

# Calcul et design de microstructures : Une question de longueur interne ?

**Contact :**

Samuel Forest  
Centre des matériaux - UMR 7633  
Ecole des Mines de Paris  
BP 87 - 91003 Evry cedex  
Tél. : 01.60.76.30.51  
Fax : 01.60.76.31.50  
Mél : samuel.forest@ensmp.fr

*Les avancées prodigieuses du calcul de structures dans les 15 dernières années ouvrent de nouveaux horizons à la mécanique des matériaux. Le maillage 3D, le calcul parallèle, les algorithmes pour les lois de comportement non linéaires permettent aujourd'hui d'aborder le calcul de microstructures complexes présentes dans la plupart des matériaux industriels : alliages métalliques, composites et multi-matériaux. A partir d'images tridimensionnelles de la microstructure, des propriétés et de la taille des constituants, les propriétés physiques et mécaniques (conductivité thermique ou électrique, modules d'élasticité et comportement élastoplastique...), pourront être prévues.*

Le calcul de microstructures repose sur trois étapes principales : l'imagerie 3D de la microstructure, l'identification de la loi de comportement des constituants et le calcul numérique des propriétés résultantes [1]. De telles représentations réalistes sont aujourd'hui disponibles grâce aux méthodes des sciences des matériaux, comme la tomographie aux rayons X. Le choix d'un volume élémentaire représentatif de la microstructure est un point clé de la démarche. On peut alors définir un problème aux limites sur ce domaine, c'est-à-dire lui imposer un gradient de température ou de potentiel électrique, une déformation moyenne, etc., et calculer le flux de chaleur, de courant ou la contrainte moyenne qui en résultent. La méthode des éléments

finis est d'une grande souplesse pour traiter des géométries et des conditions aux limites très variées. La figure 1 montre par exemple que l'on peut passer d'une image tomographique 3D de mousse de nickel à un maillage par éléments finis de type poutres. L'arrangement particulier des 5% de matière solide contenue dans ce matériau cellulaire, utilisé dans les batteries de téléphones portables, détermine sa réponse élastoplastique en traction.

La distribution des phases au sein d'un matériau hétérogène joue un rôle déterminant sur les propriétés effectives. Cet effet est d'autant plus marqué que le contraste de propriétés entre les constituants est fort, comme c'est le cas dans les matériaux

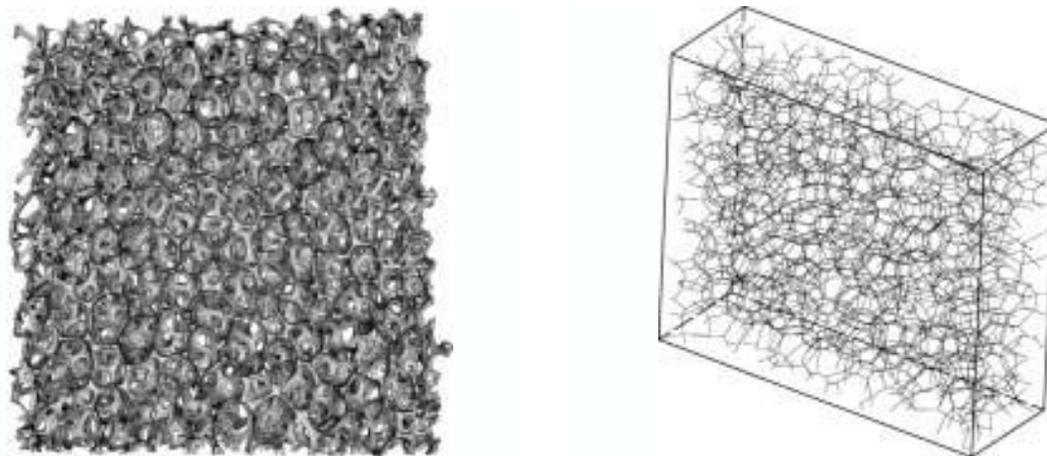


Figure 1. Reconstruction 3D d'une mousse de nickel observée par tomographie aux rayons X et le réseau de poutres associé en vue du calcul par éléments finis. La taille des cellules est de 500  $\mu\text{m}$ .

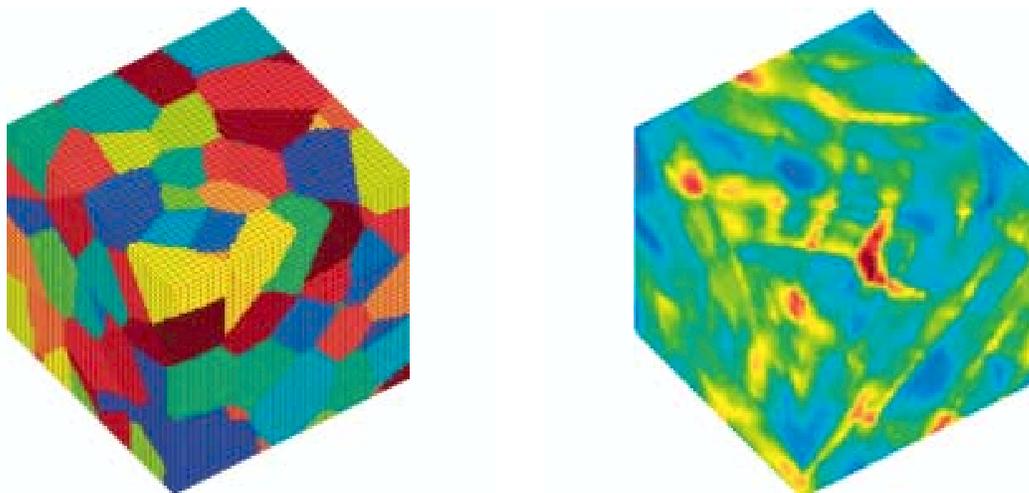


Figure 2. Calcul d'un agrégat polycristallin en élastoplasticité : maillage par éléments finis et carte de déformation plastique équivalente pour une traction moyenne imposée de 3 %. La couleur rouge correspond à des déformations locales de plus de 7 %.

cellulaires. La propriété attendue se situe en fait entre des bornes possibles, d'autant plus écartées que le contraste est grand. Cet espace laisse tout un domaine à explorer pour inventer et optimiser des microstructures en fonction des propriétés souhaitées : quelle est la morphologie cellulaire la mieux adaptée pour une application donnée ? L'arrangement doit-il être plutôt périodique ou aléatoire ? La méthode doit aboutir dans le futur à un véritable *design* de microstructures.

Le maillon faible de cette chaîne est indéniablement la loi de comportement des constituants individuels du matériau hétérogène. Cette difficulté se pose dans le cas des propriétés non linéaires des matériaux, par exemple la réponse élastoplastique locale des polycristaux métalliques. On se limite ici au cadre de la mécanique des milieux continus. Cette règle du jeu fixe les dimensions minimales des éléments de microstructure à traiter – le micromètre, voire la centaine de nanomètres. Les lois de comportement relient par exemple contraintes et déformations par l'intermédiaire de variables internes (variables d'écrouissage notamment). Or, ce comportement intrinsèque dépend en fait de la dimension du constituant au sein du matériau hétérogène, comme l'ont montré de nombreux essais de micro et nanoindentation. Par conséquent, il ne suffit pas de connaître la réponse du monocristal massif pour prévoir celle du polycristal. Il faut connaître aussi les lois d'échelles, c'est-à-dire des relations entre taille de grain et réponse locale du monocristal. La figure 2 illustre la modélisation d'un volume élémentaire représentatif de polycristal constitué de grains dont la couleur représente l'orientation, et les résultats d'un calcul parallèle réalisé sur 12 processeurs. Dans le cadre de la théorie continue de la

plasticité cristalline, la cristallographie du glissement plastique est prise en compte. On constate la formidable hétérogénéité et l'organisation de structures de déformation qui se développent au sein de ce polycristal CFC lors d'un essai de traction.

Les lois de comportement sensibles aux effets d'échelles sont en plein développement aujourd'hui. Elles incitent à introduire dans la modélisation non seulement la déformation elle-même mais son gradient, qui a la dimension de l'inverse d'une longueur. L'identification de(s) longueur(s) interne(s) intervenant alors dans les lois de comportement est la difficulté majeure de la démarche. L'enjeu est considérable, en particulier dans la course actuelle aux aciers à grains ultra-fins ou aux matériaux en couches minces permettant d'atteindre des niveaux de contraintes inégalés.

La mise en œuvre de la démarche du calcul de microstructures est nécessairement un travail d'équipe, car les compétences en imagerie et caractérisation des matériaux, puis en calcul intensif des structures, doivent être réunies. L'exemple des mousses métalliques est le fruit de la coopération de plusieurs équipes des fédérations des régions Ile-de-France et Rhône-Alpes<sup>1</sup>. Celui du polycristal met à contribution trois laboratoires de l'Ecole des Mines de Paris et de l'ONERA<sup>2</sup>.

## Référence

[1] S. Forest, G. Cailletaud, D. Jeulin, F. Feyel, I. Galliet, V. Mounoury et S. Quilici, « Introduction au calcul de microstructures », *Mécanique & Industries*, 3, 2002 (439-56).

1. Respectivement la Fédération Francilienne en Mécanique des Matériaux, Structures et Procédés (FR2609) et la Fédération Matériaux de Structure et Propriétés d'Usage (FR 2145).  
2. A savoir, le Centre des Matériaux (UMR 7633 – CNRS/École des Mines de Paris) à Evry, le Centre de Morphologie Mathématique (École des Mines de Paris) à Fontainebleau et le Département Mécanique du Solide et de l'Endommagement (ONERA DMSE/LCME) à Châtillon.