



**HAL**  
open science

**Propriétés élastiques effectives des matériaux  
nanoporeux à cavités sphériques et sphéroïdales**  
Xavier Haller, Yann Monerie, Stéphane Pagano, Pierre-Guy Vincent

► **To cite this version:**

Xavier Haller, Yann Monerie, Stéphane Pagano, Pierre-Guy Vincent. Propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux à cavités sphériques et sphéroïdales: Comportement des matériaux nanoporeux. *Matériaux & Techniques*, 2015, 103 (3), 10.1051/mattech/2015021 . hal-01285056

**HAL Id: hal-01285056**

**<https://hal.science/hal-01285056>**

Submitted on 8 Mar 2016

**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.

# Propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux à cavités sphériques et sphéroïdales

## Comportement des matériaux nanoporeux

X. Haller<sup>1,2</sup>, Y. Monerie<sup>2,3</sup>, S. Pagano<sup>2,3</sup> et P.-G. Vincent<sup>1,2</sup>

Reçu le 11 février 2015, accepté le 20 avril 2015

**Résumé** – Ce travail concerne la modélisation des propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales. La motivation de ce travail est relative au comportement du dioxyde d'uranium irradié (UO<sub>2</sub>), étudié par l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN) afin d'estimer la tenue des crayons combustibles lors d'un accident de réactivité. Ce matériau possède deux populations de cavités : (i) des cavités intragranulaires plutôt sphériques de quelques nanomètres, (ii) des cavités intergranulaires lenticulaires dont la taille varie de quelques dizaines à plusieurs centaines de nanomètres. Des travaux de dynamique moléculaire ont montré l'existence d'un effet de surface à l'échelle des cavités nanométriques dans l'UO<sub>2</sub> qui influence le comportement élastique apparent. Un modèle de type Mori et Tanaka généralisé, fondé sur l'approche par motifs morphologiques représentatifs, permettant d'estimer les propriétés élastiques effectives d'un tel matériau est proposé. L'effet de surface présent à l'échelle nanométrique est pris en compte via l'introduction des tailles caractéristiques des cavités dans le modèle. Les possibilités offertes par le modèle sont illustrées dans le cas particulier d'un matériau contenant des cavités sphériques et sphéroïdales orientées aléatoirement et dont la distribution des centres est isotrope.

**Mots clés** : Homogénéisation / matériaux nanoporeux / comportement élastique effectif / effet de surface / micromécanique

**Abstract** – **Effective elastic properties of nanoporous materials with spherical and spheroidal voids.** This work is devoted to the modeling of the effective elastic properties of nanoporous materials containing spherical and spheroidal voids. The motivation for this work is relative to the behavior of the irradiated uranium dioxide (UO<sub>2</sub>) studied by the French “*Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire*” to investigate the response of fuel rods under a reactivity accident. As a first approximation, this material exhibits two populations of cavities: (i) intragranular cavities, almost spherical in shape with a typical diameter of a few nanometers, (ii) intergranular cavities, lenticular in shape whose the size ranges from nanometers to few hundred nanometers. Molecular dynamics results show the existence of a non-neglectable surface effect on the effective elastic behavior for uranium dioxide at the nanometric scale. A generalized Mori-Tanaka model based on the morphologically representative pattern approach is proposed to estimate the effective elastic properties of such a material. The surface effect is taken into account by introducing the characteristic lengths of the cavities in the model. The abilities of this model are illustrated in the particular case of a material containing spherical and spheroidal randomly oriented cavities whose the spatial distribution of the centers is isotropic.

**Key words**: Homogenization / nanoporous materials / effective elastic properties / surface effect / micromechanical models

<sup>1</sup> Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire, B.P. 3, 13115 Saint-Paul-lez-Durance Cedex, France  
xavier.haller@irsn.fr

<sup>2</sup> Laboratoire de Micromécanique et d'Intégrité des Structures, IRSN-CNRS-Université de Montpellier, France

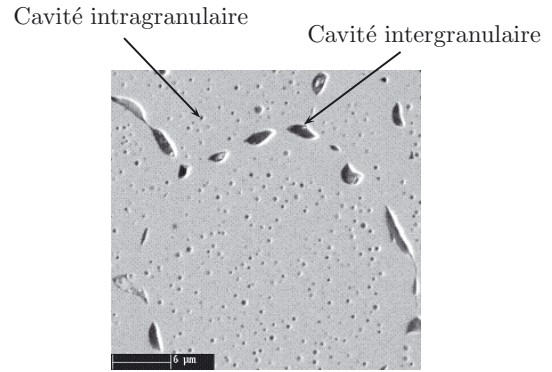
<sup>3</sup> Laboratoire de Mécanique et Génie Civil, Université de Montpellier, CC 048, 34095 Montpellier Cedex, France

## 1 Introduction

Ce travail est dédié à la détermination des propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités de formes sphériques et sphéroïdales (ellipsoïdes de révolution). L'application visée concerne le combustible nucléaire  $\text{UO}_2$  fortement irradié, étudié par l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) afin d'estimer la tenue des crayons combustibles lors d'un accident de réactivité. Des modèles micromécaniques ont déjà été développés pour décrire le comportement mécanique de ce matériau (voir par exemple [1–4]), qui a la particularité de posséder, en première approximation, deux populations de cavités : des cavités intragranulaires plutôt sphériques, de l'ordre de quelques nanomètres, et des cavités intergranulaires, de forme plutôt lenticulaire (sphéroïdes aplatis) et dont la taille varie de quelques dizaines à plusieurs centaines de nanomètres (Fig. 1). Des travaux de dynamique moléculaire récents [5] ont montré l'existence d'un effet de surface (ou *de taille*) à l'échelle des cavités nanométriques dans l' $\text{UO}_2$  qui modifie de façon non négligeable son comportement élastique effectif. Cet effet est dû à la présence d'une zone perturbée (ou *zone interfaciale*) de quelques rangées d'atomes entre les cavités et la matrice. En effet, les atomes situés près de l'interface entre deux phases sont dans un environnement local différent (coordinence, énergie, position d'équilibre) de celui des atomes situés plus loin de cette interface [6–9]. Cette zone perturbée a donc des propriétés mécaniques différentes de celles de la matrice [7, 8]. L'effet de surface devient plus important à mesure que le rapport du nombre d'atomes à proximité des surfaces sur le nombre total d'atomes augmente. Les propriétés mécaniques macroscopiques des matériaux nanocomposites dépendent alors fortement des longueurs caractéristiques nanométriques de la microstructure (ou du rapport surface/volume) [8–10], telles que la taille des cavités dans le cas de l' $\text{UO}_2$  irradié.

L'objectif de cette étude est de développer un modèle de loi de comportement mécanique analytique en élasticité linéaire capable de prendre en compte la microstructure hétérogène de l' $\text{UO}_2$  irradié et l'effet de surface présent à l'échelle des cavités nanométriques.

Des travaux récents [9, 12–14] ont étendu des modèles micromécaniques classiques, en particulier le modèle auto-cohérent généralisé et le modèle de Mori et Tanaka [15], aux cas des matériaux nanocomposites. Ces modèles fournissent des estimations du comportement élastique effectif des matériaux nanocomposites contenant des inclusions (ou cavités dans le cas présent) sphériques distribuées de façon homogènes et isotropes. Le travail présenté ici conduit à un modèle *de type Mori et Tanaka généralisé* permettant d'estimer les propriétés élastiques de matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales dont la distribution des centres des cavités est plus généralement ellipsoïdale. Cette estimation est issue de l'application de l'approche par motifs morphologiques représentatifs (MMR) [16], particulièrement adaptée pour introduire des longueurs



**Fig. 1.** Micrographie d' $\text{UO}_2$  irradié à 23 GW j/T après un traitement thermique à 2000 K pendant 3 h environ [11].

*Fig. 1. Micrograph of irradiated  $\text{UO}_2$  at 23 GWd/tU after a heat treatment at 2000 K for about 3 h [11].*

caractéristiques de la microstructure dans les modèles micromécaniques.

Dans un premier temps (Sect. 2), le modèle d'interface imparfaite cohérente utilisé pour décrire les zones perturbées est détaillé, ainsi que l'approche par motifs morphologiques représentatifs. Cette dernière est ensuite appliquée pour obtenir une estimation du comportement effectif des matériaux nanoporeux. À titre d'exemple (Sect. 3), le cas d'un matériau bi-poreux contenant des cavités nanosphériques et nanosphéroïdales orientées aléatoirement dont la distribution des centres est isotrope est traité. Enfin dans la Section 4, les applications numériques sont présentées pour illustrer les résultats de la Section 3, en particulier la dépendance du modèle à la forme et à la taille des cavités.

## 2 Interface et approche par motifs

### 2.1 Modélisation de la zone perturbée

Le modèle le plus couramment utilisé pour représenter les zones perturbées dans le cadre de l'étude du comportement mécanique des matériaux nanocomposites est le modèle d'interface imparfaite cohérente initialement proposé par Gurtin et Murdoch [17]. Ce modèle décrit la zone perturbée entre un milieu 1 et un milieu 2 par une surface matérielle, notée  $\Gamma$ , à travers laquelle une discontinuité du vecteur contrainte est postulée alors que le déplacement est supposé continu. L'équilibre de la surface est décrit par l'équation suivante [12, 13], dite parfois de Young-Laplace généralisée :

$$[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \mathbf{b})\mathbf{n} + \text{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0} \quad (1)$$

où  $\boldsymbol{\sigma}_s$  représente la contrainte surfacique,  $[\boldsymbol{\sigma}] = \boldsymbol{\sigma}^{(2)} - \boldsymbol{\sigma}^{(1)}$  le saut de contrainte à travers la surface, l'opérateur  $\text{div}_s$  la divergence surfacique d'un champ de tenseurs surfaciques tangents d'ordre deux,  $\mathbf{n}$  le vecteur normal unitaire à  $\Gamma$  (orienté de 1 vers 2) et  $\mathbf{b}$  le tenseur (d'ordre deux) de courbure.

Le comportement mécanique de la surface est supposé élastique linéaire isotrope dans le plan tangent à  $\Gamma$  [8,9] et est caractérisé par le tenseur de rigidité surfacique  $\mathbb{C}_s$  [14] :

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \gamma_s \mathbf{i}_T + \mathbb{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s \quad \text{avec} \quad \mathbb{C}_s = 2(k_s \mathbb{J}_T + \mu_s \mathbb{K}_T) \quad (2)$$

où  $\mathbb{J}_T = \frac{1}{2}(\mathbf{i}_T \otimes \mathbf{i}_T)$  et  $\mathbb{K}_T = \mathbb{I}_T - \mathbb{J}_T$ . Les tenseurs  $\mathbf{i}_T$  et  $\mathbb{I}_T$  sont les tenseurs identités respectivement d'ordre deux et quatre dans le plan tangent à  $\Gamma$  et dont les expressions sont les suivantes :

$$\mathbf{i}_T = \mathbf{i} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (3)$$

et

$$\mathbb{I}_T = \sum_{\alpha, \beta=t,b} \left[ \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\alpha + \frac{1}{2}(\mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\beta \otimes \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\beta + \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{t}_\beta \otimes \mathbf{t}_\beta \otimes \mathbf{t}_\alpha) \right] \quad (4)$$

où les vecteurs unitaire  $\mathbf{t}_t$  et  $\mathbf{t}_b$  sont orthogonaux et tangents à  $\Gamma$  au point considéré. Le tenseur  $\mathbf{i}$  est le tenseur identité d'ordre deux. Les scalaires  $k_s$  et  $\mu_s$  sont les coefficients d'élasticité surfaciques exprimés en  $\text{J/m}^2$  (ou en  $\text{N/m}$ ). Le scalaire  $\gamma_s$  (également exprimé en  $\text{J/m}^2$ ) est appelé tension de surface (par analogie avec les liquides). Ce travail est dédié à la détermination des propriétés élastiques effectives. L'influence de la tension de surface sur le comportement mécanique effectif n'est pas abordée dans le cadre de cet article (elle sera prise nulle par la suite).

La déformation surfacique  $\boldsymbol{\epsilon}_s$  est égale à la partie tangentielle de la déformation dans le milieu 1 (ou dans le milieu 2 car le déplacement et par conséquent la déformation tangentielle sont supposés continus à travers  $\Gamma$ ) sur la surface  $\Gamma$  :

$$\boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}_1(\mathbf{x}) = \mathbb{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}_2(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma. \quad (5)$$

Il a été constaté que les équations du modèle précédent correspondent, in fine, aux équations d'une coque mince (d'épaisseur  $h$  finie) de Kirchhoff-Love dont les efforts nécessaires pour la fléchir sont négligeables devant les efforts pour l'allonger (les moments linéiques sont négligés). Dans le cadre de cette théorie, le tenseur de rigidité volumique de cette coque équivalente (déjà mis en évidence dans [12,18]), indicée  $ph$ , s'écrit :

$$\mathbb{C}_{ph} = \frac{1}{h} \tilde{\mathbb{C}}_s \quad (6)$$

avec

$$\tilde{\mathbb{C}}_s = 3\tilde{k}_s \mathbb{J} + 2\tilde{\mu}_s \mathbb{K} \quad (7)$$

où

$$\tilde{k}_s = \frac{4k_s \mu_s}{3(3\mu_s - k_s)} \quad \text{et} \quad \tilde{\mu}_s = \mu_s. \quad (8)$$

Les tenseurs  $\mathbb{J} = \frac{1}{3}(\mathbf{i} \otimes \mathbf{i})$  et  $\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$  sont les tenseurs de la base d'isotropie pour les tenseurs d'ordre quatre isotropes. Le tenseur  $\mathbb{I}$  est le tenseur identité d'ordre quatre.

Il est possible de remarquer que :

$$\nu_{ph} = \tilde{\nu}_s = \frac{3\tilde{k}_s - 2\tilde{\mu}_s}{2(3\tilde{k}_s + \tilde{\mu}_s)} = \frac{k_s - \mu_s}{k_s + \mu_s} \quad (9)$$

où  $\nu_{ph}$ , qui est indépendant de  $h$ , est le coefficient de Poisson de l'interphase équivalente et  $\tilde{\nu}_s$  le coefficient de Poisson associé au tenseur de rigidité (isotrope)  $\tilde{\mathbb{C}}_s$ .

## 2.2 Approche par motifs morphologiques représentatifs

L'approche par motifs morphologiques représentatifs (MMR) a été initialement proposée par Stolz et Zaoui [16] et fortement développée par la suite par Bornert [19,20]. Contrairement à l'approche classique, fondée sur le problème d'inclusion d'Eshelby [21], l'approche par MMR permet de déterminer les propriétés élastiques effectives d'un matériau hétérogène en considérant des champs élastiques admissibles hétérogènes par phase. Cela permet de prendre en compte l'arrangement local des phases et donc d'introduire des longueurs caractéristiques de la microstructure dans les modèles micromécaniques. Elle est donc particulièrement adaptée pour déterminer les propriétés élastiques effectives des matériaux nanocomposites particuliers pour lesquels les zones perturbées sont localisées entre les hétérogénéités (cavités dans le cas présent) et la matrice.

L'approche par MMR suppose que le volume élémentaire représentatif (VER) peut être décomposé en sous-domaines disjoints, connexes, de dimensions finies. Ces sous-domaines sont regroupés en famille appelées *motifs morphologiques représentatifs*. Les membres d'un même motif ont une géométrie et une distribution spatiale des propriétés mécaniques locales identiques.

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

Cette étude se limite au cas de matériaux dont la distribution des centres des motifs (points  $\mathbf{x}_r^i$ ,  $\forall r \in [1, \dots, p]$  et  $\forall i \in [1, \dots, N_r]$ ) est supposée ellipsoïdale au sens de Ponte Castañeda et Willis [22]. Les covariances  $C_{rs}$  entre les centres d'un motif  $r$  et ceux d'un motif  $s$ , qui s'interprètent comme la probabilité de trouver un centre du motif  $r$  en un point  $\mathbf{x}$  en ayant conjointement un centre du motif  $s$  au point  $\mathbf{x} + \mathbf{h}$ , sont alors de la forme :

$$C_{rs}(\mathbf{h}) = \psi_{rs}(\|\boldsymbol{\alpha} : \mathbf{h}\|), \quad \forall (r, s) \in [1, p]^2, \quad \forall \mathbf{h} \neq \mathbf{0} \quad (10)$$

avec  $\boldsymbol{\alpha}$  un tenseur d'ordre deux symétrique normalisé et  $\psi_{rs}$  une fonction scalaire d'arguments scalaires. Le cas  $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{i}$  correspond au cas d'une distribution isotrope.

Les moyennes des contraintes et des déformations sur le domaine  $D_r$  sont respectivement notées  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r}$  et  $\langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_r}$  et sont égales à :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} = \frac{1}{|D_r|} \int_{D_r} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_r} = \frac{1}{|D_r|} \int_{D_r} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (11)$$

Dans le cadre d'une distribution spatiale ellipsoïdale des centres des motifs, la détermination des propriétés élastiques effectives passe par l'étude de problèmes auxiliaires. Chaque problème correspond à l'étude du comportement d'un motif lorsqu'il est plongé dans un milieu de référence infini (de rigidité  $\mathbb{C}_0$ ), soumis à l'infini à une déformation  $\boldsymbol{\epsilon}^0$ . Lorsque le milieu de référence est la matrice (de rigidité  $\mathbb{C}_m$ ), il est possible de construire des estimations de type Mori et Tanaka généralisé (MTG) en identifiant sur chaque problème auxiliaire le tenseur d'ordre quatre  $\mathbb{T}_{M_r}^m$  tel que :

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_r} = \mathbb{T}_{M_r}^m : \boldsymbol{\epsilon}^0 = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} - \mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_r} \quad (12)$$

où le tenseur d'ordre deux  $\boldsymbol{\tau}$  désigne la polarisation ( $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma} - \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\epsilon}$ ). Le tenseur de rigidité effectif issu de l'estimation de type MTG s'exprime alors :

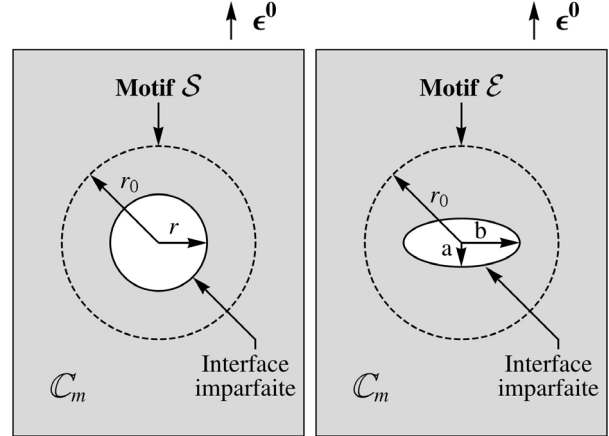
$$\mathbb{C}_M^{\text{MTG}} = \mathbb{C}_m + \left( \mathbb{I} - \langle \mathbb{T}_{M_r}^m \rangle_M : \mathbb{P}_m^d \right)^{-1} : \langle \mathbb{T}_{M_r}^m \rangle_M \quad (13)$$

où  $\langle \mathbb{T}_{M_r}^m \rangle_M = \sum_{r=1}^p c_r \mathbb{T}_{M_r}^m$ . Le scalaire  $c_r$  ( $\forall r \in [1, \dots, p]$ ) désigne la fraction volumique de motif  $r$ . Le tenseur  $\mathbb{P}_m^d$  est le tenseur de Hill relatif à la distribution ellipsoïdale des centres des motifs (c'est-à-dire que la forme de l'inclusion ellipsoïdale considérée pour le calcul de  $\mathbb{P}_m^d$  est la même que celle de la distribution spatiale des centres) lorsque le milieu de référence est la matrice [20]. Ce tenseur est égal à  $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_m) : \mathbb{C}_m^{-1}$  où  $\mathbb{S}^E$  est le tenseur d'Eshelby dont l'expression pour une inclusion sphéroïdale est donnée à l'annexe B.

### 3 Estimation des propriétés élastiques effectives

#### 3.1 Problèmes auxiliaires

Afin d'établir des estimations des propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales dont la distribution spatiale des centres est ellipsoïdale, deux motifs de forme extérieure sphérique (de rayon  $r_0$ ) sont définis. Le premier, noté  $\mathcal{S}$  et relatif aux cavités sphériques, est constitué d'une cavité sphérique (de rayon  $r$ ) entourée d'une couche de matrice de forme extérieure sphérique concentrique avec le centre de la cavité. Le second, noté  $\mathcal{E}$  et relatif aux cavités sphéroïdales, est constitué d'une cavité sphéroïdale (ellipsoïde de révolution) également entourée d'une couche de matrice de forme extérieure sphérique concentrique avec le centre de la cavité. L'axe de révolution de la cavité est porté par le vecteur  $\mathbf{n}$ . Les longueurs des demi-axes de la cavité sont notés  $a$  et  $b$



**Fig. 2.** Représentations schématiques des deux problèmes auxiliaires associés aux motifs  $\mathcal{S}$  (à gauche) et  $\mathcal{E}$  (à droite).

*Fig. 2. Schematic representations of the two auxiliary problems related to the patterns  $\mathcal{S}$  (left) and  $\mathcal{E}$  (right).*

avec  $a$  la longueur du demi-axe suivant  $\mathbf{n}$ . Le rapport de forme  $w$  de la cavité est égal à  $a/b$  ( $w < 1$  cavité aplatie ou *oblate*,  $w > 1$  cavité allongée ou *prolate*,  $w = 1$  cavité sphérique). Dans les deux motifs, des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées entre la cavité et la matrice. Le comportement élastique des interfaces est caractérisé par le tenseur de rigidité surfacique  $\mathbb{C}_s$  (Éq. (2)).

La distribution des centres des cavités étant supposée ellipsoïdale, la détermination des propriétés élastiques effectives, par l'intermédiaire de l'approche par MMR, passe par la résolution de deux problèmes auxiliaires associés aux motifs  $\mathcal{S}$  et  $\mathcal{E}$ , représentés sur la Figure 2. Des estimations de type Mori et Tanaka généralisé sont obtenues en identifiant les propriétés du milieu de référence à celles de la matrice.

Il est important de remarquer que, dans le cadre des estimations de type Mori et Tanaka généralisé, la forme extérieure et la taille de la couronne de matrice dans les motifs n'ont pas d'influences sur les estimations des propriétés élastiques effectives construites. En effet, les problèmes auxiliaires associés aux motifs (lorsque le milieu de référence est la matrice) sont identiques quelles que soient la forme et la taille du domaine de matrice dans les motifs (il est même possible de définir des motifs sans domaine de matrice). Cette remarque est illustrée dans le cas particulier du matériau traité à titre d'exemple à la Section 3.2. Il est cependant commode de définir des motifs de formes extérieures sphériques lorsque l'on considère des distributions spatiales des centres des motifs isotropes, afin de s'assurer que l'assemblage de motifs peut être construit et qu'il n'y a pas de chevauchement des membres des motifs dans le VER. Cet aspect, intimement lié à la notion d'ellipsoïdes de sûreté de Ponte Castañeda et Willis [22], n'est pas développé ici.

En raison de la symétrie du problème auxiliaire associé au motif  $\mathcal{S}$ , le tenseur  $\mathbb{T}_{M_S}^m$  est isotrope. Ses parties hydrostatique et déviatorique sont respectivement

déterminées en appliquant des déformations  $\epsilon^0$  hydrostatique et déviatorique. Les champs élastiques induits par ces chargements sont déterminés de façon exacte en suivant les travaux de Duan et al. [9]. La moyenne de la polarisation sur le motif  $\mathcal{S}$  induite par ces chargements est déterminée en appliquant l'Équation (12). Il est ensuite possible de montrer que :

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{\mathcal{MS}}^m &= f_{\mathcal{S}} \frac{(3k_m + 4\mu_m)(4k_s - 3k_m r)}{4(k_s + \mu_m r)} \mathbb{J} \\ &+ f_{\mathcal{S}} \frac{10\mu_m(3k_m + 4\mu_m)\beta_d}{3k_m\delta_d + 4\mu_m\zeta_d} \mathbb{K} \end{aligned} \quad (14)$$

où

$$\begin{aligned} \beta_d &= (k_s + r\mu_m)(\mu_s - r\mu_m), \\ \delta_d &= 3r\mu_m(r\mu_m + \mu_s) + 2k_s(2r\mu_m + \mu_s), \\ \zeta_d &= 3k_s(r\mu_m + \mu_s) + 2r\mu_m(r\mu_m + 2\mu_s). \end{aligned} \quad (15)$$

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

Le problème auxiliaire associé au motif  $\mathcal{E}$ , noté  $\mathcal{A}$  n'est pas résolu directement. Sa solution est obtenue par l'intermédiaire d'un second problème, noté  $\mathcal{A}^*$  identique, où l'interface imparfaite cohérente est remplacée par une interphase d'épaisseur  $h$  constante. La solution du problème  $\mathcal{A}$  est ensuite obtenue à partir de la solution du problème  $\mathcal{A}^*$  par une approche asymptotique, en exploitant l'équivalence entre les modèles d'interface imparfaite cohérente et d'interphase fine (cf. Sect. 2.1, Éq. (6)).

Le problème  $\mathcal{A}^*$  est résolu sous la forme d'une solution analytique approchée en s'appuyant sur les résultats des travaux de Cherkaoui et al. [23]. Ces derniers ont étudié le comportement mécanique d'une inclusion ellipsoïdale entourée d'une interphase, elle-même entourée d'un milieu infini sur lequel une déformation homogène est appliquée à l'infini. Le problème  $\mathcal{A}^*$  correspond donc à un cas particulier de leurs travaux. En utilisant les techniques de Green (plus précisément l'équation de Lippmann et Schwinger), ainsi que les opérateurs d'interface [24], les auteurs ont donné une solution approchée de ce problème en considérant deux hypothèses principales : (i) l'interphase est très mince (ii) la déformation en tout point de l'inclusion est supposée égale à sa valeur moyenne. La particularité de la solution approchée de Cherkaoui et al. [23] est qu'elle s'exprime en fonction de la solution du problème d'inclusion d'Eshelby. Après quelques développements détaillés à l'annexe 5, le tenseur  $\mathbb{T}_{\mathcal{ME}}^m$  (isotrope transverse de part la symétrie du problème auxiliaire associé au motif  $\mathcal{E}$ ) est exprimé de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{\mathcal{ME}}^m &= f_{\mathcal{E}} \left[ \alpha(\mathbb{I} - \mathbb{H}) : \tilde{\mathbb{C}}_s - \mathbb{C}_m \right] \\ &: \left[ \mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \left( \mathbb{C}_m - \alpha(\mathbb{I} - \mathbb{H}) : \tilde{\mathbb{C}}_s \right) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (16)$$

où le tenseur  $\mathbb{H}$  s'exprime en fonction du tenseur d'Eshelby  $\mathbb{S}^E(\tilde{\mathbb{C}}_s)$  et du tenseur  $\mathbb{N}(\tilde{\mathbb{C}}_s)$  (dont les expressions sont données à l'annexe B) de la façon suivante :

$$\mathbb{H} = \tilde{\mathbb{C}}_s : \left[ \mathbb{S}^E(\tilde{\mathbb{C}}_s) - \frac{1}{\alpha} \mathbb{N}(\tilde{\mathbb{C}}_s) \right] : \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1}. \quad (17)$$

Le scalaire  $\alpha$  est égal à  $(1+2w)/(bw)$ . Le tenseur  $\mathbb{P}_m$ , égal à  $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_m) : \mathbb{C}_m^{-1}$ , est le tenseur de Hill associé à la forme de la cavité considérée lorsque le milieu de référence est la matrice. Le tenseur  $\tilde{\mathbb{C}}_s$ , dont l'expression est donnée à l'Équation (7), dépend des propriétés de l'interface ( $k_s$  et  $\mu_s$ ). Le scalaire  $f_{\mathcal{E}} = w(b/r_0)^3$  représente la porosité dans le motif  $\mathcal{E}$ .

Dans le cas où  $w = 1$  (cavité sphérique), le tenseur  $\mathbb{T}_{\mathcal{ME}}^m$  est isotrope et s'exprime :

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{\mathcal{ME}}^m(w=1) &= f_{\mathcal{E}} \frac{(3k_m + 4\mu_m)(4k_s - 3k_m b)}{4(k_s + \mu_m b)} \mathbb{J} \\ &+ f_{\mathcal{E}} \frac{10\mu_m(3k_m + 4\mu_m)\beta'_d}{3k_m\delta'_d + 4\mu_m\zeta'_d} \mathbb{K} \end{aligned} \quad (18)$$

où

$$\begin{aligned} \beta'_d &= k_s - 5b\mu_m + 6\mu_s, \\ \delta'_d &= 2k_s + 15b\mu_m + 12\mu_s, \\ \zeta'_d &= 3k_s + 10b\mu_m + 18\mu_s, \end{aligned} \quad (19)$$

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

Il est remarquable (en posant  $b = r$ ) que la partie déviatorique du tenseur  $\mathbb{T}_{\mathcal{ME}}^m(w=1)$  n'est pas égale à celle du tenseur  $\mathbb{T}_{\mathcal{MS}}^m$  (Éq. (14)). Cela est dû au fait que le problème auxiliaire associé au motif  $\mathcal{E}$  (problème  $\mathcal{A}$ ) est résolu de façon approchée alors que celui relatif au motif  $\mathcal{S}$  l'est de façon exacte. En revanche, la partie hydrostatique du tenseur  $\mathbb{T}_{\mathcal{ME}}^m(w=1)$  est égale à celle du tenseur  $\mathbb{T}_{\mathcal{MS}}^m$  (Éq. (14)). Ainsi, il apparaît que, dans le cas où la cavité est sphérique et le chargement purement hydrostatique, le problème  $\mathcal{A}$  est résolu de manière exacte.

Il est par ailleurs possible de montrer que les parties déviatoriques des tenseurs  $\mathbb{T}_{\mathcal{ME}}^m(w=1)$  et  $\mathbb{T}_{\mathcal{MS}}^m$  sont égales lorsque les cavités sont très petites ( $r \rightarrow 0$ ), lorsque les cavités sont grandes ( $r \rightarrow \infty$ ), lorsque l'interface est souple ( $\|\mathbb{C}_s\| \rightarrow 0$ ) et lorsque l'interface est rigide ( $\|\mathbb{C}_s\| \rightarrow \infty$ ).

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

$$\mathbb{T}_{\mathcal{ME}}^m = -f_{\mathcal{E}} \mathbb{C}_m : \left[ \mathbb{I} - \mathbb{P}(\mathbb{C}_m) : \mathbb{C}_m \right]^{-1}. \quad (20)$$

Pour  $f_{\mathcal{E}} = 1$  (le motif n'est constitué que de la cavité et de l'interface), l'expression précédente est alors égale à l'expression du tenseur  $\mathbb{T}$  classique (tenseur identifié sur le problème d'Eshelby et qui relie la polarisation  $\boldsymbol{\tau}$  sur l'inclusion homogène à la déformation  $\epsilon^0$  appliqué à l'infini) lorsque l'inclusion est une cavité de même forme que la cavité considérée.

De la même façon, lorsque le rayon  $r$  est grand ou lorsque l'interface est souple ( $k_s = \mu_s = 0$ ), le tenseur  $\mathbb{T}_{\mathcal{MS}}^m$  est égal au tenseur  $\mathbb{T}$  classique pour une cavité

sphérique (en posant  $f_S = 1$ ) :

$$\mathbb{T}_{MS}^m = -\frac{3k_m(3k_m + 4\mu_m)}{4\mu_m}\mathbb{J} - \frac{10\mu_m(3k_m + 4\mu_m)}{9k_m + 8\mu_m}\mathbb{K}. \quad (21)$$

Par conséquent, le modèle construit à partir des tenseurs  $\mathbb{T}_{MS}^m$  et  $\mathbb{T}_{M\mathcal{E}}^m$  (et de l'Éq. (13)) tend vers son homologue *classique* sans effet de surface (modèle de Ponte Castañeda et Willis [22] dans le cas poreux lorsque l'effet de surface devient négligeable (c'est-à-dire lorsque la taille des cavités est grande ou lorsque l'interface est souple). Cette remarque est illustrée à la Section 4 (Figs. 3 et 4).

On remarque également que lorsque le rayon  $r$  est très petit ( $r \rightarrow 0$ ) ou lorsque l'interface est rigide ( $\|\mathbb{C}_s\| \rightarrow \infty$ ), le tenseur  $\mathbb{T}_{MS}^m$  est égal au tenseur  $\mathbb{T}$  *classique* pour une particule rigide (en posant  $f_S = 1$ ) :

$$\mathbb{T}_{MS}^m = (3k_m + 4\mu_m)\mathbb{J} + \frac{5\mu_m(3k_m + 4\mu_m)}{3(k_m + 2\mu_m)}\mathbb{K}. \quad (22)$$

Dans ce cas, le modèle construit à partir de  $\mathbb{T}_{MS}^m$  (et de l'équation (13)) tend vers le modèle de Ponte Castañeda et Willis [22] pour des particules sphériques rigides.

### 3.2 Exemple : matériau nano-bi-poreux

Les résultats de la section précédente sont appliqués de façon à traiter le cas particulier d'un matériau contenant : i. des cavités sphériques supposées de même tailles, réparties de façon homogène et isotrope, ii. des cavités sphéroïdales supposées de même taille, même forme, orientées aléatoirement et réparties de façon homogène et isotrope. Les propriétés élastiques des interfaces dans les motifs  $\mathcal{S}$  et  $\mathcal{E}$  sont supposées identiques. Les propriétés élastiques effectives sont déterminées à partir de l'expression (13) où le tenseur  $\mathbb{P}_m^d$ , relatif à une distribution isotrope, s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbb{P}_m^d = \frac{1}{3k_m + 4\mu_m}\mathbb{J} + \frac{3}{5\mu_m} \frac{k_m + 2\mu_m}{3k_m + 4\mu_m}\mathbb{K} \quad (23)$$

et où :

$$\langle \mathbb{T}_{Mr}^m \rangle_M = c_S \mathbb{T}_{MS}^m + c_{\mathcal{E}} \langle \mathbb{T}_{M\mathcal{E}}^m \rangle_{\odot} \quad (24)$$

Les expressions des tenseurs  $\mathbb{T}_{MS}^m$  et  $\mathbb{T}_{M\mathcal{E}}^m$  sont données respectivement aux Équations (14) et (16). L'opération  $\langle \mathbb{A} \rangle_{\odot}$  fait référence à la moyenne sur toutes les orientations de l'espace du tenseur d'ordre quatre  $\mathbb{A}$ , qui est égale à la projection de  $\mathbb{A}$  sur la base d'isotropie (i.e.  $\langle \mathbb{A} \rangle_{\odot} = (\mathbb{J} :: \mathbb{A})\mathbb{J} + (1/5)(\mathbb{K} :: \mathbb{A})\mathbb{K}$ ) [25].

La porosité totale est notée  $f$ . La porosité des cavités sphériques est fixée à  $(1 - \theta)f$  et la porosité des cavités sphéroïdales est fixée à  $\theta f$  (où  $\theta \in [0, 1]$ ). La fraction volumique  $c_S$  de motif  $\mathcal{S}$  est donc égale à  $(1 - \theta)f/f_S$  et la fraction volumique  $c_{\mathcal{E}}$  de motif  $\mathcal{E}$  à  $\theta f/f_{\mathcal{E}}$ .

En considérant les produits  $c_S \mathbb{T}_{MS}^m$  et  $c_{\mathcal{E}} \langle \mathbb{T}_{M\mathcal{E}}^m \rangle_{\odot}$ , il est possible de constater qu'ils sont respectivement indépendants de  $f_S$  et  $f_{\mathcal{E}}$  (c'est-à-dire de  $r_0$ ). Le modèle construit est donc indépendant du rayon extérieur des

**Tableau 1.** Propriétés matériaux considérées pour les applications numériques.

Table 1. Material properties used for the numerical applications.

$E_m$ (GPa)	$\nu_m$	$k_s$ (J/m <sup>2</sup> )	$\mu_s$ (J/m <sup>2</sup> )	$f$
100	0,3	14,29	7,69	10 %

motifs  $r_0$ . Comme mentionné, cette remarque est propre aux estimations de type Mori et Tanaka généralisé où le milieu de référence est la matrice. Techniquement, cela est dû au fait que le champ de polarisation  $\boldsymbol{\tau}$  est nul dans la matrice dans les motifs et hors des motifs (matrice environnante). Finalement, le modèle ne dépend que des propriétés mécaniques de la matrice et de l'interface, des porosités des cavités sphériques et sphéroïdales, de leur taille et de leur forme.

Le matériau est macroscopiquement isotrope. Le tenseur de rigidité effectif  $\mathbb{C}^{\text{MTG}}$  peut alors s'écrire :

$$\mathbb{C}_M^{\text{MTG}} = 3k^{\text{MTG}}\mathbb{J} + 2\mu^{\text{MTG}}\mathbb{K}. \quad (25)$$

Dans le cas où le matériau n'est constitué que de cavités sphériques ( $\theta = 0$ ), il vient que :

$$k_M^{\text{MTG}} = k_m + \frac{f}{3} \frac{(3k_m + 4\mu_m)(4k_s - 3k_m r)}{4(1 - f)k_s + r(3fk_m + 4\mu_m)} \quad (26)$$

et

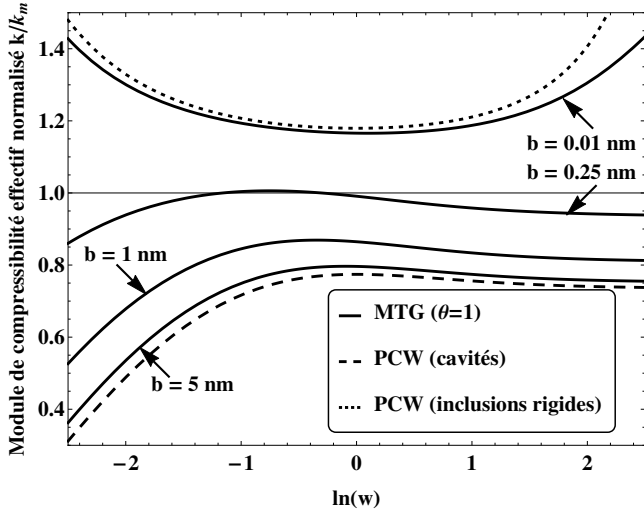
$$\mu_M^{\text{MTG}} = \mu_m + f \frac{5\beta_d \mu_m (3k_m + 4\mu_m)}{3k_m \delta_d + 4\mu_m \zeta_d - 6f\beta_d (k_m + 2\mu_m)}. \quad (27)$$

Les expressions précédentes (Éqs. (26) et (27)) correspondent à celles déjà établies dans [9, 12, 13] (dans le cas particulier où les inclusions sont des cavités). Lorsque les cavités sont grandes ( $r \rightarrow \infty$ ) ou lorsque l'interface est très souple ( $k_s = \mu_s = 0$ ), les expressions précédentes conduisent aux propriétés effectives issues de l'estimation de Mori et Tanaka pour un matériau poreux. De même, lorsque les cavités sont très petites ( $r \rightarrow 0$ ) ou lorsque l'interface est rigide ( $\|\mathbb{C}_s\| \rightarrow \infty$ ), les expressions précédentes conduisent aux propriétés effectives issues de l'estimation de Mori et Tanaka pour un matériau à inclusions rigides. Ces remarques sont bien cohérentes avec celles faites sur les limites du tenseur  $\mathbb{T}_{MS}^m$  à la Section 3.1.

## 4 Applications numériques

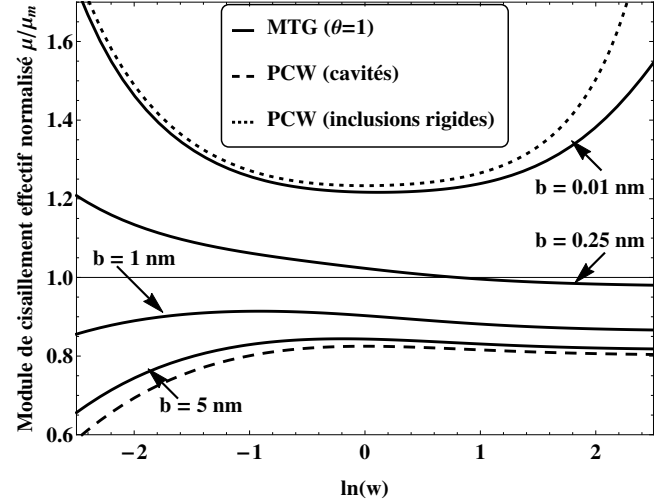
Cette section présente des applications numériques du modèle développé à la Section 3.2. Les valeurs des paramètres matériaux retenus pour ces applications sont présentées au Tableau 1. Les propriétés de l'interface ( $k_s$  et  $\mu_s$ ) sont fixées telles que le module de Young de l'interface équivalente (cf. Sect. 2.1, Éq. (6)), dont l'épaisseur est fixée à  $10^{-2}$  nm (afin qu'elle reste petite devant le rayon des cavités), soit vingt fois plus rigide que celui de la matrice. Le coefficient de Poisson  $\nu_{ph}$  est fixé à 0,3.

Premièrement, le cas particulier d'un matériau contenant uniquement des cavités sphéroïdales orientées



**Fig. 3.** Modules de compressibilité effectifs normalisés en fonction du rapport de forme des hétérogénéités (cavités avec interface, cavités sans interface ou inclusions rigides) pour différentes valeurs de  $b$  (0,01 nm, 0,25 nm, 1 nm et 5 nm).

*Fig. 3. Normalized effective bulk moduli as a function of the aspect ratio of the heterogeneities (cavities with interface, cavities without interface or rigid inclusions) for various values of  $b$  (0.01 nm, 0.25 nm, 1 nm, and 5 nm).*



**Fig. 4.** Modules de cisaillement effectifs normalisés en fonction du rapport de forme des hétérogénéités (cavités avec interface, cavités sans interface ou inclusions rigides) pour différentes valeurs de  $b$  (0,01 nm, 0,25 nm, 1 nm et 5 nm).

*Fig. 4. Normalized effective shear moduli as a function of the aspect ratio of the heterogeneities (cavities with interface, cavities without interface or rigid inclusions) for various values of  $b$  (0.01 nm, 0.25 nm, 1 nm, and 5 nm).*

aléatoirement est considéré ( $\theta = 1$ ). Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs (normalisés respectivement par rapport au module de compressibilité et de cisaillement de la matrice) en fonction du rapport de forme  $w$  des cavités sont représentées respectivement sur les Figures 3 et 4 pour différentes valeurs de  $b$  (0,01 nm, 0,25 nm, 1 nm et 5 nm). Les modules élastiques effectifs issus de l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (PCW) [22] pour un matériau à cavités sphéroïdales orientées et distribuées aléatoirement et pour un matériau à inclusions sphéroïdales rigides orientées et distribuées aléatoirement sont également représentées.

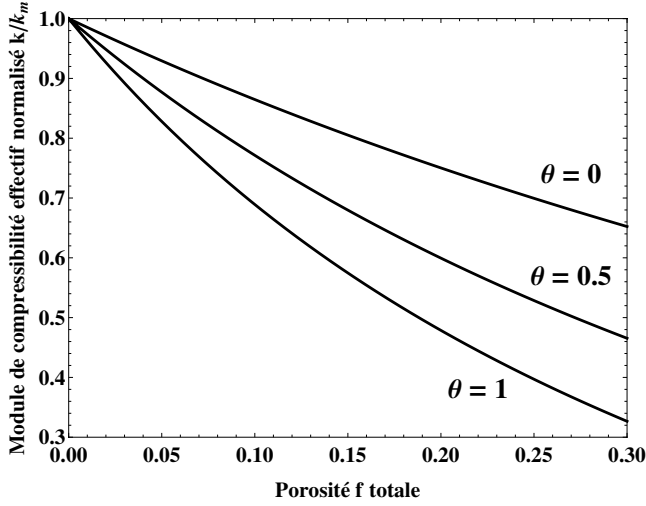
Une dépendance à la forme et à la taille des cavités a bien été introduite dans le modèle par l'intermédiaire des paramètres  $w$  et  $b$ . Lorsque la taille des cavités devient grande, l'effet de surface devient négligeable et le modèle MTG tend vers l'estimation PCW pour un matériau poreux. Lorsque la taille des cavités est très faible, le modèle MTG tend vers l'estimation PCW pour un matériau à inclusions rigides. Dans le cadre de l'application numérique présentée ici, il apparaît que les écarts entre les coefficients d'élasticité prédits par le modèle MTG et par celui de PCW pour un matériau poreux sont inférieurs à 1 % lorsque  $b$  est supérieur à 60 nm (pour  $w = 0,125$ ). De la même façon, les écarts entre les coefficients d'élasticité prédits par le modèle MTG et par celui de PCW pour un matériau à inclusions rigides sont inférieurs à 1 % lorsque  $b$  est inférieur à 0,5 pm (pour  $w = 8$ ).

Afin d'illustrer les possibilités qu'offre le modèle MTG développé, les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs (normalisés respectivement

par rapport au module de compressibilité et de cisaillement de la matrice) en fonction de la porosité totale  $f$  sont représentées respectivement sur les Figures 5 et 6 pour différents cas : (i) pour un matériau contenant uniquement des cavités nanosphériques ( $\theta = 0$ ), (ii) pour un matériau contenant uniquement des cavités nanosphéroïdales orientées aléatoirement ( $\theta = 1$ ), (iii) pour un matériau biporeux contenant des cavités nanosphériques et nanosphéroïdales dans les mêmes proportions ( $\theta = 0,5$ ). Le rayon des cavités sphériques est fixé à 1 nm, la longueur du demi-axe  $b$  des sphéroïdes est fixé à 5 nm et leur rapport de forme est fixé à 0,25.

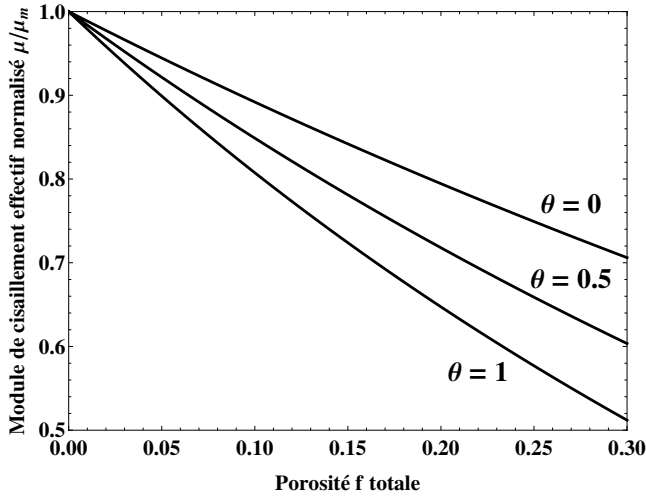
Il a été mis en évidence à la Section 3.1 que les parties déviatoriques des tenseurs  $\mathbb{T}_{MS}^m$  et  $\mathbb{T}_{M\mathcal{E}}^m$ , pour  $w = 1$ , diffèrent l'une de l'autre (cela est dû au fait que le problème auxiliaire associé au motif  $\mathcal{E}$  est résolu de façon approchée). Afin d'illustrer l'influence de cette approximation sur les propriétés élastiques effectives, les évolutions en fonction du rayon  $r$  des cavités, des modules de cisaillement effectifs d'un matériau contenant des cavités nanosphériques (distribuées aléatoirement) sont représentées sur la Figure 7 pour deux cas : (i) le cas 1 où  $\theta = 0$  (problème auxiliaire résolu de façon exact via le motif  $\mathcal{S}$ ), (ii) le cas 2 où  $\theta = 1$ ,  $w = 1$  et  $b = r$  (problème auxiliaire résolu de façon approchée via le motif  $\mathcal{E}$ ). Les bornes d'ordre 1 développées par Le Quang et He [14] pour des matériaux à cavités nanosphériques sont également représentées. Les deux modèles de type MTG conduisent effectivement à des estimations différentes des modules de cisaillement effectifs dans les cas 1 et 2. Comme cela a été mis en évidence précédemment, ces différences s'estompent cependant dans les cas de petites et grandes cavités. Bien que le module de cisaillement effectif





**Fig. 5.** Modules de compressibilité effectifs normalisés en fonction de la porosité totale pour différentes valeurs de  $\theta$ .

*Fig. 5. Normalized effective bulk moduli as a function of the total porosity for various values of  $\theta$ .*



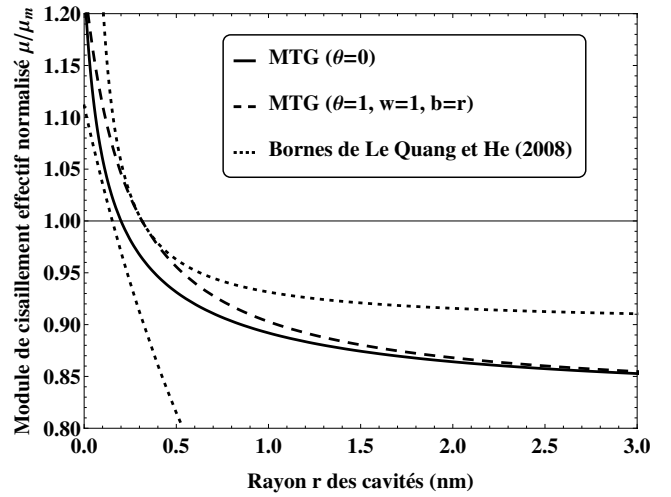
**Fig. 6.** Modules de cisaillement effectifs normalisés en fonction de la porosité totale pour différentes valeurs de  $\theta$ .

*Fig. 6. Normalized effective shear moduli as a function of the total porosity for various values of  $\theta$ .*

correspondant au cas 2 soit obtenu à partir d'un solution approchée du problème auxiliaire, il apparaît néanmoins que, pour l'application numérique présentée ici, ce module respecte les bornes de Le Quang et He [14].

## 5 Conclusion

Un modèle de type Mori et Tanaka généralisé permettant d'estimer les propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales a été proposé. Les possibilités qu'offre ce modèle ont été illustrées dans le cas particulier d'un matériau contenant des cavités sphériques et sphéroïdales



**Fig. 7.** Modules de cisaillement effectifs normalisés (par  $\mu_m$ ) en fonction du rayon  $r$  dans le cas d'un matériau à cavités sphériques – cas 1 :  $\theta = 0$ , cas 2 :  $\theta = 1$ ,  $w = 1$  et  $b = r$ .

*Fig. 7. Normalized effective shear moduli (by  $\mu_m$ ) as a function of the radius  $r$  for the case of a material containing spherical cavities – case 1 :  $\theta = 0$ , case 2 :  $\theta = 1$ ,  $w = 1$  and  $b = r$ .*

orientées aléatoirement et dont la distribution des centres est isotrope. L'effet de surface présent à l'échelle nanométrique a bien été pris en compte via l'introduction des tailles caractéristiques des cavités dans le modèle. Il a été démontré que lorsque l'effet de surface devient négligeable, le modèle correspond au modèle *classique* de Ponte Castañeda et Willis [22]. De plus, lorsque les cavités sont nanosphériques et que la distribution des centres des cavités est isotrope, le modèle correspond à un cas particulier du modèle de type Mori et Tanaka de Duan et al. [9] (établi pour les matériaux nanocomposites à inclusions sphériques). L'approche suivie est suffisamment générale pour que le modèle présenté permette également de traiter des distributions ellipsoïdales des centres des cavités, en considérant le tenseur de Hill adapté.

## Appendix A : Tenseur $\mathbb{T}_{M\mathcal{E}}^m$

Cette annexe fournit les éléments nécessaires pour établir l'expression (16) du tenseur  $\mathbb{T}_{M\mathcal{E}}^m$ . A partir de l'équation (12), il est possible de montrer que la moyenne du champ de polarisation  $\boldsymbol{\tau}$ , solution du problème  $\mathcal{A}$ , sur le motif  $\mathcal{E}$  s'exprime de la façon suivante :

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_{\mathcal{E}}} = \frac{1}{|D_{\mathcal{E}}|} \int_{\Gamma} ([\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n}) \otimes \mathbf{x} dS - f_{\mathcal{E}} \mathbb{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{\omega_c} \quad (\text{A.1})$$

où  $\mathbf{x}$  est le vecteur position,  $\mathbf{n}$  la normale unitaire à  $\Gamma$  dirigée vers la matrice et  $\omega_c$  le domaine occupé par la cavité. Le volume d'un domaine  $\omega$  est noté  $|\omega|$ .

La solution du problème  $\mathcal{A}$  est obtenue par l'intermédiaire d'un problème  $\mathcal{A}^*$  identique où l'interface est remplacée par une interphase équivalente d'épaisseur  $h$  (constante) et de rigidité  $\mathbb{C}_{ph} = (1/h)\mathbb{C}_s$ . Le domaine

occupé par l'interphase est noté  $\omega_{ph}$ . Les interfaces *ca-*  
*tivité/interphase* et *interphase/matrice* sont parfaites et  
respectivement notée  $\Gamma_1$  et  $\Gamma_2$ . Les champs élastiques so-  
lutions du problème  $\mathcal{A}^*$  sont associés à l'exposant  $\star$ .

En exploitant l'équivalence *interface/interphase fine*  
et en remarquant que  $|D_{\mathcal{E}}|$ ,  $f_{\mathcal{E}}$  et  $\mathbb{C}_m$  ne dépendent pas  
de  $h$ , il vient que :

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_{\mathcal{E}}} = \frac{1}{|D_{\mathcal{E}}|} \lim_{h \rightarrow 0} \int_{\omega_{ph}} \boldsymbol{\sigma}^{\star} dV - f_{\mathcal{E}} \mathbb{C}_m : \lim_{h \rightarrow 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\star} \rangle_{\omega_c} \quad (\text{A.2})$$

Le rapport  $|\omega_{ph}|/|\omega_c|$  peut s'exprimer de la façon sui-  
vante :

$$\frac{|\omega_{ph}|}{|\omega_c|} = \frac{(wb+h)(b+h)^2}{wb^3} - 1 = \alpha h + \beta h^2 + \zeta h^3 \quad (\text{A.3})$$

où les coefficient  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\zeta$  dépendent uniquement du rap-  
port de forme  $w$  et la longueur du demi-axe  $b$ .

En remarquant que  $1/|D_{\mathcal{E}}| = f_{\mathcal{E}}/|\omega_c|$ , il est possible  
de montrer que :

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_{\mathcal{E}}} = f_{\mathcal{E}} \left[ \alpha \tilde{\mathbb{C}}_s : \lim_{h \rightarrow 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\star} \rangle_{\omega_{ph}} - \mathbb{C}_m : \lim_{h \rightarrow 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\star} \rangle_{\omega_c} \right] \quad (\text{A.4})$$

Comme cela a déjà été mentionné, le problème  $\mathcal{A}^*$  est  
un cas particulier des travaux de Cherkaoui et al. [23] qui  
ont étudié le comportement mécanique d'une inclusion el-  
lipsoïdale entourée d'une interphase, elle-même entourée  
d'un milieu infini sur lequel une déformation homogène  
 $\boldsymbol{\epsilon}^0$  est appliquée à l'infini. Ces derniers ont établi une  
solution analytique approchée de ce problème qui s'ex-  
prime en fonction de la solution classique du problème  
d'Eshelby. En appliquant leurs résultats au cas particu-  
lier du problème  $\mathcal{A}^*$ , il vient que :

$$\langle \boldsymbol{\epsilon}^{\star} \rangle_{\omega_{ph}} = (\mathbb{I} - \mathbb{W}) : \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\star} \rangle_{\omega_c} \quad (\text{A.5})$$

et

$$\langle \boldsymbol{\epsilon}^{\star} \rangle_{\omega_c} = (\mathbb{I} - \mathbb{M})^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad (\text{A.6})$$

avec

$$\mathbb{W} = \left[ \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph}) - \frac{|\omega_c|}{|\omega_{ph}|} (\mathbb{P}_2(\mathbb{C}_{ph}) - \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph})) \right] : \mathbb{C}_{ph} \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbb{M} = \mathbb{P}_2(\mathbb{C}_m) : \mathbb{C}_m$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{|\omega_{ph}|}{|\omega_c|} \left[ \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_m) : \Delta \mathbb{C} : \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph}) : \mathbb{C}_{ph} \right] \\ &+ \frac{|\omega_{ph}|}{|\omega_c|} \left[ (\mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph}) - \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_m)) : \mathbb{C}_{ph} \right] \\ &- \left[ \mathbb{I} + \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_m) : \Delta \mathbb{C} \right] : \left[ \mathbb{P}_2(\mathbb{C}_{ph}) - \mathbb{P}_1(\mathbb{C}_{ph}) \right] : \mathbb{C}_{ph} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

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

Le tenseur  $\mathbb{P}_i(\mathbb{C}_j)$  ( $i \in \{1, 2\}$  et  $j \in \{m, ph\}$ ) est le  
tenseur de Hill associé au milieu de référence  $j$  et à une  
inclusion sphéroïdale dont la forme extérieure est iden-  
tique à la forme de  $\Gamma_i$ . Ce tenseur s'exprime en fonction

du tenseur d'Eshelby  $\mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_j)$  ( $i \in \{1, 2\}$  et  $j \in \{m, ph\}$ )  
de la façon suivante :

$$\mathbb{P}_i(\mathbb{C}_j) = \mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_j) : \mathbb{C}_j^{-1} \quad (\text{A.9})$$

Le tenseur d'Eshelby  $\mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_j)$  associé à une inclusion de  
forme sphéroïdale ne dépend que du coefficient de Poisson  
 $\nu_j$  et du rapport de forme de l'inclusion. De plus, il a été  
mis en évidence que  $\nu_{ph} = \tilde{\nu}_s$ . Il vient alors que :

$$\mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_{ph}) = \mathbb{S}_i^E(\tilde{\mathbb{C}}_s) \quad \forall i \in \{1, 2\} \quad (\text{A.10})$$

et par conséquent :

$$\begin{aligned} \forall i \in \{1, 2\}, \quad \mathbb{P}_i(\mathbb{C}_{ph}) &= \mathbb{S}_i^E(\mathbb{C}_{ph}) : \mathbb{C}_{ph}^{-1} \\ &= h \mathbb{S}_i^E(\tilde{\mathbb{C}}_s) : \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1} \\ &= h \mathbb{P}_i(\tilde{\mathbb{C}}_s) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Le tenseur  $\mathbb{P}_1(\tilde{\mathbb{C}}_s)$  associé à l'interface  $\Gamma_1$  ne dépend donc  
pas de  $h$ . En revanche, le tenseur  $\mathbb{P}_2(\tilde{\mathbb{C}}_s)$  dépend de  $h$   
à travers le rapport de forme de l'interface  $\Gamma_2$  ( $(wb+h)/(b+h)$ ).  
À partir des Équations (A.5) et (A.6), il vient que :

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\star} \rangle_{\omega_{ph}} &= (\mathbb{I} - \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1} : \mathbb{H} : \tilde{\mathbb{C}}_s) \\ &: \left[ \mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \left( \mathbb{C}_m - \alpha(\mathbb{I} - \mathbb{H}) : \tilde{\mathbb{C}}_s \right) \right]^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

et

$$\lim_{h \rightarrow 0} \langle \boldsymbol{\epsilon}^{\star} \rangle_{\omega_c} = \left[ \mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \left( \mathbb{C}_m - \alpha(\mathbb{I} - \mathbb{H}) : \tilde{\mathbb{C}}_s \right) \right]^{-1} : \boldsymbol{\epsilon}^0 \quad (\text{A.13})$$

où

$$\mathbb{H} = \tilde{\mathbb{C}}_s : \left[ \mathbb{S}^E(\tilde{\mathbb{C}}_s) - \frac{1}{\alpha} \mathbb{N}(\tilde{\mathbb{C}}_s) \right] : \tilde{\mathbb{C}}_s^{-1}. \quad (\text{A.14})$$

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

$$\mathbb{N}(\mathbb{C}_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \left[ \mathbb{S}_2^E(\mathbb{C}_0) - \mathbb{S}_1^E(\mathbb{C}_0) \right] \quad (\text{A.15})$$

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

Finalement, à partir de l'Équation (A.4), il vient que :

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{M\mathcal{E}}^m &= f_{\mathcal{E}} \left[ \alpha(\mathbb{I} - \mathbb{H}) : \tilde{\mathbb{C}}_s - \mathbb{C}_m \right] \\ &: \left[ \mathbb{I} - \mathbb{P}_m : \left( \mathbb{C}_m - \alpha(\mathbb{I} - \mathbb{H}) : \tilde{\mathbb{C}}_s \right) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

## Appendix B : Tenseurs $\mathbb{S}^E$ et $\mathbb{N}$

Dans cette annexe, les expressions du tenseur  
d'Eshelby  $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_0)$  et du tenseur  $\mathbb{N}(\mathbb{C}_0)$  pour une inclu-  
sion sphéroïdale sont données. Le tenseur de rigidité  $\mathbb{C}_0$

est supposé isotrope ( $\nu_0$  correspond au coefficient de Poisson). L'axe de révolution du sphéroïde est porté par le vecteur unitaire  $\mathbf{n}$ . Le rapport de forme de l'ellipsoïde de révolution est noté  $w$  ( $w < 1$  cas aplati,  $w > 1$  cas allongé,  $w = 1$  cas sphérique). Les tenseurs  $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_0)$  et  $\mathbb{N}(\mathbb{C}_0)$  pour une inclusion sphéroïdale sont isotropes transverses. Les tenseurs d'ordre 4 de la base d'isotropie transverse  $\{\mathbb{E}_L \ \mathbb{F} \ \mathbb{T}\mathbb{F} \ \mathbb{J}_T \ \mathbb{K}_T \ \mathbb{K}_L\}$  sont donc introduits et s'expriment de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_L &= \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, & \mathbb{J}_T &= \frac{1}{2} \mathbf{i}_T \otimes \mathbf{i}_T, \\ \mathbb{K}_E &= \frac{1}{6} (2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \mathbf{i}_T) \otimes (2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \mathbf{i}_T), \\ \mathbb{K}_T &= \mathbb{I}_T - \mathbb{J}_T, & \mathbb{K}_L &= \mathbb{K} - \mathbb{K}_T - \mathbb{K}_E, \\ \mathbb{F} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{i}_T \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} & \text{et} & \quad \mathbb{T}\mathbb{F} = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{i}_T. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Le tenseur d'Eshelby s'exprime alors :

$$\begin{aligned} \mathbb{S}^E &= S_1^E \mathbb{E}_L + S_2^E \mathbb{J}_T + S_3^E \mathbb{F} + S_4^E \mathbb{T}\mathbb{F} \\ &+ S_5^E \mathbb{K}_L + S_6^E \mathbb{K}_T \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

et

$$\mathbb{N} = N_1 \mathbb{E}_L + N_2 \mathbb{J}_T + N_3 \mathbb{F} + N_4 \mathbb{T}\mathbb{F} + N_5 \mathbb{K}_L + N_6 \mathbb{K}_T \quad (\text{B.3})$$

avec

$$\begin{aligned} S_1^E &= \frac{1}{\Delta} \left[ 2(1 - \nu_0) - 2(2 - \nu_0)w^2 \right. \\ &\quad \left. - (1 - 2\nu_0 - 2(2 - \nu_0)w^2)L(w) \right] \\ S_2^E &= \frac{1}{\Delta} \left[ -w^2 + \frac{3}{2}L(w) \right] \\ S_3^E &= \frac{\sqrt{2}}{2\Delta} \left[ 2w^2 \right. \\ &\quad \left. - (1 - 2\nu_0 + 2(1 + \nu_0)w^2)L(w) \right] \\ S_4^E &= \frac{\sqrt{2}}{2\Delta} \left[ 4\nu_0 + 2(1 - 2\nu_0)w^2 \right. \\ &\quad \left. - (1 + 4\nu_0 + 2(1 - 2\nu_0)w^2)L(w) \right] \\ S_5^E &= \frac{1}{\Delta} \left[ 2(1 - \nu_0) + 2\nu_0w^2 \right. \\ &\quad \left. - (2 - \nu_0 + (1 + \nu_0)w^2)L(w) \right] \\ S_6^E &= \frac{1}{4\Delta} \left[ -2w^2 \right. \\ &\quad \left. + (7 - 8\nu_0 - 4(1 - 2\nu_0)w^2)L(w) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} N_1 &= -\frac{1}{\Delta'} \left[ 2(1 + 2\nu_0)w + 4(2 - \nu_0)w^3 \right. \\ &\quad \left. + (1 - 2\nu_0 - 2(4 + \nu_0)w^2 - 4(2 - \nu_0)w^4) \frac{L(w)}{w} \right] \\ N_2 &= \frac{1}{2\Delta'} \left[ -10w + 3(1 + 4w^2) \frac{L(w)}{w} \right] \\ N_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}\Delta'} \left[ 2(3 - 2\nu_0)w + 4(1 + \nu_0)w^3 \right. \\ &\quad \left. - (1 - 2\nu_0 + 2(5 - \nu_0)w^2 + 4(1 + \nu_0)w^4) \frac{L(w)}{w} \right] \\ N_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}\Delta'} \left[ 2(3 + 4\nu_0)w + 4(1 - 2\nu_0)w^3 \right. \\ &\quad \left. - (1 + 4\nu_0 + 2(5 + 2\nu_0)w^2 + 4(1 - 2\nu_0)w^4) \frac{L(w)}{w} \right] \\ N_5 &= \frac{1}{\Delta'} \left[ 2(4 - \nu_0)w + 2(1 + \nu_0)w^3 \right. \\ &\quad \left. - (2 - \nu_0 + (11 - \nu_0)w^2 + 2(1 + \nu_0)w^4) \frac{L(w)}{w} \right] \\ N_6 &= \frac{1}{4\Delta'} \left[ -2(9 - 8\nu_0)w + 8(1 - 2\nu_0)w^3 \right. \\ &\quad \left. + (7 - 8\nu_0 + 8(2 - \nu_0)w^2 - 8(1 - 2\nu_0)w^4) \frac{L(w)}{w} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

et

$$L(w) = \begin{cases} \frac{w(\arccos(w) - w\sqrt{1-w^2})}{(1-w^2)^{3/2}} & \text{si } w < 1 \\ \frac{w(w\sqrt{w^2-1} - \operatorname{arccosh}(w))}{(w^2-1)^{3/2}} & \text{si } w > 1 \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

$$\Delta = 2(1 - \nu_0)(1 - w^2) \quad (\text{B.7})$$

$$\Delta' = b(1 + w)\Delta \quad (\text{B.8})$$

Lorsque l'inclusion est sphérique (c'est-à-dire  $w = 1$ ), il vient que :

$$\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_0) = \frac{1 + \nu_0}{3(1 - \nu_0)} \mathbb{J} + \frac{2}{15} \frac{4 - 5\nu_0}{1 - \nu_0} \mathbb{K} \quad (\text{B.9})$$

et

$$\mathbb{N}(\mathbb{C}_0) = \mathbb{O} \quad (\text{B.10})$$

Le tenseur d'Eshelby  $\mathbb{S}^E(\mathbb{C}_0)$  dépend seulement du coefficient de Poisson du milieu de référence  $\nu_0$  et du rapport de forme de l'inclusion  $w$ . Le tenseur  $\mathbb{N}(\mathbb{C}_0)$  dépend de  $\nu_0$ , de  $w$  et de la longueur  $b$ .

## Références

- [1] P.-G. Vincent, Y. Monerie, P. Suquet, *Int. J. Solids Struct.* **46** (2009) 480-506
- [2] P.-G. Vincent, Y. Monerie, P. Suquet, *Int. J. Solids Struct.* **46** (2009) 507-526
- [3] P.-G. Vincent, P. Suquet, Y. Monerie, H. Moulinec, *Int. J. Plasticity* **56** (2014) 45-73

- [4] P.-G. Vincent, P. Suquet, Y. Monerie, H. Moulinec, *Int. J. Plasticity* **56** (2014) 74-98
- [5] A. Jelea, M. Colbert, F. Ribeiro, G. Tréglia, R.M. Pellenq, *J. Nucl. Mater.* **415** (2011) 210-216
- [6] H. Duan, J. Wang, Z. Huang, B. Karihaloo, *Proc. Roy. Soc. A* **461** (2005) 3335-3353
- [7] J. Wang, Z. Huang, H. Duan, S. Yu, X. Feng, G. Wang, W. Zhang, T. Wang, *Acta Mech. Sol. Sinica* **24** (2011) 52-82
- [8] B. Paliwal, M. Cherkaoui, *Int. J. Solids Struct.* **49** (2012) 2424-2438
- [9] H. Duan, J. Wang, Z. Huang, B. Karihaloo, *J. Mech. Phys. Solids* **53** (2005) 1574-1596
- [10] P. Sharma, S. Ganti, *J. Appl. Mech. Trans. ASME* **71** (2004) 663-671
- [11] R. Dubourg, H. Faure-Geors, G. Nicaise, M. Barrachin, *Nucl. Eng. Design* **235** (2005) 2183-2208
- [12] S. Brisard, L. Dormieux, D. Kondo, *Comput. Mater. Sci.* **48** (2010) 589-596
- [13] S. Brisard, L. Dormieux, D. Kondo, *Comput. Mater. Sci.* **50** (2010) 403-410
- [14] H. Le Quang, Q.C. He, *Mech. Mater.* **40** (2008) 865-884
- [15] T. Mori, K. Tanaka, *Acta Metal.* **21** (1973) 571-574
- [16] C. Stolz, A. Zaoui, *C. R. Acad Sci.* **312** (1991) 143-150
- [17] M. Gurtin, A. Murdoch, *Arch. Rational Mech. Anal.* **57** (1975) 291-323
- [18] J. Wang, H. Duan, Z. Zhang, Z. Huang, *Int. J. Mech. Sci.* **47** (2005) 701-718
- [19] M. Bornert, Ph.D. thesis, École Nationale des Ponts et Chaussées, 1996
- [20] M. Bornert, in *Homogénéisation en mécanique des matériaux*, edited by M. Bornert, T. Bretheau, P. Gilormini, Hermès Science Publications, Paris, 2001, Vol. 1, Chap. 5, pp. 133-221
- [21] J.D. Eshelby, *Proc. R. Soc. Lond. A* **241** (1957) 376-396
- [22] P. Ponte Castañeda, J. Willis, *J. Mech. Phys. Solids* **43** (1995) 1919-1951
- [23] M. Cherkaoui, H. Sabar, M. Berveiller, *Int. J. Eng. Sci.* **33** (1995) 829-843
- [24] R. Hill, *J. Mech. Phys. Solids* **31** (1983) 347-357
- [25] J.-M. Gatt, Y. Monerie, D. Laux, D. Baron, *J. Nucl. Mater.* **336** (2005) 145-155