

## **Effet des fluctuations de fractions volumiques en contexte stochastique : construction d'un modèle probabiliste et stratégie de résolution**

**Johann Guilleminot\*, Christian Soize\*\*, Djimédo Kondo\*\*\* & Christophe Binétruy\***

*\*Ecole des Mines de Douai  
Département Technologie des Polymères et Composites & Ingénierie Mécanique  
941 rue Charles Bourseul B. P. 10838 59508 Douai Cedex, France  
guilleminot@ensm-douai.fr*

*\*\*Université Marne-La-Vallée  
Marne-La-Vallée, France*

*\*\*\*Université de Sciences et Technologies de Lille  
Laboratoire de Mécanique de Lille-UMR CNRS 8107  
Cité Scientifique, Bd. Paul Langevin, 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France*

### **Résumé :**

*De nombreux matériaux présentent des dispersions et des incertitudes sur leurs propriétés mécaniques macroscopiques. L'origine de ces dispersions se trouve essentiellement dans les fluctuations aléatoires constatées aux échelles inférieures, en particulier à l'échelle mésoscopique dans le cas d'incertitudes microstructurales. Nous proposons dans cette communication une démarche d'évaluation de l'incidence des fluctuations aléatoires de fraction volumique à une échelle mésoscopique, sur les propriétés macroscopiques des matériaux composites. En particulier, la méthodologie de construction du modèle probabiliste ainsi que la stratégie de résolution du problème sont décrites.*

### **Abstract :**

*Many materials encounter fluctuations and uncertainties on their macroscopic mechanical properties. This basically results from random fluctuations observed at a lower scale, especially at the mesoscale when microstructural uncertainties are considered. The aim of the present study is then to propose a new methodology that allows to evaluate the impact of a randomly fluctuating volume fraction at the mesoscale of composites. In particular, the methodology of construction of the probabilistic model as well as the strategy for solving the mechanical problem are described.*

### **Mots-clefs :**

**Homogénéisation ; Modèle probabiliste ; Matériaux composites**

## **1 Introduction**

Dans cette étude, nous considérons les matériaux composites pour lesquels certaines caractéristiques microstructurales, telle que la fraction volumique, peuvent être modélisées comme des champs aléatoires (cas de fluctuations spatio-probabilistes) à l'échelle mésoscopique. Tel est par exemple le cas des matériaux thermoplastiques renforcés par des fibres longues, sur lesquels de telles dispersions ont été mises en évidence, notamment dans la direction de l'écoulement de la résine lors de la fabrication (Coulon (2007)). Pour des raisons de confidentialité, ce phénomène est simplement illustré sur la figure 1. Afin de rendre compte de l'influence de ces fluctuations aléatoires locales, nous considérons trois échelles distinctes (respectivement microscopique, mésoscopique et macroscopique), supposées séparées et telles que décrites dans

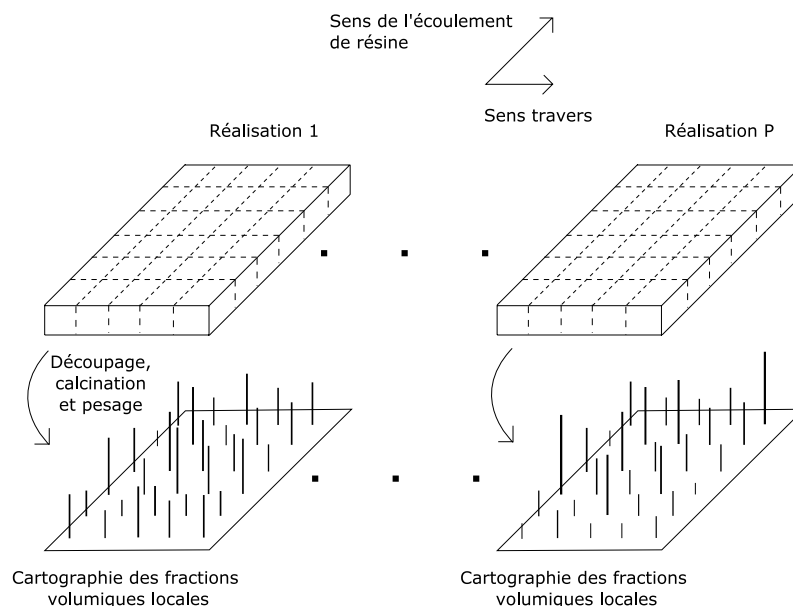


FIG. 1 – Illustration des variations spatiales aléatoires de la fraction volumique sur une plaque composite.

Gărăjeu *et al.* (2006). Cette séparation d'échelle nous permet alors de procéder à deux homogénéisations successives, illustrées sur la figure 2 :

- la première est conduite entre les échelles microscopique et mésoscopique et permet d'évaluer les propriétés mécaniques effectives de chaque région mésoscopique ;
- la seconde est réalisée entre les échelles mésoscopique et macroscopique et permet d'intégrer la mésostructure aléatoire du composite.

Afin de simplifier l'étude, nous ne considérons que le cas d'un composite biphasé, de fraction volumique mésoscopique  $F$ . Après avoir exposé la méthodologie de construction du modèle probabiliste, nous détaillons la procédure expérimentale d'identification ainsi que la stratégie de résolution.

## 2 Construction du modèle probabiliste

### 2.1 Représentation du champ aléatoire

Le champ aléatoire mésoscopique  $F(\mathbf{x})$  est de façon classique écrit sous la forme (Desce-liers *et al.* (2006)) :

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \xi_j \varphi_j(\mathbf{x}), \quad x \in \Omega \quad (1)$$

où  $\{\alpha_j\}_{j=1}^N$  est un ensemble de constantes réelles à définir,  $\{\xi_j\}_{j=1}^N$  un ensemble dénombrable de variables aléatoires et  $\{\varphi_j\}_{j=1}^N$  une base Hilbertienne de  $H = L^2(\Omega, [0,1])$ . Ces variables aléatoires peuvent être interprétées comme les projections du champ aléatoire sur la base Hilbertienne. On introduit alors une partition de l'espace  $\Omega = \bigcup_{j=1}^N \Omega_j$  (cf. figure 2) et on définit les fonctions de la base par :  $\varphi_j(\mathbf{x}) = \mathbb{I}_{\Omega_j}(\mathbf{x}) / \sqrt{|\Omega_j|}$ , où  $\mathbb{I}_{\Omega_j}(\mathbf{x})$  est la fonction indicatrice ( $\mathbb{I}_{\Omega_j}(\mathbf{x}) = 1$  si  $x \in \Omega_j$  et  $\mathbb{I}_{\Omega_j}(\mathbf{x}) = 0$  sinon). Par suite, on vérifie que :  $\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle_H =$

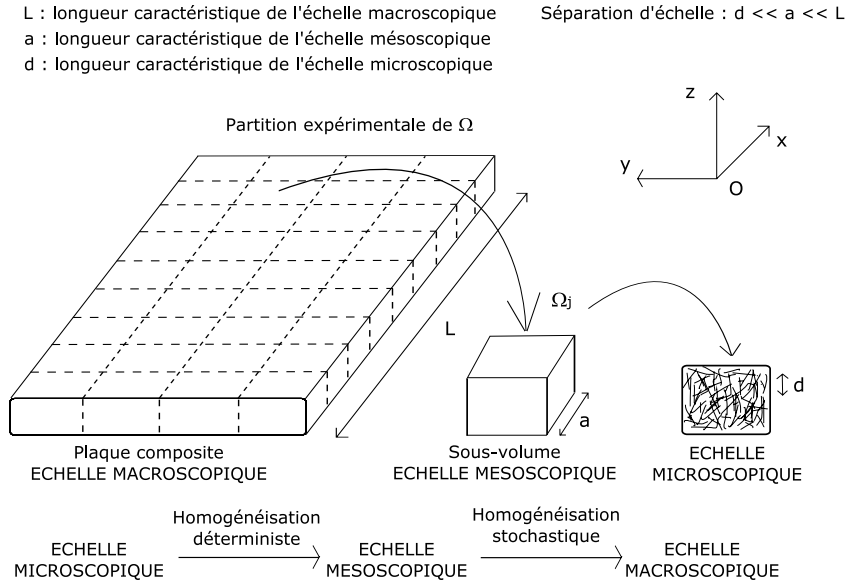


FIG. 2 – Partition et homogénéisations successives.

$\int_{\Omega} \varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_k(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{jk}$ . En remarquant à partir de (1) que pour un  $x \in \Omega_j$  donné, on a  $F(\mathbf{x}) = \alpha_j \xi_j / \sqrt{|\Omega_j|}$  et puisque  $0 \leq F(\mathbf{x}) \leq 1$  presque sûrement, on pose  $\alpha_j = \sqrt{|\Omega_j|}$  et  $0 \leq \xi_j \leq 1$ . En résumé, on retiendra que la représentation du champ aléatoire s'écrit :

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \sqrt{|\Omega_j|} \xi_j \varphi_j(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \xi_j \mathbb{I}_{\Omega_j}(\mathbf{x}), \quad x \in \Omega \quad (2)$$

avec  $\xi_j = \langle F, \varphi_j \rangle_H / \sqrt{|\Omega_j|}$ .

## 2.2 Caractérisation de la représentation

Afin de caractériser le processus, on s'intéresse dans un premier temps à la classe de celui-ci. Le moment d'ordre 2 du champ s'écrit :

$$E \{F(\mathbf{x})^2\} = E \left\{ \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sqrt{|\Omega_j| |\Omega_k|} \xi_j \xi_k \frac{1}{\sqrt{|\Omega_j|}} \mathbb{I}_{\Omega_j}(\mathbf{x}) \frac{1}{\sqrt{|\Omega_k|}} \mathbb{I}_{\Omega_k}(\mathbf{x}) \right\} \quad (3)$$

On peut alors montrer que  $\forall x \in \Omega$ ,  $E \{F(\mathbf{x})^2\} \leq 1 < \infty$ , ce qui indique que le champ ainsi construit est du second ordre (et correspond donc bien à une grandeur d'énergie finie). La moyenne, l'autocorrélation et l'autocovariance du champ sont alors respectivement données par :

$$E \{F(\mathbf{x})\} = \sum_{j=1}^N \sqrt{|\Omega_j|} \xi_j \varphi_j(\mathbf{x}) \quad (4)$$

$$R_F(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sqrt{|\Omega_j| |\Omega_k|} E \{ \xi_j \xi_k \} \varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_k(\mathbf{x}') \quad (5)$$

$$C_F(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = R_F(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - m_F(\mathbf{x}) m_F(\mathbf{x}') \quad (6)$$

avec  $\xi_j = E\{\xi_j\} = \frac{1}{|\Omega_j|} \int_{\Omega_j} m_F(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  et  $\forall x \in \Omega$ ,  $m_F(\mathbf{x}) = E\{F(\mathbf{x})\}$ .

D'autre part, en s'appuyant sur le fait que le domaine est borné, on vérifie que :  $\|F\|^2 = E\left\{\int_{\Omega} F(\mathbf{x})^2 d\mathbf{x}\right\} \leq |\Omega| < \infty$  et  $\int_{\Omega} \int_{\Omega} |R_F(\mathbf{x}, \mathbf{x}')|^2 d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \leq \sum_{j=1}^N |\Omega_j|^2 < \infty$ . Enfin, on notera que le champ aléatoire n'est ni continu presque sûrement, ni dérivable en moyenne d'ordre deux (cf. Soize (1993)).

### 2.3 Réduction du modèle probabiliste

Le nombre de parties  $N$  étant potentiellement très grand, on considère une réduction du modèle probabiliste par une représentation de Karhunen-Loève (Loève (1977)). Par suite, le champ s'écrit sous la forme :

$$F(\mathbf{x}) = \underline{F}(\mathbf{x}) + \sum_{\alpha=1}^M \sqrt{\lambda_{\alpha}} \eta_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{x}) \quad (7)$$

avec  $M \ll N$  et  $\underline{F}(\mathbf{x})$  est la moyenne du champ aléatoire.  $\{\lambda_{\alpha}\}_{\alpha=1}^M$  et  $\{\psi_{\alpha}\}_{\alpha=1}^M$  sont respectivement les valeurs et vecteurs propres de l'opérateur de covariance du champ (cf. Loève (1977)). Le vecteur aléatoire  $\eta$  a une distribution de probabilité arbitraire (avec  $E\{\eta_{\alpha}\} = 0$ ) et dépendante de la loi de probabilité du champ aléatoire  $F$  (voir Desceliers *et al.* (2006)). On introduit alors une fonction  $g$  telle que :  $g_{\alpha} : \mathbb{R} \rightarrow ]a_{\alpha}, b_{\alpha}[$ ,  $\eta_{\alpha} = g_{\alpha}(\zeta_{\alpha})$ .

Il vient :  $F(\mathbf{x}) = \underline{F}(\mathbf{x}) + \sum_{\alpha=1}^M \sqrt{\lambda_{\alpha}} g_{\alpha}(\zeta_{\alpha}) \psi_{\alpha}(\mathbf{x})$ . Le vecteur  $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_M)$  admet alors classiquement une décomposition sur les chaos polynômiaux (Soize *et al.* (2004), Wiener (1938)), écrite à l'ordre  $q$  sous la forme :

$$\zeta = \sum_{\gamma, |\gamma|=1}^q \mathbf{z}_{\gamma} \frac{H_{\gamma}(\mathbf{X})}{\sqrt{\gamma!}} \quad (8)$$

où  $\gamma$  est un multi-indice  $(\gamma_1, \dots, \gamma_m) \in \mathbb{N}^m$  (avec  $|\gamma| = \sum_{k=1}^m \gamma_k \leq q$  et  $\gamma! = \prod_{k=1}^m \gamma_k!$ ),  $\mathbf{X}$  est un vecteur Gaussien centré de dimension  $m$  ( $E\{X_i X_j\} = \delta_{ij}$ ),  $H_{\gamma}(\mathbf{X}) = \prod_{k=1}^m H_{\gamma_k}(X_k)$  (avec  $H_{\gamma_k}(x)$  polynôme d'Hermite d'ordre  $\gamma_k$ ) et  $\mathbf{z}_{\gamma}$  est un vecteur dans  $\mathbb{R}^M$ . Le maximum de vraisemblance est alors utilisé pour construire, à partir de  $\nu$  réalisations expérimentales (voir la section 3), une estimation des paramètres  $\mathbf{z}_{\gamma}$  (voir Desceliers *et al.* (2006)).

## 3 Procédure d'identification expérimentale

L'identification expérimentale requiert la considération de  $\nu$  réalisations du champ aléatoire mésoscopique. Les échantillons sont des plaques composites contenues dans le plan  $(x, y)$  d'un repère orthonormé  $(Oxyz)$  (voir la figure 2). Les dimensions selon  $x$ ,  $y$  et  $z$  sont respectivement  $h_x$ ,  $h_y$  et  $h_z$ , telles que  $h_z \ll h_x$  et  $h_z \ll h_y$ . Le champ aléatoire est donc considéré comme bidimensionnel, selon les directions  $x$  et  $y$ . La fraction volumique mésoscopique est identifiée à l'aide d'une technique non destructive ultrasonore : la vitesse de propagation des ondes longitudinales  $V_L$  dans le matériau étant explicitement liée aux propriétés élastiques effectives du domaine investigué (dans le cas isotrope, le module d'Young  $E$  et le coefficient de Poisson  $\tilde{\nu}$  du mésovolume), celle-ci dépend donc clairement du taux volumique de renfort. La procédure expérimentale proposée est ainsi la suivante :

- a. Fabrication (injection) d'un ensemble  $R_{\nu}$  de  $\nu$  réalisations, avec une consigne en fraction volumique  $f^{\text{consigne}}$  ;

- b.** Fabrication d'un ensemble  $R_\mu$  de  $\mu$  réalisations supplémentaires avec  $\mu$  consignes en fraction volumique différentes, afin d'étalonner la mesure ;
- c.** Mesure des  $\mu$  champs de vitesse  $V_L$  sur  $R_\mu$  (sur tout ou partie du domaine), puis mesure par calcination/pesage des fractions volumiques mésoscopiques sur  $R_\mu$  ;
- d.** Construction, à partir des mesures précédentes, de la relation : vitesse longitudinale/fraction volumique ;
- e.** Mesure, sur un sous-ensemble de  $R_\nu$ , des longueurs de corrélation du champ  $L_x$  et  $L_y$  ;
- f.** Définition de la partition expérimentale du domaine : on pose  $a = \max(L_x, L_y)$  ;
- g.** Mesure sur  $R_\nu$  des champs de vitesse, puis calcul des champs de fractions volumiques mésoscopiques correspondants.

Il importe de souligner que la procédure expérimentale qui vient d'être décrite est de fait consistante avec le modèle proposé (correspondance des partitions). Les premiers tests effectués montrent la linéarité de la relation vitesse longitudinale/fraction volumique.

#### 4 Solveur stochastique et modélisations micromécaniques associées

L'objectif de cette section est de proposer une stratégie de résolution du problème d'homogénéisation stochastique, i.e. de caractériser le tenseur d'élasticité macroscopique stochastique  $\tilde{\mathbb{C}} = \tilde{\mathbb{C}}(\theta)$  (l'argument  $\theta$  symbolise le caractère aléatoire de la quantité et  $\theta = \theta_k$  désigne donc une réalisation). Afin de simplifier le raisonnement, on suppose une élasticité isotrope, si bien que :  $\tilde{\mathbb{C}}(\theta) = 3\tilde{k}(\theta)\mathbb{J} + 2\tilde{\mu}(\theta)\mathbb{K}$ , où  $\tilde{k}(\theta)$  et  $\tilde{\mu}(\theta)$  sont respectivement le module de compressibilité et de cisaillement macroscopiques aléatoires du matériau ( $\mathbb{J} = \frac{1}{3}\mathbf{i} \otimes \mathbf{i}$ ,  $\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$ ,  $\mathbf{i}$  et  $\mathbb{I}$  sont les tenseurs identité d'ordre 2 et 4 respectivement). La décomposition de  $\tilde{k}(\theta)$  sur les chaos polynômiaux s'écrit (le même raisonnement est conduit pour le module de cisaillement) :

$$\tilde{k}(\theta) = \sum_{\chi, |\chi|=1}^p k_\chi^c \frac{H_\chi(\mathbf{X})}{\sqrt{\chi!}} \quad (9)$$

Les coefficients  $\{k_\chi^c\}_\chi$  sont évalués en usant de l'orthogonalité des polynômes d'Hermite, soit :

$$k_\chi^c = \frac{1}{\sqrt{\chi!}} E \left\{ \tilde{k}(\theta) H_\chi(\mathbf{X}) \right\} \quad (10)$$

Le calcul de l'espérance  $E \left\{ \tilde{k}(\theta) H_\chi(\mathbf{X}) \right\}$  correspond à une intégration multi-dimensionnelle :

$$E \left\{ \tilde{k}(\theta) H_\chi(\mathbf{X}) \right\} = \int_{\mathbb{R}^m} \tilde{k}(\theta) H_\chi(\mathbf{x}) \phi_m(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (11)$$

où  $\phi_m$  est la densité normale canonique de dimension  $m$ . L'équation (11) est résolue à l'aide de simulations numériques de Monte-Carlo (Rubinstein (1981)), qui requièrent en particulier le calcul des modules macroscopiques pour chaque réalisation. A chaque tirage, l'équation (7) fournit la réalisation du champ aléatoire  $F(\mathbf{x}, \theta_k)$ . Deux homogénéisations successives sont alors conduites et fournissent finalement la réalisation  $\tilde{\mathbb{C}}(\theta_k)$  (et donc,  $\tilde{k}(\theta_k)$  et  $\tilde{\mu}(\theta_k)$ ). Elles se résument comme suit :

- de l'échelle microscopique à l'échelle mésoscopique : pour chaque mésovolume  $\Omega_j$  ( $1 \leq j \leq N$ ), la fraction volumique  $F^{(j)}(\theta_k) = F(\mathbf{x}, \theta_k)$ ,  $x \in \Omega_j$  est déterminée par l'équation

(7) et le schéma classique de Mori-Tanaka est employé (Bornert *et al.* (2006)). On détermine donc chaque réalisation des  $N$  tenseurs effectifs mésoscopiques  $\left\{ \tilde{\mathbb{C}}^{(r)}(\theta_k) \right\}_{r=1}^N$ .

- de l'échelle mésoscopique à l'échelle macroscopique : les tenseurs d'élasticité des mésovolumes calculés, la morphologie de la réalisation du matériau composite à mésostructure aléatoire est assimilée à une morphologie polycristalline ( $N$  phases de fraction volumique  $1/N$ ), si bien que le passage de l'échelle mésoscopique à l'échelle macroscopique est effectué à l'aide du schéma autocohérent. L'équation d'autocohérence, résolue numériquement, s'écrit :

$$\tilde{\mathbb{C}}(\theta_k) = \tilde{\mathbb{C}}(\theta_k) + \frac{1}{N} \sum_{r=1}^N \left[ \left( \tilde{\mathbb{C}}^{(r)}(\theta_k) - \tilde{\mathbb{C}}(\theta_k) \right)^{-1} + \mathbb{P}_i^{(r)}(\theta_k) \right]^{-1} \left( \frac{1}{N} \sum_{s=0}^N \mathbb{A}_i^{(s)}(\theta_k) \right)^{-1} \quad (12)$$

où  $\mathbb{A}_i^{(s)}(\theta_k) = \left[ \mathbb{I} + \mathbb{P}_i^{(s)}(\theta_k) \left( \tilde{\mathbb{C}}^{(s)}(\theta_k) - \tilde{\mathbb{C}}(\theta_k) \right) \right]^{-1}$  et le tenseur de Hill  $\mathbb{P}(\theta_k)$  est évalué avec le tenseur homogénéisé macroscopique  $\tilde{\mathbb{C}}(\theta_k)$  (cf Bornert *et al.* (2006)).

## 5 Conclusion

Cette communication présente une nouvelle méthodologie, basée sur une modélisation probabiliste et micromécanique, permettant la caractérisation du tenseur d'élasticité macroscopique aléatoire en présence d'incertitudes microstructurales constatées à l'échelle mésoscopique sur le matériau. La méthodologie de construction du modèle probabiliste, la procédure d'identification expérimentale ainsi que la stratégie de résolution du problème mécanique en contexte stochastique sont détaillées dans le cas d'un matériau composite biphase.

## Références

- Bornert, M., Bretheau, T., Gilormini, P. (Eds.), "Homogenization in Mechanics of Materials", Iste Publishing Company, 2006.
- Coulon, A., "Thermoplastiques renforcés de fibres longues: relations mise en oeuvre/comportement à long terme", Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologies de Lille, A paraître.
- Desceliers, C., Ghanem, R., Soize, C. "Maximum likelihood estimation of stochastic chaos representations from experimental data", Int. J. Numer. Meth. Engng, 66, p.978-1001, 2006.
- Loève, M., "Probability Theory, 4th Ed.", Springer Verlag, New-York, 1977.
- Rubinstein, R.Y., "Simulation and the Monte Carlo Method", John Wiley and Sons, New-York, 1981.
- Soize, C., "Méthodes mathématiques en analyse du signal", MASSON, Paris, 1993.
- Soize, C., Ghanem, R., "Physical systems with random uncertainties: Chaos representations with arbitrary probability measure", SIAM Journal on Scientific Computing, 26 (2), p.395-410, 2004.
- Gărăjeu, M., Suquet, P., "On the influence of local fluctuations in volume fraction of constituents on the effective properties of nonlinear composites. Application to porous materials", Journal of the Mechanics and Physics of Materials, doi : 10.1016/j.jmps.2006.09.005, 2006.
- Wiener, N., "The homogeneous chaos", American Journal of Mathematics, 60, p.897-936, 1938.