.

On tente maintenant de pressentir l'influence des variations de volume relatif des différentes phases au cours de l'hydratation sur les caractéristiques mécaniques de la pâte de ciment. À mesure que l'hydratation progresse, les fractions d'anhydre et de pores capillaires diminuent, et la fraction d'hydrates augmente. La fraction solide (anhydre + hydrates) augmente, ce qui fait qu'intuitivement, on s'attend à ce que les caractéristiques mécaniques de la pâte augmentent au cours du temps. Néanmoins, l'anhydre est remplacé par de l'hydrate, moins dense (car le volume anhydre + hydrates augmente), donc présentant à première vue des caractéristiques mécaniques moins bonnes. Deux effets opposés se manifestent donc : augmentation de la fraction solide (conduit à augmenter les caractéristiques mécaniques effectives) et dégradation des caractéristiques d'une partie de ce solide (conduit à faire diminuer les caractéristiques mécaniques effectives). Il est par conséquent indispensable de clarifier cela à l'aide d'un modèle qui, à partir des fractions volumiques déterminées ici, évalue les caractéristiques mécaniques effectives de la pâte. De plus, il existe un troisième effet qui est le rôle fondamental de « colle » (ou, oserait-on dire, de « ciment ») que jouent les hydrates, sans lesquels la pâte de ciment ne serait qu'un milieu granulaire sans cohésion.

7.2 Morphologie des pâtes de ciment

Les caractéristiques mécaniques d'un matériau composite dépendent grandement de la morphologie de ce dernier. Il convient donc, avant d'entamer tout travail de modélisation micromécanique, de rassembler des informations sur la microstructure. Or la morphologie des pâtes de ciment est extrêmement complexe, si bien que la communauté scientifique ne semble pas avoir atteint un consensus clair sur cette dernière. Pour bien s'en rendre compte, on fait ici référence à quelques modèles issus de la littérature et se proposant de décrire la microstructure d'une pâte de ciment. Le niveau de description de ces modèles se situe soit à l'échelle de la pâte, soit à l'échelle des C-S-H.

7.2.1 À l'échelle de la pâte

À l'échelle de la pâte, les phases anhydres comme les phases hydratées apparaissent comme continues. On rencontre principalement deux modèles de microstructure de pâte en cours d'hydratation : HYMOSTRUC3D et CEMHYD3D.

Le modèle HYMOSTRUC3D [126, 127] représente la microstructure d'une pâte de ciment comme un ensemble de sphères concentriques. La figure 7.3 gauche présente un exemple d'image issue de ce modèle. Les sphères concentriques présentent en leur cœur de l'anhydre, entouré de couches d'hydrates.

Le modèle CEMHYD3D [9, 10] représente la microstructure d'une pâte de ciment comme un ensemble de voxels élémentaires, chaque voxel pouvant être constitué d'une phase bien précise Il s'agit d'un modèle tridimensionnel dont la figure 7.3 droite représente une coupe. On ne retrouve clairement pas l'organisation en couches concentriques supposée par le modèle HYMOSTRUC3D.

Ainsi, deux modèles différents de microstructure de pâtes de ciment donnent des morphologies ayant très peu de points communs. Cela montre le manque de clarté vis-à-vis de la morphologie à l'échelle de la pâte. Plutôt que de choisir un modèle existant, nous chercherons par la suite (chapitre 8) à construire notre propre modèle morphologique et à en évaluer la pertinence en comparant les estimations de caractéristiques élastiques à des mesures expérimentales.

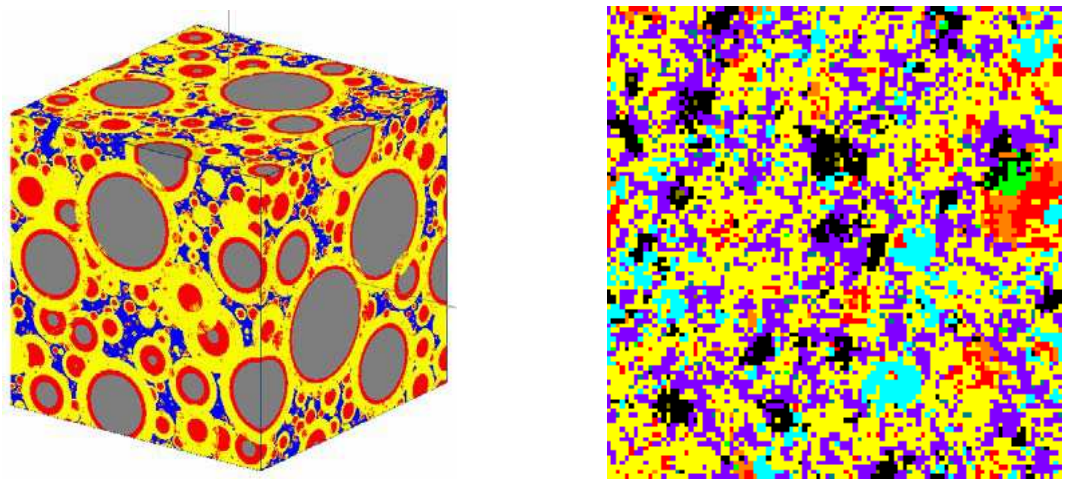


FIG. 7.3 – Modèles de microstructure de pâte de ciment : à gauche le modèle HYMOSTRUC3D [126, 127], et à droite le modèle CEMHYD3D [9, 10]

7.2.2 À l'échelle des C-S-H

On peut rencontrer dans la littérature principalement deux visions de la microstructure des silicates de calcium hydratés, selon la forme élémentaire constituant à la plus fine échelle cette microstructure : feuillet ou sphère.

Minet propose dans [83] la vision multiéchelle reprise sur la figure 7.4 et établie à partir de [82]. À l'échelle micrométrique, les C-S-H apparaissent comme un assemblage de particules de dimension submicronique. Ces particules sont elles-mêmes, à l'échelle de la dizaine de nanomètres, constituées d'un empilement de feuillets.

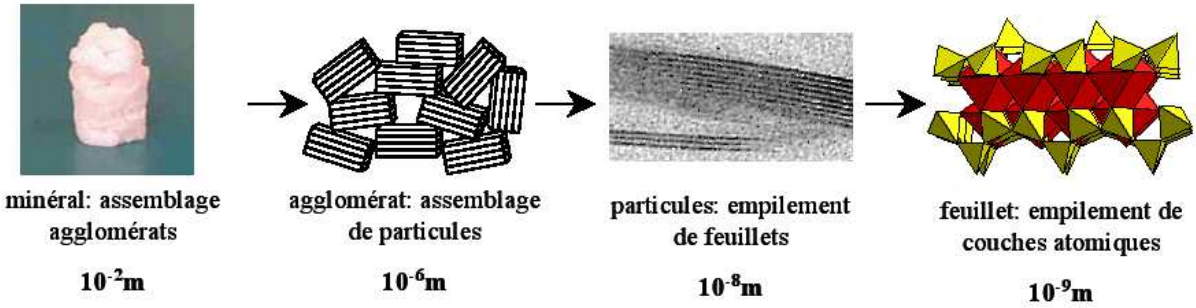


FIG. 7.4 – Un premier modèle de microstructure de C-S-H, multiéchelle partant de feuillets [83]

Jennings propose dans [61], à partir de l'analyse de résultats de différentes techniques d'observation *indirecte*, un modèle décrivant les C-S-H comme un ensemble de globules sphériques (figure 7.5). Les globules sont constitués de plusieurs particules, de forme sphérique également, et dont le diamètre est d'environ 2 nm.

Comme à l'échelle de la pâte, la microstructure n'est pas très claire à l'échelle des C-S-H. Remarquons que dans le diamètre de 2 nm des particules élémentaires du modèle de Jennings, on ne peut caser que 2 à 3 feuillets dans le sens de l'épaisseur. Nous nous permettons de prendre quelque distance avec le modèle de Jennings, qui ne semble pas reposer sur des observations directes de la microstructure. Nous privilégions ici le modèle proposé par Minet. En effet, des feuillets ont été observés, de même que les particules de dimension submicronique [46].

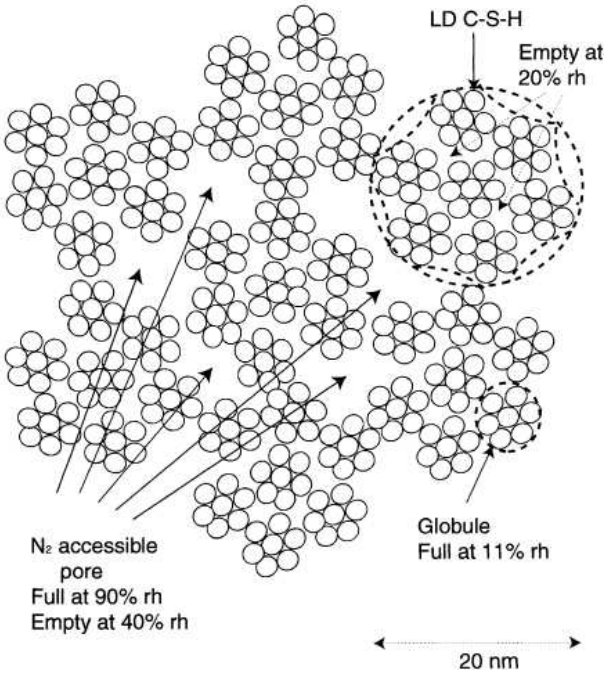


FIG. 7.5 – Un second modèle de microstructure de C-S-H, globules sphériques [61]

7.3 Synthèse des données expérimentales utilisées

On dispose de données expérimentales, issues de la littérature, sur le comportement mécanique d'une pâte de ciment à différents rapports e/c et degrés d'hydratation. Remarquons qu'il est courant de trouver des mesures de grandeurs mécaniques (élasticité, résistance) de pâtes de ciment en fonction du temps. Le degré d'hydratation est plus rarement présenté, car il s'agit d'une mesure délicate à réaliser. Or le degré d'hydratation est le paramètre d'entrée de nos modèles, qui décrit l'évolution de la pâte de ciment. Il serait possible de passer à la variable « temps » en mettant en place un modèle de cinétique d'hydratation ; ce que nous n'avons pas souhaité faire, préférant rester concentrés sur l'aspect « mécanique ». Ainsi, nous devons nous cantonner aux données mécaniques reliées au degré d'hydratation. Ces données, synthétisées dans cette section, seront exploitées pour valider les modèles développés dans cette partie III, consacrée aux C-S-H et pâtes de ciment.

7.3.1 Élasticité

On dispose de données sur l'élasticité d'une pâte de ciment au très jeune âge, à un âge plus avancé et à terme (pâtes matures).

Boumiz [15] a réalisé des mesures par ultrasons de l'élasticité de pâtes de C_3S conservées à 20°C, pour des e/c compris entre 0.3 et 0.6. Le principal intérêt de la technique ultrasons est que l'on peut démarrer la mesure à un degré d'hydratation quasi nul. Le module de Young est représenté en fonction du degré d'hydratation sur la figure 7.6.

Les travaux de Haecker *et al.* [52] fournissent des données à des âges plus avancés. Le degré d'hydratation et le module de Young de pâtes ont été mesurés à 14, 28 et 56 jours sur deux ciments différents et pour des rapports e/c allant de 0.25 à 0.6. Le module de Young est représenté en fonction du degré d'hydratation sur la figure 7.7.

On dispose également de données expérimentales sur des pâtes matures, c'est-à-dire pour une hydratation quasiment stabilisée. Helmuth et Turk [58] ont exploité trois matériaux : deux

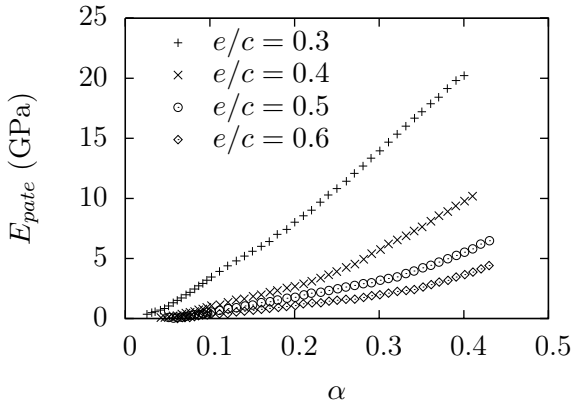


FIG. 7.6 – Module de Young de pâtes de C_3S mesuré par ultrasons [15]

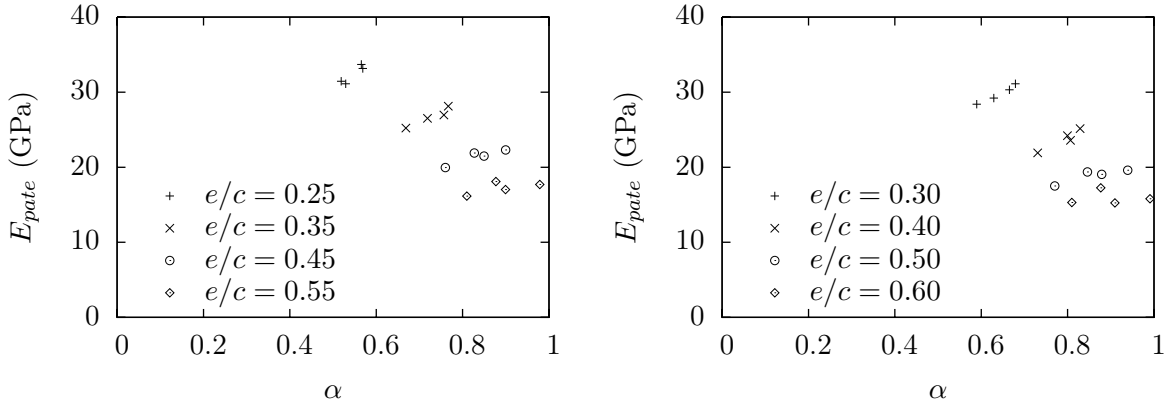


FIG. 7.7 – Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation [52]

ciments Portland et du C_3S quasi pur. Ils ont réalisé des éprouvettes à e/c compris entre 0.3 et 0.6, et ont mesuré le module de Young à 6, 7, 8, 14 et 24 mois pour les ciments et 8 et 14 mois pour le C_3S. Les mesures sont représentées en fonction du rapport e/c sur la figure 7.8.

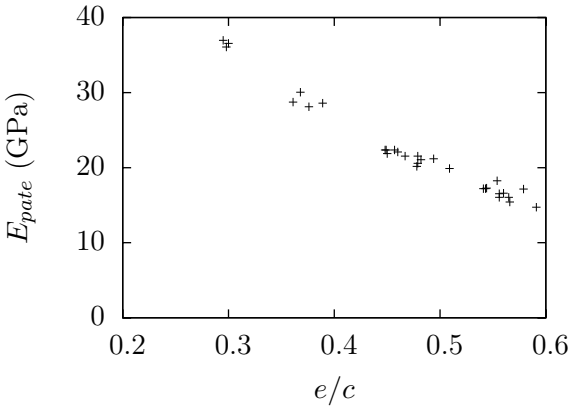


FIG. 7.8 – Module de Young de pâtes de ciment matures [58]

7.3.2 Résistance

Byfors [18] a réalisé une synthèse des résistances en compression de pâtes de ciment mesurées par Taplin. À partir de cette synthèse, Torrenti et Benboudjema [122] ont tracé le graphe repris sur la figure 7.9. Les données expérimentales sont représentées par des symboles ponctuels. Les segments de droite sont des régressions linéaires proposées par Torrenti et Benboudjema.

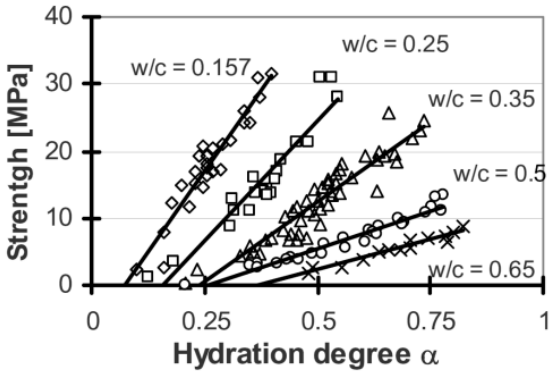


FIG. 7.9 – Résistance à la compression d'une pâte de ciment en fonction du degré d'hydratation, graphe extrait de [122]

7.3.3 Prise

En exploitant les résistances expérimentales en compression de pâtes de ciment réalisées par Taplin, citées par Byfors [18] et reprises ci-dessus, Torrenti et Benboudjema [122] ont défini un seuil α_0^{exp} sur le degré d'hydratation, en dessous duquel la résistance de la pâte peut être négligée. En faisant l'hypothèse d'une relation affine entre la résistance à la compression σ_c et le degré d'hydratation α, sous la forme $\sigma_c = \sigma_c^0(\alpha - \alpha_0^{exp})$, ils ont estimé α_0^{exp} par régression affine sur les données expérimentales (α, σ_c) disponibles pour quelques valeurs de e/c (table 7.1).

e/c	α_0^{exp}
0.16	0.07
0.25	0.16
0.35	0.24
0.5	0.25
0.65	0.37

TAB. 7.1 – Degré d'hydratation de prise d'une pâte de ciment estimé à partir de mesures de résistance à la compression [122]

Il convient de garder à l'esprit le fait que, compte tenu de la méthode de détermination utilisée, α_0^{exp} n'est qu'une *approximation* du degré d'hydratation de prise (défini comme le degré d'hydratation à partir duquel la résistance d'une pâte n'est plus nulle). En particulier, à cause de la régression linéaire, il existe sur la figure 7.9 des points expérimentaux attestant d'une résistance à la compression non nulle alors même que le degré d'hydratation de prise approché n'est pas encore atteint ($\sigma_c > 0$ pour $\alpha < \alpha_0^{exp}$).

Par ailleurs, on remarque qu'il existe un écart significatif entre le seuil de prise ici défini à partir de données sur la résistance à la compression, et le seuil qui peut être défini sur la raideur élastique à partir des essais de Boumiz [15] reportés sur la figure 7.6. Par exemple, à $e/c = 0.5$, le tableau 7.1 indique $\alpha_0^{exp} = 0.25$, alors que sur la figure 7.6, la courbe dessinée par les symboles circulaires indique qu'à $\alpha = 0.25$ la rigidité mesurée n'est plus du tout négligeable (2 à 3 GPa).

7.3.4 Fluage

Le Roy [72] a réalisé des essais de fluage en compression simple sur pâtes de ciment à $e/c =$ 0.28, 0.38 et 0.5. Le chargement est appliqué à $t_0 = 28$ jours, et son intensité vaut $\sigma_0 = 15.6$ MPa pour les $e/c = 0.28$ et 0.38, et $\sigma_0 = 9.4$ MPa pour le $e/c = 0.5$. Les éprouvettes de pâte ont été maintenues autant que possible isolées de l'extérieur, du point de vue hydrique. Les résultats obtenus sont repris sur la figure 7.10, sur laquelle la déformation élastique (déformation instantanée ε_0 observée au moment du chargement) a été retranchée de la déformation mesurée.

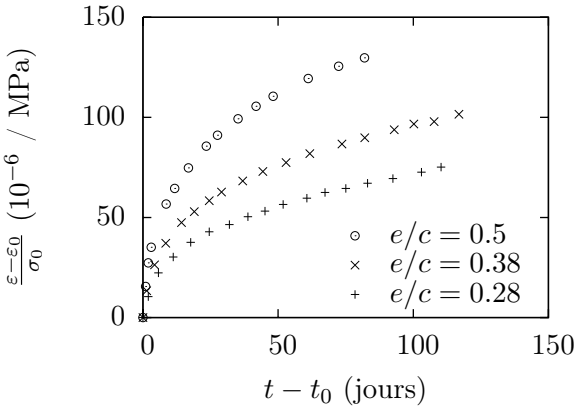


FIG. 7.10 – Déformation de fluage mesurée au cours du temps (d'après [72]), rapportée à 1 MPa de chargement

Chapitre 8

Élasticité des C-S-H et des pâtes de ciment

Ce chapitre est consacré à la mise au point d'un modèle morphologique de pâte de ciment en cours d'hydratation, afin de prédire l'élasticité de cette dernière. La première tentative suppose une précipitation des hydrates au voisinage immédiat des grains anhydres. La confrontation expérimentale montre que ce modèle morphologique n'est pas satisfaisant. On envisage alors un modèle faisant référence aux deux types de C-S-H fréquemment évoqués dans la littérature : les C-S-H haute densité (ou *inner products*) forment une couche entourant les particules anhydres, alors que les C-S-H basse densité (ou *outer products*) jouent le rôle d'une matrice poreuse. Les simulations du module de Young effectif au cours de l'hydratation sont en bon accord avec les données expérimentales disponibles, à l'exception du très jeune âge, sur lequel le modèle est perfectible. Une description plus fine de l'espace poreux des hydrates basse densité permet déjà d'aller dans ce sens.

Sommaire

8.1 Première tentative de modèle de pâte de ciment **97**
8.1.1 Modélisation 97
8.1.2 Résultats 102
8.1.3 Introduction de deux familles de particules de taille initiale contrastée 104
8.2 Modélisation **107**
8.2.1 Observations morphologiques 107
8.2.2 Modèle morphologique 109
8.2.3 Modèle micromécanique 110
8.2.4 Données d'entrée 112
8.3 Mise en œuvre et confrontation expérimentale **115**
8.3.1 Calibration de la forme des ellipsoïdes des hydrates basse densité . . . 116
8.3.2 Évolution du module de Young de la pâte en cours d'hydratation . . . 117
8.3.3 Module de Young de la pâte en fin d'hydratation 118
8.4 Quelques remarques sur le modèle **119**
8.4.1 Module de Young des hydrates basse densité 119
8.4.2 Schéma d'homogénéisation alternatif à l'échelle de la pâte 120
8.4.3 Influence de la forme des particules d'hydrates basse densité 120
8.4.4 Retour sur la rigidité des briquettes élémentaires 121
8.4.5 Module de Young de la pâte au très jeune âge 123
8.5 Conclusion **129**

Le principal objectif de ce chapitre est la mise au point d'un modèle morphologique de pâte de ciment. Il ne s'agit pas de décrire précisément la position géométrique de chaque constituant, mais plutôt de rassembler suffisamment d'information sur la morphologie pour obtenir des estimations raisonnables de l'élasticité d'une pâte en cours d'hydratation. Or nous avons souligné la complexité de la microstructure des pâtes et l'absence de consensus de la communauté scientifique sur le sujet (voir chapitre précédent). Ainsi, on s'est proposé d'utiliser la micromécanique pour mettre à l'épreuve différents modèles morphologiques, face à des résultats expérimentaux. Plusieurs modèles de morphologie ont été considérés, correspondant à plusieurs scénarios sur le développement de la microstructure. La démarche a donc été de type « essai-erreur », le « juge de paix » étant la confrontation aux données expérimentales.

Dans ce chapitre, on relate d'abord la première tentative de modèle de pâte de ciment, partant d'une microstructure fréquemment évoquée dans la communauté (section 8.1). Ce modèle suppose que les hydrates s'organisent en couches autour des particules de ciment anhydre. La confrontation aux résultats expérimentaux montre que cette approche n'est pas pleinement satisfaisante. Un certain nombre de difficultés à reproduire correctement les résultats expérimentaux nous ont conduit à mettre au point une alternative plus élaborée (sections 8.2 à 8.4).

En fait, l'homogénéisation des milieux aléatoires a déjà été exploitée pour modéliser les caractéristiques poro-élastiques au jeune âge de pâtes de ciment, mortiers et bétons [11, 23, 123]. À la plus fine échelle considérée par ces études, les C-S-H haute densité forment des inclusions dans une matrice de C-S-H basse densité, plus souple. Ce matériau composite, homogénéisé, est ensuite vu comme une matrice dans laquelle sont plongées diverses inclusions représentant la portlandite ou les grains de clinker (anhydre) restants. L'approche proposée ici conserve un modèle morphologique distinguant les C-S-H basse et haute densité, mais tente de tirer meilleur parti des informations disponibles sur la distribution spatiale des phases C-S-H haute densité, C-S-H basse densité et anhydre.

Au delà de la prise en compte des différences de propriétés mécaniques de ces constituants, l'originalité du modèle proposé à partir de la section 8.2 réside dans une représentation géométrique plus sophistiquée de la microstructure où l'on s'efforce d'exprimer le fait que les C-S-H haute densité (*inner products*) forment un domaine intermédiaire entourant les grains anhydres et les séparant des C-S-H basse densité (*outer products*). De plus, on cherche à profiter des avancées récentes en matière d'observation nanoscopique de grains d'anhydre en cours d'hydratation [65, 46]. On se place donc à une échelle qui révèle l'hétérogénéité des deux types de C-S-H, à laquelle on distingue les briques élémentaires constituées de feuillets de C-S-H et les pores de gel. On analysera l'influence de la forme de celles-ci sur les propriétés effectives du composite, en apportant ainsi des éléments de réponse à la question ouverte dans [24]. Notons que cette question continue de susciter d'intéressants échanges au sein de la communauté scientifique [125, 110].

La section 8.2 présente le modèle développé à partir d'observations de pâtes à différentes échelles et par divers moyens technologiques. Le modèle morphologique est ensuite traduit en schéma d'homogénéisation. Enfin, on rassemble les données d'entrée nécessaires à la mise en œuvre de ce dernier. La section 8.3 confronte avec un certain succès les estimations issues du modèle à des données expérimentales sur l'élasticité de pâtes tirées de différentes sources bibliographiques. La section 8.4 formule enfin quelques remarques, notamment sur l'influence de choix faits lors du développement du modèle (type de schéma d'homogénéisation, forme des particules) et sur les prédictions au très jeune âge.

Il est important de mentionner que ce travail n'est qu'une première approche de modélisation micromécanique de l'élasticité d'une pâte de ciment en cours d'hydratation. Cette vision simplifiée ne considère comme produits d'hydratation que les seuls C-S-H. Elle peut être créditée par le fait que les C-S-H représentent les produits d'hydratation les plus importants (en volume) d'une pâte de ciment Portland. Une étude plus sophistiquée devrait néanmoins tenir compte des autres hydrates formés (portlandite et phases aluminates), sans que cela ne pose d'ailleurs de problèmes

théoriques. Cependant, les résultats établis ici rendent déjà compte de façon assez satisfaisante des mesures expérimentales sur pâtes de ciment.

8.1 Première tentative de modèle de pâte de ciment

La réaction d'hydratation se caractérise par un mécanisme de dissolution - précipitation, les deux processus ayant lieu simultanément (sauf aux tous premiers instants). La microstructure obtenue dépend de l'endroit dans la pâte où se produisent ces phénomènes. La dissolution de l'anhydre a évidemment lieu à la surface des grains de ciment. La première idée a été de considérer que les hydrates ne précipitent que dans un voisinage très proche des grains anhydres. Plus précisément, on considère deux lieux de précipitation :

- à la surface des grains anhydres en remplacement du volume de ciment qui vient de se dissoudre,
- à la périphérie de la couche d'hydrates déjà formée.

Ainsi, les particules solides en cours d'hydratation sont modélisées à tout instant comme des particules composites, formées d'un cœur anhydre entouré de couches successives d'hydrates. Pour simplifier les calculs qui vont suivre, on considère des particules présentant la symétrie sphérique, et on suppose que toutes les couches d'hydrates sont douées du même comportement (il n'y aura pas d'hydrates haute et basse densité dans cette section 8.1). Assimiler les grains de ciment initiaux à des sphères semble légitime dans la mesure où ceux-ci ont été produits par broyage. Supposer que la symétrie sphérique caractérise aussi les particules composites anhydre + hydrates revient à faire l'hypothèse d'une progression isotrope de l'hydratation, c'est-à-dire indépendante de la direction dans l'espace autour du grain. On n'est donc, en particulier, pas en mesure de décrire le tout début de l'hydratation, pendant lequel des particules d'hydrates viennent se déposer sur les grains anhydres de manière à recouvrir progressivement leur surface [45]. En effet, le présent modèle suppose que dès qu'un volume infinitésimal d'hydrates s'est formé, celui-ci est réparti uniformément à la surface des particules de ciment. Néanmoins, le concept de sphère composite est fréquemment rencontré dans les modèles d'hydratation et de microstructure : on peut citer le tout premier modèle de ce genre, celui de Johnson et Jennings [62], le célèbre Hymostruc [126, 127], ou encore le récent µic [13].

Selon ce scénario de croissance des hydrates, la prise survient dès lors que les particules arrivent au contact les unes avec les autres, par l'intermédiaire de leur couche d'hydrates. La rigidité de la pâte augmente ensuite, comme conséquence à la fois du développement des surfaces de contact entre particules adjacentes et de la réduction de l'espace poreux.

8.1.1 Modélisation

Avant de décrire le modèle morphologique puis micromécanique rendant compte du scénario de précipitation des hydrates évoqué ci-dessus, on commence par s'intéresser à ce qui se passe juste avant le début de l'hydratation.

Modèle avant hydratation

On commence par étudier ce qui se passe entre le moment où le ciment a été mélangé avec l'eau et le moment où une couche infinitésimale d'hydrates recouvre les particules d'anhydre ($\alpha \to 0^+$). On est donc dans le cas $\alpha \to 0$. Comme ce sont les hydrates qui sont supposés jouer le rôle de « colle » entre les particules anhydres, on va faire l'hypothèse que ces dernières glissent librement les unes sur les autres tant qu'elles ne sont pas recouvertes d'une couche infinitésimale d'hydrates. Pour appréhender cette période à l'aide du modèle qui va être développé plus loin (voir paragraphes suivants et figures 8.3 et 8.4), on propose de recouvrir les particules d'anhydre

non pas d'une couche d'hydrates (comme c'est le cas sur la figure 8.4) mais d'une interface lisse. Ce type d'interface est caractérisé par la nullité de la partie tangentielle du vecteur contrainte et la continuité de la composante normale du vecteur déplacement. On considère donc un schéma auto-cohérent mettant en jeu dans les problèmes auxiliaires (figure 8.1) :

- une sphère pour représenter l'espace poreux,
- une sphère homogène (car l'hydratation n'a pas commencé) entourée d'une interface lisse pour représenter les grains anhydres.

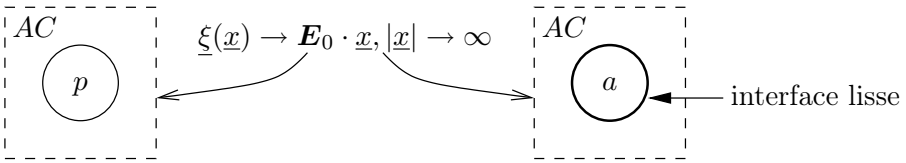


FIG. 8.1 – Problèmes auxiliaires d'élasticité à résoudre pour mettre en œuvre le schéma auto-cohérent proposé pour modéliser le mélange anhydre+eau avant hydratation

La construction de l'estimation des modules élastiques effectifs se fait de façon très similaire à ce qui a été exposé en section 2.1.1. La seule différence réside dans le problème auxiliaire visant à estimer la déformation moyenne du solide entouré de son interface : il ne s'agit plus d'un problème d'inhomogénéité d'Eshelby car à présent une interface lisse sépare la sphère solide du milieu de référence. La résolution de ce problème auxiliaire conduit à une déformation non uniforme dans la sphère solide lorsque la déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ est déviatorique. La résolution du problème plus général, avec une interface dont le comportement est isotrope transverse et défini par une relation linéaire entre le vecteur contrainte et la discontinuité de déplacement dont elle est le siège, est exposée de deux manières différentes dans [54, 135]. On propose en annexe C.2 une méthode de résolution de ce problème. Après calculs, on obtient les deux équations non linéaires suivantes, dont les modules auto-cohérents k^{AC} et μ^{AC} sont solutions :

$$k^{AC} = \frac{4(1-f_{pc})k_a\mu^{AC}}{3f_{pc}k_a + 4\mu^{AC}} \tag{8.1}$$

$$\begin{aligned} 64(15k_a + 11\mu_a)\mu^{AC^2} &+ \\ \left[360(3-f_{pc})k_a^2 + 24(14+65f_{pc})k_a\mu_a + 32(4f_{pc}-1)\mu_a^2\right]\mu^{AC} &+ \\ 9(3f_{pc}-1)(57k_a+4\mu_a)k_a\mu_a &= 0 \end{aligned} \tag{8.2}$$

avec k_a, μ_a les modules élastiques de l'anhydre et f_{pc} la porosité. Notons que l'équation (8.1) est identique à son homologue (2.8) établie avec une interface parfaite autour de l'inhomogénéité solide, puisque dans le cas d'une déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ sphérique, le caractère lisse de l'interface n'a aucune influence : celle-ci n'est pas sollicitée en cisaillement.

Le module de Young auto-cohérent ainsi obtenu est représenté en fonction de la porosité sur la figure 8.2. On constate une porosité critique $\varphi^c = 1/3$. Considérer le fait que les particules sphériques sont entourées d'une interface lisse a fait baisser la porosité critique de 1/2 à 1/3. Cette transition a également été observée dans le contexte de la résistance mécanique [107]. Autrement dit, dans le cadre du présent modèle morphologique, tant que la fraction solide initiale (ciment anhydre) est inférieure à 2/3, le milieu homogénéisé anhydre + eau n'a aucune rigidité : il n'exhibe pas un comportement de solide.

La porosité capillaire initiale (fraction volumique d'eau initiale) est reliée au rapport e/c par :

$$f_{pc}^0 = \frac{e/c}{e/c + 1/\rho_a} = \frac{e/c}{e/c + 0.32} \tag{8.3}$$

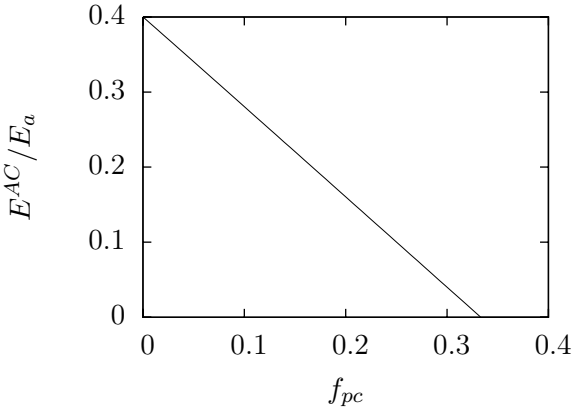


FIG. 8.2 – Module de Young estimé par schéma auto-cohérent lorsque les particules d'anhydre sont entourées d'une interface lisse ($\nu_a = 0.3$)

Ainsi, la porosité critique $\varphi^c = 1/3$ correspond à un rapport e/c critique de 0.16. Le modèle actuel est donc incapable de traiter correctement les pâtes préparées à un $e/c < 0.16$, puisque dans ce cas le mélange anhydre + eau serait doué d'une rigidité non nulle avant même que l'hydratation ne démarre. Néanmoins, dans les bétons courants, on n'atteint jamais des e/c aussi bas.

Modèle morphologique de la pâte en cours d'hydratation

Comme annoncé ci-dessus, les particules en cours d'hydratation sont considérées comme des sphères composites (cœur anhydre entouré d'une couche d'hydrates). L'espace laissé libre entre ces particules est occupé par les pores capillaires. La figure 8.3 représente de façon schématique et en 2D le modèle morphologique proposé. Elle n'est qu'une « vue de l'esprit » : le modèle réel est tridimensionnel.

L'espace poreux considéré dans le présent modèle n'est constitué que des pores capillaires. Ceci signifie que les pores de gel des hydrates ne sont pas comptés dans la porosité. Le matériau « hydrates » que l'on considère ici comme continu renferme ces pores de gel sans que l'on soit capable de les distinguer à notre échelle d'étude.

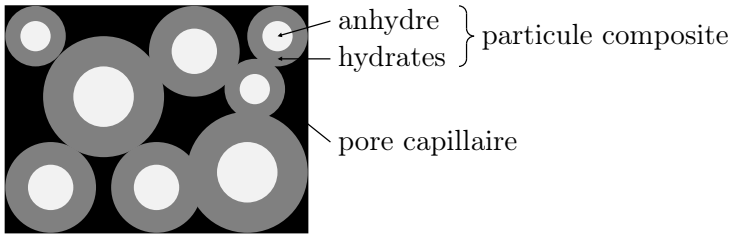


FIG. 8.3 – Représentation schématique du modèle morphologique de pâte de ciment proposé

Modèle micromécanique de la pâte en cours d'hydratation

Le milieu composite considéré est constitué de trois phases : anhydre, hydrates et espace poreux (pores capillaires), respectivement représentées par les indices a, h et pc. Les fractions

volumiques de ces trois phases dans le VER de pâte sont respectivement notées f_a, f_h et f_{pc}. La pâte de ciment, correspondant au milieu homogénéisé, est représentée par l'indice « *pate* ».

Il convient de construire un schéma d'homogénéisation rendant compte de la morphologie envisagée (schématisée sur la figure 8.3). Si les sphères n'étaient pas composites mais homogènes, on serait en présence d'un ensemble de sphères solides homogènes pénétrables. Or le schéma auto-cohérent avec formes sphériques fournit une estimation relativement satisfaisante de l'élasticité effective d'un assemblage monodisperse de sphères pénétrables (du moins en termes de module de compression : voir section 2.1). Il reste à rendre compte du caractère composite des sphères solides. On propose à cet effet de recourir à un motif morphologique représentatif (MMR), selon une démarche inspirée de [14, 116, 132]. Le MMR envisagé est formé d'un cœur anhydre entouré d'une couche d'hydrates, le tout présentant la symétrie sphérique. On fait donc appel à un schéma auto-cohérent généralisé, le caractère généralisé renvoyant à l'utilisation d'un MMR. Ce type de schéma supposant une répartition parfaitement désordonnée des pores et des MMR, le comportement effectif est isotrope.

Dans le cadre du schéma d'homogénéisation qui vient d'être évoqué, l'estimation de la rigidité effective passe classiquement par celle des déformations moyennes des trois phases anhydre, hydrates et espace poreux lorsque le VER est soumis à des conditions aux limites de type « déformation homogène au contour » (déformation $\boldsymbol{E}$). La résolution de deux problèmes auxiliaires d'élasticité, représentés sur la figure 8.4, fournit des estimations de ces déformations moyennes comme des expressions linéaires de la déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$. Contrairement au problème classique d'Eshelby [36], l'originalité de notre situation réside dans le fait que l'inhomogénéité représentant le solide est une sphère composite et non pas homogène. Ce schéma d'homogénéisation a été présenté dans [107], dans le cas limite où le cœur anhydre (a) est rigide et la couche d'hydrates (h) incompressible. On résume dans les quelques lignes qui suivent la démarche de résolution du cas général.

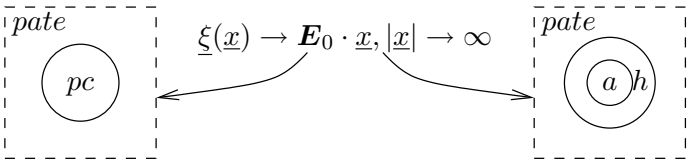


FIG. 8.4 – Problèmes auxiliaires d'élasticité à résoudre pour mettre en œuvre le schéma auto-cohérent généralisé, à base de motif morphologique représentatif, proposé pour modéliser une pâte de ciment en cours d'hydratation

La déformation moyenne de l'espace poreux capillaire est estimée par la déformation qui s'établit dans une cavité sphérique plongée dans le milieu effectif (de rigidité $\mathbb{C}_{pate}$ recherchée) soumis à l'infini à des conditions aux limites de déformation homogène ($\boldsymbol{E}_0$) au contour. Il s'agit d'un cas particulier du problème de l'inhomogénéité d'Eshelby, déjà rencontré à plusieurs reprises (par exemple en section 2.1.1 : voir équations (2.1) et (2.2)). La déformation dans la cavité est homogène :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{pc} = \mathbb{A}_{pc} : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \mathbb{A}_{pc} = \frac{3k_{pate} + 4\mu_{pate}}{4\mu_{pate}} \mathbb{J} + 5 \frac{3k_{pate} + 4\mu_{pate}}{9k_{pate} + 8\mu_{pate}} \mathbb{K} \tag{8.4}$$

où k_{pate} et μ_{pate} sont respectivement le module de compression et de cisaillement de la pâte.

La partie droite de la figure 8.4 représente le problème auxiliaire d'élasticité à résoudre en vue d'estimer la déformation moyenne des phases anhydre et hydrate. Il s'agit d'un problème d'Eshelby généralisé mettant en jeu une sphère composite incluse dans le milieu infini de rigidité $\mathbb{C}_{pate}$. On propose en annexe C.1 une méthode de résolution inspirée de [59]. Le champ de

déformation obtenu dans les phases a et h *n'est pas* homogène. Les déformations moyennes prennent la forme :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_a = \mathbb{A}_a : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{et} \quad \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_h = \mathbb{A}_h : \boldsymbol{E}_0 \tag{8.5}$$

où les tenseurs $\mathbb{A}_a$ et $\mathbb{A}_h$ sont isotropes. Ils s'écrivent donc :

$$\mathbb{A}_a = A_a^{sph}\mathbb{J} + A_a^{dev}\mathbb{K} \quad \text{et} \quad \mathbb{A}_h = A_h^{sph}\mathbb{J} + A_h^{dev}\mathbb{K} \tag{8.6}$$

Les quatre scalaires A_a^{sph}, A_a^{dev}, A_h^{sph} et A_h^{dev} peuvent être déterminés grâce à l'annexe C.1, en remplaçant 2 par a, 1 par h et 0 par *pate*.

Pour relier la déformation de référence $\boldsymbol{E}_0$ à la déformation $\boldsymbol{E}$ appliquée au contour du VER, qui est aussi la déformation moyenne du VER, on écrit cette dernière comme la moyenne des déformations des phases :

$$\boldsymbol{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = [f_a\mathbb{A}_a + f_h\mathbb{A}_h + (1 - f_a - f_h)\mathbb{A}_{pc}] : \boldsymbol{E}_0 \tag{8.7}$$

La contrainte moyenne dans le VER s'écrit de façon similaire :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = [f_a\mathbb{C}_a : \mathbb{A}_a + f_h\mathbb{C}_h : \mathbb{A}_h] : \boldsymbol{E}_0 \tag{8.8}$$

Ainsi la rigidité effective estimée par le schéma auto-cohérent généralisé peut finalement s'écrire :

$$\mathbb{C}_{pate} = (f_a\mathbb{C}_a : \mathbb{A}_a + f_h\mathbb{C}_h : \mathbb{A}_h) : [f_a\mathbb{A}_a + f_h\mathbb{A}_h + (1 - f_a - f_h)\mathbb{A}_{pc}]^{-1} \tag{8.9}$$

Cette équation ne fait intervenir que des tenseurs isotropes. Rappelons que $\mathbb{A}_a$, $\mathbb{A}_h$ et $\mathbb{A}_{pc}$ dépendent implicitement des modules effectifs k_{pate} et μ_{pate} de la pâte. L'équation (8.9) peut être scindée en deux équations scalaires non linéaires portant sur k_{pate} et μ_{pate}. Ces deux équations ont des expressions trop lourdes pour être reproduites ici. Néanmoins, on peut citer pour mémoire les équations obtenues dans le cas limite où l'anhydre est rigide ($E_a \to \infty$) et les hydrates incompressibles ($k_h \to \infty$). Ces expressions ont été établies dans [107] :

$$k_{pate} = \frac{4(1 - f_{pc})}{3f_{pc}}\mu_{pate} \tag{8.10}$$

$$\frac{\mu_h}{\mu_{pate}} = \frac{2}{1 - f_{pc}}\left[3f_{pc}\frac{\mu_h}{\mu_{pate}}\frac{k_{pate} + 2\mu_{pate}}{9k_{pate} + 8\mu_{pate}} + \frac{P_1(\chi)\mu_h + 4P_2(\chi)\mu_{pate}}{P_3(\chi)\mu_h + 8P_4(\chi)\mu_{pate}}\right] \tag{8.11}$$

où les $P_i(\chi)$ sont des polynômes de $\chi = \sqrt[3]{f_a/(f_a + f_h)}$:

$$\begin{aligned}
P_1(\chi) &= (19 + 16\chi^7)(1 - \chi^3) + 84\left(1 - \chi^2\right)^2\chi^3 \\
P_2(\chi) &= \left[4(1 + \chi^2)(1 + 9\chi^2 + \chi^4) + 16\chi(1 + \chi^4) + 55\chi^3\right](1 - \chi)^4 \\
P_3(\chi) &= 38 + 225\chi^3 - 336\chi^5 + 200\chi^7 + 48\chi^{10} \\
P_4(\chi) &= 2(2 + 3\chi^7)(1 - \chi^3) + (31\chi^2 - 11)(1 - \chi^2)\chi^3
\end{aligned} \tag{8.12}$$

Revenons au cas général exprimé par (8.9), qui permet d'obtenir numériquement les estimations auto-cohérentes des modules effectifs de la pâte de ciment (dans le cadre du modèle morphologique envisagé). Ces estimations dépendent à la fois des caractéristiques élastiques des phases anhydre et hydrates, et des fractions volumiques des trois phases en présence. Alors que les caractéristiques élastiques élémentaires sont supposées constantes tout au long de l'hydratation, les fractions volumiques évoluent au cours du temps : les fractions d'anhydre et de pores diminuent au profit des hydrates. Ces fractions volumiques peuvent être reliées au degré d'hydratation α à l'aide d'un modèle d'hydratation. Par simplicité, nous avons choisi le modèle de Powers, déjà présenté en section 7.1.2.

Caractéristiques élastiques élémentaires

Le schéma d'homogénéisation a été conçu à partir des hypothèses sur la morphologie. Les fractions volumiques des différentes phases sont évaluées en fonction du degré d'hydratation par le modèle de Powers. Il ne manque plus que les caractéristiques élastiques élémentaires des phases anhydre et hydrates pour être en mesure d'estimer la rigidité d'une pâte de ciment tout au long de son hydratation (dans le cadre du modèle de microstructure envisagé ici).

On exploite des caractéristiques élastiques mesurées par nano-indentation : cette technique consiste à indenter, à une échelle microscopique, la surface polie d'un matériau composite [124]. La courbe représentant la force en fonction de l'enfoncement de l'indenteur est enregistrée. Les caractéristiques élastiques élémentaires des différentes phases constituant le matériau composite sont ensuite évaluées par analyse statistique d'un grand nombre d'indentations (déconvolution de distributions statistiques). Notons que les hétérogénéités doivent présenter des dimensions caractéristiques bien supérieures à celles de l'empreinte de l'indenteur. Il convient également de prendre garde aux situations pathologiques, comme des inclusions rigides dans une matrice très souple, conduisant à une sous-estimation de la rigidité de l'inclusion. De plus, l'analyse statistique peut être délicate à mener. Mais elle semble nécessaire, compte tenu du fait qu'il est très difficile d'identifier visuellement les phases indentées. Par ailleurs, la nano-indentation ne donne accès qu'à une seule caractéristique élastique, si bien que dans l'hypothèse d'un matériau isotrope, il faut se donner le coefficient de Poisson pour déterminer le module de Young à partir de la mesure. Néanmoins, nous exploiterons ici des résultats de nano-indentation, dans la mesure où cette technique, même si elle n'est pas parfaite, est l'une des rares à permettre d'appréhender in-situ le comportement mécanique élémentaire des phases d'un composite.

Les données sont consignées dans la table 8.1. Soulignons à nouveau que le présent modèle considère les hydrates comme homogènes : il ne distingue pas d'hydrates haute ou basse densité.

	E (GPa)	ν
anhydre (a) [128]	135	0.3
hydrates (h) [129]	31	0.24

TAB. 8.1 – Caractéristiques élastiques des phases élémentaires issues de mesures par nano-indentation (pour le module de Young)

8.1.2 Résultats

Confrontation expérimentale du module de Young au cours de l'hydratation

La figure 8.5 représente l'évolution du module de Young d'une pâte de ciment en fonction du degré d'hydratation, pour différents rapports e/c. Les courbes représentent les évolutions estimées, alors que les points correspondent aux données expérimentales issues de [52] (voir section 7.3.1). Le modèle est capable de prédire correctement les modules de Young expérimentaux des pâtes dont le e/c est compris entre 0.35 et 0.50. Lorsque $e/c \leq 0.30$, on surestime les valeurs expérimentales alors que pour $e/c \geq 0.55$ les modules expérimentaux sont sous-estimés. Même si des écarts sont observés aux e/c « extrêmes », l'accord du modèle avec les données expérimentales de [52] reste relativement satisfaisant. Ces données concernent des âges avancés. Le comportement du modèle au jeune âge soulève des doutes bien plus importants. En effet, aux $e/c = 0.25$ et 0.3, on relève un démarrage de l'hydratation (pour $\alpha \to 0^+$) avec une valeur non nulle du module de Young effectif. Évidemment, dans la réalité, même pour des e/c faibles

comme ceux-ci, il faut attendre un certain degré d'hydratation pour voir apparaître une rigidité non nulle, c'est-à-dire un comportement de solide.

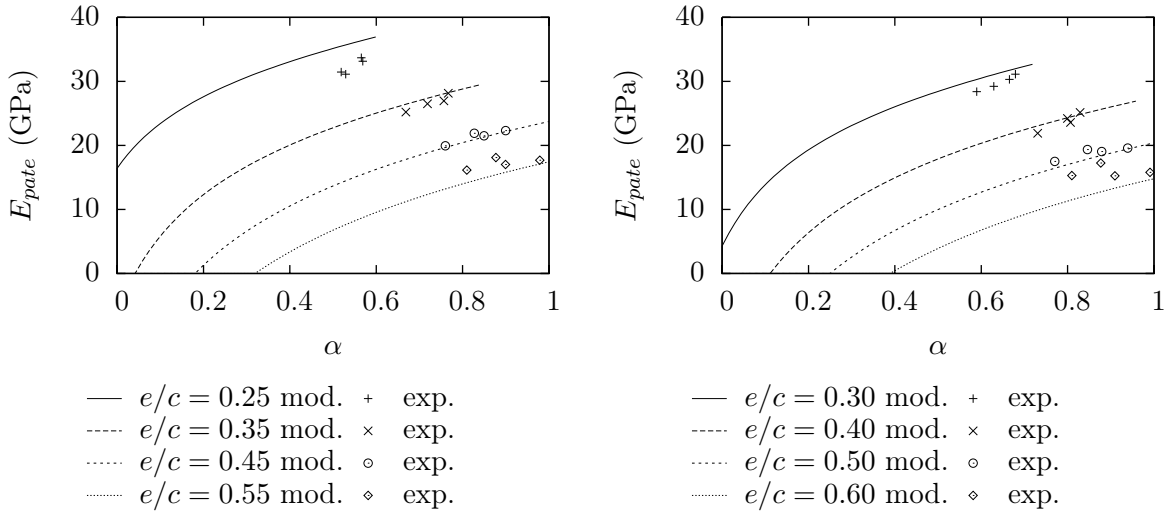


FIG. 8.5 – Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation, estimé (lignes), et mesuré expérimentalement (points) [52]

Cette limite du modèle peut s'interpréter en termes de degré d'hydratation de prise. Ce dernier est défini comme le degré d'hydratation pour lequel la rigidité effective n'est plus nulle. Remarquons que le schéma auto-cohérent généralisé développé ici (en section 8.1.1) présente exactement la même porosité critique que le schéma auto-cohérent usuel (rappelé en section 2.1.1). En effet, la rigidité effective s'annule pour une fraction volumique de pores capillaires $f_{pc} = 1/2$. Le modèle de Powers (7.4), reliant porosité capillaire et degré d'hydratation, permet d'évaluer le degré d'hydratation de prise comme celui qui est nécessaire pour atteindre cette porosité capillaire $f_{pc} = 1/2$:

$$\alpha_0^{AC} = \frac{\rho_a e/c - 1}{2(\kappa_h - 1)} \tag{8.13}$$

Ainsi les rapports e/c inférieurs à $1/\rho_a \approx 0.32$ sont problématiques puisqu'une rigidité *non nulle* est prévue dès que l'hydratation démarre ($\alpha \to 0^+$). En effet, la porosité initiale (pour $\alpha \to 0^+$), lorsque $e/c < 1/\rho_a$, est inférieure à la porosité capillaire de prise 1/2 prévue par le modèle.

Notons qu'ici le e/c critique est 0.32, alors qu'il était de 0.16 dans le modèle présenté ci-dessus avant toute hydratation. Il convient de préciser que le modèle avant toute hydratation considérait des particules anhydres entourées d'une interface lisse, donc non recouvertes d'une couche d'hydrates (« colle »), ce qui correspondait à $\alpha = 0$. Le présent modèle considère des particules anhydres toujours entourées d'une couche d'hydrates, ce qui correspond à $\alpha > 0$. Ainsi, même lorsque $\alpha \to 0^+$, le présent modèle ne tend pas vers celui décrit avant hydratation. Ceci explique les différences de porosités critiques : 1/2 ici et 1/3 auparavant.

Lorsque $e/c < 1/\rho_a$, la fraction solide initiale est supérieure à 1/2. Pourtant, dans la réalité, la pâte de ciment correspondante n'a pas encore fait prise. Ceci signifie que la fraction solide critique de prise est sous-estimée. Cette difficulté peut être en partie surmontée en envisageant une distribution de tailles étalée des particules anhydres, comme nous allons l'entrevoir dans la section suivante. On peut déjà pressentir que si les petites particules se logent dans les espaces laissés libres entre les grosses, on pourra atteindre des fractions solides bien supérieures à 0.5 sans pour autant exhiber un comportement de solide.

8.1.3 Introduction de deux familles de particules de taille initiale contrastée

D'après les travaux de la section 2.1, le schéma auto-cohérent (à formes sphériques) semble se prêter relativement bien à la modélisation d'un assemblage de sphères tronquées toutes de dimensions semblables. En particulier, dès que la fraction solide passe au dessus de 1/2, le schéma semble considérer des sphères qui se sont interpénétrées, puisqu'une rigidité effective non nulle apparaît. Or on a vu que pour des $e/c < 0.32$, la fraction solide (anhydre+hydrates naissants) en début d'hydratation ($\alpha \to 0^+$) est supérieure à 0.5, sans pour autant que la prise ne soit survenue dans la pratique. Le modèle développé jusqu'ici n'est donc pas en mesure de rendre compte de la véritable distribution de taille des grains de ciment (pouvant s'étaler de quelques microns à 150 µm pour un ciment Portland ordinaire [44]). La prise en compte d'une distribution *continue* de tailles de grains semble, à notre connaissance, pour le moment inaccessible aux outils que nous utilisons. Néanmoins, on peut aller dans cette direction en considérant deux familles de particules dont les tailles sont très différentes, afin de pouvoir introduire une séparation d'échelles.

Modélisation

On caractérise la distribution de taille initiale des particules par la fraction volumique initiale f_s^0 de petites particules dans le volume total de solide. La porosité initiale est notée f_{pc}^0 ; elle dépend du rapport e/c.

L'hypothèse de séparation d'échelles conduit à supposer que les grosses particules voient l'espace poreux et les petites particules comme un milieu continu homogénéisé (figure 8.6). On distingue donc deux échelles :

- L'échelle macroscopique est celle de la pâte de ciment. Un VER de ce matériau révèle le premier niveau d'hétérogénéité, en faisant apparaître les grosses particules anhydre + hydrates et un milieu continu dont la microstructure n'est détaillée qu'à l'échelle inférieure, l'échelle mésoscopique.
- L'échelle mésoscopique est celle du milieu continu évoqué ci-dessus. Un VER de ce matériau révèle un second niveau d'hétérogénéité, en distinguant les petites particules anhydre + hydrates des pores capillaires.

Ainsi, par exemple, lorsque nous parlerons de comportement homogénéisé à l'échelle mésoscopique (rigidité notée $\mathbb{C}_{meso}$), il s'agira du comportement effectif d'un VER pris à l'échelle mésoscopique (schéma de droite de la figure 8.6).

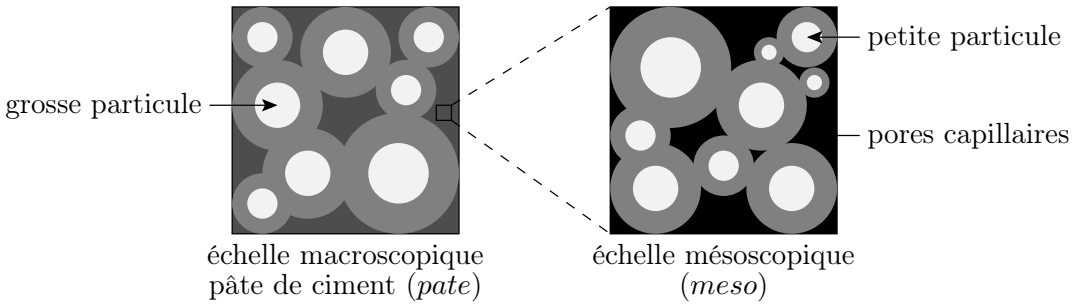


FIG. 8.6 – Modèle de microstructure multiéchelle proposé pour une pâte de ciment : un VER est schématisé à chacune des deux échelles introduites

L'élasticité du milieu homogénéisé issu de l'échelle mésoscopique (rigidité effective $\mathbb{C}_{meso}$) est déterminée par un premier schéma auto-cohérent généralisé, identique à celui développé ci-dessus (figure 8.4). Ensuite, dans un second temps, un nouveau schéma auto-cohérent généralisé est mis en œuvre, pour homogénéiser à l'échelle macroscopique les grosses particules avec le

matériau issu de l'échelle mésoscopique, ce qui conduit au tenseur de rigidité $\mathbb{C}_{pate}$. La figure 8.7 représente ces deux étapes d'homogénéisation. Dans un VER à l'échelle macroscopique, la fraction volumique de grosses particules est initialement $(1 - f_s^0)(1 - f_{pc}^0)$, puisqu'on rappelle que f_s^0 représente la fraction volumique initiale de petites particules dans l'ensemble des particules. Dans un VER à l'échelle mésoscopique, la fraction volumique de pores capillaires s'écrit initialement $\varphi_{meso}^0 = f_{pc}^0/[1 - (1 - f_s^0)(1 - f_{pc}^0)]$.

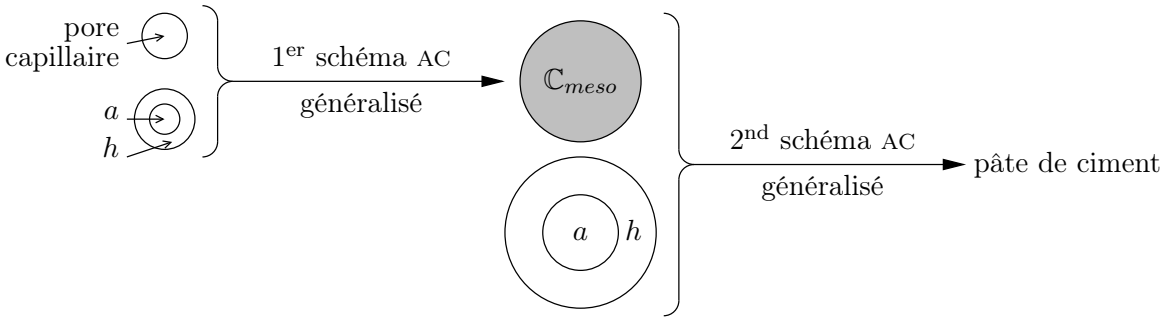


FIG. 8.7 – Principe du schéma d'homogénéisation en deux étapes

La condition de « non prise instantanée », $\mathbb{C}_{pate} = 0$ initialement, se traduit par deux conditions devant être simultanément remplies :

– il faut s'assurer d'obtenir à l'échelle mésoscopique un matériau sans rigidité ($\mathbb{C}_{meso} = 0$), ce qui se traduit par $\varphi_{meso}^0 \geq 1/2$, soit :

$$f_s^0 \leq \frac{f_{pc}^0}{1 - f_{pc}^0} \tag{8.14}$$

– il faut s'assurer qu'à l'échelle macroscopique les grosses particules ne soient pas en volume trop important pour dépasser la fraction solide critique 1/2, soit $(1 - f_s^0)(1 - f_{pc}^0) \leq 1/2$, ou encore :

$$f_s^0 \geq \frac{1 - 2f_{pc}^0}{2(1 - f_{pc}^0)} \tag{8.15}$$

Ainsi, tant que f_s^0 et f_{pc}^0 respectent les deux inégalités suivantes, la prise instantanée est évitée :

$$\frac{1 - 2f_{pc}^0}{2(1 - f_{pc}^0)} \leq f_s^0 \leq \frac{f_{pc}^0}{1 - f_{pc}^0} \tag{8.16}$$

On représente finalement en grisé sur la figure 8.8 les valeurs à donner à la porosité initiale f_{pc}^0 et à la fraction volumique initiale de petites particules f_s^0 pour s'affranchir des pathologies du modèle précédent, à savoir une prise prévue alors même que l'hydratation démarre à peine.

Pour des porosités initiales supérieures à 1/2, la prise instantanée est évitée quelle que soit la valeur de f_s^0. C'était déjà le cas dans le modèle précédent. À présent, la prise instantanée peut être évitée pour des porosités allant jusqu'à 1/4, pourvu que la fraction de petites particules respecte (8.16). Cette condition se ramène à $f_s^0 = 1/3$ lorsque $f_{pc}^0 = 1/4$. En rappelant (8.3), la condition $f_{pc}^0 \geq 1/4$ sur la porosité capillaire initiale se traduit en $e/c \geq 1/3/\rho_a \approx 0.11$. Par rapport à la situation précédente, l'introduction de deux tailles de particules bien séparées permet de diviser par au maximum 3 le rapport e/c critique. Ce résultat est intéressant du point de vue qualitatif. Cependant, on va s'apercevoir par confrontation expérimentale que le nouveau modèle n'est pas encore pleinement satisfaisant.

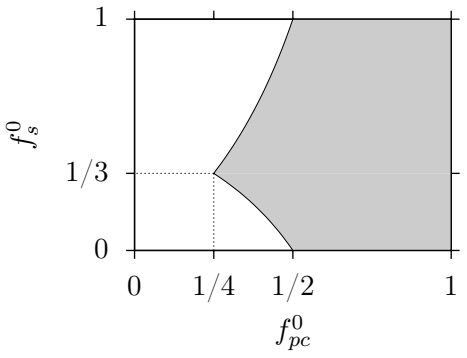


FIG. 8.8 – Porosité initiale (f_{pc}^0) et fraction volumique de petites particules (f_s^0) évitant la prise instantanée (zone grisée)

Confrontation expérimentale

La figure 8.9 présente l'évolution du module de Young en fonction du degré d'hydratation, obtenue par le modèle à deux échelles pour une fraction volumique initiale de petites particules $f_s^0 = 0.6$. Le problème de prise instantanée a bien disparu. En revanche, l'accord avec les données expérimentales de [52] n'est vraiment correct que dans l'intervalle restreint $0.3 \leq e/c \leq 0.4$.

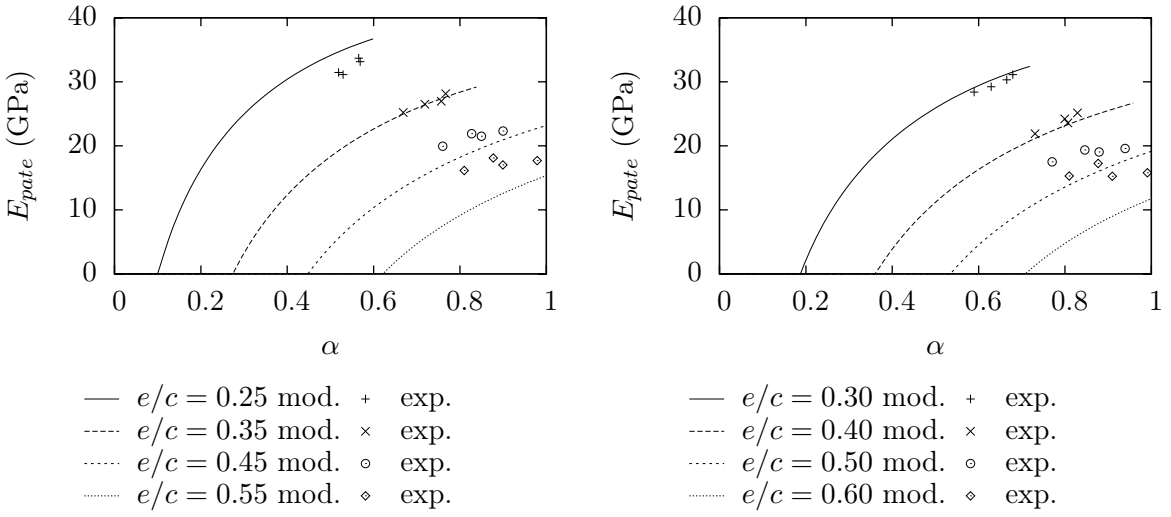


FIG. 8.9 – Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation, estimé (lignes), et mesuré expérimentalement (points) [52]

On observe sur la figure 8.9 des courbes dont la concavité est tournée vers le bas. D'après les mesures expérimentales reportées sur la figure 7.6 (page 91), on s'attend plutôt à une concavité tournée vers le haut. Par ailleurs, les degrés d'hydratation de prise obtenus par le présent modèle ne sont en accord ni avec les résultats expérimentaux synthétisés dans la table 7.1 (page 93), ni avec les degrés d'hydratation de prise apparaissant sur les courbes de la figure 7.6. Ces difficultés éprouvées à reproduire correctement les résultats expérimentaux révèlent le fait que le modèle morphologique de sphères composites développé pour la pâte dans cette section ne reflète probablement pas suffisamment bien la réalité. Il est donc nécessaire de retravailler le modèle de microstructure, en profitant notamment de différentes techniques d'observation. Nous présentons dans les sections suivantes un modèle morphologique alternatif de pâte de ciment, qu'on espère

plus satisfaisant car basé sur des observations de la microstructure.

8.2 Modélisation [108, 109]

8.2.1 Observations morphologiques

On cherche à construire un nouveau modèle micromécanique de pâte de ciment faisant appel à l'homogénéisation des milieux aléatoires pour estimer les caractéristiques élastiques effectives d'un tel matériau. Pour cela, on rappelle qu'il est nécessaire de se prononcer sur la morphologie de la pâte de ciment, au moins de manière schématique et simplifiée. Les difficultés rencontrées dans la section précédente révèlent qu'il est indispensable de se baser sur différentes techniques d'observation, et ce à plusieurs échelles. On distingue ici trois échelles :

- L'échelle macroscopique est celle de la pâte. Un VER de ce matériau révèle les grains anhydres et les hydrates.
- L'échelle mésoscopique est celle des hydrates. Un VER de ce matériau distingue une phase solide et un espace poreux.
- L'échelle microscopique est celle de la phase solide des hydrates, considérée ici comme homogène.

On précise à partir d'observations la microstructure à l'échelle de la pâte et à l'échelle des hydrates.

À l'échelle de la pâte

L'observation d'une section polie de pâte de ciment hydratée (voir figure 8.10 gauche, sur laquelle le niveau de gris est d'autant plus clair que la phase correspondante est dense) laisse apparaître plusieurs zones :

- en blanc, des grains anhydres subsistant ;
- en gris et autour des zones blanches, des hydrates appelés « haute densité » ;
- en gris et noir plus ou moins intimement mélés, des hydrates appelés « basse densité » (présentant une porosité plus élevée que les hydrates haute densité, les pores apparaissant en noir) ;
- en gris clair, la portlandite (dont on ne tient pas compte dans cette approche simplifiée).

La distinction entre « hydrates haute densité » et « hydrates basse densité » a été proposée par de nombreux auteurs en ce qui concerne les C-S-H [121, 100, 29]. Cette séparation semble de plus confirmée par les observations au microscope à transmission à rayons X mous [65].

Les grilles obtenues par nano-indentation en balayant la surface d'une section polie de matériau (voir figure 8.10 droite, sur laquelle le niveau de gris est d'autant plus clair que la phase correspondante est rigide), confirment ces constats morphologiques, et apportent une information supplémentaire sur la rigidité des phases. Il semble ainsi légitime de séparer, du point de vue mécanique, les hydrates sous deux formes :

- les hydrates haute densité (ou *inner products*), précipitant autour des grains anhydres ;
- les hydrates basse densité (ou *outer products*), précipitant dans l'espace initialement rempli d'eau.

Du point de vue morphologique, il est raisonnable d'admettre que les hydrates basse densité forment une matrice poreuse dans laquelle sont plongées des inclusions composites formées d'un cœur anhydre entouré d'hydrates haute densité. En effet, même si les coupes 2D d'un matériau 3D peuvent être trompeuses, on n'a pas l'impression sur la figure 8.10 que les couches d'hydrates haute densité sont en contact direct les unes avec les autres. Du point de vue mécanique, les hydrates basse densité jouent le rôle de colle vis-à-vis des inclusions composites. On pressent donc que la prise de la pâte de ciment, c'est-à-dire l'apparition de propriétés mécaniques (élasticité,

résistance) non nulles, va être conditionnée par le fait que cette matrice poreuse acquiert un comportement de solide. Ce dernier fait son apparition lorsque la porosité de la matrice passe en dessous d'un seuil critique. En revanche, tant que cette porosité est au dessus du seuil, le constituant « matrice » du composite fait défaut et la pâte reste un fluide.

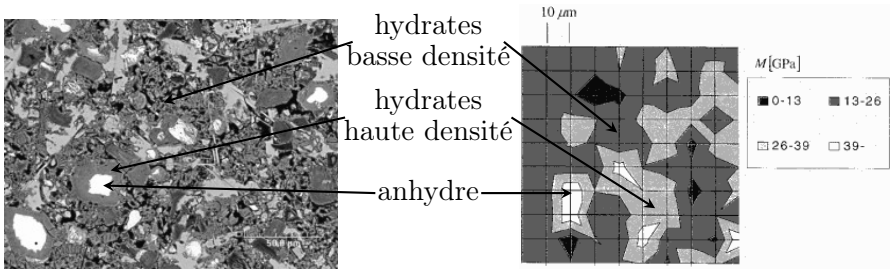


FIG. 8.10 – Section polie et grille de nano-indentation [22], pour une pâte à $e/c = 0.5$

À l'échelle des hydrates

La technique AFM (microscopie à force atomique) permet d'observer la croissance de C-S-H sur la surface d'un cristal de C_3S recouvert d'une solution saturée en chaux (figure 8.11). D'après [46], la croissance des C-S-H sur cette surface semble se faire par agrégation de petites particules aplaties de C-S-H, dont la plus grande face est initialement parallèle à la surface du cristal. Les dimensions de ces particules ont été mesurées à $60 * 30$ nm pour 5 nm d'épaisseur. On appellera dans toute la suite « briquettes élémentaires » ces petites particules (en faisant surtout référence à leurs dimensions). On suppose que l'ensemble des C-S-H (et par extension l'ensemble des hydrates, puisqu'on ne considère dans cette approche simplifiée qu'un seul type d'hydrates, les C-S-H) d'une pâte est formé de ces mêmes briquettes, agencées d'une manière qu'il reste à préciser. La porosité de l'arrangement des briquettes est susceptible de varier.

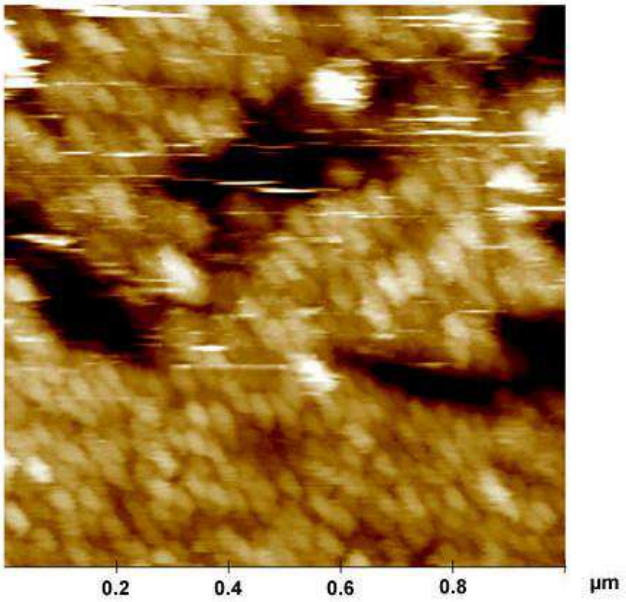


FIG. 8.11 – Observation par AFM de la croissance des C-S-H sur la surface d'un cristal de C_3S recouvert d'une goutte de solution saturée en chaux [46]

8.2.2 Modèle morphologique

Il s'agit maintenant de construire un modèle de microstructure rendant compte des observations morphologiques de la section 8.2.1. La figure 8.12 représente de manière très schématique le modèle proposé dans cette section. Il s'agit en particulier d'une représentation 2D d'un modèle qui est tridimensionnel. Les cercles représentent des sphères et les ellipses figurent en fait des particules aplaties.

Au sein d'un VER pris à l'échelle macroscopique (où les hydrates apparaissent comme une phase continue), des inclusions composites sphériques (un cœur anhydre entouré d'une couche d'hydrates haute densité) sont plongées dans une matrice d'hydrates basse densité. On suppose que ces sphères composites sont toutes homothétiques les unes par rapport aux autres. À l'échelle mésoscopique, on distingue la phase solide de l'espace poreux des hydrates haute et basse densité. La phase solide des deux types d'hydrates est formée des briquettes élémentaires de C-S-H mises en évidence dans [46] (section 8.2.1). Les deux matériaux se distinguent par leur porosité et leur morphologie.

Les hydrates haute densité sont supposés être formés d'un amas de briquettes élémentaires. Si les premières couches de briquettes sont bien parallèles à la surface du grain anhydre, on peut raisonnablement supposer que les briquettes suivantes se déposent de manière beaucoup moins ordonnée [46]. Pour simplifier, on considère une répartition isotrope de l'orientation de ces briquettes élémentaires. On suppose de plus que la porosité des hydrates haute densité est uniforme et invariable au cours de l'hydratation. Seule la fraction volumique de ces hydrates dans la pâte de ciment augmente au cours du temps. Les dimensions des briquettes étant de $5 * 30 * 60$ nm, la taille des pores des hydrates haute densité (espaces situés entre les briquettes) est de l'ordre de 5 à 60 nm, ce qui correspond grossièrement aux pores de gel (dont l'intervalle de tailles varie selon les auteurs, par exemple [89] indique 1 à 50 nm).

La phase « hydrates basse densité » renferme à la fois des pores de gel et des pores capillaires, dont les dimensions s'étaleraient de 50 nm à 20 µm, toujours selon [89]. On sent bien que pour atteindre de telles tailles, il est nécessaire de disposer de particules solides dont au moins l'une des dimensions est bien supérieure à celles des briquettes. Une première façon d'y parvenir (on en proposera une autre en fin de chapitre) est de considérer l'assemblage de plusieurs briquettes élémentaires, pour former des plaquettes (de forme aplatie). Par exemple, la mise bout à bout de 4 à 8 briquettes suffit à atteindre une taille de l'ordre de 250 nm. Au fur et à mesure de l'hydratation, de plus en plus de plaquettes précipitent dans l'espace initialement occupé par l'eau. Ainsi, la porosité des hydrates basse densité évolue au cours du temps. Par contre, on suppose que les plaquettes ont toujours la même forme. Ces dernières étant modélisées par des ellipsoïdes de révolution, la forme est caractérisée par un rapport d'aspect. Insistons sur le fait que nous appelons plaquettes les particules solides formant les hydrates basse densité et briquettes les particules solides formant les hydrates haute densité. Du point de vue mécanique, les plaquettes ont les mêmes caractéristiques que les briquettes.

En raison de l'existence de plusieurs échelles d'espace et de plusieurs constituants dans la pâte de ciment (anhydre, C-S-H haute et basse densité), il est utile de faire le point sur la notion de porosité. Il convient d'abord de signaler que les briquettes élémentaires, certes poreuses par nature en tant qu'assemblages de feuillets parallèles, sont néanmoins appréhendées de façon homogénéisée car leur porosité n'est pas accessible à l'échelle mésoscopique de la présente modélisation. Notons ensuite que la microstructure des hydrates haute densité leur confère une porosité interparticulaire dont la taille caractéristique est celle des particules elles-mêmes, typiquement 50 nm. On est donc dans l'ordre de grandeur couramment admis pour les pores de gel. Comme cela a été dit, les hydrates basse densité renferment l'espace poreux complémentaire, dans lequel la gamme de taille des pores est plus étendue, les plus grands objets correspondant à ce qu'il est convenu d'appeler pores capillaires.

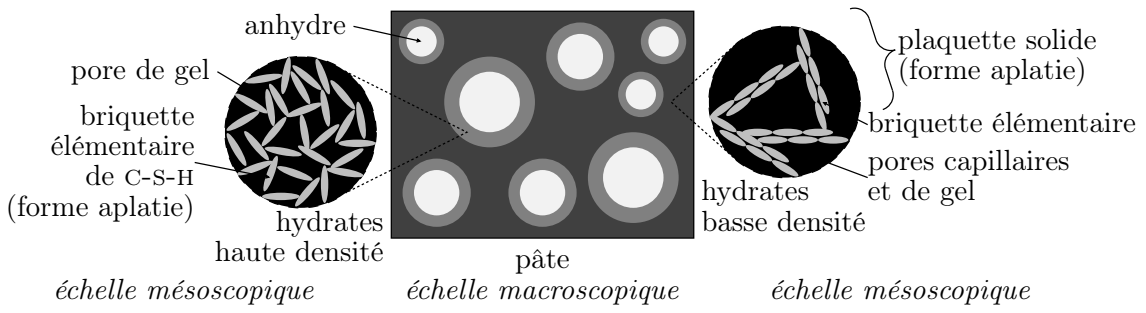


FIG. 8.12 – Représentation schématique du modèle morphologique à deux échelles de pâte de ciment proposé

Il est également utile de se pencher sur un scénario de précipitation des hydrates qui puisse donner naissance à une morphologie du type de celle que nous venons d'imaginer. Il s'agit de considérer séparément deux périodes : avant et après la prise, cette dernière correspondant au moment où les hydrates basse densité acquièrent un comportement de solide. Commençons par considérer la période avant prise. À l'instar du premier modèle (section 8.1), on retrouve une couche d'hydrates autour des grains anhydres, ce qui signifie qu'une partie des hydrates précipite au voisinage immédiat des particules de clinker. Cette couche est au départ très fine et localisée à la surface des particules anhydres. Ensuite, ce type d'hydrates se forme à la fois en place, en remplacement de l'anhydre qui vient de se dissoudre, et (éventuellement) à la périphérie de la couche d'hydrates haute densité déjà formée. Ainsi, dans chaque sphère composite, le rayon de l'interface anhydre - hydrates haute densité diminue, alors que le rayon externe de la calotte d'hydrates haute densité est appelé à augmenter (ou rester constant). Simultanément, les hydrates basse densité se densifient par précipitation de nouvelles plaquettes. La prise passée, les hydrates basse densité présentent un comportement de solide. Durant cette seconde période, le rayon externe de la calotte d'hydrates haute densité ne peut a priori plus varier, puisque les sphères composites sont à présent enchassées dans un matériau solide, les hydrates basse densité. La fraction volumique d'hydrates haute densité dans la pâte croît cependant par remplacement de l'anhydre. Remarquons que l'anhydre dissout peut, dans certains cas, ne pas être remplacé par des hydrates haute densité formés en place. Ceci conduit à la formation de « grains de Hadley » [51], c'est-à-dire des coques d'hydrates haute densité présentant un vide en leur centre. Les particules présentant cette spécificité étant minoritaires, on n'en tient pas compte dans le présent modèle. Quant aux hydrates basse densité, ils voient leur fraction volumique dans la pâte stagner, mais ceux-ci se densifient par précipitation de nouvelles plaquettes. La figure 8.13 schématise les évolutions qualitatives des fractions volumiques dans la pâte d'anhydre, d'hydrates haute densité et d'hydrates basse densité ainsi déduites du scénario de précipitation des hydrates considéré. Sur un tel graphe, la distance verticale séparant deux courbes consécutives correspond à la fraction volumique dans la pâte du constituant indiqué.

On précise maintenant les schémas d'homogénéisation proposés pour modéliser successivement l'élasticité effective des hydrates haute et basse densité (comportement effectif d'un VER à l'échelle mésoscopique), puis celle de la pâte (comportement effectif d'un VER à l'échelle macroscopique). Les schémas sont conçus afin de rendre compte du modèle morphologique développé dans cette section.

8.2.3 Modèle micromécanique

Les phases anhydre, hydrates haute et basse densité rencontrées dans un VER à l'échelle macroscopique sont respectivement notées par les indices a, hd et bd. Les deux types d'hydrates

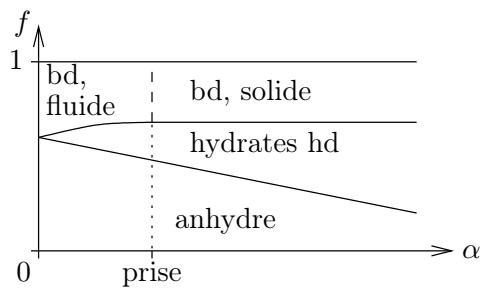


FIG. 8.13 – Évolution schématique des fractions volumiques d'anhydre et hydrates haute et basse densité dans la pâte, compatible avec le scénario de précipitation considéré dans le modèle développé ici

sont des matériaux poreux dont on distingue, dans un VER à l'échelle mésoscopique, la phase solide (représentée par un exposant s) et l'espace poreux (exposant p).

Hydrates haute densité

Le matériau « hydrates haute densité » est considéré comme un polycristal poreux dont les particules solides sont les briquettes élémentaires observées par Garrault-Gauffinet [46], de dimensions $5 * 30 * 60$ nm. Afin de simplifier le calcul, ces briquettes sont modélisées par des ellipsoïdes de révolution aplatis (*oblates*), dont le rapport d'aspect (défini comme le rapport entre le diamètre le long de l'axe de révolution et le diamètre dans le plan perpendiculaire à l'axe de révolution) serait $r^s_{hd} = 5/\sqrt{30 * 60} \approx 0.12$.

La morphologie étant aléatoire et de nature polycristalline, le schéma auto-cohérent est le mieux placé parmi les schémas d'homogénéisation classiques pour estimer la rigidité effective d'un tel milieu poreux. Notons que ce type de schéma prend en compte l'interaction entre les briquettes élémentaires dans l'esprit du désordre parfait [69]. Le schéma proposé ici se distingue cependant du schéma auto-cohérent usuel dans le sens où la sphère utilisée pour représenter la phase solide est remplacée par un ensemble d'ellipsoïdes de révolution d'orientation aléatoire. Le schéma est identique à celui employé pour le plâtre pris (section 4.2), détaillé et validé en section 2.2, à ceci près que les ellipsoïdes allongés (*prolates*) doivent être remplacés par des ellipsoïdes aplatis (*oblates*). On note φ_{hd} la porosité des hydrates haute densité.

Hydrates basse densité

Les hydrates basse densité présentant également une morphologie de type polycristal poreux avec particules solides aplaties (plaquettes), le schéma proposé est exactement le même que celui décrit ci-dessus pour les hydrates haute densité. Seuls les paramètres morphologiques rapport d'aspect (r^s_{bd}) et porosité (φ_{bd}) sont différents.

Pâte

La rigidité des deux types d'hydrates étant à présent calculée selon les schémas ci-dessus, et celle de l'anhydre étant supposée connue, on peut maintenant bâtir un schéma d'homogénéisation pour estimer l'élasticité de la pâte. Du point de vue morphologique, on rappelle que les hydrates basse densité sont considérés comme une matrice dans laquelle sont plongées des inclusions. Ces inclusions sont assimilées à des sphères composites formées d'un cœur anhydre entouré d'une calotte d'hydrates haute densité. On a déjà souligné le fait que cette idée de sphère composite

est communément rencontrée dans certains modèles d'hydratation et de microstructure de pâtes, tels que le modèle de Johnson et Jennings [62], Hymostruc [126, 127], ou µic [13].

Pour rendre compte d'une morphologie de type « matrice - inclusions » avec inclusions en sphères concentriques, il est courant de faire appel au schéma auto-cohérent généralisé en sphère à n couches, proposé dans [59] par Hervé et Zaoui. Ce type de modèle généralise le schéma à trois phases de Christensen et Lo [20]. Dans notre cas, il faut prendre $n = 4$, puisque les inclusions sont constituées de deux phases concentriques (voir figure 8.14). Remarquons qu'un tel schéma peut être associé à une distribution infiniment étalée de la taille des inclusions[1]. On s'affranchit ainsi du problème de prise instantanée qui affectait le modèle présenté en section 8.1 : seule la transition fluide - solide des hydrates basse densité commande la prise. En effet, les couches d'hydrates haute densité de deux inclusions distinctes n'entrent jamais en contact direct.

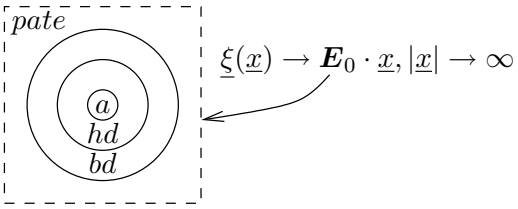


FIG. 8.14 – Schéma auto-cohérent généralisé à 4 couches proposé pour la pâte

8.2.4 Données d'entrée

Il est temps de faire un point sur l'avancement de notre démarche de modélisation. On a commencé par imaginer un modèle morphologique simplifié de pâte de ciment en cours d'hydratation (section 8.2.2) à partir d'informations recueillies par différents moyens d'observation (section 8.2.1). Ce modèle morphologique a été traduit en schéma d'homogénéisation, de manière aussi fidèle que possible, mais en introduisant quelques compromis de nature technique (section 8.2.3). Il en résulte une procédure numérique permettant d'estimer l'élasticité d'une pâte vue comme un matériau composite multiéchelle, à partir d'un certain nombre de données d'entrée. Ces dernières concernent les phases élémentaires et sont de deux natures : fractions volumiques et caractéristiques élastiques.

Fractions volumiques des différents constituants

Souhaitant suivre l'élasticité effective d'une pâte de ciment au cours de son hydratation, on a besoin des fractions volumiques des différents constituants en fonction du degré d'avancement α de la réaction d'hydratation, pour chaque valeur du rapport massique initial eau sur ciment e/c. Plus précisément, il est nécessaire de disposer des fractions volumiques dans la pâte d'anhydre (f_a), de solide (f^s_{hd}) et de pores (f^p_{hd}) d'hydrates haute densité, de solide (f^s_{bd}) et de pores (f^p_{bd}) d'hydrates basse densité.

Le point de départ est le modèle de Powers, déjà décrit en section 7.1.2. On exploite ici les expressions de f_a et f_h extraites de (7.5), et la porosité totale f_p (7.6).

[1] Le module de compression effectif de Christensen et Lo peut être interprété comme celui du « composite de Hashin » [53], microstructure obtenue par remplissage de l'espace par des sphères composites homothétiques de dimensions de plus en plus petites, jusqu'à un diamètre nul. Cette interprétation est évidemment aussi valable pour le schéma de Hervé et Zaoui.

Répartition des hydrates en haute et basse densité Tennis et Jennings [121] ont proposé un modèle quantitatif de répartition des C-S-H en haute densité (*inner products*) et basse densité (*outer products*). En conditions sèches, leur estimation de la masse de C-S-H basse densité rapportée à la masse totale de C-S-H s'écrit :

$$m_{bd} = 3.017\alpha e/c - 1.347\alpha + 0.538 \tag{8.17}$$

Cette relation a été obtenue par ajustement sur des données expérimentales disponibles pour des rapports eau sur ciment compris entre 0.25 et 0.50. Il convient donc d'éviter d'exploiter ce modèle trop en dehors de cet intervalle. Pour $e/c = 0.6$ et $\alpha > 0.997$, (8.17) n'est plus valide (l'expression donne $m_{bd} > 1$). Ainsi le rapport e/c maximum que l'on s'autorise à explorer dans le cadre de ce modèle est 0.6. Cela suppose déjà que la tendance exprimée par (8.17) reste valable pour $0.5 < e/c < 0.6$. Il n'y a pas de limite basse en termes de e/c qui rende (8.17) invalide (c'est-à-dire sortant de l'intervalle $[0, 1]$), au moins tant que le degré d'hydratation reste inférieur au degré d'hydratation ultime ($\alpha < \alpha^{ult}$ tel que défini par (7.7)), ce qui est toujours le cas. Dans le contexte de notre modèle, la phase solide des deux types d'hydrates est supposée avoir la même densité. La fraction massique m_{bd} se traduit donc directement en fraction volumique :

$$\frac{f_{bd}^s}{f_{bd}^s + f_{hd}^s} = m_{bd} \tag{8.18}$$

Modèle donnant les fractions volumiques de tous les constituants Rappelons que l'on cherche, dans la pâte, les fractions volumiques d'anhydre (f_a), de solide dans les hydrates basse (f_{bd}^s) et haute (f_{hd}^s) densité, et de pores dans les hydrates basse (f_{bd}^p) et haute (f_{hd}^p) densité. L'équation (8.18) est la première dont on dispose. On forme deux autres équations en écrivant la porosité totale et la quantité totale d'hydrate solide :

$$f_{bd}^p + f_{hd}^p = f_p \tag{8.19}$$

$$f_{bd}^s + f_{hd}^s = 1 - f_a - f_p \tag{8.20}$$

où f_p et f_a sont respectivement donnés par (7.6) et (7.5). L'expression de f_a, extraite de (7.5), forme une quatrième équation. Pour pouvoir déterminer complètement f_a, f_{bd}^s, f_{hd}^s, f_{bd}^p et f_{hd}^p, une cinquième relation est nécessaire. On suppose connue et indépendante de e/c et α (conformément à l'hypothèse de porosité constante des hydrates haute densité, voir section 8.2.2) la porosité φ_{hd} des hydrates haute densité :

$$\frac{f_{hd}^p}{f_{hd}^p + f_{hd}^s} = \varphi_{hd} \tag{8.21}$$

Les cinq fractions volumiques f_a, f_{hd}^s, f_{bd}^s, f_{hd}^p et f_{bd}^p peuvent alors être déterminées en fonction de φ_{hd}, e/c et α. La figure 8.15 représente l'évolution de celles-ci en fonction du degré d'avancement, pour $e/c = 0.3$ et 0.5, et pour $\varphi_{hd} = 0.3$ (ce choix sera justifié en section 8.3.1). Sur ce type de graphique, la distance verticale entre deux courbes consécutives représente la fraction volumique dans la pâte du constituant indiqué. Comme attendu, la fraction d'anhydre diminue au profit de celles d'hydrate solide et de pores.

On détermine enfin très simplement les quantités nécessaires au schéma d'homogénéisation développé en section 8.2.3 :

$$f_{hd} = f_{hd}^s + f_{hd}^p \quad \text{et} \quad \varphi_{bd} = \frac{f_{bd}^p}{f_{bd}^p + f_{bd}^s} \tag{8.22}$$

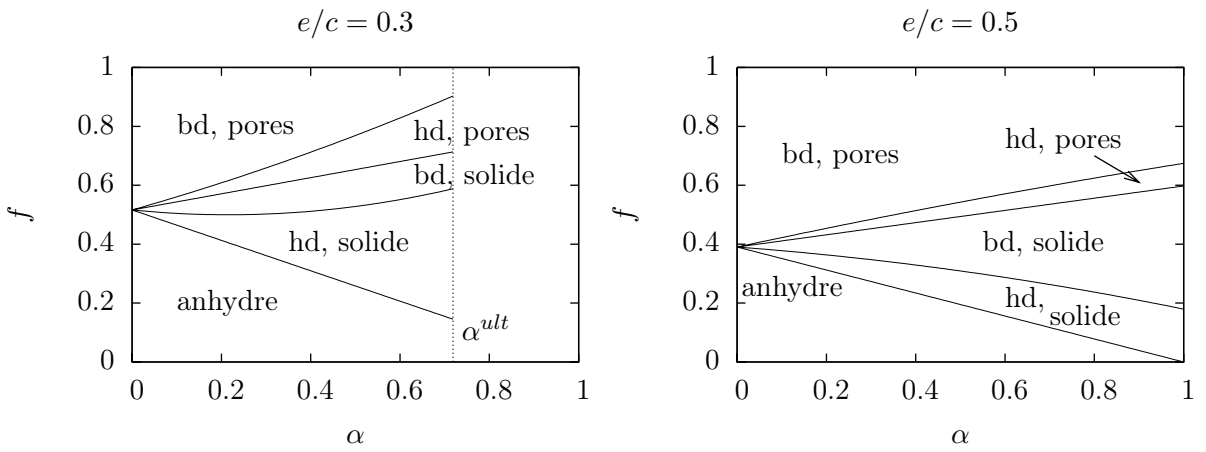


FIG. 8.15 – Répartition volumique des cinq phases constituant la pâte de ciment vue comme un milieu à deux échelles ($\varphi_{hd} = 0.3$)

Remarques sur ce modèle Le modèle qui vient d'être développé s'appuie sur les modèles de Powers [97] et de Jennings et Tennis [121]. Il présente le grand avantage de la simplicité d'implémentation. Cependant, nous allons voir qu'il ne semble pas pleinement compatible avec les évolutions des fractions volumiques attendues compte tenu du scénario de précipitation des hydrates (évolutions attendues schématisées sur la figure 8.13).

On représente sur la figure 8.16 les fractions volumiques dans la pâte de l'anhydre et des hydrates haute et basse densité en fonction du degré d'hydratation, pour les rapports eau sur ciment 0.3, 0.45 et 0.5. Pour $e/c = 0.45$, le volume cumulé d'anhydre et d'hydrates haute densité est quasiment constant tout au long de l'hydratation, ce qui est bien conforme à l'évolution attendue. Par contre, à $e/c = 0.3$, le modèle indique une évolution croissante du volume combiné d'anhydre et d'hydrates haute densité. Cela semble a priori difficilement compatible avec le scénario de précipitation des hydrates envisagé ici (voir en particulier la figure 8.13). En effet, une fois que la matrice d'hydrates basse densité a fait prise, cette dernière enchasse les sphères composites anhydre + hydrates haute densité, si bien que le rayon externe de ces sphères ne peut a priori plus augmenter. On peut néanmoins imaginer que les hydrates basse densité situés autour des sphères composites se densifient par précipitation privilégiée d'hydrates, pour former un matériau s'approchant des hydrates haute densité. Pour $e/c = 0.5$, on observe une diminution du volume cumulé d'anhydre et d'hydrates haute densité. Cela n'est pas compatible avec l'évolution attendue.

Ces remarques nous amènent à formuler quelques critiques sur le modèle qui vient d'être développé :

- Les hydrates ont été séparés en deux phases homogènes à l'échelle de la pâte (macroscopique) : basse et haute densité. Or dans la réalité, il est probable que la densité des hydrates varie de manière continue dans la pâte de ciment. Ne tenir compte que de deux familles représente peut-être une simplification un peu abrupte.
- La répartition volumique des phases obtenue par les modèles de Powers, Jennings et Tennis semble difficilement compatible avec le modèle morphologique présentant des sphères composites (cœur anhydre entouré d'une calotte d'hydrates haute densité) plongées dans une matrice d'hydrates basse densité.

Ainsi, le modèle micromécanique de pâte de ciment développé ici ne fournit qu'une vision approchée et schématique d'une réalité très complexe. Nous en sommes conscients. Néanmoins, ce modèle représente une première approche dont nous pourrons évaluer la pertinence par confron-

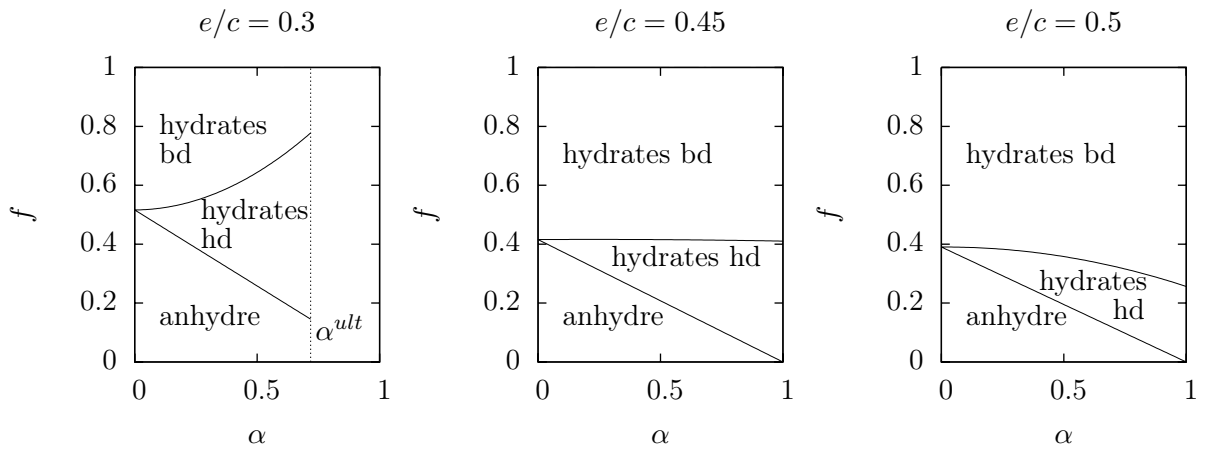


FIG. 8.16 – Répartition volumique dans la pâte de l'anhydre et des hydrates haute et basse densité, prévue par le modèle en fonction du degré d'hydratation

tation à des résultats expérimentaux.

Caractéristiques élastiques élémentaires

Les caractéristiques élastiques de la phase anhydre et des hydrates haute densité sont issues de mesures de nano-indentation : $E_a = 135$ GPa, $\nu_a = 0.3$ [128] et $E_{hd} = 31$ GPa, $\nu_{hd} = 0.24$ [129].

À l'échelle de la pâte, les hydrates basse densité se distinguent des hydrates haute densité et de l'anhydre dans le sens où leurs caractéristiques évoluent au cours du temps, c'est-à-dire sont fonctions du degré d'hydratation α par le biais de la porosité φ_{bd}, et sont de surcroît conditionnées par la valeur de e/c. Dans ces conditions, les techniques de nano-indentation ne peuvent fournir qu'un instantané de la rigidité de ces derniers. C'est pourquoi il a fallu développer un schéma d'homogénéisation propre à ceux-ci en section 8.2.3. L'estimation des caractéristiques élastiques de ces hydrates dépend en outre de la rigidité (notée $\mathbb{C}_s$) du solide constituant les briquettes élémentaires. Cette rigidité n'est malheureusement pas accessible par nano-indentation classique du fait de la taille trop petite des briquettes.

La rigidité des briquettes élémentaires peut cependant être évaluée par analyse inverse des caractéristiques des hydrates haute densité, puisque celles-ci sont fixes dans le temps et ont par ailleurs été mesurées (on rappelle $E_{hd} = 31$ GPa et $\nu_{hd} = 0.24$ [129]). Les modules k_{hd}, μ_{hd} issus de l'équation analogue à (2.16) dépendent des modules k_s, μ_s des briquettes, du rapport d'aspect r^s_{hd} des briquettes et de la porosité φ_{hd} des hydrates haute densité. On a determiné $r^s_{hd} \approx 0.12$ en section 8.2.3 à partir des dimensions des briquettes. Quant à la porosité, Tennis et Jennings [121] ont proposé 0.35 et 0.30 par des considérations de densité. La valeur 0.28 (porosité de gel) a été proposée auparavant par Powers. On utilisera dans toute la suite la valeur intermédiaire $\varphi_{hd} = 0.3$. L'analyse inverse de l'élasticité des hydrates haute densité peut à présent être réalisée en exploitant le modèle de la section 8.2.3 : elle mène à $E_s = 72$ GPa et $\nu_s = 0.27$.

8.3 Mise en œuvre et confrontation expérimentale

Pour mettre en œuvre le schéma d'homogénéisation conçu en section 8.2.3, il est nécessaire de disposer de données de nature géométrique (fractions volumiques) et de données de nature mécanique (caractéristiques élastiques), comme détaillé ci-dessus. Pour être complet, il manque en fait un dernier paramètre : le rapport d'aspect des plaquettes solides constituant les hydrates

basse densité. Les simulations issues du schéma auto-cohérent utilisé pour modéliser les hydrates basse densité, et reportées sur les figures 2.9 et 2.13 ont montré que le rapport d'aspect affecte la porosité critique caractérisant l'annulation de la rigidité effective. Il semble donc raisonnable de penser que le rapport d'aspect optimal peut être calibré sur des données expérimentales concernant le degré d'hydratation de prise, dans la mesure où la prise se définit comme une transition de l'état liquide à celui de solide doué de rigidité (et de résistance).

8.3.1 Calibration de la forme des ellipsoïdes des hydrates basse densité

On exploite ici les estimations expérimentales du degré d'hydratation de prise, disponibles pour quelques e/c, issues de [122], et reprises dans la table 7.1 (page 93). Comme les valeurs $e/c > 0.6$ nous sont interdites (rappelons que la partition (8.17) entre hydrates haute et basse densité n'est dans ce cas plus valide), nous n'exploiterons pas la dernière ligne de la table, correspondant à $e/c = 0.65$.

Dans le présent modèle, nous avons vu que les hydrates basse densité jouent le rôle de matrice, c'est-à-dire de « colle » entre les objets composites formés d'anhydre entouré d'hydrates haute densité. C'est pourquoi la rigidité de la pâte commence à augmenter à partir de 0 dès que les hydrates basse densité acquièrent un comportement de solide, ce qui se produit quand la porosité de ces derniers atteint un seuil critique, autrement dit, lorsque suffisamment de plaquettes se sont formées. Cette porosité peut s'exprimer en fonction du rapport e/c et du degré d'hydratation α à l'aide de (8.22), ce qui donne de façon formelle $\varphi_{bd} = \Phi(e/c, \alpha)$. Par ailleurs, la porosité critique des hydrates basse densité est une fonction du seul rapport d'aspect des plaquettes : $\varphi^c(r^s_{bd})$ (voir figure 2.13). L'estimation auto-cohérente $\alpha_0^{AC}(e/c)$ du degré d'hydratation de prise est alors la solution de $\varphi^c(r^s_{bd}) = \Phi(e/c, \alpha_0^{AC}(e/c))$. Le rapport d'aspect r^s_{bd} doit être optimisé afin de minimiser la distance entre les résultats expérimentaux $\alpha_0^{exp}(e/c)$ et l'estimation auto-cohérente $\alpha_0^{AC}(e/c)$.

La valeur optimale du rapport d'aspect des plaquettes est $r^s_{bd} = 0.033$ (voir la partie gauche de la figure 8.17). À e/c donné, le degré d'hydratation de prise ne dépend que très peu du choix de la porosité φ_{hd} des hydrates haute densité (partie droite de la figure 8.17). Le choix plus ou moins arbitraire $\varphi_{hd} = 0.3$ n'a ici pas grande influence.

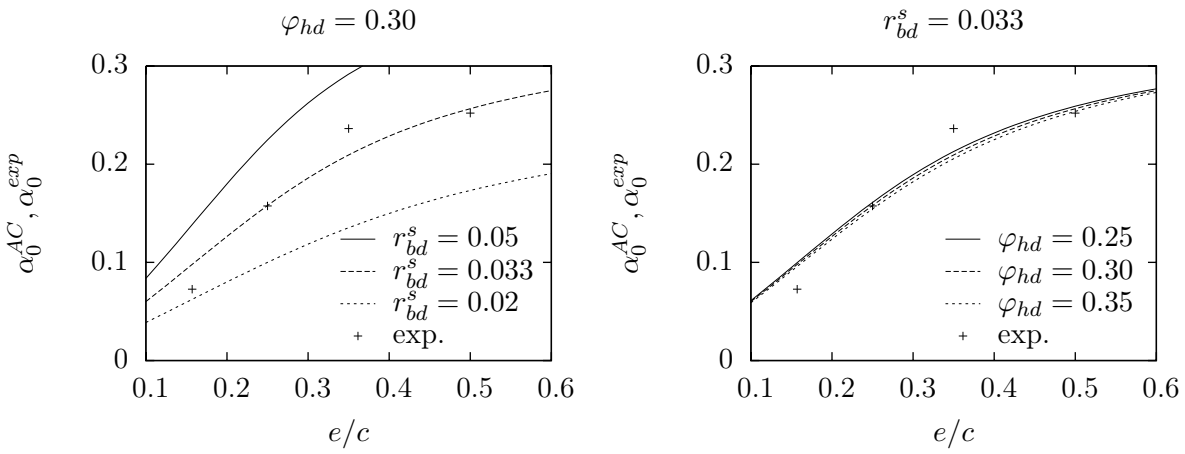


FIG. 8.17 – Estimation auto-cohérente du degré d'hydratation de prise (courbes) et valeurs expérimentales issues de [122] (points)

Le rapport d'aspect optimal $r^s_{bd} = 0.033$ déterminé pour les plaquettes des hydrates basse densité ne correspond pas à celui des briquettes des hydrates haute densité ($r^s_{hd} = 0.12$). A pos-

teriori, la détermination d'un rapport d'aspect de l'ordre de 1/30 crédite la notion de plaquette introduite pour la phase basse densité, et définie comme une juxtaposition de briquettes élémentaires. Notons cependant que la morphologie précise des hydrates basse densité reste, à ce jour, très mal définie dans la littérature. Le concept d'amas de plaquettes ne représente probablement qu'une vision assez simpliste de la microstructure de ces derniers. La question est de savoir si cette modélisation est suffisante pour rendre raisonnablement compte de l'élasticité d'une pâte de ciment.

8.3.2 Évolution du module de Young de la pâte en cours d'hydratation

Toutes les données nécessaires pour implémenter le modèle sont à présent rassemblées (voir table 8.2). On compare ici les prédictions du modèle avec les résultats expérimentaux de [52], décrits en section 7.3.1.

	E (GPa)	ν
anhydre (a)	135	0.3
hydrates haute densité (hd)	31	0.24
phase solide des hydrates (s)	72	0.27

r^s_{hd}	0.12
r^s_{bd}	0.033
φ_{hd}	0.3

TAB. 8.2 – Données d'entrée des simulations

Ces données expérimentales et les prédictions du modèle sont superposées sur la figure 8.18. L'accord est très bon sur toute la gamme de rapports e/c. On insiste sur le fait que les simulations sont basées sur des paramètres tirés de la littérature (et en particulier issus de sources autres que le papier [52] de Haecker *et al.*) sans qu'aucun ajustement avec les données de Haecker n'ait été nécessaire. Il est intéressant de noter que les degrés d'hydratation couverts par les données expérimentales de la figure 8.18 correspondent à un état avancé de la réaction d'hydratation, « loin » de la prise ; alors que le seul paramètre du modèle qui a été ajusté a précisément été optimisé pour rendre compte de la prise.

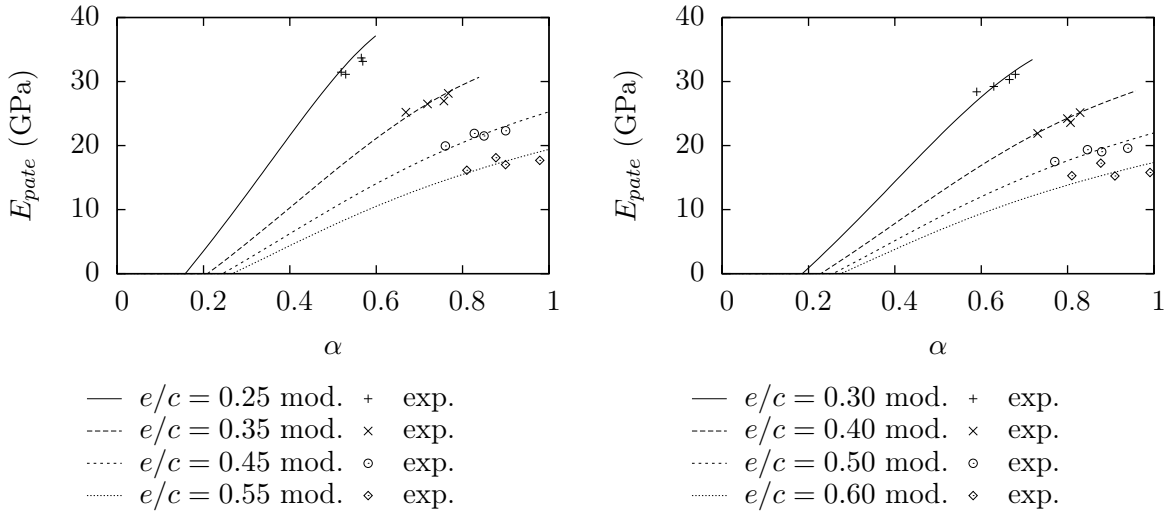


FIG. 8.18 – Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation, estimé par homogénéisation des milieux aléatoires (lignes), et mesuré expérimentalement (points) [52]

La figure 8.19 représente le module de Young estimé de la pâte non plus en fonction du

degré d'hydratation, mais en fonction de la porosité capillaire (graphique de gauche) ou totale (graphique de droite) de la pâte, toujours pour différentes valeurs du rapport e/c. Comme attendu de façon intuitive, à e/c donné, la rigidité de la pâte augmente à mesure que la porosité diminue. Il est délicat de comparer entre elles les différentes courbes, car un niveau de porosité donné peut correspondre à différents degrés d'avancement, selon le e/c. Toujours est-il que la seule variable porosité *ne permet pas* de décrire les caractéristiques mécaniques d'une pâte de ciment. En effet, les courbes sont loin d'être confondues. C'est une conséquence de la grande complexité de la morphologie des pâtes. En particulier, la phase solide (complémentaire de l'espace poreux) de la pâte n'est pas homogène dans le cas général.

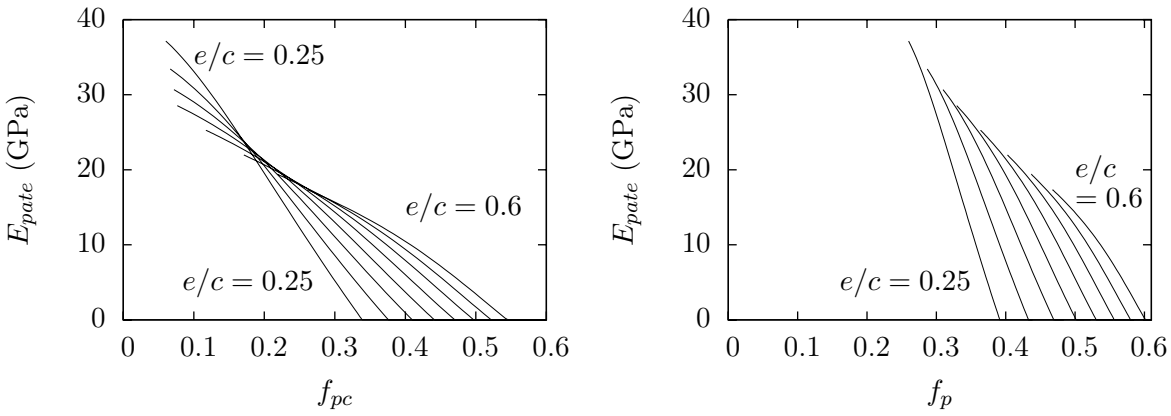


FIG. 8.19 – Module de Young estimé de pâtes de ciment en cours d'hydratation, représenté en fonction de la porosité capillaire (à gauche) ou totale (à droite), pour différents e/c compris entre 0.25 et 0.6

8.3.3 Module de Young de la pâte en fin d'hydratation

On s'intéresse maintenant aux pâtes de ciment suffisamment agées pour que le processus d'hydratation puisse être considéré comme arrivé à terme. Le degré d'hydratation α des pâtes considérées ici est donc estimé par le degré d'hydratation ultime α^{ult} (7.7) tel que prévu par le modèle de Powers. Les simulations sont toujours basées sur les données d'entrée rassemblées dans la table 8.2. Les données expérimentales sont issues des travaux de Helmuth et Turk [58], et présentées en section 7.3.1.

La figure 8.20 compare ces données expérimentales avec les prédictions du modèle. La courbe présente un point anguleux pour $e/c = \kappa_e/\rho_a$ ($= 0.42$), qui correspond à la transition entre un matériau contenant à la fois de l'anhydre, des hydrates et des pores et un matériau ne contenant que des hydrates et des pores. En fait, dans l'état d'hydratation ultime, toute la phase anhydre a réagi pour $e/c > \kappa_e/\rho_a$, alors que des cœurs anhydres subsistent pour $e/c < \kappa_e/\rho_a$.

Le modèle surestime légèrement les modules expérimentaux pour $e/c > 0.4$ et les sous-estime pour $e/c \approx 0.3$. Pour tenter d'éclairer cette surestimation des données expérimentales, on peut avancer le fait que l'état d'hydratation ultime tel que prévu par le modèle de Powers et exploité dans les simulations n'est en fait jamais atteint expérimentalement. Une autre raison de l'écart observé entre mesures et simulation peut être le fait que l'on ne tient compte dans cette première approche que des C-S-H comme hydrates. Un modèle plus élaboré devrait évidemment intégrer les autres hydrates (portlandite, aluminates, ...).

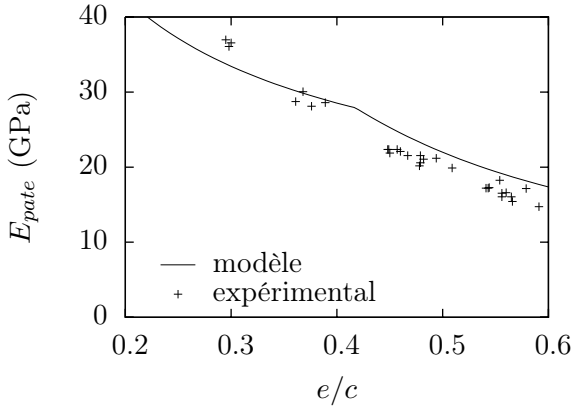


FIG. 8.20 – Module de Young de pâtes complètement hydratées, estimé par le modèle et mesuré expérimentalement [58]

8.4 Quelques remarques sur le modèle

Le modèle qui vient d'être développé, et confronté à deux jeux de données expérimentales, appelle un certain nombre de remarques.

8.4.1 Module de Young des hydrates basse densité

On représente sur la figure 8.21 l'évolution du module de Young effectif des hydrates basse densité, formant la matrice de la pâte, en fonction du degré d'hydratation pour quelques valeurs du rapport e/c. Comme attendu, cette évolution est strictement croissante. Il est intéressant de noter que le module de Young à hydratation complète ($\alpha = \alpha^{ult}$ défini par (7.7)) n'apparaît pas comme une fonction monotone du rapport e/c. Par ailleurs, ce dernier se trouve être du même ordre de grandeur que les valeurs mesurées par nano-indentation sur pâtes matures : 20 ± 2 GPa à $e/c = 0.18$ dans [129], et 21.7 ± 2.2 GPa à $e/c = 0.5$ dans [23].

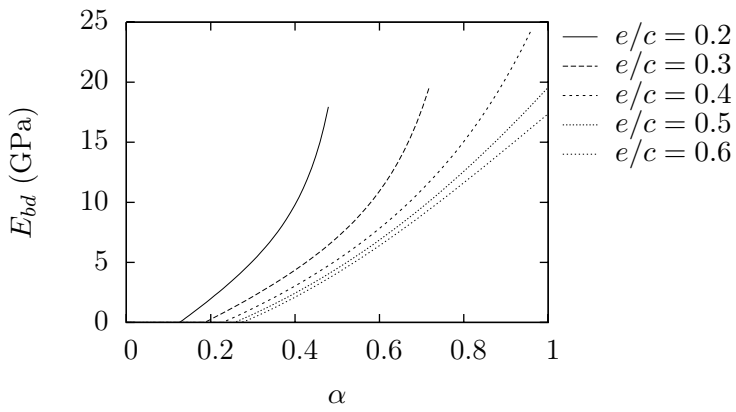


FIG. 8.21 – Module de Young estimé des hydrates basse densité, pour différentes valeurs de e/c

8.4.2 Schéma d'homogénéisation alternatif à l'échelle de la pâte

Le schéma proposé à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire pour homogénéiser un VER de pâte (voir la section 8.2.3 et en particulier la figure 8.14), est un schéma de Hervé et Zaoui [59] à 4 couches concentriques.

Une approche alternative, et relativement courante pour rendre compte de morphologies de type « matrice-inclusions », consiste à exploiter un schéma de Mori Tanaka généralisé (figure 8.22). Le caractère généralisé renvoie à la notion de motif morphologique représentatif [14, 116, 132], que l'on a déjà eu l'occasion de manier en section 8.1.1.

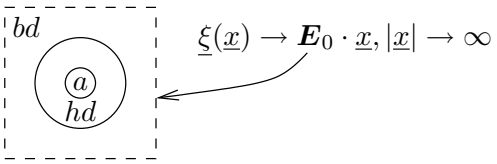


FIG. 8.22 – Problème auxiliaire d'élasticité à résoudre pour mettre en œuvre le schéma de Mori Tanaka généralisé proposé comme modèle alternatif de la pâte

La figure 8.22 représente un problème d'Eshelby généralisé mettant en jeu une sphère composite incluse dans un milieu infini de rigidité $\mathbb{C}_{bd}$. L'annexe C.1 propose une méthode de résolution inspirée de [59]. Les déformations moyennes $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_a$ et $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{hd}$ peuvent s'écrire sous la forme :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_a = \mathbb{A}_a : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{et} \quad \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{hd} = \mathbb{A}_{hd} : \boldsymbol{E}_0 \tag{8.23}$$

avec les tenseurs isotropes $\mathbb{A}_a$ et $\mathbb{A}_{hd}$. Le schéma de Mori Tanaka tient compte des interactions entre les inclusions en prenant comme déformation de référence $\boldsymbol{E}_0$ la déformation moyenne dans la matrice :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{bd} = \boldsymbol{E}_0 \tag{8.24}$$

L'estimation de Mori Tanaka de la rigidité effective de la pâte (notée par l'indice *pate*) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_{pate} \quad = \quad & [f_a \mathbb{C}_a : \mathbb{A}_a + f_{hd} \mathbb{C}_{hd} : \mathbb{A}_{hd} + (1 - f_a - f_{hd}) \mathbb{C}_{bd}] : \\ & [f_a \mathbb{A}_a + f_{hd} \mathbb{A}_{hd} + (1 - f_a - f_{hd}) \mathbb{I}]^{-1} \end{aligned} \tag{8.25}$$

où f_i désigne la fraction volumique de la phase i dans la pâte.

À la différence du schéma de Mori Tanaka classique pour lequel les inclusions sont homogènes, le schéma généralisé mis en œuvre dans l'équation ci-dessus ne se traduit pas par des expressions analytiques simples du module de Young et du coefficient de Poisson effectifs.

L'écart sur le module de Young effectif de la pâte, entre le schéma auto-cohérent généralisé à 4 couches et le schéma de Mori Tanaka généralisé, s'avère être parfaitement négligeable (figure 8.23). Ainsi, l'un ou l'autre des schémas peut être mis à profit pour homogénéiser un VER à l'échelle macroscopique, selon la simplicité d'implémentation ou tout autre critère pratique.

8.4.3 Influence de la forme des particules d'hydrates basse densité

On a considéré les hydrates basse densité comme une mousse poreuse formée d'un amas de plaquettes de dimension supérieure aux briquettes élémentaires de C-S-H. Or la morphologie précise des hydrates basse densité reste à ce jour très mal définie dans la littérature. Les observations au MEB, si tant est que l'on puisse supposer que le fait même d'observer ne dégrade pas ce que l'on observe, ne permettent pas a priori de trancher (voir par exemple la figure 8.24). Si sur cette

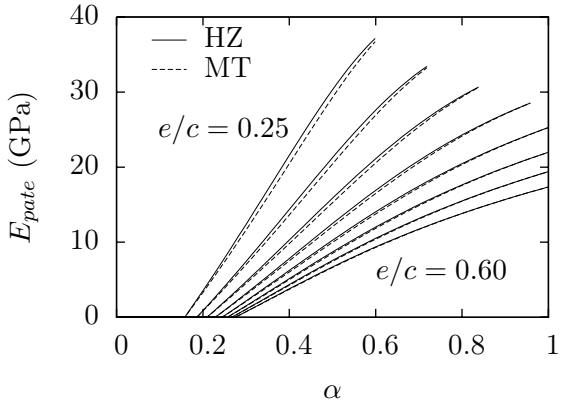


FIG. 8.23 – Module de Young de la pâte, pour des e/c entre 0.25 et 0.6, estimé par un schéma auto-cohérent généralisé à 4 couches (HZ) ou par un schéma de Mori Tanaka généralisé (MT)

figure on repère clairement la forme des cristaux d'ettringite (aiguilles) et de portlandite (plaquettes) ; en revanche, en ce qui concerne les C-S-H, la forme est nettement moins bien définie. En effet, on observe une mousse poreuse ressemblant plus ou moins à une « éponge ».

On peut alors se demander quelle est l'influence de la forme des particules solides constituant les hydrates basse densité sur le module de Young de la pâte. Pour des raisons techniques de faisabilité des calculs dans un temps raisonnable, on n'explore ici que les formes ellipsoïdales de révolution. Même si cela peut sembler assez restrictif, cela permet tout de même de considérer des formes allant de la plaquette à l'aiguille en passant par la sphère. On propose alors de remplacer les *oblates* utilisés jusqu'à présent par des *prolates*, ellipsoïdes de révolution allongés. Comme précédemment (section 8.3.1), le rapport d'aspect de ces particules est ajusté de façon à reproduire au mieux les données sur la prise (table 7.1).

Pour cela, on exploite le graphe de la figure 2.13, pour déterminer le rapport d'aspect $r_{bd}^{s,p}$ de *prolates* assurant la même porosité critique que le rapport d'aspect $r_{bd}^{s,o} = 0.033$ des *oblates* mis en œuvre jusqu'ici. On obtient $r_{bd}^{s,p} = 19$. Sans modifier aucun autre paramètre que cette forme des particules solides des hydrates basse densité (en particulier on conserve les autres données d'entrée de la table 8.2), on obtient les modules de Young de pâte représentés sur la figure 8.25. L'accord vis-à-vis des données expérimentales est clairement moins bon que précédemment (comparer les figures 8.25 et 8.18). Le modèle sous-estime systématiquement les données expérimentales. En fait, on a déjà noté en section 2.2.1 que le module de Young effectif d'un polycristal poreux constitué d'aiguilles ($r^s \to \infty$) est plus faible que celui d'un polycristal constitué de plaquettes ($r^s \to 0$), à porosité identique : voir figure 2.9.

Ainsi, du point de vue de la prédiction du module de Young effectif de la pâte, la description des hydrates basse densité à l'aide de plaquettes donne de bien meilleurs résultats qu'avec des particules allongées. Cela ne signifie pas pour autant que les hydrates basse densité soient effectivement constitués d'un amas de plaquettes : la réalité est certainement bien plus complexe. Néanmoins, on va conserver ici le modèle à plaquettes, qui assure une estimation raisonnable de l'élasticité d'une pâte en cours d'hydratation.

8.4.4 Retour sur la rigidité des briquettes élémentaires

L'analyse inverse de l'élasticité des hydrates haute densité nous a permis d'évaluer les caractéristiques élastiques de la phase solide constituant les briquettes élémentaires de C-S-H : $E_s = 72$ GPa et $\nu_s = 0.27$. Notons qu'il existe d'autres moyens de quantifier ces caractéristiques

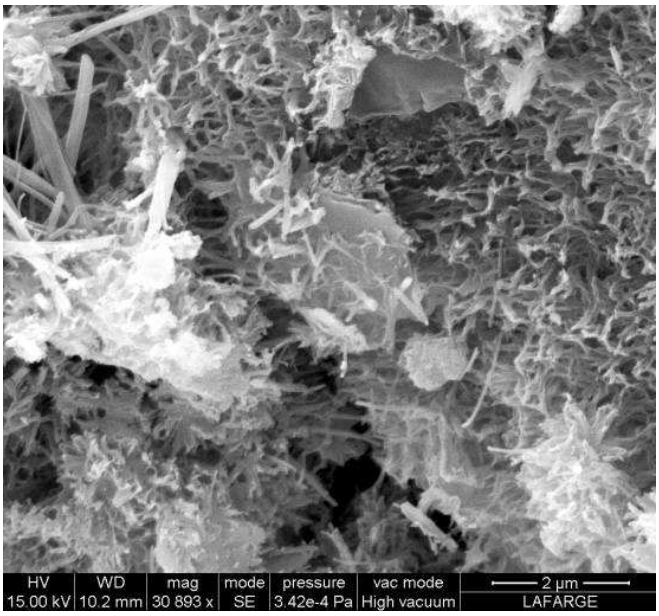


FIG. 8.24 – Observation au MEB des hydrates d'un béton standard (B25) ; on distingue en haut à gauche des aiguilles d'ettringite, vers le centre une plaquette de portlandite en partie recouverte, et des C-S-H, présentant une microstructure de type « mousse » ou « éponge », notamment sur la droite de l'image

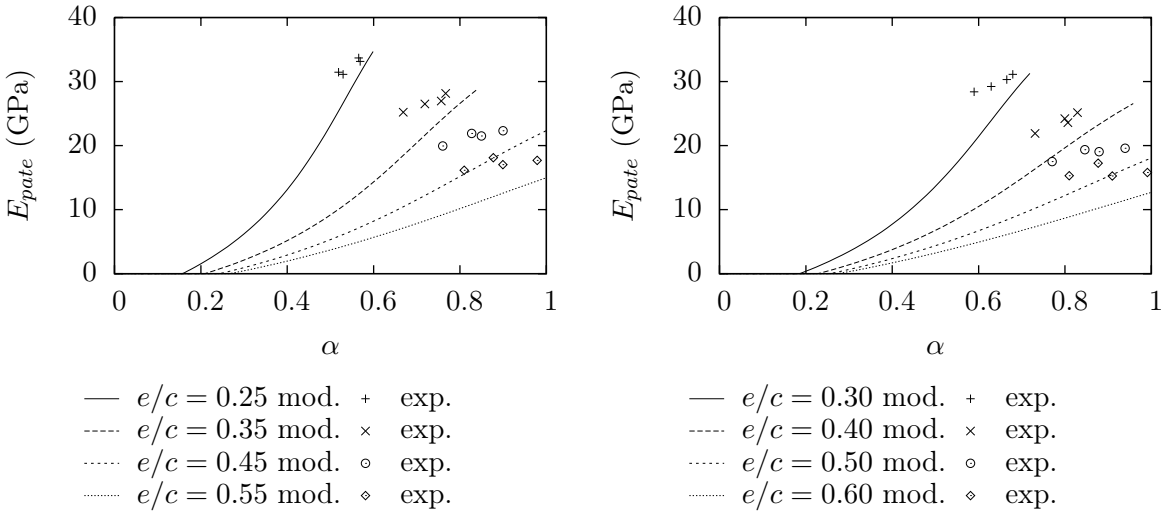


FIG. 8.25 – Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation, estimé par homogénéisation des milieux aléatoires en représentant par des particules allongées la phase solide des hydrates basse densité (lignes), et mesuré expérimentalement (points) [52]

élastiques.

Pellenq *et al.* [91] ont déterminé par modélisation à l'échelle atomique les modules élastiques de la tobermorite, un matériau souvent décrit comme analogue au solide constituant les briquettes élémentaires de C-S-H. Sur la tobermorite de rapport $C/S = 0.83$[2], avec 14 molécules d'eau par maille et pour une distance interlamellaire de 1.4 nm, soit au maximum de stabilité, les modules de Young calculés valent 54 GPa dans la direction perpendiculaire aux feuillets, 68 et 72 GPa dans les directions parallèles aux feuillets [90].

Plassard [94] a mesuré par nano-indentation à l'aide d'une pointe AFM (procédé permettant d'accéder à des échelles inférieures à celles atteintes par la nano-indentation classique de [124]) le module de Young dans la direction perpendiculaire aux feuillets d'une briquette élémentaire de C-S-H. Il a obtenu un module de Young de l'ordre de 300 GPa pour les C-S-H placés dans des conditions similaires à celles régnant dans un béton courant.

Non seulement la microstructure des C-S-H n'est pas très clairement définie, mais de plus le consensus semble loin d'être atteint sur les caractéristiques élastiques de la briquette élémentaire. En effet, on peut observer un rapport de 6 entre les résultats d'un calcul à l'échelle atomique et des mesures par AFM. C'est pourquoi nous avons préféré procéder par analyse inverse. Nous avons d'ailleurs obtenu un module de Young du même ordre de grandeur que ceux calculés par Pellenq *et al.* (72 GPa contre 54, 68 et 72 GPa). Par ailleurs, du fait de la microstructure feuilletée des briquettes élémentaires, prendre une rigidité isotrope reste une simplification. Pour aller plus loin, il serait judicieux de donner une rigidité isotrope transverse aux briquettes. Une piste pour estimer cette rigidité isotrope transverse par démarche de changement d'échelle serait, outre le calcul à l'échelle atomique [91], d'introduire une troisième échelle dans notre modèle, l'échelle microscopique. Cette échelle est celle de la briquette élémentaire de C-S-H. Un VER à cette échelle révèle les feuillets et le milieu interstitiel. L'homogénéisation du comportement d'un tel VER pourrait être conduite en s'inspirant de [31], qui concernait plutôt les argiles.

8.4.5 Module de Young de la pâte au très jeune âge

Les données expérimentales sur l'élasticité exploitées jusqu'ici concernaient des pâtes plutôt agées (plus de 14 jours). Les essais mécaniques classiques (compression simple par exemple) sont délicats à réaliser sur des pâtes de très jeune âge, ce qui explique leur plus grande rareté.

Les seules données propres au très jeune âge de la pâte exploitées jusqu'à maintenant sont les degrés d'hydratation de prise de [122]. Ces degrés d'hydratation de prise ont été obtenus par régression linéaire sur des points expérimentaux présentant la résistance à la compression en fonction du degré d'hydratation. Comme on l'a noté en section 7.3.3, le degré d'hydratation de prise réel peut très bien être inférieur à celui évalué par [122]. Ainsi, l'évolution du module de Young en fonction du degré d'hydratation peut démarrer de façon plus précoce que ce que le modèle donne (comme schématisé sur la figure 8.26). Cette hypothèse va être confirmée par les essais au très jeune âge de Boumiz.

Boumiz [15] a mesuré l'élasticité de pâtes de C_3S au très jeune âge par ultrasons (voir section 7.3.1). Ces pâtes étant saturées d'eau, les modules élastiques obtenus sont les modules non drainés. En effet, la théorie poromécanique [26] définit deux cas extrêmes pour le tenseur de rigidité d'un milieu poroélastique saturé :

- raideur drainée, en l'absence de pression dans les pores ;
- raideur non drainée, en l'absence d'échange de fluide avec l'extérieur.

Jusqu'à présent, les modèles mis en place se sont concentrés sur la raideur drainée. Il s'agit donc à présent de déterminer la raideur non drainée, nécessaire pour comparer les estimations micromécaniques aux mesures par ultrasons.

[2] Rapport C/S : rapport entre le nombre d'atomes de calcium et le nombre d'atomes de silicium dans la maille cristalline.

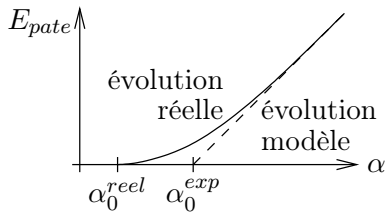


FIG. 8.26 – Représentation schématique de la probable évolution réelle du module de Young (trait plein), confrontée à l'évolution modélisée (trait interrompu)

Modules effectifs non drainés

Il existe un lien entre la raideur effective drainée ($\mathbb{C}_{hom}$) et non drainée ($\mathbb{C}_{hom}^{nd}$) d'un milieu poreux saturé [30] :

$$\mathbb{C}_{hom}^{nd} = \mathbb{C}_{hom} + M\boldsymbol{B} \otimes \boldsymbol{B} \tag{8.26}$$

avec $\boldsymbol{B}$ le tenseur de Biot et M le module de Biot du milieu poreux. Lorsque le matériau est macroscopiquement isotrope, cette relation se traduit en termes de modules de compression et de cisaillement :

$$k_{hom}^{nd} = k_{hom} + Mb^2 \quad \text{et} \quad \mu_{hom}^{nd} = \mu_{hom} \tag{8.27}$$

avec b le coefficient de Biot (tel que $\boldsymbol{B} = b\mathbf{1}$). Lorsque, de plus, la phase solide est homogène et isotrope (les modules de compression et de cisaillement étant respectivement notés k_s et μ_s), le coefficient de Biot et le module de Biot du matériau poreux s'écrivent [30] :

$$b = 1 - \frac{k_{hom}}{k_s} \quad \text{et} \quad M = \frac{k_s}{b - \varphi} \tag{8.28}$$

Comme les hydrates haute et basse densité sont des milieux poreux dont la phase solide est considérée homogène et isotrope, leurs modules non drainés se calculent à partir des modules drainés (voir section 8.2.3), en exploitant (8.27) et (8.28).

Les modules élastiques non drainés de la pâte sont estimés de la même façon que décrit en section 8.2.3, les modules drainés des hydrates basse et haute densité devant être remplacés par leurs équivalents non drainés. Cette démarche suppose l'absence d'échange d'eau entre les hydrates basse et haute densité, et avec l'extérieur.

Confrontation expérimentale

En partie gauche de la figure 8.27, on superpose les données expérimentales et les prédictions issues du modèle, obtenues à partir des données d'entrée rassemblées dans la table 8.2. L'accord n'est pas très bon, surtout au très jeune âge ($\alpha < 0.3$). L'écart entre modèle et expérience peut être quantifié par la racine de l'écart quadratique moyen :

$$\text{erreur} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(E_i^{exp} - E_i^{mod})^2}{n}} \tag{8.29}$$

n étant le nombre de points expérimentaux, et avec E_i^{exp} et E_i^{mod} les modules de Young expérimental et modélisé correspondants au point $i = 1 \ldots n$. Cette erreur vaut ici 2.36 GPa. Le modèle requiert clairement des améliorations au jeune âge. De plus, le degré d'hydratation de prise mesuré par ultrasons est très différent[3] de celui exploité en section 8.3.1 et issu de [122]. Ainsi,

[3] Les travaux de Boumiz *et al.* [15] indiquent des degrés d'hydratation de prise bien plus faibles que ceux estimés par Torrenti et Benboudjema [122]. L'existence de divergences aussi significatives sur la valeur du degré

on peut tenter de recalculer le rapport d'aspect optimal r^s_{bd} des plaquettes des hydrates basse densité, en minimisant l'erreur entre les données expérimentales et les prédictions du modèle. En réalisant une telle optimisation indépendamment pour chaque rapport e/c, on obtient les résultats donnés dans la table 8.3. Cela améliore un peu l'accord entre les données expérimentales et les prédictions, comme le montre la partie droite de la figure 8.27.

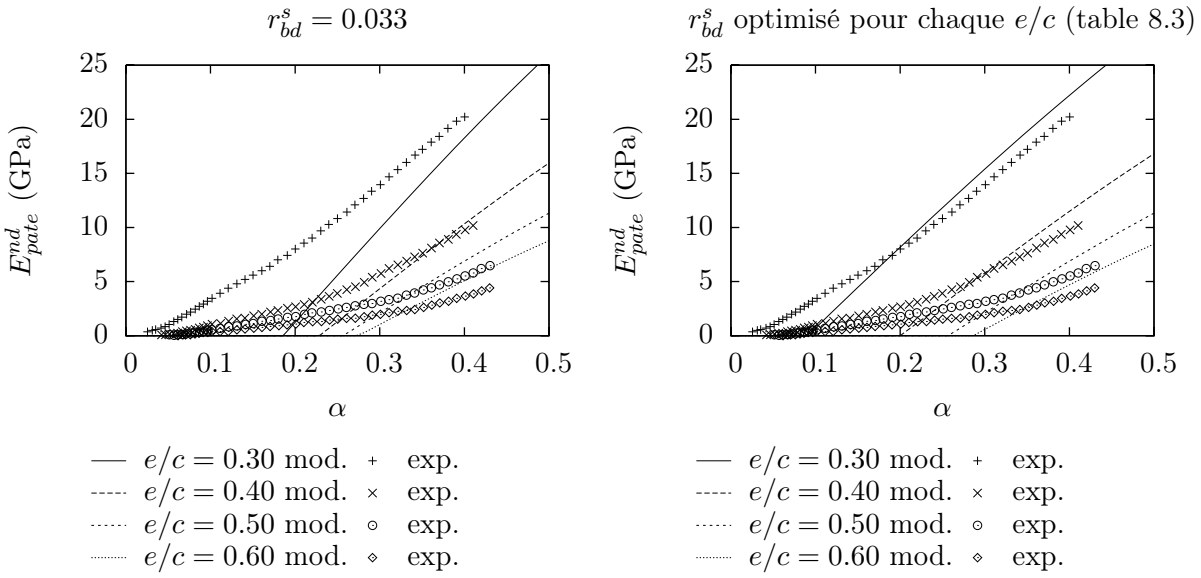


FIG. 8.27 – Module de Young non drainé d'une pâte, estimé et mesuré par ultrasons [15]

e/c	r^s_{bd} opt.	erreur (GPa)
0.3	0.015	1.56
0.4	0.028	1.31
0.5	0.033	1.28
0.6	0.035	0.96

TAB. 8.3 – Optimisation du rapport d'aspect des plaquettes des hydrates basse densité, de manière indépendante pour chaque e/c

Validité du modèle d'hydrates basse densité

La modification du seul rapport d'aspect des plaquettes solides des hydrates basse densité ne fournit pas une prédiction correcte des mesures ultrasons du degré d'hydratation de prise, à moins de recourir à des plaquettes extrêmement aplaties. On considère maintenant en plus l'influence du paramètre m_{bd} caractérisant la distribution de C-S-H entre basse et haute densité et jusqu'à maintenant évalué par le modèle (8.17) de Tennis et Jennings [121]. L'estimation auto-cohérente α_0^{AC} du degré d'hydratation de prise déterminée en section 8.3.1 peut être calculée en fonction du

d'hydratation de prise mesuré expérimentalement, selon les auteurs et les techniques, mériterait certainement des investigations complémentaires. La méthode de détermination du degré d'hydratation de prise utilisée par [122] (pied de la droite ajustée sur les données expérimentales, voir figure 7.9) conduit à une surestimation pour plusieurs e/c (il existe des points $\alpha < \alpha_0^{exp}$, $\sigma_c > 0$). Mais ceci n'apporte qu'un éclaircissement partiel sur les divergences observées.

paramètre m_{bd} sans recourir à (8.17) de façon à prendre du recul vis-à-vis du modèle de Jennings et Tennis [121]. En effet, nous avons déjà mis en évidence les difficultés liées à l'utilisation de cette répartition en deux familles d'hydrates dans le cadre du modèle morphologique développé (voir les commentaires faits autour de la figure 8.16). Comme la prise est contrôlée par les hydrates basse densité, a priori plus on en forme (m_{bd} élevé), plus la prise va être précoce.

La figure 8.28 représente α_0^{AC} en fonction de m_{bd} pour quelques valeurs du rapport e/c et du rapport d'aspect r_{bd}^s des particules solides des hydrates basse densité. Faire passer le rapport d'aspect sous 0.02 ne semble pas très réaliste, puisque la fabrication d'une telle plaquette nécessiterait la juxtaposition d'au moins $0.12/0.02 = 6$ briquettes élémentaires (0.12 étant le rapport d'aspect de la briquette élémentaire).

Le rapport m_{bd} est évidemment limité à l'intervalle $[0, 1]$. Le degré d'hydratation de prise évalué sur la figure 7.6 est < 0.03 pour $e/c = 0.3$ et < 0.1 pour $e/c = 0.5$. Aucune valeur de m_{bd} ne permet d'atteindre des seuils de prise aussi faibles (voir figure 8.28). Ceci signifie que le modèle morphologique d'hydrates basse densité vus comme une mousse poreuse doit être remis en question, particulièrement au jeune âge.

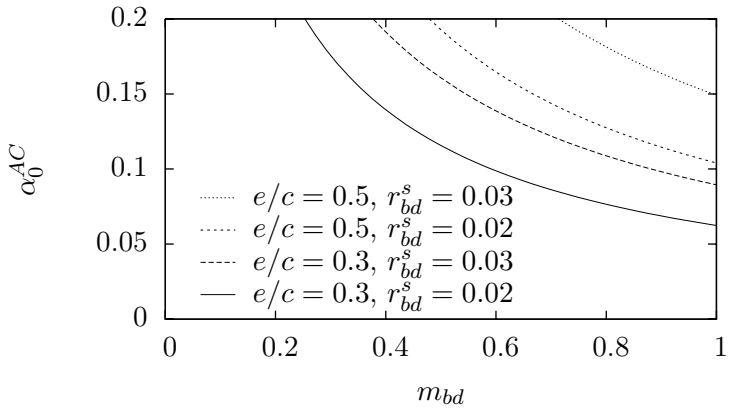


FIG. 8.28 – Estimation du degré d'hydratation de prise en fonction de la part d'hydrates apparaissant sous la forme basse densité ($e/c = 0.3$ ou 0.5 ; $r_{bd}^s = 0.02$ ou 0.03)

Modification du modèle d'hydrates basse densité

La confrontation des résultats du modèle avec les mesures ultrasons de [15] dans la section précédente a révélé que le modèle d'hydrates basse densité requiert un certain nombre d'améliorations, au moins au jeune âge. Pour retrouver le degré d'hydratation de prise observé sur les essais aux ultrasons, il serait nécessaire d'imposer aux plaquettes un rapport d'aspect si faible qu'il en deviendrait irréaliste. On peut néanmoins envisager des particules initialement très aplaties, comme des « feuilles », et qui s'épaissiraient à mesure que l'hydratation avance. Cela reviendrait à considérer pour les plaquettes un rapport d'aspect dépendant du degré d'hydratation. Nous ne creuserons pas ici cette voie, qui peut être vue comme une extension de ce travail.

Une autre voie d'amélioration réside dans le fait que, pour le moment, la phase solide des hydrates basse densité se trouve être uniformément distribuée dans l'espace laissé libre entre les particules composites anhydre + hydrates haute densité. Les hydrates basse densité se présentent donc sous la forme d'une mousse très poreuse. De plus, les plus gros pores capillaires présentent a priori des dimensions difficilement comparables à celles des plaquettes. Par conséquent, il devient nécessaire de se repencher sur la description géométrique des hydrates basse densité.

L'idée proposée est de conserver le concept de matrice entourant les sphères composites

anhydre + hydrates haute densité, mais à présent, cette matrice est vue comme un matériau à double porosité. Ce dernier est formé des hydrates basse densité eux-mêmes, toujours décrits comme une mousse poreuse, et des plus gros pores capillaires. La taille caractéristique de ces derniers est de l'ordre de la dizaine de microns, alors que les plaquettes (assemblage de quelques briquettes élémentaires de $60 * 30 * 5$ nm) formant la mousse sont plutôt de l'ordre de quelques centaines de nanomètres. Cette séparation d'échelles autorise la représentation de la matrice comme un matériau poreux dont la « phase solide » est la mousse poreuse pré-homogénéisée, c'est-à-dire les hydrates basse densité (voir figure 8.29). Comme les plus gros pores ont été isolés de la mousse poreuse, cette dernière va être plus dense que précédemment.

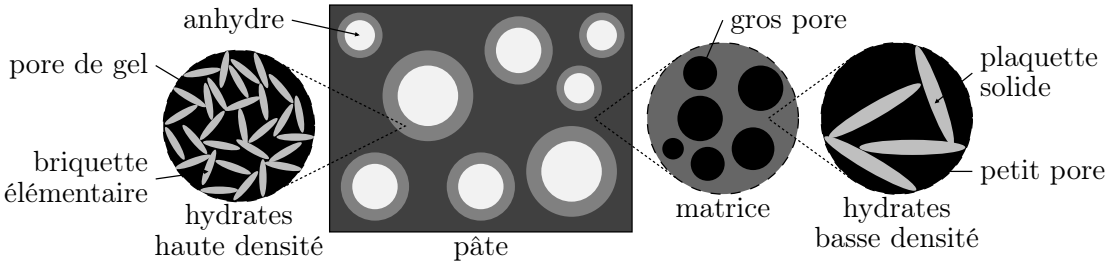


FIG. 8.29 – Représentation schématique du modèle morphologique de pâte de ciment, avec une description améliorée de la matrice

Du point de vue technique, les caractéristiques mécaniques de cette matrice peuvent être estimées en faisant appel à deux schémas auto-cohérents successifs :

- les plaquettes et les petits pores sont homogénéisés pour former les hydrates basse densité (mousse poreuse), en réutilisant le schéma auto-cohérent déjà implémenté pour modéliser les hydrates haute et basse densité dans le modèle précédent (section 8.2.3) ;
- les hydrates basse densité et les pores les plus gros sont homogénéisés pour former la matrice, en exploitant un schéma auto-cohérent classique avec des formes sphériques (rappelé en section 2.1.1), afin de rendre compte d'une précipitation désordonnée des hydrates basse densité dans l'espace situé entre les particules composites anhydre + hydrates haute densité.

Il est commode d'introduire la fraction volumique f_m de matrice dans la pâte, qui est la somme des contributions du solide (f_m^s) et de l'espace poreux (f_m^p). Par rapport aux notations utilisées en section 8.2.4, on insiste sur le fait que f_m, f_m^s et f_m^p remplacent respectivement les quantités précédentes f_{bd}, f_{bd}^s et f_{bd}^p. La porosité totale (gros et petits pores) de la matrice s'écrit $\varphi_m = f_m^p / f_m$.

La description de la matrice fait référence à deux tailles a priori bien séparées de pores. D'une part, nous avons les plus gros pores capillaires (jusqu'à 20 µm). Ils forment l'espace poreux pris en compte dans la seconde étape d'homogénéisation (mousse + espace poreux). D'autre part, la mousse poreuse (hydrates basse densité) renferme les plus petits pores capillaires (jusqu'à environ 200 nm) et les pores de gel. Le nouveau modèle introduit donc un paramètre morphologique supplémentaire χ séparant la porosité de la matrice φ_m en gros pores capillaires ($(1-\chi)\varphi_m$) et pores de la mousse ($\chi\varphi_m$). Notons que le nouveau modèle est en fait une extension du précédent. On retrouve ce dernier dans le cas particulier $\chi = 1$: en l'absence de gros pores capillaires, la matrice devient identique aux hydrates basse densité.

Évidemment, la condition pour que les hydrates basse densité soient... moins denses que les hydrates haute densité restreint les valeurs de χ envisageables. Autrement dit, la porosité de la

mousse doit être plus élevée que celle des hydrates haute densité :

$$\frac{\chi f_m^p}{\chi f_m^p + f_m^s} > \varphi_i \tag{8.30}$$

ce qui donne :

$$\chi > \chi_{min} = \frac{\varphi_i}{1-\varphi_i}\left(\frac{f_m}{f_m^p} - 1\right) \tag{8.31}$$

où χ_{min} dépend de e/c et α. Cette dernière quantité est représentée par une courbe en trait interrompu fin sur les graphes de la figure 8.30. La partie du plan (χ, α) située à gauche de cette courbe (zone grisée) doit être évitée pour assurer l'inégalité (8.31).

La prise de la pâte est conditionnée par celle de la matrice. Ceci nécessite que (i) suffisamment de plaquettes aient précipité dans la mousse d'hydrates basse densité *et* que (ii) la porosité de la matrice (dans la seconde étape d'homogénéisation) soit inférieure à 1/2 : $(1-\chi)f_m^p/f_m < 1/2$. La condition (i) (respectivement (ii)) correspond à la partie droite (respectivement gauche) de la courbe présentée sur chaque graphe de la figure 8.30. Le degré d'hydratation de prise de la pâte de ciment dépend ainsi non seulement du rapport e/c et du rapport d'aspect r_{bd}^s des plaquettes, mais aussi de χ. À titre d'illustration, considérons des valeurs de e/c allant de 0.3 à 0.5, et le rapport d'aspect $r_{bd}^s = 0.033$. Par rapport au modèle précédent (correspondant à $\chi = 1$), il apparaît que toutes les valeurs de χ dans l'intervalle $[0.45, 1]$ prédisent des degrés d'hydratation de prise inférieurs, c'est-à-dire plus proches de ce que les mesures ultrasonores suggèrent [15].

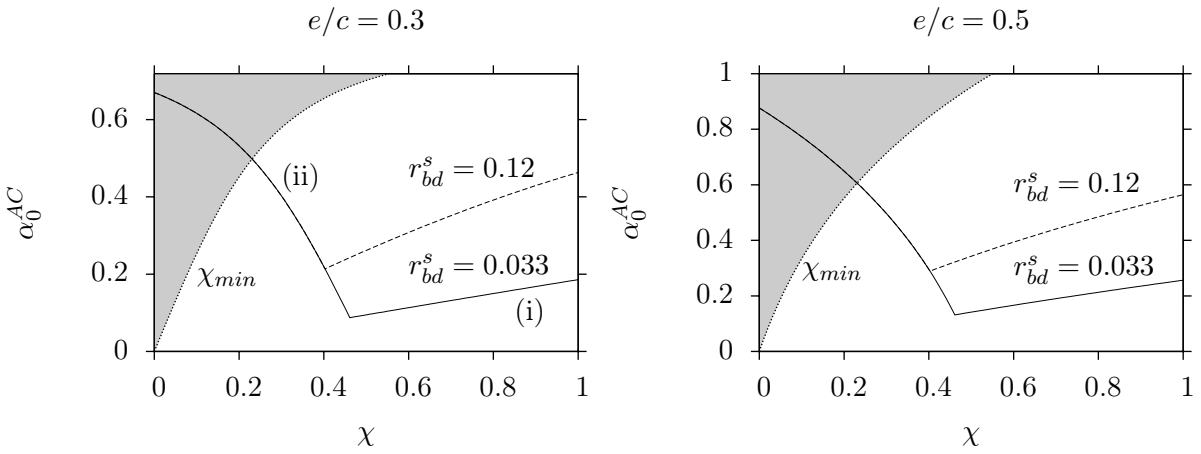


FIG. 8.30 – Degré d'hydratation de prise en fonction de χ, pour quelques valeurs de e/c et r_{bd}^s ; seule la partie des graphes située à droite de la courbe en pointillés fins est admissible (zone non grisée, correspondant à $\chi > \chi_{min}$)

Le paramètre morphologique χ est a priori une fonction $\chi(e/c, \alpha)$. Il serait intéressant de clarifier la façon précise dont χ dépend de ces deux paramètres. Cela nécessite des moyens d'investigation qui semblent hors de notre portée. Cependant, afin de commencer à appréhender le nouveau modèle, on peut d'ores et déjà proposer des simulations s'appuyant sur un χ constant, choisi comme le minimum satisfaisant $\chi > \chi_{min}$ dans l'intervalle $0.2 < e/c < 0.6$: $\chi = 0.72$. La figure 8.31 représente l'évolution du module de Young (drainé) de la pâte, en utilisant $\chi = 0.72$ et $\chi = 1$ qui permet de retrouver le modèle précédent. Avec $\chi = 0.72$, le degré d'hydratation de prise est réduit, comme attendu d'après la figure 8.30, et l'augmentation du module de Young est plus lente au début. Cependant, plus tard ($\alpha > 0.4$), le nouveau modèle donne des prédictions quasi similaires à l'ancien. C'est une bonne nouvelle dans la mesure où le modèle précédent était déjà satisfaisant sur les pâtes relativement âgées ($\alpha > 0.5$).

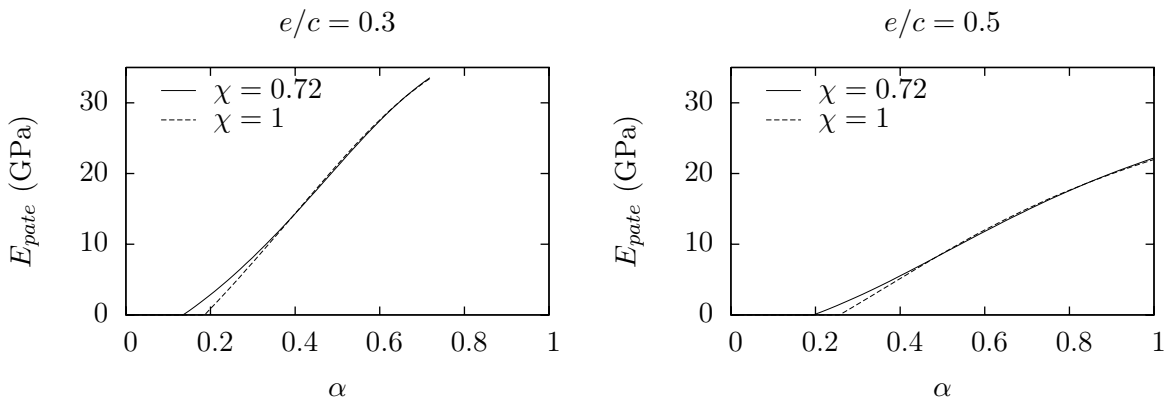


FIG. 8.31 – Module de Young d'une pâte en cours d'hydratation, estimé pour deux valeurs différentes du paramètre morphologique χ : 0.72 et 1

8.5 Conclusion

On a développé un modèle micromécanique de pâte de ciment permettant d'estimer le module de Young effectif. Ce modèle, qui recourt à l'homogénéisation des milieux aléatoires, est basé sur un schéma d'homogénéisation intégrant des informations sur la morphologie de la pâte. Ces informations sont essentiellement issues d'observations de pâtes à plusieurs échelles et par divers moyens technologiques. Les données nécessaires pour alimenter ce type de modèle ont une double nature : géométrique et mécanique. Les grandeurs géométriques sont principalement les fractions volumiques des différentes phases. Ces dernières sont estimées au cours de la réaction grâce à un modèle d'hydratation issu de la littérature. Les données mécaniques (caractéristiques élastiques) sont issues d'expériences de nano-indentation, et d'une analyse inverse lorsque ces caractéristiques élastiques ne sont pas facilement accessibles. Le seul paramètre géométrique qui a été calibré est le rapport d'aspect des plaquettes formant les hydrates basse densité. Celui-ci a été déterminé de manière à rendre compte correctement de la prise (degré d'hydratation auquel apparaît une rigidité macroscopique). Le modèle est alors capable de prédire le module de Young effectif de pâtes en cours d'hydratation (pour $\alpha > 0.5$), en reproduisant de façon très satisfaisante des données disponibles de manière indépendante dans la littérature. La comparaison entre les simulations et l'expérimental est un peu moins bonne en ce qui concerne les pâtes « matures » (6 à 24 mois), mais reste raisonnable.

Le bon accord entre les simulations et les données expérimentales crédite le modèle morphologique développé. Cependant, il s'agit de rester conscient que des améliorations sont nécessaires. En effet, la distinction entre C-S-H haute et basse densité ne suffit pas à décrire toute la complexité des pâtes de ciment. D'une part, les C-S-H présentent probablement une gamme continue de densités. D'autre part, les pâtes se composent de nombreux autres produits d'hydratation qui diffèrent à la fois en termes de densité, de nature chimique et de caractéristiques mécaniques. Intégrer de nouveaux hydrates comme la portlandite ou les phases aluminates ne semble poser aucune difficulté théorique, pourvu que les informations sur la morphologie à adopter, un modèle d'hydratation plus évolué et l'élasticité élémentaire des phases soient disponibles.

Cet enrichissement de la morphologie devrait permettre d'améliorer les prédictions au très jeune âge, qui restent pour le moment très délicates. La représentation plus soigneuse de l'espace poreux des hydrates basse densité a déjà eu pour conséquence des progrès notables. Par ailleurs, la prise en compte de différents types d'hydrates devrait permettre de quantifier les conséquences sur l'élasticité effective de la dégradation ou de la transformation de certains de ceux-ci. Par

exemple, la lixiviation se traduit au début par une dissolution de la portlandite.

Au terme d'un processus itératif « essai - erreur », dont nous n'avons présenté dans ce chapitre que la première (section 8.1) et dernière (sections 8.2 à 8.4) étape, nous disposons d'un modèle micromécanique de pâte de ciment qui estime de façon raisonnable l'élasticité effective tout au long de l'hydratation (très jeune âge exclu), même s'il ne représente que de façon simplifiée la réalité. Construire un modèle morphologique qui « passe le test de l'élasticité » est une étape primordiale du travail d'analyse micromécanique du comportement d'un matériau. En effet, il devient à présent envisageable de s'attaquer à des phénomènes plus complexes, comme la résistance et le fluage (effets différés).

Chapitre 9

Résistance des C-S-H et pâtes de ciment

Ce chapitre est consacré à la résistance des matériaux cimentaires. On propose une estimation du critère de rupture d'une pâte de ciment, par homogénéisation des milieux aléatoires. La morphologie est de type polycristalline avec des particules solides composites formées d'un cœur anhydre entouré d'une couche d'hydrates. L'anhydre est supposé présenter une résistance bien plus élevée que les hydrates. Les hydrates sont successivement supposés de von Mises et de Drucker-Prager. On retrouve le même type de désagrément qu'en élasticité avec ce modèle morphologique. On propose ensuite d'établir le critère de limite d'élasticité des hydrates basse (ou haute) densité à partir de leur microstructure, supposée formée d'un assemblage de particules aplaties. On suppose ces particules élastiques fragiles.

Sommaire

9.1 Premier modèle de résistance de pâte **132**
- 9.1.1 Introduction 132
- 9.1.2 Homogénéisation linéaire et niveau de déformation moyen des hydrates 132
- 9.1.3 Estimation du critère de rupture de la pâte 134
- 9.1.4 Application : résistance à la compression simple 138

9.2 Limite élastique d'un amas de plaquettes **138**
- 9.2.1 Critère à l'échelle de la plaquette 139
- 9.2.2 Localisation : détermination de σ'_n 140
- 9.2.3 Recherche de la famille de plaquettes critiques 140
- 9.2.4 Détermination du critère macroscopique de limite élastique 143
- 9.2.5 Cas de la traction / compression simple 145

Après avoir mis au point un modèle morphologique de pâte de ciment au chapitre précédent, il est tentant d'aller au delà de l'élasticité. Ce chapitre est consacré à la résistance.

On propose d'abord (section 9.1) un modèle de critère de rupture de pâte de ciment estimé par homogénéisation non linéaire. La morphologie reprend la première tentative réalisée en élasticité (décrite en section 8.1) : un assemblage poreux de sphères composites à cœur anhydre entouré d'une couche d'hydrates. Les hydrates sont successivement supposés de von Mises et de Druger-Prager. L'anhydre est supposé présenter une résistance bien supérieure à celle des hydrates, si bien qu'on la considère comme infinie.

Ensuite, on cherche à profiter à la fois du modèle alternatif de pâte de ciment mis au point en sections 8.2 à 8.4, et de l'approche développée pour estimer la limite élastique du plâtre pris au chapitre 5. En effet, le nouveau modèle de pâte de ciment voit les hydrates comme un assemblage de plaquettes. On adapte alors la méthode développée sur un assemblage d'aiguilles pour le plâtre pris au cas de plaquettes. Les plaquettes sont supposées élastiques fragiles.

9.1 Premier modèle de résistance de pâte [107]

En quasi-simultané avec le développement du premier modèle de pâte de ciment en élasticité (section 8.1), nous avons tenté de construire un modèle visant à estimer la résistance mécanique. Plus précisément, nous avons mis à profit le schéma d'homogénéisation, construit pour traiter l'élasticité, dans une démarche d'homogénéisation non linéaire afin d'aborder la résistance. L'originalité de ce travail (présenté dans [107] lorsque les hydrates sont de von Mises) réside dans le caractère hétérogène de la phase solide.

9.1.1 Introduction

On s'intéresse à la rupture d'un milieu poreux dont le solide est hétérogène. Plus précisément, la microstructure correspond à celle initialement envisagée pour les pâtes de ciment (figure 8.3), c'est-à-dire un assemblage désordonné et isotrope de pores capillaires et d'un motif morphologique composite sphérique constitué d'un cœur anhydre entouré d'une calotte d'hydrates. Comme en section 8.1, l'espace poreux, l'anhydre et les hydrates sont respectivement notés par les indices pc, a et h. Le domaine occupé par le VER est noté Ω. Au sein du VER, le domaine occupé par la phase i est noté Ω_i et la fraction volumique correspondante est notée f_i. On introduit le rapport $\chi = \sqrt[3]{f_a/(f_a + f_h)}$. La porosité capillaire est notée $f_{pc} = \varphi$.

On envisage successivement deux critères de rupture pour les hydrates :

- le critère de von Mises $f(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_d - k$;
- le critère de Drucker-Prager $f(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_d - \beta(h - \sigma_m)$: on remplace α par β pour éviter une collision de notation avec le degré d'hydratation α.

La résistance de l'anhydre est supposée bien supérieure à celle des hydrates, si bien qu'en pratique on la considèrera infinie.

Afin d'obtenir une expression approchée du critère de rupture macroscopique, on met en œuvre une démarche d'homogénéisation non linéaire de type sécante modifiée [95, 117, 118, 6]. Cette technique nécessite au préalable de résoudre un problème d'homogénéisation linéaire et, en particulier, de produire des estimations de la moyenne quadratique des déformations déviatoriques et de la moyenne des contraintes sphériques dans les hydrates.

9.1.2 Homogénéisation linéaire et niveau de déformation moyen des hydrates

Dans toute cette sous-section, le comportement des deux phases solides est supposé élastique linéaire isotrope. Le comportement effectif de la pâte est alors élastique linéaire isotrope. Les

tenseurs de contrainte et de déformation macroscopiques, respectivement notés $\boldsymbol{\Sigma}$ et $\boldsymbol{E}$ sont reliés par l'équation d'état :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}_{pate} : \boldsymbol{E} \quad \text{avec} \quad \mathbb{C}_{pate} = 3k_{pate}\mathbb{J} + 2\mu_{pate}\mathbb{K} \tag{9.1}$$

Afin de mettre en œuvre la technique d'homogénéisation non linéaire, il est nécessaire d'estimer la moyenne quadratique de la déformation déviatorique et la moyenne de la déformation sphérique des hydrates.

Moyenne quadratique de la déformation déviatorique

Le raisonnement présenté ici est inspiré de [68]. On part de l'expression de l'énergie élastique volumique Ψ du domaine solide :

$$\Psi = \frac{1}{2|\Omega|}\left(\int_{\Omega_a} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}_a : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Omega_h} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}_h : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}\Omega\right) \tag{9.2}$$

Celle-ci dépend des modules élastiques des phases anhydre et hydrates, d'une part de façon explicite à travers les tenseurs de rigidité $\mathbb{C}_i$, et d'autre part de façon implicite par l'intermédiaire du champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x})$. On dérive formellement cette énergie par rapport à μ_h :

$$|\Omega|\frac{\partial\Psi}{\partial\mu_h} = \int_{\Omega_a} \frac{\partial\boldsymbol{\varepsilon}}{\partial\mu_h} : \mathbb{C}_a : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Omega_h} \frac{\partial\boldsymbol{\varepsilon}}{\partial\mu_h} : \mathbb{C}_h : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Omega_h} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{K} : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}\Omega \tag{9.3}$$

En exploitant le comportement élastique local, cette expression devient :

$$|\Omega|\frac{\partial\Psi}{\partial\mu_h} = \int_{\Omega} \frac{\partial\boldsymbol{\varepsilon}}{\partial\mu_h} : \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Omega_h} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{K} : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}\Omega \tag{9.4}$$

On applique ensuite le lemme de Hill [133] au champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ et au champ de « déformation » $\partial\boldsymbol{\varepsilon}/\partial\mu_h$ satisfaisant la « déformation » au contour $\partial\boldsymbol{E}/\partial\mu_h = \boldsymbol{0}$:

$$|\Omega|\frac{\partial\Psi}{\partial\mu_h} = \int_{\Omega_h} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{K} : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}\Omega \tag{9.5}$$

On obtient enfin une relation entre la dérivée de l'énergie élastique et la moyenne quadratique de la déformation déviatorique dans les hydrates :

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\mu_h} = 2f_h\left\langle\varepsilon_d^2\right\rangle_h \tag{9.6}$$

Il reste à substituer l'expression macroscopique $\Psi = \boldsymbol{E} : \mathbb{C}_{pate} : \boldsymbol{E}/2$ de l'énergie élastique, pour obtenir :

$$4f_h\left\langle\varepsilon_d^2\right\rangle_h = -\frac{\partial 1/k_{pate}}{\partial\mu_h}\Sigma_m^2 - \frac{\partial 1/\mu_{pate}}{\partial\mu_h}\Sigma_d^2 \tag{9.7}$$

Pour exploiter cette égalité, il convient à présent de proposer des estimations des modules élastiques effectifs k_{pate} et μ_{pate} de la pâte. C'est maintenant que l'on fait référence au schéma d'homogénéisation développé en section 8.1.

Dans le cas limite de l'anhydre rigide et des hydrates incompressibles, les modules effectifs de la pâte sont donnés par les équations (8.10) et (8.11) avec les polynômes $P_i(\chi)$ définis par (8.12). En notant $\mathcal{A} = k_{pate}/\mu_h$ et $\mathcal{B} = \mu_{pate}/\mu_h$, on obtient :

$$\mathcal{A} = \frac{4(1-\varphi)}{3\varphi}\mathcal{B} \quad \text{et} \quad \mathcal{B} = \begin{cases} \dfrac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a} & \text{si} \quad \varphi < 1/2 \\ 0 & \text{si} \quad \varphi > 1/2 \end{cases} \tag{9.8}$$

avec :

$$a = 8(3-\varphi)P_2(\chi) \tag{9.9}$$
$$b = 2(3-\varphi)P_1(\chi) + 24(2\varphi-1)P_4(\chi) \tag{9.10}$$
$$c = 3(2\varphi-1)P_3(\chi) \tag{9.11}$$

Ainsi, la moyenne quadratique de la déformation déviatorique dans les hydrates (9.7) prend la forme :

$$4f_h\mu_h^2 \left\langle \varepsilon_d^2 \right\rangle_h = \frac{\Sigma_m^2}{\mathcal{A}} + \frac{\Sigma_d^2}{\mathcal{B}} \tag{9.12}$$

Moyenne de la contrainte sphérique

La démarche d'homogénéisation non linéaire conduite avec des hydrates de Drucker-Prager va de surcroît nécessiter une estimation de la contrainte sphérique moyenne dans les hydrates, $\langle \sigma_m \rangle_h$.

On utilise pour cela les résultats établis dans l'annexe C.1.3, en remplaçant 2 par a, 1 par h et 0 par *pate*. La porosité reste notée φ. L'équation (C.22) relie la contrainte moyenne $\langle \sigma_m \rangle_h$ dans les hydrates à $E_{0m} = \operatorname{tr} E_0/3$. En tenant compte des caractères rigide de l'anhydre ($k_a \to \infty$) et incompressible des hydrates ($k_h \to \infty$), cette relation devient :

$$\langle \sigma_m \rangle_h = (3k_{pate} + 4\mu_{pate})E_{0m} \tag{9.13}$$

Par ailleurs, la contrainte moyenne $\Sigma_m = \langle \sigma_m \rangle$ sur l'ensemble du VER est reliée à E_{0m} par :

$$\Sigma_m = (3f_a k_a A_a^{sph} + 3f_h k_h A_h^{sph})E_{0m} \tag{9.14}$$

où A_a^{sph} et A_h^{sph} sont respectivement donnés par (C.5) et (C.11). Dans le cas limite qui nous intéresse ici ($k_a \to \infty$ et $k_h \to \infty$), cette relation devient :

$$\Sigma_m = (1-\varphi)(3k_{pate} + 4\mu_{pate})E_{0m} \tag{9.15}$$

On a ainsi établi :

$$\langle \sigma_m \rangle_h = \mathcal{C}\Sigma_m \quad \text{avec} \quad \mathcal{C} = \frac{1}{1-\varphi} \tag{9.16}$$

9.1.3 Estimation du critère de rupture de la pâte

On cherche à construire le critère de rupture de la pâte connaissant celui des hydrates, donné sous la forme $f(\boldsymbol{\sigma}) = 0$. On envisage successivement le critère de von Mises et celui de Drucker-Prager.

Cas des hydrates de von Mises

Détermination du critère macroscopique Dans un premier temps, on suppose que les hydrates obéissent au critère de von Mises. L'idée consiste à se ramener à un problème d'homogénéisation non linéaire en donnant aux hydrates un comportement élastique non linéaire fictif, défini par un tenseur de rigidité sécant $\mathbb{C}_h(\varepsilon_d)$ tel que :

$$f(\lim_{\varepsilon_d \to \infty} \mathbb{C}_h(\varepsilon_d) : \boldsymbol{\varepsilon}) = 0 \tag{9.17}$$

En d'autres termes, le comportement fictif est choisi de façon à saturer asymptotiquement le critère de résistance lorsque la déformation locale est suffisamment grande (on note symboliquement $\varepsilon_d \to \infty$). Dans la pratique, on choisit un tenseur $\mathbb{C}_h(\varepsilon_d)$ isotrope, avec un module de

compression k_h constant et un module de cisaillement $\mu_h(\varepsilon_d)$. Pour le cas particulier du matériau de von Mises ($\sigma_d - k = 0$), (9.17) prend la forme :

$$\lim_{\varepsilon_d \to \infty} 2\mu_h(\varepsilon_d)\varepsilon_d = k \tag{9.18}$$

Il suffit donc que $\mu_h(\varepsilon_d)$ soit équivalent à $k/(2\varepsilon_d)$ lorsque $\varepsilon_d \to \infty$. On note en particulier que $\mu_h(\varepsilon_d)/k_h \to 0$. Ceci autorise à considérer les hydrates comme un matériau incompressible et donc à exploiter les résultats de la section 9.1.2.

On fait alors appel à la méthode sécante modifiée [95, 117, 118] avec la déformation effective $\varepsilon_d^{ef} = \sqrt{\langle \varepsilon_d^2 \rangle}$ et pour les hydrates le comportement fictif non linéaire :

$$\mu_h(\varepsilon_d) \approx k/(2\varepsilon_d) \quad \text{lorsque} \quad \varepsilon_d \to \infty \tag{9.19}$$

Ceci permet de déterminer la réponse du VER à des trajets de déformations macroscopiques radiaux $\boldsymbol{E} = \lambda \boldsymbol{e}$. Sur chacun de ceux-ci, on évalue la contrainte macroscopique mobilisée asymptotiquement (quand $\lambda \to \infty$). Cette dernière appartient à la frontière ∂G^{hom} du domaine de résistance macroscopique G^{hom}, que l'on construit ainsi point par point. La relation (9.12) prend la forme :

$$\frac{\Sigma_m^2}{\mathcal{A}} + \frac{\Sigma_d^2}{\mathcal{B}} = f_h[2\mu_h(\varepsilon_d)\varepsilon_d]^2 \tag{9.20}$$

Le comportement fictif choisi (9.19) conduit alors à l'expression de ∂G^{hom} :

$$\frac{\Sigma_m^2}{\mathcal{A}} + \frac{\Sigma_d^2}{\mathcal{B}} = f_h k^2 \tag{9.21}$$

ou encore, en exploitant (9.8) :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = f_h \mathcal{B} k^2 \tag{9.22}$$

avec $f_h = (1-\varphi)(1-\chi^3)$ et $\mathcal{B}$ donné par (9.8). Dans le plan (Σ_m, Σ_d), ce critère est une ellipse dont le rapport d'aspect est fonction de la seule porosité, tandis que la taille dépend de la porosité, de la fraction de noyaux anhydres dans le solide, et est proportionnelle à la résistance des hydrates.

Étude de quelques cas particuliers Lorsque $\chi \to 0$ (fraction volumique d'anhydre nulle), $\mathcal{B} \to (1-2\varphi)/(1-\varphi/3)$ et on retrouve le critère obtenu [95] par le schéma auto-cohérent classique (pores et solide homogène) :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{(1-\varphi)(1-2\varphi)}{1-\varphi/3}k^2 \tag{9.23}$$

pour $\varphi < 1/2$. Le domaine de résistance est réduit à $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{0}$ lorsque $\varphi > 1/2$.

Soulignons le fait qu'il *n'est pas* possible de définir pour le solide composite « anhydre - hydrates » ($\chi > 0$) une résistance $k' = k'(k, \chi)$ équivalente à placer dans le schéma auto-cohérent classique (9.23).

Lorsque $\chi \to 1$ (couche d'hydrates d'épaisseur infinitésimale), on s'approche du cas limite d'un polycristal poreux dont les grains solides sont infiniment résistants et entourés d'une interface dont la résistance au cisaillement est limitée[1]. Il s'agit en fait d'étudier le produit

[1] Le cas des grains infiniment résistants entourés d'une interface de Tresca sera traité directement en termes d'interface en section 12.3.2. On portera à cette occasion un regard critique sur les résultats obtenus ici par passage à la limite.

$(1-\varphi)(1-\chi^3)\mathcal{B}$. Un développement limité lorsque $\chi \to 1^-$ donne :

$$(1-\varphi)(1-\chi^3)\mathcal{B} = \begin{cases} \dfrac{9(1-3\varphi)(1-\varphi)}{4(3-\varphi)}\dfrac{1}{(1-\chi)^2} + \mathcal{O}\left(\dfrac{1}{1-\chi}\right) & \text{si } \varphi < 1/3 \\ \dfrac{(1/2-\varphi)(1-\varphi)}{\varphi - 1/3} + \mathcal{O}(1-\chi) & \text{si } 1/3 < \varphi < 1/2 \\ 0 & \text{si } \varphi > 1/2 \end{cases} \tag{9.24}$$

Ainsi, comme la figure 9.1 le suggère, quand $\chi \to 1$, $(1-\varphi)(1-\chi^3)\mathcal{B} \to \infty$ lorsque $\varphi < 1/3$. La porosité critique $\varphi = 1/3$ apparaît : la résistance devient infinie. En fait, on pressent que la résistance devient alors limitée par celle du solide, qui a été ici supposée infinie. Lorsque $1/3 < \varphi < 1/2$, le critère s'écrit :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{(1/2-\varphi)(1-\varphi)}{\varphi - 1/3}k^2 \tag{9.25}$$

Lorsque $\varphi > 1/2$, la résistance est nulle. Ce seuil passe à 1/3 lorsque $k = 0$ (interfaces sans résistance). Ce seuil est à rapprocher de celui obtenu en élasticité pour des grains entourés d'une interface lisse (début de la section 8.1.1).

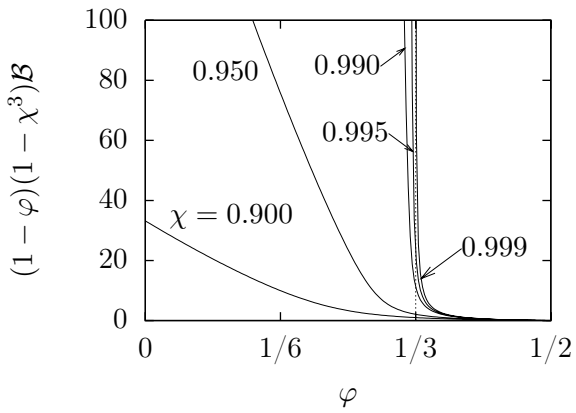


FIG. 9.1 – Taille du critère en fonction de la porosité pour des valeurs de χ proches de 1

Cas général À présent, χ est a priori quelconque. La figure 9.2 représente le critère macroscopique obtenu pour $\varphi = 0.4$ et quelques valeurs de la fraction de grains anhydres dans le solide : on perçoit clairement un effet de renforcement à mesure que χ augmente. Autrement dit, à porosité fixée, le domaine de résistance correspondant à χ_1 est inclus dans celui correspondant à χ_2, si $\chi_1 < \chi_2$.

Cas des hydrates de Drucker-Prager

On envisage à présent un critère de Drucker-Prager ($f(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_d - \beta(h - \sigma_m)$) pour les hydrates. La construction du critère macroscopique est similaire à celle décrite ci-dessus dans le cas du critère von Mises.

Détermination du critère macroscopique On donne aux hydrates un comportement fictif non linéaire sous la forme :

$$\mu_h(\varepsilon_m, \varepsilon_d) = \frac{\beta(h - 3k_h\varepsilon_m)}{2\varepsilon_d} \quad \text{lorsque} \quad \varepsilon_d \to \infty \tag{9.26}$$

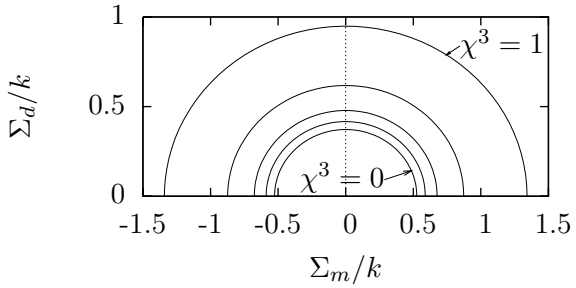


FIG. 9.2 – Critère macroscopique obtenu pour $\varphi = 0.4$ et les fractions de cœurs anhydres dans le solide $\chi^3 = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$

et k_h constant. La contrainte sphérique $\sigma_m = 3k_h\varepsilon_m$ étant en moyenne égale à $\Sigma_m/(1-\varphi)$ (9.16), elle reste, en moyenne, finie. Ainsi, $\mu_h \ll k_h$ lorsque $\varepsilon_d \to \infty$: le matériau devient incompressible. Toujours dans le but d'utiliser une approche d'homogénéisation non linéaire basée sur la méthode sécante modifiée [6], on introduit les déformations effectives :

$$\varepsilon_m^{ef} = \langle \varepsilon_m \rangle_h \quad \text{et} \quad \varepsilon_d^{ef} = \sqrt{\langle \varepsilon_d^2 \rangle_h} \tag{9.27}$$

De façon similaire au cas von Mises, on obtient le critère macroscopique sous la forme :

$$\frac{\Sigma_m^2}{\mathcal{A}} + \frac{\Sigma_d^2}{\mathcal{B}} = f_h \beta^2 \left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi} \right)^2 \tag{9.28}$$

soit, en substituant l'expression de $\mathcal{A}$ (9.8) :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)} \Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = (1-\varphi)(1-\chi^3)\mathcal{B}\beta^2 \left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi} \right)^2 \tag{9.29}$$

Le critère macroscopique ainsi obtenu est une conique dans le plan (Σ_m, Σ_d).

Étude de quelques cas particuliers Lorsque $\chi \to 0$, $\mathcal{B} \to (1-2\varphi)/(1-\varphi/3)$ et on obtient le critère :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)} \Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{(1-2\varphi)(1-\varphi)}{1-\varphi/3} \beta^2 \left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi} \right)^2 \tag{9.30}$$

obtenu pour des grains homogènes de Drucker-Prager.

Remarquons qu'il *n'est pas* possible de définir pour caractériser le solide hétérogène des paramètres $h'(h, \beta, \chi)$ et $\beta'(h, \beta, \chi)$ « effectifs » à placer dans (9.30).

Lorsque $\chi \to 1$, on se trouve dans le cas limite d'un polycristal poreux dont les grains solides sont infiniment résistants et entourés d'une interface dont la résistance est caractérisée par un critère de Drucker-Prager. On réutilise le résultat (9.24) sur la limite du produit $(1-\varphi)(1-\chi^3)\mathcal{B}$. Pour $\varphi < 1/3$, $(1-\varphi)(1-\chi^3)\mathcal{B} \to \infty$ et le domaine devient $\Sigma_m < h(1-\varphi)$. Pour $\varphi > 1/2$, $(1-\varphi)(1-\chi^3)\mathcal{B} \to 0$ et le critère devient $\Sigma_m = \Sigma_d = 0$.

Cas général À présent, χ est a priori quelconque. La figure 9.3 représente le critère macroscopique obtenu pour $\beta = 0.2$, $\varphi = 0.4$ et quelques valeurs de la fraction d'anhydre dans le solide : on perçoit un effet de renforcement à mesure que χ augmente. Autrement dit, à porosité fixée, le domaine de résistance correspondant à χ_1 est inclus dans celui correspondant à χ_2 si $\chi_1 < \chi_2$. Cela peut se montrer en remarquant le fait que pour toute porosité, $(1-\varphi)(1-\chi^3)\mathcal{B}$ est une fonction croissante de χ.

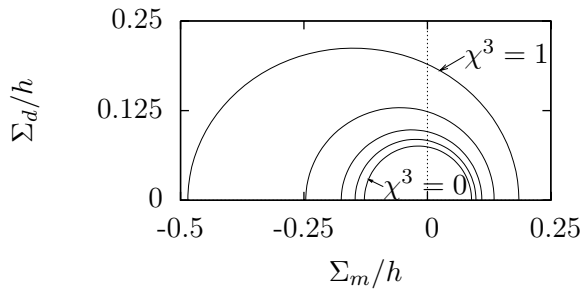


FIG. 9.3 – Critère macroscopique obtenu pour $\beta = 0.2$, $\varphi = 0.4$ et les fractions de grains anhydres dans le solide $\chi^3 = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$

9.1.4 Application : résistance à la compression simple

On applique à présent les critères de rupture de pâte au trajet de chargement particulier de la compression simple. La résistance à la compression simple est notée Σ_c. On représente sur la figure 9.4 les résultats obtenus lorsque les hydrates sont supposés de von Mises ou de Drucker-Prager. On retrouve les mêmes pathologies qu'en élasticité : le modèle prévoit une prise instantanée aux $e/c = 0.2$ et 0.3. C'était attendu dans la mesure où le modèle morphologique est resté le même.

Il est ainsi temps de passer au second modèle morphologique présenté au chapitre 8 (sections 8.2 à 8.4). De plus, nous allons pouvoir profiter des travaux de modélisation de la limite élastique du plâtre pris (chapitre 5).

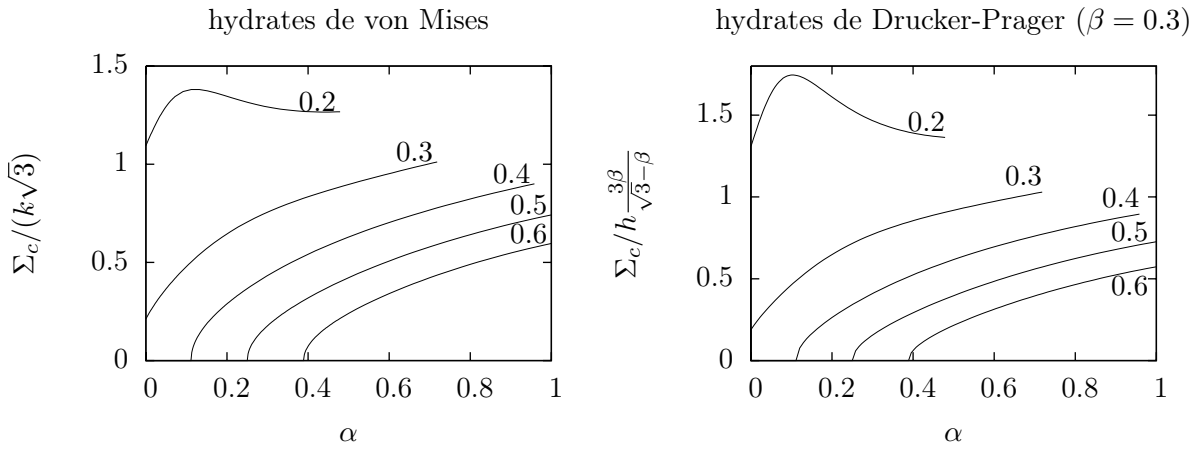


FIG. 9.4 – Résistance en compression simple en fonction du degré d'hydratation, pour des rapports e/c entre 0.2 et 0.6

9.2 Limite élastique d'un amas de plaquettes

On cherche à profiter à la fois :
- du second modèle morphologique de pâte de ciment présenté au chapitre 8, donnant de bons résultats en élasticité ;
- des développements accomplis sur la limite élastique du plâtre pris (chapitre 5).

Dans le modèle morphologique de pâte de ciment décrit en section 8.2 (voir figure 8.12), les hydrates sont vus comme un amas de particules aplaties (briquettes pour les hydrates haute densité, plaquettes pour les hydrates basse densité). Cette section est consacrée à la construction d'un modèle de limite d'élasticité d'un tel amas de plaquettes, selon une démarche similaire à celle conduite pour le plâtre pris (chapitre 5). On obtient ainsi une estimation de la limite élastique à l'échelle mésoscopique, valable aussi bien pour les hydrates basse densité que pour les hydrates haute densité (puisque ceux-ci sont décrits par le même modèle morphologique). Il restera, en extension de ce travail, à passer à l'échelle macroscopique pour obtenir une estimation de la limite élastique d'une pâte de ciment.

Comme nous n'irons pas au dessus de l'échelle des hydrates, nous qualifierons cette dernière d'« échelle macroscopique » dans toute la suite.

9.2.1 Critère à l'échelle de la plaquette

Comme au chapitre 5, il faut commencer par se donner un critère de rupture à l'échelle microscopique, c'est-à-dire à l'échelle de la plaquette. On se donne donc un critère portant sur la contrainte moyenne (notée $\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}}$, $\underline{N}$ étant l'axe de révolution de la plaquette) dans la plaquette et tenant compte du caractère anisotrope de la forme de cette dernière. Plus précisément, on considère le vecteur contrainte sur une facette contenant $\underline{N}$. La normale à la facette est notée $\underline{n}'$. Le vecteur contrainte $\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{n}'$ présente une partie normale, $\sigma'_n = \underline{n}' \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{n}'$, et une partie tangentielle, $\underline{\sigma}'_t = \boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{n}' - \sigma'_n \underline{n}'$ (figure 9.5). On envisage un critère de rupture portant exclusivement sur la partie normale :

$$\max_{\underline{n}' \text{ tq } \underline{n}' \cdot \underline{N} = 0} \sigma'_n = \sigma_{cr} \tag{9.31}$$

La détermination du maximum de σ'_n revient à chercher la facette la plus défavorable au sein de la plaquette.

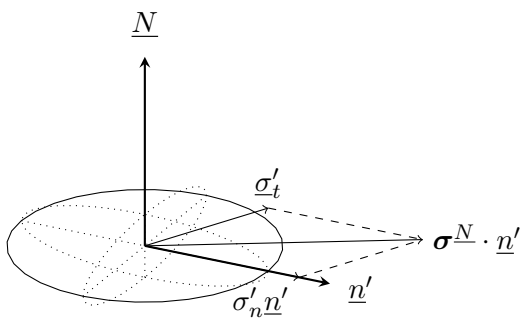


FIG. 9.5 – Plaquette d'axe $\underline{N}$, vecteur contrainte sur une facette de normale $\underline{n}'$ et ses composantes normale et tangentielle

Pour simplifier les calculs, on considère des plaquettes infiniment aplaties, c'est-à-dire des disques. On se place donc dans le cas limite du rapport d'aspect $r^s \to 0$. Le comportement des plaquettes est supposé élastique fragile. L'élasticité des plaquettes est caractérisée par le module de Young E_s et le coefficient de Poisson ν_s. La porosité de l'amas de plaquettes est notée φ_h. Les modules élastiques effectifs, solutions de (2.16), sont notés k_h et μ_h. L'indice h fait référence aux hydrates vus comme un milieu homogénéisé, sans spécifier s'il s'agit d'hydrates haute ou basse densité.

La contrainte moyenne dans une plaquette d'orientation $\underline{N}$ donnée est estimée par le biais de la solution du problème de l'inhomogénéité d'Eshelby, comme effectué en section 5.2.1 sur le

plâtre pris. Ceci conduit au tenseur de localisation des contraintes $\mathbb{B}$, tel que :

$$\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} = \mathbb{B}(\underline{N}, \nu_s, \varphi_h) : \boldsymbol{\Sigma} \tag{9.32}$$

On recherche le domaine d'élasticité macroscopique dans l'espace des contraintes principales. Le tenseur des contraintes macroscopiques est donc pris sous la forme :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \Sigma_1 \underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \Sigma_2 \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2 + \Sigma_3 \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \tag{9.33}$$

9.2.2 Localisation : détermination de σ'_n

Dans la base sphérique $(\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi)$, les composantes du tenseur de contraintes moyen dans la plaquette d'axe $\underline{N} = \underline{e}_r$ sont notées :

$$\boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} = \begin{pmatrix} \sigma_{rr} & \sigma_{r\theta} & \sigma_{r\phi} \\ \sigma_{r\theta} & \sigma_{\theta\theta} & \sigma_{\theta\phi} \\ \sigma_{r\phi} & \sigma_{\theta\phi} & \sigma_{\phi\phi} \end{pmatrix}_{(\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi)} \tag{9.34}$$

Ces composantes dépendent de (θ, ϕ) décrivant l'orientation de la plaquette.

On se donne un vecteur $\underline{n}'$ situé dans le plan de la plaquette. Son orientation est caractérisée par l'angle ψ qu'il fait avec $\underline{e}_\theta$ (figure 9.6).

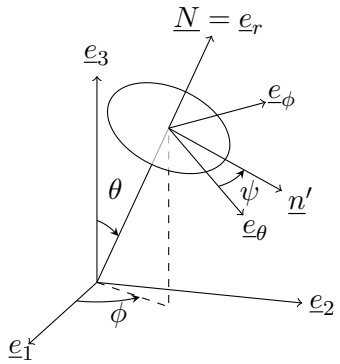


FIG. 9.6 – Plaquette d'axe $\underline{N} = \underline{e}_r$, vecteur $\underline{n}'$ dans le plan de la plaquette, caractérisé par l'angle ψ

La partie normale du vecteur contrainte sur la facette d'axe $\underline{n}'$ s'écrit :

$$\sigma'_n = \underline{n}' \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\underline{N}} \cdot \underline{n}' = \frac{\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{\phi\phi}}{2} + \frac{\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\phi\phi}}{2} \cos(2\psi) + \sigma_{\theta\phi} \sin(2\psi) \tag{9.35}$$

On peut interpréter cette contrainte comme la contrainte de traction dans la direction $\underline{n}'$. Il s'agit d'une fonction de ψ qui est π-périodique, puisque selon deux directions $\underline{n}'$ opposées, la contrainte σ'_n est évidemment la même. On rappelle que dans (9.35), $\sigma_{\theta\theta}$, $\sigma_{\phi\phi}$ et $\sigma_{\theta\phi}$ dépendent à la fois de l'orientation de la plaquette par le biais de θ, ϕ, et du tenseur de contraintes macroscopique par le biais des contraintes principales $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$.

9.2.3 Recherche de la famille de plaquettes critiques

On recherche, pour un état de contraintes macroscopique $(\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$ donné, l'orientation critique. Il s'agit de l'orientation (θ, ϕ) de la famille de plaquettes dans laquelle

$$\max_{\underline{n}' \text{ tq } \underline{n}' \cdot \underline{N} = 0} \sigma'_n \tag{9.36}$$

est maximum. Il faut donc commencer par rechercher, dans une plaquette d'orientation θ, ϕ donnée, la direction $\underline{n}'$ qui maximise la contrainte de traction σ'_n. Ensuite, il s'agira de rechercher l'orientation qui maximise cette contrainte de traction maximale dans la plaquette.

Recherche de la direction critique dans une plaquette d'orientation donnée

Il s'agit de rechercher le maximum de σ'_n (9.35), lorsque $\underline{n}'$ décrit le plan de la plaquette, c'est-à-dire lorsque $\psi \in [0, \pi[$. Les paramètres $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3, \theta, \phi$ sont fixés. Il est facile de montrer que le maximum est atteint en $\psi = t/2$ où t est caractérisé par :

$$\cos t = \frac{(\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\phi\phi})/2}{\sqrt{(\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\phi\phi})^2/4 + \sigma_{\theta\phi}^2}} \quad \text{et} \quad \sin t = \frac{\sigma_{\theta\phi}}{\sqrt{(\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\phi\phi})^2/4 + \sigma_{\theta\phi}^2}} \tag{9.37}$$

On note $\underline{n}$ la direction permettant d'atteindre le maximum. La valeur de ce maximum est :

$$\sigma_n = \frac{\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{\phi\phi}}{2} + \sqrt{\left(\frac{\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\phi\phi}}{2}\right)^2 + \sigma_{\theta\phi}^2} \tag{9.38}$$

Recherche de l'orientation critique

La contrainte de traction maximale est connue dans chaque plaquette. Il s'agit maintenant de déterminer la plaquette critique, c'est-à-dire de maximiser, pour un état de contrainte macroscopique donné, σ_n par rapport à l'orientation (θ, ϕ) de la plaquette.

Après quelques calculs, on montre que (9.38) peut se mettre sous la forme :

$$\sigma_n = a_0(\Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3) + a_1 f(\theta, \phi) \tag{9.39}$$

avec :

$$\begin{aligned} f(\theta, \phi) &= \sqrt{\begin{array}{l} \left[[(\Sigma_1 - \Sigma_2)\cos^2\phi + \Sigma_2 - \Sigma_3]\cos^2\theta + (\Sigma_1 - \Sigma_2)\cos^2\phi + \Sigma_3 - \Sigma_1\right]^2 \\ + [2(\Sigma_1 - \Sigma_2)\cos\theta\cos\phi\sin\phi]^2 \end{array}} \\ &+ a_2\left[(\Sigma_2 - \Sigma_1)\sin^2\theta\cos^2\phi + (\Sigma_2 - \Sigma_3)\cos^2\theta - \Sigma_2\right] \end{aligned} \tag{9.40}$$

et :

$$a_1 = \frac{5\mu_s(3k_s + 4\mu_s)}{2(1 - \varphi_h)[6\mu_h(k_s + 2\mu_s) + \mu_s(9k_s + 8\mu_s)]} \quad \text{et} \quad a_2 = \frac{9k_s\mu_s + 2\mu_h(2\mu_s - 3k_s)}{\mu_s(3k_s + 4\mu_s)} \tag{9.41}$$

On a $a_1 > 0$ et $a_2 > 1$ lorsque $\nu_s > 0$, ce qui est toujours notre cas. L'expression de a_0 est trop lourde pour être explicitée dans ce texte.

Il s'agit à présent de maximiser la fonction f. Par symétrie, il suffit de rechercher le maximum sur $[0, \pi/2] \times [0, \pi/2]$. On montre qu'en fait il ne peut y avoir d'extremum sur $]0, \pi/2[\times]0, \pi/2[$. On recherche donc le maximum sur l'un des côtés du huitième de sphère unité : $\theta = \pi/2$, $\phi = 0$ ou $\phi = \pi/2$. Les résultats sont synthétisés dans la table 9.1.

Il reste à déterminer le maximum global de f. Il faut pour cela distinguer plusieurs cas selon la façon dont s'ordonnent les contraintes principales. On montre qu'en fait l'axe de révolution de la plaquette critique coïncide avec l'axe de la plus petite contrainte principale (voir figure 9.7).

Revenons un instant sur la direction maximisant la contrainte de traction dans une plaquette critique. Considérons par exemple le cas $\Sigma_3 < \Sigma_1$ et $\Sigma_3 < \Sigma_2$: la plaquette critique est de normale $\underline{e}_3$ ($\theta = 0$). On montre à partir de (9.37) que si $\Sigma_1 > \Sigma_2$, la direction critique dans la plaquette est $\underline{e}_1$. De façon similaire, si $\Sigma_2 > \Sigma_1$, la direction critique dans la plaquette est $\underline{e}_2$ (voir figure 9.8). Ainsi, la direction la plus défavorable dans la plaquette critique coïncide avec la direction principale correspondant à la contrainte principale la plus élevée. Et la normale à la plaquette critique coïncide avec la direction principale associée à la contrainte principale la plus faible. Ces résultats sont conformes à l'intuition.

$\theta = \pi/2$	maximum local de f	
cas	ϕ	valeur de f
$\Sigma_2 > \Sigma_1$	0	$\lvert\Sigma_2 - \Sigma_3\rvert - a_2\Sigma_1$
$\Sigma_1 > \Sigma_2$	$\pi/2$	$\lvert\Sigma_1 - \Sigma_3\rvert - a_2\Sigma_2$

$\phi = 0$	maximum local de f	
cas	θ	valeur de f
$\Sigma_1 > \Sigma_3$	0	$\lvert\Sigma_1 - \Sigma_2\rvert - a_2\Sigma_3$
$\Sigma_3 > \Sigma_1$	$\pi/2$	$\lvert\Sigma_3 - \Sigma_2\rvert - a_2\Sigma_1$

$\phi = \pi/2$	maximum local de f	
cas	θ	valeur de f
$\Sigma_2 > \Sigma_3$	0	$\lvert\Sigma_2 - \Sigma_1\rvert - a_2\Sigma_3$
$\Sigma_3 > \Sigma_2$	$\pi/2$	$\lvert\Sigma_3 - \Sigma_1\rvert - a_2\Sigma_2$

TAB. 9.1 – Maximisation locale de la fonction f définie par (9.40)

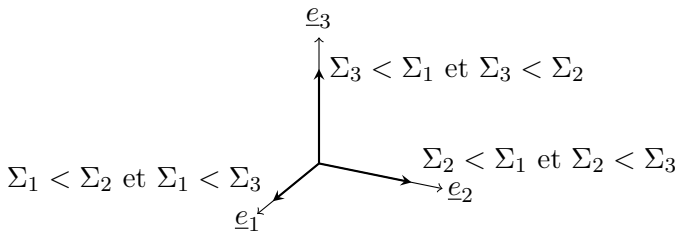


FIG. 9.7 – Normale à la famille des plaquettes critiques (représentée par une flèche en trait gras) selon la façon dont s'ordonnent les contraintes principales macroscopiques

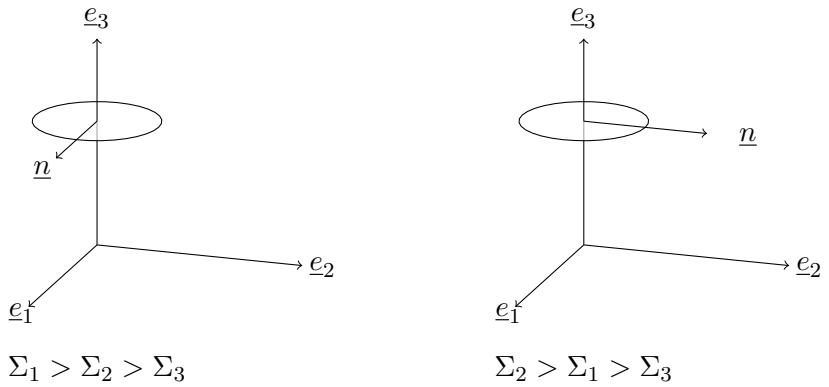


FIG. 9.8 – Plaquette critique et direction critique $\underline{n}$ au sein de cette plaquette, selon l'ordre des contraintes principales

9.2.4 Détermination du critère macroscopique de limite élastique

On ordonne sous la forme $\Sigma_I \geq \Sigma_{II} \geq \Sigma_{III}$ les contraintes principales. Le maximum global de f est dans tous les cas :

$$\max_{0\leq\theta\leq\pi,\ 0\leq\phi<2\pi} f(\theta,\phi) = \Sigma_I - \Sigma_{II} - a_2\Sigma_{III} \tag{9.42}$$

Le domaine d'élasticité macroscopique s'écrit alors, en rappelant (9.39) :

$$a_0(\Sigma_I + \Sigma_{II} + \Sigma_{III}) + a_1(\Sigma_I - \Sigma_{II} - a_2\Sigma_{III}) < \sigma_{cr} \tag{9.43}$$

Cette inégalité peut se réécrire sous la forme :

$$b_1\Sigma_I + b_2\Sigma_{II} + b_3\Sigma_{III} < \sigma_{cr} \tag{9.44}$$

avec :

$$b_1 = a_0 + a_1\ , \quad b_2 = a_0 - a_1 \quad \text{et} \quad b_3 = a_0 - a_1a_2 \tag{9.45}$$

Notons que b_1, b_2 et b_3 ne dépendent que de ν_s et φ_h (figure 9.9). Lorsque $\varphi_h \to 0$, $b_1 \to 1$, $b_2 \to 0$ et $b_3 \to 0$, si bien que le critère macroscopique devient $\Sigma_I < \sigma_{cr}$. On retrouve dans ce cas le critère de Rankine, analogue direct du critère local (lorsque $\varphi_h \to 0$, on ne distingue plus les différentes plaquettes).

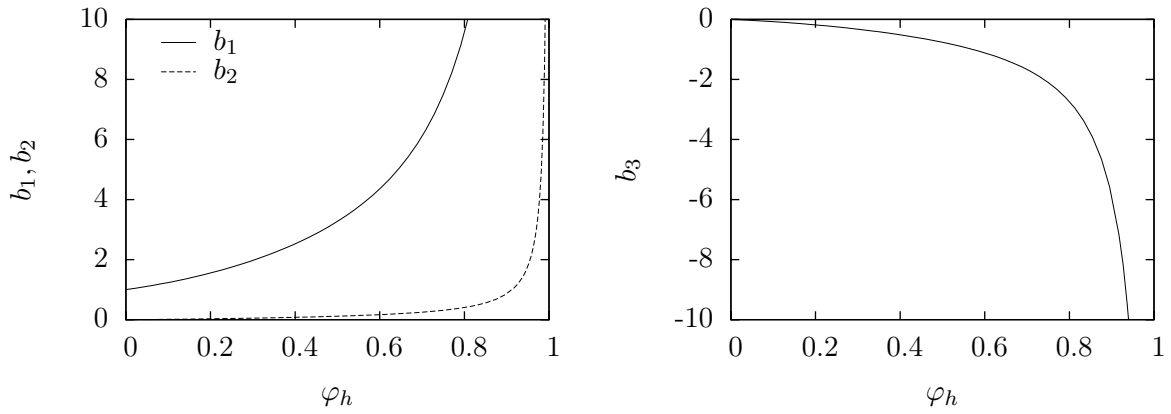


FIG. 9.9 – Paramètres b_1, b_2, b_3 intervenant dans le critère macroscopique de limite élastique ($\nu_s = 0.27$)

Dans l'espace des contraintes principales, le critère macroscopique est un cône à base hexagonale (figure 9.10). La pointe du cône est obtenue sur la trissectrice $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = h$. Elle est caractérisée par $h = h^{max}$, avec :

$$\frac{h^{max}}{\sigma_{cr}} = \frac{1}{b_1 + b_2 + b_3} = \frac{(1-\varphi_h)k_s(3k_h + 4\mu_s)}{6k_s\mu_s + k_h(3k_s - 2\mu_s)} \tag{9.46}$$

On représente, sur la figure 9.11, h^{max} en fonction de la porosité.

Pour appréhender l'influence de la porosité sur l'ouverture du cône, on peut déterminer les paramètres β contrôlant l'ouverture des cônes de Drucker-Prager ($\Sigma_d = \beta(h - \Sigma_m)$) inscrit et circonscrit. La méthode a déjà été exposée en section 5.4.3, voir équation (5.30) en remplaçant les c_i par les b_i donnés par (9.45). Les résultats sont tracés sur la figure 9.12 : plus la porosité est élevée, plus le cône est fermé.

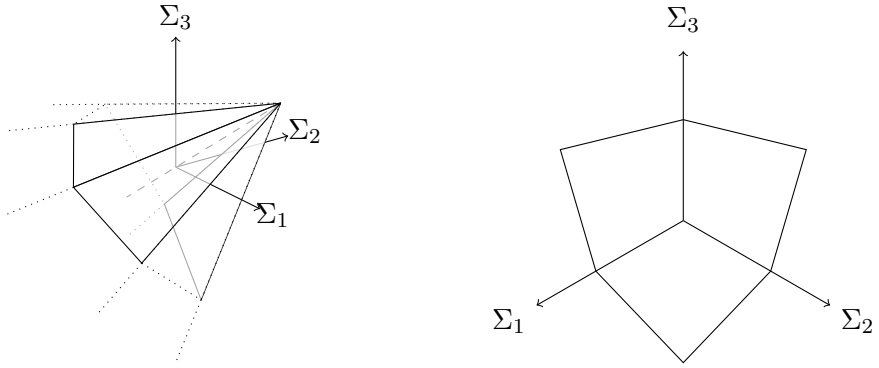


FIG. 9.10 – Critère de limite élastique macroscopique dans l'espace des contraintes principales, et coupe par un plan à Σ_m constant

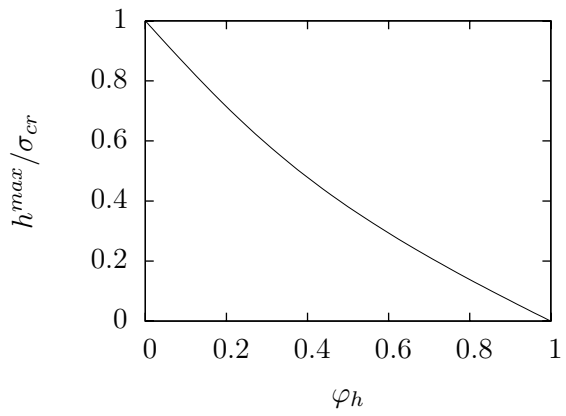


FIG. 9.11 – Pointe du critère macroscopique de limite élastique ($\nu_s = 0.27$)

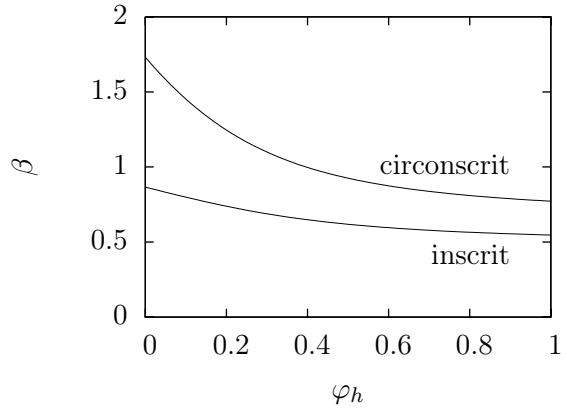


FIG. 9.12 – Paramètres β des cônes de Drucker-Prager inscrit et circonscrit ($\nu_s = 0.27$)

9.2.5 Cas de la traction / compression simple

Limite élastique uniaxiale

On considère un état de contrainte macroscopique uniaxial (traction ou compression simple). Les limites élastiques macroscopiques sont :

$$\Sigma_t^{lim} = \frac{\sigma_{cr}}{b_1} \quad \text{et} \quad \Sigma_c^{lim} = -\frac{\sigma_{cr}}{b_3} \tag{9.47}$$

avec les mêmes notations qu'au début de la section 5.3.4. La figure 9.13 gauche représente ces limites élastiques en fonction de la porosité. Notons qu'à porosité nulle, la limite élastique en compression tend vers l'infini. C'est lié au choix du critère local, limité uniquement en traction. Pour remédier à cela, il conviendrait d'enrichir le critère local, par exemple en y faisant intervenir la partie tangentielle $|\underline{\sigma}_t'|$ du vecteur contrainte (voir figure 9.5), comme on l'a fait sur le plâtre pris en section 5.4.

On représente en partie droite de la figure 9.13 la déformation macroscopique E_{33} atteinte juste à la limite élastique.

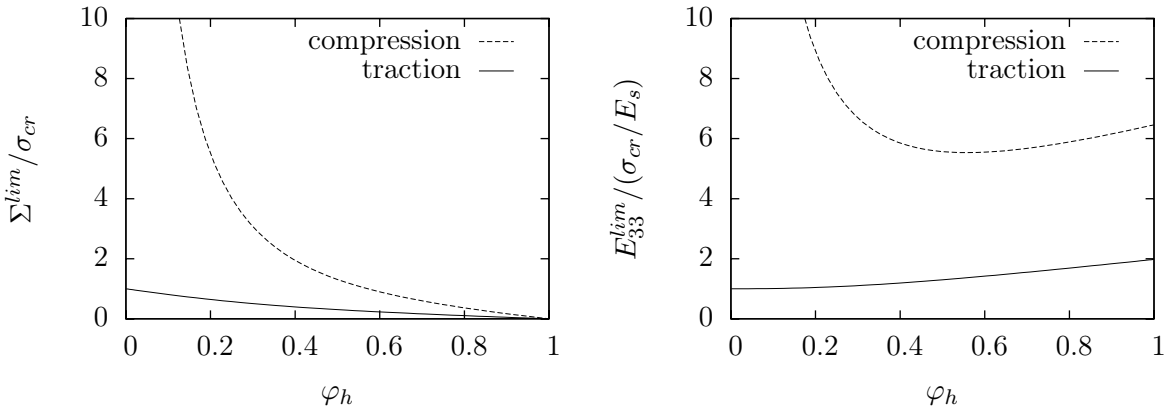


FIG. 9.13 – Limites élastiques en traction et compression simple, et déformation à la limite élastique

Comparaison avec les résultats obtenus sur un amas d'aiguilles

Il peut être intéressant de comparer les limites élastiques uniaxiales obtenues pour un amas d'aiguilles (pour le plâtre pris, voir section 5.3 et plus précisément la figure 5.8) avec celles que nous venons de déterminer pour un amas de plaquettes. La difficulté pour établir une comparaison objective réside dans le choix du paramètre σ_{cr} dans les deux cas. En effet, ces paramètres peuvent difficilement être comparés, surtout s'ils sont censés rendre compte de façon approximative du mécanisme de rupture par déchaussement des particules (c'est le cas pour le gypse). Néanmoins, considérons que ces paramètres prennent la même valeur dans les deux cas (aiguilles et plaquettes). Cela permet d'obtenir la même limite élastique en traction simple lorsque la porosité tend vers 0. On obtient alors les courbes de la figure 9.14, tracées avec le même coefficient de Poisson du solide, $\nu_s = 0.3$. En traction simple, à porosité donnée, les plaquettes permettent d'obtenir une limite élastique plus grande. En compression simple, ce n'est vrai qu'aux porosités les plus élevées ($\varphi > 0.45$). Rappelons que ce genre de comparaison ne vaut qu'à titre indicatif, puisqu'il est difficile de mettre sur le même plan les paramètres σ_{cr} des deux cas.

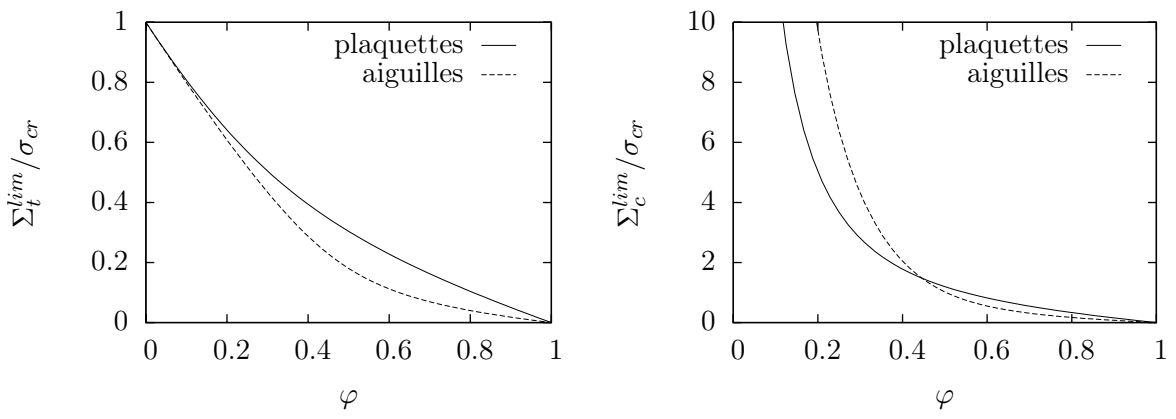


FIG. 9.14 – Limites élastiques en traction et compression simple, pour des polycristaux poreux à base de disques ou d'aiguilles ($\nu_s = 0.3$)

Chapitre 10

Effets différés (fluage) des C-S-H et pâtes de ciment

L'élasticité de la pâte de ciment a déjà fait l'objet d'un modèle micromécanique, dont la validation a permis de dégager un modèle morphologique offrant une description de la microstructure certes simplifiée mais permettant des estimations réalistes du module de Young en cours d'hydratation. On cherche ici à réutiliser ce modèle morphologique dans le contexte du fluage, en s'intéressant d'abord aux hydrates. On suppose que le mécanisme microscopique responsable du fluage est le glissement des feuillets les uns sur les autres, au sein des particules solides de C-S-H. Trois modèles de complexité croissante sont proposés. Le premier considère que le seul mécanisme de déformation possible dans les particules est le glissement, visqueux, feuillet sur feuillet. Le second ajoute un mécanisme de déformation élastique en extension simple, selon la normale aux feuillets. Le troisième part de particules élastiques isotropes et en modifie le comportement de glissement feuillet sur feuillet pour le rendre viscoélastique. On montre que les résultats issus de ce troisième modèle sont les plus pertinents vis-à-vis du fluage des hydrates. Enfin, on réalise le changement d'échelle supplémentaire nécessaire pour estimer le fluage de la pâte de ciment.

Sommaire

10.1 Glissement visqueux feuillet sur feuillet **149**
10.2 Glissement visqueux et raideur normale **150**
10.2.1 Fluage à court terme 152
10.2.2 Fluage à long terme 153
10.2.3 Simulation numérique de la déformation de fluage 155
10.2.4 Effet du rapport d'aspect des particules solides 157
10.3 Glissement visqueux et raideur isotrope **158**
10.3.1 Fluage à court terme 160
10.3.2 Fluage à long terme 160
10.3.3 Simulation numérique de la déformation de fluage 162
10.3.4 Effet du rapport d'aspect des particules solides 164
10.4 Estimation du fluage de la pâte **164**
10.4.1 Modèle 164
10.4.2 Confrontation expérimentale 164
10.4.3 Questions et perspectives d'amélioration 166

Un modèle d'élasticité d'une pâte de ciment en cours d'hydratation a été proposé dans le chapitre 8. Ses prédictions sont en assez bon accord avec des données expérimentales sur le degré d'hydratation de prise, le module de Young en cours d'hydratation et celui de pâtes complètement hydratées. Ce modèle micromécanique faisant appel à l'homogénéisation des milieux aléatoires, il a été nécessaire de construire une description simplifiée de la morphologie d'une pâte de ciment en cours d'hydratation. Ce modèle morphologique donnant des estimations réalistes de l'élasticité de la pâte, il est très tentant de chercher à le réutiliser pour évaluer d'autres phénomènes mécaniques tels que le fluage.

On considère le fluage propre, viscoélastique, à hydratation stabilisée, en conditions drainées. On s'attend à ce que les hydrates soient la seule phase qui manifeste des effets différés, c'est pourquoi on commence par étudier ceux-ci. Ce chapitre propose une synthèse des différentes approches envisagées pour modéliser le fluage des hydrates. Il se base sur les méthodes d'homogénéisation mises en place dans [31], et sur les techniques couramment employées pour traiter les comportements viscoélastiques en mécanique.

On aborde le fluage des hydrates avec l'hypothèse que le mécanisme activé à l'échelle microscopique est un glissement relatif des feuillets à l'intérieur des particules solides de C-S-H (particules schématiquement représentées sur la figure 10.1). Cette hypothèse, bien qu'encore débattue, a été avancée par de nombreux auteurs, pour lesquels l'eau jouerait le rôle de lubrifiant entre les feuillets [73, 101, 130, 8, 48, 87, 63, 119].

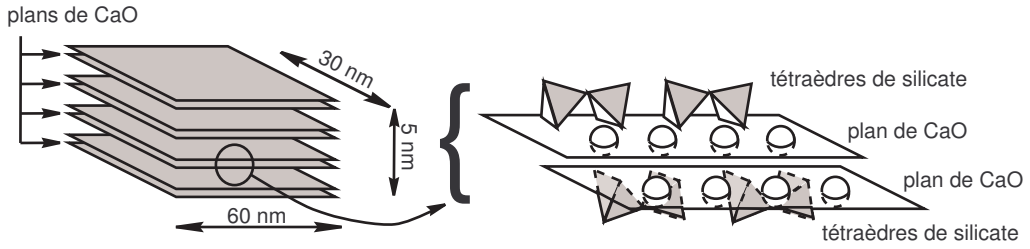


FIG. 10.1 – Représentation schématique d'une particule de C-S-H ([5], d'après le modèle de Courault et Nonat [25, 88])

Ce chapitre présente d'abord trois sections, chacune étant dédiée au traitement d'une hypothèse sur le comportement de la particule solide de C-S-H, menant à des modèles de plus en plus élaborés. Dans un premier temps, on suppose que les particules ne présentent qu'un seul mécanisme de déformation : le glissement visqueux feuillet sur feuillet (section 10.1). Ce modèle est cependant insuffisant car un blocage se manifeste aux faibles porosités. Un second modèle considère alors, en plus du glissement visqueux, un mécanisme de déformation élastique dans la direction normale aux feuillets (section 10.2). On met en évidence des résultats encourageants, compte tenu de la simplicité des « ingrédients de base » : plusieurs formes de réponses macroscopiques en fluage apparaissent, selon la densité de l'assemblage de particules. Cependant, l'absence de déformation élastique instantanée aux faibles porosités constitue la principale faiblesse de ce modèle. Un troisième modèle considère enfin des particules élastiques isotropes du point de vue de la déformation élastique, et isotropes transverses du point de vue de la déformation visqueuse, selon un mode de combinaison « en série » (section 10.3). Cette troisième approche se révèle être la plus satisfaisante pour modéliser le fluage des hydrates. Les différents modèles développés ici se nourrissent abondamment des résultats établis en annexe B dans un cadre élastique.

Chaque modèle est d'abord présenté en considérant des formes sphériques pour les particules de C-S-H, pour éviter d'alourdir inutilement l'exposé. Le cas de particules en forme d'*oblate* (ellipsoïde de révolution aplati), dont l'axe de révolution coïncide à la normale aux feuillets, est

considéré à la fin de chaque section, de manière à déterminer, au moins de façon qualitative, l'allure de la déformation de fluage des hydrates.

Pour terminer, la section 10.4 est consacrée au fluage de la pâte de ciment, obtenu à la fois en mettant en œuvre un changement d'échelle supplémentaire, et en exploitant des valeurs « réalistes » (au sens : celles du modèle élastique présenté au chapitre 8) du rapport d'aspect caractérisant la forme des particules d'hydrates. La comparaison du modèle proposé avec les données expérimentales est pour le moment essentiellement qualitative.

10.1 Glissement visqueux feuillet sur feuillet

Cette première approche considère que les particules solides de C-S-H présentent un unique mode de déformation : le glissement visqueux feuillet sur feuillet. Comme rappelé au début de l'annexe B, le comportement de chaque particule feuilletée est modélisé par un tenseur visqueux isotrope transverse [31]. Ainsi, le comportement homogénéisé d'une particule feuilletée, dont la normale aux feuillets est $\underline{e}_3$, peut s'écrire :

$$\dot{\varepsilon}_{11} = \dot{\varepsilon}_{22} = \dot{\varepsilon}_{33} = \dot{\varepsilon}_{12} = 0 \ , \quad \sigma_{23} = 2d_{2323}\dot{\varepsilon}_{23} \quad \text{et} \quad \sigma_{13} = 2d_{2323}\dot{\varepsilon}_{13} \tag{10.1}$$

avec $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ le tenseur taux de déformation et $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes. Le comportement macroscopique est alors purement visqueux. La morphologie étant de nature polycristalline, on propose de mettre en œuvre un schéma auto-cohérent pour estimer le tenseur de viscosité effectif. L'estimation auto-cohérente de ce dernier est notée $\mathbb{D}^{AC}$. Dans l'hypothèse d'une distribution uniforme des orientations des particules, le milieu effectif est isotrope, et on introduit les coefficients de viscosité en compression isotrope k^{AC} et en cisaillement μ^{AC}, de sorte que $\mathbb{D}^{AC} = 3k^{AC}\mathbb{J} + 2\mu^{AC}\mathbb{K}$. La porosité est notée φ.

Le comportement local, décrit par (10.1), a formellement la structure d'un comportement élastique, pourvu que le tenseur de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ soit remplacé par le tenseur taux de déformation $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Il est ainsi possible d'utiliser directement les résultats de l'homogénéisation des milieux aléatoires en élasticité. En particulier, on exploite ici les résultats établis en annexe B.2, en remarquant que la situation présente correspond à $c_{2323} = d_{2323}$ et $c_{3333} \to \infty$, soit $\rho = c_{2323}/c_{3333} \to 0$. On se tourne donc vers les développements limités de la section B.2.2, et en particulier vers (B.13), (B.14), (B.17) et (B.18). Ainsi, les deux premiers développements limités nous indiquent que $k^{AC} = c_{3333}f_k(\varphi, \rho) \to \infty$ et $\mu^{AC} = c_{3333}f_\mu(\varphi, \rho) \to \infty$ lorsque $0 < \varphi < 1/4$. Les deux autres développements limités donnent :

$$\frac{k^{AC}}{d_{2323}} = \frac{4(\varphi+2)(1-2\varphi)(1-\varphi)}{\varphi(3-\varphi)(4\varphi-1)} \quad \text{et} \quad \frac{\mu^{AC}}{d_{2323}} = \frac{3(\varphi+2)(1-2\varphi)}{(3-\varphi)(4\varphi-1)} \tag{10.2}$$

pour $1/4 < \varphi < 1/2$.

La figure 10.2 représente l'évolution des coefficients de viscosité macroscopique en fonction de la porosité. La porosité critique $\varphi = 1/4$ s'interprète comme un seuil de blocage : lorsque l'amas de particules feuilletées devient trop dense, une particule donnée ne peut plus se déformer par glissement feuillet sur feuillet car elle se trouve génée par les particules avoisinantes, d'orientation différente.

Il est à présent nécessaire de déterminer l'évolution de la valeur numérique de ce seuil en fonction du rapport d'aspect des particules solides. En effet, le modèle morphologique de pâte de ciment validé sur l'élasticité utilise des particules en forme d'*oblate* (ellipsoïde de révolution aplati), et non de sphère, pour représenter la phase solide des hydrates. Ce travail sera réalisé (avec l'étude de deux autres seuils) en section 10.2.4. Pour le moment, il suffit d'observer la courbe « $\varphi^{t\to\infty}$ » de la figure 10.11. Les points représentant le rapport d'aspect $r^s = 0.033$ et la porosité des hydrates (à hydratation complète, située entre 0.35 et 0.5 ; pour des rapports

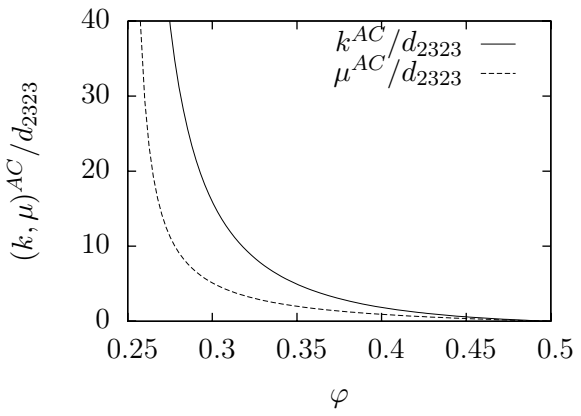


FIG. 10.2 – Coefficients de viscosité effectifs en fonction de la porosité

e/c compris entre 0.2 et 0.6), se trouvent bien en dessous du seuil. Ceci signifie que ce modèle prévoit un blocage à hydratation complète, quel que soit le rapport e/c. Ce n'est évidemment pas acceptable, et l'interdiction de la déformation d'extension normale aux feuillets semble être rédhibitoire de ce point de vue, comme nous allons le voir dans la section suivante.

10.2 Glissement visqueux feuillet sur feuillet et raideur élastique normale aux feuillets

Cette seconde approche considère que les particules feuilletées sont susceptibles de se déformer selon deux modes (figure 10.3) :

- un glissement simple, visqueux, feuillet sur feuillet,
- une extension simple, élastique, dans la direction normale aux feuillets.

Ainsi, le comportement d'une particule feuilletée, dont la normale aux feuillets est $\underline{e}_3$, peut s'écrire :

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{12} = 0 \ , \quad \sigma_{33} = c_{3333}\varepsilon_{33} \ , \quad \sigma_{23} = 2d_{2323}\dot{\varepsilon}_{23} \quad \text{et} \quad \sigma_{13} = 2d_{2323}\dot{\varepsilon}_{13} \tag{10.3}$$

c_{3333} et d_{2323} désignant respectivement la raideur élastique d'extension normale aux feuillets et la viscosité de glissement feuillet sur feuillet.

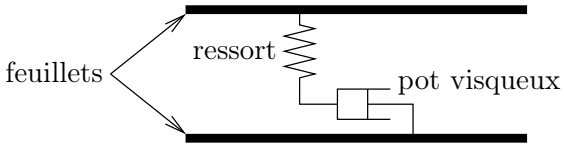


FIG. 10.3 – Représentation schématique du comportement viscoélastique des particules feuilletées, à l'aide de modèles rhéologiques placés entre deux feuillets

L'orientation variable des particules feuilletées va coupler ces modes de déformation pour donner naissance à un comportement effectif viscoélastique. Le ressort et le pot visqueux de la figure 10.3 ne sont assemblés ni en série, ni en parallèle, car ils concernent des mécanismes de déformation intéressant des directions distinctes. Au contraire, ils interagissent d'une façon beaucoup plus complexe et subtile, interaction dictée par l'arrangement des particules solides et leur orientation relative. La micromécanique, et plus précisément le schéma auto-cohérent,

couplée à la transformation de Laplace-Carson, permettent d'estimer cette interaction dans le cadre d'une distribution aléatoire des particules solides et de leur orientation.

La transformation de Laplace-Carson est en effet classiquement utilisée [102] pour transformer formellement un problème de viscoélasticité linéaire non vieillissante en un problème d'élasticité linéaire. L'homogénéisation dans le cadre de l'élasticité linéaire peut alors être mise à profit pour déterminer le comportement effectif dans l'espace de Carson. La dernière étape consiste à inverser la transformation de Laplace-Carson pour obtenir un comportement viscoélastique dans le domaine temporel. Il s'agit bien souvent de l'étape la plus délicate du point de vue mathématique car seules les inverses de fonctions simples sont connues de façon analytique ; à défaut, il faut recourir à une inversion numérique de la transformée de Laplace.

Les transformations de Laplace et de Laplace-Carson sont respectivement définies par :

$$\mathcal{L}_f(p) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\mathrm{e}^{-pt}\,\mathrm{d}t \quad \text{et} \quad f^\star(p) = p\mathcal{L}_f(p) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)p\mathrm{e}^{-pt}\,\mathrm{d}t \tag{10.4}$$

Ainsi (10.3) devient, dans le domaine de Carson :

$$\varepsilon_{11}{}^\star(p) = \varepsilon_{22}{}^\star(p) = \varepsilon_{12}{}^\star(p) = 0\ , \tag{10.5}$$

$$\sigma_{33}{}^\star(p) = c_{3333}\varepsilon_{33}{}^\star(p)\ , \quad \sigma_{13}{}^\star(p) = 2d_{2323}p\varepsilon_{13}{}^\star(p) \quad \text{et} \quad \sigma_{23}{}^\star(p) = 2d_{2323}p\varepsilon_{23}{}^\star(p)$$

Le comportement des particules solides dans l'espace de Carson a ainsi exactement la structure de celui traité en annexe B.2 (voir (B.9)) pourvu que c_{3333} et c_{2323} soient respectivement remplacés par $c^\star_{3333}(p) = c_{3333}$ et $c^\star_{2323}(p) = d_{2323}p$. Les résultats établis en annexe B.2 peuvent donc directement être réutilisés ici dans l'espace de Carson pour obtenir les modules effectifs $k^{AC\star}(p)$ et $\mu^{AC\star}(p)$ (voir structure donnée par (B.10)).

Une expérience de fluage à contrainte macroscopique purement sphérique impose $\mathbf{\Sigma}(t) = \Sigma_0\mathrm{H}(t)\mathbf{1}$ (en notant H la fonction de Heaviside), qui devient dans l'espace de Carson $\mathbf{\Sigma}^\star(p) = \Sigma_0\mathbf{1}$. L'évolution de la déformation macroscopique s'écrit alors $\boldsymbol{E}(t) = E^{sph}(t)\mathbf{1}$, avec la transformée de Carson de $E^{sph}(t)$:

$$E^{sph\star}(p) = \frac{\Sigma_0}{3c_{3333}f_k(\varphi, p_a)} \tag{10.6}$$

avec la variable de Carson adimensionnée $p_a = d_{2323}p/c_{3333}$. On définit alors la déformation sphérique adimensionnée et le temps adimensionné :

$$E_a^{sph} = \frac{c_{3333}}{\Sigma_0}E^{sph} \quad \text{et} \quad t_a = \frac{c_{3333}t}{d_{2323}} \tag{10.7}$$

La déformation adimensionnée E_a^{sph} apparaît comme une fonction des seuls φ et t_a. Elle est obtenue en remarquant que $t_a \to E_a^{sph}(\varphi, t_a)$ est la transformée de Carson inverse de $p_a \to 1/3/f_k(\varphi, p_a)$.

De façon similaire, une expérience de fluage à contrainte macroscopique purement déviatorique impose $\mathbf{\Sigma}(t) = \Sigma_0\mathrm{H}(t)\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$, où $\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$ est un tenseur déviatorique quelconque. L'évolution de la déformation macroscopique s'écrit alors $\boldsymbol{E}(t) = E^{dev}(t)\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$, avec :

$$E^{dev\star}(p) = \frac{\Sigma_0}{2c_{3333}f_\mu(\varphi, p_a)} \tag{10.8}$$

On définit alors la déformation déviatorique adimensionnée :

$$E_a^{dev} = \frac{c_{3333}}{\Sigma_0}E^{dev} \tag{10.9}$$

La déformation adimensionnée E_a^{dev} apparaît comme une fonction des seuls φ et t_a, $t_a \to E_a^{dev}(\varphi, t_a)$ étant la transformée de Carson inverse de $p_a \to 1/2/f_\mu(\varphi, p_a)$.

Les expressions des fonctions f_k et f_μ sont malheureusement beaucoup trop compliquées pour permettre une inversion analytique de la transformation de Laplace-Carson. Cependant, les évolutions asymptotiques de la déformation de fluage (lorsque $t_a \to 0$ ou $t_a \to \infty$) peuvent être appréhendées en exploitant les développements limités établis en section B.2.2.

10.2.1 Fluage à court terme

On s'intéresse d'abord au cas $t_a \to 0$, qui peut s'obtenir en examinant la limite de la transformée de Carson en $p_a \to \infty$.

Lorsque $0 < \varphi < 2/5$, on reprend les expressions (B.21) et (B.22) :

$$f_k(\varphi, p_a) = \mathcal{K}_1^\infty(\varphi) p_a + \mathcal{O}(1) \quad \text{et} \quad f_\mu(\varphi, p_a) = \mathcal{M}_1^\infty(\varphi) p_a + \mathcal{O}(1) \tag{10.10}$$

ainsi la déformation sphérique de fluage s'écrit asymptotiquement :

$$E_a^{sph}(\varphi, t_a) \approx \frac{t_a}{3\mathcal{K}_1^\infty(\varphi)} \quad \text{quand} \quad t_a \to 0 \tag{10.11}$$

et de façon similaire la déformation déviatorique de fluage s'écrit :

$$E_a^{dev}(\varphi, t_a) \approx \frac{t_a}{2\mathcal{M}_1^\infty(\varphi)} \quad \text{quand} \quad t_a \to 0 \tag{10.12}$$

avec les fonctions de la porosité $\mathcal{K}_1^\infty$ et $\mathcal{M}_1^\infty$ explicitées en (B.23) et (B.24).

Ceci signifie que l'on n'observe pas de déformation élastique instantanée, et que la déformation augmente linéairement avec le temps : le comportement effectif s'identifie ici à celui d'un pot visqueux. La pente initiale de l'évolution de la déformation de fluage macroscopique est représentée sur la figure 10.4. Cette pente est une fonction croissante de la porosité, et elle tend vers l'infini quand $\varphi \to 2/5^-$, que ce soit en fluage sphérique ou en fluage déviatorique.

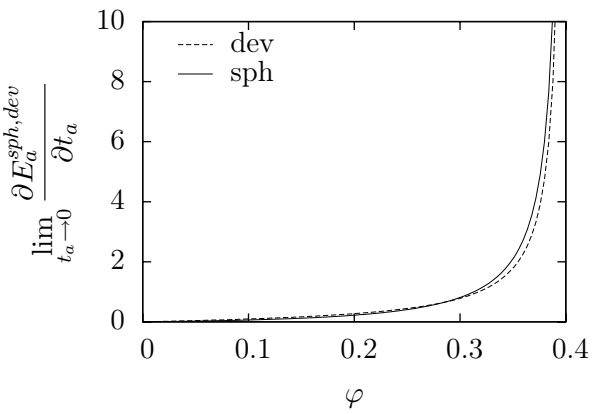


FIG. 10.4 – Pente initiale de l'évolution de la déformation de fluage

Lorsque $2/5 < \varphi < 1/2$, on reprend les expressions (B.25) et (B.26) :

$$f_k(\varphi, p_a) = \mathcal{K}_0^\infty(\varphi) + \mathcal{K}_{-1}^\infty(\varphi) p_a^{-1} + \mathcal{O}\left(p_a^{-2}\right) \quad \text{et} \quad f_\mu(\varphi, p_a) = \mathcal{M}_0^\infty(\varphi) + \mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi) p_a^{-1} + \mathcal{O}\left(p_a^{-2}\right) \tag{10.13}$$

ainsi la déformation sphérique de fluage s'écrit asymptotiquement :

$$E_a^{sph}(\varphi, t_a) \approx \frac{1}{3\mathcal{K}_0^\infty(\varphi)} - \frac{\mathcal{K}_{-1}^\infty(\varphi)}{3\mathcal{K}_0^\infty(\varphi)^2} t_a \quad \text{quand} \quad t_a \to 0 \tag{10.14}$$

et de façon similaire la déformation déviatorique de fluage s'écrit :

$$E_a^{dev}(\varphi, t_a) \approx \frac{1}{2\mathcal{M}_0^\infty(\varphi)} - \frac{\mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi)}{2\mathcal{M}_0^\infty(\varphi)^2} t_a \quad \text{quand} \quad t_a \to 0 \tag{10.15}$$

avec $\mathcal{K}_0^\infty$, $\mathcal{K}_{-1}^\infty$, $\mathcal{M}_0^\infty$ et $\mathcal{M}_{-1}^\infty$ donnés par les équations (B.27) à (B.30). La déformation de fluage présente maintenant une déformation élastique instantanée non nulle. La figure 10.5 représente celle-ci ainsi que la pente initiale des déformations de fluage sphérique et déviatorique.

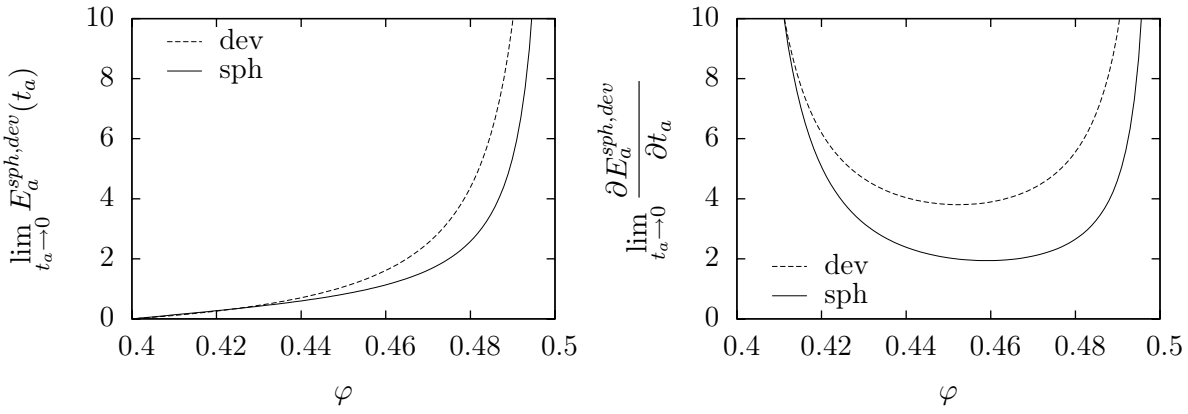


FIG. 10.5 – Partie élastique et pente initiales de la déformation de fluage

Ces résultats sur le fluage de court terme, schématisés sur la figure 10.6, appellent quelques commentaires :

- À court terme ($t_a \to 0$), le pot visqueux peut être considéré comme bloqué.
- Les polycristaux dont la porosité est supérieure à 2/5 sont suffisamment peu denses pour que la déformation élastique d'extension simple normale aux feuillets puisse s'exprimer sans être génée par les particules avoisinantes, d'orientation différente : on observe une déformation élastique instantanée. On remarque que sur l'intervalle de porosités $2/5 < \varphi < 1/2$, la pente initiale de la déformation de fluage n'est pas monotone. Plus précisément, cette dernière part de l'infini lorsque $\varphi \to 2/5^+$, décroît jusqu'à un minimum puis augmente pour tendre vers l'infini en $\varphi \to 1/2^-$. Ceci est valable sous sollicitation aussi bien sphérique que déviatorique (voir partie droite de la figure 10.5).
- Les polycristaux dont la porosité est inférieure à 2/5 sont au contraire trop denses : les particules avoisinantes empêchent la déformation d'extension dans le sens normal aux feuillets d'une particule donnée, et il n'y a pas de déformation élastique instantanée.
- On passe de manière continue d'une situation à l'autre, en $\varphi = 2/5$, puisque la courbe de fluage présente alors une déformation initiale nulle avec une tangente verticale.

10.2.2 Fluage à long terme

On s'intéresse à présent au cas $t_a \to \infty$, qui peut s'obtenir en examinant la limite de la transformée de Carson lorsque $p_a \to 0$.

Lorsque $0 < \varphi < 1/4$, on reprend les expressions (B.13) et (B.14) :

$$f_k(\varphi, p_a) = \mathcal{K}_0^0(\varphi) + \mathcal{O}(p_a) \quad \text{et} \quad f_\mu(\varphi, p_a) = \mathcal{M}_0^0(\varphi) + \mathcal{O}(p_a) \tag{10.16}$$

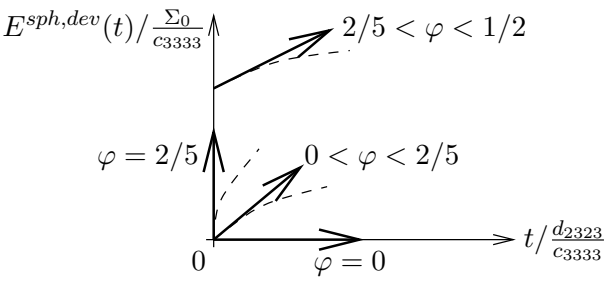


FIG. 10.6 – Allure de la déformation de fluage à court terme

ainsi la déformation sphérique de fluage s'écrit asymptotiquement :

$$E_a^{sph}(\varphi, t_a) \approx \frac{1}{3\mathcal{K}_0^0(\varphi)} \quad \text{quand} \quad t_a \to \infty \tag{10.17}$$

et de façon similaire la déformation déviatorique de fluage s'écrit :

$$E_a^{dev}(\varphi, t_a) \approx \frac{1}{2\mathcal{M}_0^0(\varphi)} \quad \text{quand} \quad t_a \to \infty \tag{10.18}$$

avec $\mathcal{K}_0^0$ et $\mathcal{M}_0^0$ donnés en (B.15) et (B.16). Dans ce cas, la déformation de fluage finit par se stabiliser, à un niveau qui dépend de la porosité (figure 10.7).

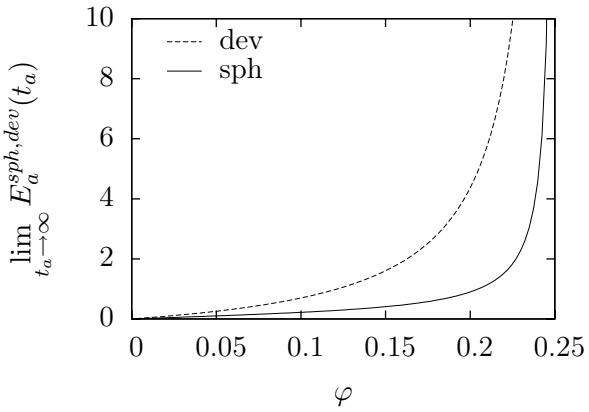


FIG. 10.7 – Déformation de fluage asymptotique à long terme

Lorsque $1/4 < \varphi < 1/2$, on reprend les expressions (B.17) et (B.18) :

$$f_k(\varphi, p_a) = \mathcal{K}_1^0(\varphi)p_a + \mathcal{O}\left(p_a^2\right) \quad \text{et} \quad f_\mu(\varphi, p_a) = \mathcal{M}_1^0(\varphi)p_a + \mathcal{O}\left(p_a^2\right) \tag{10.19}$$

ainsi la déformation sphérique de fluage s'écrit asymptotiquement :

$$E_a^{sph}(\varphi, t_a) \approx \frac{t_a}{3\mathcal{K}_1^0(\varphi)} \quad \text{quand} \quad t_a \to \infty \tag{10.20}$$

et de façon similaire la déformation déviatorique de fluage s'écrit :

$$E_a^{dev}(\varphi, t_a) \approx \frac{t_a}{2\mathcal{M}_1^0(\varphi)} \quad \text{quand} \quad t_a \to \infty \tag{10.21}$$

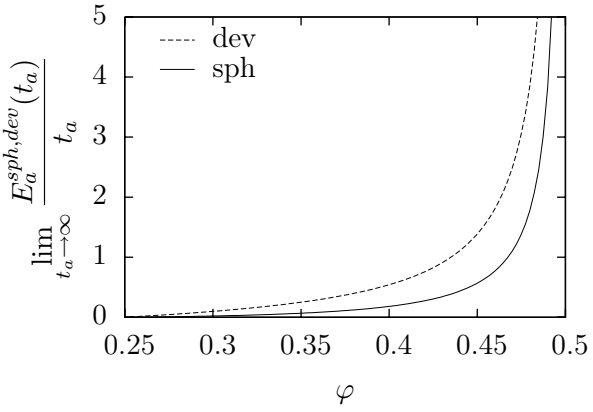


FIG. 10.8 – Pente de la branche asymptotique linéaire à long terme

avec $\mathcal{K}_1^0$ et $\mathcal{M}_1^0$ explicités en (B.19) et (B.20). Dans ce cas, il existe une branche asymptotique linéaire dont la pente est représentée sur la figure 10.8.

Ces résultats sur le fluage de long terme, schématisés sur la figure 10.9, appellent quelques commentaires :

- Les polycristaux dont la porosité est supérieure à 1/4 sont suffisamment peu denses pour que le glissement feuillet sur feuillet puisse s'exprimer, sans être géné par les particules avoisinantes, d'orientation différente : on observe un comportement macroscopique de pot visqueux.
- Les polycristaux dont la porosité est inférieure à 1/4 sont au contraire trop denses : les particules avoisinantes empêchent la déformation de glissement feuillet sur feuillet en sollicitant leur mode de déformation élastique en extension normale aux feuillets ; le comportement effectif asymptotique est de nature élastique.

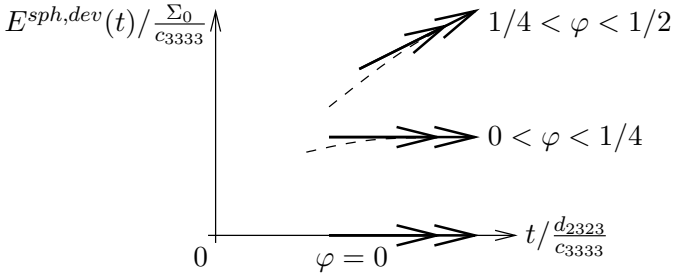


FIG. 10.9 – Allure de la déformation de fluage à long terme

10.2.3 Simulation numérique de la déformation de fluage

L'évolution complète de la déformation de fluage ne peut être déterminée que par le biais d'une procédure numérique d'inversion de la transformée de Laplace [1, 47, 115]. On représente sur la figure 10.10 l'évolution ainsi obtenue de la déformation de fluage sphérique et déviatorique, pour toute une gamme de porosités.

On retrouve les tendances mises en évidence en section 10.2.1 pour $t_a \to 0$, et en section 10.2.2 pour $t_a \to \infty$. De plus, on note que la déformation de fluage déviatorique est toujours quantitativement plus importante que la déformation de fluage sphérique.

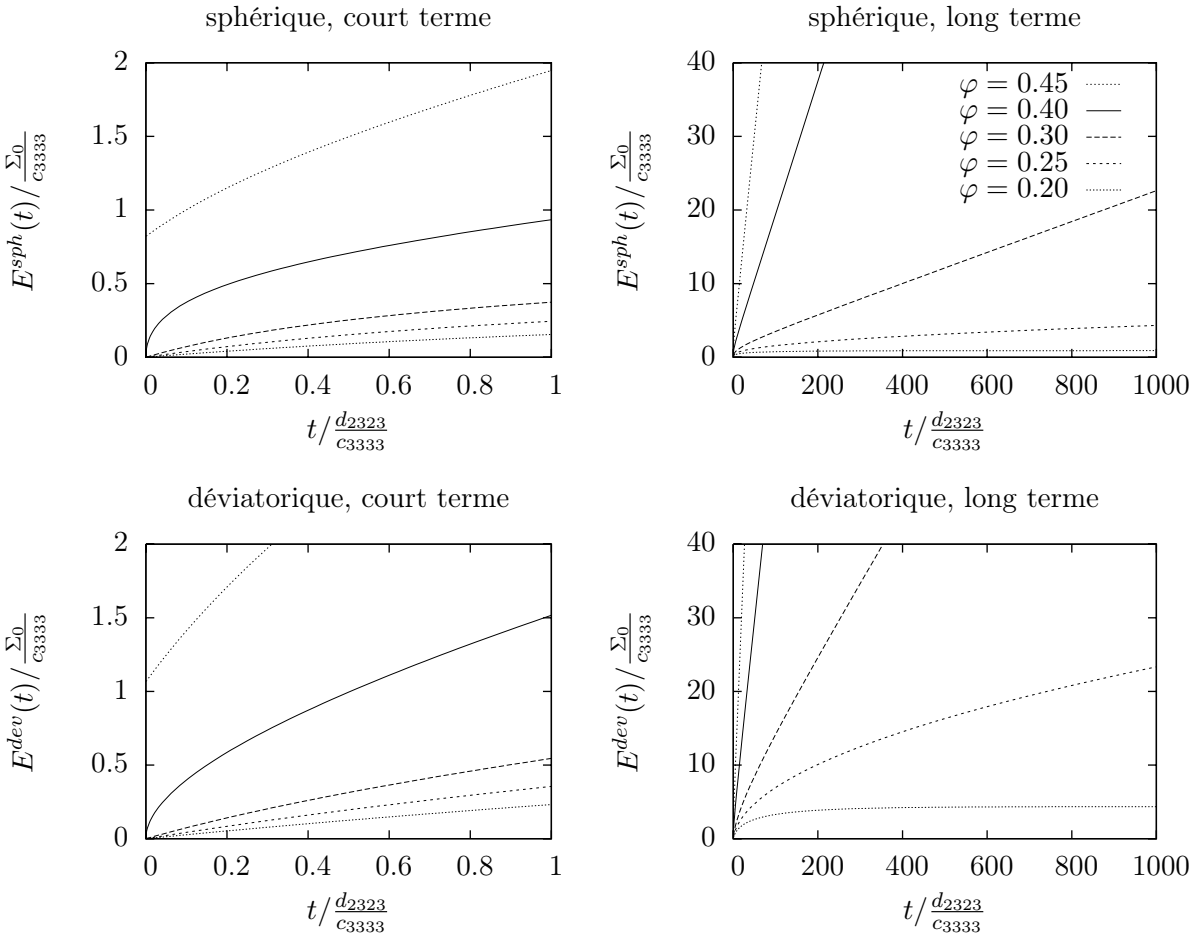


FIG. 10.10 – Déformations de fluage sphérique et déviatorique au cours du temps

10.2.4 Effet du rapport d'aspect des particules solides

Avec des particules sphériques, trois seuils en terme de porosité sont apparus au fil des sections précédentes :

- $\varphi^c = 1/2$: porosité critique ($\varphi > \varphi^c \Rightarrow$ déformation infinie) ;
- $\varphi^{t\to 0} = 2/5$: seuil à $t \to 0$ ($\varphi > \varphi^{t\to 0} \Rightarrow$ déformation élastique instantanée) ;
- $\varphi^{t\to\infty} = 1/4$: seuil à $t \to \infty$ ($\varphi < \varphi^{t\to\infty} \Rightarrow$ il existe une déformation asymptotique ; $\varphi > \varphi^{t\to\infty} \Rightarrow$ comportement asymptotique visqueux).

L'observation et la démarche micromécanique menées en élasticité (chapitre 8) ont montré que les particules solides des hydrates ne peuvent pas être assimilées à des sphères mais plutôt à des *oblates* (ellipsoïdes de révolution aplatis). Il est donc intéressant (et nécessaire) de rechercher l'influence du rapport d'aspect des particules solides sur les trois seuils précédents, afin de statuer sur le type d'évolution en fluage attendu.

Il s'agit de reprendre le travail réalisé en annexe B en remplaçant les particules sphériques de solide (sur la figure B.1 notamment) par des *oblates*, l'axe de révolution coïncidant avec la normale aux feuillets. La forme utilisée pour représenter l'espace poreux reste une sphère. Les expressions sont plus lourdes à manipuler du fait du remplacement dans l'expression (B.4) du tenseur de Hill $\mathbb{P}^{AC}_{sph}$ d'une sphère dans le milieu homogénéisé de rigidité $\mathbb{C}^{AC}$ par le tenseur de Hill $\mathbb{P}^{AC}_{obl}$ d'un *oblate* dans ce même milieu homogénéisé. Cependant, la méthode reste la même qu'en annexe B. Une fois les deux équations non linéaires en k^{AC} et μ^{AC} (homologues de (B.8)) obtenues, les trois porosités critiques peuvent être déterminées en fonction du rapport d'aspect r^s des particules solides de la manière suivante :

$\varphi^c(r^s)$ étant la porosité pour laquelle le module de Young homogénéisé s'annule, on fait $E^{AC} \to 0$ dans les deux équations, ce qui permet de déterminer $\varphi(r^s) = \varphi^c(r^s)$ (et le coefficient de Poisson $\nu^{AC}(r^s)$ correspondant) ;

$\varphi^{t\to 0}$ étant la porosité pour laquelle, lorsque $c_{2323}/c_{3333} \to \infty$, le module de Young homogénéisé devient infini, on fait $c_{2323}/c_{3333} \to \infty$ puis $E^{AC} \to \infty$ dans les deux équations, ce qui permet de déterminer $\varphi(r^s) = \varphi^{t\to 0}(r^s)$ (et le coefficient de Poisson $\nu^{AC}(r^s)$ correspondant) ;

$\varphi^{t\to\infty}$ étant la porosité pour laquelle, lorsque $c_{2323}/c_{3333} \to 0$, le module de Young homogénéisé s'annule, on fait $c_{2323}/c_{3333} \to 0$ puis $E^{AC} \to 0$ dans les deux équations, ce qui permet de déterminer $\varphi(r^s) = \varphi^{t\to\infty}(r^s)$ (et le coefficient de Poisson $\nu^{AC}(r^s)$ correspondant) ;

Au passage, du point de vue technique, il est bien plus facile de déterminer ces seuils que de déterminer les modules homogénéisés de façon complète. La figure 10.11 représente les évolutions de ces trois seuils (en termes de porosité) en fonction du rapport d'aspect des particules solides (pour des *oblates*, donc des rapports d'aspect $r^s < 1$). On note que tous les seuils tendent vers 1 lorsque le rapport d'aspect des particules tend vers 0 : avec des particules infiniment aplaties, il suffit d'une infime fraction volumique de solide pour que le seuil soit atteint. En d'autres termes, pour $r_s \to 0$ et $\varphi < 1$, il n'y a pas de déformation instantanée et il y a une déformation asymptotique.

Le modèle morphologique de pâte de ciment décrit en section 8.2 nous a conduit à donner un rapport d'aspect $r^s = 0.033$ aux particules solides constituant les C-S-H basse densité. Il s'agit maintenant, pour déterminer qualitativement l'allure de la réponse en fluage de ces C-S-H, de comparer la porosité de ce matériau aux trois seuils lus sur la figure 10.11 pour le rapport d'aspect $r^s = 0.033$.

L'intervalle de porosités typique des C-S-H basse densité se trouve bien en dessous des trois seuils représentés sur la figure 10.11. Ceci signifie que ce modèle donne :

- à court terme, une déformation de fluage sans déformation élastique instantanée ;
- à long terme, une déformation de fluage se stabilisant asymptotiquement.

Le même raisonnement peut être reconduit sur les hydrates haute densité : les mêmes conclusions sont valables.

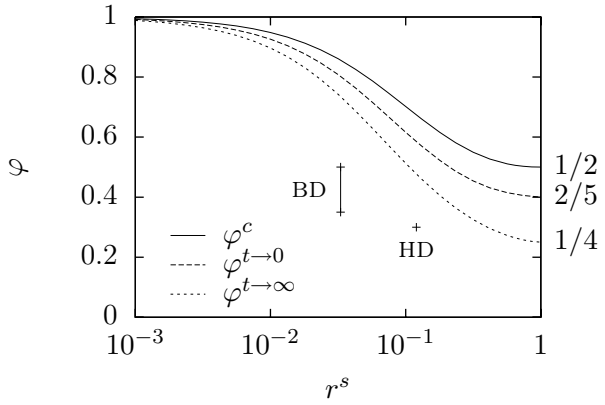


FIG. 10.11 – Influence du rapport d'aspect des particules solides sur les trois seuils en terme de porosité, et points représentant les hydrates basse (BD) et haute densité (HD) dans le plan (r^s, φ)

Ce modèle est déjà intéressant en lui-même, car il fait apparaître plusieurs types d'évolutions de la déformation de fluage, selon la porosité, avec pour seuls « ingrédients de base » une raideur et un pot visqueux entre les feuillets. Cependant, il ne prévoit pas de déformation élastique instantanée pour les hydrates, alors qu'il en existe une. De plus, le modèle de pâte de ciment développé et validé en élasticité (chapitre 8) est capable de la quantifier. La cohérence de la démarche impose que le modèle viscoélastique intègre en termes d'élasticité instantanée ce que donne le modèle élastique.

Physiquement, le modèle de fluage des hydrates qui vient d'être développé ne présente pas de déformation élastique instantanée car le pot visqueux inhibe initialement tout glissement feuillet sur feuillet. Pour remédier à cela et permettre une déformation de glissement à l'échelle particulaire, il faudrait placer en série du pot visqueux un ressort. Ainsi les particules feuilletées présenteraient deux composantes de raideur instantanées non infinies : c_{3333} et c_{2323}. Cette rigidité resterait cependant isotrope transverse, alors que celle employée par le modèle élastique est isotrope. Plus simplement, on propose de mettre en jeu des particules isotropes du point de vue de la déformation élastique, et isotropes transverses du point de vue de la déformation visqueuse, selon un mode d'assemblage « en série ».

10.3 Glissement visqueux feuillet sur feuillet et raideur élastique isotrope

Le troisième modèle proposé part d'une particule élastique isotrope, identique à celle du modèle élastique (chapitre 8), et en modifie le comportement en introduisant une composante visqueuse. Plus précisément, on modifie le comportement en glissement simple feuillet sur feuillet, en remplaçant la raideur élastique par un modèle de Maxwell (raideur en série avec un pot visqueux) : voir figure 10.12. De cette façon, l'élasticité instantanée de la particule correspond exactement à une élasticité isotrope, comme dans le modèle élastique. Ainsi, la cohérence interne de la modélisation est assurée. Les modules élastiques sont notés k_s, μ_s. La viscosité mise en série de la raideur μ_s dans le cas du glissement feuillet sur feuillet est notée η_s.

Dans l'espace de Carson, la souplesse de la particule dont la normale aux feuillets est $\underline{e}_r$, orientée par les deux angles θ et ϕ, s'écrit alors :

$$\mathbb{S}_s{}^\star(\theta, \phi, p) = \mathbb{S}_s^e + \mathbb{S}_s^{v\star}(\theta, \phi, p) \tag{10.22}$$

FIG. 10.12 – Remplacement de la raideur par un modèle de Maxwell

avec la partie élastique isotrope :

$$\mathbb{S}_s^e = \frac{1}{3k_s}\mathbb{J} + \frac{1}{2\mu_s}\mathbb{K} \tag{10.23}$$

et la partie visqueuse (qui, elle, dépend de l'orientation de la particule), écrite en notation de Voigt :

$$\mathbb{S}_s^{v\star}(\theta,\phi,p) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/(2\eta_s p) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/(2\eta_s p) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{(\underline{e}_\theta,\underline{e}_\phi,\underline{e}_r)} \tag{10.24}$$

Les trois paramètres caractérisant le comportement viscoélastique de la particule sont donc :

- les modules élastiques de compression k_s et cisaillement μ_s, pris égaux aux modules élastiques de la particule solide de C-S-H du modèle élastique (chapitre 8) ;
- la viscosité η_s intervenant dans le modèle de Maxwell régissant le glissement feuillet sur feuillet.

Dans l'espace de Carson, la souplesse de la particule prend exactement la forme de la souplesse introduite en annexe B.3, pourvu que k, μ et c_g soient respectivement remplacés par $k^\star(p) = k_s$, $\mu^\star(p) = \mu_s$ et ${c_g}^\star(p) = \eta_s p$. Les résultats établis en annexe B.3 peuvent donc ici être réutilisés pour obtenir les modules homogénéisés $k^{AC\star}(p)$ et $\mu^{AC\star}(p)$ dans l'espace de Carson (structure décrite par (B.35)).

Comme déjà vu précédemment, une expérience de fluage à contrainte macroscopique purement sphérique impose $\mathbf{\Sigma}(t) = \Sigma_0 \mathrm{H}(t)\mathbf{1}$, soit $\mathbf{\Sigma}^\star(p) = \Sigma_0\mathbf{1}$. La déformation macroscopique s'écrit alors $\boldsymbol{E}(t) = E^{sph}(t)\mathbf{1}$ avec la transformée de Carson de $E^{sph}(t)$:

$$E^{sph\star}(p) = \frac{\Sigma_0}{3k^{AC\star}(p)} = \frac{\Sigma_0}{3k_s g_k(\varphi,\nu_s,p_a)} \tag{10.25}$$

avec $p_a = \eta_s p/\mu_s$ la variable de Carson adimensionnée. On peut alors définir la déformation sphérique adimensionnée et le temps adimensionné :

$$E_a^{sph} = \frac{k_s}{\Sigma_0}E^{sph} \quad \text{et} \quad t_a = \frac{\mu_s t}{\eta_s} \tag{10.26}$$

La déformation sphérique adimensionnée E_a^{sph} apparaît alors comme une fonction des seuls φ, ν_s, t_a, et sa transformée de Carson s'écrit :

$$E_a^{sph\star}(\varphi,\nu_s,p_a) = \frac{1}{3g_k(\varphi,\nu_s,p_a)} \tag{10.27}$$

De façon similaire, une expérience de fluage à contrainte macroscopique purement déviatorique impose $\mathbf{\Sigma}(t) = \Sigma_0\mathrm{H}(t)\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$, soit $\mathbf{\Sigma}^\star(p) = \Sigma_0\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$. La déformation macroscopique s'écrit alors $\boldsymbol{E}(t) = E^{dev}(t)\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$ avec la transformée de Carson de $E^{dev}(t)$:

$$E^{dev\star}(p) = \frac{\Sigma_0}{2\mu^{AC\star}(p)} = \frac{\Sigma_0}{2k_s g_\mu(\varphi,\nu_s,p_a)} \tag{10.28}$$

On peut alors définir la déformation déviatorique adimensionnée :

$$E_a^{dev} = \frac{k_s}{\Sigma_0} E^{dev} \tag{10.29}$$

Sa transformée de Carson s'écrit :

$$E_a^{dev\star}(\varphi, \nu_s, p_a) = \frac{1}{2g_\mu(\varphi, \nu_s, p_a)} \tag{10.30}$$

Les expressions des fonctions g_k et g_μ n'étant pas analytiques, une inversion directe de la transformation de Laplace-Carson est exclue. Cependant, les développements limités établis en section B.3.2 vont permettre d'évaluer l'évolution de la déformation de fluage à court ($t_a \to 0$) et long ($t_a \to \infty$) terme.

10.3.1 Fluage à court terme

On s'intéresse d'abord au cas $t_a \to 0$, obtenu en faisant $p_a \to \infty$. On reprend alors les expressions (B.46) et (B.47), valables pour $0 < \varphi < 1/2$:

$$g_k(\varphi, \nu_s, p_a) = \mathcal{K}_0^\infty(\varphi, \nu_s) + \mathcal{K}_{-1}^\infty(\varphi, \nu_s) p_a^{-1} + \mathcal{O}\left(p_a^{-2}\right) \tag{10.31}$$

$$g_\mu(\varphi, \nu_s, p_a) = \mathcal{M}_0^\infty(\varphi, \nu_s) + \mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi, \nu_s) p_a^{-1} + \mathcal{O}\left(p_a^{-2}\right) \tag{10.32}$$

ainsi la déformation sphérique de fluage s'écrit asymptotiquement :

$$E_a^{sph}(\varphi, \nu_s, t_a) \approx \frac{1}{3\mathcal{K}_0^\infty(\varphi, \nu_s)} - \frac{\mathcal{K}_{-1}^\infty(\varphi, \nu_s)}{3\mathcal{K}_0^\infty(\varphi, \nu_s)^2} t_a \quad \text{quand} \quad t_a \to 0 \tag{10.33}$$

et de façon similaire la déformation déviatorique de fluage s'écrit :

$$E_a^{dev}(\varphi, \nu_s, t_a) \approx \frac{1}{2\mathcal{M}_0^\infty(\varphi, \nu_s)} - \frac{\mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi, \nu_s)}{2\mathcal{M}_0^\infty(\varphi, \nu_s)^2} t_a \quad \text{quand} \quad t_a \to 0 \tag{10.34}$$

avec $\mathcal{K}_0^\infty$, $\mathcal{K}_{-1}^\infty$, $\mathcal{M}_0^\infty$ et $\mathcal{M}_{-1}^\infty$ donnés par les équations (B.48) à (B.51). Ceci signifie que l'on observe une déformation élastique initiale pour toute valeur de la porosité entre 0 et 1/2. La raideur instantanée correspond exactement à la raideur définie par le schéma auto-cohérent avec une phase solide élastique de modules k_s, μ_s. Ce modèle inclut donc (par construction) le modèle élastique du chapitre 8. La figure 10.13 représente la déformation élastique instantanée et la pente initiale des déformations de fluage sphérique et déviatorique. Notons que la déformation élastique et la pente initiales sont toutes deux supérieures dans le cas d'une sollicitation déviatorique à celles obtenues pour une sollicitation sphérique.

10.3.2 Fluage à long terme

On s'intéresse à présent au cas $t_a \to \infty$ obtenu en faisant $p_a \to 0$. Lorsque $0 < \varphi < 1/4$, on reprend les expressions (B.38) et (B.39) :

$$g_k(\varphi, \nu_s, p_a) = \mathcal{K}_0^0(\varphi, \nu_s) + \mathcal{O}(p_a) \quad \text{et} \quad g_\mu(\varphi, \nu_s, p_a) = \mathcal{M}_0^0(\varphi, \nu_s) + \mathcal{O}(p_a) \tag{10.35}$$

ainsi la déformation sphérique de fluage s'écrit asymptotiquement :

$$E_a^{sph}(\varphi, \nu_s, t_a) \approx \frac{1}{3\mathcal{K}_0^0(\varphi, \nu_s)} \quad \text{quand} \quad t_a \to \infty \tag{10.36}$$

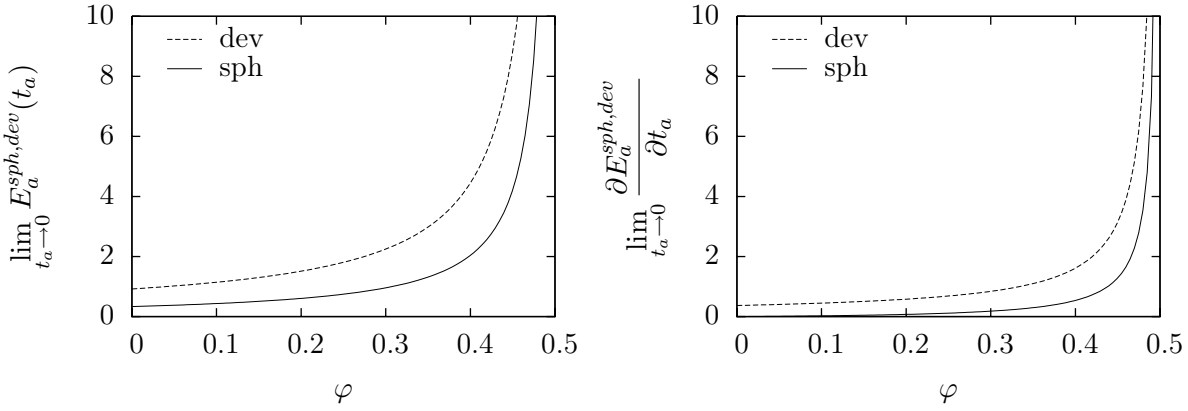


FIG. 10.13 – Déformation élastique et pente initiales de l'évolution de la déformation de fluage ($\nu_s = 0.27$)

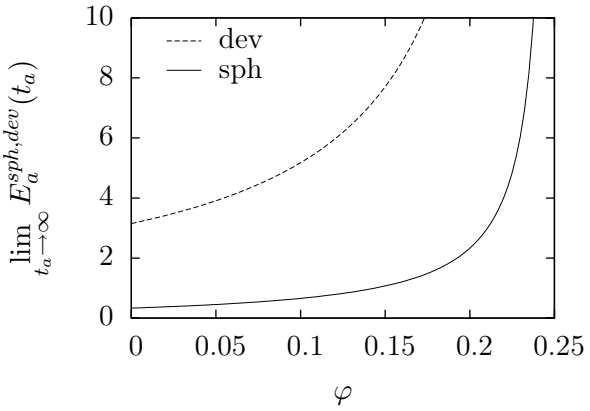


FIG. 10.14 – Déformation de fluage asymptotique à long terme ($\nu_s = 0.27$)

et de façon similaire la déformation déviatorique de fluage s'écrit :

$$E_a^{dev}(\varphi, \nu_s, t_a) \approx \frac{1}{2\mathcal{M}_0^0(\varphi, \nu_s)} \quad \text{quand} \quad t_a \to \infty \tag{10.37}$$

avec $\mathcal{K}_0^0$ et $\mathcal{M}_0^0$ explicités par (B.40) et (B.41). La déformation de fluage finit par se stabiliser, à un niveau asymptotique qui dépend de la porosité (figure 10.14).

Lorsque $1/4 < \varphi < 1/2$, on reprend les expressions (B.42) et (B.43) :

$$g_k(\varphi, \nu_s, p_a) = \mathcal{K}_1^0(\varphi, \nu_s)p_a + \mathcal{O}\left(p_a^2\right) \quad \text{et} \quad g_\mu(\varphi, \nu_s, p_a) = \mathcal{M}_1^0(\varphi, \nu_s)p_a + \mathcal{O}\left(p_a^2\right) \tag{10.38}$$

ainsi la déformation sphérique de fluage s'écrit asymptotiquement :

$$E_a^{sph}(\varphi, \nu_s, t_a) \approx \frac{t_a}{3\mathcal{K}_1^0(\varphi, \nu_s)} \quad \text{quand} \quad t_a \to \infty \tag{10.39}$$

et de façon similaire la déformation déviatorique de fluage s'écrit :

$$E_a^{dev}(\varphi, \nu_s, t_a) \approx \frac{t_a}{2\mathcal{M}_1^0(\varphi, \nu_s)} \quad \text{quand} \quad t_a \to \infty \tag{10.40}$$

avec $\mathcal{K}_1^0$ et $\mathcal{M}_1^0$ donnés par (B.44) et (B.45). Dans ce cas, la déformation de fluage ne cesse de croître à un taux constant. On observe donc une branche asymptotique linéaire, dont la pente est représentée sur la figure 10.15.

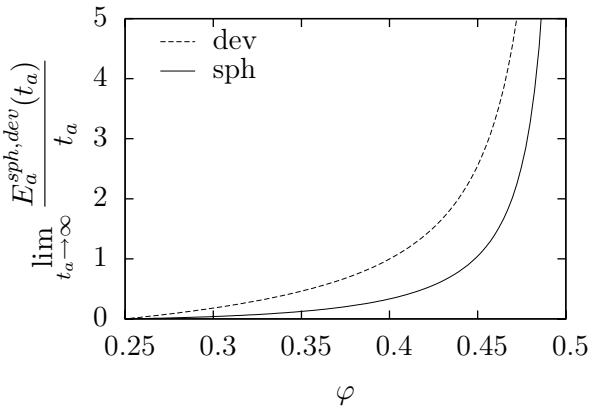


FIG. 10.15 – Pente de la déformation asymptotique de fluage à long terme ($\nu_s = 0.27$)

Ces résultats sur le fluage de long terme, schématisés sur la figure 10.16, appellent les mêmes commentaires qu'en fin de section 10.2.2. Ils sont qualitativement identiques à ceux obtenus avec le modèle de la figure 10.3.

10.3.3 Simulation numérique de la déformation de fluage

On représente sur la figure 10.17 l'évolution de la déformation de fluage sphérique et déviatorique, pour toute une gamme de porosités, en faisant appel à une procédure numérique d'inversion de la transformée de Laplace [1, 47, 115].

On retrouve les tendances mises en évidence en section 10.3.1 pour $t_a \to 0$, et en section 10.3.2 pour $t_a \to \infty$. De plus, on note que la déformation de fluage déviatorique est toujours quantitativement plus importante que la déformation de fluage sphérique.

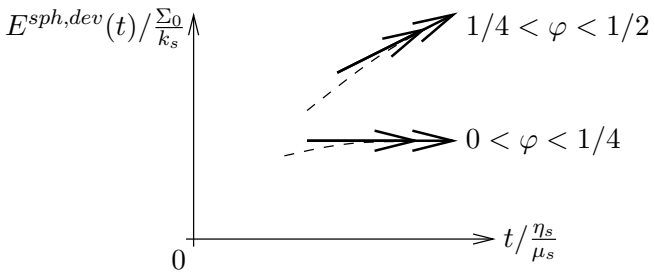


FIG. 10.16 – Allure de la déformation de fluage à long terme

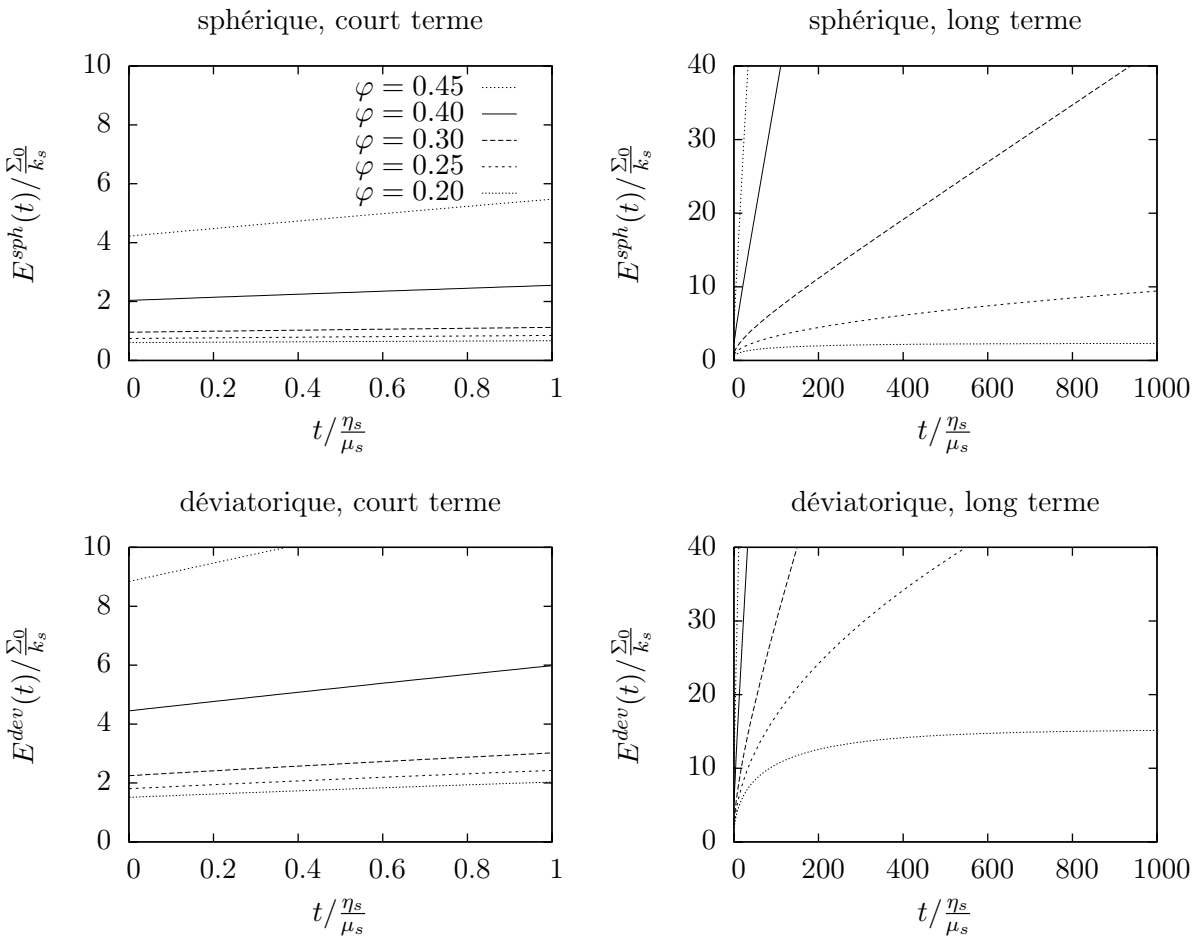


FIG. 10.17 – Déformations de fluage macroscopique sphérique et déviatorique au cours du temps ($\nu_s = 0.27$)

10.3.4 Effet du rapport d'aspect des particules solides

Avec des particules sphériques, deux seuils en porosité sont apparus :
- $\varphi^c = 1/2$: porosité critique ($\varphi > \varphi^c \Rightarrow$ déformation infinie),
- $\varphi^{t\to\infty} = 1/4$: seuil à $t \to \infty$ ($\varphi > \varphi^{t\to\infty} \Rightarrow$ comportement asymptotique visqueux).

Remarquons qu'à présent, il n'y a plus de porosité critique séparant deux modes de fonctionnement distincts à $t \to 0$. On montre que les deux seuils évoluent avec le rapport d'aspect des particules solides exactement de la même façon qu'établi en section 10.2.4. On renvoie donc aux courbes « φ^c » et « $\varphi^{t\to\infty}$ » de la figure 10.11.

Pour le rapport d'aspect des particules solides des hydrates basse densité, la porosité de ceux-ci à hydratation complète se trouve toujours inférieure aux deux seuils. Ceci signifie que le fluage des hydrates basse densité à hydratation complète, telle que prévue par ce modèle, présente :
- à court terme, une déformation élastique initiale ;
- à long terme, une déformation qui se stabilise.

Ce raisonnement et ses conclusions sont aussi valables pour les hydrates haute densité.

10.4 Estimation du fluage de la pâte

10.4.1 Modèle

Les sections précédentes ont été dédiées au fluage des hydrates. Elles fournissent donc le comportement différé à l'échelle mésoscopique[1]. Pour passer à l'échelle macroscopique (c'est-à-dire celle de la pâte), il faut mener une étape d'homogénéisation supplémentaire, comme cela a été fait en élasticité (section 8.2 et figure 8.12). L'idée est de réexploiter dans l'espace de Carson le schéma d'homogénéisation utilisé en élasticité (schéma de Hervé Zaoui, voir figure 8.14), puis de réaliser une inversion numérique de la transformée de Laplace-Carson. Les grains anhydres sont supposés purement élastiques. On réemploie les paramètres listés dans la table 8.2. Comme la transformée de Laplace-Carson nous limite à des comportements viscoélastiques non vieillissants, on se place à hydratation stabilisée. Plus précisément, on se place à l'état d'hydratation ultime $\alpha = \alpha^{ult}$ tel que défini par (7.7).

Le seul paramètre restant à déterminer est le temps caractéristique de fluage à l'échelle microscopique, défini par $\tau = \eta_s/\mu_s$. Les simulations reportées sur la figure 10.18 permettent de quantifier l'influence de ce temps caractéristique sur la réponse en fluage de la pâte.

10.4.2 Confrontation expérimentale

On compare la déformation de fluage estimée par le modèle micromécanique aux mesures issues de [72] (voir section 7.3.4). Le temps caractéristique τ est calibré de façon à reproduire correctement les derniers points expérimentaux à $e/c = 0.5$. L'ajustement donne $\tau = 0.56$ j. Ces courbes modèles sont superposées aux points expérimentaux sur la figure 10.19. On a soustrait la déformation élastique instantanée ε_0 de la déformation de fluage $\varepsilon(t)$. L'accord n'est que qualitatif. Notamment, on surestime les déformations mesurées à $e/c = 0.38$ et 0.28.

Enfin, on considère le modèle morphologique de pâte qui sépare les pores des hydrates basse densité en gros et petits pores (figure 8.29). On rappelle que le paramètre morphologique χ représente la fraction de petits pores dans l'espace poreux de la matrice entourant les particules composites anhydre + hydrates basse densité. On constate que cette description plus raffinée de l'espace poreux des hydrates basse densité offre des simulations de déformation de fluage un peu plus proches de l'expérimental que le modèle qui ne présentait pas cette séparation (figure 10.20).

[1] Les échelles macroscopique, mésoscopique et microscopique envisagées pour la pâte de ciment ont été définies au début de la section 8.2.1, page 107.

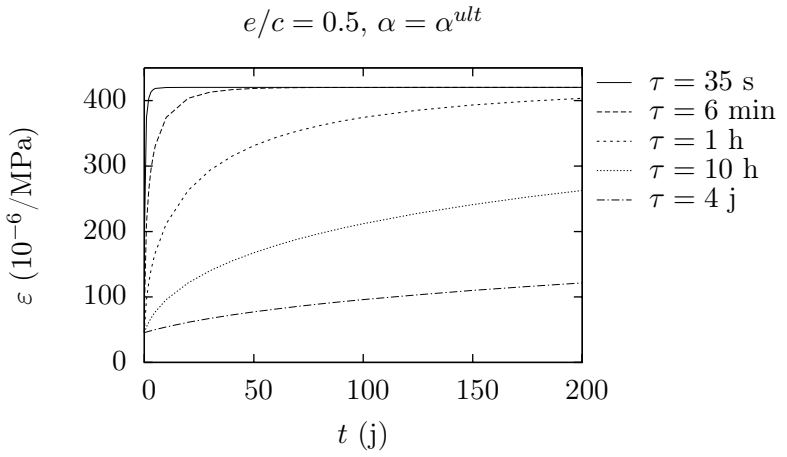


FIG. 10.18 – Influence du temps caractéristique τ à l'échelle microscopique sur le fluage de la pâte en compression simple ($e/c = 0.5$, $\alpha = \alpha^{ult}$)

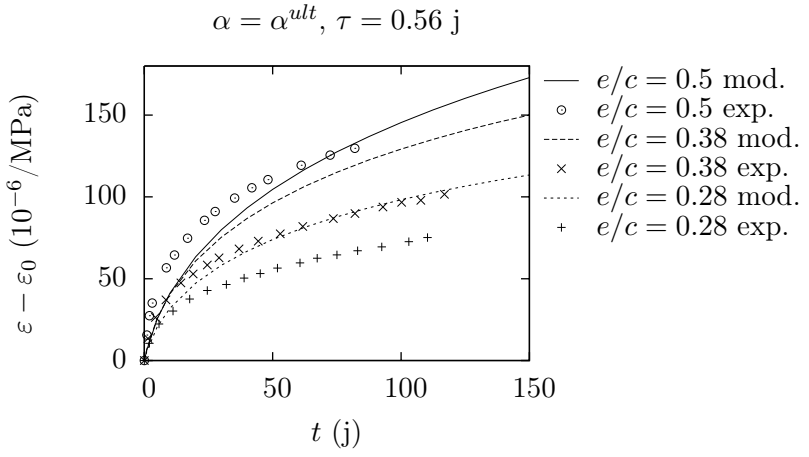


FIG. 10.19 – Fluage en compression simple de la pâte estimée par modèle (sans séparation petits/gros pores capillaires : voir figure 8.12) pour différents e/c et mesurée (d'après [72])

On met ici en évidence un second argument en faveur de cette description améliorée, le premier ayant été soulevé en élasticité (section 8.4.5).

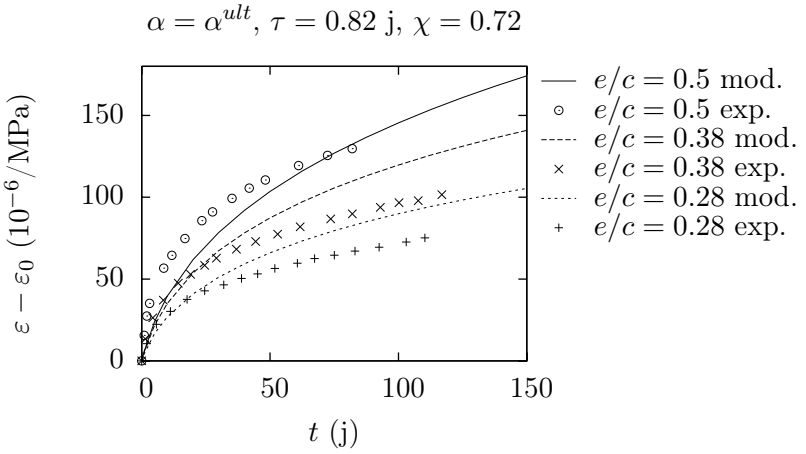


FIG. 10.20 – Fluage en compression simple de la pâte estimée par modèle (avec séparation petits/gros pores capillaires : voir figure 8.29) pour différents e/c et mesurée (d'après [72])

10.4.3 Questions et perspectives d'amélioration

On vient de développer un modèle de fluage de pâte de ciment en considérant que les effets différés observés à l'échelle macroscopique prennent naissance au niveau des interactions entre feuillets au sein des particules de C-S-H. La confrontation expérimentale est qualitativement satisfaisante. Pour aller plus loin, il convient de répondre à un certain nombre de questions :

- Le modèle de Maxwell est probablement trop simpliste pour décrire le comportement en glissement relatif feuillet sur feuillet. Il est évidemment possible de traiter n'importe quel modèle rhéologique plus élaboré. Mais comment orienter le choix d'un modèle morphologique pertinent pour représenter les interactions se jouant entre les feuillets ? Les calculs à l'échelle atomique comme ceux de [49, 91] pourraient probablement apporter des pistes de réponse à cette question.
- On a considéré un mécanisme de glissement feuillet sur feuillet au sein des particules de C-S-H. Il semble judicieux d'envisager aussi le glissement particule sur particule. Cela nous renvoie au problème de la gestion d'interfaces autour de particules non sphériques, déjà soulevé en section 5.1 à propos de la rupture du gypse, mais avec ici une difficulté supplémentaire provenant du comportement anisotrope qui s'ajoute à la forme anisotrope des particules.
- On peut également se poser la question de l'influence du caractère évolutif de la microstructure de la pâte sur le fluage. Cette question est particulièrement critique au jeune âge. Les quelques éléments apportés par [106] laissent penser qu'il s'agit d'un problème délicat. Il faudra certainement abandonner le formalisme confortable de la transformée de Laplace-Carson, nous limitant aux comportements non vieillissants.
- Enfin, on peut se demander comment inclure dans le modèle l'impact de l'humidité relative sur le fluage de la pâte. Il est probable qu'une meilleure connaissance des mécanismes microscopiques (à l'échelle des particules de C-S-H) responsables du fluage apportera des éléments de réponse à cette question.

Quatrième partie

Effets d'interface (cas des particules sphériques)

Chapitre 11

Introduction

À plusieurs reprises au cours de ce travail, nous avons rencontré la nécessité de tenir compte de mécanismes d'interface à l'échelle microscopique :

- au chapitre 5, nous avons vu que le mécanisme de rupture du plâtre pris semble être un déchaussement des cristaux ;
- au chapitre 9, nous avons émis l'hypothèse d'un mécanisme de rupture des C-S-H d'une pâte de ciment par décohésion des particules ;
- au chapitre 10, nous avons mentionné l'un des mécanismes cités comme à l'origine du fluage des C-S-H : le glissement visqueux des particules feuilletées les unes sur les autres.

Nous pouvons ajouter la question du fluage du plâtre pris, le mécanisme local à l'origine de ce phénomène étant probablement un glissement des cristaux de gypse les uns sur les autres.

Ces quatre situations se caractérisent par la nécessité de tenir compte d'une interface imparfaite entre les particules solides. Si on recourt à un schéma auto-cohérent pour estimer le comportement homogénéisé, il est alors nécessaire d'entourer l'inhomogénéité solide d'une interface non parfaite, séparant cette dernière du milieu effectif infini. Le problème auxiliaire ainsi défini n'est plus un problème d'inhomogénéité d'Eshelby. Dans le cadre de ce travail, nous ne nous sommes pas engagés dans sa résolution. Ainsi, dans presque toutes les situations exposées au paragraphe précédent, nous avons été amenés à mettre en place un contournement se traduisant par une modification de la physique locale prise en compte (par exemple le mécanisme de déchaussement des cristaux remplacé par une rupture des cristaux eux-mêmes).

Dans cette partie IV, nous nous proposons d'étudier l'influence de mécanismes impliquant les interfaces entre particules sur les caractéristiques mécaniques effectives dans un cas qui est accessible dans l'immédiat sans développements spécifiques : les particules de forme sphérique. Les résultats ne seront applicables que de façon qualitative au plâtre pris et aux C-S-H. Néanmoins, nous pensons qu'il est intéressant de chercher à appréhender l'effet des mécanismes interfaciaux sur les caractéristiques effectives. Cette partie IV revêt ainsi un caractère plus académique que les deux précédentes. On envisage d'abord la résistance (chapitre 12) puis le fluage (chapitre 13).

Chapitre 12

Résistance impliquant des mécanismes d'interface

Ce chapitre est consacré à l'estimation de la résistance de polycristaux poreux présentant des interfaces non parfaites aux joints de grains. Le critère de rupture macroscopique est déterminé par homogénéisation non linéaire en exploitant la méthode sécante modifiée. Après avoir établi quelques résultats sans préciser la morphologie du milieu poreux avec interfaces considéré, on envisage plusieurs mécanismes de rupture du polycristal poreux. On envisage successivement une rupture des grains, puis des joints et enfin l'éventualité d'une rupture combinée des grains et des joints.

Sommaire

12.1 Préliminaires indépendants de la morphologie **173**
12.1.1 Déformations moyennes en élasticité linéaire 173
12.1.2 Critère de rupture macroscopique 175
12.2 Morphologies envisagées **179**
12.2.1 Lien entre les raideurs d'interface 180
12.2.2 Estimation de la surface spécifique de contacts 181
12.2.3 Estimation de moyennes 183
12.2.4 Grains isotropes et interface non parfaite 184
12.2.5 Grains isotropes transverses et interface non parfaite 187
12.3 Estimation de critères de rupture d'assemblages de grains **189**
12.3.1 Rupture intragranulaire 189
12.3.2 Rupture intergranulaire 193
12.3.3 Rupture intra et intergranulaire 199
12.4 Conclusion **203**

On s'intéresse ici aux caractéristiques de résistance de matériaux constitués de particules en contact selon des interfaces. On se place dans le cadre du calcul à la rupture [103], et on exploite une technique d'homogénéisation non linéaire basée sur la méthode sécante modifiée [95, 117, 118, 6, 30], afin d'estimer le critère de rupture du composite à partir de celui ou ceux de ses constituants. La particularité de ce travail réside dans la prise en compte de critères de rupture d'interface au niveau des joints entre particules solides.

Dans un premier temps, on établit quelques résultats sans préciser la morphologie du VER (section 12.1). On considère une phase solide homogène, un espace poreux et des interfaces. Il s'agit d'abord d'établir les expressions en fonction de la contrainte macroscopique d'estimateurs du niveau moyen de déformation déviatorique dans le solide et du saut tangentiel de déplacement à l'interface. Ensuite, on détermine formellement le critère de rupture du composite dans deux cas :

- la résistance est conditionnée par celle du solide : on envisage un critère de von Mises puis de Drucker-Prager ;
- la résistance est conditionnée par celle des interfaces : on envisage un critère de Tresca puis de Mohr-Coulomb.

Ces critères macroscopiques tiennent compte de la morphologie du composite par le biais de la dépendance des modules élastiques effectifs en fonction des modules élastiques du solide et de l'interface. On propose donc dans un second temps (section 12.2) un moyen d'estimer cette dépendance, à l'aide de schémas d'homogénéisations. On envisage une morphologie de type polycristal poreux, avec des grains solides séparés par des interfaces intergranulaires. Le comportement des grains solides est soit isotrope, soit isotrope transverse. Le comportement isotrope transverse est choisi de façon à modéliser une microstructure feuilletée avec des feuillets rigides qui peuvent librement glisser les uns sur les autres. Enfin, dans un troisième temps (section 12.3), on détermine le critère de rupture macroscopique du polycristal poreux. On suppose successivement que la résistance macroscopique est conditionnée par celle des grains (rupture intragranulaire), par celle des joints (rupture intergranulaire), et simultanément par les grains et les joints (rupture intra et intergranulaire). Ces deux derniers cas constituent la principale originalité de ce chapitre.

Le tableau 12.1 propose une synthèse des différents cas de figure explorés dans ce chapitre, selon le critère de rupture envisagé pour les grains et pour les joints. Dans chaque cas, on fait référence à l'équation définissant le critère macroscopique obtenu et éventuellement à une figure illustrant le critère.

joints / grains	résistance ∞	lisses	Tresca	Mohr-Coulomb
résistance ∞	éq. (12.101)	éq. (12.104)	éq. (12.114) fig. 12.14	éq. (12.127) fig. 12.16
feuilletés	éq. (12.119)	résistance nulle	éq. (12.117) fig. 12.14	éq. (12.131) fig. 12.18
von Mises	éq. (12.99) fig. 12.10	éq. (12.102) fig. 12.10	présenté dans [33]	éq. (12.141), (12.144) éq. (12.147), fig. 12.19
Drucker-Prager	éq. (12.109) fig. 12.13	éq. (12.110) fig. 12.13		

TAB. 12.1 – Types de solide et de joints intergranulaires abordés en section 12.3 de ce chapitre : renvois vers l'équation donnant le critère de rupture macroscopique et vers une figure illustrant ce dernier

12.1 Préliminaires indépendants de la morphologie

On considère un milieu poreux (figure 12.1) dont le solide est homogène et traversé par des interfaces, qui sont des surfaces de discontinuité du champ de déplacement. Les domaines occupés par le VER, la phase solide hors interfaces et l'espace poreux sont respectivement notés Ω, Ω_s et Ω_p. La surface occupée par l'ensemble des interfaces est notée Γ. Pour le moment, on ne précise pas la morphologie.

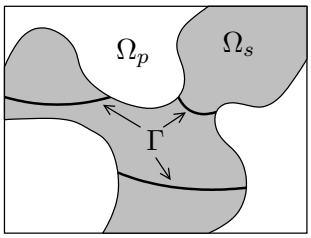


FIG. 12.1 – Allure schématique d'un VER de milieu poreux considéré

Avant d'aborder le critère de rupture macroscopique d'un tel milieu poreux, il est nécessaire de relier à la contrainte macroscopique certains estimateurs des niveaux de déformation dans le solide et de saut de déplacement à l'interface.

12.1.1 Déformations moyennes en élasticité linéaire

L'espace poreux est à la pression nulle. Dans toute cette sous-section, le solide est supposé présenter un comportement élastique linéaire isotrope caractérisé par le tenseur de rigidité $\mathbb{C}_s = 3k_s\mathbb{J} + 2\mu_s\mathbb{K}$ où k_s et μ_s sont les modules de compression et de cisaillement. L'interface a un comportement élastique linéaire isotrope transverse :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} = \boldsymbol{K} \cdot [\![\underline{\xi}]\!] \tag{12.1}$$

avec :

$$\boldsymbol{K} = K_n \underline{n} \otimes \underline{n} + K_t(\mathbf{1} - \underline{n} \otimes \underline{n}) \tag{12.2}$$

$\underline{n}$ désignant la normale à l'interface et $[\![a]\!]$ la discontinuité de la quantité a au travers de l'interface orientée par $\underline{n}$. Ainsi, le comportement local s'écrit :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = \mathbf{0} & \text{si } \underline{x} \in \Omega_p \\ \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) & \text{si } \underline{x} \in \Omega_s \\ [\![\boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) \cdot \underline{n}(\underline{x})]\!] = \underline{0} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) \cdot \underline{n}(\underline{x}) = \boldsymbol{K} \cdot [\![\underline{\xi}]\!](\underline{x}) & \text{si } \underline{x} \in \Gamma \end{cases} \tag{12.3}$$

On impose une condition de déformation homogène au contour du VER :

$$\underline{\xi}(\underline{x}) = \boldsymbol{E} \cdot \underline{x}, |\underline{x}| \to \infty \tag{12.4}$$

La contrainte moyenne dans tout le VER est notée $\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$. Comme le comportement local est élastique linéaire, le comportement effectif, reliant déformation au contour et contrainte moyenne, est également élastique linéaire :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^{hom} : \boldsymbol{E} \tag{12.5}$$

avec $\mathbb{C}^{hom}$ le tenseur de rigidité effectif. On suppose que la morphologie est telle que ce dernier soit isotrope. Les modules de compression et de cisaillement sont alors notés k^{hom} et μ^{hom}. On cherche à relier à la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$ la moyenne quadratique de la déformation déviatorique du solide et la moyenne quadratique du saut tangentiel de déplacement à l'interface.

Moyenne quadratique de la déformation déviatorique du solide

On cherche à déterminer la moyenne quadratique de la déformation déviatorique équivalente sur la phase solide, notée $\langle \varepsilon_d^2 \rangle_s$, avec $\varepsilon_d^2 = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{dev}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{dev}}/2$. La démarche est inspirée de [68].

On commence par écrire la densité d'énergie élastique Ψ stockée dans le VER. Celle-ci se compose de deux termes : l'énergie stockée dans le solide Ω_s et celle stockée dans l'interface Γ :

$$|\Omega|\Psi = \frac{1}{2}\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}V + \frac{1}{2}\int_{\Gamma} [\![\underline{\xi}]\!] \cdot \boldsymbol{K} \cdot [\![\underline{\xi}]\!]\,\mathrm{d}S \tag{12.6}$$

L'énergie élastique dépend des modules élastiques du solide de façon explicite et de façon implicite par le biais des champs de déformation et de saut de déplacement. On dérive formellement l'énergie élastique par rapport au module de cisaillement du solide :

$$|\Omega|\frac{\partial \Psi}{\partial \mu_s} = \int_{\Omega_s} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mu_s} : \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}V + \frac{1}{2}\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\varepsilon} : 2\mathbb{K} : \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}V + \int_{\Gamma} \frac{\partial [\![\underline{\xi}]\!]}{\partial \mu_s} \cdot \boldsymbol{K} \cdot [\![\underline{\xi}]\!]\,\mathrm{d}S \tag{12.7}$$

ce qui devient, en exploitant le comportement local (12.3) :

$$|\Omega|\frac{\partial \Psi}{\partial \mu_s} = \int_{\Omega_s \cup \Omega_p} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mu_s} : \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{d}V + 2\int_{\Omega_s} \varepsilon_d^2\,\mathrm{d}V + \int_{\Gamma} \frac{\partial [\![\underline{\xi}]\!]}{\partial \mu_s} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}\,\mathrm{d}S \tag{12.8}$$

On montre que la somme des premier et dernier termes du membre de droite est nulle, en appliquant le lemme de Hill (généralisé à des champs de déplacement présentant des discontinuités [30, 78]) au champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ et au champ de « déformation » $\partial\boldsymbol{\varepsilon}/\partial\mu_s$ dérivant de $\partial\underline{\xi}/\partial\mu_s$ cinématiquement admissible avec la « déformation au contour » $\partial\boldsymbol{E}/\partial\mu_s = \boldsymbol{0}$. Ainsi, il vient :

$$|\Omega|\frac{\partial \Psi}{\partial \mu_s} = 2|\Omega_s| \left\langle \varepsilon_d^2 \right\rangle_s \tag{12.9}$$

La densité d'énergie élastique a pour expression macroscopique :

$$\Psi = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma} : \boldsymbol{E} = \frac{1}{2}\boldsymbol{E} : \mathbb{C}^{hom} : \boldsymbol{E} \tag{12.10}$$

Ainsi, la dérivée par rapport à μ_s de cette densité d'énergie prend également la forme :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \mu_s} = \frac{1}{2}\left(9\frac{\partial k^{hom}}{\partial \mu_s}E_m^2 + 4\frac{\partial \mu^{hom}}{\partial \mu_s}E_d^2\right) \tag{12.11}$$

puisqu'on rappelle que la déformation $\boldsymbol{E}$ étant une donnée du problème, elle est indépendante de μ_s. En exploitant le comportement macroscopique (12.5), il vient :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \mu_s} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial 1/k^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_m^2 + \frac{\partial 1/\mu^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_d^2\right) \tag{12.12}$$

En identifiant (12.9) et (12.12), on établit finalement une expression de la moyenne recherchée en fonction notamment de la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$:

$$4(1-\varphi)\left\langle \varepsilon_d^2 \right\rangle_s = -\frac{\partial 1/k^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_m^2 - \frac{\partial 1/\mu^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_d^2 \tag{12.13}$$

Notons que l'on retrouve un résultat de [30]. La présence de l'interface Γ est donc prise en compte implicitement dans les expressions de k^{hom} et μ^{hom}.

En pratique, pour exploiter l'expression (12.13), il reste à quantifier la variation des modules élastiques effectifs en fonction du module de cisaillement du solide. Ces variations peuvent par exemple être approchées à l'aide d'un schéma d'homogénéisation, dépendant de la morphologie. L'égalité (12.13) deviendra alors une *estimation* de $\langle \varepsilon_d^2 \rangle_s$.

Moyenne quadratique du saut tangentiel de déplacement à l'interface

On décompose le saut de déplacement à l'interface (normale $\underline{n}$) en une partie normale et une partie tangentielle (figure 12.2) : $[\![\underline{\xi}]\!] = [\![\xi_n]\!]\underline{n} + [\![\underline{\xi}_t]\!]$ avec $[\![\xi_n]\!] = [\![\underline{\xi}]\!] \cdot \underline{n}$. On cherche à déterminer la moyenne quadratique de la partie tangentielle sur l'interface Γ, soit $\langle [\![\underline{\xi}_t]\!]^2 \rangle_\Gamma$.

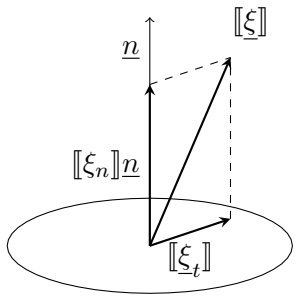


FIG. 12.2 – Décomposition du saut de déplacement à l'interface

En s'inspirant à nouveau de [68], on dérive l'expression microscopique (12.6) de la densité d'énergie élastique par rapport au module d'interface K_t :

$$|\Omega| \frac{\partial \Psi}{\partial K_t} = \int_{\Omega_s \cup \Omega_p} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial K_t} : \boldsymbol{\sigma} \, \mathrm{d}V + \int_\Gamma \frac{\partial [\![\underline{\xi}]\!]}{\partial K_t} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} \, \mathrm{d}S + \frac{1}{2} \int_\Gamma [\![\underline{\xi}]\!] \cdot (\mathbf{1} - \underline{n} \otimes \underline{n}) \cdot [\![\underline{\xi}]\!] \, \mathrm{d}S \tag{12.14}$$

où on a utilisé le comportement local (12.3). En appliquant le lemme de Hill au champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ et au champ de « déformation » $\partial \boldsymbol{\varepsilon} / \partial K_t$, on montre que la somme des deux premiers termes est nulle. En remarquant que $(\mathbf{1} - \underline{n} \otimes \underline{n}) \cdot [\![\underline{\xi}]\!]$ n'est autre que la partie tangentielle du saut de déplacement à l'interface, il vient :

$$|\Omega| \frac{\partial \Psi}{\partial K_t} = \frac{1}{2} |\Gamma| \left\langle [\![\underline{\xi}_t]\!]^2 \right\rangle_\Gamma \tag{12.15}$$

Comme précédemment, on dérive l'expression macroscopique (12.10) de la densité d'énergie élastique puis on exploite le comportement macroscopique (12.5) pour finalement établir la moyenne recherchée :

$$\frac{|\Gamma|}{|\Omega|} \left\langle [\![\underline{\xi}_t]\!]^2 \right\rangle_\Gamma = -\frac{\partial 1/k^{hom}}{\partial K_t} \Sigma_m^2 - \frac{\partial 1/\mu^{hom}}{\partial K_t} \Sigma_d^2 \tag{12.16}$$

En pratique, pour mettre à profit cette expression, il est nécessaire de quantifier la dépendance des modules effectifs en K_t. Remarquons qu'il faut également évaluer la surface spécifique d'interface dans le VER (c'est-à-dire le rapport $|\Gamma|/|\Omega|$).

12.1.2 Critère de rupture macroscopique

On envisage deux mécanismes locaux de rupture, affectant soit le solide Ω_s, soit l'interface Γ. Dans les deux cas, il s'agit de rupture ductile. On applique alors une démarche d'homogénéisation non linéaire [134] basée sur la méthode sécante modifiée [95, 117, 118, 6, 30] pour estimer le critère de rupture macroscopique.

Rupture du solide

On suppose que la résistance du composite est conditionnée par celle du solide. On envisage successivement pour le solide un critère de von Mises et un critère de Drucker-Prager.

Solide de von Mises On suppose que la résistance du solide est caractérisée par un critère de von Mises : $\sigma_d < k$. On recherche la forme du critère de rupture macroscopique. L'idée est de conférer au solide un comportement élastique non linéaire fictif, saturant asymptotiquement (aux « grandes » déformations) le critère : $\sigma_d = 2\mu_s(\varepsilon_d)\varepsilon_d \to k$. On peut par exemple utiliser :

$$\mu_s(\varepsilon_d) = \frac{k}{2\varepsilon_d} \quad \text{lorsque} \quad \varepsilon_d \to \infty \tag{12.17}$$

et k_s constant. On note que $\mu_s \ll k_s$ lorsque $\varepsilon_d \to \infty$: le solide peut être considéré comme incompressible. Aux grandes déformations $\boldsymbol{E}$, le comportement macroscopique est alors élastique non linéaire, caractérisé par un tenseur de rigidité sécant $\mathbb{C}^{hom}(\boldsymbol{E})$. Ce dernier peut être estimé par une approche d'homogénéisation non linéaire. Conformément à l'esprit des méthodes sécantes, on approche le champ de modules de cisaillement $\mu_s(\varepsilon_d(\underline{x}))$ par un champ uniforme $\mu_s(\varepsilon_d^{ef})$, pour un choix approprié de la déformation effective ε_d^{ef}, estimateur du niveau moyen de déformation dans le solide. On choisit d'utiliser comme estimateur le second moment de la déformation déviatorique dans le solide :

$$\varepsilon_d^{ef} = \sqrt{\langle \varepsilon_d^2 \rangle_s} \tag{12.18}$$

Cette déformation effective ε_d^{ef} peut être reliée au niveau de contrainte macroscopique par (12.13) :

$$\varepsilon_d^{ef\,2} = -\frac{1}{4(1-\varphi)}\left(\frac{\partial 1/k^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_m^2 + \frac{\partial 1/\mu^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_d^2\right) \tag{12.19}$$

On envisage des trajets de chargement macroscopiques radiaux $\boldsymbol{E} = \lambda \boldsymbol{e}$ ($\boldsymbol{e}$ définit la direction du trajet, λ désigne la position sur le trajet), et on détermine la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^{hom}(\boldsymbol{E}) : \boldsymbol{E}$ atteinte lorsque $\lambda \to \infty$. Cette contrainte macroscopique asymptotique se trouve sur le critère de rupture macroscopique. La déformation déviatorique locale devenant asymptotiquement grande, (12.17) et le choix (12.18) de la déformation déviatorique effective donnent :

$$2\mu_s(\varepsilon_d^{ef})\varepsilon_d^{ef} = k \tag{12.20}$$

Il reste à exploiter (12.19) pour établir le critère de rupture macroscopique :

$$-\mu_s^2 \frac{\partial 1/k^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_m^2 - \mu_s^2 \frac{\partial 1/\mu^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_d^2 = (1-\varphi)k^2 \tag{12.21}$$

Ce dernier peut également être mis sous la forme :

$$\left(\frac{\mu_s}{k^{hom}}\right)^2 \frac{\partial k^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_m^2 + \left(\frac{\mu_s}{\mu^{hom}}\right)^2 \frac{\partial \mu^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_d^2 = (1-\varphi)k^2 \tag{12.22}$$

En pratique, il reste à fournir la variation des modules élastiques effectifs k^{hom} et μ^{hom} en fonction du module de cisaillement μ_s lorsque la phase solide du VER présente un comportement élastique linéaire isotrope incompressible ($k_s \to \infty$). C'est par ce biais que le critère (12.22) dépend de la morphologie du VER. Notons que la dépendance des modules effectifs en μ_s est à construire sur un VER fictif présentant la même morphologique que le VER réel, mais dont le solide a un comportement élastique linéaire incompressible. En supposant que les modules élastiques effectifs ainsi obtenus peuvent s'écrire sous la forme :

$$k^{hom} = \mathcal{A}_\mu \mu_s \quad \text{et} \quad \mu^{hom} = \mathcal{B}_\mu \mu_s \tag{12.23}$$

avec $\mathcal{A}_\mu$ et $\mathcal{B}_\mu$ indépendants de μ_s, le critère macroscopique prend l'expression :

$$\frac{\Sigma_m^2}{\mathcal{A}_\mu} + \frac{\Sigma_d^2}{\mathcal{B}_\mu} = (1-\varphi)k^2 \tag{12.24}$$

Solide de Drucker-Prager On suppose à présent que la résistance du solide est caractérisée par un critère de Drucker-Prager : $\sigma_d < \alpha(h - \sigma_m)$. L'idée est, comme précédemment, de conférer au solide un comportement non linéaire fictif saturant asymptotiquement (aux « grandes » déformations) le critère de Drucker-Prager : $\sigma_d = 2\mu_s(\varepsilon_m, \varepsilon_d)\varepsilon_d \to \alpha(h - 3k_s\varepsilon_m)$. Dans cette expression, on reconnaît la contrainte sphérique $3k_s\varepsilon_m = \sigma_m$. On peut par exemple prendre :

$$\mu_s(\varepsilon_m, \varepsilon_d) = \frac{\alpha(h - 3k_s\varepsilon_m)}{2\varepsilon_d} \quad \text{lorsque} \quad \varepsilon_d \to \infty \tag{12.25}$$

et k_s constant. La contrainte sphérique $\sigma_m = 3k_s\varepsilon_m$ a un niveau moyen qui reste fini, puisqu'on verra (en section 12.2.3) que la moyenne présente l'expression $\langle\sigma_m\rangle_s = \Sigma_m/(1-\varphi)$. Ainsi, on note que $\mu_s \ll k_s$ lorsque $\varepsilon_d \to \infty$: le matériau solide peut être considéré comme incompressible. Dans l'esprit des méthodes sécantes, le champ de modules de cisaillement $\mu_s(\varepsilon_m(\underline{x}), \varepsilon_d(\underline{x}))$ est approché par le champ uniforme $\mu_s(\varepsilon_m^{ef}, \varepsilon_d^{ef})$, pour un choix approprié des déformations effectives ε_m^{ef} et ε_d^{ef}. On fait ici un choix mixte, comme dans [32] :

$$\varepsilon_d^{ef} = \sqrt{\langle\varepsilon_d^2\rangle_s} \quad \text{et} \quad \varepsilon_m^{ef} = \langle\varepsilon_m\rangle_s \tag{12.26}$$

La déformation effective déviatorique ε_d^{ef} est encore reliée au niveau de contrainte macroscopique par (12.19). Quant à la déformation effective sphérique ε_m^{ef}, elle est reliée à la contrainte sphérique moyenne dans le solide par : $\varepsilon_m^{ef} = \langle\sigma_m\rangle_s/(3k_s)$.

La suite de la démarche est très similaire à celle du paragraphe précédent (solide de von Mises). On aboutit au critère macroscopique sous la forme :

$$\left(\frac{\mu_s}{k^{hom}}\right)^2 \frac{\partial k^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_m^2 + \left(\frac{\mu_s}{\mu^{hom}}\right)^2 \frac{\partial \mu^{hom}}{\partial \mu_s}\Sigma_d^2 = (1-\varphi)\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi}\right)^2 \tag{12.27}$$

Dans cette expression, k^{hom} et μ^{hom} sont les modules effectifs obtenus sur un VER fictif présentant la même morphologie que le VER réel, mais avec un solide de comportement élastique linéaire incompressible. En supposant que les modules élastiques effectifs ainsi obtenus peuvent s'écrire sous la forme :

$$k^{hom} = \mathcal{A}_\mu\mu_s \quad \text{et} \quad \mu^{hom} = \mathcal{B}_\mu\mu_s \tag{12.28}$$

avec $\mathcal{A}_\mu$ et $\mathcal{B}_\mu$ indépendants de μ_s, le critère macroscopique prend l'expression :

$$\frac{\Sigma_m^2}{\mathcal{A}_\mu} + \frac{\Sigma_d^2}{\mathcal{B}_\mu} = (1-\varphi)\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi}\right)^2 \tag{12.29}$$

Rupture de l'interface

On suppose à présent que la résistance du composite est conditionnée par celle de l'interface Γ. On envisage successivement pour cette interface un critère de Tresca et un critère de Mohr-Coulomb. On fait appel à une extension de la méthode sécante modifiée au cas des interfaces [78, 33, 76].

On décompose le vecteur contrainte $\boldsymbol{\sigma}\cdot\underline{n}$ à l'interface en une partie normale $\sigma_n = \underline{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\cdot\underline{n}$ et une partie tangentielle $\underline{\sigma}_t = \boldsymbol{\sigma}\cdot\underline{n} - \sigma_n\cdot\underline{n}$ (figure 12.3).

Interface de Tresca On suppose que la résistance de l'interface Γ est caractérisée par un critère de type Tresca : $|\underline{\sigma}_t| < k$.

L'idée est de conférer à l'interface un comportement élastique non linéaire fictif, tel que, pour des sauts de déplacement tangentiels grands le critère soit saturé : $|K_t([\![\underline{\xi}]\!])[\![\underline{\xi}_t]\!]| = k$. On peut par exemple prendre :

$$K_t(|[\![\underline{\xi}_t]\!]|) = \frac{k}{|[\![\underline{\xi}_t]\!]|} \quad \text{lorsque} \quad |[\![\underline{\xi}_t]\!]| \to \infty \tag{12.30}$$

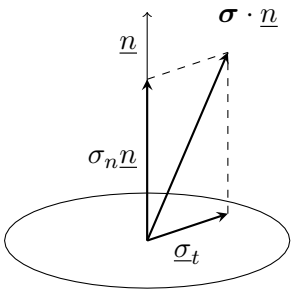


FIG. 12.3 – Décomposition du vecteur contrainte à l'interface

et K_n constant. On note que $K_t \ll K_n$ lorsque $|[\![\underline{\xi}_t]\!]| \to \infty$. Dans le but d'utiliser une approche d'homogénéisation non linéaire généralisant la méthode sécante modifiée au cas des interfaces, on introduit le saut de déplacement tangentiel effectif :

$$[\![\xi_t]\!]^{ef} = \sqrt{\left\langle [\![\underline{\xi}_t(\underline{x})]\!]^2 \right\rangle_\Gamma} \tag{12.31}$$

Dans l'esprit de la méthode sécante, on approche le champ de raideurs tangentielles d'interface $K_t(|[\![\underline{\xi}_t(\underline{x})]\!]|)$ par le champ uniforme $K_t([\![\xi_t]\!]^{ef})$. Le saut de déplacement tangentiel effectif $[\![\xi_t]\!]^{ef}$ peut être relié au niveau de contrainte macroscopique par (12.16) :

$$[\![\xi_t]\!]^{ef\,2} = -\frac{|\Omega|}{|\Gamma|}\left(\frac{\partial 1/k^{hom}}{\partial K_t}\Sigma_m^2 + \frac{\partial 1/\mu^{hom}}{\partial K_t}\Sigma_d^2\right) \tag{12.32}$$

Comme précédemment, on envisage des trajets de chargement macroscopiques radiaux $\boldsymbol{E} = \lambda \boldsymbol{e}$ et on détermine la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^{hom}(\boldsymbol{E}) : \boldsymbol{E}$ atteinte lorsque $\lambda \to \infty$. Le saut de déplacement tangentiel effectif étant asymptotiquement grand, (12.30) et le choix (12.31) de la déformation déviatorique effective donnent :

$$K_t([\![\xi_t]\!]^{ef})[\![\xi_t]\!]^{ef} = k \tag{12.33}$$

Il reste à exploiter (12.32) pour établir le critère de rupture macroscopique :

$$-K_t^2\frac{\partial 1/k^{hom}}{\partial K_t}\Sigma_m^2 - K_t^2\frac{\partial 1/\mu^{hom}}{\partial K_t}\Sigma_d^2 = \frac{|\Gamma|}{|\Omega|}k^2 \tag{12.34}$$

Ce dernier peut également être mis sous la forme :

$$\left(\frac{K_t}{k^{hom}}\right)^2\frac{\partial k^{hom}}{\partial K_t}\Sigma_m^2 + \left(\frac{K_t}{\mu^{hom}}\right)^2\frac{\partial \mu^{hom}}{\partial K_t}\Sigma_d^2 = \frac{|\Gamma|}{|\Omega|}k^2 \tag{12.35}$$

Pour obtenir un critère utilisable en pratique, il reste à relier les modules élastiques effectifs k^{hom} et μ^{hom} au module d'interface K_t, lorsque l'interface a un comportement élastique linéaire tel que $K_n \to \infty$. Insistons sur le fait que cette relation doit être établie pour un VER fictif de même morphologie que le VER réel, mais dont les interfaces sont élastiques linéaires telles que $K_n \to \infty$. Il est également nécessaire d'évaluer la surface spécifique d'interface $|\Gamma|/|\Omega|$. Celle-ci dépend de la morphologie du VER. En supposant que les modules élastiques effectifs peuvent s'écrire sous la forme :

$$k^{hom} = \mathcal{A}_{K_t}\frac{|\Omega|}{|\Gamma|}K_t \quad \text{et} \quad \mu^{hom} = \mathcal{B}_{K_t}\frac{|\Omega|}{|\Gamma|}K_t \tag{12.36}$$

avec $\mathcal{A}_{K_t}$ et $\mathcal{B}_{K_t}$ indépendants de K_t, le critère macroscopique prend l'expression :

$$\frac{\Sigma_m^2}{\mathcal{A}_{K_t}} + \frac{\Sigma_d^2}{\mathcal{B}_{K_t}} = k^2 \tag{12.37}$$

Interface de Mohr-Coulomb On suppose à présent que la résistance de l'interface Γ est caractérisée par un critère de type Mohr-Coulomb : $|\underline{\sigma}_t| < \alpha(h - \sigma_n)$. On confère à l'interface un comportement élastique non linéaire fictif, tel que, pour des sauts de déplacement tangentiel grands le critère de Mohr-Coulomb soit saturé : $|K_t([\![\underline{\xi}]\!])[\![\underline{\xi}_t]\!]| = \alpha(h - K_n[\![\xi_n]\!])$. Dans cette expression on reconnaît la composante normale du vecteur contrainte à l'interface $\sigma_n = K_n[\![\xi_n]\!]$. Ceci peut par exemple être réalisé en prenant :

$$K_t([\![\xi_n]\!], |[\![\underline{\xi}_t]\!]|) = \frac{\alpha(h - K_n[\![\xi_n]\!])}{|[\![\underline{\xi}_t]\!]|} \quad \text{lorsque} \quad |[\![\underline{\xi}_t]\!]| \to \infty \tag{12.38}$$

et K_n constant. Comme on le verra en section 12.2.3, la moyenne de la composante normale du vecteur contrainte sur l'interface s'écrit $\langle \sigma_m \rangle_\Gamma = \mathcal{D}\Sigma_m$: elle est finie. Ainsi, en moyenne $K_n[\![\xi_n]\!]$ est fini, si bien que $K_t \ll K_n$ lorsque $|[\![\underline{\xi}_t]\!]| \to \infty$. On introduit les sauts de déplacement normal et tangentiel effectifs suivants :

$$[\![\xi_n]\!]^{ef} = \left\langle [\![\underline{\xi}_n(\underline{x})]\!] \right\rangle_\Gamma \quad \text{et} \quad [\![\xi_t]\!]^{ef} = \sqrt{\left\langle [\![\underline{\xi}_t(\underline{x})]\!]^2 \right\rangle_\Gamma} \tag{12.39}$$

On approche alors le champ de raideurs tangentielles d'interface $K_t([\![\xi_n(\underline{x})]\!], |[\![\underline{\xi}_t(\underline{x})]\!]|)$ par le champ uniforme $K_t([\![\xi_n]\!]^{ef}, [\![\xi_t]\!]^{ef})$. Le saut de déplacement tangentiel effectif $[\![\xi_t]\!]^{ef}$ peut être relié au niveau de contrainte macroscopique par (12.16). Le saut de déplacement normal effectif peut quant à lui s'exprimer en fonction de la contrainte normale moyenne sur l'interface sous la forme $[\![\xi_n]\!]^{ef} = \langle \sigma_n \rangle_\Gamma / K_n = \mathcal{D}\Sigma_m / K_n$.

La suite de la démarche est très similaire aux paragraphes précédents. On aboutit au critère macroscopique sous la forme :

$$\left(\frac{K_t}{k^{hom}}\right)^2 \frac{\partial k^{hom}}{\partial K_t}\Sigma_m^2 + \left(\frac{K_t}{\mu^{hom}}\right)^2 \frac{\partial \mu^{hom}}{\partial K_t}\Sigma_d^2 = \frac{|\Gamma|}{|\Omega|}\alpha^2(h - \mathcal{D}\Sigma_m)^2 \tag{12.40}$$

Dans cette expression, les modules effectifs k^{hom} et μ^{hom} sont ceux du milieu poreux lorsque l'interface présente un comportement élastique linéaire tel que $K_n \to \infty$. En supposant que ces modules élastiques effectifs peuvent s'écrire sous la forme :

$$k^{hom} = \mathcal{A}_{K_t}\frac{|\Omega|}{|\Gamma|}K_t \quad \text{et} \quad \mu^{hom} = \mathcal{B}_{K_t}\frac{|\Omega|}{|\Gamma|}K_t \tag{12.41}$$

avec $\mathcal{A}_{K_t}$ et $\mathcal{B}_{K_t}$ indépendants de K_t, le critère macroscopique adopte l'expression :

$$\frac{\Sigma_m^2}{\mathcal{A}_{K_t}} + \frac{\Sigma_d^2}{\mathcal{B}_{K_t}} = \alpha^2(h - \mathcal{D}\Sigma_m)^2 \tag{12.42}$$

où $\mathcal{D}$, tel que $\langle \sigma_n \rangle_\Gamma = \mathcal{D}\Sigma_m$, sera explicité en section 12.2.3.

12.2 Morphologies envisagées

Les critères macroscopiques (12.22), (12.27), (12.35) et (12.40) ont été établis sous une forme indépendante de la morphologie. En fait, pour les exploiter en pratique, il est nécessaire de fournir la dépendance des modules effectifs vis-à-vis des modules locaux, lorsque le comportement local est élastique linéaire. C'est par ce biais que l'on introduit des informations sur la morphologie.

Les schémas d'homogénéisation représentent un moyen de produire une estimation de l'influence de la morphologie sur les modules élastiques effectifs. Pour des détails sur le lien entre morphologie et choix du schéma d'homogénéisation, on se reportera à [132]. On envisage ici une morphologie de nature polycristalline. La phase solide Ω_s se présente donc sous forme de grains,

et l'interface Γ est formée de la réunion des surfaces de contact entre les grains. Plutôt que de tenir directement compte de cette interface Γ, il est plus commode d'entourer chacun des grains d'une interface fictive $\mathcal{I}$ dont la raideur sera choisie de façon à satisfaire un critère d'équivalence avec la situation réelle.

Nous décrivons dans les deux sous-sections (12.2.4 et 12.2.5) les schémas d'homogénéisation proposés pour approcher une telle morphologie, dans le cas de grains solides de comportement isotrope ou isotrope transverse. Les perspectives d'application du premier type de morphologie, avec les grains isotropes, concernent le grès ou les milieux granulaires tels que le sable. Pour ce qui est du second type de morphologie, on peut le rapprocher des argiles ou des C-S-H, en raison de la structure en feuillets des particules.

Mais avant de développer les deux schémas, il est nécessaire de relier la raideur de l'interface fictive $\mathcal{I}$ entourant chacun des grains à celle de l'interface réelle Γ séparant les grains, et de produire une approximation du rapport $|\Gamma|/|\Omega|$ exprimant la surface de contacts intergranulaires par unité de volume du VER.

12.2.1 Lien entre les raideurs d'interface [77, 33]

Avant toutes choses, il convient de bien préciser les relations qu'entretiennent la raideur $\boldsymbol{K}$ caractérisant le comportement de l'interface intergranulaire Γ dans le VER et la raideur $\boldsymbol{K}'$ caractérisant l'interface fictive $\mathcal{I}$ placée autour de chacun des grains. La mise en place de cette interface fictive simplifiera le développement du schéma auto-cohérent visant à estimer l'élasticité effective de l'assemblage de grains. La relation suivante peut être établie de façon directe (en remarquant que l'interface fictive $\mathcal{I}$ autour de chaque grain ne prend en compte que la moitié de la discontinuité de déplacement entre deux grains) ou par un raisonnement énergétique :

$$\boldsymbol{K}' = 2\boldsymbol{K} \tag{12.43}$$

Le raisonnement énergétique conduisant à cette relation est le suivant. On représente sur la figure 12.4 l'interface réelle, séparant les grains, et l'interface fictive, entourant chacun des grains. L'interface entre deux grains $\mathcal{G}_i$ et $\mathcal{G}_j$ est notée $\mathcal{I}_{i,j}$. Le vecteur contrainte et la discontinuité de déplacement sur cette interface sont respectivement notés $\underline{T}$ et $[\![\underline{\xi}]\!]$. La raideur d'interface est $\boldsymbol{K}$. L'interface fictive $\mathcal{I}_i$ entourant le grain $\mathcal{G}_i$ présente quant à elle la raideur $\boldsymbol{K}'$. La discontinuité de déplacement sur cette interface est notée $[\underline{\xi}]$. Par simplicité, le raisonnement qui suit suppose les grains rigides (on pourrait s'affranchir de cette hypothèse).

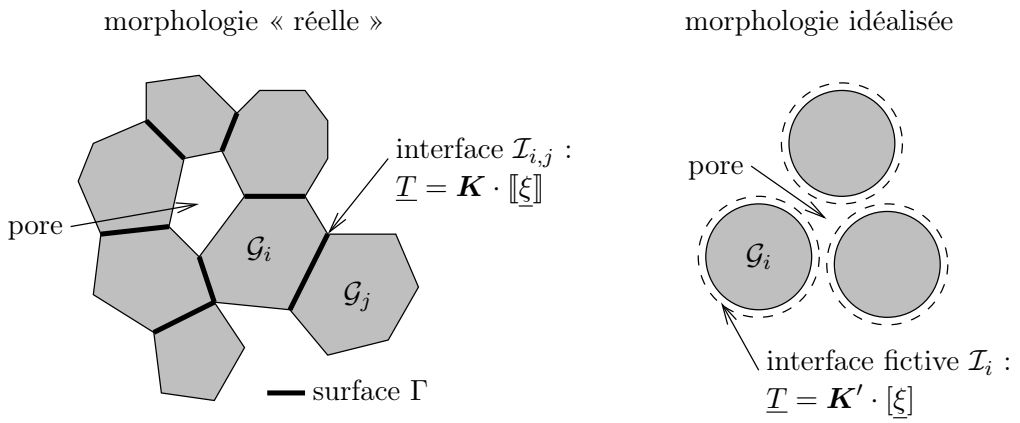


FIG. 12.4 – Représentation schématique de la morphologie « réelle », avec une interface *séparant* les grains, et de la morphologie idéalisée, avec une interface *entourant* chacun des grains

D'une part, en adoptant le point de vue de l'interface réelle (partie gauche de la figure 12.4), la densité d'énergie élastique s'écrit comme la somme des contributions de chaque interface entre grains :

$$\Psi = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{\{i,j\}} \int_{\mathcal{I}_{i,j}} \underline{T} \cdot [\![\underline{\xi}]\!] \, \mathrm{d}S = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i} \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} \int_{\mathcal{I}_{i,j}} \underline{T} \cdot [\![\underline{\xi}]\!] \, \mathrm{d}S \tag{12.44}$$

Or seule une fraction de la périphérie de chaque grain est en contact avec d'autres grains. On note $\partial\mathcal{G}_i^s$ la portion de la périphérie $\partial\mathcal{G}_i$ du grain $\mathcal{G}_i$ en contact avec les grains voisins. Le vecteur contrainte est évidemment nul sur le complémentaire de $\partial\mathcal{G}_i^s$. Ainsi, on obtient :

$$\Psi = \frac{1}{4|\Omega|} \sum_{i} \int_{\partial\mathcal{G}_i^s} \underline{T} \cdot [\![\underline{\xi}]\!] \, \mathrm{d}S \tag{12.45}$$

On fait alors apparaître la raideur d'interface $\boldsymbol{K}$:

$$\Psi = \frac{1}{4|\Omega|} \sum_{i} \int_{\partial\mathcal{G}_i^s} \underline{T} \cdot \boldsymbol{K}^{-1} \cdot \underline{T} \, \mathrm{d}S \tag{12.46}$$

D'autre part, en adoptant le point de vue de l'interface fictive supposée élastique linéaire (partie droite de la figure 12.4),

$$\Psi' = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i} \int_{\partial\mathcal{G}_i^s} \underline{T} \cdot [\underline{\xi}] \, \mathrm{d}S \tag{12.47}$$

En introduisant l'équation d'état de l'interface fictive $\underline{T} = \boldsymbol{K'} \cdot [\underline{\xi}]$, il vient :

$$\Psi' = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i} \int_{\partial\mathcal{G}_i^s} \underline{T} \cdot \boldsymbol{K'} \cdot \underline{T} \, \mathrm{d}S \tag{12.48}$$

L'équivalence, au sens de l'énergie élastique, entre les deux modèles se traduit par $\Psi = \Psi'$, ce qui est assuré lorsque $\boldsymbol{K'} = 2\boldsymbol{K}$, soit (12.43).

12.2.2 Estimation de la surface spécifique de contacts

On se penche à présent sur la surface spécifique de contacts intergranulaires $|\Gamma|/|\Omega|$, qu'il est nécessaire d'estimer lorsque la rupture du VER est conditionnée par celle des interfaces entre les grains (voir (12.35) et (12.40)). Ce rapport est un paramètre morphologique : il ne dépend que de l'arrangement géométrique des grains. On propose ici de relier, de façon approchée, la surface spécifique de contacts à la porosité (ou, de façon équivalente, à la fraction solide).

Dans un premier temps, on va relier $|\Gamma|/|\Omega|$ à la fraction moyenne de surface d'un grain en contact avec d'autres grains. On note $\mathcal{N}$ le nombre de grains présents dans le VER. La frontière $\partial\mathcal{G}_i$ du grain $\mathcal{G}_i$ est toujours décomposée en deux surfaces disjointes : la surface $\partial\mathcal{G}_i^s$ en contact avec les grains voisins, et la surface complémentaire, en contact avec l'espace poreux. On a :

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} |\partial\mathcal{G}_i^s| = 2|\Gamma| \tag{12.49}$$

le coefficient 2 provenant du fait que dans $\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} |\partial\mathcal{G}_i^s|$, on compte deux fois chaque interface grain / grain : une fois sur chacun des deux grains séparés par l'interface. De plus, on a :

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} |\mathcal{G}_i| = (1-\varphi)|\Omega| \tag{12.50}$$

$(1-\varphi)$ étant la fraction solide. Par ailleurs, en assimilant, certes grossièrement, l'ensemble des grains à des sphères de même rayon r_0, on obtient :

$$\frac{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} |\partial \mathcal{G}_i|}{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} |\mathcal{G}_i|} = \frac{3}{r_0} \tag{12.51}$$

Ainsi, en combinant ces trois dernières équations, il vient :

$$\frac{|\Gamma|}{|\Omega|} = \frac{3(1-\varphi)}{2r_0}\varrho \tag{12.52}$$

en notant :

$$\varrho = \frac{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} |\partial \mathcal{G}_i^s|}{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} |\partial \mathcal{G}_i|} \tag{12.53}$$

Autrement dit, ϱ mesure la fraction surfacique moyenne de la périphérie des grains en contact avec d'autres grains. On cherche maintenant à estimer cette grandeur.

Une première approche, mise en œuvre par [76, 78], consiste à faire appel :

- à des travaux sur la compaction de poudres [40, 56], proposant une estimation de l'aire de contact entre deux grains voisins,
- à [4] pour évaluer le nombre moyen de contacts par grain au sein de l'assemblage granulaire.

Dans le cadre d'un assemblage cubique, l'approximation suivante de ϱ est établie [76, 78] :

$$\varrho = (1-\varphi)(1-2\varphi) \tag{12.54}$$

Une seconde approche consiste à réaliser de simples calculs de géométrie et d'aires sur la maille élémentaire décrite en section 2.1.3 (figure 2.3), qui représente un assemblage cubique de sphères tronquées. En fait, il suffit de travailler sur un huitième de maille élémentaire, voir figure 2.4 gauche : ϱ est égal au rapport de l'aire des zones grisées par l'aire des zones grisées et de la portion de sphère blanche. Les expressions obtenues sont malheureusement trop lourdes pour être reprises dans ce texte. Les résultats du calcul sont représentés sur la figure 12.5, avec aussi l'expression obtenue ci-dessus (12.54).

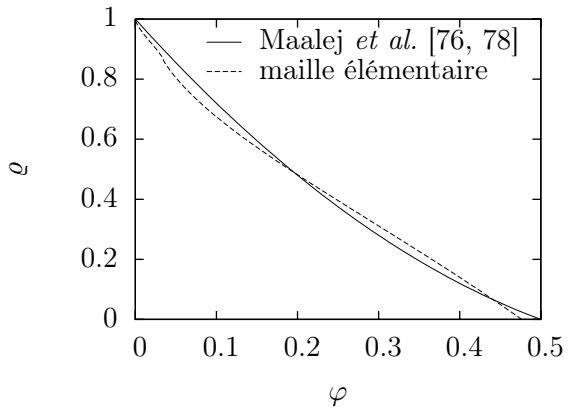


FIG. 12.5 – Portion de la périphérie d'un grain en contact avec d'autres grains, estimée en fonction de la porosité selon [76, 78] (expression (12.54)) ou de façon géométrique sur une maille élémentaire

Les deux approches donnent des résultats remarquablement comparables. Nous privilégions le résultat de [76, 78], qui a l'avantage de fournir une expression compacte (12.54). Ainsi, en combinant (12.52) et (12.54), nous obtenons une approximation de la surface spécifique de contacts

intergranulaires :

$$\frac{|\Gamma|}{|\Omega|} = \frac{3(1-\varphi)^2(1-2\varphi)}{2r_0} \tag{12.55}$$

avec φ la porosité et r_0 le rayon caractéristique des grains. Notons que pour établir (12.51), nous avons supposé que l'assemblage de grains est monodisperse et que chaque grain a une forme « proche de la sphère » (c'est-à-dire ni trop élancée, ni trop aplatie).

12.2.3 Estimation de moyennes

On a identifié en section 12.1.2 qu'il est nécessaire de déterminer la moyenne de la contrainte sphérique sur la phase solide, $\langle \sigma_m \rangle_s$. La pression étant nulle dans les pores :

$$\boldsymbol{\Sigma} = (1-\varphi)\,\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_s \tag{12.56}$$

d'où :

$$\langle \sigma_m \rangle_s = \frac{\Sigma_m}{1-\varphi} \tag{12.57}$$

Notons que ceci est valable pour tout milieu poreux, du moment que l'espace poreux est à pression nulle.

On va également avoir besoin de la moyenne sur l'interface intergranulaire Γ de la composante normale σ_n du vecteur contrainte. Cette dernière peut être évaluée par la méthode exposée dans [78]. On part de la relation suivante, issue du théorème de Green et découlant du fait que $\underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}) = \underline{0}$:

$$\int_{\mathcal{G}_i} \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{d}V = \int_{\partial\mathcal{G}_i} \underline{x} \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}\,\mathrm{d}S \tag{12.58}$$

Assimilant le grain $\mathcal{G}_i$ à une sphère de rayon r_0, ce qui donne $\underline{n} = \underline{e}_r$ et $\underline{x} = r_0\underline{e}_r$, et en prenant la trace de l'équation précédente, on obtient :

$$\int_{\mathcal{G}_i} 3\sigma_m\,\mathrm{d}V = \int_{\partial\mathcal{G}_i} r_0\sigma_{rr}\,\mathrm{d}S \tag{12.59}$$

En sommant sur l'ensemble des grains, il vient :

$$3\int_{\Omega_s} \sigma_m\,\mathrm{d}V = r_0 \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \int_{\partial\mathcal{G}_i} \sigma_{rr}\,\mathrm{d}S \tag{12.60}$$

Constatant que $\sigma_{rr} = \sigma_n$ sur la périphérie des grains sphériques, et l'espace poreux étant à la pression nulle, on a :

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \int_{\partial\mathcal{G}_i} \sigma_n\,\mathrm{d}S = \frac{3|\Omega|}{r_0}\Sigma_m \tag{12.61}$$

Or dans l'assemblage de grains constituant le VER, seule la portion $\partial\mathcal{G}_i^s$ de la périphérie $\partial\mathcal{G}_i$ du grain i est en contact avec les grains voisins. Sur la surface complémentaire, en contact avec l'espace poreux, on a évidemment $\sigma_n = 0$:

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \int_{\partial\mathcal{G}_i} \sigma_n\,\mathrm{d}S = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \int_{\partial\mathcal{G}_i^s} \sigma_n\,\mathrm{d}S \tag{12.62}$$

La dernière somme vaut exactement le double de l'intégrale de σ_n sur l'interface intergranulaire Γ :

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \int_{\partial\mathcal{G}_i^s} \sigma_n\,\mathrm{d}S = 2\int_{\Gamma} \sigma_n\,\mathrm{d}S \tag{12.63}$$

Ainsi on obtient finalement la moyenne recherchée :

$$\langle \sigma_n \rangle_\Gamma = \frac{3|\Omega|}{2r_0|\Gamma|}\Sigma_m \tag{12.64}$$

Il reste à rappeler (12.55) pour obtenir $\langle \sigma_n \rangle_\Gamma = \mathcal{D}\Sigma_m$ avec :

$$\mathcal{D} = \frac{1}{(1-\varphi)^2(1-2\varphi)} \tag{12.65}$$

Conformément à l'intuition, plus la porosité est proche de la porosité critique $\varphi^c = 1/2$, plus les contraintes transmises par les grains sur leurs surfaces de contact (de plus en plus réduites) sont importantes. On note que le résultat (12.65) a été établi de manière indépendante du comportement des grains.

12.2.4 Grains isotropes et interface non parfaite

Description du schéma

On envisage un schéma auto-cohérent du même type que celui présenté en section 2.1, donc avec des inhomogénéités sphériques pour représenter le solide et l'espace poreux (figure 2.1). La différence réside dans le fait que l'inhomogénéité représentant le solide est maintenant entourée d'une interface $\mathcal{I}$ non parfaite (figure 12.6).

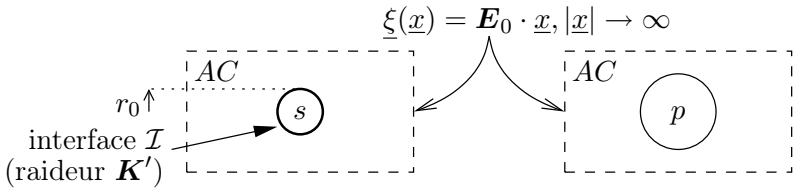


FIG. 12.6 – Problèmes auxiliaires d'élasticité à résoudre pour mettre en œuvre le schéma auto-cohérent envisagé (forme sphérique entourée d'une interface $\mathcal{I}$ pour représenter le solide s et forme sphérique pour représenter l'espace poreux p)

Le solide est élastique isotrope (modules de compression et de cisaillement k_s, μ_s). L'espace poreux (porosité φ) est à la pression nulle. L'inhomogénéité solide est entourée d'une interface élastique non parfaite, isotrope transverse, notée $\mathcal{I}$ et dont le comportement est décrit par (12.1) et (12.2) avec une raideur d'interface $\boldsymbol{K}'$. On annule le saut de déplacement normal en imposant $K'_n \to \infty$: décollement et pénétration des solides séparés par l'interface sont interdits. Le rayon moyen des grains solides est noté r_0.

Estimation des modules homogénéisés

La déformation moyenne de l'espace poreux est classiquement estimée par la déformation d'une cavité sphérique plongée dans le milieu effectif soumis à l'infini à des conditions aux limites en déformation homogène au contour ($\boldsymbol{E}_0$) : voir figure 12.6 droite. Il s'agit d'un cas particulier de l'inhomogénéité d'Eshelby [36] déjà rencontré plusieurs fois, par exemple en (2.1) :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p = \mathbb{A}_p : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \mathbb{A}_p = (\mathbb{I} - \mathbb{S}^{AC}_{sph})^{-1} \tag{12.66}$$

où $\mathbb{S}^{AC}_{sph}$ est le tenseur d'Eshelby d'une sphère dans le milieu de rigidité $\mathbb{C}^{AC}$, explicité en (2.2).

La déformation moyenne de l'ensemble des grains sans et avec leurs interfaces $\mathcal{I}$ est estimée en résolvant le problème auxiliaire représenté sur la partie gauche de la figure 12.6. Ce problème auxiliaire est traité en annexe C.2. Il convient d'adapter les notations employées dans cette annexe comme suit : 2 devient s, 0 devient AC, $\boldsymbol{K}$ devient $\boldsymbol{K'}$. Il faut également réaliser le passage à la limite $K'_n \to \infty$. La moyenne de la déformation sur l'ensemble des grains peut être mise sous la forme :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s = \mathbb{A}_s : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{et} \quad \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{s\cup\mathcal{I}} = \mathbb{A}_{s\cup\mathcal{I}} : \boldsymbol{E}_0 \tag{12.67}$$

selon que l'on exclut ou inclut la discontinuité de déplacement sur l'interface $\mathcal{I}$.

Ainsi la déformation moyenne sur l'ensemble du VER s'écrit :

$$\boldsymbol{E} = [\varphi \mathbb{A}_p + (1-\varphi)\mathbb{A}_{s\cup\mathcal{I}}] : \boldsymbol{E}_0 \tag{12.68}$$

Et le tenseur des contraintes moyen sur le VER a pour expression :

$$\boldsymbol{\Sigma} = (1-\varphi)\mathbb{C}_s : \mathbb{A}_s : \boldsymbol{E}_0 \tag{12.69}$$

Le tenseur de rigidité auto-cohérent est donc solution de :

$$\mathbb{C}^{AC} = (1-\varphi)\mathbb{C}_s : \mathbb{A}_s : [\varphi \mathbb{A}_p + (1-\varphi)\mathbb{A}_{s\cup\mathcal{I}}]^{-1} \tag{12.70}$$

En projetant cette équation tensorielle sur $\mathbb{J}$ et $\mathbb{K}$, et en notant k^{AC} et μ^{AC} les modules auto-cohérents, on établit les deux équations suivantes :

$$k^{AC} = \frac{4(1-\varphi)k_s\mu^{AC}}{3\varphi k_s + 4\mu^{AC}} \tag{12.71}$$

$$(1-\varphi)\frac{\mu_s}{\mu^{AC}} = 1 + 6\varphi\frac{\mu_s}{\mu^{AC}}\frac{k^{AC}+2\mu^{AC}}{9k^{AC}+8\mu^{AC}} + 3\left[\frac{5K'_t r_0}{2\mu_s} + \left(\frac{\mu_s}{8\mu^{AC}} + \frac{6k_s+17\mu_s}{57k_s+4\mu_s}\right)^{-1}\right]^{-1} \tag{12.72}$$

Notons que ces équations auraient pu être obtenues comme les limites de celles établies par le schéma auto-cohérent mettant en jeu un motif morphologique représentatif avec une calotte d'épaisseur finie (figure 8.4), lorsque l'épaisseur e de cette calotte tend vers 0 (puis $K'_n \to \infty$), pourvu que les modules élastiques de cette calotte respectent l'expression (C.35) :

$$k = \left(K'_n - \frac{4K'_t}{3}\right)e \quad \text{et} \quad \mu = K'_t e \tag{12.73}$$

On montre en annexe C que ces relations assurent l'équivalence, du point du vue du comportement élastique, entre une couche d'épaisseur e infinitésimale de matériau isotrope (k, μ) et une interface (K'_n, K'_t).

Le découplage de (12.71) et (12.72) fait alors apparaître $x = \mu^{AC}/\mu_s$ comme racine positive du polynôme :

$$a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0 = 0 \tag{12.74}$$

avec :

$$\begin{aligned}
a_3 &= 2[2(17m+8)\kappa + 22m + 40]m && (12.75)\\
a_2 &= 2[(17m+8)(5m-1)\varphi - 3(11m+4)(m-2)]\kappa && (12.76)\\
&+ 2[(4\varphi-1)m^2 + (14+65\varphi)m + 20(3-\varphi)] \\
a_1 &= [(5\varphi-2)m^2 + (298\varphi-137)m + 9 + 77\varphi]\kappa + 3(3\varphi-1)(m+19) && (12.77)\\
a_0 &= 3\kappa(m+19)(2\varphi-1) && (12.78)
\end{aligned}$$

en notant $\kappa = K_t r_0/\mu_s$ et $m = 4\mu_s/(3k_s)$. On rappelle que $K_t' = 2K_t$, d'après (12.43). Le module de compression homogénéisé est ensuite donné par (12.71).

Il est intéressant de rechercher la porosité critique d'un tel modèle, c'est-à-dire la porosité au delà de laquelle les modules élastiques homogénéisés sont nuls. Il s'agit donc de rechercher la porosité φ^c pour laquelle la racine positive de (12.74) s'annule. Lorsque $x = 0$, il ne reste plus que $a_0 = 0$ *à condition que* $\kappa \neq 0$, et dans ce cas la porosité critique est $\varphi^c = 1/2$. Lorsque $\kappa = 0$, $a_0 = 0$ et le polynôme (12.74) devient $a_3x^2 + a_2x + a_1 = 0$, avec $a_1 = 6(3\varphi - 1)(m + 19)$. La porosité critique tombe à $\varphi^c = 1/3$. Autrement dit, la porosité critique dépend du comportement de l'interface : pour $\mu_s \neq 0$, si $K_t > 0$, $\varphi^c = 1/2$ et si $K_t = 0$ (interface lisse), $\varphi^c = 1/3$.

Cas particulier du solide incompressible Le polynôme (12.74) devient dans le cas du solide incompressible ($m \to 0$) :

$$8(5 + 2\kappa)(3 - \varphi)\mathcal{B}_\mu^2 + [(9 + 77\varphi)\kappa + 57(3\varphi - 1)]\mathcal{B}_\mu + 57\kappa(2\varphi - 1) = 0 \tag{12.79}$$

où $\mathcal{B}_\mu$ est tel que $\mu^{AC} = \mathcal{B}_\mu \mu_s$. Notons que $\mathcal{B}_\mu = 0$ pour $\varphi > 1/2$ lorsque $K_t > 0$ et pour $\varphi > 1/3$ lorsque $K_t = 0$. À son tour, (12.71) donne :

$$\mathcal{A}_\mu = \frac{4(1-\varphi)}{3\varphi}\mathcal{B}_\mu \tag{12.80}$$

où $\mathcal{A}_\mu$ est tel que $k^{AC} = \mathcal{A}_\mu \mu_s$.

Dans le cas particulier de l'interface parfaitement adhérente ($K_t \to \infty$ soit $\kappa \to \infty$), (12.79) donne :

$$\mathcal{B}_\mu = \frac{1 - 2\varphi}{1 - \varphi/3} \tag{12.81}$$

et $\mathcal{B}_\mu = 0$ pour $\varphi > 1/2$. On se retrouve dans le cas du schéma auto-cohérent classique avec une phase solide incompressible (section 2.1).

Dans le cas particulier de l'interface parfaitement lisse ($K_t \to 0$ soit $\kappa \to 0$), (12.79) donne :

$$\mathcal{B}_\mu = \frac{19}{40}\frac{1 - 3\varphi}{1 - \varphi/3} \tag{12.82}$$

et $\mathcal{B}_\mu = 0$ pour $\varphi > 1/3$. Sur la figure 12.7, on représente le module de cisaillement auto-cohérent en fonction de la porosité, dans le cas d'une interface adhérente (12.81) et dans le cas d'une interface lisse (12.82). La raideur effective est toujours supérieure dans le cas des joints adhérents.

Cas particulier du solide rigide Revenons au cas de l'interface quelconque (K_t fini). Le polynôme (12.74) donne, dans le cas du solide rigide ($E_s \to \infty$) :

$$\frac{\mu^{AC}}{K_t r_0} = \frac{1 - 2\varphi}{3\varphi - 1} \tag{12.83}$$

On constate une porosité critique, $\varphi^c = 1/2$, et une porosité de « blocage », $\varphi = 1/3$, en dessous de laquelle le module de cisaillement auto-cohérent, rapporté au module tangentiel d'interface K_t, est infini. Notons qu'ici nous nous sommes placés dans le cas du module d'interface $K_n \to \infty$. Pour une discussion plus complète de la raideur effective en fonction de K_n, K_t, se reporter à [78].

On cherche à écrire les modules homogénéisés sous la forme (12.36), ce qui donne :

$$\mathcal{A}_{K_t} = \frac{|\Gamma|}{|\Omega|}\frac{k^{AC}}{K_t} \quad \text{et} \quad \mathcal{B}_{K_t} = \frac{|\Gamma|}{|\Omega|}\frac{\mu^{AC}}{K_t} \tag{12.84}$$

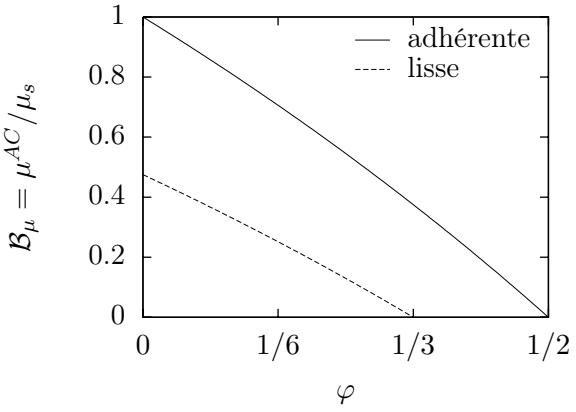


FIG. 12.7 – Module de cisaillement effectif, rapporté au module de cisaillement du solide, en fonction de la porosité, pour une interface soit adhérente, soit lisse

ou encore, compte tenu de (12.55) :

$$\mathcal{A}_{K_t} = \frac{3}{2}(1-\varphi)^2(1-2\varphi)\frac{k^{AC}}{K_t r_0} \quad \text{et} \quad \mathcal{B}_{K_t} = \frac{3}{2}(1-\varphi)^2(1-2\varphi)\frac{\mu^{AC}}{K_t r_0} \tag{12.85}$$

En rappelant (12.83), on obtient :

$$\mathcal{B}_{K_t} = \frac{2(1-\varphi)^2(1/2-\varphi)^2}{\varphi - 1/3} \tag{12.86}$$

en notant de plus que $\mathcal{B}_{K_t} = 0$ pour $\varphi > 1/2$ et $\mathcal{B}_{K_t} \to \infty$ pour $\varphi < 1/3$. On représente en trait continu sur la figure 12.9 ci-après, l'évolution du module de cisaillement homogénéisé en fonction de la porosité. Le solide étant rigide, (12.71) donne la relation suivante entre $\mathcal{A}_{K_t}$ et $\mathcal{B}_{K_t}$:

$$\mathcal{A}_{K_t} = \frac{4(1-\varphi)}{3\varphi}\mathcal{B}_{K_t} \tag{12.87}$$

12.2.5 Grains isotropes transverses et interface non parfaite

Description du schéma

On suppose à présent que les grains sont constitués d'un empilement de feuillets rigides parallèles pouvant librement glisser les uns par rapport aux autres, sans autre mode de déformation possible. Une première étape d'homogénéisation représente l'empilement de feuillets par un matériau homogène isotrope transverse. Le schéma auto-cohérent envisagé en seconde étape d'homogénéisation est illustré sur la figure 12.8. Comme précédemment (section 12.2.4), une interface $\mathcal{I}$ (raideur $\boldsymbol{K'}$ avec $K'_n \to \infty$) entoure l'inhomogénéité solide. On considère une distribution isotrope de l'orientation des particules solides. Deux différences sont à noter par rapport au cas présenté en annexe B.1 (figure B.1) :

- une interface non parfaite entoure l'inhomogénéité sphérique solide ;
- le comportement isotrope transverse du solide est particulier.

En effet, le vecteur $\underline{e}_3$ étant normal aux feuillets, le comportement du matériau constituant les grains se traduit par :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \varepsilon_{13} \\ 0 & 0 & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & 0 \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1,\underline{e}_2,\underline{e}_3)} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1,\underline{e}_2,\underline{e}_3)} \tag{12.88}$$

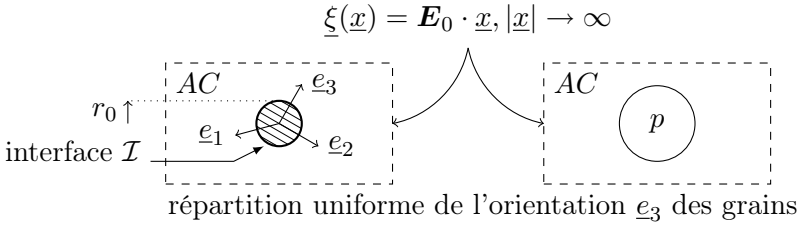


FIG. 12.8 – Problèmes auxiliaires d'élasticité à résoudre pour mettre en œuvre le schéma auto-cohérent envisagé (forme sphérique entourée d'une interface $\mathcal{I}$ pour représenter le solide s et forme sphérique pour représenter l'espace poreux p), l'inhomogénéité solide présentant un comportement isotrope transverse

les composantes non nulles des tenseurs de déformation et de contrainte pouvant être quelconques.

Ce schéma d'homogénéisation représente une piste vers une modélisation alternative des C-S-H d'une pâte de ciment, vus comme un assemblage de particules feuilletées dont la résistance est conditionnée par celle des contacts entre particules. Évidemment, la forme sphérique utilisée ne convient qu'en première approche aux hydrates, dont les particules solides ont été représentées en section 8.2 par des ellipsoïdes de révolution aplatis.

Estimation des modules homogénéisés

La moyenne de la déformation sur l'espace poreux est, comme d'habitude, donnée par la solution d'Eshelby [36] pour une cavité sphérique :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p = \mathbb{A}_p : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \mathbb{A}_p = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1} \tag{12.89}$$

La moyenne de la déformation de l'ensemble des particules solides avec leurs interfaces $\mathcal{I}$ est déterminée en annexe C.3. Il convient de remplacer les notations de cette annexe comme suit : 2 devient s, 0 devient AC, $\boldsymbol{K}$ devient $\boldsymbol{K}'$. L'équation (C.64), dont il convient de prendre la limite lorsque $K_n \to \infty$, permet d'écrire :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{s \cup \mathcal{I}} = \mathbb{A}_{s \cup \mathcal{I}} : \boldsymbol{E}_0 \tag{12.90}$$

La moyenne du tenseur des contraintes dans l'ensemble des particules solides est explicitée par l'équation (C.65) dans laquelle on fait $K'_n \to \infty$:

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_s = \mathbb{A}_s^c : \boldsymbol{E}_0 \tag{12.91}$$

Ainsi la déformation et la contrainte moyenne dans l'ensemble du VER s'écrivent :

$$\boldsymbol{E} = [\varphi \mathbb{A}_p + (1-\varphi)\mathbb{A}_{s \cup \mathcal{I}}] : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\Sigma} = (1-\varphi)\mathbb{A}_s^c : \boldsymbol{E}_0 \tag{12.92}$$

On établit alors l'expression de la rigidité effective :

$$\mathbb{C}^{AC} = (1-\varphi)\mathbb{A}_s^c : [\varphi \mathbb{A}_p + (1-\varphi)\mathbb{A}_{s \cup \mathcal{I}}]^{-1} \tag{12.93}$$

En projetant cette équation tensorielle sur $\mathbb{J}$ et $\mathbb{K}$, on obtient finalement :

$$k^{AC} = \frac{10(1-4\varphi)(1-\varphi)}{3\varphi(1+29\varphi)} K'_t r_0 \quad \text{et} \quad \mu^{AC} = \frac{5(1-4\varphi)}{2(1+29\varphi)} K'_t r_0 \tag{12.94}$$

On constate que la raideur auto-cohérente est nulle pour $\varphi > 1/4$.

Comme précédemment, on cherche à écrire les modules homogénéisés sous la forme (12.36), ce qui conduit à $\mathcal{A}_{K_t}$ et $\mathcal{B}_{K_t}$ exprimés par (12.85). Compte tenu de l'expression particulière (12.94), nous obtenons ici (on rappelle que $K_t' = 2K_t$ (12.43)) :

$$\mathcal{A}_{K_t} = \frac{10(1-4\varphi)(1-\varphi)^3(1-2\varphi)}{\varphi(1+29\varphi)} \quad \text{et} \quad \mathcal{B}_{K_t} = \frac{15(1-4\varphi)(1-\varphi)^2(1-2\varphi)}{2(1+29\varphi)} \tag{12.95}$$

soit, comme dans le cas du solide rigide (12.87) :

$$\mathcal{A}_{K_t} = \frac{4(1-\varphi)}{3\varphi}\mathcal{B}_{K_t} \tag{12.96}$$

On représente sur la figure 12.9 le module de cisaillement obtenu pour des grains feuilletés (12.95) ou rigides (12.86).

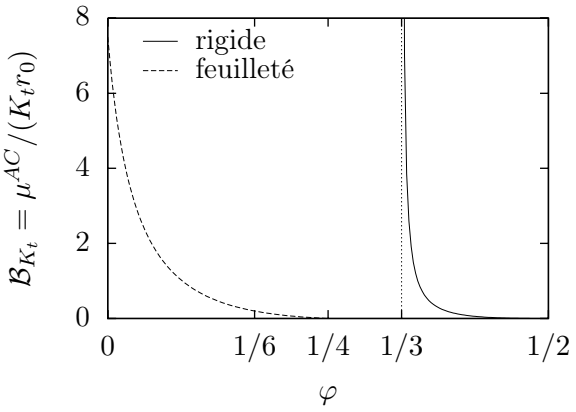


FIG. 12.9 – Module de cisaillement effectif, rapporté au module d'interface multiplié par le rayon caractéristique des grains, en fonction de la porosité, pour des grains soit rigides, soit feuilletés

12.3 Estimation de critères de rupture d'assemblages de grains

Il s'agit maintenant d'exploiter les résultats des sections 12.1 et 12.2 pour estimer le critère de rupture d'un assemblage poreux de grains.

12.3.1 Rupture intragranulaire

On envisage un premier mécanisme de rupture : la rupture intragranulaire. Le solide constituant les grains présente un critère de rupture soit de von Mises, soit de Drucker-Prager. On examine successivement deux cas extrêmes pour les joints de grains : soit infiniment résistants, soit lisses (aucune résistance). On utilise les résultats des sections 12.1.2 et 12.2.4.

Solide de von Mises

Le critère macroscopique est donné par (12.24) avec la relation (12.80) entre $\mathcal{A}_\mu$ et $\mathcal{B}_\mu$. Ainsi le critère macroscopique ne s'exprime plus qu'en fonction de $\mathcal{B}_\mu$:

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = (1-\varphi)\mathcal{B}_\mu k^2 \tag{12.97}$$

Dans le plan (Σ_m, Σ_d), ce critère est une ellipse centrée dont le rapport d'aspect ne dépend que de la porosité et dont la taille dépend de la porosité, de la nature des joints de grains (par le biais de $\mathcal{B}_\mu$) et est proportionnelle à la résistance k du solide. En particulier, la contrainte déviatorique équivalente maximale admissible s'écrit :

$$\Sigma_d^{max} = k\sqrt{(1-\varphi)\mathcal{B}_\mu} \tag{12.98}$$

Joints infiniment résistants Dans le cas de joints de grains infiniment résistants (ce qui est obtenu par $K_t \to \infty$), l'expression de $\mathcal{B}_\mu$ est donnée par (12.81). Le critère macroscopique s'explicite alors sous la forme :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{(1-\varphi)(1-2\varphi)}{1-\varphi/3}k^2 \tag{12.99}$$

On ne fait que retrouver un résultat de [95]. La résistance est nulle pour $\varphi > 1/2$. Sur la figure 12.10, on représente en trait plein et en fonction de la porosité l'évolution de la contrainte déviatorique équivalente maximale admissible :

$$\Sigma_d^{max} = k\sqrt{\frac{(1-\varphi)(1-2\varphi)}{1-\varphi/3}} \tag{12.100}$$

On note que lorsque le solide présente une résistance infinie, la résistance macroscopique devient également infinie pour $\varphi < 1/2$. Dans ce cas, la résistance macroscopique est :

$$\infty \text{ si } \varphi < 1/2 \quad \text{et} \quad 0 \text{ si } \varphi > 1/2 \tag{12.101}$$

Joints lisses Dans le cas de joints de grains parfaitement lisses (obtenus pour $K_t \to 0$), l'expression de $\mathcal{B}_\mu$ est donnée par (12.82). Le critère macroscopique s'explicite alors sous la forme :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{19}{40}\frac{(1-\varphi)(1-3\varphi)}{1-\varphi/3}k^2 \tag{12.102}$$

Cette fois, la résistance est nulle pour $\varphi > 1/3$. La contrainte déviatorique équivalente maximale s'écrit :

$$\Sigma_d^{max} = k\sqrt{\frac{19}{40}\frac{(1-\varphi)(1-3\varphi)}{1-\varphi/3}} \tag{12.103}$$

Cette dernière est représentée en trait interrompu sur la figure 12.10. À porosité égale, le domaine de résistance du polycristal à grains lisses est systématiquement inclus dans celui du polycristal à joints infiniment résistants.

On note que lorsque le solide est infiniment résistant ($k \to \infty$), la résistance macroscopique du polycristal à grains lisses est également infinie pour $\varphi < 1/3$. Ainsi, la résistance macroscopique ne prend que deux valeurs :

$$\infty \text{ si } \varphi < 1/3 \quad \text{et} \quad 0 \text{ si } \varphi > 1/3 \tag{12.104}$$

Solide de Drucker-Prager

Le critère macroscopique est donné par (12.29) avec la relation (12.80) entre $\mathcal{A}_\mu$ et $\mathcal{B}_\mu$. Ainsi le critère macroscopique ne s'exprime plus qu'en fonction de $\mathcal{B}_\mu$:

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \mathcal{B}_\mu(1-\varphi)\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi}\right)^2 \tag{12.105}$$

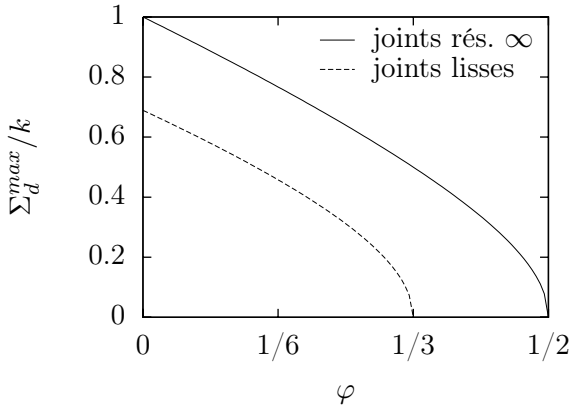


FIG. 12.10 – Contrainte déviatorique maximale macroscopique obtenue pour des grains de von Mises et des joints soit infiniment résistants, soit lisses

ou encore :

$$a(\Sigma_m + b)^2 + \Sigma_d^2 = c \tag{12.106}$$

avec :

$$a = \frac{3\varphi - 4\alpha^2\mathcal{B}_\mu}{4(1-\varphi)}\ , \quad b = \frac{4(1-\varphi)\alpha^2\mathcal{B}_\mu}{3\varphi - 4\alpha^2\mathcal{B}_\mu}h \quad \text{et} \quad c = \frac{3\varphi(1-\varphi)\alpha^2\mathcal{B}_\mu}{3\varphi - 4\alpha^2\mathcal{B}_\mu}h^2 \tag{12.107}$$

Remarquons que lorsque $\alpha \to 0$ en maintenant $\alpha h = k$, on retrouve bien le critère (12.97) obtenu pour un solide de von Mises.

Lorsque le solide ne présente aucune cohésion ($h = 0$), le critère macroscopique devient $a\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = 0$. Le milieu effectif est également non cohérent, son critère est du type Drucker-Prager avec :

$$\alpha^{hom} = \sqrt{\frac{\alpha^2\mathcal{B}_\mu - 3\varphi/4}{1-\varphi}} \tag{12.108}$$

si $\alpha^2 > 3\varphi/(4\mathcal{B}_\mu)$; et il est réduit à $\Sigma_m = \Sigma_d = 0$ si $\alpha^2 < 3\varphi/(4\mathcal{B}_\mu)$. On note que la porosité critique, au delà de laquelle la résistance devient nulle, ainsi obtenue dépend de α.

Lorsque $h > 0$, le critère macroscopique (12.106) est une conique dont le type dépend du signe de $3\varphi - 4\alpha^2\mathcal{B}_\mu$ (figure 12.11). Remarquons que les résultats pour un matériau non cohérent peuvent s'obtenir par simple passage à la limite $h \to 0$, ce qui revient à transformer les coniques de la figure 12.11 par une homothétie de centre $(0,0)$ et de rapport $h \to 0$:

- l'ellipse devient le point $(0,0)$;
- l'hyperbole devient un cône de sommet $(0,0)$.

Comme mentionné en conclusion (section 12.4), il convient de rester critique vis-à-vis de la forme des critères obtenus. En effet, l'utilisation des mêmes approches dans le cadre d'un matériau poreux à matrice, les pores se présentant donc comme des cavités, montre qu'aux faibles porosités, l'homogénéisation non linéaire (basée sur une unique déformation effective pour toute la phase solide) prédit un critère ouvert en compression isotrope, alors qu'un calcul sur une sphère creuse montre que la limite en compression isotrope est finie (pour $\alpha < \sqrt{3/2}$), voir [30]. Il convient donc de rester prudent ici sur la forme des critères macroscopiques obtenus.

Joints infiniment résistants Dans le cas de joints de grains infiniment résistants (ce qui est obtenu par $K_t \to \infty$), l'expression de $\mathcal{B}_\mu$ est donnée par (12.81). Le critère macroscopique

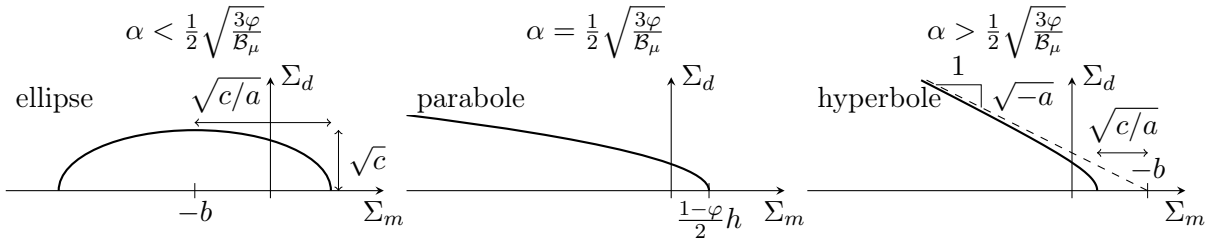


FIG. 12.11 – Forme du critère macroscopique en fonction de la porosité et du paramètre α du critère du solide, pour des grains de Drucker-Prager

(12.105) s'explicite alors sous la forme :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{(1-2\varphi)(1-\varphi)}{1-\varphi/3}\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi}\right)^2 \tag{12.109}$$

Dans le plan $(\Sigma_m/h, \Sigma_d/h)$, ce critère ne dépend que du paramètre α du critère du solide et de la porosité φ. La figure 12.12 gauche donne la forme du critère en fonction de (α, φ). La résistance est nulle pour $\varphi > 1/2$. On représente le critère obtenu pour quelques couples (α, φ) sur la figure 12.13 en trait continu.

Joints lisses Dans le cas de joints de grains parfaitement lisses ($K_t \to 0$), l'expression de $\mathcal{B}_\mu$ est donnée par (12.82). Le critère macroscopique (12.105) devient alors :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{19}{40}\frac{(1-3\varphi)(1-\varphi)}{1-\varphi/3}\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi}\right)^2 \tag{12.110}$$

La figure 12.12 droite indique la forme du critère selon les valeurs du couple (α, φ). Cette fois, la résistance est nulle pour $\varphi > 1/3$. On trace le critère obtenu pour quelques couples (α, φ) sur la figure 12.13 en trait interrompu.

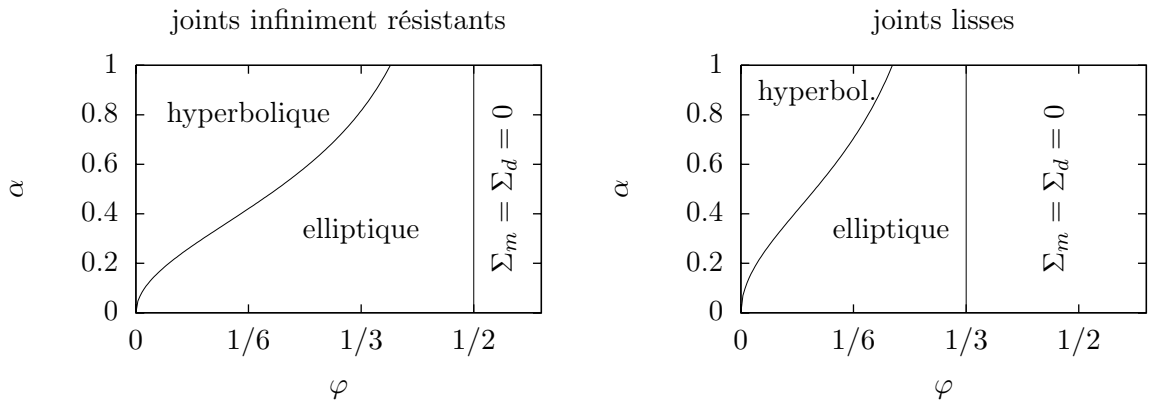


FIG. 12.12 – Forme du critère macroscopique selon les valeurs de la porosité φ et du paramètre α du critère du solide, pour des grains de Drucker-Prager et des joints soit infiniment résistants, soit lisses

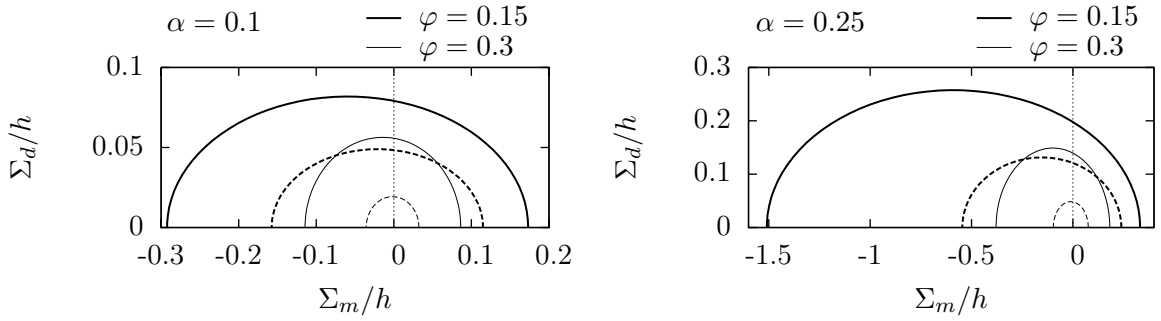


FIG. 12.13 – Critères macroscopiques obtenus avec des grains de Drucker-Prager pour des joints infiniment résistants (trait continu) ou lisses (trait interrompu)

On peut montrer simplement que les domaines de résistance estimés par homogénéisation non linéaire sont ordonnés de façon conforme à l'intuition : le domaine pour les joints lisses est inclus dans celui pour les joints infiniment résistants, toutes choses étant égales par ailleurs. D'après (12.105), le domaine de résistance, paramétré par h, α, φ et $\mathcal{B}_\mu(\varphi)$ est dans tous les cas caractérisé par :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 \leq \mathcal{B}_\mu(\varphi)(1-\varphi)\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{1-\varphi}\right)^2 \tag{12.111}$$

ou encore par $f(h, \alpha, \varphi, \mathbf{\Sigma}) \leq \mathcal{B}_\mu(\varphi)$ avec :

$$f(h, \alpha, \varphi, \mathbf{\Sigma}) = \frac{\dfrac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2}{(1-\varphi)\alpha^2\left(h - \dfrac{\Sigma_m}{1-\varphi}\right)^2} \tag{12.112}$$

Notons respectivement $\mathcal{B}_\mu^{lis}$ et $\mathcal{B}_\mu^{inf}$ les fonctions $\mathcal{B}_\mu$ caractérisant respectivement l'assemblage de grains à joints lisses et celui à joints infiniment résistants. Comme $\mathcal{B}_\mu^{lis}(\varphi) < \mathcal{B}_\mu^{inf}(\varphi)$, pour h, α, φ fixés et $\mathbf{\Sigma}$ donné, $f(h, \alpha, \varphi, \mathbf{\Sigma}) \leq \mathcal{B}_\mu^{lis}(\varphi) \Rightarrow f(h, \alpha, \varphi, \mathbf{\Sigma}) \leq \mathcal{B}_\mu^{inf}(\varphi)$. Autrement dit, le domaine de résistance macroscopique de l'assemblage à joints lisses est inclus dans celui de l'assemblage à joints infiniment résistants.

12.3.2 Rupture intergranulaire

On envisage un second mécanisme de rupture : la rupture des joints de grains. On examine successivement un solide infiniment résistant et un solide feuilleté (feuillets glissant librement les uns sur les autres). On utilise les résultats des sections 12.1.2, 12.2.4 et 12.2.5. Il convient de noter que même si les résultats présentés en section 12.1 ont été établis en supposant le solide isotrope, ceux-ci restent valables pour un solide anisotrope tant que le comportement effectif est lui-même isotrope et que l'on ne s'intéresse qu'à la rupture des joints de grains.

Le cas des grains feuilletés semble prometteur comme première approche de la modélisation des C-S-H d'une pâte de ciment, vus comme un assemblage de particules feuilletées et dont la résistance serait conditionnée par celle des contacts interparticulaires, le glissement feuillet sur feuillet se faisant librement. Il s'agit d'un modèle différent de celui proposé au chapitre 9, qui supposait une rupture (fragile) *des particules solides elles-mêmes* : la différence se situe au niveau du mécanisme local de rupture supposé. Il ne s'agit néanmoins que d'une première approche car pour aller plus loin il conviendrait de considérer des particules feuilletées de forme *oblate*, conformément au modèle morphologique de pâte de ciment proposé dans le chapitre 8.

Joints de Tresca

Le critère macroscopique est donné par (12.37). On constate que la même relation prévaut entre $\mathcal{A}_{K_t}$ et $\mathcal{B}_{K_t}$, que le solide soit rigide (voir (12.87)) ou feuilleté (voir (12.96)). Ainsi le critère macroscopique ne s'exprime plus qu'en fonction de $\mathcal{B}_{K_t}$:

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \mathcal{B}_{K_t}k^2 \tag{12.113}$$

Dans le plan (Σ_m, Σ_d), ce critère est une ellipse centrée dont le rapport d'aspect ne dépend que de la porosité et dont la taille dépend de la porosité et de la nature du solide (par le biais de $\mathcal{B}_{K_t}$), et est proportionnelle à la résistance k des joints.

Solide infiniment résistant Dans le cas du solide rigide, l'expression de $\mathcal{B}_{K_t}$ est donnée par (12.86). Le critère macroscopique s'explicite alors sous la forme :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{2(1-\varphi)^2(1/2-\varphi)^2}{\varphi-1/3}k^2 \tag{12.114}$$

La contrainte déviatorique équivalente maximale est :

$$\Sigma_d^{max} = \sqrt{\frac{2}{\varphi-1/3}}(1-\varphi)(1/2-\varphi)k \tag{12.115}$$

Cette contrainte maximale est représentée en fonction de la porosité sur la figure 12.14 en trait continu. On observe une porosité critique, $\varphi = 1/3$, en deçà de laquelle la résistance macroscopique est infinie. Cette dernière devient en réalité limitée par la résistance des grains, mais ceux-ci ont, dans le cadre du présent modèle, été pris de résistance infinie. Au delà de ce seuil, la taille du domaine de résistance décroît avec la porosité, jusqu'à s'annuler pour $\varphi = 1/2$.

Lorsque la résistance des joints devient nulle ($k \to 0$), la résistance macroscopique devient aussi nulle pour $\varphi > 1/3$. On retrouve bien le résultat établi précédemment pour des joints lisses et un solide dont on fait tendre la résistance vers l'infini (équation (12.104)).

On peut comparer le critère établi ici pour des grains infiniment résistants séparés par des interfaces de Tresca à celui obtenu en section 9.1.3 pour un assemblage de pores et de particules composites à cœur infiniment résistant et calotte de von Mises, dans la limite d'une épaisseur de calotte tendant vers 0. Rappelons le critère (9.25) que nous avons obtenu par un tel passage à la limite :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{(1/2-\varphi)(1-\varphi)}{\varphi-1/3}k^2 \tag{12.116}$$

On trouve un facteur $(1-2\varphi)(1-\varphi) = \varrho$ entre le membres de droite des critères (12.114) et (12.116). Ceci provient du fait qu'en considérant la limite d'une couche d'épaisseur tendant vers 0, nous n'avions pas pris garde au fait que seule une portion de la périphérie de chaque grain est en contact avec d'autres grains, le complémentaire subissant un vecteur contrainte nul. Le critère établi ici par un raisonnement mettant en jeu directement une interface nous semble donc plus approprié que celui obtenu en faisant tendre l'épaisseur de la calotte vers 0.

Solide feuilleté Dans le cas du solide feuilleté (feuillets rigides glissant librement les uns sur les autres), l'expression de $\mathcal{B}_{K_t}$ est donnée par (12.95). Le critère macroscopique s'explicite alors sous la forme :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{15(1-4\varphi)(1-\varphi)^2(1-2\varphi)}{2(1+29\varphi)}k^2 \tag{12.117}$$

La contrainte déviatorique équivalente maximale est alors :

$$\Sigma_d = \sqrt{\frac{15(1-4\varphi)(1-2\varphi)}{2(1+29\varphi)}}(1-\varphi)k \tag{12.118}$$

On observe (en trait interrompu sur la figure 12.14) une résistance finie à porosité nulle, puis celle-ci décroît avec la porosité, jusqu'à $\varphi = 1/4$; au delà, la résistance est nulle.

Lorsque la résistance des joints devient infinie ($k \to \infty$), la résistance macroscopique devient :

$$\infty \text{ si } \varphi < 1/4 \quad \text{et} \quad 0 \text{ si } \varphi > 1/4 \tag{12.119}$$

Lorsque la résistance des joints est nulle ($k \to 0$), la résistance macroscopique devient nulle quelle que soit la porosité.

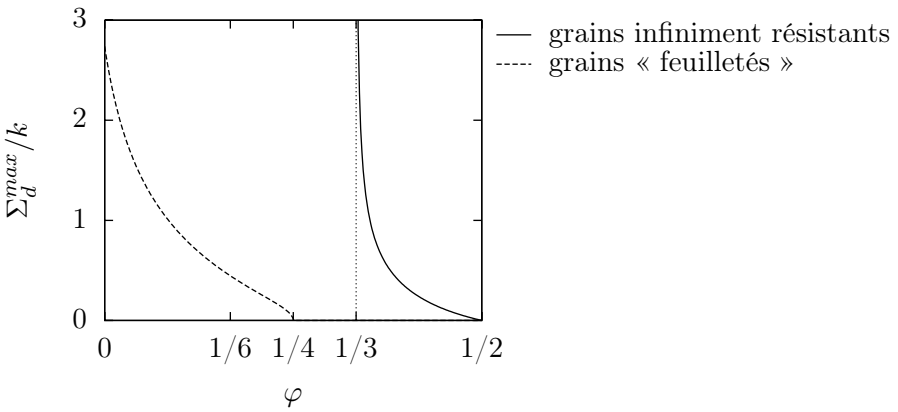


FIG. 12.14 – Contrainte déviatorique maximale macroscopique obtenue pour des joints de Tresca et des grains soit infiniment résistants, soit feuilletés

Joints de Mohr-Coulomb

Le critère macroscopique est donné par (12.42). Comme précédemment, la même relation prévaut entre $\mathcal{A}_{K_t}$ et $\mathcal{B}_{K_t}$, que le solide soit rigide ou feuilleté. De plus, $\mathcal{D}$ présente la même expression (12.65) indépendamment du comportement des grains. Ainsi le critère macroscopique ne s'exprime plus qu'en fonction de $\mathcal{B}_{K_t}$:

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \mathcal{B}_{K_t}\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{(1-\varphi)^2(1-2\varphi)}\right)^2 \tag{12.120}$$

Lorsque $\alpha \to 0$ en maintenant $\alpha h = k$, on retrouve bien le critère (12.113) obtenu pour une interface de Tresca.

Lorsque les joints de grain ne présentent aucune cohésion ($h \to 0$), le critère macroscopique devient :

$$a\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = 0 \quad \text{avec} \quad a = \frac{3\varphi}{4(1-\varphi)} - \frac{\alpha^2\mathcal{B}_{K_t}}{(1-\varphi)^4(1-2\varphi)^2} \tag{12.121}$$

Lorsque $a < 0$, il s'agit d'un critère de Drucker-Prager sans cohésion, avec $\alpha^{hom} = \sqrt{-a}$. Le domaine de résistance est limité à $\Sigma_m = \Sigma_d = 0$ lorsque $a > 0$.

Dans le cas général $h \neq 0$, le critère (12.120) peut être mis sous la forme :

$$a(\Sigma_m + b)^2 + \Sigma_d^2 = c \tag{12.122}$$

avec :

$$a = \frac{3\varphi}{4(1-\varphi)} - \frac{\mathcal{B}_{K_t}\alpha^2}{(1-\varphi)^4(1-2\varphi)^2} \tag{12.123}$$

$$b = \frac{4(1-\varphi)^2(1-2\varphi)\mathcal{B}_{K_t}\alpha^2}{3\varphi(1-\varphi)^3(1-2\varphi)^2 - 4\mathcal{B}_{K_t}\alpha^2}h \tag{12.124}$$

$$c = \frac{3\varphi(1-\varphi)^3(1-2\varphi)^2\mathcal{B}_{K_t}\alpha^2}{3\varphi(1-\varphi)^3(1-2\varphi)^2 - 4\mathcal{B}_{K_t}\alpha^2}h^2 \tag{12.125}$$

La forme du critère macroscopique dépend du signe de a, et donc des valeurs prises par la porosité φ et l'angle de frottement microscopique α (on rappelle que $\mathcal{B}_{K_t}$ est une fonction de la porosité qui dépend du type de solide). Le critère macroscopique est elliptique si $a > 0$, soit :

$$\alpha^2 < \frac{3\varphi(1-\varphi)^3(1-2\varphi)^2}{4\mathcal{B}_{K_t}} \tag{12.126}$$

et hyperbolique si $a < 0$.

Solide infiniment résistant Dans le cas du solide rigide, l'expression de $\mathcal{B}_{K_t}$ est donnée par (12.86). Le critère macroscopique s'explicite alors sous la forme :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{2(1-\varphi)^2(1/2-\varphi)^2}{\varphi - 1/3}\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{(1-\varphi)^2(1-2\varphi)}\right)^2 \tag{12.127}$$

Dans le cas particulier où les joints ne présentent aucune cohésion, le critère macroscopique devient (12.121) avec :

$$a = \frac{3\varphi}{4(1-\varphi)} - \frac{\alpha^2}{2(1-\varphi)^2(\varphi-1/3)} \tag{12.128}$$

Lorsque $a < 0$, on obtient macroscopiquement un critère de Drucker-Prager sans cohésion, dont l'angle de frottement s'écrit :

$$\alpha^{hom} = \sqrt{\frac{\alpha^2}{2(1-\varphi)^2(\varphi-1/3)} - \frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}} \tag{12.129}$$

Notons que ce modèle a été appliqué avec succès aux sables lâches (porosité $\varphi > 0.4$) par [76, 78]. Lorsque $a > 0$, le domaine de résistance est limité à $\Sigma_m = \Sigma_d = 0$.

Revenons au cas général $h \neq 0$. Lorsque $\varphi > 1/2$, $\mathcal{B}_{K_t} = 0$ et le domaine de résistance se limite au point $\Sigma_m = \Sigma_d = 0$. Lorsque $\varphi < 1/3$, $\mathcal{B}_{K_t} \to \infty$ et le domaine de résistance est le demi plan $\Sigma_m < (1-\varphi)^2(1-2\varphi)h$. Lorsque $1/3 < \varphi < 1/2$, le critère (12.127) peut être mis sous la forme (12.122). Le type de conique obtenu dépend alors des valeurs prises par φ et α. Par exemple, le critère est elliptique si :

$$\alpha^2 < \frac{\varphi(1-\varphi)(3\varphi-1)}{2} \tag{12.130}$$

On résume ces résultats sur la figure 12.15 et on représente le critère obtenu pour quelques couples (α, φ) sur la figure 12.16.

Solide feuilleté Dans le cas du solide feuilleté, l'expression de $\mathcal{B}_{K_t}$ est donnée par (12.95). Le critère macroscopique s'explicite alors sous la forme :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = \frac{15(1-4\varphi)(1-\varphi)^2(1-2\varphi)}{2(1+29\varphi)}\alpha^2\left(h - \frac{\Sigma_m}{(1-\varphi)^2(1-2\varphi)}\right)^2 \tag{12.131}$$

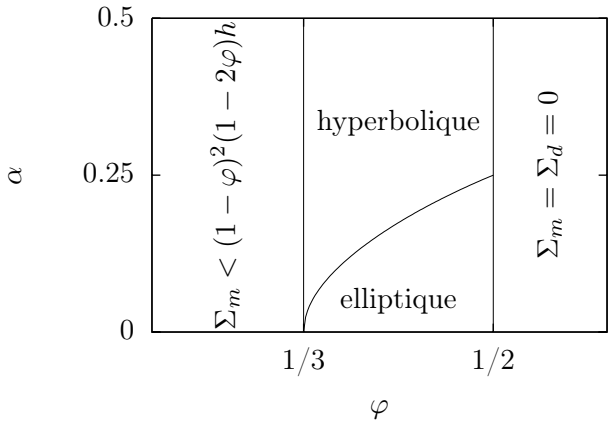


FIG. 12.15 – Forme du domaine macroscopique de résistance en fonction de la porosité φ et du paramètre α du critère de joint, pour un solide infiniment résistant

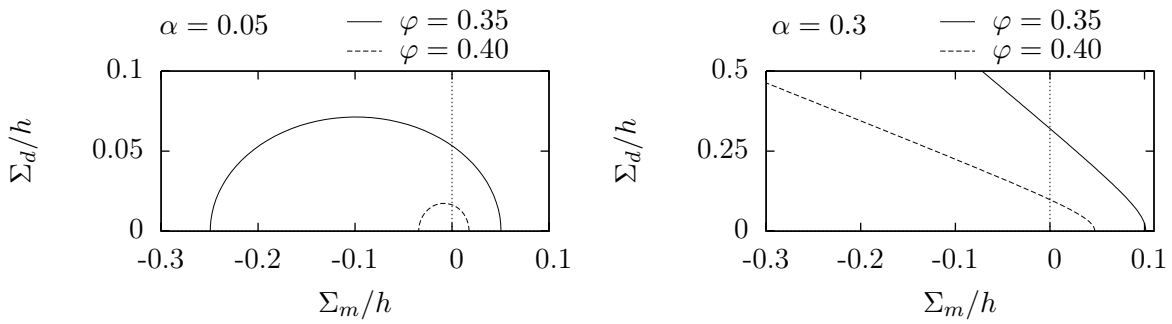


FIG. 12.16 – Critères macroscopiques pour des joints de Mohr-Coulomb et des grains infiniment résistants

Dans le cas particulier où les joints ne présentent aucune cohésion, le critère macroscopique devient (12.121) avec :

$$a = \frac{3\varphi}{4(1-\varphi)} - \frac{15(1-4\varphi)\alpha^2}{2(1-\varphi)^2(1-2\varphi)(1+29\varphi)} \tag{12.132}$$

Lorsque $a < 0$, on obtient macroscopiquement un critère de Drucker-Prager sans cohésion, dont l'angle de frottement s'écrit $\alpha^{hom} = \sqrt{-a}$. Lorsque $a > 0$, le domaine de résistance est limité à $\Sigma_m = \Sigma_d = 0$.

Revenons au cas général $h \neq 0$. Lorsque $\varphi > 1/4$, $\mathcal{B}_{K_t} = 0$ et le domaine de résistance se limite au point $\Sigma_m = \Sigma_d = 0$. Lorsque $0 < \varphi < 1/4$, le critère (12.131) peut être mis sous la forme (12.122). Sa forme dépend alors des valeurs prises par φ et α. Par exemple, il est elliptique si :

$$\alpha^2 < \frac{\varphi(1-\varphi)(1-2\varphi)(1+29\varphi)}{10(1-4\varphi)} \tag{12.133}$$

On résume ces résultats sur la figure 12.17 et on représente le critère obtenu pour quelques couples (α, φ) sur la figure 12.18. La possibilité de glissement entre feuillets affaiblit considérablement le matériau, du point de vue de sa résistance, par rapport au matériau à grains infiniment résistants du paragraphe précédent.

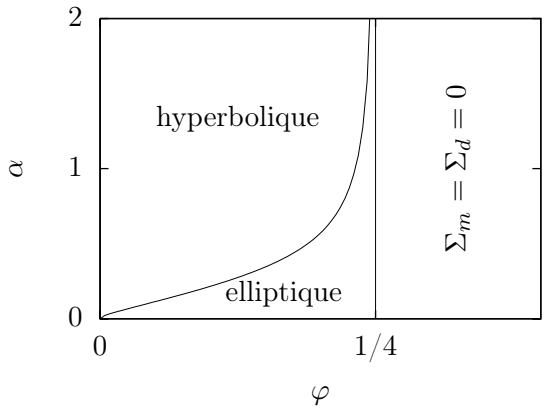


FIG. 12.17 – Forme du domaine de résistance macroscopique en fonction de la porosité φ et du paramètre α du critère de joint, pour des grains feuilletés

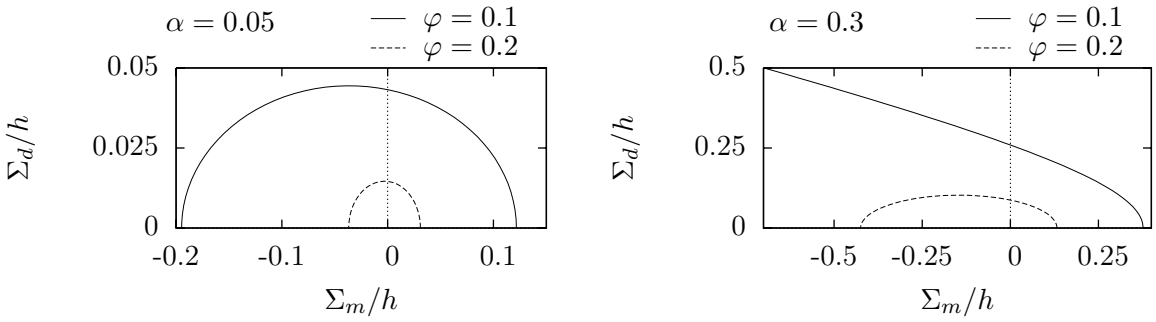


FIG. 12.18 – Critères macroscopiques pour des joints de Mohr-Coulomb et des grains feuilletés

12.3.3 Rupture intra et intergranulaire

Pour terminer, on considère que la rupture locale peut se faire *simultanément* dans les grains et dans les joints. Le cas de grains de von Mises et de joints de Tresca a été proposé dans [33], pour une porosité nulle. Ici, on s'intéresse au cas de grains de von Mises et de joints de Mohr-Coulomb sans cohésion, en s'autorisant une valeur quelconque de la porosité.

On procède, comme dans les sections précédentes qui ne supposaient qu'un seul des deux mécanismes de rupture, par homogénéisation non linéaire en mettant en œuvre la méthode sécante modifiée. La différence provient du fait qu'à présent, on donne un comportement élastique non linéaire fictif à la fois au solide s et à l'interface Γ. Ce comportement sature asymptotiquement (aux « grandes » déformations) le critère de rupture du solide et des joints. On se donne donc :

$$\mu_s(\varepsilon_d) = \frac{k}{2\varepsilon_d} \tag{12.134}$$

lorsque $\varepsilon_d \to \infty$; et :

$$K_t([\![\xi_n]\!], |[\![\underline{\xi}_t]\!]|) = -\alpha \frac{K_n [\![\xi_n]\!]}{|[\![\underline{\xi}_t]\!]|} \tag{12.135}$$

lorsque $|[\![\underline{\xi}_t]\!]| \to \infty$. Aux « grandes » déformations, $\mu_s \to 0$ et $K_t \to 0$ ce qui signifie qu'asymptotiquement, solide et joints peuvent être considérés incompressibles ($k_s \to \infty$ et $K_n \to \infty$).

On commence par rappeler brièvement les résultats tirés du schéma d'homogénéisation linéaire utilisé pour rendre compte de la morphologie. Ensuite, on écrit les conditions vérifiées par la contrainte macroscopique lorsque le mécanisme intragranulaire est activé, puis lorsque le mécanisme intergranulaire est activé. Enfin, on construit le critère de rupture macroscopique en envisageant successivement trois cas de figure :

- le mécanisme intragranulaire est activé seul,
- le mécanisme intergranulaire est activé seul,
- les deux mécanismes sont activés simultanément.

Schéma linéaire

Il s'agit de considérer un polycristal poreux avec interfaces autour des grains solides. Le solide est incompressible ($k_s \to \infty$). L'interface intergranulaire est telle que $K_n \to \infty$. La porosité est notée φ. En fait, ce schéma linéaire a déjà été traité, en section 12.2.4 : voir figure 12.6. Les modules auto-cohérents sont notés k^{AC} et μ^{AC}. On rappelle ici les résultats obtenus (équations (12.80) et (12.79)) :

$$k^{AC} = \frac{4(1-\varphi)}{3\varphi}\mu^{AC} \tag{12.136}$$

$$8(5+2\kappa)(3-\varphi)\mathcal{B}_\mu^2 + [(9+77\varphi)\kappa + 57(3\varphi-1)]\mathcal{B}_\mu + 57\kappa(2\varphi-1) = 0 \tag{12.137}$$

avec :

$$\kappa = \frac{K_t r_0}{\mu_s} \quad \text{et} \quad \mathcal{B}_\mu = \frac{\mu^{AC}}{\mu_s} \tag{12.138}$$

La résolution de (12.137) conduit à $\mathcal{B}_\mu(\kappa, \varphi)$.

Saturation du critère du solide

Lorsque le mécanisme intragranulaire est activé, $2\mu_s\varepsilon_d \to k$. Dans ce cas, en mettant en œuvre une démarche d'homogénéisation non linéaire basée sur la méthode sécante modifiée avec

la déformation effective (12.18), on établit la relation (12.22) entre Σ_m et Σ_d. Cette relation se traduit, en introduisant les grandeurs adimensionnées $\mathcal{B}_\mu$ et κ, par :

$$\frac{\mathcal{B}_\mu - \kappa\partial\mathcal{B}_\mu/\partial\kappa}{(1-\varphi)\mathcal{B}_\mu^2}\left[\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\left(\frac{\Sigma_m}{k}\right)^2 + \left(\frac{\Sigma_d}{k}\right)^2\right] = 1 \tag{12.139}$$

Saturation du critère de joint

Lorsque le mécanisme intergranulaire est activé, $K_t|[\![\underline{\xi}_t]\!]| = -\alpha K_n[\![\xi_n]\!]$. Dans ce cas, en mettant en œuvre une démarche d'homogénéisation non linéaire basée sur la méthode sécante modifiée avec les sauts de déplacement effectifs (12.39), on établit la relation (12.40) avec $h = 0$. Cette relation se traduit, en introduisant les grandeurs adimensionnées $\mathcal{B}_\mu$ et κ, par :

$$\frac{\kappa^2\partial\mathcal{B}_\mu/\partial\kappa}{\mathcal{B}_\mu^2}\left[\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2\right] = \frac{3\alpha^2}{2(1-\varphi)^2(1-2\varphi)}\Sigma_m^2 \tag{12.140}$$

Mécanisme intragranulaire activé seul

Dans le cas où le mécanisme intragranulaire est activé *seul*, $\varepsilon_d \to \infty$, soit $\mu_s \to 0$, alors que K_t reste fini. Par conséquent on a $\kappa \to \infty$. La relation (12.139) entre Σ_m et Σ_d est vérifiée. Comme $\kappa \to \infty$, elle se simplifie sensiblement :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\left(\frac{\Sigma_m}{k}\right)^2 + \left(\frac{\Sigma_d}{k}\right)^2 = \frac{3(1-2\varphi)(1-\varphi)}{3-\varphi} \tag{12.141}$$

On retrouve bien (12.99). On décrit ainsi une première partie du critère de rupture macroscopique.

Le mécanisme intragranulaire n'est plus le seul activé lorsque la contrainte macroscopique est telle que la relation (12.140) émanant de la saturation du critère de joint vient également à être vérifiée. Comme ici $\kappa \to \infty$, cette dernière relation s'écrit :

$$\frac{3}{4}\frac{\varphi(1-\varphi)(3-\varphi) - 10\alpha^2}{(1-\varphi)^2(3-\varphi)}\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = 0 \tag{12.142}$$

Ainsi le point $(\Sigma_m^{intra}, \Sigma_d^{intra})$ à partir duquel le mécanisme intragranulaire n'est plus le seul à être activé est solution de (12.141) et (12.142). Il est caractérisé par :

$$\Sigma_d^{intra} = \frac{k}{\alpha}\sqrt{\frac{3(1-2\varphi)(1-\varphi)[10\alpha^2 - \varphi(1-\varphi)(3-\varphi)]}{10(3-\varphi)}} \tag{12.143}$$

Mécanisme intergranulaire activé seul

Dans le cas où le mécanisme intergranulaire est activé *seul*, $|[\![\underline{\xi}_t]\!]| \to \infty$, soit $K_t \to 0$, alors que μ_s reste fini. Par conséquent, on a $\kappa \to 0$. La relation (12.140) est alors vérifiée. Comme $\kappa \to 0$, elle se simplifie sensiblement :

$$\left[\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)} - \frac{3\alpha^2}{2(1-\varphi)^2(3\varphi-1)}\right]\Sigma_m^2 + \Sigma_d^2 = 0 \tag{12.144}$$

lorsque $1/3 < \varphi < 1/2$. Pour $0 < \varphi < 1/3$, l'expression précédente est à remplacer par $\Sigma_m = 0$. On retrouve bien (12.128). On décrit ainsi une seconde partie du critère de rupture macroscopique.

Le mécanisme intergranulaire n'est plus le seul activé lorsque la contrainte macroscopique est telle que la relation (12.139) émanant de la saturation du critère du solide vient également à être vérifiée, ce qui, compte tenu de $\kappa \to 0$, s'écrit :

$$\frac{3\varphi}{4(1-\varphi)}\left(\frac{\Sigma_m}{k}\right)^2 + \left(\frac{\Sigma_d}{k}\right)^2 = \begin{cases} \dfrac{57(1-\varphi)(1-3\varphi)}{40(3-\varphi)} & \text{si } 0 < \varphi < \dfrac{1}{3} \\ \dfrac{57(1-\varphi)(3\varphi-1)(1-2\varphi)}{311\varphi^2 - 330\varphi + 111} & \text{si } \dfrac{1}{3} < \varphi < \dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{12.145}$$

Ainsi le point $(\Sigma_m^{inter}, \Sigma_d^{inter})$ à partir duquel le mécanisme intergranulaire n'est plus le seul à être activé est solution de (12.144) et (12.145). Il est caractérisé par :

$$\Sigma_d^{inter} = \begin{cases} \dfrac{k}{2}\sqrt{\dfrac{57(1-\varphi)(1-3\varphi)}{10(3-\varphi)}} & \text{si } 0 < \varphi < \dfrac{1}{3} \\ \dfrac{k}{\alpha}\sqrt{\dfrac{57(1-\varphi)(1-2\varphi)(3\varphi-1)[2\alpha^2 - \varphi(1-\varphi)(3\varphi-1)]}{311\varphi^2 - 330\varphi + 111}} & \text{si } \dfrac{1}{3} < \varphi < \dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{12.146}$$

Mécanismes intra et intergranulaires activés simultanément

En dehors des domaines de validité des deux portions de courbes établies ci-dessus, les deux mécanismes, intra et intergranulaire, sont activés en simultané. Cela se traduit par $\varepsilon_d \to \infty$ et $|[\![\underline{\xi}_t]\!]| \to \infty$, soit $\mu_s \to 0$ et $K_t \to 0$. Ainsi le rapport $\kappa = K_t r_0/\mu_s$ est a priori indéterminé. Les relations (12.139) et (12.140) entre Σ_m et Σ_d sont simultanément vérifiées. La résolution de ce système de deux équations mène à $\Sigma_m(\kappa)$ et $\Sigma_d(\kappa)$ sous la forme :

$$\begin{cases} \Sigma_m(\kappa) &= -(1-\varphi)\kappa\dfrac{k}{\alpha}\sqrt{\dfrac{2(1-2\varphi)(1-\varphi)}{3}}\sqrt{\dfrac{\partial\mathcal{B}_\mu/\partial\kappa}{\mathcal{B}_\mu - \kappa\partial\mathcal{B}_\mu/\partial\kappa}} \\ \Sigma_d(\kappa) &= \dfrac{k}{\alpha}\sqrt{\dfrac{1-\varphi}{2}}\sqrt{\dfrac{2\alpha^2\mathcal{B}_\mu^2 - \varphi(1-2\varphi)(1-\varphi)\kappa^2\partial\mathcal{B}_\mu/\partial\kappa}{\mathcal{B}_\mu - \kappa\partial\mathcal{B}_\mu/\partial\kappa}} \end{cases} \tag{12.147}$$

On décrit ainsi de façon paramétrique la troisième partie du critère macroscopique, en faisant varier κ de 0, ce qui revient à partir du point $(\Sigma_m^{inter}, \Sigma_d^{inter})$, à ∞, ce qui permet de rejoindre le point $(\Sigma_m^{intra}, \Sigma_d^{intra})$.

Résultats

Dans le plan (Σ_m, Σ_d), le critère de rupture macroscopique est donc constitué de trois portions de courbes (figure 12.19) :

- un segment de droite partant de l'origine $\Sigma_m = \Sigma_d = 0$, sur lequel seul le mécanisme intergranulaire est activé, et s'arrêtant au point $(\Sigma_m^{inter}, \Sigma_d^{inter})$;
- un arc d'ellipse, sur lequel seul le mécanisme intragranulaire est activé, s'arrêtant au point $(\Sigma_m^{intra}, \Sigma_d^{intra})$;
- une courbe, sur laquelle les deux mécanismes sont simultanément activés, reliant les points $(\Sigma_m^{inter}, \Sigma_d^{inter})$ et $(\Sigma_m^{intra}, \Sigma_d^{intra})$.

Le critère de rupture est donc fermé, contrairement à celui obtenu dans le cas des grains infiniment résistants, pour lesquels « l'arc d'ellipse est rejeté à l'infini », ce qui donne un critère de Drucker-Prager.

Sur la figure 12.20, on représente les critères macroscopiques obtenus pour quelques valeurs de la porosité φ et de l'angle de frottement α entre grains. Conformément à l'intuition, à α constant, les domaines de résistance macroscopique sont croissants (au sens de l'inclusion) lorsque

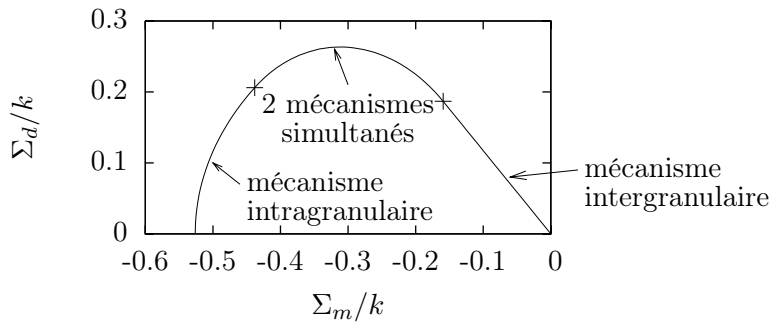


FIG. 12.19 – Critère de rupture macroscopique obtenu pour des grains de von Mises et des joints de Mohr-Coulomb sans cohésion : les croix représentent les deux points $(\Sigma_m^{inter}, \Sigma_d^{inter})$ et $(\Sigma_m^{intra}, \Sigma_d^{intra})$ (calcul réalisé pour $\varphi = 0.4$, $\alpha = 0.3$)

la porosité décroît. À porosité fixée, l'arc d'ellipse atteint lorsque le seul mécanisme de rupture intragranulaire est activé appartient à la même ellipse quel que soit α, puisqu'évidemment le mécanisme de rupture intergranulaire n'est alors pas activé.

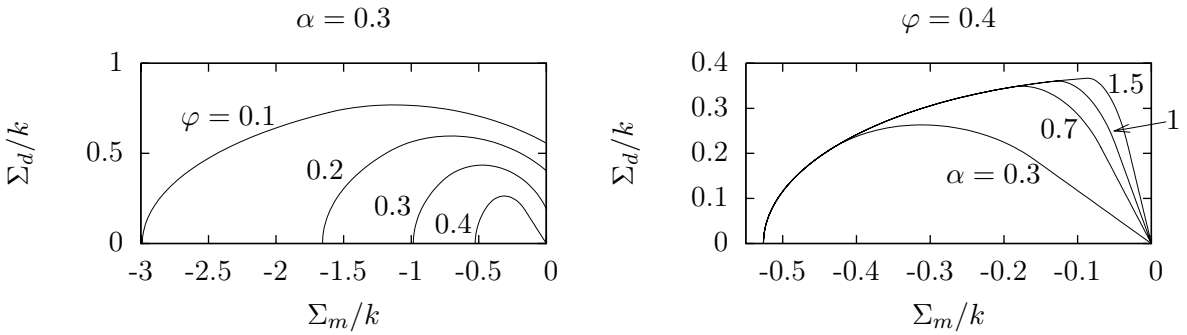


FIG. 12.20 – Influence des paramètres φ et α sur le critère macroscopique obtenu pour des grains de von Mises et des joints de Mohr-Coulomb sans cohésion

Comme perspective d'application de ce modèle, on peut citer les grès. En effet, la morphologie de ces matériaux se présente comme un assemblage de grains et de pores, les grains étant collés les uns aux autres par un « ciment ». On dispose [131] de données expérimentales sur trois grès, en termes de porosité (voir table 12.2) et de points appartenant au critère de rupture dans le plan (Σ_m, Σ_d) (points sur la figure 12.21). Le modèle de critère de rupture développé ici ne présente que trois paramètres : la porosité φ, la résistance k des grains (critère de von Mises) et l'angle de frottement α des joints (critère de Mohr-Coulomb sans cohésion). La porosité est déjà connue. Les paramètres k et α sont ajustés de façon à prédire correctement les contraintes déviatoriques équivalentes maximales (le critère établi par homogénéisation non linéaire donnant des approximations satisfaisantes des charges limites déviatoriques, du moins dans le cas d'une morphologie de type cavités dans une matrice [12]). Les résultats de cet ajustement sont présentés dans le tableau 12.2, et les critères modèles correspondants sont superposés aux données expérimentales sur la figure 12.21. On note deux limites au modèle actuel :

– La résistance à la compression isotrope est largement surestimée en valeur absolue. On peut invoquer le fait (comme discuté en conclusion ci-après) que les critères de rupture obtenus par homogénéisation non linéaire, certes pour une morphologie de type cavités dans une

matrice, peinent à décrire correctement les résistances isotropes.

– Les porosités des trois grès étant inférieures à 1/3, la partie du critère correspondant à une rupture uniquement intergranulaire est un segment de droite à $\Sigma_m = 0$. Or les résultats expérimentaux suggèrent plutôt un segment de droite de pente finie, cette pente étant d'ailleurs quasiment la même sur les trois grès. Aux faibles confinements, le mode de rupture observé sur les grès est fragile. En considérant un mode de rupture exclusivement intergranulaire et fragile, on obtient bien un critère macroscopique de pente finie [78, 76] aux porosités faibles ($\varphi < 1/3$). En établissant un critère mixte ductile-fragile, [70] parvient à reproduire correctement tous les points expérimentaux (sauf les résistances à la compression isotrope).

type de grès	porosité mesurée	k ajusté (MPa)	α ajusté
Adamsviller	0.22	190	0.4
Berea	0.21	335	0.4
Rothbach	0.19	205	0.4

TAB. 12.2 – Grès étudiés dans [131] et porosités mesurées

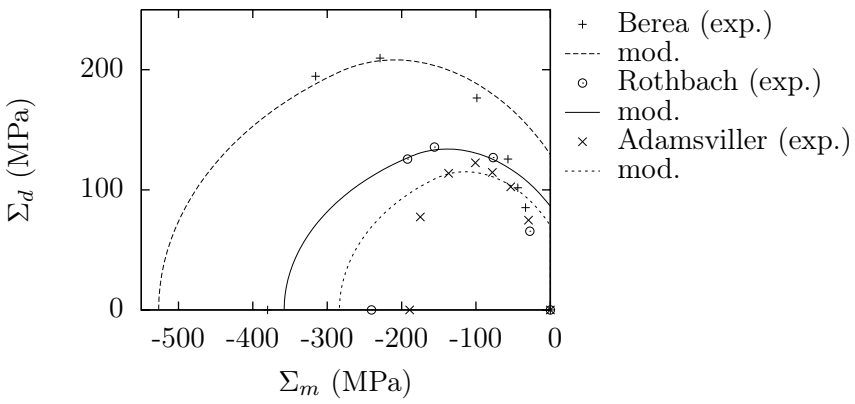


FIG. 12.21 – Comparaison, sur trois grès, du critère de rupture modélisé avec des points expérimentaux issus de [131]

12.4 Conclusion

Pour terminer, il est important de rappeler que les critères de rupture macroscopique qui viennent d'être obtenus par homogénéisation non linéaire ne sont que des estimations. Hormis le fait que les modules élastiques effectifs ont été estimés par schémas d'homogénéisation, l'utilisation de déformations effectives uniformes dans tout le solide et de sauts de déplacement effectifs uniformes sur toutes les interfaces mène à des critères macroscopiques approchés. En effet, on ne capture pas les hétérogénéités du champ de déformation et du champ de saut de déplacement.

Dans le cas d'une morphologie de type milieu poreux avec matrice solide et cavités sphériques, il est possible de quantifier les écarts réalisés par un modèle d'homogénéisation non linéaire à déformation effective uniforme sur les contraintes limites sphériques. En effet, il est possible de réaliser, en calcul à la rupture, le calcul exact des charges limites sur une sphère creuse. Le modèle par homogénéisation non linéaire donne d'excellentes approximations des charges limites

isotropes pour des porosités $\varphi \geq 0.4$ [12]. Par contre, aux porosités faibles, on observe un écart assez significatif entre les estimations et les charges limites sur sphère creuse, pour un solide de von Mises. Pour un solide de Drucker-Prager et en compression isotrope, c'est pire : la résistance estimée devient infinie en dessous d'une certaine porosité critique non nulle, alors que la résolution en calcul à la rupture sur une sphère creuse donne une résistance en compression isotrope finie quelle que soit la porosité, sous réserve que $\alpha < \sqrt{3/2}$ [7]. Ces mésaventures proviennent évidemment du fait qu'aux faibles porosités, de fortes concentrations de déformation apparaissent autour des pores, ce qui mène à des hétérogénéités qu'une déformation effective uniforme n'arrive plus à capturer (voir [30]). Heureusement, il est possible d'améliorer le modèle en partitionnant le solide en domaines concentriques autour des pores, chaque domaine recevant une déformation effective [35]. Asymptotiquement, pour un nombre infini de couches concentriques, les charges limites calculées sur la sphère creuse sont retrouvées.

Ce chapitre est consacré à une morphologie non pas de type matrice-cavités, mais de type polycristalline avec des joints imparfaits entre les grains. Pour quantifier la pertinence des critères macroscopiques obtenus, il n'est plus possible, à notre connaissance, de recourir à une géométrie de référence permettant de déterminer les charges limites sur l'axe des contraintes sphériques de façon exacte (comme c'est possible avec la sphère creuse pour les morphologies de type matrice-cavités). Ainsi, le problème nous semble rester ouvert.

Enfin, notons qu'il est possible d'étendre les estimations développées sur poreux sec (pression nulle dans les pores) au cas de poreux partiellement saturés (voir [34], consacré à une morphologie de type cavités dans une matrice, qui serait à adapter à la situation d'un polycristal).

Chapitre 13

Effets différés (fluage) par mécanisme d'interface

Ce chapitre est consacré au fluage de polycristaux poreux comportant des joints de grains non parfaits. On envisage d'abord le cas de grains élastiques pouvant glisser de façon visqueuse les uns sur les autres. Ensuite, on s'intéresse à des grains visqueux et des joints élastiques. Les perspectives d'application concernent le plâtre pris, dont on reproduirait alors le mécanisme de fluage couramment admis : le glissement relatif visqueux des cristaux de gypse les uns sur les autres. Il s'agit d'une application qualitative, puisque seul le cas de particules de forme sphérique est traité ici.

Sommaire

13.1 Préliminaire en élasticité **206**
13.2 Grains élastiques et joints visqueux **206**
13.3 Grains visqueux et joints élastiques **208**

On s'intéresse au fluage de polycristaux poreux. La morphologie est identique à celle adoptée au chapitre précédent : des grains en contact selon des joints. On rappelle d'abord brièvement le schéma d'homogénéisation utilisé ici (section 13.1), qui est identique à l'un de ceux introduits au chapitre précédent. On considère ensuite le cas de grains élastiques et de joints visqueux (section 13.2). Il s'agit d'un première étape vers un modèle de fluage de plâtre pris, puisque le mécanisme local responsable du fluage de ce matériau est un glissement visqueux des cristaux les uns sur les autres [80]. Il ne s'agit que d'une première étape, puisqu'ici on considère des particules de forme sphérique, alors que les cristaux de gypse sont allongés. On peut également citer une seconde perspective d'application : le fluage des C-S-H d'une pâte de ciment, si on considère que le mécanisme local de fluage est un glissement des particules solides les unes sur les autres. À nouveau, il ne s'agirait que d'une première approche, puisque les particules introduites dans le modèle de pâte de ciment sont aplaties et non sphériques. On considère enfin le cas de grains visqueux en contact selon des joints élastiques (section 13.3).

13.1 Préliminaire en élasticité

Comme au chapitre 10, on a recours à la transformation de Laplace-Carson pour réutiliser dans un cadre viscoélastique tous les développements de l'homogénéisation des milieux aléatoires en élasticité. La première étape est donc d'établir le comportement homogénéisé d'un assemblage de grains élastiques en contact selon des interfaces élastiques également. Les grains, de rayon caractéristique r_0, ont un comportement isotrope incompressible caractérisé par le module de cisaillement μ_s. Les joints ont un comportement isotrope transverse caractérisé par les modules d'interface normal $K_n \to \infty$ et tangentiel K_t. La porosité est notée φ. Comme au chapitre 12, on a recours à un schéma auto-cohérent pour estimer les modules élastiques effectifs (voir plus particulièrement la section 12.6 et la figure 12.2.4). Les modules auto-cohérents sont notés k^{AC} et μ^{AC}. On rappelle les résultats (12.79) et (12.80) obtenus précédemment :

$$k^{AC} = \frac{4(1-\varphi)}{3\varphi}\mu^{AC} \tag{13.1}$$

$$8(3-\varphi)\left(5+2\frac{K_t r_0}{\mu_s}\right)\left(\frac{\mu^{AC}}{\mu_s}\right)^2 + \left[(9+77\varphi)\frac{K_t r_0}{\mu_s} + 57(3\varphi-1)\right]\frac{\mu^{AC}}{\mu_s} + 57(2\varphi-1)\frac{K_t r_0}{\mu_s} = 0 \tag{13.2}$$

Ces résultats sont réutilisés dans les deux sections suivantes.

13.2 Grains élastiques et joints visqueux

On considère des particules élastiques (module de cisaillement μ_s) et des interfaces purement visqueuses (viscosité K_t^v). Ainsi, dans l'espace de Carson, on écrit : ${\mu_s}^\star(p) = \mu_s$ et ${K_t}^\star(p) = K_t^v p$. On réutilise alors les équations (13.1) et (13.2) dans l'espace de Carson, afin de déterminer les modules effectifs $k^{AC\star}(p)$ et $\mu^{AC\star}(p)$.

On envisage une expérience de fluage macroscopique en cisaillement. On impose donc la contrainte macroscopique sous la forme $\boldsymbol{\Sigma}(t) = \Sigma_0^{dev}\mathrm{H}(t)\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$, où $\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$ est un tenseur déviatorique. Dans l'espace de Carson, la contrainte macroscopique s'écrit $\boldsymbol{\Sigma}^\star(p) = \Sigma_0^{dev}\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$. La déformation macroscopique s'écrit alors dans l'espace de Carson :

$$\boldsymbol{E}^\star(p) = \frac{1}{2\mu^{AC\star}(p)}\boldsymbol{\Sigma}^\star(p) \tag{13.3}$$

Dans le domaine temporel, la déformation macroscopique s'écrit donc $\boldsymbol{E}(t) = E^{dev}(t)\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$ avec la transformée de Carson de $E^{dev}(t)$:

$$E^{dev\star}(p) = \frac{\Sigma_0^{dev}}{2\mu^{AC\star}(p)} \tag{13.4}$$

On peut introduire le temps caractéristique $\tau_1 = K_t^v r_0/\mu_s$ et normaliser la déformation macroscopique par Σ_0^{dev}/μ_s. Il reste à inverser numériquement la transformée de Laplace-Carson, pour tracer les fonctions de fluage macroscopique en cisaillement sur la figure 13.1, pour différentes porosités. Notons qu'une fois la déformation macroscopique et le temps normalisés, la forme de la courbe de fluage ne dépend plus que de la porosité.

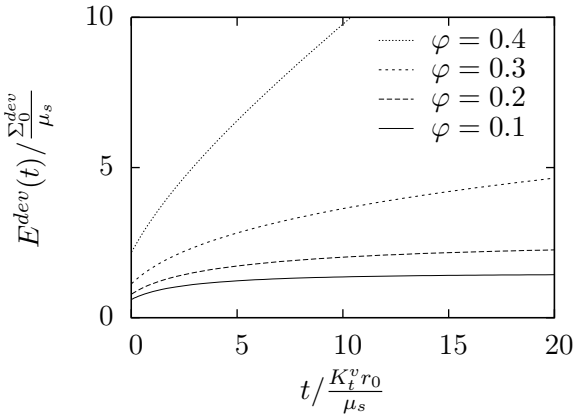


FIG. 13.1 – Fonction de fluage en cisaillement, pour différentes porosités

En faisant appel au même type de raisonnement que celui exposé en sections 10.2.1, 10.2.2, 10.3.1 et 10.3.2, on peut déterminer l'allure de la déformation de fluage déviatorique à court et à long terme selon la valeur de la porosité (figure 13.2) :

- à court terme, on observe une déformation élastique initiale non nulle quelle que soit la porosité ;
- à long terme, l'allure de la déformation de fluage asymptotique dépend de la porosité :
  - stabilisation asymptotique de la déformation pour un assemblage dense ($\varphi < 1/3$) ;
  - stabilisation asymptotique du taux de déformation pour un assemblage lâche ($\varphi > 1/3$).

Ces résultats qualitatifs sont bien confirmés par les simulations numériques reportées sur la figure 13.1.

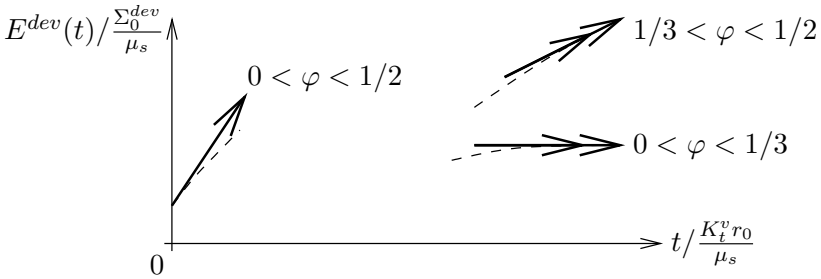


FIG. 13.2 – Allure de la déformation de fluage déviatorique à court et long terme

13.3 Grains visqueux et joints élastiques

On considère à présent des particules visqueuses (viscosité de cisaillement μ_s^v) et des interfaces élastiques (module tangentiel K_t). On fait, ici aussi, appel à la transformée de Laplace-Carson, pour écrire : ${\mu_s}^\star(p) = \mu_s^v p$ et ${K_t}^\star(p) = K_t$.

Comme dans le cas précédent, on s'intéresse à une expérience de fluage macroscopique en cisaillement. La contrainte macroscopique est à nouveau de la forme $\boldsymbol{\Sigma}(t) = \Sigma_0^{dev}\mathrm{H}(t)\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$. La déformation macroscopique s'écrit alors $\boldsymbol{E}(t) = E^{dev}(t)\boldsymbol{T}^{\mathrm{dev}}$ avec la transformée de Carson de $E^{dev}(t)$:

$$E^{dev\star}(p) = \frac{\Sigma_0^{dev}}{2\mu^{AC\star}(p)} \tag{13.5}$$

Par rapport au cas précédent, l'expression de $\mu^{AC\star}(p)$ est différente dans la mesure où le comportement local caractérisé par ${\mu_s}^\star(p)$ et ${K_t}^\star(p)$ n'est plus le même. On peut introduire le temps caractéristique $\tau_2 = \mu_s^v/(K_t r_0)$ et normaliser la déformation macroscopique par $\Sigma_0^{dev}/(K_t r_0)$. La figure 13.3 représente les fonctions de fluage en cisaillement obtenues pour différentes valeurs de la porosité. Une fois le temps et la déformation macroscopique normalisés, la courbe de fluage ne dépend plus que de la porosité.

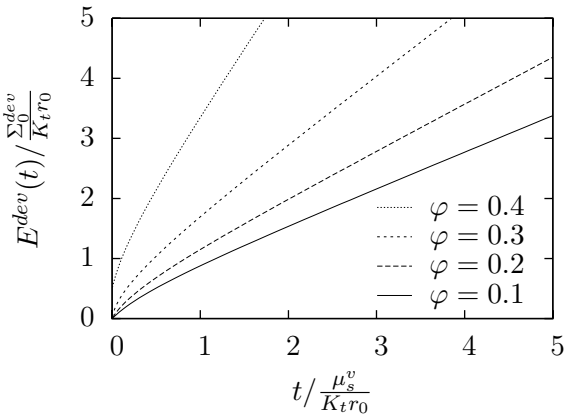


FIG. 13.3 – Fonction de fluage en cisaillement, pour différentes porosités

En faisant à nouveau appel au même type de raisonnement que celui exposé en sections 10.2.1, 10.2.2, 10.3.1 et 10.3.2, on peut déterminer l'allure de la déformation de fluage déviatorique selon la valeur de la porosité (figure 13.4) :

- à court terme, la valeur de la déformation élastique initiale dépend de la porosité :
  - pas de déformation élastique initiale pour un assemblage dense ($\varphi < 1/3$) ;
  - déformation élastique initiale non nulle pour un assemblage lâche ($\varphi > 1/3$) ;
- à long terme, on observe un taux de déformation asymptotique.

On met ainsi en évidence un seuil sur la porosité affectant l'allure de la courbe de fluage macroscopique, comme déjà constaté au chapitre 10 pour un assemblage de particules feuilletées.

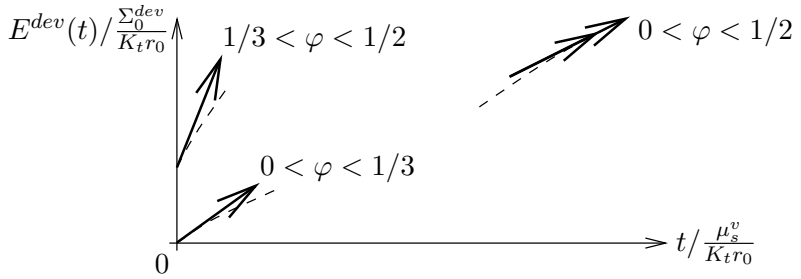


FIG. 13.4 – Allure de la déformation de fluage déviatorique à court et long terme

Cinquième partie

Annexes

Annexe A

Notation de Voigt pour les tenseurs symétriques

On rappelle la notation de Voigt, pratique pour représenter les tenseurs d'ordre 2 symétriques et d'ordre 4 présentant les symétries mineures.

On considère un tenseur $\boldsymbol{T}$ symétrique d'ordre 2, de composantes T_{ij} dans la base $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$. La symétrie se traduit par $T_{ji} = T_{ij}$. En notation de Voigt, un tel tenseur est représenté dans cette même base $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ par le vecteur à 6 composantes suivant :

$$\boldsymbol{T} = \begin{bmatrix} T_{11} \\ T_{22} \\ T_{33} \\ \sqrt{2}\,T_{23} \\ \sqrt{2}\,T_{13} \\ \sqrt{2}\,T_{12} \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1,\underline{e}_2,\underline{e}_3)} \tag{A.1}$$

On considère un tenseur $\mathbb{T}$ d'ordre 4 présentant les symétries mineures, de composantes T_{ijkl} dans la base $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$. Les symétries mineures se traduisent par $T_{jikl} = T_{ijkl} = T_{ijlk}$. En notation de Voigt, un tel tenseur est représenté dans cette même base $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ par la matrice 6*6 suivante :

$$\mathbb{T} = \begin{bmatrix} T_{1111} & T_{1122} & T_{1133} & \sqrt{2}\,T_{1123} & \sqrt{2}\,T_{1113} & \sqrt{2}\,T_{1112} \\ T_{2211} & T_{2222} & T_{2233} & \sqrt{2}\,T_{2223} & \sqrt{2}\,T_{2213} & \sqrt{2}\,T_{2212} \\ T_{3311} & T_{3322} & T_{3333} & \sqrt{2}\,T_{3323} & \sqrt{2}\,T_{3313} & \sqrt{2}\,T_{3312} \\ \sqrt{2}\,T_{2311} & \sqrt{2}\,T_{2322} & \sqrt{2}\,T_{2333} & 2\,T_{2323} & 2\,T_{2313} & 2\,T_{2312} \\ \sqrt{2}\,T_{1311} & \sqrt{2}\,T_{1322} & \sqrt{2}\,T_{1333} & 2\,T_{1323} & 2\,T_{1313} & 2\,T_{1312} \\ \sqrt{2}\,T_{1211} & \sqrt{2}\,T_{1222} & \sqrt{2}\,T_{1233} & 2\,T_{1223} & 2\,T_{1213} & 2\,T_{1212} \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1,\underline{e}_2,\underline{e}_3)} \tag{A.2}$$

Annexe B

Schéma auto-cohérent avec des particules élastiques isotropes transverses

Ce chapitre est consacré au développement d'un schéma auto-cohérent faisant appel à un problème auxiliaire d'élasticité mettant en jeu des inhomogénéités solides isotropes transverses. Ces inhomogénéités sont de forme sphérique, comme celle représentant l'espace poreux. On considère une répartition isotrope de l'axe d'isotropie transverse des particules solides. Ce travail est utile pour estimer le comportement en fluage d'un assemblage de particules feuilletées lorsque le mécanisme microscopique de fluage est un glissement feuillet sur feuillet.

Sommaire

B.1 Cas général : comportement isotrope transverse quelconque **216**
B.2 Cas particulier : feuillets rigides **218**
B.2.1 Principe de détermination des modules effectifs 218
B.2.2 Développements limités 219
B.3 Cas particulier : souplesse isotrope et souplesse de glissement **220**
B.3.1 Principe de détermination des modules effectifs 220
B.3.2 Développements limités 221

On considère un polycristal poreux (de porosité φ) dont les grains solides sont feuilletés, c'est-à-dire constitués de feuillets plans parallèles, empilés les uns sur les autres. On s'intéresse au comportement élastique effectif d'un tel milieu poreux. La modélisation micromécanique du comportement des polycristaux à grains feuilletés, dans le contexte de l'homogénéisation des milieux aléatoires, a été initiée dans [31]. À l'échelle du polycristal, le comportement induit par les feuillets empilés est modélisé en affectant à chaque grain solide un comportement élastique isotrope transverse. On suppose que le comportement des grains solides ne diffère que par leur orientation.

Dans un premier temps, on considère que les grains ont un comportement isotrope transverse quelconque (section B.1). On établit alors l'équation tensorielle dont les estimations des modules élastiques effectifs sont solution. Ensuite, on envisage deux cas particuliers :

- le cas de feuillets rigides, si bien que les particules ne peuvent se déformer que selon deux mécanismes : le glissement simple feuillet sur feuillet et l'extension simple dans la direction normale aux feuillets (section B.2) ;
- le cas où la souplesse des particules peut être décomposée en la somme d'une souplesse isotrope et d'une souplesse n'autorisant que le glissement feuillet sur feuillet (section B.3).

Ces travaux sont présentés en annexe afin d'éviter d'alourdir le texte principal.

B.1 Cas général : comportement isotrope transverse quelconque

Dans cette première section, les grains ont un comportement élastique isotrope transverse absolument quelconque. Le comportement des grains ne diffère que par leur orientation. Ainsi, dans une base orthonormée dont le troisième vecteur est normal au plan des feuillets, le tenseur de rigidité de chaque grain présente toujours les mêmes composantes. En notation de Voigt (voir annexe A), ce tenseur, isotrope transverse, s'écrit, le vecteur normal au plan des feuillets étant $\underline{e}_r$:

$$\mathbb{C}_s(\theta,\phi) = \begin{bmatrix} c_{1111} & c_{1122} & c_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ c_{1122} & c_{1111} & c_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ c_{1133} & c_{1133} & c_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2c_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2c_{2323} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{1111}-c_{1122} \end{bmatrix}_{(\underline{e}_\theta,\underline{e}_\phi,\underline{e}_r)} \tag{B.1}$$

où $(\underline{e}_r, \underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi)$ forme la base sphérique (figure 2.8). La rigidité d'un grain ne dépend que de son orientation, décrite par les deux angles d'Euler (θ, ϕ), et des cinq composantes c_{1111}, c_{1122}, c_{1133}, c_{3333} et c_{2323}.

La morphologie étant aléatoire et de nature polycristalline, on propose de mettre en œuvre un schéma auto-cohérent en vue d'estimer la rigidité effective du milieu poreux. Pour des raisons de simplicité de l'exposé, on représente les différents grains par des formes sphériques (figure B.1), sachant que le calcul est possible (mais beaucoup plus lourd) avec des formes ellipsoïdales de révolution dont l'axe de révolution coïncide avec la normale aux feuillets. La distribution de l'orientation du vecteur normal aux feuillets est supposée uniforme, ce qui conduit à un comportement effectif isotrope. L'estimation auto-cohérente du tenseur de rigidité effectif est ainsi notée $\mathbb{C}^{AC} = 3k^{AC}\mathbb{J} + 2\mu^{AC}\mathbb{K}$, en faisant apparaître le module de compression isotrope k^{AC} et le module de cisaillement μ^{AC}.

La méthode d'homogénéisation requiert, pour des conditions aux limites en déformation homogène $\boldsymbol{E}$ au contour du VER, des estimations de la déformation moyenne dans l'espace poreux et dans le domaine solide, et de la contrainte moyenne dans le domaine solide. On désigne respectivement l'espace poreux et le domaine solide par les indices p et s. La porosité est notée φ.

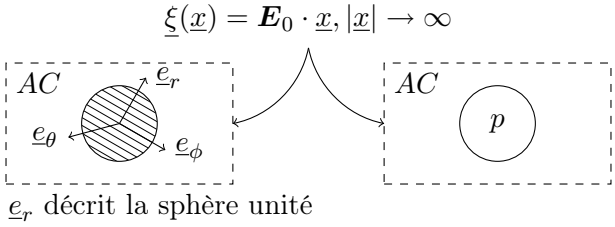


FIG. B.1 – Problèmes auxiliaires à résoudre pour mettre en œuvre le schéma auto-cohérent envisagé

La déformation moyenne dans l'espace poreux est estimée par la déformation uniforme qui s'établit dans une cavité sphérique plongée dans un milieu de référence, infini, dont la rigidité est la rigidité homogénéisée recherchée, et soumis à une déformation homogène $\boldsymbol{E}_0$ à l'infini (qui sera reliée à la déformation $\boldsymbol{E}$ au contour du VER par la règle de moyenne (B.7)) :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1} : \boldsymbol{E}_0 \tag{B.2}$$

avec $\mathbb{S}_{sph}^{AC}$ le tenseur d'Eshelby [36] d'une sphère dans un milieu dont la rigidité est $\mathbb{C}^{AC}$. Le milieu de référence étant isotrope, ce tenseur d'Eshelby prend une expression très simple :

$$\mathbb{S}_{sph}^{AC} = \alpha^{AC}\mathbb{J} + \beta^{AC}\mathbb{K} \quad \text{avec} \quad \alpha^{AC} = \frac{3k^{AC}}{3k^{AC} + 4\mu^{AC}} \quad \text{et} \quad \beta^{AC} = \frac{6}{5}\frac{k^{AC} + 2\mu^{AC}}{3k^{AC} + 4\mu^{AC}} \tag{B.3}$$

La déformation moyenne dans la famille des grains dont la normale aux feuillets est $\underline{e}_r$ (donc paramétrée par θ, ϕ) est estimée par la déformation uniforme qui s'établit dans une sphère constituée du même matériau que ces grains, plongée dans le milieu effectif infini et soumis à la déformation homogène $\boldsymbol{E}_0$ à l'infini [36] :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_g^{\underline{e}_r}(\theta, \phi) = \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s(\theta, \phi) - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} : \boldsymbol{E}_0 \tag{B.4}$$

avec $\mathbb{P}_{sph}^{AC}$ le tenseur de Hill d'une sphère dans un milieu dont la rigidité est $\mathbb{C}^{AC}$; il est relié au tenseur d'Eshelby correspondant par $\mathbb{S}_{sph}^{AC} = \mathbb{P}_{sph}^{AC} : \mathbb{C}^{AC}$.

La déformation moyenne dans la totalité du domaine solide est alors obtenue par moyenne angulaire de la déformation estimée pour la famille de grains dont la normale aux feuillets est $\underline{e}_r$. Pour déterminer cette moyenne angulaire, $\underline{e}_r$ décrit toute la sphère unité, avec une distribution uniforme :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_g^{\underline{e}_r}(\theta, \phi) \frac{\sin\theta}{4\pi} \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \\ &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s(\theta, \phi) - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{4\pi} \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi : \boldsymbol{E}_0 \end{aligned} \tag{B.5}$$

La contrainte moyenne dans la totalité du domaine solide est estimée de la même manière à partir de (B.4) :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_s = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{C}_s(\theta, \phi) : \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s(\theta, \phi) - \mathbb{C}^{AC})\right]^{-1} \frac{\sin\theta}{4\pi} \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi : \boldsymbol{E}_0 \tag{B.6}$$

La déformation homogène au contour du VER peut alors être reliée à la déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ en exploitant (B.2), (B.5) et la règle de moyenne :

$$\boldsymbol{E} = \varphi \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p + (1 - \varphi) \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_s \tag{B.7}$$

La contrainte macroscopique est $\boldsymbol{\Sigma} = (1-\varphi)\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_s$. Le tenseur de rigidité effectif est alors défini comme le tenseur reliant déformation et contrainte macroscopiques : $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^{AC} : \boldsymbol{E}$. Compte tenu de (B.2), (B.5) et (B.6), ce dernier s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathbb{C}^{AC} &= (1-\varphi)\left[\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\mathbb{C}_s(\theta,\phi) : \left[\mathbb{I}+\mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s(\theta,\phi)-\mathbb{C}^{AC})\right]^{-1}\frac{\sin\theta}{4\pi}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\right] : \\ &\left[\varphi(\mathbb{I}-\mathbb{S}_{sph}^{AC})^{-1}+(1-\varphi)\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\left[\mathbb{I}+\mathbb{P}_{sph}^{AC} : (\mathbb{C}_s(\theta,\phi)-\mathbb{C}^{AC})\right]^{-1}\frac{\sin\theta}{4\pi}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\right]^{-1}\end{aligned} \tag{B.8}$$

Cette équation tensorielle, projetée sur $\mathbb{J}$ et $\mathbb{K}$, se ramène à deux équations scalaires non linéaires dont k^{AC} et μ^{AC} sont solutions.

B.2 Cas particulier : feuillets rigides

À présent, on considère des feuillets rigides, si bien que seuls deux mécanismes de déformation sont possibles pour les particules solides ($\underline{e}_3$ étant la normale aux feuillets) :
- le glissement simple feuillet sur feuillet : $\varepsilon_{13} = \sigma_{13}/2/c_{2323}$ et $\varepsilon_{23} = \sigma_{23}/2/c_{2323}$;
- l'extension simple normale aux feuillets : $\varepsilon_{33} = \sigma_{33}/c_{3333}$.

B.2.1 Principe de détermination des modules effectifs

Ce comportement particulier peut être obtenu à partir du comportement général traité en section B.1 en prenant la limite $c_{1111} \to \infty$. En effet, sur la souplesse $\mathbb{S}_s = {\mathbb{C}_s}^{-1}$ des particules, cette limite donne :

$$\lim_{c_{1111}\to\infty}\mathbb{S}_s(\theta,\phi) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/c_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2/c_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2/c_{2323} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{(\underline{e}_\theta,\underline{e}_\phi,\underline{e}_r)} \tag{B.9}$$

ce qui correspond exactement au comportement à traiter ici. Ainsi, on détermine la limite des modules effectifs k^{AC} et μ^{AC} établis en section B.1 lorsque $c_{1111} \to \infty$. Ces derniers, normalisés par c_{3333}, apparaissent comme des fonctions de φ et $\rho = c_{2323}/c_{3333}$ (conformément à l'analyse dimensionnelle) :

$$k^{AC} = c_{3333}f_k(\varphi,\rho) \quad \text{et} \quad \mu^{AC} = c_{3333}f_\mu(\varphi,\rho) \tag{B.10}$$

On montre que $f_k(\varphi,\rho) = f_\mu(\varphi,\rho) = 0$ pour $\varphi \geq 1/2$. On ne peut expliciter une expression analytique simple des modules effectifs pour $\varphi < 1/2$. En effet, le module de Young adimensionné effectif $E_a^{AC} = E^{AC}/c_{3333}$ s'exprime en fonction du coefficient de Poisson effectif ν^{AC} :

$$E_a^{AC} = \frac{(\nu^{AC}+1)(5\nu^{AC}-4)[(3\varphi-4)\nu^{AC}+2-3\varphi]}{(1-\nu^{AC})[5(\varphi-2)\nu^{AC}-7\varphi+2]} \tag{B.11}$$

et le coefficient de Poisson effectif est lui-même solution de l'équation du troisième degré suivante :

$$\begin{aligned} & 25[4(9\varphi-2)(\varphi-2)\rho-(5\varphi+2)(3\varphi-4)]{\nu^{AC}}^3 \\ + \; & 5[4(-141\varphi^2+212\varphi-52)\rho+3(77\varphi^2-60\varphi-28)]{\nu^{AC}}^2 \\ + \; & [4(711\varphi^2-724\varphi+188)\rho+3(-379\varphi^2+238\varphi+72)]\nu^{AC} \\ + \; & 4(2-7\varphi)(33\varphi-14)\rho+7(17\varphi+2)(3\varphi-2) = 0 \end{aligned} \tag{B.12}$$

On peut néanmoins déterminer des développements limités lorsque $\rho \to 0$ ou $\rho \to \infty$. Ceux-ci sont mis à profit en sections 10.2.1 et 10.2.2 pour appréhender la déformation de fluage des hydrates d'une pâte de ciment à court terme et à long terme.

B.2.2 Développements limités

Lorsque $\rho \to 0$ et pour $0 < \varphi < 1/4$, on a :

$$f_k(\varphi, \rho) = \mathcal{K}_0^0(\varphi) + \mathcal{O}(\rho) \tag{B.13}$$

$$f_\mu(\varphi, \rho) = \mathcal{M}_0^0(\varphi) + \mathcal{O}(\rho) \tag{B.14}$$

$$\mathcal{K}_0^0(\varphi) = \frac{(1-4\varphi)(7\varphi+2)(\varphi+2)}{12\varphi(\varphi+1)(2-3\varphi)} \tag{B.15}$$

$$\mathcal{M}_0^0(\varphi) = \frac{(1-4\varphi)(\varphi+2)}{16\varphi(\varphi+1)} \tag{B.16}$$

On remarque que les modules homogénéisés s'annulent en $\varphi \to 1/4^-$.

Lorsque $\rho \to 0$ et pour $1/4 < \varphi < 1/2$, on a :

$$f_k(\varphi, \rho) = \mathcal{K}_1^0(\varphi)\rho + \mathcal{O}\left(\rho^2\right) \tag{B.17}$$

$$f_\mu(\varphi, \rho) = \mathcal{M}_1^0(\varphi)\rho + \mathcal{O}\left(\rho^2\right) \tag{B.18}$$

$$\mathcal{K}_1^0(\varphi) = \frac{4(\varphi+2)(1-2\varphi)(1-\varphi)}{\varphi(3-\varphi)(4\varphi-1)} \tag{B.19}$$

$$\mathcal{M}_1^0(\varphi) = \frac{3(\varphi+2)(1-2\varphi)}{(3-\varphi)(4\varphi-1)} \tag{B.20}$$

Les modules homogénéisés sont, au premier ordre, proportionnels à ρ, ce qui est conforme avec le fait qu'ils s'annulent en $\varphi \to 1/4^-$.

Lorsque $\rho \to \infty$ et pour $0 < \varphi < 2/5$, on a :

$$f_k(\varphi, \rho) = \mathcal{K}_1^\infty(\varphi)\rho + \mathcal{O}(1) \tag{B.21}$$

$$f_\mu(\varphi, \rho) = \mathcal{M}_1^\infty(\varphi)\rho + \mathcal{O}(1) \tag{B.22}$$

$$\mathcal{K}_1^\infty(\varphi) = \frac{4(1-\varphi)(\varphi+2)(2-5\varphi)}{9\varphi(2+3\varphi)} \tag{B.23}$$

$$\mathcal{M}_1^\infty(\varphi) = \frac{(2+\varphi)(2-5\varphi)}{6\varphi} \tag{B.24}$$

On note que les modules homogénéisés tendent vers l'infini, puisqu'ils apparaissent au premier ordre comme proportionnels à ρ.

Lorsque $\rho \to \infty$ et pour $2/5 < \varphi < 1/2$, on a :

$$f_k(\varphi, \rho) = \mathcal{K}_0^\infty(\varphi) + \mathcal{K}_{-1}^\infty(\varphi)\rho^{-1} + \mathcal{O}\left(\rho^{-2}\right) \tag{B.25}$$

$$f_\mu(\varphi,\rho) = \mathcal{M}_0^\infty(\varphi) + \mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi)\rho^{-1} + \mathcal{O}\left(\rho^{-2}\right) \tag{B.26}$$

$$\mathcal{K}_0^\infty(\varphi) = \frac{3(1-2\varphi)(\varphi+2)(13\varphi-4)}{2(3\varphi+1)(6-7\varphi)(5\varphi-2)} \tag{B.27}$$

$$\mathcal{K}_{-1}^\infty(\varphi) = -\frac{45\varphi(1-\varphi)(1-2\varphi)(\varphi+2)(4176\varphi^4-5347\varphi^3+3404\varphi^2-1288\varphi+216)}{16(1+3\varphi)^3(5\varphi-2)^3(6-7\varphi)^2} \tag{B.28}$$

$$\mathcal{M}_0^\infty(\varphi) = \frac{9(\varphi+2)(1-2\varphi)}{8(3\varphi+1)(5\varphi-2)} \tag{B.29}$$

$$\mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi) = -\frac{135\varphi(1-\varphi)(1-2\varphi)(\varphi+2)(-36\varphi^2+31\varphi-4)}{64(1+3\varphi)^3(5\varphi-2)^3} \tag{B.30}$$

On remarque que $\mathcal{K}_0^\infty(\varphi)$ et $\mathcal{M}_0^\infty(\varphi) \to \infty$ lorsque $\varphi \to 2/5^+$, ce qui est conforme avec le fait que les modules sont infinis pour $0 < \varphi < 2/5$.

B.3 Cas particulier : souplesse isotrope augmentée d'une souplesse de glissement feuillet sur feuillet

À présent, on confère aux particules solides une souplesse élastique qui est la somme :
- d'une souplesse isotrope (modules de compression k et de cisaillement μ) ;
- d'une souplesse n'autorisant que le glissement simple feuillet sur feuillet, caractérisée par le module c_g : $\varepsilon_{13} = \sigma_{13}/2/c_g$ et $\varepsilon_{23} = \sigma_{23}/2/c_g$ ($\underline{e}_3$ étant la normale aux feuillets).

Ainsi, on écrit :

$$\mathbb{S}_s(\theta,\phi) = \mathbb{S}_{iso} + \mathbb{S}_g(\theta,\phi) \tag{B.31}$$

avec :

$$\mathbb{S}_{iso} = \frac{1}{3k}\mathbb{J} + \frac{1}{2\mu}\mathbb{K} \tag{B.32}$$

et, en notation de Voigt dans la base $(\underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi, \underline{e}_r)$:

$$\mathbb{S}_g(\theta,\phi) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/(2c_g) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/(2c_g) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{(\underline{e}_\theta,\underline{e}_\phi,\underline{e}_r)} \tag{B.33}$$

B.3.1 Principe de détermination des modules effectifs

La rigidité de la particule étant isotrope transverse, on reprend à nouveau les résultats établis en section B.1, avec :

$$c_{1111} = k + \frac{4\mu}{3}\ , \quad c_{1122} = k - \frac{2\mu}{3}\ , \quad c_{1133} = k - \frac{2\mu}{3}\ , \quad c_{3333} = k + \frac{4\mu}{3} \quad \text{et} \quad c_{2323} = \frac{\mu c_g}{\mu + c_g} \tag{B.34}$$

Les modules effectifs, normalisés par k, apparaissent comme des fonctions de la porosité φ, du coefficient de Poisson $\nu = (3k-2\mu)/(6k+2\mu)$ et du rapport $\chi = c_g/\mu$:

$$k^{AC} = kg_k(\varphi,\nu,\chi) \quad \text{et} \quad \mu^{AC} = kg_\mu(\varphi,\nu,\chi) \tag{B.35}$$

On note que $g_k(\varphi,\nu,\chi) = g_\mu(\varphi,\nu,\chi) = 0$ pour $\varphi \geq 1/2$. Pour $\varphi < 1/2$, on ne peut fournir une expression analytique des modules homogénéisés. L'équation tensorielle (B.8) mène, d'une part, à l'expression de g_k en fonction de g_μ :

$$g_k = \frac{4(1-\varphi)g_\mu}{4g_\mu + 3\varphi} \tag{B.36}$$

en omettant la dépendance en (φ,ν,χ) de g_k et g_μ ; et d'autre part à une équation polynomiale du quatrième degré en g_μ :

$$\begin{aligned}
& 256(1+\nu)^2(\chi+1)g_\mu^4 \\
+\ & 192(1+\nu)[((1-11\varphi)\nu + 4(1+\varphi))\chi + (3-7\varphi)\nu + 3 + 2\varphi]g_\mu^3 \\
+\ & 36[((21\varphi^2 + 122\varphi - 91)\nu^2 + 4(3\varphi^2 - 77\varphi + 28)\nu - 9\varphi^2 + 110\varphi - 13)\chi \\
& +(1+\nu)((13\varphi^2 - 74\varphi + 17)\nu - 5\varphi^2 + 28\varphi + 5)]g_\mu^2 \\
+\ & 54(1-2\nu)[((-27\varphi^2 - 82\varphi + 49)\nu + 3\varphi^2 + 74\varphi - 29)\chi + (4\varphi - 1)(3-\varphi)(\nu+1)]g_\mu \\
+\ & 243\chi(\varphi+2)(2\varphi-1)(1-2\nu)^2 = 0
\end{aligned} \tag{B.37}$$

Même si la résolution analytique est hors de portée, on peut établir des développements limités de $g_k(\varphi,\nu,\chi)$ et $g_\mu(\varphi,\nu,\chi)$ lorsque $\chi \to 0$ ou ∞. Ceux-ci sont mis à profit en sections 10.3.1 et 10.3.2 pour évaluer l'allure de la déformation de fluage des hydrates d'une pâte de ciment.

B.3.2 Développements limités

Lorsque $\chi \to 0$ et $0 < \varphi < 1/4$, on a :

$$g_k(\varphi,\nu,\chi) = \mathcal{K}_0^0(\varphi,\nu) + \mathcal{O}(\chi) \tag{B.38}$$

$$g_\mu(\varphi,\nu,\chi) = \mathcal{M}_0^0(\varphi,\nu) + \mathcal{O}(\chi) \tag{B.39}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_0^0(\varphi,\nu) &= \frac{3}{16}\frac{(13\varphi-3)\nu - 5\varphi - 3}{1+\nu} \\
&+ \frac{3}{16}\frac{\sqrt{(169\varphi^2 + 50\varphi - 23)\nu^2 - 2(13\varphi+1)(5\varphi-1)\nu + 25\varphi^2 - 34\varphi + 25}}{1+\nu}
\end{aligned} \tag{B.40}$$

$$\mathcal{K}_0^0(\varphi,\nu) = \frac{4(1-\varphi)\mathcal{M}_0^0(\varphi,\nu)}{3\varphi + 4\mathcal{M}_0^0(\varphi,\nu)} \tag{B.41}$$

On note que les modules effectifs tendent vers 0 lorsque $\varphi \to 1/4^-$.

Lorsque $\chi \to 0$ et $1/4 < \varphi < 1/2$, on a :

$$g_k(\varphi,\nu,\chi) = \mathcal{K}_1^0(\varphi,\nu)\chi + \mathcal{O}\left(\chi^2\right) \tag{B.42}$$

$$g_\mu(\varphi,\nu,\chi) = \mathcal{M}_1^0(\varphi,\nu)\chi + \mathcal{O}\left(\chi^2\right) \tag{B.43}$$

$$\mathcal{M}_1^0(\varphi,\nu) = \frac{9(\varphi+2)(1-2\varphi)(1-2\nu)}{2(4\varphi-1)(3-\varphi)(1+\nu)} \tag{B.44}$$

$$\mathcal{K}_1^0(\varphi,\nu) = \frac{4(1-\varphi)\mathcal{M}_1^0(\varphi,\nu)}{3\varphi} \tag{B.45}$$

Les modules homogénéisés sont, au premier ordre, proportionnels à χ, ce qui est compatible avec le fait qu'ils tendent vers 0 quand $\varphi \to 1/4^-$.

Lorsque $\chi \to \infty$ et $0 < \varphi < 1/2$, on a :

$$g_k(\varphi,\nu,\chi) = \mathcal{K}_0^\infty(\varphi,\nu) + \mathcal{K}_{-1}^\infty(\varphi,\nu)\chi^{-1} + \mathcal{O}\left(\chi^{-2}\right) \tag{B.46}$$

$$g_\mu(\varphi,\nu,\chi) = \mathcal{M}_0^\infty(\varphi,\nu) + \mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi,\nu)\chi^{-1} + \mathcal{O}\left(\chi^{-2}\right) \tag{B.47}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_0^\infty(\varphi,\nu) &= \frac{3}{16}\frac{(21\varphi-11)\nu-9\varphi+1}{1+\nu} \qquad \text{(B.48)}\\ &+ \frac{3}{16}\frac{\sqrt{(441\varphi^2-270\varphi+25)\nu^2-14(3\varphi-1)(9\varphi-5)\nu+81\varphi^2-114\varphi+49}}{1+\nu}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi,\nu) &= \frac{9}{5}\frac{1-2\nu}{1+\nu} \qquad \text{(B.49)}\\ &* \frac{2[(-35\varphi^2+25\varphi-4)\nu+15\varphi^2-15\varphi+4]\mathcal{M}_0^\infty(\varphi,\nu)+3(1-2\varphi)[(10\varphi-3)\nu-5\varphi+3]}{4[7(1-3\varphi)\nu+9\varphi-5]\mathcal{M}_0^\infty(\varphi,\nu)+3[(13-27\varphi)\nu+15\varphi-11]}\end{aligned}$$

$$\mathcal{K}_0^\infty(\varphi,\nu) = \frac{4(1-\varphi)\mathcal{M}_0^\infty(\varphi,\nu)}{4\mathcal{M}_0^\infty(\varphi,\nu)+3\varphi} \tag{B.50}$$

$$\mathcal{K}_{-1}^\infty(\varphi,\nu) = \frac{12\varphi(1-\varphi)\mathcal{M}_{-1}^\infty(\varphi,\nu)}{[4\mathcal{M}_0^\infty(\varphi,\nu)+3\varphi]^2} \tag{B.51}$$

Notons que $\lim_{\chi\to\infty} \mu^{AC}/k = \mathcal{M}_0^\infty(\varphi,\nu)$ n'est autre que l'expression du module de cisaillement homogénéisé rapporté au module de compression du solide dans le cadre d'un schéma auto-cohérent classique avec solide isotrope (comme celui évoqué en section 2.1). En effet, lorsque $\chi \to \infty$, la souplesse $\mathbb{S}_g(\theta,\phi)$, ajoutée à la souplesse isotrope $\mathbb{S}_{iso}$, devient nulle. Cette remarque vaut également pour le module de compression.

Annexe C

Résolution de quelques problèmes auxiliaires d'élasticité

Cette annexe est consacrée à quelques problèmes d'élasticité, dont la solution est mise à profit dans le texte principal pour construire des schémas d'homogénéisation. Il s'agit de quelques situations généralisant le problème classique de l'inhomogénéité d'Eshelby, pour une forme sphérique.

Sommaire

C.1 Sphère composite à deux phases isotropes concentriques **224**
C.1.1 Déformation auxiliaire sphérique 224
C.1.2 Déformation auxiliaire déviatorique 226
C.1.3 Moyenne sur la calotte de la contrainte moyenne 227
C.2 Sphère isotrope entourée d'une interface **227**
C.2.1 Déformation auxiliaire sphérique 228
C.2.2 Déformation auxiliaire déviatorique 230
C.3 Sphère feuilletée entourée d'une interface **231**
C.3.1 Déformation auxiliaire sphérique 232
C.3.2 Déformations auxiliaires déviatoriques 233
C.3.3 Tenseurs de localisation 235
C.3.4 Ensemble d'inhomogénéités d'orientation répartie de façon isotrope . . 236

On s'intéresse à des problèmes d'élasticité dans lesquels un objet solide particulier est plongé dans un milieu d'extension infinie et de comportement isotrope. Les conditions aux limites, à l'infini, sont de type déformation homogène au contour. Dans le cas où l'objet en question est un ellipsoïde homogène entouré d'une interface parfaite, on se retrouve dans le cadre classique de l'inhomogénéité d'Eshelby [36]. La déformation est alors uniforme dans l'inhomogénéité. On s'intéresse ici à des situations sortant de ce cadre, pour lesquelles la déformation n'est plus uniforme. Plus précisément, on envisage successivement trois types d'inhomogénéités :

- une sphère composite constituée d'un cœur entouré d'une calotte sphérique, les deux milieux étant de comportement isotrope,
- une sphère homogène de comportement isotrope entourée d'une interface non parfaite,
- une sphère homogène de comportement isotrope transverse (particulier) entourée d'une interface non parfaite.

Pour calculer les moyennes des champs de déformation et de contrainte sur un domaine fermé Ω, on va utiliser les relations suivantes, exprimant les intégrales de volume des champs de tenseurs de déformation et de contrainte sous forme d'intégrales de surface [133] :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega} \underline{\xi} \otimes \underline{n}\,\mathrm{d}S \tag{C.1}$$

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega} \underline{x} \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}\,\mathrm{d}S \tag{C.2}$$

$\underline{n}$ étant la normale sortante du domaine Ω.

C.1 Sphère composite à deux phases isotropes concentriques

On considère le problème auxiliaire d'élasticité représenté sur la figure C.1. Les sphères de rayon r_1 et $r_0 > r_1$ partitionnent l'espace en trois domaines notés Ω_2, Ω_1 et Ω_0 de l'intérieur vers l'extérieur. Pour $i \in \{0, 1, 2\}$, le domaine Ω_i est occupé par un matériau élastique linéaire isotrope de tenseur de rigidité $\mathbb{C}_i = 3k_i\mathbb{J} + 2\mu_i\mathbb{K}$ avec k_i et μ_i les modules de compression et de cisaillement. Les conditions aux limites, à l'infini, sont de type déformation homogène au contour : $\underline{\xi}(\underline{x}) = \boldsymbol{E}_0 \cdot \underline{x}, |\underline{x}| \to \infty$, le tenseur $\boldsymbol{E}_0$ étant appelé « déformation auxiliaire ».

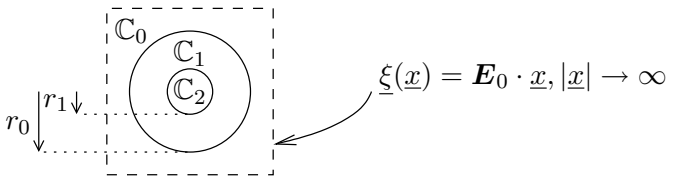


FIG. C.1 – Problème auxiliaire mettant en jeu une sphère composite à deux phases concentriques

L'objectif est de déterminer la moyenne du champ de déformation dans les domaines Ω_2 et Ω_1. Pour cela, on résout d'abord complètement le problème d'élasticité. Ensuite, on détermine à partir de (C.1) et de l'expression du champ de déplacement solution les déformations moyennes dans les domaines Ω_2 et Ω_1. On envisage successivement une déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ sphérique puis déviatorique. On travaille dans la base sphérique (figure 2.8). La démarche est inspirée de [59].

C.1.1 Déformation auxiliaire sphérique

Dans un premier temps, on considère une déformation auxiliaire sphérique, soit $\boldsymbol{E}_0 = E_0\mathbf{1}$.

Résolution du problème

Le champ de déplacement $\underline{\xi}$ est recherché dans chacun des trois domaines Ω_2, Ω_1 et Ω_0 sous la forme radiale particulière :

$$\underline{\xi}_i(\underline{x}) = \left(a_i r + \frac{b_i}{r^2}\right) \underline{e}_r \tag{C.3}$$

avec $i \in \{1, 2, 3\}$. Dans chaque domaine, le champ de contraintes associé par le comportement élastique linéaire isotrope au champ de déformation dérivant de (C.3) est à divergence nulle, donc statiquement admissible. Les 6 constantes a_2, b_2, a_1, b_1, a_0 et b_0 sont exprimées en fonction des modules élastiques k_i, μ_i, des rayons r_1, r_0 et de la déformation auxiliaire E_0 en exploitant :

- la nullité du déplacement au centre, en $r = 0$, soit $b_2 = 0$;
- le respect de la condition à la limite en $r \to \infty$, soit $a_0 = E_0$;
- la continuité du déplacement et du vecteur contrainte au travers des surfaces sphériques $r = r_1$ et $r = r_0$, ce qui fournit 4 équations indépendantes.

On dispose ainsi de 6 équations indépendantes pour déterminer a_2, b_2, a_1, b_1, a_0 et b_0.

Déformations moyennes

Le champ de déplacement dans le domaine Ω_2 présente la forme $\underline{\xi}_2(\underline{x}) = a_2 r \underline{e}_r$, ce qui signifie que la déformation est uniforme dans Ω_2. L'expression de cette dernière est $\boldsymbol{\varepsilon}_2(\underline{x}) = a_2 \mathbf{1}$, soit :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = A_2^{sph} \boldsymbol{E}_0 \tag{C.4}$$

avec le scalaire :

$$A_2^{sph} = \frac{(3k_1 + 4\mu_1)(3k_0 + 4\mu_0)}{(3k_1 + 4\mu_0)(3k_2 + 4\mu_1) + 12(k_2 - k_1)(\mu_1 - \mu_0)(r_1/r_0)^3} \tag{C.5}$$

dans le cas où, rappelons-le, $\boldsymbol{E}_0$ est sphérique.

On recherche maintenant la déformation moyenne dans la sphère de rayon r_0, c'est-à-dire dans le domaine $\Omega_2 \cup \Omega_1$. On note cette dernière $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup 1}$. Pour cela, on applique l'égalité (C.1) au domaine $\Omega = \Omega_2 \cup \Omega_1$:

$$\int_{\Omega_2 \cup \Omega_1} \boldsymbol{\varepsilon} \, \mathrm{d}V = \int_{r=r_0} \underline{\xi}_1 \otimes \underline{n} \, \mathrm{d}S \tag{C.6}$$

Dans l'intégrale de surface apparaissant au second membre, l'expression $r = r_0$ signifie que le domaine d'intégration est la sphère de rayon r_0. Il vient :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup 1} = \left(a_1 + \frac{b_1}{r_0^3}\right) \mathbf{1} \tag{C.7}$$

En exploitant les expressions de a_1 et b_1, on établit :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup 1} = A_{2\cup 1}^{sph} \boldsymbol{E}_0 \tag{C.8}$$

avec le scalaire :

$$A_{2\cup 1}^{sph} = \frac{[3k_2 + 4\mu_1 + 3(k_1 - k_2)(r_1/r_0)^3](3k_0 + 4\mu_0)}{(3k_1 + 4\mu_0)(3k_2 + 4\mu_1) + 12(k_2 - k_1)(\mu_1 - \mu_0)(r_1/r_0)^3} \tag{C.9}$$

dans le cas où $\boldsymbol{E}_0$ est sphérique.

La déformation moyenne sur le domaine Ω_1 se déduit alors des deux résultats (C.4) et (C.8) précédents, en partant simplement de l'identité :

$$(|\Omega_2| + |\Omega_1|) \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup 1} = |\Omega_2| \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 + |\Omega_1| \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_1 \tag{C.10}$$

ce qui donne $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_1 = A_1^{sph} \boldsymbol{E}_0$, avec :

$$A_1^{sph} = \frac{A_{2\cup 1}^{sph} - (r_1/r_0)^3 A_2^{sph}}{1 - (r_1/r_0)^3} \tag{C.11}$$

Il reste à réaliser le même travail pour une déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ déviatorique.

C.1.2 Déformation auxiliaire déviatorique

Dans un second temps, on considère une déformation auxiliaire déviatorique, par exemple sous la forme $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2)$, où $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ est la base cartésienne.

Résolution du problème

Le champ de déplacement est recherché dans les trois domaines Ω_i sous la forme [75] :

$$\underline{\xi}_i(\underline{x}) = \xi_i^r(r) \sin^2\theta \cos 2\phi \; \underline{e}_r + \xi_i^\theta(r) \sin\theta \cos\theta \cos 2\phi \; \underline{e}_\theta + \xi_i^\phi(r) \sin\theta \sin 2\phi \; \underline{e}_\phi \tag{C.12}$$

Pour assurer l'équilibre du champ de contraintes (c'est-à-dire $\underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}_i) = \underline{0}$) associé par le comportement élastique linéaire isotrope, les fonction ξ_i^r, ξ_i^θ et ξ_i^ϕ de r doivent présenter les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
\xi_i^r(r) &= a_i r - \frac{6\nu_i}{1-2\nu_i} b_i r^3 + 3\frac{c_i}{r^4} + \frac{5-4\nu_i}{1-2\nu_i}\frac{d_i}{r^2} \\
\xi_i^\theta(r) &= a_i r - \frac{7-4\nu_i}{1-2\nu_i} b_i r^3 - 2\frac{c_i}{r^4} + 2\frac{d_i}{r^2} \\
\xi_i^\phi(r) &= -\xi_i^\theta(r)
\end{aligned} \tag{C.13}$$

avec ν_i le coefficient de Poisson du matériau occupant le domaine Ω_i et a_i, b_i, c_i, d_i des constantes (au sens indépendantes des variables d'espace r, θ, ϕ) pour le moment indéterminées. On écrit les conditions suivantes :

- nullité du déplacement au centre, en $r = 0$, soit $c_2 = 0$ et $d_2 = 0$;
- condition à la limite portant sur le déplacement à l'infini, en $r \to \infty$, soit $a_0 = E_0$ et $b_0 = 0$;
- continuité du déplacement et du vecteur contrainte au travers des surfaces sphériques $r = r_1$ et $r = r_0$, ce qui fournit 8 équations indépendantes.

Ces 12 relations permettent de déterminer les 12 inconnues a_i, b_i, c_i et d_i ($i \in \{1, 2, 3\}$) en fonction des modules élastiques k_i, μ_i, des rayons r_0, r_1 et du niveau de déformation E_0. Il s'agit maintenant d'établir les déformations moyennes dans Ω_2 et Ω_1.

Déformations moyennes

Le mode de calcul est identique à ce qui a été présenté précédemment en section C.1.1 : la relation (C.1) est exploitée pour se ramener à une intégrale de surface sur le champ de déplacement.

Remarquons que contrairement au cas de la déformation auxiliaire sphérique, la déformation n'est ici pas uniforme dans Ω_2 : $b_2 \neq 0$. La déformation moyenne dans Ω_2 s'obtient par :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = \frac{1}{|\Omega_2|} \int_{\Omega_2} \boldsymbol{\varepsilon} \, \mathrm{d}V = \frac{1}{|\Omega_2|} \int_{r=r_1} \underline{\xi}_2 \otimes \underline{n} \, \mathrm{d}S \tag{C.14}$$

l'intégrale de surface étant à réaliser sur la sphère de rayon r_1. Compte tenu de la forme particulière (définie par (C.12) et (C.13)) du champ de déplacement $\underline{\xi}_2$, ceci devient :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = \left(a_2 - \frac{21}{5(1-2\nu_2)} b_2 r_1^2 + \frac{4(4-5\nu_2)}{5(1-2\nu_2)} \frac{d_2}{r_1^3} \right) (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2) \tag{C.15}$$

On aboutit ainsi à :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = A_2^{dev} \boldsymbol{E}_0 \tag{C.16}$$

le scalaire A_2^{dev} présentant une expression malheureusement trop lourde pour être reprise dans ce texte. Cette expression dépend des modules élastiques k_i, μ_i et du rapport des rayons r_1/r_0.

De la même façon, on calcule la déformation moyenne dans $\Omega_2 \cup \Omega_1$:

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup 1} = \left(a_1 - \frac{21}{5(1-2\nu_1)} b_1 r_0^2 + \frac{4(4-5\nu_1)}{5(1-2\nu_1)} \frac{d_1}{r_0^3} \right) (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2) \tag{C.17}$$

Ceci permet d'écrire :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup 1} = A_{2\cup 1}^{dev} \boldsymbol{E}_0 \tag{C.18}$$

L'expression du scalaire $A_{2\cup 1}^{dev}$ est également trop lourde pour être explicitée ici.

La déformation moyenne dans le domaine Ω_1 se calcule enfin simplement par $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_1 = A_1^{dev} \boldsymbol{E}_0$ où A_1^{dev} est exprimé par une relation analogue à (C.11) : il suffit de remplacer les exposants *sph* par *dev*.

C.1.3 Moyenne sur la calotte de la contrainte moyenne

En section 9.1.2, on exploite la moyenne $\langle \sigma_m \rangle_1$ de la contrainte moyenne sur le domaine Ω_1 (avec $\sigma_m = \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma}/3$). On détermine ici cette moyenne.

Quelle que soit la déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$, on vient de montrer que la moyenne du champ de déformation sur le domaine Ω_1 s'écrit :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_1 = (A_1^{sph} \mathbb{J} + A_1^{dev} \mathbb{K}) : \boldsymbol{E}_0 \tag{C.19}$$

Le domaine Ω_1 étant constitué d'un matériau homogène de rigidité $\mathbb{C}_1$, la moyenne du champ de contraintes sur ce domaine est :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_1 = \mathbb{C}_1 : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_1 = \mathbb{C}_1 : (A_1^{sph} \mathbb{J} + A_1^{dev} \mathbb{K}) : \boldsymbol{E}_0 \tag{C.20}$$

Il ne reste plus qu'à prendre le tiers de la trace de cette expression, pour obtenir :

$$\frac{1}{3} \operatorname{tr} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_1 = 3 k_1 A_1^{sph} E_{0m} \tag{C.21}$$

le tenseur de rigidité $\mathbb{C}_1$ étant isotrope (k_1 désigne le module de compression). Dans cette expression, on a $E_{0m} = \operatorname{tr} \boldsymbol{E}_0/3$. La trace étant un opérateur linéaire, la moyenne désirée $\langle \sigma_m \rangle_1$ est égale à la quantité calculée dans (C.21). ll vient ainsi, compte tenu de (C.5), (C.9) et (C.11) :

$$\langle \sigma_m \rangle_1 = \frac{3k_1(3k_2 + 4\mu_1)(3k_0 + 4\mu_0)}{(3k_1 + 4\mu_0)(3k_2 + 4\mu_1) + 12(k_2 - k_1)(\mu_1 - \mu_0)(r_1/r_0)^3} E_{0m} \tag{C.22}$$

Remarquons que la partie déviatorique de la déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$ n'intervient pas.

C.2 Sphère isotrope entourée d'une interface

On considère à présent le problème d'élasticité représenté sur la figure C.2. La sphère de rayon $r = r_0$ sépare l'espace en deux domaines, Ω_2 et Ω_0. Chacun de ces deux domaines est constitué d'un matériau élastique linéaire isotrope, de tenseur de rigidité $\mathbb{C}_i = 3k_i\mathbb{J} + 2\mu_i\mathbb{K}$, avec $i \in \{0, 2\}$. Les deux domaines sont séparés en $r = r_0$ par une interface $\mathcal{I}$ de comportement élastique linéaire isotrope transverse. Il existe ainsi une relation linéaire entre le vecteur contrainte et le saut de déplacement à l'interface :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} = \boldsymbol{K} \cdot [\![\underline{\xi}]\!] \quad \text{en} \quad r = r_0 \tag{C.23}$$

avec $\underline{n}$ la normale à l'interface (orientée de Ω_2 vers Ω_0), $[\![\underline{\xi}]\!] = \underline{\xi}(r_0^+, \theta, \phi) - \underline{\xi}(r_0^-, \theta, \phi)$ le saut de déplacement, et $\boldsymbol{K}$ le tenseur de rigidité d'interface. Ce dernier prend la forme :

$$\boldsymbol{K} = K_n \underline{n} \otimes \underline{n} + K_t(\mathbf{1} - \underline{n} \otimes \underline{n}) \tag{C.24}$$

Dans cette expression, K_n et K_t sont respectivement appelés raideur normale et tangentielle d'interface. Les conditions aux limites à l'infini portent sur le déplacement et sont de type déformation homogène au contour, avec la déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$.

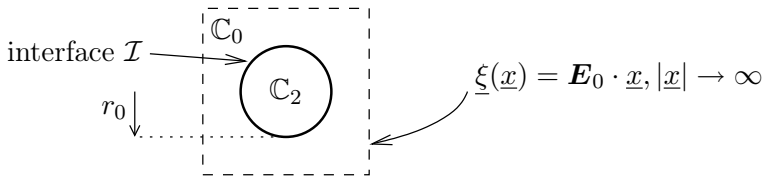


FIG. C.2 – Problème auxiliaire d'élasticité mettant en jeu une sphère isotrope entourée d'une interface

On peut voir ce cas comme une dégénérescence de celui traité dans la section précédente (section C.1), avec $r_1 \to r_0$. De ce fait, la démarche va être très similaire : pour deux déformations auxiliaires successives, l'une sphérique et l'autre déviatorique, on résout le problème d'élasticité puis on calcule les déformations moyennes. Par ailleurs, nous montrerons qu'il est possible de retrouver les résultats établis ici, à partir de ceux obtenus précédemment sur l'inhomogénéité composite, en évaluant la limite $r_1 \to r_0$, pourvu que les modules élastiques du milieu 1 prennent une expression adéquate dépendant de l'épaisseur $r_0 - r_1$.

C.2.1 Déformation auxiliaire sphérique

Le principe de résolution est similaire à celui appliqué à l'inhomogénéité composite. On envisage en premier lieu la déformation auxiliaire sphérique $\boldsymbol{E}_0 = E_0 \mathbf{1}$.

Résolution du problème

On reprend un champ de déplacement sous la forme (C.3) avec $i \in \{0, 2\}$. Il n'y a donc que 4 inconnues : a_0, b_0, a_2 et b_2. Ces dernières sont déterminées en exploitant les 4 équations scalaires issues de :

- la nullité du déplacement au centre, en $r = 0$, soit $b_2 = 0$;
- le respect de la condition à la limite en $r \to \infty$, soit $a_0 = E_0$;
- la continuité du vecteur contrainte au travers de la surface sphérique $r = r_0$;
- la loi d'interface en $r = r_0$ décrite par (C.23) et (C.24).

Les inconnues a_0, b_0, a_2 et b_2 sont ainsi exprimées en fonction des modules élastiques k_0, μ_0, k_2, μ_2, du module d'interface K_n, du rayon r_0 et de E_0. Le module d'interface K_t n'intervient pas car, le champ de déplacement étant radial, l'interface n'est pas sollicitée en cisaillement.

Déformations moyennes

On cherche à déterminer la déformation moyenne du domaine Ω_2. Il convient de prendre garde au fait que le résultat va a priori être différent selon que l'on compte ou non la discontinuité de déplacement dont l'interface $\mathcal{I}$ est le siège.

Si cette discontinuité de déplacement est exclue, on obtient :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = \frac{1}{|\Omega_2|} \int_{r=r_0^-} \underline{\xi}_2 \otimes \underline{n} \, \mathrm{d}S = \left(a_2 + \frac{b_2}{r_0^3} \right) \mathbf{1} \tag{C.25}$$

l'intégrale de surface étant prise sur la sphère de rayon $r = r_0^-$. Il vient :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = A_2^{sph} \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad A_2^{sph} = \frac{(3k_0 + 4\mu_0) K_n r_0}{(3k_2 + 4\mu_0) K_n r_0 + 12 k_2 \mu_0} \tag{C.26}$$

Si, au contraire, la discontinuité de déplacement à l'interface $\mathcal{I}$ ($r = r_0$) est inclue, on obtient :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2 \cup \mathcal{I}} = \frac{1}{|\Omega_2|} \int_{r=r_0^+} \underline{\xi}_0 \otimes \underline{n} \, \mathrm{d}S = \left(a_0 + \frac{b_0}{r_0^3} \right) \mathbf{1} \tag{C.27}$$

l'intégrale de surface étant prise sur la sphère de rayon $r = r_0^+$. La notation « $2 \cup \mathcal{I}$ » sert justement à indiquer que l'on tient compte de la discontinuité de déplacement dans le calcul de la déformation moyenne. L'expression précédente devient :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2 \cup \mathcal{I}} = A_{2 \cup \mathcal{I}}^{sph} \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad A_{2 \cup \mathcal{I}}^{sph} = \frac{(3k_0 + 4\mu_0)(K_n r_0 + 3k_2)}{(3k_2 + 4\mu_0) K_n r_0 + 12 k_2 \mu_0} \tag{C.28}$$

pour $\boldsymbol{E}_0$ sphérique. La déformation moyenne est effectivement différente selon que la discontinuité de déplacement est exclue ou inclue.

Obtention comme cas limite du problème à inhomogénéité composite

En fait, il est possible d'établir les déformations moyennes recherchées dans le présent problème (figure C.2) comme limites de celles obtenues sur le problème à inhomogénéité composite (figure C.1), en considérant une calotte Ω_1 dont l'épaisseur tend vers 0. Il s'agit d'abord d'établir une équivalence, en termes de comportement élastique, entre (voir figure C.3) :

- une couche d'épaisseur infinitésimale constituée d'un matériau élastique linéaire isotrope, caractérisée par son épaisseur e et les modules élastiques k et μ ;
- une interface élastique isotrope transverse, caractérisée par les modules d'interface K_n et K_t.

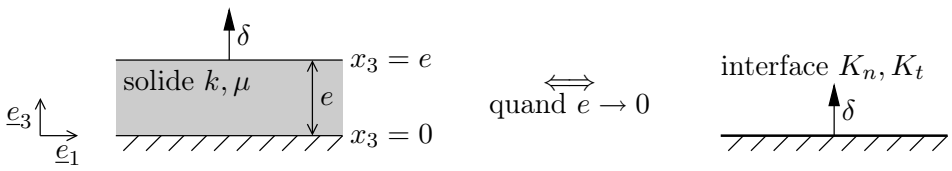


FIG. C.3 – Équivalence entre une couche de matériau élastique linéaire isotrope d'épaisseur infinitésimale et une interface élastique

Équivalence couche infinitésimale - interface L'équivalence est établie en identifiant les relations entre le vecteur contrainte et la discontinuité de déplacement, successivement pour une discontinuité de déplacement normale et pour une discontinuité de déplacement tangentielle.

On commence par imposer un déplacement normal au plan supérieur de la couche de solide : $\underline{\xi} = \delta \underline{e}_3$ en $x_3 = e$. Le plan inférieur est soumis à un déplacement nul. Dans ce cas, on montre que les champs de déplacement et de contrainte solutions du problème d'élasticité s'écrivent dans la couche :

$$\underline{\xi} = \delta \frac{x_3}{e} \underline{e}_3 \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\sigma} = \left(k - \frac{2\mu}{3} \right) \frac{\delta}{e} (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2) + \left(k + \frac{4\mu}{3} \right) \frac{\delta}{e} \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \tag{C.29}$$

Ainsi, le « saut de déplacement » au travers de la couche, dont l'épaisseur est vouée à tendre vers 0, s'écrit $[\![\underline{\xi}]\!]^c = \underline{\xi}(x_3 = e) - \underline{\xi}(x_3 = 0) = \delta \underline{e}_3$. L'exposant c indique qu'il s'agit d'un résultat

établi sur la couche solide, et non sur l'interface. Le vecteur contrainte s'écrit quant à lui : $\underline{T}^c = \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{e}_3 = (k + 4\mu/3)\delta/e\,\underline{e}_3$. Par conséquent, la relation entre vecteur contrainte et saut de déplacement prend la forme :

$$\underline{T}^c = \left(k + \frac{4\mu}{3}\right)\frac{1}{e}[\![\underline{\xi}]\!]^c \tag{C.30}$$

On reconnaît, de façon attendue, le module œdométrique $k + 4\mu/3$. Par identification avec la loi d'interface $\underline{T} = K_n[\![\underline{\xi}]\!]$ (rappelons que la discontinuité de déplacement est ici normale à l'interface), on obtient :

$$K_n e = k + \frac{4\mu}{3} \tag{C.31}$$

lorsque $e \to 0$. Cette égalité assure que les relations entre le vecteur contrainte et la discontinuité de déplacement sont identiques dans le cas d'une couche d'épaisseur infinitésimale et dans le cas d'une interface, pour une sollicitation normale.

On impose ensuite un déplacement tangentiel au plan supérieur : $\underline{\xi} = \delta\underline{e}_1$ en $x_3 = e$. Dans ce cas, on montre que les champs de déplacement et contrainte solutions du problème d'élasticité s'écrivent :

$$\underline{\xi} = \delta\frac{x_3}{e}\underline{e}_1 \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\sigma} = \mu\frac{\delta}{e}(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_3 + \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_1) \tag{C.32}$$

Ainsi, le « saut de déplacement » au travers de la couche est $[\![\underline{\xi}]\!]^c = \delta\underline{e}_1$. Le vecteur contrainte s'exprime par $\underline{T}^c = \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{e}_3 = \mu\delta/e\,\underline{e}_1$. Par conséquent, la relation entre vecteur contrainte et saut de déplacement prend la forme :

$$\underline{T}^c = \mu\frac{1}{e}[\![\underline{\xi}]\!]^c \tag{C.33}$$

En identifiant avec la loi d'interface $\underline{T} = K_t[\![\underline{\xi}]\!]$, on obtient l'égalité suivante :

$$K_t e = \mu \tag{C.34}$$

Ainsi, il est possible de modéliser une interface comme une couche de matériau élastique isotrope dont l'épaisseur e tend vers 0, du moment que les modules élastiques de cette couche respectent (C.31) et (C.34). En particulier, ces modules élastiques dépendent de l'épaisseur e.

Application Dans le problème décrit sur la figure C.1, on fait tendre l'épaisseur, notée e, de la calotte sphérique Ω_1 vers 0. Avant de prendre la limite lorsque $e \to 0$, il faut exprimer en fonction de l'épaisseur les modules élastiques k_1 et μ_1 de façon à satisfaire (C.31) et (C.34) :

$$k_1 = \left(K_n - \frac{4K_t}{3}\right)e \quad \text{et} \quad \mu_1 = K_t e \tag{C.35}$$

Le rayon r_1 s'écrit $r_1 = r_0 - e$. Il reste à prendre la limite de (C.5) et (C.9) pour $e \to 0$. On retrouve alors exactement (C.26) et (C.28).

C.2.2 Déformation auxiliaire déviatorique

On considère à présent une déformation auxiliaire déviatorique, par exemple $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2)$.

Résolution du problème

On reprend un champ de déplacement sous la forme (C.12), (C.13) avec $i \in \{0, 2\}$. Il y a ici 8 inconnues : a_i, b_i, c_i et d_i pour $i \in \{0, 2\}$. Pour les déterminer, on dispose, comme précédemment, des relations suivantes :

– déplacement nul au centre, en $r = 0$, soit $c_2 = 0$ et $d_2 = 0$;

– condition à la limite en déplacement en $r \to \infty$, soit $a_0 = E_0$ et $b_0 = 0$;
– continuité du vecteur contrainte au travers de la surface sphérique $r = r_0$, ce qui donne deux équations indépendantes ;
– comportement d'interface en $r = r_0$ exprimé par (C.23) et (C.24), qui fournit également deux équations indépendantes.

Les inconnues a_i, b_i, c_i et d_i sont ainsi exprimées en fonction des modules élastiques k_0, μ_0, k_2, μ_2, des modules d'interface K_n, K_t, du rayon r_0 et de E_0.

Déformations moyennes

On procède comme précédemment (section C.2.1), en excluant, ou en incluant, la discontinuité de déplacement à l'interface. On aboutit à des expressions similaires à (C.15) :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = \frac{1}{|\Omega_2|} \int_{r=r_0^-} \underline{\xi}_2 \otimes \underline{n} \, \mathrm{d}S = \left(a_2 - \frac{21}{5(1-2\nu_2)} b_2 r_0^2 + \frac{4(4-5\nu_2)}{5(1-2\nu_2)} \frac{d_2}{r_0^3} \right) \frac{1}{E_0} \boldsymbol{E}_0 \tag{C.36}$$

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup\mathcal{I}} = \frac{1}{|\Omega_2|} \int_{r=r_0^+} \underline{\xi}_0 \otimes \underline{n} \, \mathrm{d}S = \left(a_0 - \frac{21}{5(1-2\nu_0)} b_0 r_0^2 + \frac{4(4-5\nu_0)}{5(1-2\nu_0)} \frac{d_0}{r_0^3} \right) \frac{1}{E_0} \boldsymbol{E}_0 \tag{C.37}$$

Ces expressions mènent à :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = A_2^{dev} \boldsymbol{E}_0 \quad \text{et} \quad \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup\mathcal{I}} = A_{2\cup\mathcal{I}}^{dev} \boldsymbol{E}_0 \tag{C.38}$$

Nous n'explicitons pas plus en détail les expressions de A_2^{dev} et $A_{2\cup\mathcal{I}}^{dev}$: ce serait inutilement lourd.

Pour terminer, mentionnons le fait qu'on peut retrouver les déformations moyennes obtenues ici commes limites de celles établies sur le modèle à sphère composite (section C.1.2), lorsque l'épaisseur de la calotte Ω_1 tend vers 0. La même remarque a été faite dans le cas de la déformation auxiliaire sphérique.

C.3 Sphère feuilletée entourée d'une interface

On considère à présent une sphère de comportement non plus isotrope mais isotrope transverse (figure C.4). La sphère est toujours entourée d'une interface dont le comportement est décrit par (C.23) et (C.24). Le comportement isotrope transverse de l'inhomogénéité est choisi de façon très particulière : $\underline{e}_3$ étant l'axe d'isotropie transverse, seules les déformations de glissement ε_{13} et ε_{23} sont autorisées, en ne mobilisant aucune contrainte. Tous les autres modes de déformation sont interdits. Par le biais de ce comportement avec liaisons internes, on cherche à modéliser le comportement homogénéisé d'un empilement de feuillets rigides pouvant librement glisser les uns sur les autres. Le comportement de l'inhomogénéité Ω_2 s'écrit ainsi sous la forme :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \varepsilon_{13} \\ 0 & 0 & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & 0 \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1,\underline{e}_2,\underline{e}_3)} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1,\underline{e}_2,\underline{e}_3)} \tag{C.39}$$

Les conditions aux limites portent toujours sur le déplacement à l'infini : elles sont de type déformation homogène au contour ($\boldsymbol{E}_0$).

On envisage d'abord de déterminer la déformation moyenne de l'inhomogénéité Ω_2 avec et sans l'interface, et la contrainte moyenne dans Ω_2, pour autant de déformations auxiliaires particulières que nécessaire pour construire les tenseurs de localisation $\mathbb{A}_2$, $\mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}}$ et $\mathbb{A}_2^c$ tels que :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = \mathbb{A}_2 : \boldsymbol{E}_0 \ , \quad \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup\mathcal{I}} = \mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}} : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{et} \quad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_2 = \mathbb{A}_2^c : \boldsymbol{E}_0 \tag{C.40}$$

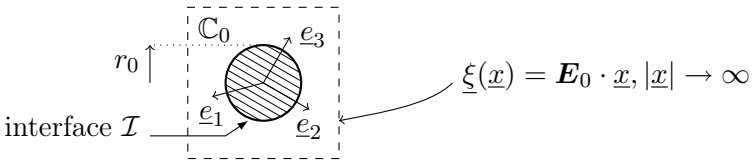


FIG. C.4 – Problème auxiliaire mettant en jeu une sphère isotrope transverse entourée d'une interface

La géométrie du problème et le comportement des deux phases étant invariants par rotation autour de $\underline{e}_3$, il suffit de considérer quatre déformations auxiliaires :

$$\boldsymbol{E}_0 = E_0\mathbf{1}\ ,\ \ \boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_1-\underline{e}_3\otimes\underline{e}_3)\ ,\ \ \boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_2+\underline{e}_2\otimes\underline{e}_1)\ \text{ et }\ \boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_3+\underline{e}_3\otimes\underline{e}_1) \tag{C.41}$$

En effet, les résultats respectivement attendus pour $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_1-\underline{e}_2\otimes\underline{e}_2)$ et $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_2\otimes\underline{e}_3+\underline{e}_3\otimes\underline{e}_2)$ se déduisent de ceux obtenus avec $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_2+\underline{e}_2\otimes\underline{e}_1)$ et $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_3+\underline{e}_3\otimes\underline{e}_1)$, puisque la « structure » étudiée présente l'axe $\underline{e}_3$ comme axe de révolution. Afin de résoudre le problème d'élasticité, on recherche dans le milieu infini Ω_0 le champ de déplacement sous la forme (C.3) ou (C.12) déjà exploitée à maintes reprises dans cette annexe. Dans le milieu Ω_2, on s'inspire des champs de déplacement et de contraintes solutions du problème mettant en jeu une inhomogénéité isotrope (section C.2) dont on fait tendre la raideur vers une valeur limite particulière dépendant de la nature de $\boldsymbol{E}_0$.

Ensuite, on envisage un ensemble (infini) d'inhomogénéités isotropes transverses telles que celle représentée sur la figure C.4, avec une distribution isotrope de l'axe d'isotropie transverse. On évalue alors les déformations et contraintes moyennes sur l'ensemble des inhomogénéités.

C.3.1 Déformation auxiliaire sphérique

On envisage d'abord le cas d'une déformation auxiliaire sphérique, soit $\boldsymbol{E}_0 = E_0\mathbf{1}$. On pressent que l'inhomogénéité ne va subir aucune déformation.

Résolution du problème

Dans le domaine Ω_0, le champ de déplacement est recherché sous la forme (C.3). Dans le domaine Ω_2, on s'inspire des champs de déplacement et de contrainte obtenus pour une inhomogénéité isotrope rigide (donc caractérisée par un module de Young $E_2 \to \infty$), soit :

$$\underline{\xi}_2 = \underline{0} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = a_2\mathbf{1} \tag{C.42}$$

Les champs de déformation et de contrainte dans Ω_2 satisfont alors bien le comportement (C.39). Pour déterminer les inconnues a_0, b_0 et a_2, on procède comme en section C.2.1, en écrivant les conditions aux limites en $r \to \infty$, la continuité du vecteur contrainte et le comportement d'interface sur la surface $r = r_0$. On a ainsi résolu le problème d'élasticité.

Déformations et contraintes moyennes

La déformation moyenne de l'inhomogénéité Ω_2 est calculée comme précédemment, en section C.2.1. On obtient deux expressions différentes selon que la discontinuité de déplacement à l'interface $\mathcal{I}$ est exclue ou inclue :

$$\langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_2 = \alpha_{sph}\boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \alpha_{sph} = 0 \tag{C.43}$$

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{2\cup\mathcal{I}} = \beta_{sph} \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \beta_{sph} = \frac{3k_0 + 4\mu_0}{K_n r_0 + 4\mu_0} \tag{C.44}$$

L'indice « *sph* » fait référence au caractère sphérique de la déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0$. Afin de manipuler des expressions moins lourdes, on emploie les notations α_{sph} et β_{sph} au lieu de A_2^{sph} et $A_{2\cup\mathcal{I}}^{sph}$. On retrouve les expressions (C.26) et (C.28) dans la limite d'une inhomogénéité rigide ($k_2 \to \infty$).

Le champ de contraintes est uniforme dans l'inhomogénéité Ω_2 :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_2 = \gamma_{sph} \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \gamma_{sph} = \frac{(3k_0 + 4\mu_0) K_n r_0}{K_n r_0 + 4\mu_0} \tag{C.45}$$

On retrouve la limite de l'équation (C.26) multipliée par $3k_2$ (pour obtenir les contraintes dans Ω_2 à partir de la déformation), lorsque $k_2 \to \infty$.

C.3.2 Déformations auxiliaires déviatoriques

On considère successivement les déformations auxiliaires $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3)$, $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1)$ et $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_3 + \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_1)$.

Déformation auxiliaire en $\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3$

On envisage la déformation auxiliaire déviatorique particulière $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3)$. On pressent que l'inhomogénéité ne va subir aucune déformation.

Résolution du problème Dans le domaine Ω_0, le champ de déplacement est recherché sous la forme donnée par (C.12) et (C.13). Dans l'inhomogénéité Ω_2, on suppose un champ de déplacement nul :

$$\underline{\xi}_2 = \underline{0} \tag{C.46}$$

De plus, on y recherche le champ de contraintes sous une forme similaire à celui qui s'établit dans une inhomogénéité isotrope (section C.2) dont on fait tendre le module de Young vers l'infini. Plus précisément, on reprend la même forme de dépendance vis-à-vis des variables d'espace (x_1, x_2 et x_3 dans la base cartésienne $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$), en faisant intervenir des constantes (a_2 à j_2 et l_2 : on exclut k_2 afin d'éviter la confusion avec un éventuel module de compression) à déterminer :

$$\boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} a_2 + b_2 x_1^2 + c_2 x_2^2 + d_2 x_3^2 & e_2 x_1 x_2 & 0 \\ e_2 x_1 x_2 & f_2(x_1^2 - x_3^2) & l_2 x_2 x_3 \\ 0 & l_2 x_2 x_3 & g_2 + h_2 x_1^2 + i_2 x_2^2 + j_2 x_3^2 \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)} \tag{C.47}$$

Le comportement (C.39) impose d'emblée $l_2 = 0$. De plus, pour que ce champ de contraintes soit statiquement admissible ($\underline{\text{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}_2) = \underline{0}$), il faut prendre $b_2 = e_2 = j_2 = 0$. La suite de la résolution est désormais classique : on écrit la condition à la limite en $r \to \infty$, la continuité du vecteur contrainte sur l'interface en $r = r_0$ et le comportement de l'interface. On parvient ainsi à déterminer les inconnues $a_0, b_0, c_0, d_0, a_2, c_2, d_2, f_2, g_2, h_2, i_2$, ce qui signifie que le problème d'élasticité est résolu et qu'en particulier nos intuitions sur les champs de déplacement et de contrainte dans l'inhomogénéité étaient bonnes.

Déformations et contraintes moyennes La déformation moyenne de la sphère Ω_2 prend la forme, selon que la discontinuité de déplacement à l'interface est exclue ou inclue :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = \alpha_{11-33} \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \alpha_{11-33} = 0 \tag{C.48}$$

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_{2\cup\mathcal{I}} &= \beta_{11-33}\boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \\ \beta_{11-33} &= \frac{\mu_0(3k_0+4\mu_0)[(2K_t+3K_n)r_0+40\mu_0]}{3(k_0+2\mu_0)K_nK_tr_0^2+\mu_0[2(9k_0+16\mu_0)K_t+3(5k_0+8\mu_0)K_n]r_0+8\mu_0^2(9k_0+8\mu_0)}\end{aligned} \tag{C.49}$$

L'indice « $11-33$ » fait référence à l'expression de la déformation auxiliaire imposée ici : $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_1-\underline{e}_3\otimes\underline{e}_3)$. La contrainte moyenne dans l'inhomogénéité est :

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_2 &= \gamma_{11-33}\boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \\ \gamma_{11-33} &= \frac{\mu_0(3k_0+4\mu_0)[5K_nK_tr_0+8\mu_0(3K_t+2K_n)]r_0}{3(k_0+2\mu_0)K_nK_tr_0^2+\mu_0[2(9k_0+16\mu_0)K_t+3(5k_0+8\mu_0)K_n]r_0+8\mu_0^2(9k_0+8\mu_0)}\end{aligned} \tag{C.50}$$

Ces résultats auraient pu être obtenus directement en prenant la limite des moyennes déterminées sur une inhomogénéité sphérique isotrope (section C.2.2), lorsque la rigidité de cette sphère devient infinie ($E_2\to\infty$).

Déformation auxiliaire en $\underline{e}_1\otimes\underline{e}_2+\underline{e}_2\otimes\underline{e}_1$

On envisage à présent la déformation auxiliaire déviatorique $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_2+\underline{e}_2\otimes\underline{e}_1)$. On pressent à nouveau que l'inhomogénéité ne va subir aucune déformation.

La méthode de résolution est identique à celle menée ci-dessus pour la déformation auxiliaire $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_1-\underline{e}_3\otimes\underline{e}_3)$. On signale juste les formes sous lesquelles les champs de déplacement et de contraintes sont recherchés dans l'inhomogénéité :

$$\underline{\xi}_2 = \underline{0} \tag{C.51}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} a_2x_1x_2 & b_2+c_2x_1^2+d_2x_2^2+e_2x_3^2 & f_2x_2x_3 \\ b_2+c_2x_1^2+d_2x_2^2+e_2x_3^2 & g_2x_1x_2 & h_2x_1x_3 \\ f_2x_2x_3 & h_2x_1x_3 & i_2x_1x_2 \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1,\underline{e}_2,\underline{e}_3)} \tag{C.52}$$

Le comportement (C.39) impose d'emblée $f_2 = h_2 = 0$.

Une fois le problème d'élasticité résolu, on calcule les déformations et contraintes moyennes dans l'inhomogénéité. On retrouve exactement les expressions (C.48), (C.49) et (C.50) obtenues avec $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_1-\underline{e}_3\otimes\underline{e}_3)$. Ainsi, en conservant le même principe de notation, on peut écrire :

$$\alpha_{12+21} = \alpha_{11-33}\ , \quad \beta_{12+21} = \beta_{11-33} \quad \text{et} \quad \gamma_{12+21} = \gamma_{11-33} \tag{C.53}$$

Déformation auxiliaire en $\underline{e}_1\otimes\underline{e}_3+\underline{e}_3\otimes\underline{e}_1$

La dernière déformation auxiliaire à traiter est $\boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1\otimes\underline{e}_3+\underline{e}_3\otimes\underline{e}_1)$. Contrairement aux cas précédents, on pressent ici que l'inhomogénéité va se déformer comme un pore, avec un champ de contraintes nul en son sein. En effet, le glissement $1,3$ est précisément l'un des seuls modes de déformation autorisés par le comportement de l'inhomogénéité. De plus, ce glissement se fait sous contrainte nulle.

L'esprit de la méthode de résolution est le même que précédemment. Seule change la forme sous laquelle sont recherchés dans l'inhomogénéité les champs de déplacement et de contraintes. Compte tenu de l'hypothèse de comportement analogue à celui d'un pore, on prend :

$$\underline{\xi}_2 = a_2(x_3\underline{e}_1+x_1\underline{e}_3) \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \boldsymbol{0} \tag{C.54}$$

Une fois le problème d'élasticité résolu, les déformations et contraintes moyennes sur l'inhomogénéité sont calculées comme précédemment :

$$\langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_2 = \alpha_{13+31}\boldsymbol{E}_0\ , \quad \langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_{2\cup\mathcal{I}} = \beta_{13+31}\boldsymbol{E}_0 \quad \text{et} \quad \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_2 = \gamma_{13+31}\boldsymbol{E}_0 \tag{C.55}$$

avec :

$$\alpha_{13+31} = \beta_{13+31} = 5\frac{3k_0 + 4\mu_0}{9k_0 + 8\mu_0} \quad \text{et} \quad \gamma_{13+31} = 0 \tag{C.56}$$

On retrouve la limite des expressions obtenues sur une inhomogénéité de comportement isotrope dont on aurait fait tendre le module de Young vers 0, c'est-à-dire pour un pore (voir section C.2.2 dans le cas limite $E_2 \to 0$).

C.3.3 Tenseurs de localisation

On synthétise à présent les résultats établis dans les deux sections précédentes (C.3.1 et C.3.2) en formant les expressions des tenseurs de localisation définis en (C.40). La procédure est identique pour les trois tenseurs $\mathbb{A}_2$, $\mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}}$ et $\mathbb{A}_2^c$. Détaillons le cas de $\mathbb{A}_2$.

Il s'agit donc de déterminer toutes les composantes du tenseur de localisation $\mathbb{A}_2$, tel que $\langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_2 = \mathbb{A}_2 : \boldsymbol{E}_0$, en exploitant les résultats établis en (C.43), (C.48), (C.53) et (C.55). Ces résultats peuvent être résumés de la façon suivante :

$$\langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_2 = \begin{cases} \alpha_{sph}\boldsymbol{E}_0 & \text{si} \quad \boldsymbol{E}_0 = E_0\mathbf{1} \\ \alpha_{11-33}\boldsymbol{E}_0 & \text{si} \quad \boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3) \\ \alpha_{12+21}\boldsymbol{E}_0 & \text{si} \quad \boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1) \\ \alpha_{13+31}\boldsymbol{E}_0 & \text{si} \quad \boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_3 + \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_1) \end{cases} \tag{C.57}$$

À ces quatre relations, nous pouvons en ajouter deux, compte tenu du fait que la structure étudiée ici (figure C.4) présente la symétrie de révolution d'axe $\underline{e}_3$, du point de vue de la géométrie et du comportement des matériaux :

$$\langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_2 = \begin{cases} \alpha_{12+21}\boldsymbol{E}_0 & \text{si} \quad \boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2) \\ \alpha_{13+31}\boldsymbol{E}_0 & \text{si} \quad \boldsymbol{E}_0 = E_0(\underline{e}_2 \otimes \underline{e}_3 + \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_2) \end{cases} \tag{C.58}$$

Les équations (C.57) et (C.58) rassemblent alors suffisamment d'information pour construire le tenseur $\mathbb{A}_2$, c'est-à-dire déterminer l'ensemble de ses composantes. En notation de Voigt (voir annexe A) dans la base $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$, nous obtenons :

$$\mathbb{A}_2 = \begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}_{(\underline{e}_1,\underline{e}_2,\underline{e}_3)} \tag{C.59}$$

avec les trois sous-matrices 0 (désignant la matrice $3 * 3$ remplie de zéros) et A_1, A_2 définies de la manière suivante :

$$A_1 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} \alpha_{sph} + \alpha_{11-33} + \alpha_{12+21} & \alpha_{sph} + \alpha_{11-33} - 2\alpha_{12+21} & \alpha_{sph} - 2\alpha_{11-33} + \alpha_{12+21} \\ \alpha_{sph} - \alpha_{12+21} & \alpha_{sph} + 2\alpha_{12+21} & \alpha_{sph} - \alpha_{12+21} \\ \alpha_{sph} - \alpha_{11-33} & \alpha_{sph} - \alpha_{11-33} & \alpha_{sph} + 2\alpha_{11-33} \end{bmatrix} \tag{C.60}$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} \alpha_{13+31} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{13+31} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{12+21} \end{bmatrix} \tag{C.61}$$

Les tenseurs $\mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}}$ et $\mathbb{A}_2^c$ sont respectivement construits de la même façon en remplaçant α par β et γ.

C.3.4 Ensemble d'inhomogénéités d'orientation répartie de façon isotrope

Pour terminer, on considère un ensemble (infini) de problèmes auxiliaires semblables à celui représenté sur la figure C.4, se distinguant uniquement par l'orientation de la normale aux feuillets (ou encore par l'orientation de l'axe d'isotropie transverse de l'inhomogénéité). On considère une distribution isotrope de cette orientation. Il s'agit de déterminer les déformations (en incluant et en excluant la discontinuité de déplacement à l'interface) et contraintes moyennes sur l'ensemble des inhomogénéités.

On commence par écrire les tenseurs de localisation $\mathbb{A}_2^{\theta,\phi}$, $\mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}}^{\theta,\phi}$ et $\mathbb{A}_2^{c\ \theta,\phi}$ concernant une inhomogénéité dont l'axe d'isotropie transverse est l'axe $\underline{e}_r$ de la base sphérique. Ainsi, l'orientation de l'inhomogénéité est paramétrée par les angles θ et ϕ. On dispose déjà des expressions de ces tenseurs lorsque l'axe est $\underline{e}_3$ (voir (C.59), (C.60) et (C.61)). Il suffit alors de construire un tenseur présentant dans la base $(\underline{e}_\theta, \underline{e}_\phi, \underline{e}_r)$ les mêmes composantes que celles du tenseur (C.59) dans la base $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$. On obtient ainsi $\mathbb{A}_2^{\theta,\phi}$. Il en est de même pour établir $\mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}}^{\theta,\phi}$ et $\mathbb{A}_2^{c\ \theta,\phi}$.

Il reste à déterminer la moyenne de la déformation sur toutes les inhomogénéités, en tenant compte du caractère isotrope de la distribution d'orientation :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2^{iso} = \mathbb{A}_2^{iso} : \boldsymbol{E}_0 \quad \text{avec} \quad \mathbb{A}_2^{iso} = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{A}_2^{\theta,\phi} \frac{\sin\theta}{4\pi} \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \tag{C.62}$$

L'exposant *iso* rappelle justement le fait que l'on considère un ensemble d'inhomogénéités d'orientation répartie de façon isotrope. Le calcul mène à un tenseur isotrope, dont la partie sphérique (sur $\mathbb{J}$) est nulle (ce qui était prévisible puisque l'inhomogénéité ne se déforme pas sous l'effet d'une déformation auxiliaire sphérique) :

$$\mathbb{A}_2^{iso} = 2\frac{3k_0 + 4\mu_0}{9k_0 + 8\mu_0}\mathbb{K} \tag{C.63}$$

Selon le même principe, on obtient respectivement les tenseurs $\mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}}^{iso}$ et $\mathbb{A}_2^{c,iso}$ par moyenne angulaire de $\mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}}^{\theta,\phi}$ et $\mathbb{A}_2^{c\ \theta,\phi}$:

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_{2\cup\mathcal{I}}^{iso} = {} & \frac{3k_0 + 4\mu_0}{K_n r_0 + 4\mu_0}\mathbb{J} + \mathbb{K}\frac{3k_0 + 4\mu_0}{5(9k_0 + 8\mu_0)} * \\ & \frac{30(k_0 + 2\mu_0)K_n K_t r_0^2 + \mu_0[3(77k_0 + 104\mu_0)K_n + 2(117k_0 + 184\mu_0)K_t]r_0 + 200\mu_0^2(9k_0 + 8\mu_0)}{3(k_0 + 2\mu_0)K_n K_t r_0^2 + \mu_0[3(5k_0 + 8\mu_0)K_n + 2(9k_0 + 16\mu_0)K_t]r_0 + 8\mu_0^2(9k_0 + 8\mu_0)} \end{aligned} \tag{C.64}$$

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_2^{c,iso} = {} & \frac{3k_0 + 4\mu_0}{K_n r_0 + 4\mu_0} K_n r_0 \mathbb{J} + \frac{3}{5}\mu_0(3k_0 + 4\mu_0) * \\ & \frac{5K_n K_t r_0^2 + 8\mu_0(2K_n + 3K_t)r_0}{3(k_0 + 2\mu_0)K_n K_t r_0^2 + \mu_0[3(5k_0 + 8\mu_0)K_n + 2(9k_0 + 16\mu_0)K_t]r_0 + 8\mu_0^2(9k_0 + 8\mu_0)}\mathbb{K} \end{aligned} \tag{C.65}$$

Conclusion et perspectives

L'objectif premier de ce travail était d'évaluer si les techniques d'homogénéisation des milieux aléatoires basées sur les schémas inspirés de la solution d'Eshelby étaient susceptibles de contribuer à optimiser la formulation des matériaux de construction que sont le plâtre pris et la pâte de ciment. Certes, ces derniers ont un caractère très familier et traditionnel, lié à leur usage au quotidien depuis près de 200 ans, sans aller jusqu'à remonter à l'Empire Romain[1]. Ceci ne contribue pas à leur conférer une image *high-tech*. Et pourtant, de nombreuses questions restent ouvertes, tout particulièrement en ce qui concerne la microstructure du ciment. Les développements que nous avons pu mener se sont donc heurtés au relatif manque de connaissances sur ces matériaux. Malgré cela, nous espérons avoir contribué à apporter une réponse positive quant à la pertinence de l'application des techniques d'homogénéisation des milieux aléatoires aux matériaux plâtre et ciment.

Dans la **partie I**, nous avons cherché à identifier des familles de microstructures pour lesquelles le schéma auto-cohérent fournit une approximation intéressante de l'élasticité effective. En particulier, nous avons analysé en détail le cas d'une forme ellipsoïdale de révolution allongée (*prolate*) dans le problème auxiliaire visant à estimer la déformation moyenne dans le solide. En considérant une distribution isotrope de ces formes, le schéma auto-cohérent produit des estimations de caractéristiques élastiques effectives très voisines de celles obtenues par des calculs en éléments finis sur des microstructures constituées d'un enchevêtrement de particules allongées.

Une extension qui nous semble intéressante et accessible serait de reprendre cette confrontation entre le schéma auto-cohérent et le numérique dans le cas de particules aplaties.

Dans la **partie II**, nous nous sommes consacrés au matériau plâtre pris, modélisé comme un enchevêtrement d'aiguilles. Nous avons proposé un schéma d'homogénéisation rendant compte de l'élasticité, et celui-ci a été confronté à des mesures expérimentales. Une fois le comportement élastique correctement capturé par le modèle, il devient possible d'envisager des phénomènes plus complexes. Nous avons mis l'accent sur la limite élastique, en proposant un modèle s'appuyant sur la rupture fragile des cristaux. Les limites élastiques en traction et compression simple ont été comparées à des données expérimentales. Nous nous sommes ensuite tournés vers la modélisation du comportement post-limite élastique (post-pic), c'est-à-dire ce qu'il advient lorsque la déformation macroscopique imposée à une éprouvette de plâtre pris continue d'augmenter au delà de la limite élastique.

Dans les applications pratiques, le plâtre pris présente très fréquemment des bulles en fraction volumique importante. Le modèle d'élasticité a été adapté pour en tenir compte. Il conviendrait d'en faire de même pour les modèles de limite élastique et de comportement post-pic, afin d'en accroître le champ d'application industriel.

Dans la **partie III**, nous nous sommes consacrés aux silicates de calcium hydratés (C-S-H), principaux hydrates des pâtes de ciment Portland. Ces derniers semblent présenter une morphologie de type assemblage de particules aplaties, les particules étant elles-mêmes constituées d'un empilement de feuillets. Comme il est très délicat de fabriquer une éprouvette de C-S-H pur, nous avons eu recours à des données expérimentales sur pâtes de ciment pour valider nos approches. Il a donc fallu mettre en œuvre une étape supplémentaire d'homogénéisation afin d'estimer le comportement de la pâte. Nous avons commencé par proposer un modèle micromécanique multiéchelle de pâte de ciment, descendant jusqu'à l'échelle de la particule solide de C-S-H (quelques dizaines de nanomètres). Cette étape de notre travail a été rendue délicate par le manque de consensus de la communauté scientifique sur la morphologie des pâtes et des C-S-H. Nous avons donc dû recourir à une approche de type essai - erreur, dans laquelle les méthodes de changement

[1] Le dôme du Panthéon, à Rome, est constitué de béton.

d'échelle nous ont servi à tester les modèles morphologiques envisagés vis-à-vis de mesures expérimentales de l'élasticité. Finalement, nous avons abouti à un modèle morphologique donnant des prédictions satisfaisantes de l'élasticité. Il est à noter que la forme des particules élémentaires de solide a joué, dans cette discussion, un rôle décisif. Des améliorations sont néanmoins nécessaires au très jeune âge. Nous avons ensuite profité de ce modèle morphologique pour explorer les déformations différées de la pâte, en attribuant l'origine physique du fluage macroscopique à un mécanisme de glissement feuillet sur feuillet au sein des particules de C-S-H. Les développements ont conduit à une discussion encourageante sur les différents comportements susceptibles d'être observés à court et long terme. L'impact considérable de la porosité et du rapport d'aspect particulaire mérite d'être souligné. Cependant, la confrontation expérimentale montre que des ajustements sont nécessaires. Nous avons également mis au point un modèle de limite élastique d'un amas de plaquettes, morphologie semblable à celle envisagée pour le gel de C-S-H. Le changement d'échelle supplémentaire, permettant d'atteindre la pâte, reste à accomplir.

Comme perspectives de cette partie consacrée aux pâtes de ciment, nous nous devons de citer le passage aux mortiers et bétons, qui est indispensable pour envisager une application industrielle des modèles développés. Il convient aussi de rappeler que le modèle de pâte de ciment que nous avons développé est relativement simple du point de vue des phases prises en compte : nous n'avons envisagé que les C-S-H (certes séparés en deux types distincts) comme hydrates et les phases anhydres sont restées homogènes. Une extension de ce travail serait de considérer les autres hydrates, portlandites et aluminates, et de voir les grains de clinker comme composites constitués de plusieurs phases anhydres.

Dans la **partie IV**, plus académique que les deux parties précédentes car non directement consacrée à un matériau particulier, nous avons exploré l'effet de mécanismes ayant lieu dans les joints séparant les particules solides. Pour des raisons de difficulté technique, cette étude a été restreinte aux particules sphériques, ce qui limite l'application au plâtre et aux pâtes de ciment au plan qualitatif. Nous avons d'abord envisagé la modélisation du critère de rupture d'un assemblage de grains, en considérant plusieurs mécanismes de rupture, soit intragranulaire, soit intergranulaire soit simultanément intra et intergranulaire. Cette dernière situation permet d'entrevoir des perspectives d'application prometteuses aux grès. Nous avons ensuite considéré le fluage d'un assemblage de particules, selon que les grains sont élastiques et les joints visqueux, ou l'inverse. Le premier cas représente le mécanisme de fluage couramment admis pour le plâtre pris.

Bien évidemment, une extension qui nous semble riche d'applications potentielles serait de considérer des particules non plus sphériques, mais de forme ellipsoïdales de révolution.

Terminons par une remarque importante sur notre utilisation abondante du schéma autocohérent. Ce schéma est le mieux placé, parmi les schémas d'homogénéisation basés sur le résultat de l'inhomogénéité d'Eshelby, pour rendre compte de morphologies de type granulaire ou polycristalline [132]. Son utilisation semble donc naturelle pour les matériaux auxquels nous nous sommes intéressés, puisque, à une certaine échelle, la morphologie de ceux-ci est de nature granulaire et désordonnée. Nous reconnaissons cependant avoir accordé une confiance a priori (excessive ?) à ce schéma, en l'emmenant sur des terrains pour lesquels il n'a pas été initialement conçu et pour lesquels il n'est pas habituellement utilisé. Ainsi, on peut se demander quel est théoriquement le lien entre la forme des inhomogénéités employées dans des problèmes d'Eshelby pour estimer des déformations moyennes et la forme réelle des particules dont les matériaux sont constitués. On sait en effet que le choix du rapport d'aspect de l'inhomogénéité dans le problème d'Eshelby concerne non seulement la forme des particules mais aussi leur distribution spatiale [96]. Cependant, force est de constater que la forme sphérique n'est pas en accord avec l'expé-

rience[2], puisqu'on a pu mettre en évidence des compacts de C-S-H [39] de porosité de l'ordre de 0.6 doués d'une élasticité isotrope correspondant à un module de Young de 3 GPa... Par ailleurs, dès lors que l'on exploite dans un schéma auto-cohérent des inhomogénéités de plusieurs formes différentes, on sait bien que la symétrie majeure du tenseur de rigidité auto-cohérent obtenu n'est plus nécessairement assurée. Nous nous sommes limités à vérifier numériquement la symétrie des tenseurs de rigidité auto-cohérents obtenus dans les différentes applications envisagées ici. Malgré les doutes légitimes que notre démarche peut soulever, la confiance accordée au schéma auto-cohérent ne semble pas avoir été déçue par la confrontation tant avec l'expérimental qu'avec le numérique. Pourtant, les raisons de ces quelques succès, si le lecteur veut bien nous autoriser ce terme, restent à clarifier.

[2] Pour plus de détails à ce sujet, voir [110].

Bibliographie

[1] J. Abate and W. Whitt. A unified framework for numerically inverting Laplace transforms. *INFORMS Journal on Computing*, 18(4):408–421, 2006. [p. 155, 162]

[2] M. A. Ali and B. Singh. The effect of porosity on the properties of glass fibre-reinforced gypsum plaster. *Journal of Materials Science*, 10(11):1920–1928, 1975. [p. 37, 38, 44, 59, 64, 76]

[3] S. Alsadi, E. C. Combe and Y.-S. Cheng. Properties of gypsum with the addition of gum arabic and calcium hydroxide. *Journal of Prosthetic Dentistry*, 76(5):530–534, 1996. [p. 38, 59, 64]

[4] E. Arzt. The influence of an increasing particle coordination on the densification of spherical powders. *Acta Metallurgica*, 30(10):1883–1890, 1982. [p. 182]

[5] R. Barbarulo. *Comportement des matériaux cimentaires : actions des sulfates et de la température.* Thèse de doctorat, École nationale supérieure de Cachan, France, 2002. [p. 148]

[6] J.-F. Barthélémy. *Approche micromécanique de la rupture et de la fissuration dans les géomatériaux.* Thèse de doctorat, Enpc, Champs-sur-Marne, France, 2005. [p. 132, 137, 172, 175]

[7] J.-F. Barthélémy et L. Dormieux. Détermination du critère de rupture macroscopique d'un milieu poreux par homogénéisation non linéaire. *Comptes Rendus Mécanique*, 331(4) :271–276, 2003. [p. 204]

[8] F. Benboudjema. *Modélisation des déformations différées du béton sous sollicitations biaxiales. Application aux enceintes de confinement de bâtiments réacteurs des centrales nucléaires.* Thèse de doctorat, Université de Marne-la-Vallée, Champs-sur-Marne, France, 2002. [p. 148]

[9] D. P. Bentz. Three-dimensional computer simulation of Portland cement hydration and microstructure development. *Journal of the American Ceramic Society*, 80(1):3–21, 1997. [p. 83, 88, 89]

[10] D. P. Bentz. *CEMHYD3D: A three dimensional cement hydration and microstructural development modelling package.* NISTIR 6485, U.S. Department of Commerce, 2000. [p. 88, 89]

[11] O. Bernard, F.-J. Ulm and E. Lemarchand. A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials. *Cement and Concrete Research*, 33(9):1293–1309, 2003. [p. 96]

[12] N. Bilger, M. Bornert, F. Auslender, A. Zaoui et R. Masson. *Surface d'écoulement macroscopique des milieux poreux : modification du critère de Gurson par une approche micromécanique.* Dans *15e congrès français de mécanique*, Nancy, France, 2001. [p. 202, 204]

[13] S. Bishnoi and K. Scrivener. *Optimised continuum cement hydration modelling.* In *2nd international symposium on advances in concrete through science and engineering*, pp. 63–74, Quebec, Canada, 2006. [p. 97, 112]

[14] M. Bornert, C. Stolz and A. Zaoui. Morphological representative pattern-based bounding in elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(3):307–331, 1996. [p. 100, 120]

[15] A. Boumiz, D. Sorrentino, C. Vernet and F. Cohen Tenoudji. *Modelling the development of the elastic moduli as a function of the degree of hydration of cement pastes and mortars.* In *Why does cement set? an interdisciplinary approach, Second* Rilem *workshop on hydration and setting*, Dijon, France, 1997. [p. 90, 91, 93, 123, 124, 125, 126, 128]

[16] J. F. Brotchie and G. Urbach. The flexural behaviour of fibrous plaster sheets. *Australian Journal of Applied Science*, 14(1):69–93, 1962. [p. 76]

[17] B. Budiansky. On the elastic moduli of some heterogeneous materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13:223–227, 1965. [p. 10, 14]

[18] J. Byfors. *Plain concrete at early ages.* PhD thesis, Swedish cement and concrete institute, Sweden, 1980. [p. 92]

[19] *Commissariat à l'Énergie Atomique CEA - DEN/DM2S/SEMT.* [p. 17]

[20] R. M. Christensen and K. H. Lo. Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 27(4):315–330, 1979. [p. 112]

[21] A. Colak. Physical and mechanical properties of polymer-plaster composites. *Materials Letters*, 60(16):1977–1982, 2006. [p. 37, 38, 44, 59, 64]

[22] G. Constantinides. *Invariant mechanical properties of calcium silicate hydrates (C-S-H) in cement-based materials: instrumented nanoindentation and microporomechanical modelling.* PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, Boston, Usa, 2005. [p. 108]

[23] G. Constantinides and F.-J. Ulm. The effect of two types of C-S-H on the elasticity of cement-based materials: results from nanoindentation and micromechanical modelling. *Cement and Concrete Research*, 34(1):67–80, 2004. [p. 96, 119]

[24] G. Constantinides and F.-J. Ulm. The nanogranular nature of C-S-H. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(1):64–90, 2007. [p. 96]

[25] A.-C. Courault. *Stœchiométrie des C-S-H et propriétés dans différents environnements chimiques. Modélisation expérimentale.* Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, Dijon, France, 2001. [p. 28, 148]

[26] O. Coussy. *Poromechanics.* Wiley, 2003. [p. 123]

[27] C. Dany. *Étude de l'influence de la microstructure sur les propriétés mécaniques du plâtre sec.* Mémoire de master, génie physique des matériaux, Insa, Lyon, France, 1995. [p. 64]

[28] W. De Jong and J. Bouman. Zeitschrift für kristallographie. 100:275, 1938. [p. 40]

[29] S. Diamond. The microstructure of cement paste and concrete - a visual primer. *Cement and Concrete Composites*, 26(8):919–933, 2004. [p. 107]

[30] L. Dormieux, D. Kondo and F.-J. Ulm. *Microporomechanics.* Wiley, 2006. [p. 9, 14, 21, 124, 172, 174, 175, 191, 204]

[31] L. Dormieux, E. Lemarchand et J. Sanahuja. Comportement macroscopique des matériaux poreux à microstructure en feuillets. *Comptes Rendus Mécanique*, 334(5) :304–310, 2006. [p. 123, 148, 149, 216]

[32] L. Dormieux, A. Molinari and D. Kondo. Micromechanical approach to the behavior of poroelastic materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(10):2203–2231, 2002. [p. 177]

[33] L. Dormieux, J. Sanahuja et Y. Maalej. Résistance d'un polycristal avec interfaces intergranulaires imparfaites. *Comptes Rendus Mécanique*, 335(1) :25–31, 2007. [p. 172, 177, 180, 199]

[34] L. Dormieux, J. Sanahuja and S. Maghous. Influence of capillary effects on strength of non-saturated porous media. *Comptes Rendus Mécanique*, 334(1):19–24, 2006. [p. 204]

[35] G. J. Dvorak and A. Bahei-El-Din. *Inelastic composite materials: transformation analysis and experiments.* In P. Suquet (ed.): *Continuum micromechanics.* Cism Courses and Lectures n.377, Springer, 1997. [p. 204]

[36] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 241(1226):376–396, 1957. [p. 10, 14, 15, 19, 21, 43, 100, 184, 188, 217, 224]

[37] S. Eve, M. Gomina, A. Gmouh, A. Samdi, R. Moussa and G. Orange. Microstructural and mechanical behaviour of polyamide fibre-reinforced plaster composites. *Journal of the European Ceramic Society*, 22(13):2269–2275, 2002. [p. 76]

[38] C. W. Fairhurst. Compressive properties of dental gypsum. *Journal of Dental Research*, 39(4):812–824, 1960. [p. 38, 59, 64]

[39] R. F. Feldman and J. J. Beaudoin. Microstructure and strength of hydrated cement. *Cement and Concrete Research*, 6(3):389–400, 1976. [p. 241]

[40] N. A. Fleck. On the cold compaction of powders. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43(9):1409–1431, 1995. [p. 182]

[41] A. Fritsch, L. Dormieux and C. Hellmich. Porous polycristals built up by uniformly and axisymmetrically oriented needles: homogenization of elastic properties. *Comptes Rendus Mécanique*, 334(3):151–157, 2006. [p. 22, 26, 44, 48, 69, 80]

[42] A. Fritsch, L. Dormieux, C. Hellmich and J. Sanahuja. *Tissue engineering using ceramics and polymers*, ch. Micromechanics of hydroxyapatite-based biomaterials and tissue engineering scaffolds, pp. 529–565. Woodhead, 2007. [p. 47]

[43] E. J. Garboczi, K. A. Snyder, J. F. Douglas and M. F. Thorpe. Geometrical percolation threshold of overlapping ellipsoids. *Physical Review E*, 52(1):819–828, Jul 1995. [p. 26]

[44] S. Garcia-Boivin. *Retrait au jeune âge du béton : développement d'une méthode expérimentale et contribution à l'analyse physique du retrait endogène.* Thèse de doctorat, Lcpc, France, 1999. [p. 104]

[45] S. Garrault, E. Finot, E. Lesniewska and A. Nonat. Study of C-S-H growth on C_3S surface during its early hydration. *Materials and Structures*, 38(4):435–442, 2005. [p. 97]

[46] S. Garrault-Gauffinet. *Étude expérimentale et par simulation numérique de la cinétique de croissance et de la structure des hydrosilicates de calcium, produits d'hydratation des silicates tricalcique et dicalcique.* Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, Dijon, France, 1998. [p. 28, 89, 96, 108, 109, 111]

[47] D. P. Gaver. Observing stochastic processes and approximate transform inversion. *Operations Research*, 14(3):444–459, 1966. [p. 155, 162]

[48] A. Gmira. *Étude texturale et thermodynamique d'hydrates modèles du ciment.* Thèse de doctorat, Université d'Orléans, France, 2003. [p. 83, 148]

[49] A. Gmira, M. Zabat, R. J.-M. Pellenq and H. Van Damme. Microscopic physical basis of the poromechanical behavior of cement-based materials. *Materials and Structures*, 37(1):3–14, 2004. [p. 166]

[50] A. Gmouh, S. Eve, A. Samdi, R. Moussa, J. Hamel and M. Gomina. Changes in plaster microstructure by pre-stressing or by adding gypsum grains: microstructural and mechanical investigations. *Materials Science and Engineering A*, 352:325–332, 2003. [p. 38, 59, 64]

[51] D. W. Hadley, W. L. Dolch and S. Diamond. On the occurrence of hollow-shell hydration grains in hydrated cement paste. *Cement and Concrete Research*, 30(1):1–6, 2000. [p. 110]

[52] C.-J. Haecker, E. J. Garboczi, J. W. Bullard, R. B. Bohn, Z. Sun, S. P. Shah and T. Voigt. Modeling the linear elastic properties of Portland cement paste. *Cement and Concrete Research*, 35(10):1948–1960, 2005. [p. 83, 90, 91, 102, 103, 106, 117, 122]

[53] Z. Hashin. The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29:143–150, 1962. [p. 112]

[54] Z. Hashin. The spherical inclusion with imperfect interface. *Journal of Applied Mechanics*, 58(2):444–449, 1991. [p. 98]

[55] S. Haussühl. Elastische und thermoelastiche eigenschaften von $CaSO_4$, $2H_2O$ (gips). *Zeitschrift für Kristallographie*, 122:311–314, 1965. [p. 40]

[56] A. S. Helle, K. E. Easterling and M. F. Ashby. Hot-isostatic pressing diagrams: new developments. *Acta Metallurgica*, 33(12):2163–2174, 1985. [p. 182]

[57] C. Hellmich, L. Dormieux, A. Fritsch and J. Sanahuja. Mechanical behaviour of hydroxyapatite biomaterials: an experimentally validated micromechanical model for elasticity and strength. *Journal of Biomedical Materials Research part A*, 2008, in press. [p. 28, 44]

[58] R. A. Helmuth and D. H. Turk. *Elastic moduli of hardened Portland cement and tricalcium silicate pastes: effect of porosity.* In *Symposium on Structure of Portland Cement Paste and Concrete*, pp. 135–144, 1966. [p. 90, 92, 118, 119]

[59] É. Hervé and A. Zaoui. n-layered inclusion-based micromechanical modelling. *International Journal of Engineering Science*, 31(1):1–10, 1993. [p. 47, 100, 112, 120, 224]

[60] R. Hill. A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(4):213–222, 1965. [p. 10, 14]

[61] H. M. Jennings. A model for the microstructure of calcium silicate hydrate in cement paste. *Cement and Concrete Research*, 30(1):101–116, 2000. [p. 89, 90]

[62] H. M. Jennings and S. K. Johnson. Simulation of microstructure development during the hydration of a cement compound. *Journal of the American Ceramic Society*, 69(11):790–795, 1986. [p. 97, 112]

[63] H. M. Jennings, J. J. Thomas, J. S. Gevrenov, G. Constantinides and F. J. Ulm. *Nanostructure of C-S-H gel in cement paste as a function of curing conditions and relative humidity.* In *Creep, shrinkage and durability of concrete and concrete structures, proceedings of Concreep 7*, pp. 19–37, Nantes, France, 2005. IA-Concreep. [p. 148]

[64] D. Jeulin, P. Monnaie and F. Péronnet. Gypsum morphological analysis and modeling. *Cement and Concrete Composites*, 23:299–311, 2001. [p. 28]

[65] M. C. G. Juenger, V. H. R. Lamour, P. J. M. Monteiro, E. M. Gartner and G. P. Denbeaux. Direct observation of cement hydration by soft X-ray transmission microscopy. *Journal of Materials Science Letters*, 22(19):1335–1337, 2003. [p. 96, 107]

[66] A. A. Khalil. Gypsum plasters, II. constitution and properties of the prepared β-hemihydrates. *Journal of Applied Chemistry and Biotechnology*, 22:703–709, 1972. [p. 38, 59, 64]

[67] W. F. Klima. *The kinetics of crystal growth of calcium sulfate dihydrate.* PhD thesis, State University of New York at Buffalo, Usa, 1983. [p. 41]

[68] W. Kreher. Residual stresses and stored elastic energy of composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(1):115–128, 1990. [p. 133, 174, 175]

[69] E. Kröner. Bounds for effective elastic moduli of disordered materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 25:137–155, 1977. [p. 14, 111]

[70] T. H. Le, L. Dormieux, L. Jeannin, Y. Maalej and J. Sanahuja. Micromechanical models of the strength of a sandstone. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, submitted in 2008. [p. 203]

[71] M. H. Le Chatelier. *Recherches expérimentales sur la constitution des mortiers hydrauliques.* Thèse de doctorat, 1887. [p. 86]

[72] R. Le Roy. *Déformations instantanées et différées des bétons à hautes performances.* Thèse de doctorat, Enpc, Champs-sur-Marne, France, 1995. [p. 93, 164, 165, 166]

[73] R. P. Lohtia. Mechanism of creep in concrete. *Roorkee University Research Journal*, 12(1–2):37–47, 1970. [p. 148]

[74] B. Loret, T. Hueckel and A. Gajo. Chemo-mechanical coupling in saturated porous media: elastic-plastic behaviour of homoionic expansive clays. *International Journal of Solids and Structures*, 39(10):2773–2806, 2002. [p. 28]

[75] A. E. H. Love. *A treatise on the mathematical theory of elasticity.* Dover, New-York, 1944. [p. 226]

[76] Y. Maalej. *Comportement mécanique d'un milieu granulaire injecté par un coulis de ciment : étude expérimentale et modélisation micromécanique.* Thèse de doctorat, Enpc, Champs-sur-Marne, France, 2007. [p. 177, 182, 196, 203]

[77] Y. Maalej, L. Dormieux et J. Sanahuja. Comportement élastique non linéaire d'un milieu granulaire : approche micromécanique. *Comptes Rendus Mécanique*, 335(8) :461–466, 2007. [p. 180]

[78] Y. Maalej, L. Dormieux and J. Sanahuja. Micromechanical approach to the failure criterion of granular media. *European Journal of Mechanics, A/Solids*, submitted in 2007. [p. 174, 177, 182, 183, 186, 196, 203]

[79] A. J. Majumdar. Glass fibre reinforced cement and gypsum products. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 319(1536):69–78, 1970. [p. 76]

[80] S. Meille. *Étude du comportement mécanique du plâtre pris en relation avec sa microstructure.* Thèse de doctorat, Insa, Lyon, France, 2001. [p. 28, 31, 33, 36, 37, 38, 41, 44, 45, 46, 47, 48, 52, 206]

[81] S. Meille and E. J. Garboczi. Linear elastic properties of 2D and 3D models of porous materials made from elongated objects. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 9(5):371–390, 2001. [p. 24, 25]

[82] F. Merlin, H. Lombois, S. Joly, N. Lequeux, J.-L. Halary and H. Van Damme. Cement-polymer and clay-polymer nano- and meso-composites: spotting the difference. *Journal of Materials Chemistry*, 12:3308–3315, 2002. [p. 89]

[83] J. Minet. *Synthèse et caractérisation de silicates de calcium hydratés hybrides.* Thèse de doctorat, Université de Paris-sud, U.F.R. scientifique d'Orsay, France, 2003. [p. 83, 89]

[84] J. K. Mitchell. *Fundamentals of soil behavior.* Wiley, 1993. [p. 28]

[85] T. Mori and K. Tanaka. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21(5):1605–1609, 1973. [p. 10]

[86] C. Moyne and M. A. Murad. Electro-chemo-mechanical couplings in swelling clays derived from a micro/macro-homogenization procedure. *International Journal of Solids and Structures*, 39(25):6159–6190, 2002. [p. 28]

[87] A. Nonat. The structure and stoichiometry of the C-S-H. *Cement and Concrete Research*, 34(9):1521–1528, 2004. [p. 83, 148]

[88] A. Nonat, A.-C. Courault and D. Damidot. A new model describing the variation of Ca/Si ratio with lime concentration in solution. *Cement Wapno Beton*, 8:184–191, 2001. [p. 28, 148]

[89] R. E. Oberholster. *Pore structure, permeability and diffusivity of hardened cement paste and concrete in relation to durability: status and prospects.* In *8th International congress on chemistry of cement*, pp. 323–335, Rio de Janeiro, Brazil, 1986. [p. 109]

[90] R. J.-M. Pellenq. *communication personnelle.* 2007. [p. 123]

[91] R. J.-M. Pellenq, N. Lequeux and H. Van Damme. Engineering the bonding scheme in C-S-H: The iono-covalent framework. *Cement and Concrete Research*, 38(2):159–174, 2008. [p. 123, 166]

[92] K. K. Phani. Young's modulus-porosity relation in gypsum systems. *American Ceramic Society bulletin*, 65(12):1584–1586, 1986. [p. 37, 38, 44]

[93] B. Pichler, C. Hellmich and J. Eberhardsteiner. Spherical and acicular representation of hydrates in a micromechanical model for cement paste - Prediction of early-age elasticity and strength. *Acta Mechanica*, 2008. [p. 28]

[94] C. Plassard. *Étude fondamentale des mécanismes à l'origine de la cohésion des nanoparticules de silicates de calcium hydratés par microscopie à force atomique.* Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, Dijon, France, 2005. [p. 123]

[95] P. Ponte Castañeda. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 39(1):45–71, 1991. [p. 132, 135, 172, 175, 190]

[96] P. Ponte Castañeda and J. R. Willis. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43(12):1919–1951, 1995. [p. 240]

[97] T. C. Powers and T. L. Brownyard. Studies of the physical properties of hardened Portland cement paste (nine parts). *Journal of the American Concrete Institute*, 43, oct. 1946 to april 1947. [p. 85, 114]

[98] F. Péronnet. *Caractérisation du comportement mécanique des plâtres.* Insa Lyon, France, 1994. Rapport de stage, génie physique des matériaux. [p. 64]

[99] T. Rahman, W. Lutz, R. Finn, S. Schmauder and S. Aicher. Simulation of the mechanical behavior and damage in components made of strain softening cellulose fiber reinforced gypsum materials. *Computational Materials Science*, 39(1):65–74, 2007. [p. 76]

[100] I. G. Richardson. The nature of the hydration products in hardened cement pastes. *Cement and Concrete Composites*, 22(2):97–113, 2000. [p. 107]

[101] W. Ruetz. *An hypothesis for the creep of the hardened cement paste and the influence of simultaneous shrinkage.* In *Proceedings of the Structure of Concrete and its Behavior under Load*, pp. 365–387, 1968. [p. 148]

[102] J. Salençon. *Viscoélasticité linéaire appliquée au calcul des structures.* Enpc, 1996. [p. 151]

[103] J. Salençon. *Introduction à l'élasto-plasticité et au calcul à la rupture.* École polytechnique, 2000. [p. 52, 172]

[104] J. Salençon. *Mécanique des milieux continus.* École polytechnique, 2001. [p. 9]

[105] M. E. Sanad, E. C. Combe and A. A. Grant. The use of additives to improve the mechanical properties of gypsum products. *Journal of Dental Research*, 61(6):808–810, 1982. [p. 38, 59, 64]

[106] J. Sanahuja. *Retrait de séchage et rupture d'un milieu poreux : approche micromécanique.* Mémoire de master, msms, Enpc, Champs-sur-Marne, France, 2004. [p. 166]

[107] J. Sanahuja et L. Dormieux. Résistance d'un milieu poreux à phase solide hétérogène. *Comptes Rendus Mécanique*, 333(11) :818–823, 2005. [p. 98, 100, 101, 132]

[108] J. Sanahuja, L. Dormieux and G. Chanvillard. Modelling elasticity of a hydrating cement paste. *Cement and Concrete Research*, 37(10):1427–1439, 2007. [p. 107]

[109] J. Sanahuja, L. Dormieux et G. Chanvillard. Modélisation de l'élasticité d'une pâte de ciment au jeune âge. *Revue Européenne de Génie Civil*, 11(9–10) :1241–1268, 2007. [p. 107]

[110] J. Sanahuja, L. Dormieux and G. Chanvillard. A reply to the discussion "Does C-S-H particle shape matter?" F.-J. Ulm and H. M. Jennings of the paper "Modelling elasticity of a hydrating cement paste", CCR 37 (2007). *Cement and Concrete Research*, 38(8–9):1130–1134, 2008. [p. 96, 241]

[111] E. Sanchez-Palencia. Comportements local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes. *International Journal of Engineering Science*, 12(4) :331–351, 1974. [p. 17]

[112] H. Schinkel. *Creep of gypsum under flexural load.* Techn. rep., Bouwcentrum Advies bv, 1993. [p. 38, 59, 64]

[113] B. Simon et M. Bienfait. Structure et mécanisme de croissance du gypse. *Acta Crystallographica*, 19(5) :750–756, 1965. [p. 41]

[114] V. Smilauer and Z. Bittnar. Microstructure-based micromechanical prediction of elastic properties in hydrating cement pastes. *Cement and Concrete Research*, 36(9):1708–1718, 2006. [p. 83]

[115] H. Stehfest. Algorithm 368: numerical inversion of Laplace transforms. *Communications of the Association for Computing Machinery*, 13(1):47–49, 1970. [p. 155, 162]

[116] C. Stolz and A. Zaoui. Combined variational approach and morphological analysis to the behaviour of inhomogeneous elastic media. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris, Série II*, 312:143–150, 1991. [p. 100, 120]

[117] P. Suquet. Overall properties of nonlinear composites: a modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda's nonlinear variational procedure. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris, Série II*, 301:563–571, 1995. [p. 132, 135, 172, 175]

[118] P. Suquet. *Effective behavior of non linear composites.* In P. Suquet (ed.): *Continuum micromechanics.* Cism Courses and Lectures n.377, Springer, 1997. [p. 132, 135, 172, 175]

[119] B. T. Tamtsia and J. J. Beaudoin. Basic creep of hardened cement paste, a re-examination of the role of water. *Cement and Concrete Research*, 30(9):1465–1475, 2000. [p. 148]

[120] E. i. Tazawa. Effect of self stress on flexural strength of gypsum-polymer composites. *Advanced Cement Based Materials*, 7(1):1–7, 1998. [p. 37, 38, 44, 59, 64]

[121] P. D. Tennis and H. M. Jennings. A model for two types of calcium silicate hydrate in the microstructure of Portland cement pastes. *Cement and Concrete Research*, 30(6):855–863, 2000. [p. 107, 113, 114, 115, 125, 126]

[122] J. M. Torrenti and F. Benboudjema. Mechanical threshold of cementitious materials at early age. *Materials and Structures*, 38(3):299–304, 2005. [p. 83, 92, 93, 116, 123, 124, 125]

[123] F.-J. Ulm, G. Constantinides and F. H. Heukamp. Is concrete a poromechanics material? - A multiscale investigation of poroelastic properties. *Materials and Structures*, 37(1):43–58, 2004. [p. 96]

[124] F.-J. Ulm, A. Delafargue and G. Constantinides. *Experimental microporomechanics.* In L. Dormieux and F.-J. Ulm (eds.): *Applied micromechanics of porous materials.* Cism Courses and Lectures n.480, Springer, 2005. [p. 102, 123]

[125] F.-J. Ulm and H. M. Jennings. Does C-S-H particle shape matter? A discussion of the paper "Modelling elasticity of a hydrating cement paste", by J. Sanahuja, L. Dormieux and G. Chanvillard, CCR 37 (2007). *Cement and Concrete Research*, 38(8–9):1126–1129, 2008. [p. 96]

[126] K. van Breugel. *Simulation of hydration and formation of structure in hardening cement-based materials.* PhD thesis, Faculty of civil engineering, Delft University of technology, Delft, Netherlands, 1991. [p. 88, 89, 97, 112]

[127] K. van Breugel. Numerical simulation of hydration and microstructural development in hardening cement-based materials (I) theory. *Cement and Concrete Research*, 25(2):319–331, 1995. [p. 88, 89, 97, 112]

[128] K. Velez, S. Maximilien, D. Damidot, G. Fantozzi and F. Sorrentino. Determination by nanoindentation of elastic modulus and hardness of pure constituents of Portland cement clinker. *Cement and Concrete Research*, 31(4):555–561, 2001. [p. 102, 115]

[129] K. Velez and F. Sorrentino. *Characterization of cementitious materials by nanoindentation.* In W. Kurdowski and M. Gawlicki (eds.): Kurdowski *Symposium "Science of cement and concrete"*, pp. 67–77, Krakow, Poland, 2001. [p. 102, 115, 119]

[130] F. H. Wittmann. *Creep and shrinkage mechanisms.* In Z. P. Bazant and F. H. Wittmann (eds.): *Creep and shrinkage in concrete structures*, pp. 129–161. Wiley, 1982. [p. 148]

[131] T.-F. Wong, C. David and W. Zhu. The transition from brittle faulting to cataclastic flow in porous sandstones: Mechanical deformation. *Journal of Geophysical Research*, 102(B2):3009–3025, 1997. [p. 202, 203, 253]

[132] A. Zaoui. *Structural morphology and constitutive behavior of microheterogeneous materials.* In P. Suquet (ed.): *Continuum micromechanics*, pp. 291–347. Cism Courses and Lectures n.377, Springer, 1997. [p. 10, 100, 120, 179, 240]

[133] A. Zaoui. *Matériaux hétérogènes et composites.* École polytechnique, 2000. [p. 9, 14, 15, 133, 224]

[134] A. Zaoui. Continuum micromechanics: survey. *Journal of Engineering Mechanics*, 128(8):808–816, 2002. [p. 10, 175]

[135] Z. Zhong and S. A. Meguid. On the elastic field of a spherical inhomogeneity with an imperfectly bonded interface. *Journal of Elasticity*, 46(2):91–113, 1997. [p. 98]

Principales notations

$\lvert\mathcal{D}\rvert$	volume ou aire du domaine $\mathcal{D}$ (volume ou surface)
$\underline{A}$	tenseur d'ordre 1
$\boldsymbol{A}$	tenseur d'ordre 2
$\mathbb{A}$	tenseur d'ordre 4
$\underline{A} \wedge \underline{B}$	produit vectoriel
$\mathcal{T}_1 \cdot \mathcal{T}_2$	produit simplement contracté de deux tenseurs
$\mathcal{T}_1 : \mathcal{T}_2$	produit doublement contracté de deux tenseurs
$\mathcal{T}_1 \otimes \mathcal{T}_2$	produit tensoriel de deux tenseurs
$\mathbf{1}$	tenseur identité d'ordre 2
$\operatorname{tr} \boldsymbol{A}$	trace de $\boldsymbol{A}$
$\boldsymbol{A}^{\mathrm{dev}}$	déviateur de $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{A}^{\mathrm{dev}} = \boldsymbol{A} - 1/3(\operatorname{tr} \boldsymbol{A})\mathbf{1}$
A_m	« intensité » de la partie sphérique de $\boldsymbol{A}$, $A_m = (\operatorname{tr} \boldsymbol{A})/3$
A_d	« intensité » de la partie déviatorique de $\boldsymbol{A}$, $A_d = \sqrt{\boldsymbol{A}^{\mathrm{dev}} : \boldsymbol{A}^{\mathrm{dev}}/2}$
$\mathbb{I}$	tenseur identité d'ordre 4, pour les tenseurs symétriques $\mathbb{I} : \boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}$ où $\boldsymbol{S}$ est un tenseur symétrique
$\mathbb{J}$	tenseur extrayant la partie sphérique d'un tenseur symétrique d'ordre 2 $\mathbb{J} = 1/3\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ $\mathbb{J} : \boldsymbol{S} = 1/3(\operatorname{tr} \boldsymbol{S})\mathbf{1}$ où $\boldsymbol{S}$ est un tenseur symétrique
$\mathbb{K}$	tenseur extrayant la partie déviatorique d'un tenseur symétrique d'ordre 2 $\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$ $\mathbb{K} : \boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^{\mathrm{dev}}$ où $\boldsymbol{S}$ est un tenseur symétrique
${}^{\mathrm{t}}\boldsymbol{A}$	transposé d'un tenseur d'ordre 2
$\mathcal{T}^{-1}$	inverse d'un tenseur d'ordre 2 ou 4
$\mathbf{grad}\,(\underline{A})$	gradient d'un tenseur d'ordre 1
$\underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{A})$	divergence d'un tenseur d'ordre 2
Ω	domaine occupé par le VER (volume élémentaire représentatif)

j étant une phase particulière du VER :

Ω_j	domaine occupé par la phase j au sein du VER
f_j	fraction volumique de la phase j dans le VER

$\langle a \rangle_j$ moyenne spatiale de la grandeur a sur le domaine occupé par la phase j
$\mathbb{C}_j$ tenseur de rigidité de la phase j
$\mathbb{S}_j$ tenseur de souplesse de la phase j, $\mathbb{S}_j = {\mathbb{C}_j}^{-1}$
si la phase j est isotrope, $\mathbb{C}_j = 3k_j\mathbb{J} + 2\mu_j\mathbb{K}$:
k_j module de compression de la phase j
μ_j module de cisaillement de la phase j
E_j module de Young de la phase j
ν_j coefficient de Poisson de la phase j
avec les relations classiques :
$k_j = \dfrac{E_j}{3(1-2\nu_j)}$, $\mu_j = \dfrac{E_j}{2(1+\nu_j)}$, $E_j = \dfrac{9k_j\mu_j}{3k_j+\mu_j}$ et $\nu_j = \dfrac{3k_j - 2\mu_j}{6k_j + 2\mu_j}$

$\underline{\xi}$ vecteur déplacement
$\boldsymbol{\varepsilon}$ tenseur de déformation linéarisé
$\boldsymbol{\sigma}$ tenseur de contraintes

$\mathrm{H}(x)$ fonction d'Heaviside, $\mathrm{H}(x) = 1$ si $x > 0$ et $\mathrm{H}(x) = 0$ si $x < 0$
$f^\star(p)$ transformée de Carson de la fonction f, $f^\star(p) = \int_{-\infty}^{\infty} p\mathrm{e}^{-pt} f(t)\mathrm{d}t$

e/p rapport massique initial eau sur plâtre

notations habituelles de chimie du ciment :
C CaO
S SiO_2
H H_2O
A Al_2O_3
F Fe_2O_3

e/c rapport massique initial eau sur ciment
α degré d'hydratation :
quantité d'anhydre ayant réagi rapportée à la quantité initiale

Liste des tableaux

2.1 Polynômes $a_{i_k,i_\mu}(m_s,\varphi)$ intervenant dans (2.17) 23
2.2 Polynômes $b_{i_k,i_\mu}(m_s,\varphi)$ intervenant dans (2.18) 23
2.3 Porosité critique et coefficient de Poisson associé pour quelques valeurs limites du rapport d'aspect des ellipsoïdes de révolution 26

3.1 Masses molaire et volumique des composés de l'équation d'hydratation du plâtre 33

4.1 Composantes non nulles du tenseur de rigidité du cristal de gypse 40
4.2 Rapport d'aspect des cristaux et module de Young expérimental du plâtre pris . 45

5.1 Maximisation de la fonction f définie par (5.15) 56
5.2 Maximisation locale de la fonction g définie par (5.25) 61

6.1 Composantes de la rigidité effective pour une distribution isotrope d'orientations 70

7.1 Degré d'hydratation de prise estimé à partir de résistances à la compression . . 93

8.1 Caractéristiques élastiques des phases élémentaires issues de nano-indentation . 102
8.2 Données d'entrée des simulations 117
8.3 Optimisation du rapport d'aspect des plaquettes BD, pour chaque e/c 125

9.1 Maximisation locale de la fonction f définie par (9.40) 142

12.1 Types de solide et de joints intergranulaires abordés dans ce chapitre 172
12.2 Grès étudiés dans [131] et porosités mesurées 203

Table des figures

1.1 Différentes échelles caractérisant une structure et son matériau constitutif 9
1.2 VER soumis à des conditions aux limites de déformation homogène au contour . 10
1.3 Un exemple de problème auxiliaire d'élasticité 11

2.1 Problèmes auxiliaires d'élasticité pour un schéma AC à formes sphériques 15
2.2 Caractéristiques élastiques effectives issues d'un schéma AC à formes sphériques 16
2.3 Maille élémentaire dans deux configurations : sphères disjointes ou interpénétrées 17
2.4 Huitième de maille élémentaire et maillage correspondant 18
2.5 Module de compression effectif relatif, par schéma AC et calculé numériquement 18
2.6 Problèmes auxiliaires d'élasticité pour un schéma AC à forme sphérique pour l'espace poreux et ellipsoïdale de révolution pour le solide 19
2.7 Définition du rapport d'aspect d'un ellipsoïde de révolution 20
2.8 Base sphérique définie par rapport à la base fondamentale 20
2.9 Caractéristiques élastiques effectives estimées par schéma AC à forme solide ellipsoïdale de révolution 22
2.10 Microstructures 3D construites en implantant des parallélépipèdes dans un cube 24
2.11 Module de Young calculé numériquement sur cube rempli de parallélépipèdes . . 24
2.12 Caractéristiques élastiques effectives par schéma AC et calculées numériquement 25
2.13 Fraction solide critique en fonction du rapport d'aspect des particules solides, estimée par schéma AC, et seuil de percolation calculé géométriquement 26
2.14 Influence du rapport d'aspect des ellipsoïdes utilisés pour représenter l'espace poreux sur le module de Young auto-cohérent 27

3.1 Porosité du plâtre pris en fonction du rapport massique eau sur poudre de plâtre 33
3.2 Variation relative de volume entre l'état initial et l'état final, en fonction du e/p 34
3.3 Évolution schématique des volumes de plâtre, eau, gypse et air lors de l'hydratation 34
3.4 Photo MEB d'un plâtre pris 35
3.5 Photo MEB d'un plâtre pris issu d'un gâchage avec de l'acide citrique 36
3.6 Photo MEB d'un plâtre pris présentant des bulles 36
3.7 Représentation de la microstructure multiéchelle d'un plâtre pris avec bulles . . 37
3.8 Module de Young mesuré sur plâtre pris 38
3.9 Résistances en traction et compression simples mesurées sur plâtre pris 38

4.1 Maille de De Jong et Bouman et tenseur de rigidité du gypse 40
4.2 Représentation schématique des cristaux en cours de croissance 41
4.3 Représentation schématique d'un cristal de gypse et de ses faces 41
4.4 Caractérisation de l'orientation d'un cristal par les trois angles d'Euler θ, ϕ, ψ . 42
4.5 Problèmes auxiliaires d'élasticité pour le schéma AC modélisant le plâtre pris . . 42
4.6 Module de Young mesuré sur plâtre pris et estimé par schéma auto-cohérent . . 44
4.7 Module de Young par schéma AC, selon l'orientation de la maille dans les *prolates* 45
4.8 Module de Young normalisé en fonction du rapport d'aspect des cristaux 46

4.9 Module de Young effectif de plâtre pris avec bulles 48
4.10 Module de Young du plâtre pris, à partir de *prolates* anisotropes ou isotropes . . 49

5.1 Vecteur contrainte sur une facette perpendiculaire à l'axe d'un cristal 53
5.2 Domaine d'élasticité local propre aux cristaux de gypse, dans le plan (σ_N, σ_T) . 53
5.3 Pointe du critère macroscopique en fonction de la porosité (cristaux en aiguilles) 55
5.4 Axe des cristaux critiques selon l'ordre des contraintes principales 57
5.5 Paramètres du critère macroscopique, en fonction de la porosité intercristalline . 57
5.6 Critère macroscopique et coupe par un plan à $\Sigma_m = \mathrm{tr}\,\mathbf{\Sigma}/3$ constant 58
5.7 Paramètres α des critères de Drucker-Prager inscrit et circonscrit 58
5.8 Résistances en traction et compression simple estimées et mesurées 59
5.9 Orientation des cristaux critiques en traction et compression simple 60
5.10 Axe du cristal critique selon l'ordre des contraintes principales 62
5.11 Paramètres du domaine d'élasticité macroscopique en fonction de φ et de β . . . 62
5.12 Critère de limite élastique macroscopique et coupe par un plan à Σ_m constant . 63
5.13 Paramètres α des critères de Drucker-Prager inscrit et circonscrit 63
5.14 Résistances en traction et compression simple estimées et mesurées 64
5.15 Orientation du cristal critique en traction et compression simple 65
5.16 Contraintes dans le cristal critique à la limite élastique en traction / compression 65

6.1 Distribution isotrope transverse de cristaux envisagée 69
6.2 Composantes de la rigidité homogénéisée en fonction de θ_0 71
6.3 Composantes de la rigidité homogénéisée en fonction de θ_1 72
6.4 Module de Young apparent en fonction de la fraction solide 72
6.5 Cristaux désactivés et subsistants, et prochain cristal désactivé (traction simple) 73
6.6 Contrainte σ_N dans l'axe du cristal θ pour quelques valeurs de θ_0 (traction simple) 74
6.7 Variable d'endommagement θ_0 en fonction de la déformation macroscopique . . 75
6.8 Comportement obtenu en traction simple pour quelques valeurs de la porosité . 75
6.9 Cristaux désactivés, subsistants, et prochain cristal désactivé (compression simple) 76
6.10 Contrainte de traction dans l'axe du cristal θ pour quelques valeurs de θ_1 (compression simple) 77
6.11 Schématisation de la loi d'évolution de la variable d'endommagement θ_1, en fonction de la déformation de compression macroscopique 78
6.12 Variable d'endommagement θ_1 en fonction de la déformation de compression E^c_{33} 78
6.13 Comportement obtenu en compression simple pour quelques valeurs de la porosité 79

7.1 Répartition de l'anhydre, des hydrates et des pores capillaires selon Powers . . . 86
7.2 Évolution schématique des volumes d'anhydre, hydrates, eau et air 87
7.3 Modèles de microstructure de pâte de ciment : HYMOSTRUC3D et CEMHYD3D . . 89
7.4 Un premier modèle de microstructure de C-S-H, multiéchelle partant de feuillets 89
7.5 Un second modèle de microstructure de C-S-H, globules sphériques 90
7.6 Module de Young de pâtes de C_3S mesuré par ultrasons 91
7.7 Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation 91
7.8 Module de Young de pâtes de ciment matures 92
7.9 Résistance en compression d'une pâte de ciment en fonction du degré d'hydratation 92
7.10 Déformation de fluage mesurée au cours du temps 93

8.1 Problèmes auxiliaires d'élasticité pour le schéma AC modélisant anhydre+eau . . 98
8.2 Module de Young estimé par schéma AC avec des particules anhydres lisses . . . 99
8.3 Représentation schématique du modèle morphologique de pâte de ciment proposé 99
8.4 Problèmes auxiliaires d'élasticité pour le schéma AC généralisé modélisant la pâte 100

8.5 Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation, estimé et mesuré . 103
8.6 Modèle de microstructure multiéchelle proposé pour une pâte de ciment 104
8.7 Principe du schéma d'homogénéisation en deux étapes 105
8.8 Porosité initiale et fraction de petites particules évitant la prise instantanée . . . 106
8.9 Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation, estimé et mesuré . 106
8.10 Section polie et grille de nano-indentation 108
8.11 Observation par AFM de la croissance des C-S-H sur la surface d'un cristal de C_3S 108
8.12 Schéma du modèle morphologique à deux échelles de pâte de ciment 110
8.13 Évolution schématique des fractions volumiques d'anhydre et hydrates HD et BD compatible avec le scénario de précipitation envisagé 111
8.14 Schéma auto-cohérent généralisé à 4 couches proposé pour la pâte 112
8.15 Répartition volumique des cinq phases constituant la pâte de ciment 114
8.16 Répartition volumique dans la pâte de l'anhydre et des hydrates HD et BD . . . 115
8.17 Estimation AC du degré d'hydratation de prise et valeurs expérimentales 116
8.18 Module de Young de pâtes de ciment en cours d'hydratation, estimé et mesuré . 117
8.19 Module de Young estimé de pâtes de ciment en cours d'hydratation, représenté en fonction de la porosité capillaire ou totale 118
8.20 Module de Young de pâtes complètement hydratées, estimé et mesuré 119
8.21 Module de Young estimé des hydrates basse densité, pour différents e/c 119
8.22 Problème auxiliaire d'élasticité pour le schéma de MT généralisé modèle de pâte 120
8.23 Module de Young de la pâte, estimé par un schéma auto-cohérent généralisé à 4 couches ou par un schéma de Mori Tanaka généralisé 121
8.24 Observation au MEB des hydrates d'un béton standard (B25) 122
8.25 Module de Young de pâtes de ciment, estimé avec des particules BD allongées . . 122
8.26 Probable évolution réelle du module de Young, confrontée à l'évolution modélisée 124
8.27 Module de Young non drainé d'une pâte, estimé et mesuré par ultrasons 125
8.28 Estimation du degré d'hydratation de prise en fonction de la part d'hydrates BD 126
8.29 Modèle morphologique de pâte, avec une description améliorée de la matrice . . 127
8.30 Degré d'hydratation de prise en fonction de χ, pour quelques valeurs de e/c et r^s_{bd} 128
8.31 Module de Young d'une pâte en cours d'hydratation, estimé pour deux χ 129

9.1 Taille du critère en fonction de la porosité pour des valeurs de χ proches de 1 . 136
9.2 Critère macroscopique pour $\varphi = 0.4$ et quelques fractions de cœurs 137
9.3 Critère macroscopique pour $\beta = 0.2$, $\varphi = 0.4$ et quelques fractions de cœurs . . . 138
9.4 Résistance en compression simple en fonction du degré d'hydratation 138
9.5 Plaquette et vecteur contrainte sur une facette contenant la normale à la plaquette 139
9.6 Plaquette et vecteur dans le plan de la plaquette, caractérisé par l'angle ψ . . . 140
9.7 Normale à la plaquette critique selon l'ordre des contraintes principales 142
9.8 Plaquette critique et direction critique, selon l'ordre des contraintes principales . 142
9.9 Paramètres intervenant dans le critère macroscopique de limite élastique 143
9.10 Critère de limite élastique macroscopique, et coupe par un plan à Σ_m constant . 144
9.11 Pointe du critère macroscopique de limite élastique 144
9.12 Paramètres β des cônes de Drucker-Prager inscrit et circonscrit 144
9.13 Limites élastiques en traction et compression simple 145
9.14 Limites élastiques en traction et compression simple, pour des disques ou aiguilles 146

10.1 Représentation schématique d'une particule de C-S-H 148
10.2 Coefficients de viscosité effectifs en fonction de la porosité 150
10.3 Schématisation du comportement viscoélastique des particules feuilletées 150
10.4 Pente initiale de l'évolution de la déformation de fluage 152

10.5 Partie élastique et pente initiales de la déformation de fluage 153
10.6 Allure de la déformation de fluage à court terme 154
10.7 Déformation de fluage asymptotique à long terme 154
10.8 Pente de la branche asymptotique linéaire à long terme 155
10.9 Allure de la déformation de fluage à long terme 155
10.10 Déformations de fluage sphérique et déviatorique au cours du temps 156
10.11 Influence du rapport d'aspect des particules sur les trois seuils fonctions de φ . . 158
10.12 Remplacement de la raideur par un modèle de Maxwell 159
10.13 Déformation élastique et pente initiales de l'évolution de la déformation de fluage 161
10.14 Déformation de fluage asymptotique à long terme 161
10.15 Pente de la déformation asymptotique de fluage à long terme 162
10.16 Allure de la déformation de fluage à long terme 163
10.17 Déformations de fluage sphérique et déviatorique au cours du temps 163
10.18 Influence du temps caractéristique τ sur le fluage de la pâte en compression . . . 165
10.19 Fluage en compression simple de la pâte estimé et mesuré pour différents e/c . . 165
10.20 Fluage en compression simple de la pâte estimé par modèle (avec séparation petits/gros pores capillaires) et mesuré pour différents e/c 166

12.1 Allure schématique d'un VER de milieu poreux considéré 173
12.2 Décomposition du saut de déplacement à l'interface 175
12.3 Décomposition du vecteur contrainte à l'interface 178
12.4 Schéma de la morphologie « réelle » et de la morphologie idéalisée 180
12.5 Portion de la périphérie d'un grain en contact avec d'autres grains 182
12.6 Problèmes auxiliaires d'élasticité pour modéliser un polycristal à joints imparfaits 184
12.7 Module de cisaillement effectif, pour une interface adhérente ou lisse 187
12.8 Problèmes auxiliaires d'élasticité pour modéliser un polycristal poreux à joints imparfaits et grains feuilletés 188
12.9 Module de cisaillement effectif, pour des grains rigides ou feuilletés 189
12.10 Contrainte déviatorique maximale macroscopique pour des grains de von Mises et des joints infiniment résistants ou lisses 191
12.11 Forme du critère macroscopique selon φ et α, pour des grains de Drucker-Prager 192
12.12 Forme du critère macroscopique selon φ et α, pour des grains de Drucker-Prager et des joints infiniment résistants ou lisses 192
12.13 Critères macroscopiques pour des grains de Drucker-Prager et des joints infiniment résistants ou lisses 193
12.14 Contrainte déviatorique maximale macroscopique pour des joints de Tresca et des grains infiniment résistants ou feuilletés 195
12.15 Forme du critère macroscopique selon φ et α, pour un solide infiniment résistant 197
12.16 Critères macro. pour joints de Mohr-Coulomb et grains infiniment résistants . . 197
12.17 Forme du critère macroscopique selon φ et α, pour des grains feuilletés 198
12.18 Critères macroscopiques pour des joints de Mohr-Coulomb et des grains feuilletés 198
12.19 Critère macroscopique pour des grains de von Mises et des joints de Mohr-Coulomb sans cohésion 202
12.20 Influence de φ et α sur le critère macroscopique pour des grains de von Mises et des joints de Mohr-Coulomb sans cohésion 202
12.21 Confrontation expérimentale, sur trois grès, du critère de rupture modélisé . . . 203

13.1 Fonction de fluage en cisaillement, pour différentes porosités 207
13.2 Allure de la déformation de fluage déviatorique à court et long terme 207
13.3 Fonction de fluage en cisaillement, pour différentes porosités 208

13.4 Allure de la déformation de fluage déviatorique à court et long terme 209

B.1 Problèmes auxiliaires à résoudre pour modéliser un assemblage de grains feuilletés 217

C.1 Problème auxiliaire avec une sphère composite à deux phases concentriques . . . 224
C.2 Problème auxiliaire avec une sphère isotrope entourée d'une interface 228
C.3 Équivalence entre une couche de matériau élastique linéaire isotrope d'épaisseur infinitésimale et une interface élastique 229
C.4 Problème auxiliaire avec une sphère isotrope transverse entourée d'une interface 232