HAL
open science

Une approche multi-échelles directe pour modéliser le comportement non linéaire des composites énergétiques

Carole Nadot-Martin, Damien Halm, Sophie Dartois, Marion Touboul, André Dragon, Alain Fanget

To cite this version:

Carole Nadot-Martin, Damien Halm, Sophie Dartois, Marion Touboul, André Dragon, et al.. Une approche multi-échelles directe pour modéliser le comportement non linéaire des composites énergétiques. 17èmes Journées Nationales sur les Composites (JNC17), Jun 2011, Poitiers-Futuroscope, France. pp.204. hal-00597463

HAL Id: hal-00597463

https://hal.science/hal-00597463v1

Submitted on 1 Jun 2011

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.

Une approche multi-échelles directe pour modéliser le comportement non linéaire des composites énergétiques

A direct multi-scale approach for modelling the non linear behaviour of energetic composites

Carole Nadot-Martin [1], Damien Halm [1], Sophie Dartois [1], Marion Touboul[1], André Dragon[1] et Alain Fanget[2]

1 : Département Physique et Mécanique de Matériaux
Institut Pprime – CNRS – ENSMA – Université de Poitiers UPR 3346 – F - 86961 FUTUROSCOPE CHASSENEUIL CEDEX
e-mail : carole.nadot@ensma.fr, damien.halm@ensma.fr
2 : Commissariat à l'Energie Atomique
Centre d'Etudes de Gramat – F- 46500 GRAMAT
e-mail : alain.fanget@cea.fr

Résumé

Le papier concerne une modélisation multi-échelles, à destination des élastomères fortement chargés (composites énergétiques et propergols), dont le but est de fournir les réponses non linéaires à la fois globale et locale du matériau en cours de chargement mécanique. Les avancées les plus récentes concernant d'une part la modélisation en transformations finies du milieu sain et d'autre part, celle de l'endommagement par décohésion charges / matrice, sont présentées et discutées. Pour le milieu sain, l'approche est pour la première fois appliquée à un propergol réel. Les estimations résultantes sont confrontées aux résultats issus de simulations de microstructures en champs complets réalisées à partir d'images microtomographiques aux rayons X. Enfin, la simulation d'un chargement d'extension-compression, appliqué à une microstructure artificielle générée numériquement, permet d'illustrer les capacités de l'approche proposée à suivre les événements discrets se produisant à l'échelle des interfaces (nucléation et fermeture des défauts) tout en rendant compte de leurs effets à l'échelle supérieure (anisotropie induite et restitution des propriétés effectives).

Abstract

The paper presents a multi-scale modelling, for highly-filled elastomers (energetic composites and propellants), aiming at providing the non linear global and local responses of the material under mechanical loading. The latest advances regarding the finite strain behaviour of the sound material on the one hand, and damage by interface debonding on the other hand, are presented and discussed. For the sound material, the approach is applied for the first time to a real propellant. The resulting estimates are compared to results of full-field microstructure simulations performed on X-ray microtomography images. At last, the simulation of a loading path involving tension and compression applied to a microstructure numerically generated, allows exemplifying the ability of the advanced approach to follow progressive microstructural damage events (nucleation and closing of interfacial defects) and to account for their macroscopic effects (induced anisotropy and recovery of effective properties by closure of defects).

Mots Clés : propergols, grandes déformations, micromécanique, simulations de microstructures, décohésion d'interfaces.
Keywords : propellants, finite strains, micromechanics, full-field simulations, interface debonding.

1. Introduction

Ce travail s'inscrit dans le cadre des études de vulnérabilité des composites énergétiques et propergols solides, utilisés dans les secteurs de la défense et de la propulsion spatiale, à des sollicitations accidentelles de faibles vitesses. La vulnérabilité, ou plus simplement la probabilité d'initiation d'une réaction chimique, est essentiellement gouvernée par les processus dissipatifs et l'endommagement induits à l'échelle microstructurale par la sollicitation. Aussi, l'évaluation des risques de réaction passe par l'élaboration d'une modélisation multi échelle apte à fournir, en plus de la réponse macroscopique du milieu, une estimation des champs mécaniques, de la dissipation

locale et des caractéristiques de l'endommagement au sein de la microstructure (morphologie et position des défauts).
La modélisation multi-échelles des propergols constitue un domaine de recherche encore largement ouvert aux multiples challenges scientifiques. L'un des plus forts est relié à la complexité morphologique de cette classe d'élastomères chargés et notamment aux forts taux de charges impliqués (entre 70 et 90 % en masse). De tels taux sont à l'origine d'interactions complexes entre les particules à l'origine d'une hétérogénéité de déformation marquée au sein de la matrice, ces deux aspects gouvernant le comportement et en particulier la décohésion interfaciale des particules les plus grosses. Les travaux récents de [1], dédiés aux propergols, soulignent l'inhabilité des méthodes en champs moyens classiques (*i.e.* de type Eshelby sans prise en compte des fluctuations intraphases) à capturer les effets des interactions complexes entre particules avant et en cours d'endommagement. Un autre challenge réside dans la multiplicité des non linéarités à prendre en compte (grandes déformations, viscoélasticité, endommagement…) obligeant le recours ou le développement d'approches suffisamment simples pour pouvoir les incorporer. Enfin, l'exigence d'accès aux champs locaux liée au contexte d'application se présente comme un verrou à l'utilisation des approches d'homogénéisation courantes qui ne fournissent que les premiers et seconds moments par phase en plus de la réponse homogénéisée.
Cette communication synthétise quelques avancées récentes d'une approche multi-échelles qualifiée d' « Approche Morphologique » (AM), tentée comme alternative aux techniques précitées. Elle est le fruit d'extensions non linéaires successives [2-4] de l'approche linéaire initialement proposée par [5] pour des composites fortement chargés.
Après une présentation de la schématisation explicite de la microstructure initiale au départ de l'AM (section 2), les principaux ingrédients théoriques nécessaires à la résolution pratique du problème local en transformations finies associé au milieu hétérogène sain (*i.e.* non endommagé) seront résumés et discutés (section 3). Les premières estimations obtenues pour une microstructure propergol réelle (Butalite 400) seront confrontées aux solutions de référence obtenues par calculs en champs complets par éléments finis (EF). La section 4 abordera la modélisation de l'endommagement par décohésion grains / matrice, cette fois dans le cadre préliminaire des petites perturbations, tout d'abord pour un nombre fixé de défauts ouverts et/ou fermés [3] puis, en présence d'évolution (nombre et configuration des défauts). Les résultats seront analysés.

2. Représentation explicite de la microstructure initiale

La microstructure initiale du composite particulaire est représentée par un agrégat de grains polyédriques séparés par de fines couches de matrice d'épaisseur constante, néanmoins différente d'une couche à l'autre. Cette schématisation est illustrée sur la (Fig. 1). Pour chaque couche α, quatre paramètres morphologiques sont définis : l'épaisseur h^α (représentative de la distance intergranulaire, l'aire projetée A^α, la normale $\mathbf{n}^\alpha$, le vecteur $\mathbf{d}^\alpha$ reliant les centroïdes des grains adjacents.

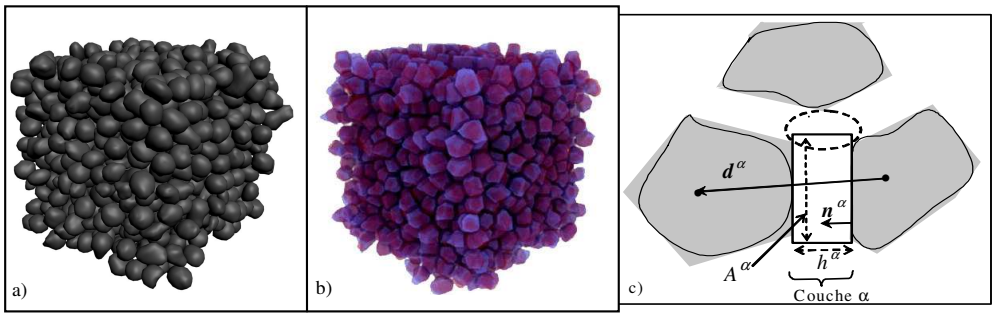

Fig. 1. Schématisation géométrique, illustration dans le cas de la Butalite 400, propergol fourni par l'ONERA : a) microstructure réelle reconstruite à partir d'images issues de microtomographie X; b) superposition des microstructures réelle et polyédrisée ; c) paramètres morphologiques d'une couche α (schéma 2D).

Une fois les grains réels approchés par des polyèdres (sous contrainte de parallélisme des facettes de grains en vis à vis), les paramètres $\mathbf{d}^\alpha$, $\mathbf{n}^\alpha$ et h^α sont directement identifiables par simples mesures géométriques. L'aire projetée A^α, d'où découle la définition de la zone de matrice qualifiée de couche α entre deux polyèdres, est définie comme la moyenne arithmétique des deux aires obtenues par projection, depuis les centroïdes des grains, des deux facettes opposées sur le plan médiateur de la zone intergranulaire considérée. Par suite la couche α, de volume $A^\alpha h^\alpha$, ne correspond pas à la zone de matrice strictement confinée entre les deux facettes en regard; elle peut être plus large comme illustré sur la coupe 2D de la (Fig. 1-c).
Pratiquement, tout l'enjeu réside dans l'optimisation du processus de polyédrisation, c'est-à-dire de la correspondance entre microstructures réelle et schématisée afin de garantir le maximum de représentativité aux paramètres morphologiques. Un algorithme adapté est utilisé à cet effet.

3. L'AM pour le matériau sain (*i.e.* non endommagé)

3.1 Ingrédients théoriques essentiels, résolution pratique, discussion

A partir de la représentation géométrique précédente, l'approche du problème hétérogène est fondée sur un cadre cinématique simplificateur construit sur quatre hypothèses : (i) les centroïdes des grains ont un mouvement d'ensemble défini par le gradient de transformation global **F** (donnée du problème, caractéristique du chargement macroscopique) (ii) les grains se déforment d'une manière homogène et le gradient de transformation est identique pour tous, il est noté $\mathbf{f}^0$, (iii) chaque couche α a un gradient de transformation homogène $\mathbf{f}^\alpha$, pouvant varier d'une couche à une autre, (iv) Les perturbations aux coins et arêtes des grains (zone de recouvrement encerclée sur la (Fig. 1-c)) sont négligées. La continuité du champ de déplacement aux interfaces grains / couches fournit alors le gradient de transformation d'une couche α quelconque en fonction de sa morphologie initiale :

$$f_{ij}^\alpha = f_{ij}^0 + \left(F_{ik} - f_{ik}^0\right)\frac{d_k^\alpha n_j^\alpha}{h^\alpha} \qquad \text{(Eq. 1)}$$

La compatibilité entre le mouvements local précédent et le mouvement global (**F**), à savoir $\mathbf{F} = \langle \mathbf{f} \rangle_{|V_0|}$ (avec $|V_0|$, volume initial) nécessite le respect de la condition géométrique, dite de compatibilité, suivante:

$$\frac{1}{|V_0|}\sum_\alpha d_i^\alpha n_j^\alpha A^\alpha = \delta_{ij} \qquad \text{(Eq. 2)}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker. (Eq. 2) est un critère d'applicabilité de l'AM à un composite donné et un critère de choix d'un Volume Elémentaire Représentatif associé à cette méthodologie, voir [2] pour plus de détails. Pour un volume schématisé satisfaisant (Eq. 2) (paramètres initiaux connus $\left\{\mathbf{d}^\alpha, \mathbf{n}^\alpha, \mathbf{h}^\alpha, A^\alpha \quad \forall\alpha\right\}$) et un chargement donné (**F**), la résolution du problème hétérogène est concrètement la suivante. Le gradient de transformation $\mathbf{f}^0$ des grains est calculé de sorte à satisfaire le principe de macrohomogénéité de Hill dans lequel (Eq. 1) et les lois de comportement locales (grains et matrice) sont insérées. La connaissance de $\mathbf{f}^0$ permet de calculer $\mathbf{f}^\alpha$ pour toutes les couches (Eq. 1), les déformations et contraintes nominales locales et au final la contrainte nominale homogénéisée par moyenne volumique. La procédure est numérique et valable quel que soit le comportement des phases.

En raison de l'hypothèse de gradient de transformation homogène dans la phase grain, l'AM est préférable pour les composites fortement chargés dont la matrice est plus souple d'une part (accommodation de l'essentiel de la déformation) et la dispersion granulométrique modérée d'autre

part (propice au mouvement d'ensemble des charges). C'est le cas des propergols sous sollicitations quasi-statiques en considérant classiquement la matrice comme l'ensemble liant élastomère + charges les plus fines (non concernées par la décohésion), voir *e.g.* [6]. Un point positif de l'AM est la prise en compte d'une hétérogénéité de déformation dans la phase matrice, aspect essentiel en micromécanique non linéaire pour ne pas surestimer la réponse homogénéisée [7]. Physiquement, l'hétérogénéité dans la matrice (*i.e.* d'une zone intergranulaire à l'autre) est la signature des interactions complexes entre particules. (Eq. 1) montre que les effets d'interaction entre deux particules opposées, pris en compte via l'AM, dépendent de l'épaisseur, de l'orientation de la zone intergranulaire (couche α) considérée et d'un indicateur de la taille des particules en question ($\mathbf{d}^{\alpha}$). C'est là un avantage essentiel offert par l'AM pour décrire ultérieurement la décohésion d'interfaces. Enfin, en négligeant les perturbations au voisinage des arêtes et coins de polyèdres, l'AM ne tient pas compte des effets de concentration de champs dus aux acuités artificiellement introduites par la polyédrisation des charges réelles. La transmission des effets au sein de l'agrégat, et notamment d'une zone intergranulaire à l'autre, s'effectue de fait via les facettes des grains comme en témoigne la présence de $\mathbf{f}^0$ dans (Eq. 1).

3.2 Application à un propergol, première confrontation AM / EF

La comparaison des estimations aux résultats de simulations en champs complets par Eléments Finis constitue de nos jours une étape essentielle dans l'évaluation d'une approche micromécanique [1]. Par rapport à une confrontation à l'expérience, elle permet de s'affranchir des erreurs liées à la description du comportement local (ce dernier étant pris identique dans les deux cas). Les estimations aux deux échelles (macro et microscopiques) fournies par l'AM ont été antérieurement confrontées aux solutions EF avec succès sur des microstructures simples et un comportement de phase hyper ou viscohyperélastique [2]. On présente ici les tous premiers résultats obtenus sur une microstructure propergol réelle, la Butalite 400 fournie par l'ONERA. Elle est constituée de *62 %* en volume de charges de Perchlorate d'Ammonium (diamètre moyen 400 µm) dans une matrice Polybutadiène. Une chaîne d'outils, inédite pour les composites énergétiques, a été développée en collaboration avec le Centre de Morphologie Mathématique de l'Ecole des Mines de Paris pour la reconstruction/segmentation 3D des images acquises en microtomographie aux rayons X, [8]. Ces outils opérationnels pour la Butalite 400 monomodale sont en cours d'extension pour des dispersions granulométriques plus élevées, plus proches de la réalité des propergols industriels. Les images numériques résultantes (Fig. 1-a) ont été maillées d'une part, et polyédrisées (Fig. 1-b) d'autre part pour identifier des paramètres morphologiques d'entrée de l'AM (Fig. 1-c). La Fig.2 confronte la réponse macroscopique fournie par l'AM à la solution de référence EF pour un chargement de compression hydrostatique (gradient de transformation imposé $\boldsymbol{F} = \alpha \sum_{i=1}^{3} \boldsymbol{e}^i \otimes \boldsymbol{e}^i$).

Pour simplicité, ces premières simulations ont été réalisées en considérant les deux phases hyperélastiques compressibles de type Mooney Rivlin (coefficients 100 fois supérieurs pour les charges). Pour la matrice polybutadiène, les coefficients C_{10} = 0.0114 MPa et C_{01} = 0.021 MPa ont été identifiés sur un essai de traction (dans l'attente de données supplémentaires) et le module de compressibilité à partir d'un essai de compression hydrostatique (module moyen 7 GPa). Les premiers résultats à l'échelle macroscopique apparaissent encourageants mais doivent être confirmés par la confrontation des champs locaux.

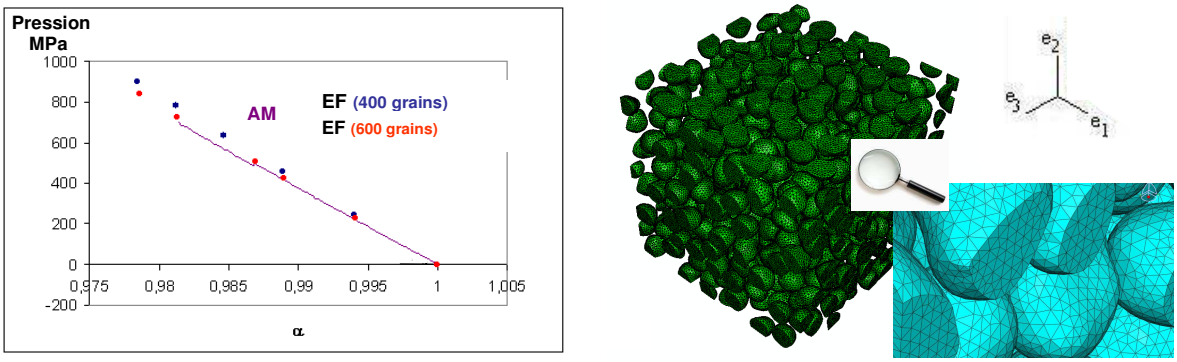

Fig.2. Confrontation des réponses macroscopiques AM et EF pour un chargement de compression hydrostatique (calculs réalisés en hyperélasticité sans endommagement). Maillage EF volumique de la microstructure initiale de la Butalite 400 (exemple de cube à 400 grains).

4. L'AM en présence d'endommagement

4.1 Etat et configuration fixés

La décohésion aux interfaces charges / matrice a été introduite par [3] de manière compatible avec la description cinématique du milieu sain (section 3.1) mais dans le cadre préliminaire des petites perturbations ($\mathbf{F}$, $\mathbf{f}^0$ et $\mathbf{f}^\alpha$ désignent désormais les gradients de déplacement macroscopique, des grains et d'une couche α respectivement). Il en ressort que les interfaces ne peuvent être partiellement décollées (sauts affines) et que les deux interfaces d'une même couche sont forcément dans le même état (sain ou décollé). Notons que la décohésion totale d'une interface n'exclut pas la décohésion partielle d'un grain représenté par un polyèdre à plusieurs facettes. Lorsque les deux interfaces d'une couche sont saines, le gradient de déplacement de la couche en question est donné par (Eq. 1). Lorsqu'elles sont décollées, le respect des conditions de sauts de déplacement aux interfaces (avec des sauts affines $b_i^\alpha = f_{ij}^{\alpha D} y_j$) fournit l'expression suivante :

$$f_{ij}^\alpha = f_{ij}^0 + \left(F_{ik} - f_{ik}^0\right)\frac{d_k^\alpha n_j^\alpha}{h^\alpha} + f_{ij}^{\alpha D} \qquad \text{(Eq. 3)}$$

où $\mathbf{f}^{\alpha D}$ est la contribution spécifique des deux défauts aux interfaces de la couche concernée. L'hétérogénéité de déformation dans la matrice (d'une couche à l'autre) est ainsi renforcée puisqu'elle dépend de la morphologie microstructurale mais aussi des effets des défauts. Le gradient de déplacement $\mathbf{f}^0$ est obtenu en satisfaisant le lemme de Hill généralisé dans lequel (Eqs. 1-3) et les lois de comportement locales sont insérées. Un nombre fixé de défauts ouverts et/ou fermés est considéré avec une hypothèse de frottement infini des lèvres de défauts fermés. Selon le même principe que pour le matériau sain (section 3.1), la connaissance de $\mathbf{f}^0$ fournit $\mathbf{f}^\alpha$ pour toutes les couches (via Eqs. 1 et 3), les déformations et contraintes de Cauchy locales et au final la contrainte homogénéisée par moyenne volumique. La procédure est analytique et valable quel que soit le comportement des phases. La seule hypothèse concerne le comportement des défauts fermés supposés bloqués par frottement infini. Ainsi, cette population de défauts ne dégrade pas le milieu. Dans le cas où les phases (charges et matrice) sont élastiques linéaires, $\mathbf{f}^0$ et par suite les estimations aux deux échelles s'avèrent dépendre des modules des constituants et d'une série de grandeurs :

$$\mathbf{F}, \left\{\boldsymbol{\varepsilon}^{fD}\right\}, \left\{\boldsymbol{\varepsilon}^{\beta D}\right\} \quad \text{et} \quad \begin{aligned} \overline{\mathbf{T}} &= \frac{1}{|V|}\sum_{\alpha} \mathbf{d}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha} \otimes \mathbf{d}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha} \frac{A^{\alpha}}{h^{\alpha}} \\ \mathbf{D} &= \frac{1}{|V|}\sum_{\beta} \mathbf{d}^{\beta} \otimes \mathbf{n}^{\beta} A^{\beta} \\ \overline{\mathbf{D}} &= \frac{1}{|V|}\sum_{\beta} \mathbf{d}^{\beta} \otimes \mathbf{n}^{\beta} \otimes \mathbf{d}^{\beta} \otimes \mathbf{n}^{\beta} \frac{A^{\beta}}{h^{\beta}} \end{aligned} \qquad \text{(Eq. 4)}$$

L'exposant α est utilisé pour une couche quelconque du volume, alors que les exposants f et β font référence respectivement aux couches avec défauts fermés et ouverts. En accord avec (Eq. 3) $\boldsymbol{\varepsilon}^{fD}$=Sym. $\mathbf{f}^{fD}$, (resp. $\boldsymbol{\varepsilon}^{\beta D}$=Sym. $\mathbf{f}^{\beta D}$) représente la déformation locale induite par les défauts fermés (resp. ouverts) aux interfaces d'une couche f (resp. β). Au côté du tenseur $\overline{\boldsymbol{T}}$ témoin de la morphologie globale initiale du milieu, deux paramètres tensoriels **D** et $\overline{\boldsymbol{D}}$ émergent naturellement dans les estimations aux deux échelles. Ils traduisent la dégradation du milieu induite par les seuls défauts ouverts (voir sommations sur β (Eq. 4)). Leur forme reflète le caractère granulaire du milieu dans la façon dont il est dégradé. En effet non seulement l'orientation des défauts apparaît (vecteurs $\mathbf{n}^{\beta}$) mais également les vecteurs $\mathbf{d}^{\beta}$ reliant les centroïdes des grains. **D** n'est pas symétrique induisant ainsi une forme d'anisotropie complexe. Le couplage entre anisotropie initiale et induite est assuré par la coexistence de $\overline{\mathbf{T}}$ d'une part et **D** et $\overline{\mathbf{D}}$ d'autre part.

A titre d'illustration, la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha}$ (Sym. $\mathbf{f}^{\alpha}$) d'une couche α quelconque s'écrit sous forme additive de trois contributions $\boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha(r)} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha(d)} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha D}$ avec :

- $\boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha(r)}(\mathbf{E};\overline{\mathbf{T}},\mathbf{D},\overline{\mathbf{D}})$, partie réversible linéaire en **E** (Sym. **F**) paramétrée par la morphologie initiale (via $\overline{\mathbf{T}}$) et la configuration de l'endommagement (via **D** et $\overline{\mathbf{D}}$) globales du composite.
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha(d)}(\left\{\boldsymbol{\varepsilon}^{fD}\right\},\left\{\boldsymbol{\varepsilon}^{\beta D}\right\};\overline{\mathbf{T}},\mathbf{D},\overline{\mathbf{D}})$, partie véhiculant l'influence des deux populations de défauts (fermés et ouverts) présentes dans le volume sur la déformation de la couche α considérée. Les effets des interactions entre deux particules opposées sont ainsi influencés par l'état des interfaces ailleurs dans le volume.
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha D}$, nul si la couche est saine et valant $\boldsymbol{\varepsilon}^{\beta D}$ ou $\boldsymbol{\varepsilon}^{fD}$ si la couche décollée a ses interfaces ouvertes ou fermées, respectivement.

En raison de l'hypothèse de frottement infini des lèvres de défauts fermés, les $\boldsymbol{\varepsilon}^{fD}$ sont des variables rendant compte des effets de distorsion par blocage des défauts fermés. Elles sont indépendantes de **E**. En revanche, les déformations $\boldsymbol{\varepsilon}^{\beta D}$ induites par les défauts ouverts dépendent de **E** au même titre que le degré d'ouverture de ces défauts. Cette dépendance est obtenue par une procédure de localisation / homogénéisation complémentaire (voir [3] pour les détails).

Dans la section suivante l'AM, succinctement présentée ici pour une configuration d'endommagement fixée, est étendue pour gérer l'évolution de l'endommagement (critère de nucléation de défauts) et de sa configuration (critères de fermeture / réouverture). Comme on a accès aux champs locaux, c'est naturellement à cette échelle que les différents critères sont formulés.

4.2 Evolution de l'état et de la configuration de l'endommagement

Au nombre de trois, les critères privilégient une formulation cinématique en accord avec la philosophie de l'AM. En pratique, ils sont testés à chaque pas de chargement. Quand l'un ou l'autre est satisfait pour une ou plusieurs interfaces, les paramètres tensoriels **D** et $\overline{\mathbf{D}}$ sont actualisés en conséquence par ajout ou retrait des couches correspondantes dans les sommations qui les définissent (Eq. 4).

Critère de nucléation : décohésion grains /matrice :
Dans le prolongement de l'hypothèse de frottement infini, la nucléation est supposée en mode normal. Soit α une couche saine. On définit deux points P1 et P2 situés respectivement dans le grain et dans la couche et distants chacun du barycentre de l'interface I_1^α d'une longueur λ (inférieure à la plus petite des épaisseurs de couche), voir (Fig. 3). L'intervalle $[-\lambda,\lambda]$ peut être vu comme l'épaisseur d'une interface équivalente, mais qui contrairement aux modèles cohésifs n'est pas considérée comme une phase ayant son comportement propre. On suppose qu'il y a décohésion de l'interface dès lors que la projection de la différence de positions actuelles d_{norm}^α des deux points P2 et P1 sur la normale à l'interface I_1^α atteint une valeur critique d_{crit}, constante à déterminer expérimentalement, liée aux propriétés d'adhésion des interfaces :

$$d_{norm}^\alpha = d_{crit} \quad \text{avec} \quad d_{norm}^\alpha = 2\lambda + \Delta\mathbf{u}.\mathbf{n}^\alpha \qquad \text{(Eq. 5)}$$

où $\Delta\mathbf{u}$ représente la différence de déplacement des points P2 et P1 au cours du chargement. Cette quantité dépend des caractéristiques morphologiques de la couche considérée et de l'endommagement déjà présent ailleurs dans le milieu (cf. [3] pour son expression exacte). Dès lors qu'une couche α vérifie (Eq. 5), les interfaces en regard sont décollées.

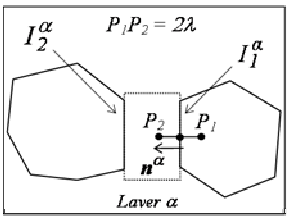

Fig. 3. Définition des points tests P1 et P2 de part et d'autre d'une interface.

Critères de fermeture et de réouverture des défauts :
L'hypothèse d'ouverture en mode I impose que les défauts soient d'abord ouverts avant de se refermer. Une fois les défauts créés, des critères de fermeture/ réouverture gèrent l'évolution de la configuration d'endommagement et traduisent ainsi la désactivation / réactivation des défauts. Pour une couche β dont les interfaces sont décollées, les défauts se ferment dès que $\left\langle \mathbf{b}^\beta \right\rangle_{I_1^\beta}.\mathbf{n}^\beta = 0$ où $\left\langle \mathbf{b}^\beta \right\rangle_{I_1^\beta}$ désigne le saut de déplacement moyen sur l'interface I_1^β de la couche β. Etant donné la linéarité du saut à l'interface, ce dernier est donné par la relation $\left\langle \mathbf{b}^\beta \right\rangle_{I_1^\beta} = \mathbf{f}^\beta D.\mathbf{Y}^{B1}$ avec $\mathbf{Y}^{B1}$ le vecteur position initial du barycentre de I_1^β et $\mathbf{f}^{\beta D}$, évalué à chaque pas de chargement à partir de la connaissance de $\boldsymbol{\varepsilon}^{\beta D}$ en fonction de $\mathbf{E}$ [4]. Au moment de la fermeture, une couche β devient une couche f, dont la déformation liée aux défauts à ses frontières devient $\boldsymbol{\varepsilon}^{fD}$, définie par : $\boldsymbol{\varepsilon}^{fD} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\beta D}(\mathbf{E}_{ferm})$, c'est-à-dire que la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}^{fD}$ prend la valeur de $\boldsymbol{\varepsilon}^{\beta D}$ au moment précis de la fermeture des défauts pour la couche considérée. En raison du coefficient de frottement infini, $\boldsymbol{\varepsilon}^{fD}$ et le saut moyen n'évoluent plus en attendant une éventuelle réouverture. On suppose que celle-ci survient dès que la déformation normale $\mathbf{n}^f.\boldsymbol{\varepsilon}^f.\mathbf{n}^f$ redevient strictement positive.

4.3 Illustration

A titre d'illustration des capacités de l'AM en présence d'endommagement, on présente une simulation d'une extension – contraction, réalisée sur un volume constitué de 351 grains

polyédriques entourés d'une matrice occupant 25% du volume total. Cette microstructure a été générée numériquement de sorte à satisfaire les exigences de la schématisation au départ de l'AM (section 1). Le critère de compatibilité (Eq. 2) est satisfait avec une très bonne précision pour le nombre de particules considéré. Les modules élastiques valent E = 120 GPa - ν = 0,3 pour les grains et E = 4 GPa - ν =0,45 pour la matrice. La valeur critique d_{crit} et la quantité associée λ intervenant dans le critère de nucléation sont choisies arbitrairement et valent respectivement 3,548 µm et h/10 où h=29µm (épaisseur de la couche la plus fine du volume).
Le gradient de déplacement macroscopique **F** (partie symétrique correspondante **E**) est la seule donnée requise par l'AM pour définir le trajet de chargement. Le composite est soumis au chargement suivant : (i) « tension » : extension dans la direction **1**, contraction dans les directions **2** et **3** en imposant un rapport constant entre les incréments de **F** : $\Delta F_{22} = \Delta F_{33} = -0{,}3\ \Delta F_{11}$; (ii) « compression » : chargement opposé au premier (contraction dans la direction **1**, extension dans les deux autres directions, en conservant le même rapport entre les incréments).
La (Fig. 4) présente l'évolution de la contrainte homogénéisée Σ_{11} en fonction de la déformation axiale E_{11} (imposée). Parallèlement, la (Fig. 5) visualise en 3D la microstructure, pour certains points remarquables de la courbe de la (Fig. 4) ainsi que la représentation du module d'Young E(**m**) homogénéisé dans chaque direction **m** des plans (**1**,**2**), (**1**,**3**) et (**2**,**3**). L'angle φ représente l'angle entre la direction **i** et le vecteur **m** dans le plan (**i**,**j**).
Chaque fois qu'une couche de matrice se décolle de ses grains adjacents, ses interfaces se colorent en rouge sur la visualisation 3D. Lorsque les défauts se referment, ils disparaissent en vue de mieux visualiser leur fermeture (ils demeurent néanmoins présents dans le matériau). On peut ainsi suivre la chronologie et la localisation des événements endommageants. La mise en parallèle des deux figures permet de formuler les observations suivantes aux points remarquables de la courbe indiqués entre parenthèses :

- (1) : le matériau est sain et pratiquement isotrope, la réponse homogénéisée est linéaire élastique.
- De (2) à (4) : on observe la nucléation progressive des défauts de normale proche de l'axe **1** ; la réponse devient non linéaire avec un adoucissement progressif. A la fin de la phase de « tension », le module d'Young est principalement dégradé dans la direction **1**.
- L'étape (4)-(5) correspond à la décharge jusqu'à E_{11}=0. La pente de la réponse axiale homogénéisée est clairement plus faible que celle du début du chargement, confirmant ainsi la dégradation de la rigidité.
- Au point (5) (c'est-à-dire en E_{11}=0), tous les défauts se ferment simultanément, conduisant ainsi à la restauration instantanée de E(**m**) (les paramètres **D** et $\overline{\mathbf{D}}$ deviennent nuls, puisqu'ils font intervenir une somme sur les défauts ouverts, voir (Eq. 4)). On illustre ainsi la capacité de l'AM à rendre compte du comportement unilatéral.
- Entre (5) et (6), la réponse en compression est linéaire avec une pente égale à sa valeur initiale.
- En poursuivant la compression (entre (6) et (7)), des défauts normaux aux directions transverses **2** et **3** apparaissent progressivement. A la fin du chargement, le module d'Young E est dégradé dans ces directions avec une légère anisotropie (dégradation plus importante dans la direction **3**). Les défauts refermés sont bloqués (hypothèse de frottement infini) et ne contribuent pas à l'anisotropie.

5. Conclusion

Les dernières avancées dans le développement de l'AM permettent de conclure sur quelques atouts ou spécificités de cette approche multi-échelles. D'une part, elle est adaptée, mais exclusivement réservée, aux microstructures fortement chargées. D'autre part, une caractéristique essentielle est son caractère direct, manifesté sous trois formes. Tout d'abord dans les fondations même de l'approche, par une représentation explicite de la microstructure dans laquelle chaque grain et zone de matrice intergranulaire est représenté, labellisé et caractérisé via des paramètres morphologiques. Cet aspect distingue l'AM des méthodes de type Eshelby (versions classiques) et par là même, la « rapproche » des approches en champs complets. De ce point de départ, découle une résolution

directe du problème d'homogénéisation non linéaire (sans linéarisation préalable des lois non linéaires locales, dans l'espace temps réel en viscoélasticité [2]) facilitant le traitement de non linéarités couplées. Enfin, l'aspect direct de l'AM se manifeste par l'accès (via hypothèses) à une estimation des champs locaux, avec une hétérogénéité dans la matrice fonction de la morphologie microstructurale. Une telle hétérogénéité reflète la complexité des interactions entre particules. Cet aspect est novateur dans le domaine des propergols dont l'homogénéisation est majoritairement abordée par des approches en champs moyens (ex. Mori-Tanaka sans fluctuation) ne permettant pas la prise en compte de ces effets complexes dus au fort taux de charges. Les premières confrontations AM/EF réalisées sur une microstructure propergol réelle en hyperélasticité sont encourageantes pour des temps de calculs AM 20 fois inférieurs (à ressources informatiques identiques). De la version en petites perturbations intégrant l'endommagement, on retiendra le suivi possible de l'évolution de la réponse homogénéisée (anisotropie induite, effets unilatéraux) en cours de chargement en fonction des évènements discrets se produisant à l'échelle des interfaces, nucléations et fermeture de défauts, dont on connaît et peut visualiser simultanément la position et les caractéristiques (orientation, morphologie) au sein de la microstructure. L'influence des défauts sur les interactions entre particules, l'hétérogénéité résultante dans la matrice et par suite, les décohésions et fermetures de défauts ultérieures est également prise en compte.

Références

[1] H.M. INGLIS, P.H. GEUBELLE, K. MATOUS, H. TAN, Y. HUANG, « Cohesive modeling of dewetting in particulate composites: micromechanics vs. multiscale finite element analysis ». *Mechanics of Materials,* Vol. 39(6), pp. 580-595, 2007.

[2] C. NADOT-MARTIN, M. TOUBOUL, A. DRAGON, A. FANGET, « Direct scale transition approach for highly-filled viscohyperelastic particulate composites: computational study ». *Chapitre 12 [dans] Multiscale Modeling of Heterogeneous Materials: From Microstructure to Macro-scale Properties*, O. Cazacu ed., ISTE/Wiley, pp. 218-237, 2008.

[3] C. NADOT, A. DRAGON, H. TRUMEL, A. FANGET, « Damage modelling framework for viscoelastic particulate composites via a scale transition approach ». *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, Vol. 44(3), pp. 553-583, 2006.

[4] S. DARTOIS, C. NADOT-MARTIN, D. HALM, A. DRAGON, A. FANGET. « Discrete damage modelling of highly-filled composites via a direct multiscale "morphological approach" ». *Journal of Multiscale Modelling,* Vol. 1(384), pp. 347-368, 2009.

[5] J. CHRISTOFFERSEN, « Bonded granulates ». *J. Mech. Phys. Solids,* Vol. 31(1), pp. 55-83, 1983.

[6] F. XU, N. ARAVAS, P. SOFRONIS, « Constitutive modeling of solid propellant materials with evolving microstructural damage ». *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 56 pp. 2050–2073, 2008.

[7] H. MOULINEC, P. SUQUET, « Intraphase strain heterogeneity in nonlinear composites: a computational approach ». *Eur. J. Mech. A/Solids,* Vol. 22, pp. 751-770, 2003.

[8] V. TARIEL, D. JEULIN, A. FANGET, G. CONTESSE, « 3D Multi-scale segmentation of granular materials ». *Image Anal. Stereol.*, Vol. 27, pp. 23-28, 2008.

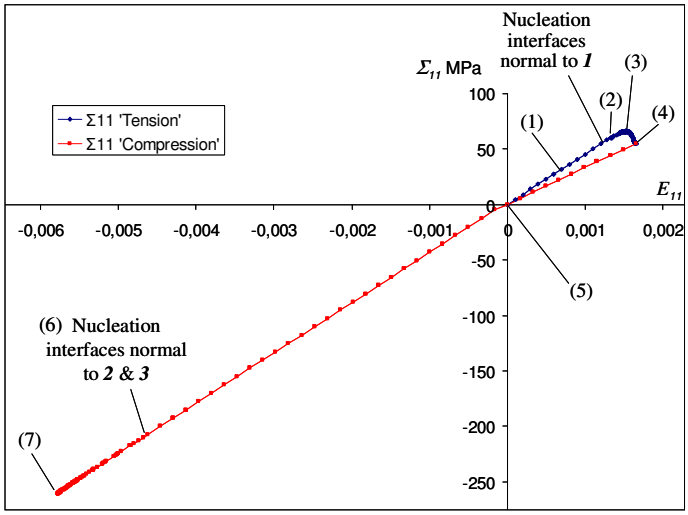

Fig. 4. Contrainte de Cauchy homogénéisée Σ_{11} en fonction de E_{11}. lors de la simulation d'un trajet « tension - compression » (calculs réalisés en petites déformations avec endommagement).

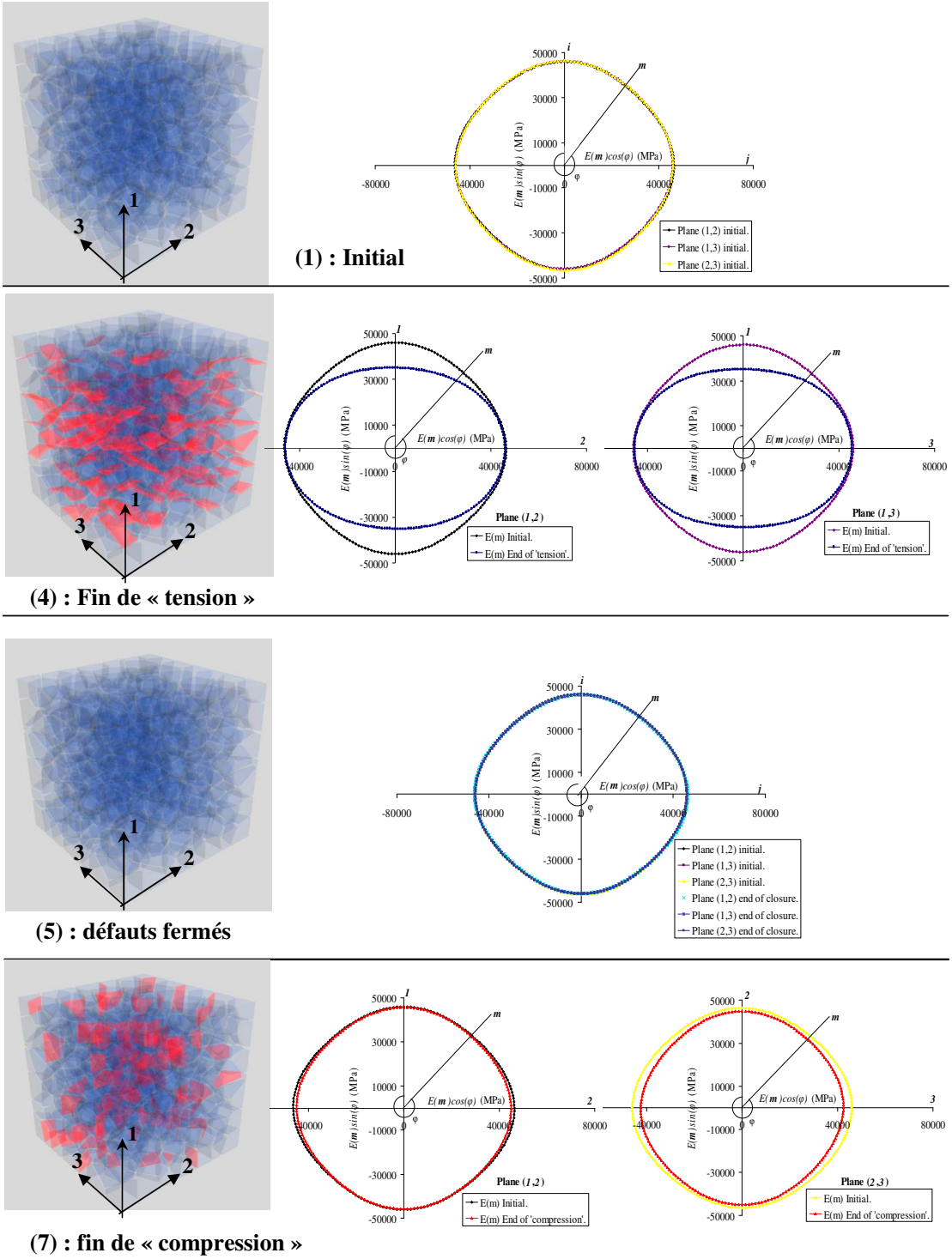

Fig. 5. Position et orientation des défauts ouverts et représentation du module d'Young homogénéisé.