

# Effets de la proximité des inclusions dans un Volume Élémentaire Représentatif sur le calcul des champs locaux et des propriétés effectives

L. Belgrand<sup>1,2</sup>, I. Ramière<sup>1</sup>, R. Largenton<sup>3</sup>, F. Lebon<sup>2</sup>

<sup>1</sup> CEA, DES, IRESNE, DEC, SESC, LSC ; Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez Durance; {louis.belgrand,isabelle.ramiere}@cea.fr

<sup>2</sup> Aix-Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, LMA ; F-13453 Marseille cedex 13; {belgrand,lebon}@lma.cnrs-mrs.fr

<sup>3</sup> EDF R&D, Dpt MMC ; Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez Durance; rodrigue.largenton@edf.fr

**Résumé** — Ce travail s'intéresse aux effets induits par la proximité des hétérogénéités sur le comportement de composites inclusionnaires biphasiques. Nous considérons des inclusions sphériques monodispersées, de fraction volumique modérée, rigides ou souples. La distance entre inclusions varie entre le rayon des sphères et un dixième de ce rayon. Des calculs numériques sur VER sont réalisés. Les propriétés élastiques effectives et moyennes par phase obtenues sont comparées aux estimations de Mori-Tanaka. Les aspects locaux (contraintes), importants dans une démarche multiéchelle, sont également regardés.

**Mots clés** — matériaux hétérogènes, distance entre inclusions, homogénéisation, comportement local

## 1 Contexte et objectifs

La simulation du comportement mécanique de matériaux à microstructure hétérogène s'appuie en général sur des méthodes dites d'homogénéisation. Plusieurs grands types d'approches se distinguent. Les approches d'homogénéisation analytique permettent de représenter à l'échelle macroscopique l'effet de paramètres microstructuraux. Elles n'utilisent pas de maillage et permettent ainsi un gain important en temps de calcul. Cependant, ces approches sont généralement limitées pour représenter des effets locaux induits par certaines géométries de microstructures. Les approches d'homogénéisation numérique s'appuient quant à elles, sur des calculs sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de la microstructure et permettent d'obtenir toutes les informations locales et effectives d'intérêt. Elles sont en contre-partie très "gourmandes" en temps de calcul. Pour réduire le temps de calcul des méthodes d'homogénéisation numérique tout en représentant les champs locaux, des approches basées sur des techniques de réduction d'ordre de modèles ont été développées. Les fonctions de bases de ces problèmes locaux sont obtenues à partir d'essais numériques préalables à champs complets sur VER, qui doivent être réévalués pour tout nouveau comportement ou microstructure. On se focalise ici sur les 2 premières classes d'approches.

Nous nous intéressons ici à des composites biphasiques munis d'inclusions sphériques monodispersées de fraction volumique modérée ( $\sim 10 - 30\%$ ). Dans ce cas, les approches de type Mori-Tanaka [8, 7] fournissent des estimations précises des propriétés effectives et des moments d'ordre 1 et 2 par phase. Ces estimations tiennent compte de la fraction volumique d'inclusions, des propriétés mécaniques des phases, mais pas de la répartition des inclusions et en particulier leur proximité. En effet, ces approches considèrent les hétérogénéités comme des inclusions isolées dans une matrice infinie. Des études sur l'effet du recouvrement des inclusions [14, 4] ont montré l'impact de celui-ci sur les modèles homogénéisés. Cependant à notre connaissance, aucune étude ne s'est intéressée à l'effet de la proximité des sphères (sans recouvrement) sur les propriétés effectives. Dans une démarche multiéchelle, il apparaît également important d'étudier l'effet induit par la distance minimale entre inclusions sur le comportement local de ces microstructures. Certaines grandeurs d'intérêt peuvent être localement fortement impactées.

Ainsi, dans cette étude, nous proposons de générer, pour une même fraction volumique d'inclusions, des éléments de volume représentatifs avec une distance minimale entre inclusions monodispersées variant du rayon des sphères à un dixième de ce rayon. Ces VER sont discrétisés par éléments finis et des calculs d'élastostaticité sont réalisés pour quantifier l'impact de cette distance sur les propriétés effectives et sur les champs locaux. L'influence du contraste de rigidité entre les phases (inclusions rigides ou souples) est également regardée. Plusieurs rapports d'échelle sont considérés pour s'assurer de la fiabilité des résultats obtenus.

## 2 Génération de microstructures

Nous effectuons des calculs sur des VER cubiques de côté de taille  $l$ , composés d'inclusions sphériques monodispersées de diamètre  $d$ . Le tirage des sphères est obtenu via un algorithme de contraction mécanique [15] basé sur la méthode Random Sequential Addition (RSA) [3]. La distance minimale entre deux sphères, notée  $s$ , est alors imposée.

La discrétisation des VER par éléments finis est effectuée via l'outil COMBS [2] basé sur la plateforme SALOME [10] du CEA. Le maillage est généré de façon périodique. Une étude de convergence en maillage [11] a montré qu'il était préférable d'utiliser des éléments finis quadratiques plutôt que linéaires, notamment au niveau des contraintes obtenues dans la phase inclusionnaire. Par ailleurs, l'utilisation d'éléments finis isoparamétriques permet alors de mieux représenter la géométrie des inclusions sphériques et ainsi d'obtenir des fractions volumiques maillées proches des fractions théoriques avec beaucoup moins d'éléments [12]. Cette fraction volumique d'inclusion maillée intervient au premier ordre dans la détermination du comportement effectif. Ainsi les maillages utilisés par la suite seront composés d'éléments quadratiques tétraédriques à dix nœuds.

Pour obtenir un maillage non dégénéré, le nombre minimal d'éléments entre deux frontières (bords des inclusions ou du VER) est fixé à 2. Cela permet d'avoir toujours un nœud dans la matrice entre deux frontières. Ainsi, le maillage est non uniforme, avec un raffinement de maillage plus important entre les inclusions proches et dans les inclusions coupées par les bords du VER. En pratique, le pas de maillage minimum est dicté par ces inclusions coupées. Ainsi, le nombre de nœuds total du maillage ne dépend que faiblement de la distance minimale  $s$ . Le pas de maillage minimal est fixé à  $\frac{d}{100}$  alors que le pas de maillage maximal est choisi à  $r = \frac{d}{2}$ . Un facteur de gradation de 2 est utilisé entre les éléments. Ce raffinement de maillage permet des calculs fiables (cf. étude de convergence en maillage réalisée) mais conduit à des maillages à grand nombre d'éléments. En définissant le rapport d'échelle par le rapport entre la taille du VER et le diamètre des inclusions ( $RE = \frac{l}{d}$ ), un exemple de nombre de nœuds obtenu est présenté dans la table 1. On peut noter la cohérence de la variation du nombre de nœuds vis-à-vis du rapport d'échelle.

	$RE = 2.5$	$RE = 5$	$RE = 10$
nb de nœuds	30 000	300 000	2 500 000

TABLE 1 – Nombre de nœuds moyen dans le maillage des VER à fraction volumique d'inclusion  $f_v = 13.4\%$  pour différents rapports d'échelle  $RE$  avec  $d = 20\ \mu m$

## 3 Propriétés élastiques et homogénéisation

Chacune des phases est supposée suivre un comportement élastique linéaire. Le contraste entre phases est ajusté en modifiant les paramètres mécaniques de la phase inclusionnaire (cf. section 3.1). Une estimation des propriétés effectives et des contraintes moyennes par phase peut alors être obtenue à partir des approches de type Mori-Tanaka. Ces estimations sont rappelées en section 3.2. Enfin nous réalisons également des calculs numériques sur VER, et ce pour différentes distances minimales entre inclusions (paramètre  $s$ , cf. section 2). Ces calculs à champs complets nous permettent également de déterminer des propriétés effectives apparentes et de calculer les moments d'ordre un des contraintes, cf. section 3.3. Ainsi des comparaisons avec les estimations de Mori-Tanaka seront possibles.

Dans la suite du document, **les indices 1 et 2 représentent respectivement la phase inclusionnaire et la phase matricielle.**

### 3.1 Contrastes de rigidité entre phases

Nous considérons un matériau numérique modèle dont les propriétés élastiques par phase sont les suivantes :

$$\begin{cases} E_2 = 20\ \text{MPa} \\ E_1 = E_2 \times \text{contraste} \\ \nu_1 = \nu_2 = 0.3 \end{cases} \quad (1)$$

où  $E$  correspond au module de Young et  $\nu$  au coefficient de Poisson. Le contraste sur le module d'Young entre la phase inclusionnaire et la phase matricielle varie et prend les valeurs  $\{0.01; 0.1; 10; 100\}$ . Par définition, les modules de compressibilité  $k$  et de cisaillement  $\mu$  ont alors le même contraste.

### 3.2 Estimations de Mori-Tanaka

La loi d'homogénéisation de Mori-Tanaka (MT) permet d'établir une estimation des propriétés effectives de matériau de type inclusions/matrice. On a ainsi les relations suivantes [7] :

$$\begin{cases} k^{MT} = k_2 + f\nu \left( \frac{k_1 - k_2}{1 + (1 - f\nu) \frac{k_1 - k_2}{\frac{4}{3}\mu_2 + k_2}} \right) \\ \mu^{MT} = \mu_2 + f\nu \left( \frac{\mu_1 - \mu_2}{1 + (1 - f\nu) \frac{\mu_1 - \mu_2}{\tilde{\mu} + \mu_2}} \right) \end{cases} \quad \text{avec } \tilde{\mu} = \frac{\mu_2}{6} \frac{9k_2 + 8\mu_2}{k_2 + 2\mu_2} \quad (2)$$

où  $f\nu$  correspond à la fraction volumique associée à la phase inclusionnaire.

Comme toute estimation analytique, cette loi possède un domaine d'utilisation. En particulier, il faut que la fraction volumique d'inclusions ne soit pas trop élevée ( $f\nu < 40\%$ ). Il est à noter que dans le cas où la loi ne serait pas une bonne estimation, elle en reste néanmoins une borne de Hashin-Shtrikman [5].

Cette approche permet par ailleurs d'obtenir des estimations de moyennes par phases. On parle alors d'approche "par champs moyens". En considérant le temps de relaxation infini de l'article [7], on obtient une estimation de la contrainte moyenne dans la phase inclusionnaire :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 = 2\mu^{MT} \tilde{b}^d \underline{\underline{E}}^d + 3k^{MT} \tilde{b}^m E^m \underline{\underline{Id}} \quad (3)$$

avec  $\underline{\underline{E}}^d$  et  $E^m$  les parties respectivement déviatorique et sphérique du tenseur des déformations macroscopiques (noté  $\underline{\underline{E}}$  dans la suite) et  $\underline{\underline{Id}}$  le tenseur identité d'ordre 2. Les coefficients  $\tilde{b}^d$  et  $\tilde{b}^m$  du tenseur d'homogénéisation sont donnés par :

$$\tilde{b}^d = \frac{\mu_1}{\mu_2} \frac{\frac{10}{3}\mu_2 + \frac{5}{2}k_2}{\frac{3}{2}(1 - f\nu)k_2 + (\frac{3}{2}f\nu + 1)\frac{\mu_1}{\mu_2}k_2 + \frac{4}{3}(1 - f\nu)\mu_2 + (\frac{4}{3}f\nu + 2)\mu_1} \quad (4)$$

$$\tilde{b}^m = k_1 \frac{\frac{4}{3}\mu_2 + k_2}{\frac{4}{3}\mu_2 \tilde{k}_e + k_2 k_1} \quad \text{avec } \tilde{k}_e = f\nu k_1 + (1 - f\nu)k_2 \quad (5)$$

La contrainte moyenne dans la phase matricielle se déduit de (3) en considérant la relation :

$$f\nu \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_1 + (1 - f\nu) \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_2 = \underline{\underline{\Sigma}} \quad (6)$$

avec  $\underline{\underline{\Sigma}}$  la contrainte moyenne sur le VER obtenue par :  $\underline{\underline{\Sigma}} = 2\mu^{MT} \underline{\underline{E}}^d + 3k^{MT} E^m \underline{\underline{Id}}$

### 3.3 Homogénéisation numérique

Pour réaliser les calculs numériques par éléments finis sur le VER, il faut imposer des conditions aux limites. Nous retenons dans cette étude les conditions aux limites périodiques pour leur précision et leur convergence en rapport d'échelle [6, 1], sans considération sur les temps de calcul. Les champs locaux sont immédiatement accessibles et on parle de méthode "par champs complets".

À partir de plusieurs chargements unitaires (6 en 3D) en déformation macroscopique, il est possible d'obtenir, à partir de moyennes volumiques sur le VER, le tenseur d'élasticité effectif complet. Dans le cas étudié ici, le tirage effectué nous garantit que le comportement effectif du matériau est isotrope. En effet, les sphères sont réparties aléatoirement dans le VER et celui-ci est périodique. Nous avons effectué des vérifications numériques qui confirment ce résultat. L'article [6] décrit alors une approche numérique d'homogénéisation permettant le calcul des propriétés effectives apparentes, via les modules de compressibilité  $k^{app}$  et de cisaillement  $\mu^{app}$ , à partir de deux chargements bien choisis. Ici, nous montrons qu'à partir d'un unique chargement mixte, il est possible d'obtenir les deux modules apparents d'intérêt via la

formule (7). 
$$\underline{\underline{E}} = \begin{pmatrix} 1. & 1. & 0. \\ 1. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} k^{app} = \frac{1}{3} \text{trace}(\underline{\underline{\Sigma}}^{app}) \\ \mu^{app} = \frac{1}{4} \left( \frac{3}{2} \Sigma_{XX}^{app} - \frac{1}{2} \text{trace}(\underline{\underline{\Sigma}}^{app}) + \Sigma_{XY}^{app} \right) \end{cases} \quad (7)$$

avec

$$\underline{\underline{\Sigma}}^{app} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\sigma}} dV \quad (8)$$

où  $V$  représente le VER et  $|V|$  sa mesure.

On peut noter que davantage de termes que dans [6] sont utilisés pour le calcul de  $\mu^{app}$ , ce qui assure une meilleure stabilité de cette valeur.

Les contraintes moyennes par phase sont obtenues directement à partir des champs locaux :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_i = \frac{1}{|V_i|} \int_{V_i} \underline{\underline{\sigma}} dV_i \quad (9)$$

où  $V_i$  représente le domaine occupé par la phase  $i$  considérée et  $|V_i|$  sa mesure.

## 4 Effets induits par la proximité des inclusions

Nous effectuons des tirages dont la distance minimale (effective) entre inclusions  $s$  prend des valeurs dans l'ensemble  $s \in \{0.1; 0.2; 0.4; 0.6; 0.8; 1; 1.2\} r$ , avec  $r$  le rayon des inclusions. Trois rapports d'échelle  $RE = 2.5, 5$  et  $10$  sont considérés. Pour chacun de ces rapports,  $50, 10$  et  $5$  tirages sont respectivement réalisés. On détermine alors la moyenne et l'écart-type des grandeurs désirées sur les tirages. Les calculs à  $RE = 10$  sont considérés comme simulations de référence. En effet, à cette taille de VER, l'écart-type entre les différents tirages devient faible. Nous le verrons sur les figures 1 et 2.

Nous analysons les effets de la distance minimale  $s$  sur les propriétés effectives, les moyennes par phases et les champs locaux dans les trois prochains paragraphes. Sur les modules apparents et les contraintes hydrostatiques moyennes par phase, les résultats numériques sont mis en confrontation avec la loi homogénéisée de Mori-Tanaka. La discussion se fera sur les contrastes  $0.1$  et  $10$ , mais des tendances similaires sont observées pour les contrastes  $0.01$  et  $100$ , respectivement. Sauf mention contraire, les inclusions seront supposées avoir un diamètre  $d = 20 \mu m$ .

### 4.1 Sur les propriétés effectives

Nous nous intéressons tout d'abord à l'influence du paramètre de distance minimale  $s$  sur les propriétés effectives. La figure 1 illustre l'évolution des modules apparents,  $k^{app}$  et  $\mu^{app}$  (cf. Eq (7)), en fonction de  $s$  sur les propriétés effectives pour les différents contrastes et  $RE$ .

Tout d'abord, nous observons une faible variation des moyennes entre les différents  $RE$ . Comme attendu, lorsque  $RE$  augmente, l'écart-type diminue pour devenir assez faible à  $RE = 10$ . On note également, qu'à  $RE$  fixé, l'écart-type diminue à mesure que  $s$  augmente, pour devenir presque négligeable à  $s = 1.2r$ . Cependant, cette tendance est à rapprocher d'un éventuel biais du tirage. En effet, les possibilités de répartition des inclusions diminuent à mesure que  $s$  augmente. On obtient alors des géométries très similaires et donc des résultats proches entre les tirages.

Concernant les propriétés effectives, on remarque une rigidification (resp. assouplissement) du matériau lorsque les inclusions se rapprochent pour des hétérogénéités plus rigides (resp. souples) que la matrice. Notons que l'estimation de Mori-Tanaka reste toujours une borne de Hashin-Shtrikman [5] (supérieure ou inférieure selon le contraste). Nous avons confirmé les tendances observées grâce à des simulations sur des VERs avec des inclusions de rayon différent ( $r = 5 \mu m$ ) ou de fraction volumique différente ( $f_v = 25.1 \%$ ), non présentées dans cet article.

Il semble y avoir un effet induit par les inclusions sur la matrice plus important lorsque celle-ci est de faible épaisseur entre les inclusions. On retrouve ici des ordres de distances similaires à ceux évoqués dans [9], avec une perturbation de la matrice par les inclusions sur une zone de l'ordre de la taille des inclusions. On aurait tendance à penser que globalement ces effets sont peu visibles si les inclusions sont espacées d'au moins un rayon  $r$ , car dans ce cas les propriétés effectives semblent atteindre une asymptote sur les graphes de la figure 1 et les valeurs prédites par la loi de Mori-Tanaka sont retrouvées.

Une tendance à l'assouplissement à  $contraste < 1$  a également été observée récemment dans [16] dans le cas de microstructures avec canaux cylindriques entre les pores. Les propriétés effectives décroissent alors par rapport à une microstructure sans canaux de même fraction volumique, même pour une fraction volumique de canaux faible.

Pour le comportement en fonction de  $s$  en cas d'inclusions rigides ( $contraste > 1$ ), on peut voir un parallèle avec l'étude menée dans [4], où le recouvrement des sphères est analysé. Les auteurs observent alors que les propriétés effectives croissent lorsque le nombre de sphères est réduit pour une fraction volumique et une taille de VER fixées (i.e. la taille des sphères augmente).

Soulignons néanmoins que même si la tendance des propriétés effectives à être modifiées par le paramètre de distance  $s$  est nette, cet écart reste faible (de l'ordre du pourcent). La loi de Mori-Tanaka reste dans les cas étudiés une bonne estimation.

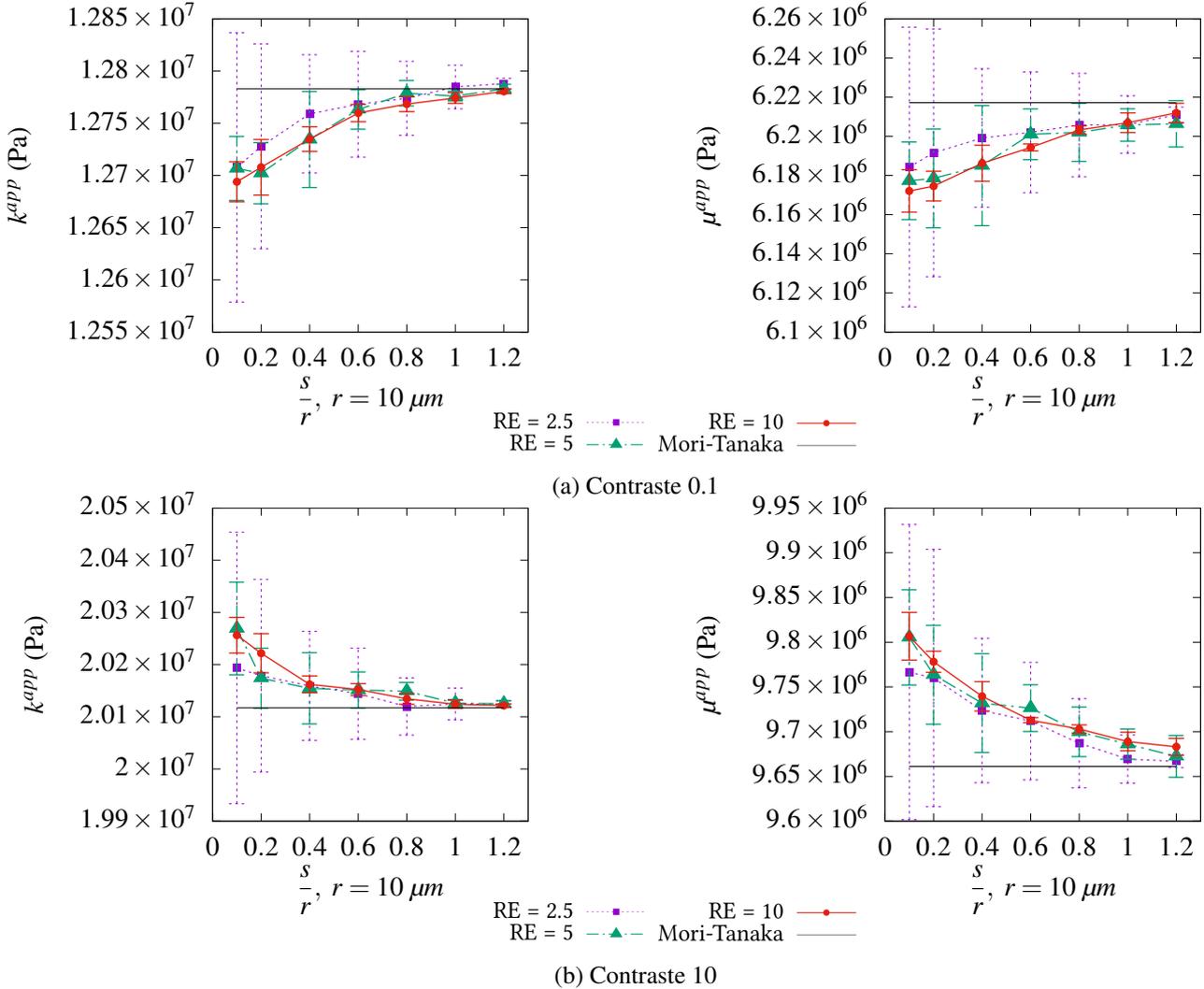


FIGURE 1 – Influence de la proximité entre sphères sur les propriétés effectives pour différents contrastes et rapports d'échelles.  $r = d/2 = 10 \mu\text{m}$  et  $f_v = 13.4 \%$

## 4.2 Sur les moyennes par phases

Nous nous intéressons ici à l'influence du paramètre de distance minimal  $s$  sur les moyennes de contraintes par phase. La figure 2 reporte l'évolution des moyennes par phase de la contrainte hydrostatique  $\langle \underline{\sigma}_{hydro} \rangle_i = \frac{1}{|V_i|} \int_{V_i} \frac{1}{3} trace(\underline{\sigma}) dV_i$  en fonction de  $s$  pour différents contrastes et  $RE$ . Des comparaisons similaires sont obtenus pour la contrainte équivalente.

Tout d'abord, des conclusions identiques à la section 4.1 peuvent être tirées sur la faible influence de  $RE$  sur la tendance des résultats en moyenne.

Par contre, on observe ici que l'allure des courbes ne dépend pas du contraste. Lorsque les sphères se rapprochent la contrainte a alors tendance à augmenter (resp. diminuer) dans la phase inclusionnaire

(resp. matricielle), et ce quel que soit le contraste entre les phases.

Pour les inclusions rigides, on peut trouver des similitudes avec [13] où l'influence de la forme des inclusions (polyèdres et sphères) sur la contrainte moyenne par phase est étudiée. Ils observent que la contrainte moyenne dans la phase inclusionnaire dans le cas de polyèdres est supérieure à celle du cas des sphères. Dans la phase matricielle, la contrainte moyenne est légèrement inférieure avec des inclusions polyédriques qu'avec des inclusions sphériques. Le comportement d'inclusions sphériques (très) proches ( $s < 0.5r$ ) étudié ici s'apparente alors à celui d'inclusions polyédriques, ce qui semble géométriquement cohérent.

Pour finir, on constate que la phase rigide dicte les propriétés effectives, avec des courbes très similaires aux propriétés effectives observées sur la figure 1. De plus, c'est la contrainte moyenne dans la phase inclusionnaire qui est le plus impactée par le rapprochement des inclusions, la matrice ayant globalement un comportement moyen plus stable (écarts < 1%). Ceci est certainement à rapprocher de la fraction volumique matricielle beaucoup plus importante dans notre cas.

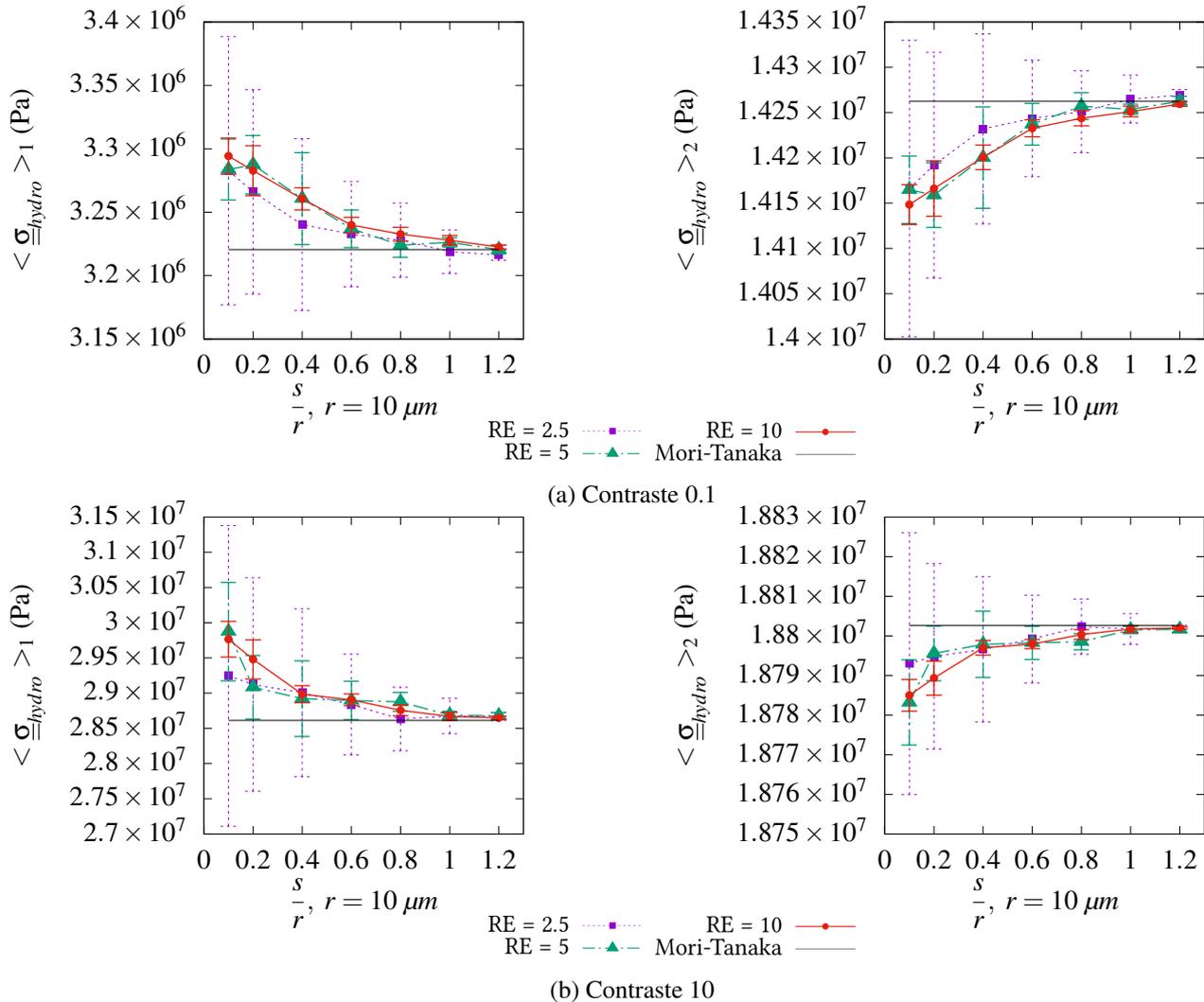


FIGURE 2 – Influence de la proximité entre sphères sur les moyennes par phase de la contrainte hydrostatique pour différents contrastes et rapports d'échelles.  $r = d/2 = 10 \mu\text{m}$  et  $f_v = 13.4 \%$

### 4.3 Sur les champs locaux

On réalise des histogrammes de la fréquence de la contrainte hydrostatique au sein de chacune des phases. Ces histogrammes sont reportés sur la figure 3 pour les distances minimales  $s$  extrêmes. On s'aperçoit que plus les inclusions sont éloignées, plus le comportement au sein de celles-ci est homogène (l'écart-type de l'histogramme est 3 à 4 fois plus petit).

A l'inverse, lorsque les inclusions sont proches, la matrice va avoir tendance à être moins scindée et donc plus homogène. L'écart-type de l'histogramme est légèrement plus faible à  $s$  petit que  $s$  grand,

même si la matrice, comme déjà discuté en section 4.2, est beaucoup moins impactée en moyenne par la distance entre sphères.

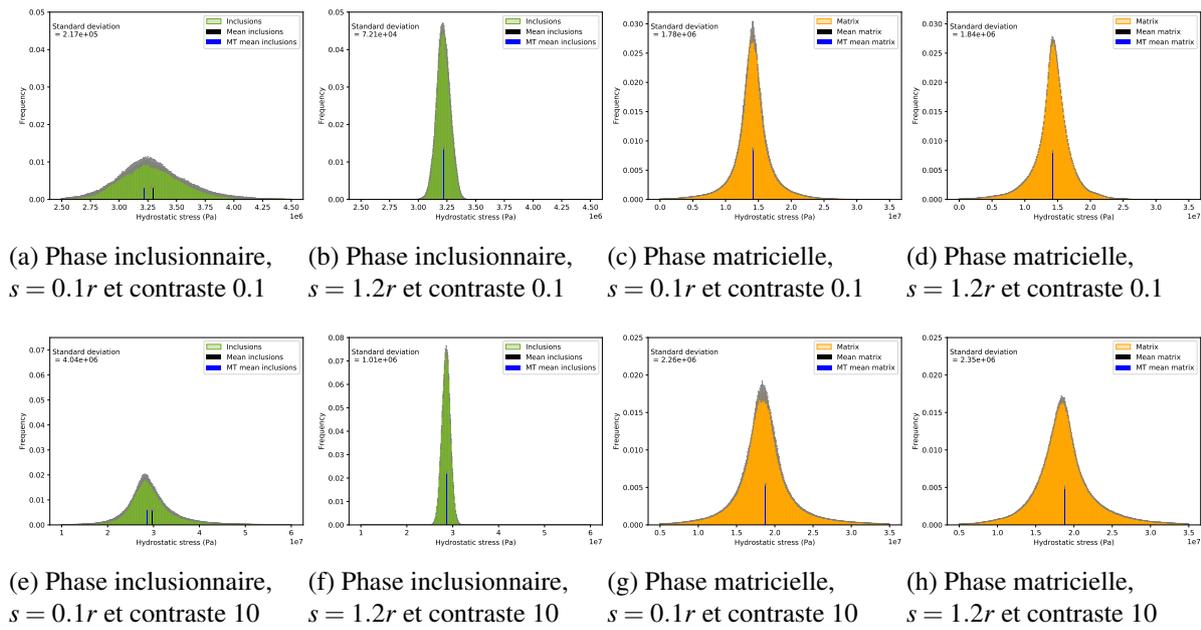


FIGURE 3 – Histogrammes de fréquence de la contrainte hydrostatique par phase à  $RE = 10$ ,  $f_v = 13.4\%$  et les valeurs de  $s$  extrêmes ( $s = 0.1r$  et  $s = 1.2r$ ) pour les contrastes 0.1 et 10

Toutefois, certains effets très localisés ne sont pas visible sur les histogrammes, car ils ne concernent que quelques mailles. On réalise ainsi des vues en coupe d'un VER à  $RE = 10$  pour les valeurs de  $s$  extrêmes ( $s = 0.1r$  et  $s = 1.2r$ ) et les contrastes 0.1 et 10, cf. figure 4. La contrainte hydrostatique bornée par la contrainte minimale (resp. maximale) de la phase souple (resp. rigide) est affichée.

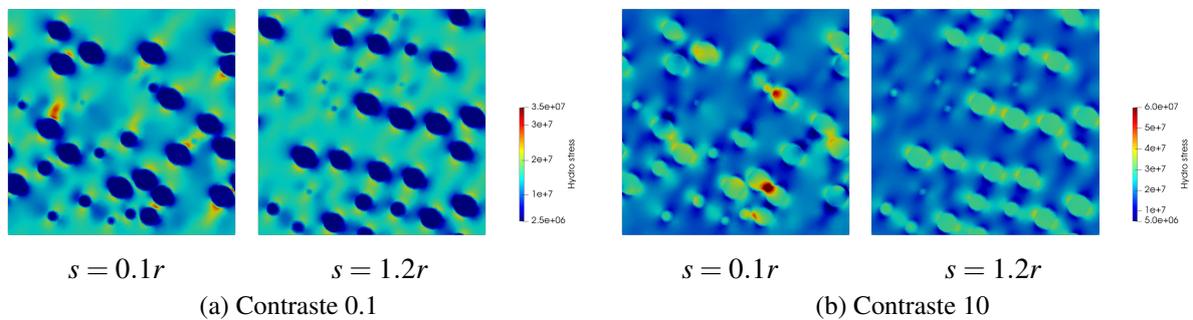


FIGURE 4 – Contrainte hydrostatique locale à  $RE = 10$ ,  $f_v = 13.4\%$  et pour les valeurs de  $s$  extrêmes et les contrastes 0.1 et 10 - Vue en coupe du VER

Nous observons clairement à  $s = 0.1r$  des zones de fortes contraintes (en valeur absolue) lorsque les sphères sont proches. Les zones où les sphères ont une distance plus importante entre elles, ont alors un comportement similaire à  $s = 1.2r$ . Les zones entre sphères proches peuvent alors avoir une contrainte plus que doublée par rapport à des inclusions plus éloignées.

Par ailleurs, nous visualisons bien les perturbations de la matrice au niveau de l'interface inclusion/matrice de l'ordre du diamètre des sphères (cf. [9]), déjà évoquées dans la section 4.1, qui semblent induire un réseau entre les sphères, ce qui corrobore notre parallèle avec le réseau de canaux (cf. [16]).

## 5 Conclusion

Nous avons étudié l'influence de la proximité géométrique entre inclusions sphériques sur les propriétés effectives, moyennes par phase et sur le comportement local de composites biphasés.

Nous avons pu constater que la distance minimale entre sphères impacte les propriétés effectives dans le sens de la rigidité (souplesse) des inclusions pour une distance inférieure au rayon des sphères. Les contraintes moyennes par phase ont, quant à elles, un comportement indépendant du contraste. Les contraintes augmentent dans la phase inclusionnaire et diminuent dans la phase matricielle quand la distance minimale entre inclusions diminue. La phase inclusionnaire (minoritaire) est en moyenne la plus impactée par le rapprochement des inclusions. Les estimations (effectives et moyennes par phase) de Mori-Tanaka restent cependant bonnes avec un écart à la simulation de l'ordre de quelques pourcents.

On observe un impact largement plus important sur les grandeurs locales, en particulier entre et dans les sphères les plus proches. En particulier, la contrainte maximale (cf. initiation de phénomènes locaux dans la microstructure) peut localement être doublée. Dans le cadre d'un couplage numérique multiéchelle, il apparaît alors important de ne pas se contenter des propriétés effectives, mais de simuler également avec précision le comportement local.

## Références

- [1] M. Bornert, T. Bretheau, and P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux, Tome 1 : Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermes science, 2001.
- [2] C. Bourcier, W. Dridi, L. Chomat, E. Laucoin, B. Bary, and E. Adam. Combs : Open source python library for RVE generation. Application to microscale diffusion simulations in cementitious materials. In *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA + MC 2013)*, La Cité des Sciences et de l'Industrie, Paris, France, 2013.
- [3] D.W. Cooper. Random-sequential-packing simulations in three dimensions for spheres. *Physical Review A*, 38 :522–524, 1988.
- [4] A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad, and H. El Minor. Effect of overlapping inclusions on effective elastic properties of composites. *Mechanics Research Communications*, 53 :24–30, 2013.
- [5] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(2) :127–140, 1963.
- [6] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40(13) :3647–3679, 2003.
- [7] R. Masson, M. Seck, J. Fauque, and M. Garajeu. A modified secant formulation to predict the overall behavior of elasto-viscoplastic particulate composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 137 :103874, 2020.
- [8] T. Mori and K. Tanaka. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21(5) :571–574, 1973.
- [9] G.M. Odegard, T.C. Clancy, and T.S. Gates. Modeling of the mechanical properties of nanoparticle/polymer composites. *Polymer*, 46(2) :553–562, 2005.
- [10] SALOME platform. <https://www.salome-platform.org/>.
- [11] I. Ramière, R. Masson, B. Michel, and S. Bernaud. Un schéma de calcul multi-échelles de type Éléments Finis au carré pour la simulation de combustibles nucléaires hétérogènes. In *13e colloque national en calcul des structures*, Giens, Var, France, Mai 2017. Université Paris-Saclay.
- [12] I. Ramière. *Autour de méthodes numériques pour les couplages multiphysiques et multiéchelles en mécanique des solides*. Habilitation à Diriger des Recherches, Aix Marseille Université (AMU), Octobre 2021.
- [13] A. Rasool and H. J. Böhm. Effects of particle shape on the macroscopic and microscopic linear behaviors of particle reinforced composites. *International Journal of Engineering Science*, 58 :21–34, 2012.
- [14] S. Torquato. Morphology and effective properties of disordered heterogeneous media. *International Journal of Solids and Structures*, 35(19) :2385–2406, 1998.
- [15] S. Williams and A. Philipse. Random packings of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction. *Physical review E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 67 :051301, 2003.
- [16] O. Zerhouni, S. Brisard, and K. Danas. Quantifying the effect of two-point correlations on the effective elasticity of specific classes of random porous materials with and without connectivity. *International Journal of Engineering Science*, 166 :103520, 2021.