

# Introduction au calcul de microstructures

## Elements of microstructural mechanics

S. Forest<sup>a,\*</sup>, G. Cailletaud<sup>a</sup>, D. Jeulin<sup>b</sup>, F. Feyel<sup>a,c</sup>, I. Galliet<sup>a</sup>, V. Mounoury<sup>a</sup>, S. Quilici<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Centre des matériaux, École des mines de Paris/CNRS, UMR 7633, BP 87, 91003 Evry, France

<sup>b</sup> Centre de morphologie mathématique, École des mines de Paris, 35 rue Saint-Honoré, 77305 Fontainebleau, France

<sup>c</sup> ONERA DMSE/LCME, 22 avenue de la division Leclerc, BP 72, 92322 Châtillon cedex, France

### Résumé

S'appuyant sur les méthodes de la mécanique des structures et sur les connaissances en sciences des matériaux, le calcul de microstructures est devenu un outil privilégié et accessible de la mécanique des matériaux hétérogènes. Il s'impose pour le calcul de composants industriels dont la taille est de l'ordre de grandeur de celle des hétérogénéités, ou qui présentent des singularités géométriques telles que des micro-perforations. Le calcul de volumes élémentaires représentatifs de matériaux hétérogènes permet de prévoir l'influence de la morphologie des phases et de leur répartition sur les propriétés effectives linéaires ou non, l'objectif in fine étant l'optimisation de microstructures. La méthode donne accès aux valeurs locales des contraintes et déformations qui permettent ensuite de prévoir l'apparition et la propagation de l'endommagement. On insiste sur les moyens actuellement disponibles pour obtenir des représentations réalistes tridimensionnelles des microstructures et sur les moyens de calcul à mettre en œuvre. La difficulté du choix et de l'identification des lois de comportement des constituants demeure le facteur limitant. Les exemples présentés concernent les alliages polycristallins, les revêtements multicristallins, les mousses métalliques et des biphasés à fort contraste de propriétés.

© 2002 Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS. All rights reserved.

### Abstract

Microstructural mechanics combines the computational methods of structural mechanics and materials sciences. It is dedicated to the mechanics of heterogeneous materials. On the one hand, it can be used to compute industrial components for which the size of the heterogeneities is of the order of magnitude of the size of the structure itself or of holes or notches. On the other hand, the computation of Representative Volume Elements of heterogeneous materials enables one to predict the influence of phase morphology and distribution on the linear or nonlinear effective properties, having in view microstructure optimization. Such computations provide the local stress–strain fields that can be used to predict damage or crack initiation. This work focuses on the modern tools available for reconstructing realistic three-dimensional microstructures and for computing them, including parallel computing. The choice of the local nonlinear constitutive equations and the difficulty of identification of the corresponding parameters remain the weak link in the methodology. The main example detailed in this work deals with polycrystalline plasticity and illustrates the tremendous heterogeneity of local stress and strain, and the effect of grain boundary or free surfaces. Other examples are given regarding two-phase materials, metal foams and metal coatings.

© 2002 Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS. All rights reserved.

*Mots-clés* : Calcul de structures ; Microstructure ; Mécanique ; Matériaux ; Calcul parallèle ; Éléments finis ; Lois de comportement ; Mousse métallique ; Polycristal

*Keywords* : Structural mechanics; Microstructure; Mechanics; Materials; Parallel computing; Finite element; Constitutive equations; Metal foams; Polycrystal

## 1. Objectifs

La mécanique des matériaux hétérogènes s'est longtemps limitée à l'établissement de modèles simplifiés de comporte-

ment incluant quelques aspects de leur microstructure et estimant leurs propriétés effectives. Les progrès considérables des moyens de calcul dans les vingt dernières années ont favorisé le développement de simulations numériques basées sur une prise en compte plus explicite de la microstructure des matériaux. Le calcul de microstructures dans le cadre la mécanique des milieux continus est désormais une discipline

\* Correspondance et tirés à part.

Adresse e-mail : samuel.forest@mat.ensmp.fr (S. Forest).

scientifique à part entière. Le nom *calcul de microstructures* fait référence à la discipline *calcul des structures* sur laquelle elle s'appuie et qu'elle prolonge. Le calcul de microstructures combine les méthodes numériques du calcul des structures et les connaissances en sciences des matériaux, et a pour objectifs :

- *la compréhension des mécanismes locaux de déformation* à l'œuvre au sein des matériaux hétérogènes, au niveau des hétérogénéités individuelles : incompatibilités de déformation entre grains voisins d'un polycristal, concentrations de contraintes dans un matériau composite... C'est l'objectif assigné à la *micromécanique* proprement dite ;
- *le calcul de composants industriels* dont la taille est du même ordre de grandeur que celle des hétérogénéités présentes. On rencontre cette situation par exemple dans les systèmes de la micro-électronique ou des pièces mécaniques aux dimensions très réduites (films, couches minces...), pour lesquels la taille de grain et la taille de la structure sont comparables. Ce besoin peut aussi se faire sentir dans des parties critiques de pièces plus massives, telles que des entailles ou micro-perforations [13]...
- *la prévision des propriétés effectives des matériaux hétérogènes*. Des méthodes d'homogénéisation ont été développées pour borner ou estimer les propriétés effectives des mélanges de différents constituants [57]. Ces estimations peuvent être comparées à des calculs directs de volumes élémentaires représentatifs (VER) du matériau. On est en droit d'utiliser le calcul de microstructures comme méthode d'homogénéisation numérique. Lorsque les propriétés des constituants sont très contrastées ou lorsque l'on est confronté à des chargements macroscopiques imposés complexes (multiaxial, changements de trajets de chargement, comportement cyclique...), le calcul direct de microstructures peut très bien s'avérer être la seule solution fiable au problème de l'estimation des propriétés effectives ;
- *la simulation des mécanismes locaux d'endommagement*. L'initiation de l'endommagement dans un matériau n'est pas pilotée par des valeurs moyennes de contraintes ou déformations par phase, que les techniques d'homogénéisation sont souvent en mesure d'estimer, mais bien plutôt par certaines valeurs maximales atteintes localement au sein de la microstructure hétérogène (près des joints de grain ou des interfaces...). Le calcul direct de microstructures fournit aussi ces informations locales et peut être couplé à des critères de rupture ou d'évolution de l'endommagement en vue de la prévision de l'amorçage et de la propagation de fissures ou de l'endommagement.

Le recours au cadre général de la mécanique des milieux continus impose une borne inférieure aux échelles d'hétérogénéités présentes dans le matériau qui peuvent être prises

en compte. Une taille minimale des phases de l'ordre du micromètre reste une limite raisonnable dans le cas général (élastoviscoplasticité, le cas de l'élasticité permettant des incursions plus profondes encore dans la matière à condition d'introduire explicitement les défauts). Le traitement de zones de matériau élastoplastique contenant un nombre limité de dislocations par exemple tombe dans le domaine de la dynamique des dislocations [39], délibérément exclue de la présente étude, ainsi que les modélisations similaires de milieux discrets ou particuliers traités par des schémas numériques explicites. La mécanique des milieux continus dits généralisés permet cependant de repousser un peu les limites de la modélisation continue classique à des échelles où des effets de taille des constituants sont observés. L'exemple des superalliages monocristallins à base de nickel comportant un réseau régulier de précipités  $\gamma'$  de taille  $0,5 \mu\text{m}$  dans une matrice  $\gamma$ , est traité dans le cadre de la mécanique des milieux de Cosserat dans [29]. On insiste sur la possibilité par ce biais de prévoir l'influence de la taille de précipités sur le comportement global à fraction volumique donnée. L'introduction de longueurs internes caractéristiques dans le calcul de microstructures est présentée dans la section 4.2.

Les matériaux hétérogènes présentent généralement une répartition aléatoire de phases selon une certaine distribution statistique de sorte qu'en général une seule simulation ne sera pas suffisante. Un nombre suffisant de réalisations de la microstructure sera nécessaire pour estimer la propriété cherchée ainsi que sa dispersion. En particulier, la question de la *taille du VER* pour une propriété physique ou géométrique donnée et une précision visée doit être au centre des préoccupations.

Le calcul de microstructures procède en trois étapes principales : représentation réaliste de la microstructure, choix des méthodes numériques de résolution du problème aux limites et d'évolution à résoudre, identification des lois de comportement des constituants. Ces étapes sont traitées respectivement aux paragraphes 2 à 4. Les matériaux concernés par cette approche sont très divers et vont des biphasés élastiques aux mousses métalliques, mais on insiste plus particulièrement ici sur la plasticité des matériaux cristallins. L'exemple traité de manière étendue en section 6 est celui du comportement mécanique des agrégats polycristallins. La dernière partie fait le lien entre le calcul de microstructures et l'identification de lois de comportement macroscopiques pour applications structurales.

## 2. Représentation de la microstructure

Les observations microscopiques (optiques ou électroniques à balayage) fournissent généralement des vues bidimensionnelles de la distribution des hétérogénéités au sein de la microstructure, qui peuvent parfois être suffisantes pour prédire son influence sur le comportement mécanique résultant. Dans le cas général toutefois, des informations tri-

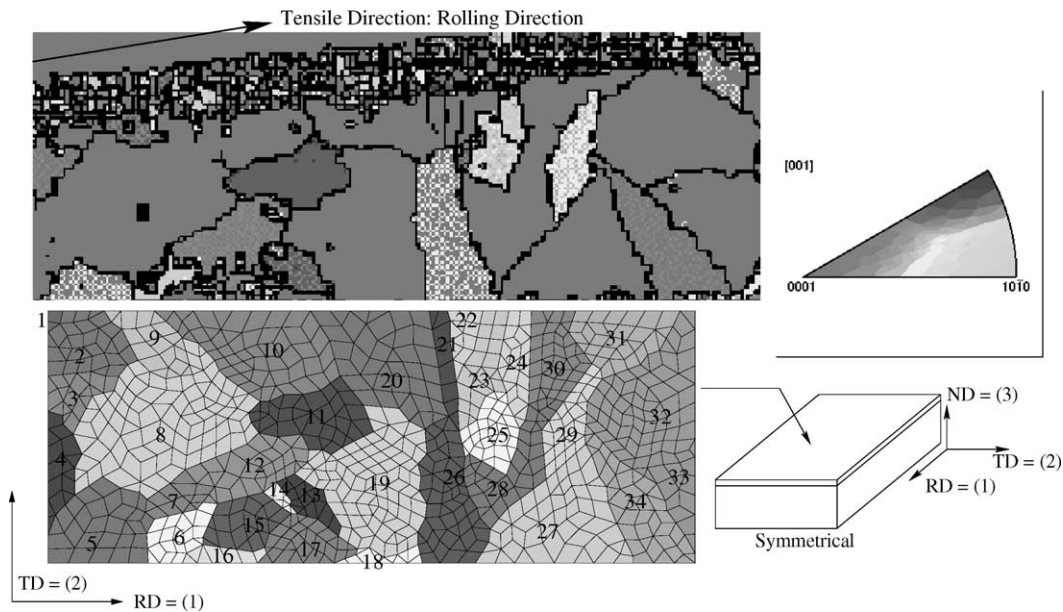


Fig. 1. Distribution de grains de zinc sur une tôle d'acier galvanisée : analyse EBSD (en haut) ; maillage par éléments finis et extension 3D (en bas) ; la taille de grain est d'environ  $200 \mu\text{m}$ .

Fig. 1. Grain distribution in a zinc coating on a galvanized steel sheet: EBSD analysis (top); finite element mesh of the grains and 3D extension (bottom); the grain size is about  $200 \mu\text{m}$  on the pictures.

dimensionnelles sont nécessaires pour obtenir une représentation réaliste de la microstructure.

### 2.1. Microstructures 2D ou quasi-2D

Le cas des films minces ou des revêtements contenant un seul grain dans l'épaisseur peut être traité de manière relativement simple puisqu'une caractérisation bidimensionnelle donne une représentation complète de la microstructure. La Fig. 1 montre une analyse EBSD (diffraction des électrons rétro-diffusés) d'un revêtement de zinc d'une tôle d'acier galvanisée au trempé [47]. L'épaisseur du revêtement est d'environ  $10 \mu\text{m}$  et la taille de grain de l'ordre de  $400 \mu\text{m}$ . L'analyse EBSD fournit une carte des orientations de tous les grains de la zone étudiée, dont on peut aussi déduire la géométrie de chaque grain. Cette information est utilisée ensuite pour réaliser un maillage par éléments finis du revêtement (Fig. 1) en vue de calculs de la réponse mécanique du revêtement. Un calcul bidimensionnel est toutefois insuffisant car les mécanismes de déformation activés dans chaque grain lors de la déformation de la tôle revêtue sont tridimensionnels : les systèmes de glissement basal et pyramidal ont été observés expérimentalement dans cet alliage de zinc dont la structure cristallographique est hexagonale compacte. Une vue idéalisée de tous les grains ayant leur axe sénaire perpendiculaire à la tôle, ce qui pourrait conduire à une analyse simplifiée bidimensionnelle, n'est pas réaliste ici. C'est pourquoi le maillage de la Fig. 1 est étendu dans la direction normale à la tôle, avec l'hypothèse mineure que tous les joints de grains sont perpendiculaires à l'interface substrat/revêtement [47].

Une situation similaire est rencontrée dans le cas de pièces ou d'éprouvettes multicristallines pour lesquelles la taille de grain est de l'ordre de grandeur de la taille de l'échantillon. Une éprouvette recristallisée de l'alliage Inconel 600 contenant huit grains centimétriques est présentée sur la Fig. 2 d'après [21,22]. A nouveau une analyse 2D du problème de la traction de l'échantillon conduirait à une prédiction erronée des champs de déformation, car les grains ne présentent pas d'orientations particulières de haute symétrie. Une représentation 3D simplifiée de la géométrie des grains peut se déduire de l'observation de toutes les faces de l'éprouvette comme le montre la Fig. 2. Les facettes des grains sont alors considérées comme planes.

### 2.2. Microstructures 3D réelles

Dans le cas général, le volume de matériau étudié contient un grand nombre d'hétérogénéités cachées au cœur du volume. L'observation de la morphologie des phases en présence et de leur distribution dans l'espace est une difficulté majeure qui souvent reste sans solution ou exige des efforts considérables. Le polissage successif d'un volume de polycristal est possible mais c'est une méthode destructive [55,56].

Cependant, des techniques spécifiques d'imagerie tridimensionnelle sont d'ores – et – déjà disponibles. Si les phases ont des densités très différentes, la *tomographie aux rayons X* peut être utilisée. C'est le cas par exemple des mousses métalliques, matériaux qui ont suscité un intérêt scientifique et industriel considérable dans les dix dernières années, pour des applications dans le domaine de l'absorption d'énergie [3,34,41]. Un échantillon de mousse d'alumi-

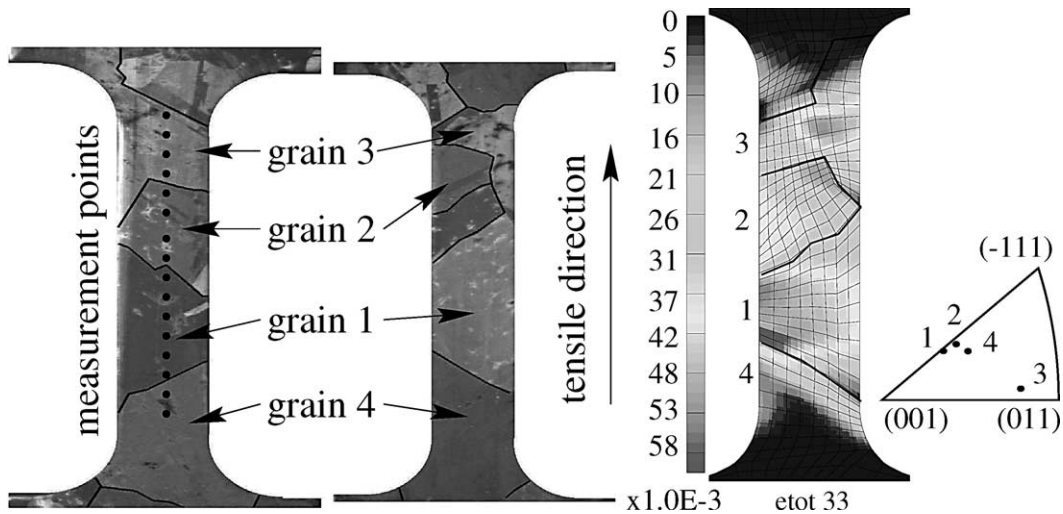


Fig. 2. Éprouvette de nickel multicristalline : vues de dessus et de dessous (à gauche), carte de déformation plastique équivalente issue d'un calcul par éléments finis et orientation des grains (à droite) ; la longueur utile de l'éprouvette mesure 15 mm.

Fig. 2. Multicrystalline nickel sample: both sides of the sample (left), finite element computation and orientation of the grains (right); the gauge length of the sample is about 15 mm.

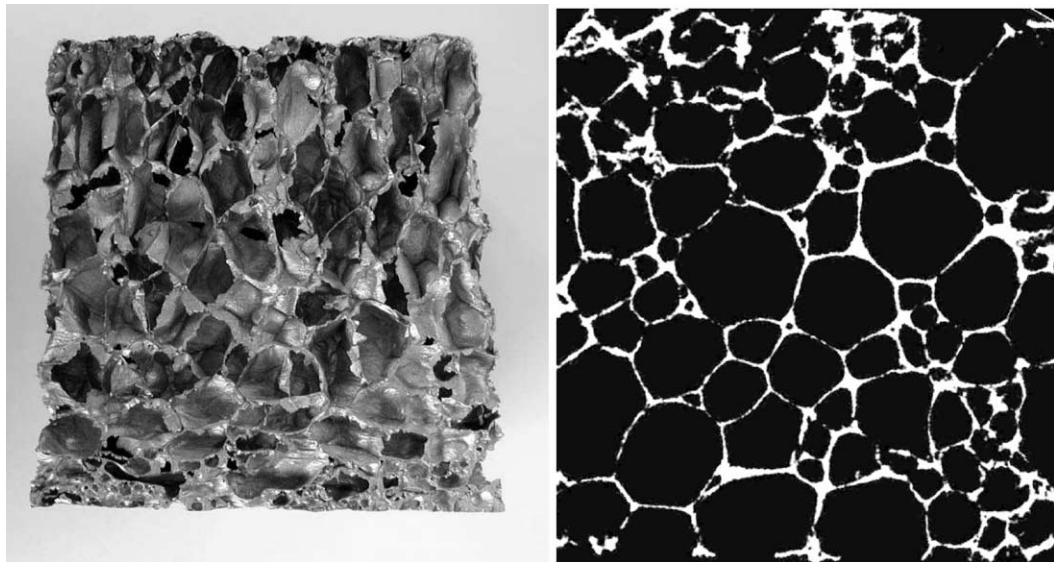


Fig. 3. Structure cellulaire des mousses d'aluminium : échantillon et section bidimensionnelle reconstruite d'après une tomographie aux rayons X ; l'arête de l'échantillon mesure 10 cm.

Fig. 3. Cellular morphology of aluminum foams: sample (left) and two-dimension slice (right) reconstructed from X-ray tomography; the edge of the sample is 10 cm long.

nium est présenté sur la Fig. 3 avec une section reconstruite d'après la tomographie 3D [35]. La forte hétérogénéité de répartition des tailles de cellules est clairement visible.

Quand l'une des phases peut être substituée par une résine transparente à la lumière, la *microscopie confocale* est un outil puissant pour obtenir des vues 3D de la microstructure, au moins sur une certaine profondeur. C'est le cas de plusieurs matériaux de l'industrie agro-alimentaire dont certaines phases molles peuvent être infiltrées de la sorte. Le matériau de la Fig. 6 est un biphasé à fort contraste de propriétés élastiques puisque la phase verte/rouge est plus de mille fois plus rigide que la phase

transparente [23]. La microscopie confocale permet de fournir le détail de la microstructure sur une profondeur de l'ordre de 50  $\mu\text{m}$ .

### 2.3. Modèles de microstructures aléatoires

Si des images tridimensionnelles de la microstructure ne sont pas disponibles, on peut essayer de les simuler en utilisant par exemple des modèles de structures aléatoires (voir les chapitres concernés dans [10,36]). Il faut alors vérifier que le modèle statistique retenu rend bien compte des informations obtenues sur des images 2D : fraction volumique

des phases, distributions des tailles, covariance, connexité. . . Au-delà des idéalizations périodiques, les modèles de structures aléatoires sont disponibles pour décrire par exemple la microstructure des matériaux cellulaires : réseaux de Voronoï, nids d'abeilles aléatoires, réseaux de poutres quasi-périodiques [3]. . . La Fig. 4(a) montre ainsi l'utilisation d'un réseau de poutres élastoplastiques pour simuler le comportement des mousses en traction, mais on pourrait aussi penser à utiliser les structures obtenues à l'aide de systèmes dynamiques comme celle de la Fig. 4(b).

L'exemple présenté dans ce travail est le cas de la morphologie polycristalline décrite en détail dans [4,17]. Il existe deux modèles simplifiés de distribution des grains d'un polycristal : le modèle périodique de Kelvin (arrangement périodique de tétrakaidécédres) et celui plus réaliste de la mosaïque de Voronoï. En effet ce dernier modèle reproduit une distribution de grains obtenue par croissance isotrope et à vitesse constante de germes disposés aléatoirement dans l'espace. Une réalisation d'une telle distribution est montrée sur la Fig. 5. Lorsque la mosaïque est simulée,

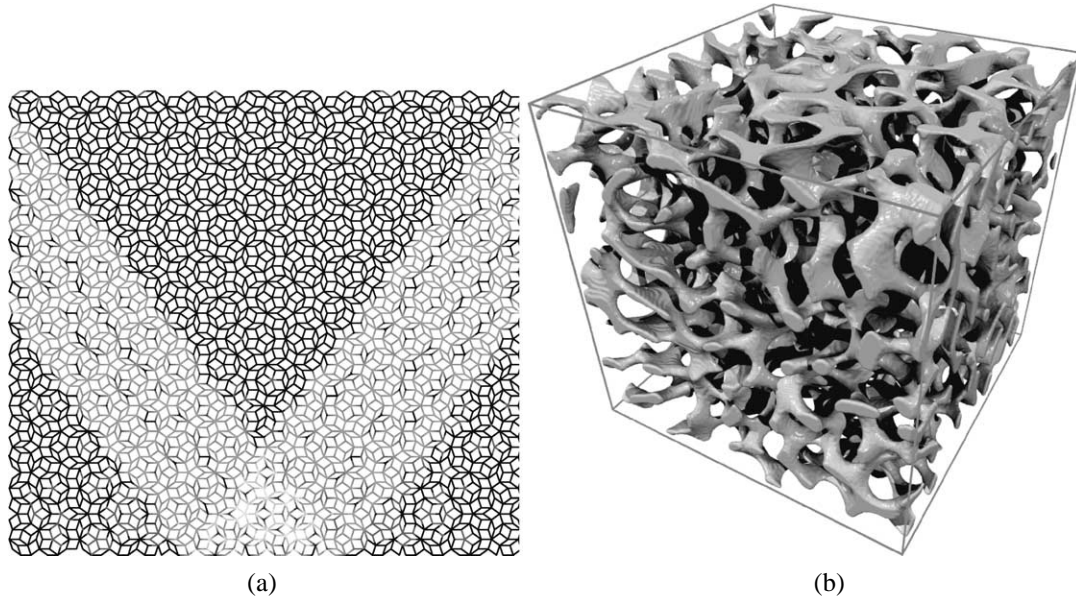


Fig. 4. Modèles de structures cellulaires : réseau de Penrose de poutres élastoplastiques (à gauche), microstructure poreuse obtenue à partir d'un système dynamique réaction–diffusion (à droite) [16,18].

Fig. 4. Models of cellular structures: Penrose network of elastoplastic beams (on the left), porous microstructure obtained using a reaction–diffusion dynamical system (right).

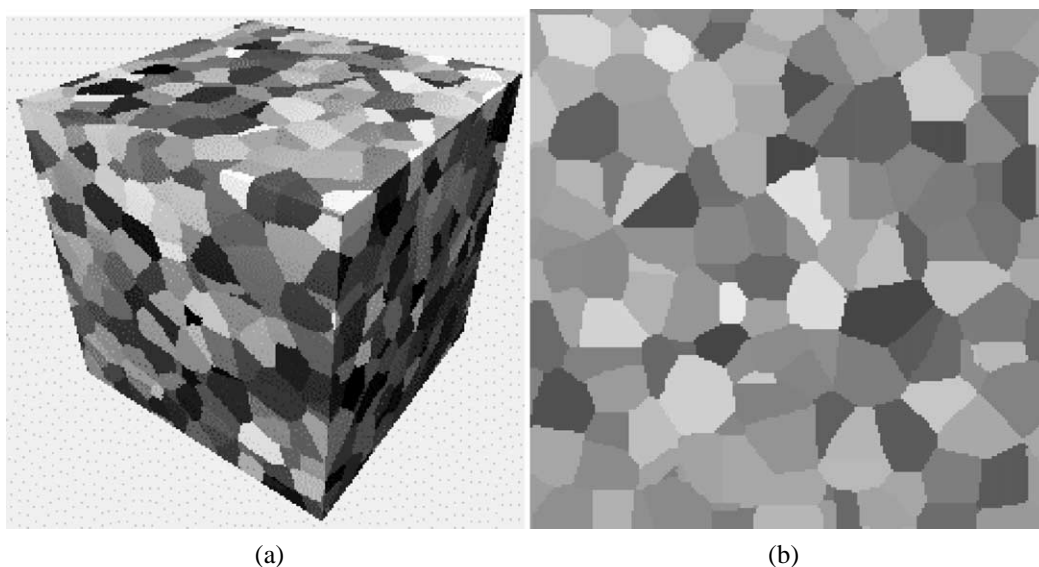


Fig. 5. Mosaïque de Voronoï : distribution 3D (à gauche) ; section d'un cube de polyèdre de Voronoï réalisée avec une contrainte de périodicité au bord (à droite).

Fig. 5. Simulation of Voronoi polyhedra: 3D distribution (left); section of cube made of Voronoi polyhedra with a periodicity constraint at the boundary (right).

une couleur est attribuée aléatoirement à chaque grain. La couleur correspond à une orientation cristallographique et la distribution de ces orientations doit être en accord avec la fonction de distribution des orientations obtenue expérimentalement par une analyse de texture. Dans [4,5], on a considéré simplement des distributions isotropes. Lors de la génération de l'agrégat, il est possible d'imposer une contrainte de périodicité de la géométrie des grains du bord, en vue d'appliquer des conditions aux limites périodiques lors du calcul de microstructure (voir Fig. 5(b)).

#### 2.4. Morphologie et comportement mécanique

L'effort consacré à une description détaillée et réaliste de la microstructure est d'autant plus justifié que la morphologie des phases en présence peut avoir une influence consi-

dérable sur le comportement mécanique global du matériau à fraction volumique de phase donnée. Cet effet est d'autant plus marqué que les propriétés sont fortement contrastées. L'exemple du matériau biphasé de la Fig. 6 est assez frappant pour être détaillé ici.

La Fig. 6 montre en fait deux morphologies très différentes obtenues par des méthodes d'élaboration distinctes : l'une est appelée distribution grossière et l'autre morphologie plus fine. Il faut noter que les deux distributions conduisent à la même fraction volumique des phases. La rigidité élastique de la phase verte/rouge est au moins mille fois supérieure à celle de la phase transparente. Les propriétés élastiques de chaque constituant et du mélange ont été déterminées par des essais de flexion 4 points [23]. Elles ont été mesurées aussi en fonction de la fraction volumique de phase dure et sont représentées sur la Fig. 7(a) : la micro-

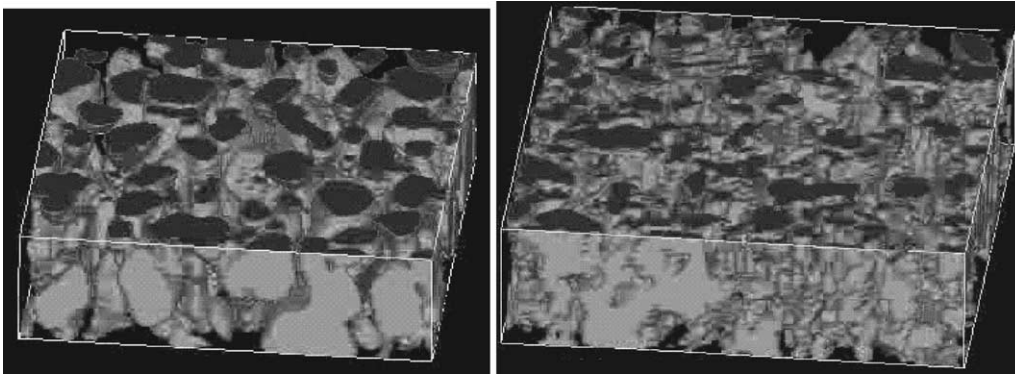


Fig. 6. Microstructures 3D d'un matériau biphasé de l'industrie agro-alimentaire obtenues par microscopie confocale ; la phase molle est transparente : distribution grossière (à gauche), morphologie plus fine (à droite) ; l'épaisseur de la couche est  $50 \mu\text{m}$  (d'après [23]).

Fig. 6. Three-dimensional microstructure of a two-phase material from food industry obtained by confocal microscopy; the soft phase is transparent: coarse distribution (left), fine distribution (right); the thickness of the layer is  $50 \mu\text{m}$  (after [23]).

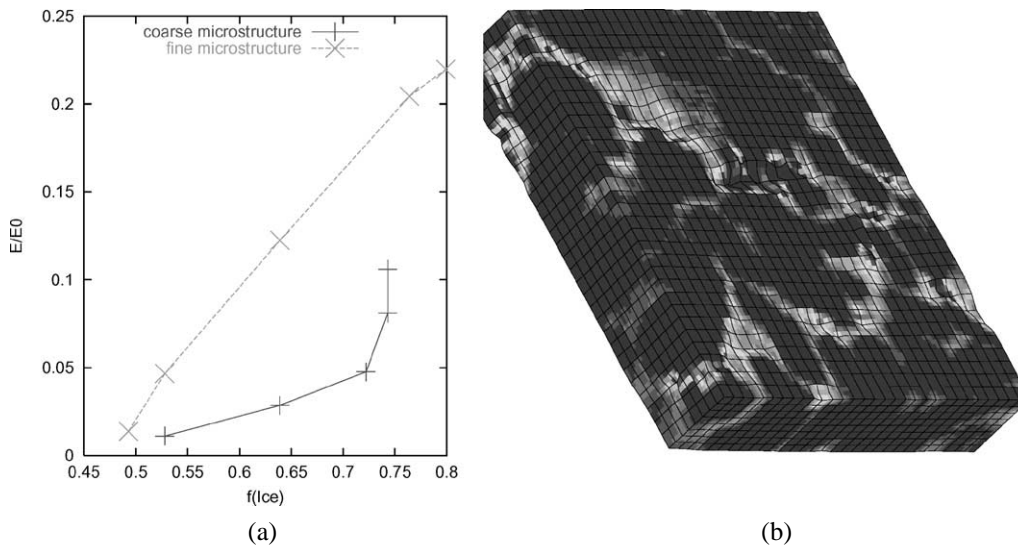


Fig. 7. Propriétés mécaniques d'un biphasé : module d'Young correspondant aux morphologies de la Fig. 6 en fonction de la fraction volumique de phase dure (à gauche) ; exemple de calcul par éléments finis de traction d'une tranche de matériau, la couleur noir/blanche désignant des contraintes faibles/élevées (à droite).

Fig. 7. Mechanical properties of a two-phase material: elastic properties corresponding to the morphologies of Fig. 6 as a function of hard phase volume fraction (left); example of FE computation of a two phase material slice in tension, the black/white colors denoting low/high stresses (right).

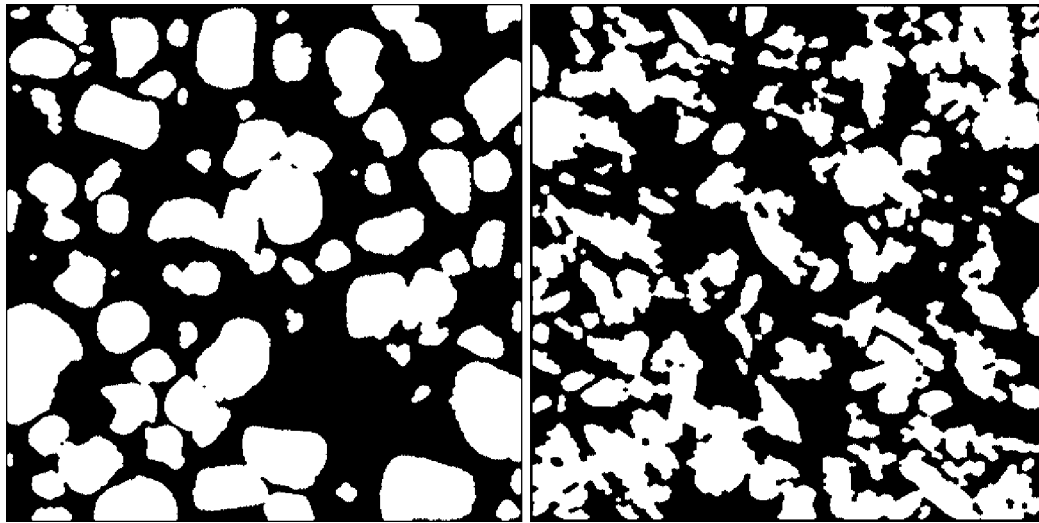


Fig. 8. Sections 2D des microstructures de la Fig. 6.

Fig. 8. Two-dimensional slices of both microstructures of Fig. 6.

structure fine s'avère être nettement plus rigide que la distribution grossière de phases (voir aussi les sections 2D de microstructure de la Fig. 8). Il apparaît que cet effet ne peut être décrit de manière convaincante par les bornes ou estimations standards issues de la théorie de l'homogénéisation. Il peut être attribué au degré de percolation de la phase dure différent dans les deux microstructures. Une simulation directe de la réponse élastique de ce composite utilisant les images réelles de microstructure permet par contre de distinguer les deux microstructures. La Fig. 7(b) montre une telle simulation par le biais de la méthode des éléments finis : les bandes de localisation de la déformation dans la phase molle apparaissent clairement.

### 3. Méthodes numériques

Deux groupes principaux de méthodes numériques sont utilisées aujourd'hui pour résoudre le problème aux limites et d'évolution posé sur l'élément de microstructure. Les équations aux dérivées partielles à résoudre sont les équations d'équilibre dans le cas statique abordé dans ce travail. On évoque les lois de comportement dans la section suivante. Dans le cas de calcul de VER, on applique des conditions homogènes au contour (en déplacements ou en forces), des conditions de périodicité ou des conditions mixtes, classiques en homogénéisation [9]. La méthode des éléments finis est robuste, s'applique à toutes sortes de géométries (structures ou VERs), et s'est avérée fiable même dans le cas de problèmes fortement non linéaires. Dans le cas du calcul de VER avec des conditions de périodicité, les méthodes basées sur les séries ou les transformations de Fourier ont été utilisées avec succès pour simuler des changements de phase displacifs ou diffusifs [38,60] et, plus récemment, des problèmes élastoplastiques [45]. Seule la simulation par éléments finis est abordée dans la suite.

#### 3.1. Maillage de microstructures

Le choix de la méthode des éléments finis pour résoudre le problème de microstructure nécessite avant tout la construction d'un maillage discrétisant la géométrie de manière réaliste. Une méthode de construction directe et systématique, parfois appelée *méthode des éléments multiphasés*, consiste à superposer un maillage 3D régulier sur l'image de la microstructure. La propriété mécanique associée à la couleur du voxel sous-jacent est attribuée à chaque point d'intégration de chaque élément (Fig. 9(a)). L'inconvénient de cette technique est la description pauvre des interfaces : les sauts de certaines quantités autorisés au travers de l'interface ne sont pas rendus correctement si l'interface traverse l'élément. Un maillage respectant les interfaces est possible en particulier dans le cas des polyèdres de Voronoï (Fig. 9(b)) en utilisant les méthodes de triangulation de Delaunay qui sont standards en 2D, et en 3D aussi si l'on utilise des tétraèdres [32,59].

Une comparaison entre les deux types de maillages de la Fig. 9 a été effectuée dans le cas des propriétés élastiques fortement contrastées du matériau biphasé de la section 2.4. Elle révèle d'une part que les valeurs moyennes des grandeurs mécaniques sont identiques dans les deux cas et, d'autre part, que la réponse locale près des interfaces peut différer notablement à moins qu'un raffinement de maillage suffisant soit utilisé dans les deux cas. C'est pourquoi la méthode des éléments multiphasés est utilisée à maintes reprises dans ce travail. Il est aussi possible d'utiliser les cellules de Voronoï pour mailler des distributions plus complexes de phases [33].

#### 3.2. Calcul parallèle

Les modèles éléments finis ainsi obtenus sont en général très complexes : ils sont souvent tridimensionnels et fi-

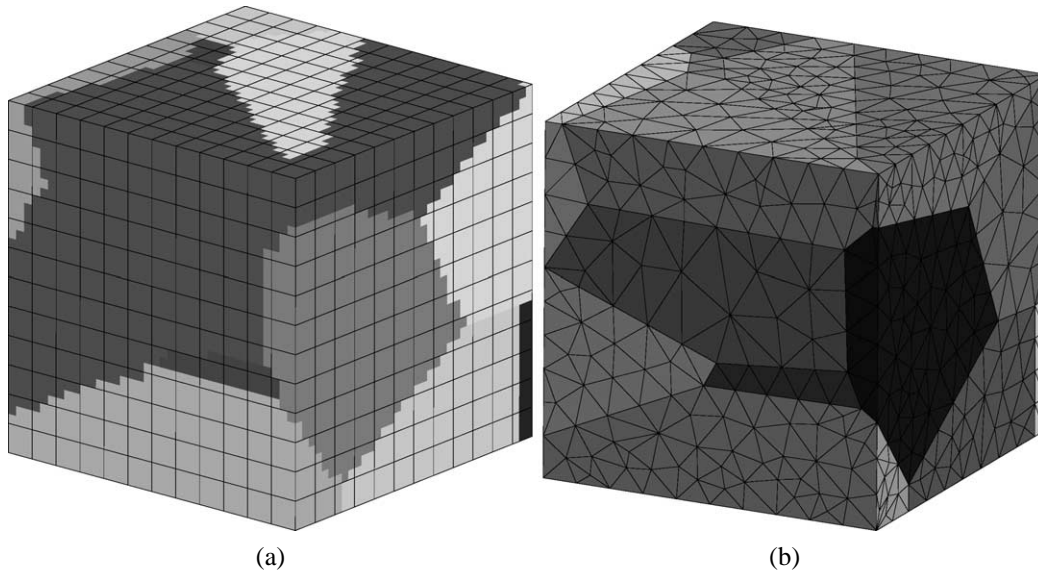


Fig. 9. Maillage d'un agrégat de 10 polyèdres de Voronoï par la technique des éléments multiphasés (à gauche) et par des triangulations de Delaunay (à droite).

Fig. 9. Meshing 10 Voronoi polyhedra: multiphase element technique (left); 3D free meshing with tetrahedra (right).

nement maillés de manière à respecter au mieux les frontières inter-phases dont on a vu qu'elles conditionnent une partie de la réponse mécanique du VER. La résolution des systèmes linéaires creux associés devient alors très coûteuse et requiert un espace de stockage très important.

Par ailleurs (voir section suivante), les lois de comportement associées sont non-linéaires (visoplasticité, grandes déformations. . .). Il faut alors, en chaque point d'intégration de la structure, résoudre un système différentiel d'évolution, ce qui est coûteux en temps calcul et suppose le stockage des variables internes associées.

Ces deux considérations, portant sur l'étape *globale* (résolution du système linéaire tangent) et *locale* (calcul des lois de comportement) imposent le recours à de nouvelles méthodes de résolution.

Le calcul parallèle est ainsi apparu il y a une quinzaine d'années en calcul de structure. Il s'agissait alors, après un examen de complexité algorithmique, de distribuer les boucles de calcul les plus coûteuses sur différents processeurs de machines dédiées, et cela – si possible – de manière automatique.

Parallèlement à la technologie qui a évolué (notamment avec l'apparition des « grappes » de machines) sont apparues des méthodes dites de *décomposition de domaines*, qui tentent de prendre en compte les spécificités du problème à résoudre. Alors que les méthodes automatiques fonctionnaient, avec des résultats limités, sur tout problème, les méthodes de décomposition de domaines s'attachent à prendre en compte les aspects mécaniques propres aux problèmes de calcul de structures.

Le code de calcul utilisé pour les divers exemples présentés dans cet article implante la méthode de décomposition de domaines FETI [25,26]. Elle repose sur une partition non-recouvrante de la structure en sous-domaines. Chaque sous-domaine est alors confié à un processeur ou une machine

particulier. Dans ce cadre, la parallélisation de l'étape *locale* (calcul des lois de comportement) est immédiate dès que celles-ci reposent sur l'hypothèse de l'état local (le comportement mécanique du VER associé à un point d'intégration ne dépend que de l'histoire mécanique *locale* en ce même point). Nous n'abordons pas ici les problèmes de répartition de charge de calcul pour les modèles non-linéaires qui peuvent venir nuancer ce propos.

Par contre, l'étape *globale* requiert un traitement particulier : le propre de cette étape est de coupler la réponse de l'ensemble de la structure. Sa résolution indépendante sur chaque sous-domaine conduit à des discontinuités de solution aux interfaces. La méthode FETI est ainsi une méthode itérative duale qui cherche la répartition de forces à imposer aux interfaces de sorte que la solution en déplacement obtenue soit continue. On ne peut détailler ici cette méthode. On retiendra juste qu'elle enchaîne de manière automatique différentes étapes :

- décomposition en sous-domaines,
- schéma itératif de résolution du problème global,
- assemblage des résultats (chaque sous-domaine ne voit que les grandeurs associées à la région concernée).

#### 4. Lois de comportement des constituants

Les équations de comportement décrivant la réponse locale de chaque constituant d'un matériau hétérogène représentent à coup sûr le maillon faible de la chaîne du calcul de microstructures. En effet, ce comportement local est en général mal connu et peut différer notablement du comportement observé sur la phase isolée massive. C'est particulièrement vrai des propriétés non linéaires telles que la viscoplasticité. Un jeu de lois de comportement pour des



matériaux cristallins est présenté ici comme l'archétype de loi locale présentant une forte anisotropie.

#### 4.1. Plasticité cristalline

Le cadre théorique de la plasticité cristalline est aujourd'hui bien établi et rend compte du mécanisme de glissement cristallographique au niveau du grain d'une manière continue [1,15,42]. Il introduit une décomposition multiplicative du gradient de la transformation  $\tilde{F}$  en une partie élastique et une partie plastique :

$$\tilde{F} = \tilde{1} + \underline{u}_{i,j} \underline{e}_i \otimes \underline{e}_j = \tilde{E} \tilde{P} \quad (1)$$

où  $\underline{u}$  est le vecteur déplacement. Le choix de la partie rotation de la déformation élastique  $\tilde{E}$  est fixé par la définition d'une configuration intermédiaire dite isocline pour laquelle l'orientation de l'élément de cristal coïncide avec l'orientation initiale. L'écoulement plastique est le résultat du glissement de la matière selon  $N$  systèmes caractérisés par un plan de glissement de normale  $\underline{n}$  et une direction de glissement  $\underline{m}$  :

$$\dot{\tilde{P}} \tilde{P}^{-1} = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s \underline{m}^s \otimes \underline{n}^s \quad (2)$$

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{K} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad \text{avec} \quad (3)$$

$$\tau^s = \underline{m}^s \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{n}^s$$

Une loi d'écoulement viscoplastique (3) liant la contrainte résolue  $\tau^s$  sur le système  $s$  à l'incrément de glissement plastique  $\dot{\gamma}^s$  a été adoptée. Deux variables d'écrouissage apparaissent dans (3) : le seuil  $r^s$  appelé écrouissage isotrope et la contrainte interne  $x^s$  associée à l'écrouissage cinématique. L'écrouissage cinématique au niveau du grain décrit d'une manière phénoménologique la formation possible de structures de dislocations, en particulier sous chargement cyclique. Les lois d'évolution retenues sont les suivantes :

$$r^s = r_0 + Q \sum_{r=1}^N h^{sr} (1 - e^{-bv^r}), \quad \dot{v}^s = |\dot{\gamma}^s| \quad (4)$$

$$x^s = c\alpha^s, \quad \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\dot{v}^s\alpha^s - \left( \frac{|x^s|}{M} \right)^m \text{sign}\alpha^s \quad (5)$$

Le seuil initial est  $r_0$ . La matrice d'interaction  $h^{rs}$  rend compte de l'auto-écrouissage et de l'écrouissage latent. L'équation d'évolution de l'écrouissage cinématique contient deux termes de restauration dynamique et statique respectivement. D'autres choix de variables d'écrouissage sont possibles notamment des variables de densité de dislocation utilisées couramment en métallurgie physique [15,24]. Les plus simples d'entre elles conduisent à des réponses tout à fait analogue aux résultats obtenues avec les lois (3) à (5).

Les paramètres matériau intervenant dans les lois de comportement ont été identifiés par exemple dans le cas de

monocristaux de cuivre et de superalliage à base de nickel en traction, en traction-compression cyclique et en fluage [43,44]. Même si la forme de ces lois de comportement reste dans une certaine mesure pertinente pour décrire le comportement au sein du grain du polycristal, les valeurs des paramètres diffèrent généralement du monocristal massif au polycristal. Celles utilisées pour le monocristal proviennent en général d'une identification par approche inverse à partir de la réponse expérimentale macroscopique du polycristal et de la réponse d'un modèle de polycristal homogénéisé. Le biais introduit par le choix d'un schéma spécifique d'homogénéisation empêche de trancher sur la pertinence des paramètres obtenus. En particulier, des valeurs de paramètres très différentes sont obtenues selon qu'on utilise un modèle de Taylor du polycristal ou un schéma dit autocohérent [53]. L'utilisation de ces paramètres pour le calcul d'agrégats polycristallins tels que ceux présentés en section 6 n'est donc pas sans ambiguïté. Une première tentative d'approche inverse utilisant directement les agrégats polycristallins est rapportée dans la référence [6].

#### 4.2. Introduction d'une échelle de longueur

Un but de la mécanique des matériaux hétérogènes doit être, dans le cas des polycristaux métalliques, de prévoir le comportement du polycristal à partir de la seule connaissance du comportement du monocristal, de la texture cristallographique du polycristal et de la forme des grains. Cette ambition reste encore inaccessible si l'on s'en tient au cadre classique qui n'est pas sensible à l'effet de taille de grain, alors que ces effets sont bien connus en métallurgie physique [40]. Il faut en effet remarquer que, dans le cadre classique de la mécanique des milieux continus, la taille absolue des constituants du matériau hétérogène ne joue aucun rôle sur la réponse globale ni locale prévue par le modèle. Tout au plus, des effets de tailles relatives de constituants peuvent être décrits. Dans le cas des calculs de VER, on impose une déformation ou une contrainte moyenne et la dimension absolue des maillages n'a donc aucun effet. La taille absolue des grains du maillage de la Fig. 9 par exemple n'importe pas.

Des calculs de microstructures plus réalistes devraient permettre de placer une échelle sous les cartes de déformation de la Fig. 12, comme c'est le cas d'une micrographie obtenue expérimentalement... L'introduction explicite de règles métallurgiques intégrant des effets d'échelles, telles que la loi de Hall et Petch corrélant la limite d'élasticité du polycristal à sa taille de grain, ne peuvent être utilisées pour calculer les champs au sein même du grain puisqu'il s'agit de relations essentiellement macroscopiques. Une réponse possible à ces difficultés consiste à introduire des variables supplémentaires incorporant une longueur caractéristique. L'une d'entre elles est le *tenseur densité de dislocation* (appelé aussi souvent densité de dislocations d'accommoda-

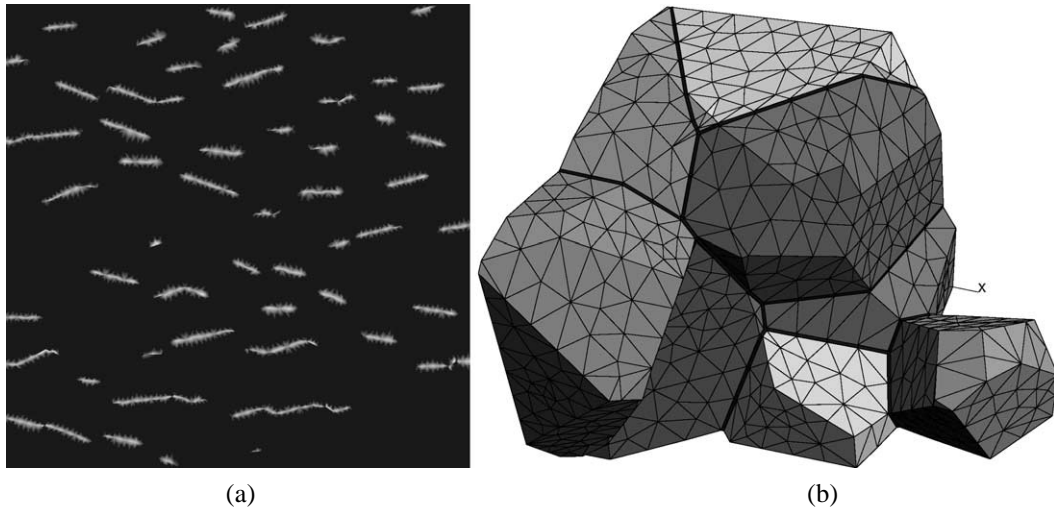


Fig. 10. Simulation de l'endommagement intergranulaire au sein d'un polycristal : cas bidimensionnel d'un polycristal en traction verticale (à gauche), maillage 3D de joints de grains déformables ou endommageables (à droite).

Fig. 10. Modelling intergranular damage in a polycrystalline aggregate: damage initiation in two-dimensional polycrystal in vertical tension (left); 3D meshing of damageable grain boundaries (right).

tion géométrique) défini comme le rotationnel de l'inverse de la déformation élastique [31] :

$$\underline{\alpha} = -\text{curl } \underline{E}^{-1} \quad (6)$$

qui a la dimension de l'inverse d'une longueur. La signification physique de cette quantité apparaît plus clairement quand on la relie à la courbure de réseau cristallin  $\kappa$ . La rotation de réseau relie l'orientation initiale d'un élément de cristal à son orientation actuelle. Elle est donc reliée à la partie rotation de la décomposition polaire de  $\underline{E} = \underline{R}\underline{U}$ , et peut être représentée par un vecteur axial dont la direction est l'axe de rotation et sa norme l'angle de rotation. Le gradient de ce vecteur correspond, au moins dans le cas des faibles rotations, au tenseur de courbure de réseau  $\underline{\kappa}$  [31]. La courbure de réseau peut se déduire expérimentalement de cartes d'orientations obtenues par EBSD. Elle contribue à l'érouissage local du matériau [2], et on ajoute donc le terme suivant dans la loi d'érouissage isotrope :

$$r^s = r_0 + Q \sum_{r=1}^N h^{sr} (1 - e^{-bv^r}) + H\theta^s \quad (7)$$

où  $\theta^s$  est l'angle de courbure du réseau par rapport à des axes cristallographiques donnés attachés au système  $s$ , sur une longueur caractéristique donnée. Cette extension du cadre de la plasticité classique relève de la mécanique des milieux continus généralisés, puisqu'elle est formulée à l'aide d'une modélisation d'un milieu du second gradient ou de Cosserat [27,29]. Elle permet par exemple de prévoir des effets de taille compatibles avec des lois du type Hall–Petch pour le polycristal, dans le cas de structures cubique à faces centrées et hexagonale compacte [28,29]. Elle modifie également les modes de localisation de la déformation près de zones de concentration de contraintes, voire de singularités (pour les fissures, voir [30]).

#### 4.3. Couplages avec d'autres mécanismes physiques

Le glissement dû au mouvement des dislocations n'est pas toujours le seul mécanisme actif lors de la déformation irréversible d'un matériau métallique. D'autres mécanismes de déformation ou d'endommagement doivent être pris en compte : maillage, changement de phase induit par la contrainte, croissance ou recristallisation, clivage, rupture inter ou transgranulaire... La Fig. 10(a) montre un calcul 2D de rupture intergranulaire dans un alliage de zirconium [20]. Sur la Fig. 10(b), les joints de grains ont une épaisseur non nulle pour que des propriétés spécifiques puissent leur être attribuées : glissement intergranulaire, cavitation observés à haute température. Dans [20,46] la modélisation mécanique est couplée aux phénomènes de diffusion pour prévoir les contraintes engendrées par la croissance d'une couche d'oxyde d'une part, et d'autre part la corrosion sous contrainte.

Plusieurs de ces mécanismes importants ont été simulés individuellement ou couplés à la plasticité. Pourtant, ils agissent souvent concurremment et la difficulté principale des calculs futurs sera de faire face à la non-linéarité accrue de ces problèmes couplés.

#### 5. Calculs de mono- et multicristaux

L'intérêt de calculer des échantillons contenant un nombre limité de gros grains réside dans le fait qu'on a là un moyen de valider expérimentalement l'ensemble de la chaîne de calcul de microstructure, en comparant les réponses globale et locale simulées à des mesures de champs de déformations ou contraintes. Dans le cas des revêtements multicristallins, les calculs ont aussi un intérêt pratique industriel à savoir l'optimisation de la microstructure, par exemple la taille de grain.

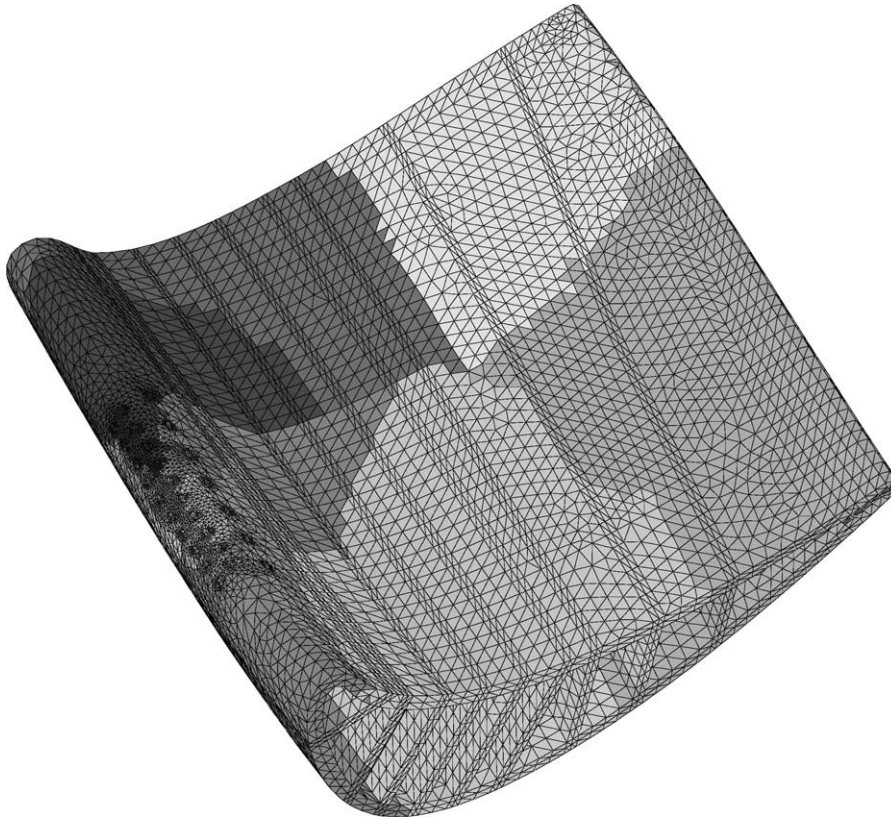


Fig. 11. Entre structure et microstructure : calcul d'aube de turbine monocristalline multiperforée, maillage et découpage en 8 sous-domaines pour le calcul parallèle.

Fig. 11. Between structure and microstructure: meshing of a single crystal multiperforated turbine blade, and its decomposition into 8 subdomains for parallel computing.

### 5.1. Cas d'un monocristal multiperforé

La déformation homogène et hétérogène des monocristaux sous des chargements de traction, compression plane, cisaillement, fluage et autres a été très largement étudiée expérimentalement et simulée numériquement. C'est l'ensemble de ces données qui ont contribué à l'établissement des lois de comportement élastoviscoplastique du monocristal présentées au paragraphe 4. On se contente ici de mentionner un exemple de calcul de monocristal à l'interface entre calcul de microstructure et calcul de structure. Les aubes de turbines des parties chaudes des moteurs d'avion sont désormais en superalliage à base de nickel monocristallin. Il s'agit de pièces d'une taille de 10 cm environ, creuses pour être refroidies en service. La pale est alors percée de multiples trous de refroidissement qui autorisent la formation d'un film d'air protégeant l'aube des gaz de combustion. Ces trous d'un diamètre de l'ordre de 0,3 mm affaiblissent toutefois localement la structure. Un calcul complet représentant la géométrie complexe de la pièce et prenant le chargement d'une mission réaliste (forces aérodynamiques, champs de température, force centrifuge) est aujourd'hui possible grâce en particulier au calcul parallèle et à la fiabilité des lois de comportement anisotrope du monocristal. Un maillage de pale avec son découpage en 8 sous-domaines est

donné en Fig. 11. Le calcul livre en particulier les contraintes et déformation locales, près de trous par exemple et se prête à un post-traitement de calcul de durée de vie en fatigue-fluage nécessaire en vue du dimensionnement [14].

Un tel calcul de structure monocristalline prenant en compte la multiperforation constitue une référence pour le calcul avec des maillages plus grossiers n'intégrant pas les trous, utilisés couramment en bureau d'études. L'affaiblissement local dû aux trous peut toutefois être pris en compte grâce à une loi de comportement modifiée dans la zone perforée. Un tel modèle homogénéisé est proposé dans [13,14], sous la forme de lois de comportement de monocristal étendu sensible en particulier à la partie hydrostatique des contraintes.

### 5.2. Éprouvettes multicristallines et revêtements

Les multicristaux métalliques ont été étudiés aussi bien expérimentalement que numériquement dans de nombreuses situations au cours des 15 dernières années : bicristaux de cuivre [43], multicristaux de cuivre, nickel, aluminium, fer [7,19,21,58,61]. Les éprouvettes sont généralement déformées *in situ* en microscopie à balayage. Une analyse EBSD fournit le champ de rotation de réseau par comparaison aux orientations initiales des grains. L'utilisation de grilles à la

surface permet d'obtenir des cartes de certaines composantes du tenseur de déformation. Dans toutes les situations mentionnées, les résultats expérimentaux ont été comparés avec succès à des calculs 3D utilisant la plasticité cristalline.

L'application de cette méthodologie à des revêtements métalliques est sans doute un enjeu industriel plus important. Le cas des revêtements de zinc sur tôles d'acier a été introduit au paragraphe 2.1. Les résultats du calcul par éléments finis de la traction d'un substrat acier avec son revêtement de zinc avec le maillage de la Fig. 1 par exemple, révèlent les aspects suivants du comportement du revêtement :

- l'état de contrainte fortement multiaxial des grains en fonction de leur orientation, alors même que le substrat est en traction pure ;
- les systèmes de glissement activés au cœur des grains, aux joints de grains et à l'interface ;
- le gradient de contrainte et de déformation qui se développe de l'interface à la surface libre ; on montre d'ailleurs que ce gradient est d'autant plus fort que le ratio épaisseur de la couche/largeur des grains est grand ;
- les forces qui s'exercent sur les joints de grains et à l'interface, à corrélérer avec les observations de rupture intergranulaire ou de décohésion à l'interface ;
- la rugosité induite par la plasticité.

Une présentation détaillée de ces résultats se trouve dans la référence [47].

### 5.3. Confrontation à des mesures de champs

Les résultats des calculs précédents peuvent être directement confrontés à des mesures de champs de certaines quantités physiques généralement à la surface des échantillons déformés :

- mesure de champ de déformation avec la méthode des grilles ; la grille est déposée à la surface de l'échantillon par électrolithographie avec un pas de 1 à 100  $\mu\text{m}$  ou plus selon les besoins (voir [52] et beaucoup d'autres contributions dans ce même volume). Des comparaisons entre simulation et expérience existent dans [58,61] par exemple. L'accord peut être amélioré en utilisant des maillages suffisamment fins et une géométrie 3D des grains réaliste. Si la surface présente une rugosité suffisante, la grille n'est plus nécessaire et on a recours à des méthodes de corrélation d'images pour estimer le champ de déformation d'une image à l'autre. C'est par exemple le cas des mousses métalliques : on trouvera un exemple dans [3] ;
- mesures de champ d'orientation cristalline par EBSD, qui donnent non seulement les orientations initiales pertinentes des grains mais aussi les rotations de réseau consécutives. On peut même en déduire l'intensité de la courbure du réseau, utile dans certains modèles men-

tionnés plus haut. Les modèles de plasticité cristalline sont en mesure de prévoir ces rotations de réseau dues à la déformation plastique (voir [52] et [22] pour des confrontations calcul–expérience) ;

- mesures de déformation élastique locale par rayons X ; elles sont en général traduites en termes de contraintes par le biais des relations d'élasticité linéaire. Les hétérogénéités de contraintes de grain à grain, voire au sein d'un grain suffisamment gros peuvent être mesurées de la sorte et ont été comparées à des simulations numériques [22]. De manière plus ambitieuse encore, des techniques d'imagerie aux rayons X au synchrotron HASYLAB (Hamburg–RFA), livrent un champ complet de déformation élastique et d'orientation cristalline au sein d'un grain. Des traitements d'images lourds mais systématiques sont nécessaires [22].

## 6. Calculs d'agrégats polycristallins

On utilise ici les microstructures polycristallines de la Fig. 5 pour évaluer les contraintes et déformations intragranulaires. L'objectif est d'estimer leur dispersion et d'étudier l'influence du voisinage d'un grain sur son comportement, quantifier les incompatibilités de déformations dues aux joints de grain ou l'effet de surface libre, effets non accessibles par les modèles classiques de polycristal à champs moyens. Il s'agit donc d'un prélude à la prévision de l'amorçage et la propagation de fissures sous chargements complexes.

Pour que le calcul soit pertinent, le VER de polycristal calculé doit d'une part contenir suffisamment de grains pour mériter ce label et d'autre part chaque grain doit être maillé assez finement pour que la solution éléments finis (de l'ordre de 1000 points d'intégration par grain) converge au sens de la discrétisation [4]. Dans ces conditions, le calcul parallèle est incontournable.

### 6.1. Hétérogénéités intragranulaires

La Fig. 12 montre le maillage d'un agrégat de 238 grains et le champ de déformation plastique équivalente en son sein après 1,5 % de déformation moyenne en traction verticale pour l'alliage c.f.c. INCO600. Les orientations cristallines ont été distribuées de manière aléatoire. On remarque que la structure de bandes de déformation qui se forme en ce début de déformation ne suit pas nécessairement les contours des joints de grain, de sorte que la simulation est en mesure de prévoir le développement de structures de déformation.

On propose dans cette section et jusqu'au début de la section 7 un voyage allant du constat des hétérogénéités locales intragranulaires jusqu'à la réponse moyenne macroscopique, en passant pas des moyennes plus locales sur les grains individuels. Ce parcours apparaît sur la Fig. 13. La Fig. 13(a) montre l'ensemble des états de contrainte et déformation axiales rencontrés dans un grain particulier, i.e. les

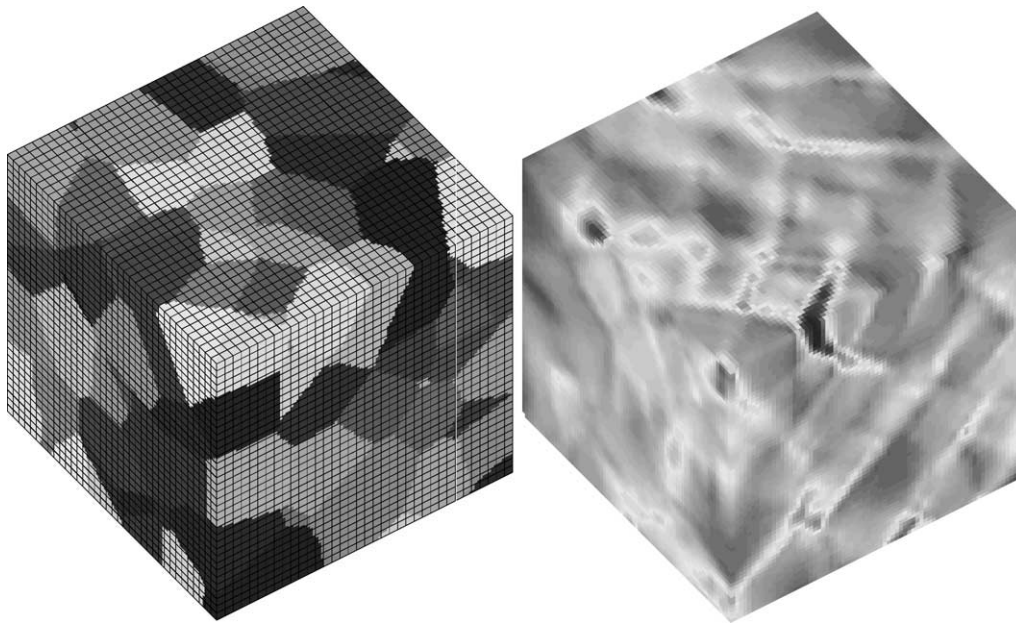


Fig. 12. Déformation d'un agrégat polycristallin d'alliage INCO600 : distribution des grains et maillage (à gauche), carte de la déformation plastique équivalente pour 1 % de déformation moyenne (à droite).

Fig. 12. Deformation of a polycrystalline aggregate: grain distribution and mesh (on the left), equivalent plastic deformation map (on the right) showing the development of deformation band structures for 1% mean tensile strain.

valeurs à tous les points d'intégration contenus dans ce grain, pour trois niveaux successifs de déformation moyenne. On constate très tôt une formidable hétérogénéité aussi bien en contrainte qu'en déformation, qui s'accroît avec le chargement (la suppression des points de Gauss situés trop près des joints de grains atténue légèrement cet effet sans modifier sensiblement la figure). L'évolution de la contrainte moyenne dans ce grain en fonction de sa déformation moyenne est donnée également, ainsi que l'état qui serait obtenu sur un monocristal ayant la même orientation sollicité par le même chargement macroscopique. La contrainte locale fluctue de  $\pm 50\%$  autour de la moyenne, de sorte que le terme fluctuation souvent employé dans le contexte de l'homogénéisation n'est plus vraiment adapté ! Les variations de déformation sont du même ordre de grandeur. L'effet de voisinage se manifeste de la manière suivante. Au sein des plus gros grains de l'agrégat, on trouve en général que la partie déviatorique des contraintes fluctue en général assez peu, en tout cas beaucoup moins que la contrainte hydrostatique. Pour des grains plus petits en revanche, des états multiaxiaux très dispersés en déviateur comme en trace sont obtenus.

L'opération de prise de moyenne sur chaque grain individuel ne suffit pas à gommer les hétérogénéités observées : la dispersion obtenue sur les courbes de charge moyenne des 238 grains de l'agrégat reste considérable (Fig. 13(b)). Seule une moyenne sur tous les grains ayant des orientations proches permet de retrouver des ordres de grandeurs prévus par les modèles d'homogénéisation [5]. On remarque aussi des grains en état de décharge élastique.

Un maillage suffisamment fin est nécessaire pour aboutir aux conclusions précédentes, ici un cube de  $28 \times 28 \times 28$

briques à vingt nœuds et 27 points de Gauss. Un maillage trop grossier masque généralement la complexité des distributions des glissements plastiques en particulier.

## 6.2. Effets de joint de grain et de surface libre

L'image du grain du polycristal ayant un comportement moyen avec un cœur déformé de manière homogène entouré d'une couronne avec un comportement différent ne résiste pas à l'analyse de calculs d'agrégats réels. Une telle image est parfois utilisée pour développer des modèles simplifiés de comportement du polycristal mais s'avère ne correspondre, en général, à aucune réalité tangible au moins dans le cas des matériaux c.f.c. Le joint de grain est en revanche la source d'une dispersion formidable des champs locaux. La Fig. 14 donne les valeurs de la contrainte axiale de tous les points d'un grain fixé en fonction de leur distance au joint de grain le plus proche. La taille du grain considéré étant de 5, le centre se trouve près de 2,5 sur la courbe. On constate que la dispersion augmente considérablement lorsqu'on s'approche d'un joint de grain. La contrainte moyenne des points situés à une distance donnée d'un joint est quant à elle à peu près constante, ce qui invalide le modèle de la couronne. La dispersion peut donc conduire à des zones proches d'un joint plus dures aussi bien que plus molles, ce qui est conforme à de nombreuses observations in situ [52].

La situation est toutefois un peu différente dans le cas d'agrégats de zinc étudiés dans [6,47]. La structure cristallographique est hexagonale compacte et l'élasticité est très anisotrope (contrairement au cas précédent). Deux familles de systèmes actifs sont observées : glissement basal

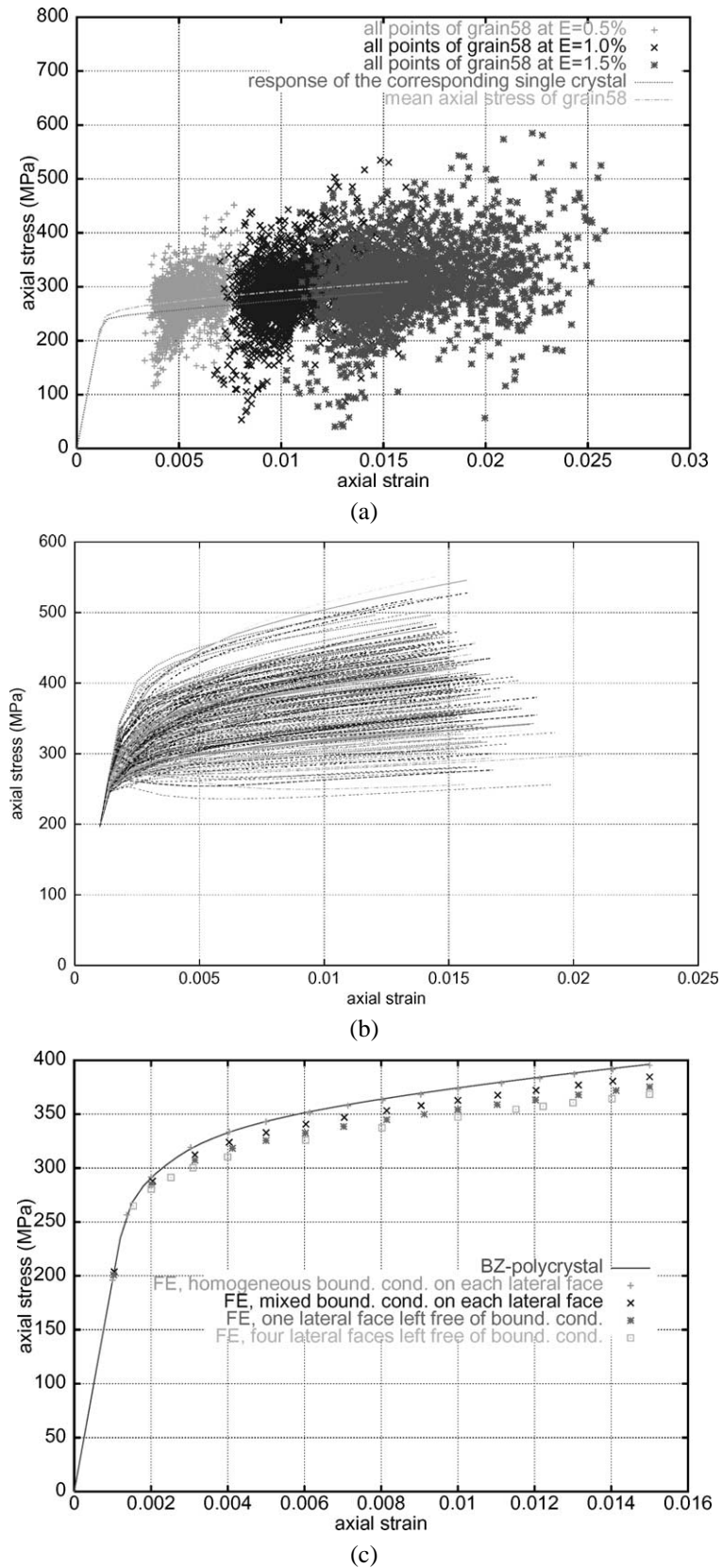


Fig. 13. Du micro au macro : états de contrainte et déformation axiales dans un grain particulier pour tous les points d'intégration, à trois niveaux de charge moyenne (haut), réponse moyenne de tous les grains de l'agrégat (milieu) et courbe de charge macroscopique contrainte/déformation moyennes (bas).

Fig. 13. Micro–macro transition: axial stress and strain states in a particular grain for all integration points and three different overall strain level (top), mean response of all individual grains of the considered volume (center) and macroscopic stress/strain curves for different boundary conditions and comparison with a homogenization polycrystal model (bottom).

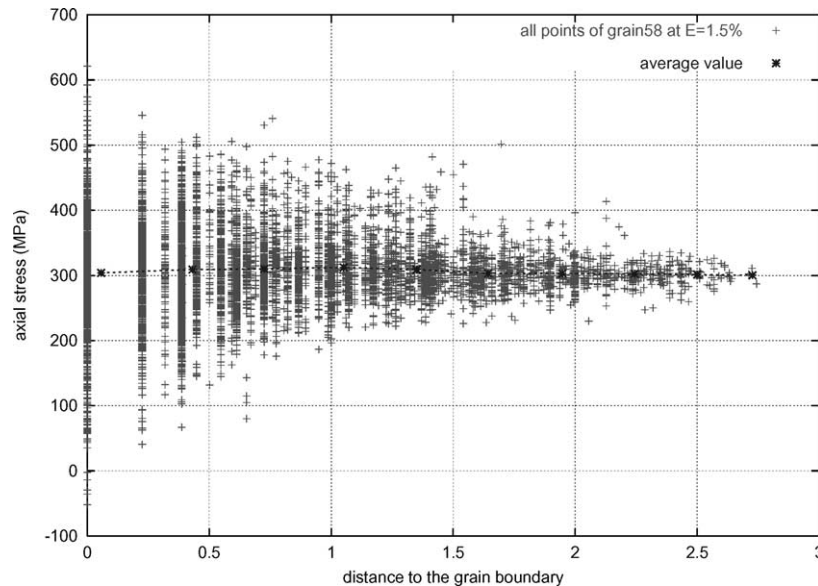


Fig. 14. Effet de joint grain : contrainte axiale de tous les points d'un grain particulier et sa moyenne en fonction de leur distance au joint de grain le plus proche.

Fig. 14. Grain boundary effect on the axial stress of all points present in a given grain, as a function of the their distance to the closest grain boundary.

et pyramidal  $\Pi_2$ . On constate en fait que le glissement pyramidal qui a une contrainte résolue critique initiale 10 fois supérieure à celle du glissement basal, est activé préférentiellement près des joints de grains, ce qui a été vérifié expérimentalement.

Un soupçon plane aujourd'hui sur la validité d'une extrapolation au volume des conclusions d'observations expérimentales du comportement en surface des matériaux. L'accès aux valeurs volumiques restant encore hors de portée dans la plupart des cas, la simulation numérique est l'outil idéal pour mettre en évidence un éventuel effet de surface. C'est pourquoi les réponses locales des grains proches d'une face libre du cube polycristallin en traction ont été systématiquement comparées à celles de grains au cœur de l'agrégat [5]. L'effet principal observé est semblable à celui du joint de grain : la présence d'une surface libre conduit à une forte dispersion des états de contrainte/déformation. La surface libre ne conduit pas systématiquement à une diminution des contraintes de von Mises locales. En moyenne on observe toutefois une baisse pouvant atteindre 10 % de la contrainte équivalente moyenne, une réduction du nombre de systèmes actifs, une augmentation limitée de la déformation équivalente moyenne, lorsqu'on s'approche de la surface libre. La profondeur affectée par la surface a été évaluée dans ce cas à un ou deux grains. De tels effets sont des conséquences purement mécaniques de la présence d'une surface libre et n'intègrent pas des mécanismes liés à un comportement différent des dislocations près d'une surface. C'est pourquoi les effets prévus sont plus faibles que ceux annoncés dans la littérature de métallurgie physique, souvent contradictoires d'ailleurs. Ils sont de l'ordre de grandeur de ceux décrits par des approches mettant en œuvre des modèles de demi-inclusion dans un milieu semi-infini [50,54].

## 7. Identification de règles de transition d'échelle et lien avec les lois de comportement macroscopique

Le calcul de VERs fournit aussi, bien sûr, une estimation de la réponse globale grâce à des opérations de moyennes associées à une perte d'information considérable. Elle permet de faire le lien avec des modèles issus de l'homogénéisation d'une part et d'autre part à des modèles macroscopiques plus phénoménologiques applicables aux calculs de structures constituées de ce matériau.

### 7.1. Comportement macroscopique du polycristal

La Fig. 13(c) donne la contrainte moyenne sur l'agrégat en fonction de la déformation moyenne, pour différentes conditions aux limites de traction appliquées : conditions de déformation homogène au contour, conditions de faces latérales libres et autres conditions mixtes. Les différences révèlent en fait l'écart entre le volume de matière étudié et un véritable VER. Le nombre de grains est encore insuffisant pour qualifier le volume de VER mais on s'en approche en fait assez rapidement. Pour garantir l'aspect représentatif du volume considéré pour la propriété étudiée, il faut vérifier les points suivants :

- regarder la convergence de la réponse globale quand on augmente le nombre de grains au sein du volume calculé (à densité de maillage constante) ;
- calculer la dispersion des réponses globales obtenues lorsqu'on simule plusieurs réalisations de la microstructure ;

- vérifier l'équivalence de l'application de conditions aux limites en déformations et contraintes homogènes au contour, et périodiques.

La taille du VER a été étudiée systématiquement dans le cas de la torsion de fils de cuivre, en suivant la première procédure, dans [51]. Une section de fil contenant environ 30 grains est nécessaire pour atteindre un comportement stabilisé de polycristal.

Lorsque ces conditions sont remplies à une tolérance donnée près, on peut comparer la réponse obtenue à celles de modèles classiques de polycristal homogénéisé. Ces modèles prennent en compte généralement la texture cristallographique et la forme des grains (sphérique ou ellipsoïdale). Les grains ne sont pas considérés individuellement et on appelle phase du polycristal l'ensemble des grains ayant une orientation donnée [53]. La relation (8) résume les réponses de plusieurs modèles. Elle donne la contrainte moyenne au sein de la phase  $g$  en fonction de la contrainte macroscopique  $\underline{\Sigma}$ , de la déformation plastique globale  $\underline{E}^p$  et locale  $\underline{\varepsilon}^{pg}$ , dans le cas de l'élasticité homogène isotrope :

$$\underline{\sigma}^g = \underline{\Sigma} + \mu \alpha (\underline{E}^p - \underline{\varepsilon}^{pg}) \quad (8)$$

Lorsque  $\alpha$  vaut 2 (resp. 1), on obtient le modèle dit de Lin (resp. Kröner), proches en fait du modèle de Taylor pour lequel les déformations sont identiques dans toutes les phases, ce qui conduit en général à une réponse trop rigide. Il existe cependant un modèle simplifié assez réaliste issu de [8], selon le schéma dit *autocoherent* tel que :

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3\mu p}{2J_2(\underline{\Sigma})}, \quad p = \left( \frac{2}{3} \underline{E}^p : \underline{E}^p \right)^{1/2}, \quad \underline{E}^p = \langle \underline{\varepsilon}^{pg} \rangle \quad (9)$$

La Fig. 13(c) montre que cette estimation, valable pour un polycristal élastoplastique isotrope sous chargement radial monotone, est en accord avec la simulation de l'agrégat polycristallin. La dispersion des réponses des phases individuelles prévues par ce modèle reste toutefois en deçà de ce que livre le calcul d'agrégats (Fig. 13(b)) [4,5]. C'est une difficulté majeure des modèles à champs moyens que d'estimer l'hétérogénéité de déformation présente dans le matériau déformé, au moins de constituant à constituant.

### 7.2. Identification de règles de changement d'échelle

De nombreux schémas d'homogénéisation sont basés sur l'idéalisation qu'est la phase individuelle considérée comme inclusion dans un milieu infini, parce que des solutions explicites étaient disponibles dans ce cas-là. Les moyens de calcul sont tels aujourd'hui qu'on peut substituer à ces problèmes d'inclusions des configurations plus réalistes de la microstructure et coupler les modèles simplifiés à ces calculs de VER. Pour des situations plus générales que celles décrites par la relation (8) (extensions à l'élastoviscoplasticité et aux chargements complexes, cycliques...), une re-

lation de changement d'échelle de la forme suivante a été proposée :

$$\underline{\sigma}^g = \underline{\Sigma} + \mu (\underline{\beta} - \underline{\beta}^g) \quad (10)$$

$$\underline{\dot{\beta}}^g = \underline{\dot{\varepsilon}}^{pg} - D \underline{\varepsilon}_{eq}^{pg} \underline{\beta}^g \quad (11)$$

où des variables d'accommodation non linéaire  $\underline{\beta}$  ont été introduites [11,48]. La loi d'évolution (11)<sub>2</sub> fait intervenir un paramètre  $D$  qu'on propose d'ajuster de sorte que la réponse du modèle simplifié coïncide avec un calcul d'inclusion selon un schéma autocoherent par exemple [12,49], ou, de manière plus générale, avec un calcul d'agrégats polycristallins. Une première procédure d'identification couplant calcul de VER et intégration du modèle homogénéisé est présentée dans [6] dans le cas du zinc à température ambiante. Des lois d'évolution plus riches que (11)<sub>2</sub> sont nécessaires pour mieux rendre compte de comportement local ou chargements globaux plus complexes [9]. L'intérêt de la méthode d'identification est de fournir au calcul de structures classique un modèle macroscopique facilement intégrable dans un code par éléments finis mais aussi fidèle que possible à la réponse de l'élément de volume polycristallin. Ce modèle est utilisable pour tout type de chargement, ce qu'exige son usage dans un code de calcul de structures.

## 8. Conclusions et perspectives

Le calcul de microstructures, au carrefour de la mécanique des structures et des sciences des matériaux, a été illustré dans deux types d'applications principaux :

- le calcul de pièces ou composants industriels tels que la taille des hétérogénéités du matériau est de l'ordre de grandeur de la taille de la structure ou de ses singularités (entailles, perforations...). On rappelle le cas des matériaux en couches minces ou revêtements, celui des composants microélectronique ou micro-systèmes mécaniques (capteurs...), aubes ou chambres de combustion multiperforées...
- le calcul de VER de matériaux hétérogènes aléatoires, en vue de la prédiction de leur comportement effectif et de l'optimisation de la microstructure (morphologie, taille...).

Dans les deux cas, des calculs réalistes tridimensionnels sont nécessaires et le calcul parallèle est apparu comme un outil incontournable et mûr pour les applications industrielles. Ces calculs peuvent d'ailleurs être effectués sur des microordinateurs standards en réseau.

Dans le cas des méthodes numériques d'homogénéisation, la notion de VER est apparue comme une notion-clef non encore complètement élucidée. Sa taille dépend de la propriété effective étudiée, du contraste des propriétés des phases en présence, de la morphologie et des conditions aux limites utilisées. Si le contraste est trop fort, le VER doit



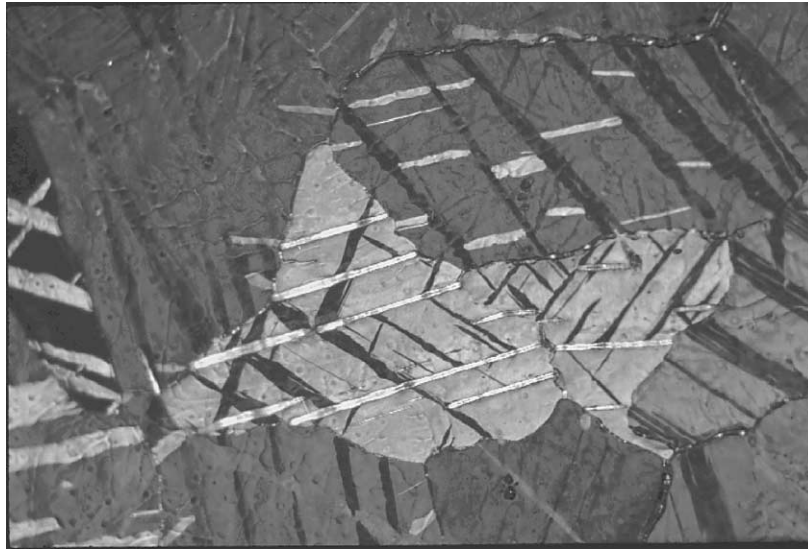


Fig. 15. Déformation et endommagement d'un revêtement de zinc en expansion équibiaxiale : déformation par glissement (non visible ici), maillage intense et fissures de clivages au sein des grains (taille de grain 500  $\mu\text{m}$ ).

Fig. 15. Deformation and damage in a zinc coating after a severe expansion test: a network of twins and cleavage cracks is clearly visible (grain size 500  $\mu\text{m}$ ).

contenir un nombre considérable d'hétérogénéités, ce qui risque de conduire à un calcul hors de portée. On peut toutefois tirer parti de tailles intermédiaires grâce à un traitement statistique d'un grand nombre de réalisations [37]. D'autres applications à des composites particuliers ou à fibres doivent être envisagés.

L'enjeu réside véritablement dans l'application massive du calcul de microstructures à une approche locale de l'endommagement et de la rupture. Il s'agira alors de relier ces simulations aux modèles de prévision de durée de vie, sous chargements monotones, cycliques (fatigue), thermomécanique (fluage, anisotherme)... Arrivera-t-on bientôt à simuler des structures de déformation et endommagement aussi complexes (et fascinantes !) que celles observées par exemple dans un revêtement de zinc après 20 à 30 % de déformation globale (Fig. 15) ?

## Références

- [1] R.J. Asaro, Crystal plasticity, *J. Appl. Mech.* 50 (1983) 921–934.
- [2] M.F. Ashby, The deformation of plastically non-homogeneous alloys, in: A. Kelly, R.B. Nicholson (Eds.), *Strengthening Methods in Crystals*, Applied Science Publishers, London, 1971, pp. 137–192.
- [3] X. Badiche, S. Forest, T. Guibert, Y. Bienvenu, J.-D. Bartout, P. Ienny, M. Croset, H. Bernet, Mechanical properties and non-homogeneous deformation of open-cell nickel foams: application of the mechanics of cellular solids and of porous materials, *Materials Science and Engineering A A289* (2000) 276–288.
- [4] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin, G. Cailletaud, Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: FE model, *Int. J. Plasticity* 17 (2001) 513–536.
- [5] F. Barbe, S. Forest, G. Cailletaud, Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: Results, *Int. J. Plasticity* 17 (2001) 537–563.
- [6] F. Barbe, R. Parisot, S. Forest, G. Cailletaud, Calibrating a homogenization polycrystal model from large scale computations of polycrystalline aggregates, *J. Phys. IV France* 11 (2001) 277–284.
- [7] R. Becker, Analysis of texture evolution in channel die compression – I. Effects of grain interaction, *Acta Metall. Mater.* 39 (1991) 1211–1230.
- [8] M. Berveiller, A. Zaoui, An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystal, *J. Mech. Phys. Sol.* 26 (1979) 325–344.
- [9] J. Besson, G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, S. Forest, *Mécanique non linéaire des matériaux*, Hermès, France, 2001, 445 p.
- [10] M. Bornert, T. Bretheau, P. Gilormini, *Homogénéisation en mécanique des matériaux*, Hermès, 2001.
- [11] G. Cailletaud, A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals, *Int. J. Plasticity* 8 (1992) 55–73.
- [12] G. Cailletaud, P. Pilvin, Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis, *Revue Européenne des Éléments Finis* 3 (4) (1994) 515–541.
- [13] J.-M. Cardona, S. Forest, G. Cailletaud, F. Gallerneau, F. Caruel, Anisothermal cyclic viscoplastic computation of multiperforated components, in: A.S. Khan (Ed.), *Plasticity 2000, The Eighth International Symposium on Plasticity and its Current Applications*, 2000, pp. 35–37.
- [14] J.-M. Cardona, Comportement et durée de vie des pièces multiperforées : application aux aubes de turbine, Thèse de doctorat, École des Mines de Paris, 2000.
- [15] A.M. Cuitiño, M. Ortiz, Computational modelling of single crystals, *Modelling Simul. Mater. Sci. Engrg.* 1 (1993) 225–263.
- [16] L. Decker, D. Jeulin, 3D spatial time structure simulations by reaction-diffusion models, *Acta Stereologica* 18 (1999) 247–254.
- [17] L. Decker, D. Jeulin, Simulation 3d de matériaux aléatoires polycristallins, *Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des Matériaux* (février 2000) 271–275.
- [18] L. Decker, Modèles de structures aléatoires de type réaction–diffusion, PhD thesis, École des Mines de Paris, 1999.
- [19] F. Delaire, J.L. Raphanel, C. Rey, Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension: experimental study and finite element simulations, *Acta Mater.* 48 (2000) 1075–1087.
- [20] O. Diard, S. Leclercq, G. Rousselier, G. Cailletaud, Intergranular stress corrosion cracking modelling for zirconium alloy fuel cladding: environmental effects simulations with mechanical-chemical coupled calculations, in: D. Miannay, P. Costa, D. François, A. Pineau (Eds.), *EuroMat2000, Proc. Advances in Mechanical Behaviour, Plasticity and Damage*, Elsevier, 2000, pp. 1175–1180.

- [21] F. Eberl, F. Feyel, S. Quilici, G. Cailletaud, Approches numériques de la plasticité cristalline, *J. Phys. IV France* 8 (1998) 15–25.
- [22] F. Eberl, Second order heterogeneities in a multycrystal: Experimental developments using X-ray diffraction comparison with a finite element model, Thèse de doctorat, Doctor Communis Europae ENSAM Paris, 2000.
- [23] Y. El Ouarzazi, Mechanical properties of a highly-contrasted two-phase material, Technical report, École des Mines de Paris/Unilever, 2000.
- [24] Y. Estrin, Dislocation density related constitutive modelling, in: *Unified Constitutive Laws of Plastic Deformation*, Academic Press, 1996, pp. 69–106.
- [25] C. Farhat, F.-X. Roux, A method of finite element tearing interconnecting and its parallel solution algorithm, *Int. J. Numer. Methods Engrg.* 32 (1991) 1205–1227.
- [26] F. Feyel, Application du calcul parallèle aux modèles à grand nombre de variables internes, Thèse de doctorat, École des Mines de Paris, 1998.
- [27] N.A. Fleck, J.W. Hutchinson, Strain gradient plasticity, *Adv. Appl. Mech.* 33 (1997) 295–361.
- [28] S. Forest, Cosserat modeling of size effects in polycrystals, in: J.L. Bassani, L.P. Kubin, R.L.P. Selinger, K. Cho (Eds.), *Multiscale Materials Modeling-2000*, Vol. 653, Boston, Material Research Society, 2001, pp. Z8.2.1–Z8.2.12.
- [29] S. Forest, F. Barbe, G. Cailletaud, Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviour of polycrystals and multiphase materials, *Int. J. Solids Structures* 37 (2000) 7105–7126.
- [30] S. Forest, P. Boubidi, R. Sievert, Strain localization patterns at a crack tip in generalized single crystal plasticity, *Scripta Materialia* 44 (2001) 953–958.
- [31] S. Forest, M. Fivel, Modèles discrets et continus de la plasticité des métaux : du monocristal au polycristal, in: J. Ayache, J.-P. Morniroli (Eds.), *Microscopie des défauts cristallins*, École thématique, 7–18 Mai, Société Française de Microscopie, Oléron, 2001, pp. 457–466.
- [32] P.L. George, H. Borouchaki, Triangulation de Delaunay et maillage. Applications aux éléments finis, Hermès, 1997.
- [33] S. Ghosh, K. Lee, S. Moorthy, Two-scale analysis of heterogeneous elastic–plastic materials with asymptotic homogenization and Voronoi cell finite element model, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 132 (1996) 63–116.
- [34] L.J. Gibson, M.F. Ashby, *Cellular solids*, Cambridge University Press, 1998.
- [35] F. Grillon, Communication personnelle, 2001.
- [36] D. Jeulin, Probabilistic models of structures, in: G.N. Frantziskonis (Ed.), *Workshop PROBAMAT 21st Century*, Perm, Russia, 10–12 September, in: *NATO ASI Series*, Vol. 46, 1997, pp. 233–257.
- [37] T. Kanit, S. Forest, D. Jeulin, V. Mounoury, I. Galliet, Détermination du volume élémentaire représentatif d'un milieu élastique aléatoire, Technical report, GT Mécatmat Approches probabilistes en mécanique des milieux hétérogènes, organisé par D. Jeulin, F. Montheillet et P. Franciosi, INSA-Lyon, 31 mai 2001.
- [38] A.G. Khachatryan, *Theory of Structural Transformations in Solids*, Wiley, 1983.
- [39] L.P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincere, V. Pontikis, Y. Bréchet, Dislocation microstructures and plastic flow: a 3d simulation, *Solid State Phenomena* 23 & 24 (1992) 455–465.
- [40] A. Lasalmonie, J.L. Strudel, Influence of grain size on the mechanical behaviour of some high strength materials, *J. Mat. Sci.* 21 (1985) 1837–1852.
- [41] E. Maire, F. Wattebled, J.Y. Buffiere, G. Peix, Deformation of a metallic foam studied by X-ray computed tomography and finite element calculations, in: T.W. Clyne, A.B. Simancik (Eds.), *Proceedings of the 'Euromat 99' Conference in München*, Vol. 5, Wiley, 1999, pp. 68–73.
- [42] J. Mandel, Équations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques, *Int. J. Solids Structures* 9 (1973) 725–740.
- [43] L. Méric, G. Cailletaud, M. Gaspérini, F.E. calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension–compression tests, *Acta Metall. Mater.* 42 (3) (1993) 921–935.
- [44] L. Méric, P. Poubanne, G. Cailletaud, Single crystal modeling for structural calculations. Part 1: Model presentation, *J. Engrg. Mat. Technol.* 113 (1991) 162–170.
- [45] H. Moulinec, P. Suquet, A fast numerical method for computing the linear and non linear mechanical properties of composites, *C. R. Acad. Sci. Paris* 318 (1994) 1417–1423.
- [46] M. Parise, O. Sicardy, G. Cailletaud, Modelling of the mechanical behavior of the metal–oxide system during Zr alloy oxidation, *J. Nucl. Mat.* 256 (1998) 35–46.
- [47] R. Parisot, S. Forest, A.-F. Gourgues, A. Pineau, D. Mareuse, Modelling the mechanical behavior of a multycrystalline zinc coating on a hot-dip galvanized steel sheet, *Computational Materials Science* 19 (2001) 189–204.
- [48] P. Pilvin, The contribution of micromechanical approaches to the modelling of inelastic behaviour of polycrystals, in: A. Pineau, G. Cailletaud, T. Lindley (Eds.), *Fourth Int. Conf. on Biaxial/Multiaxial Fatigue and Design*, Mechanical Engineering Publications, London, 1996, pp. 3–19, ESIS 21.
- [49] P. Pilvin, Une approche inverse pour l'identification d'un modèle polycristallin élastoviscoplastique, in: 3ème Colloque National en Calcul des Structures, 20–23 mai, Giens, Presses Académiques de l'Ouest, 1997, pp. 207–212.
- [50] P. Pilvin, Une approche simplifiée pour schématiser l'effet de surface sur le comportement mécanique d'un polycristal, *J. Phys. IV France* 4 (1998) 33–38.
- [51] S. Quilici, S. Forest, G. Cailletaud, On size effects in torsion of multipoly-crystalline specimens, *J. Phys. IV France* 8 (1998) 325–332.
- [52] C. Rey, P. Viaris de Lesegno, R. Chiron, Analysis of shear localization in iron single crystals by local strain field lattice rotation field measurements, in: J. Ziebs, J. Bressers, H. Frenz, D.R. Hayhurst, H. Klingelhöffer, S. Forest (Eds.), *Proceedings of the International Symposium on Local Strain and Temperature Measurements in Non-uniform Fields at Elevated Temperatures*, Berlin, Woodhead, 1996, pp. 30–39.
- [53] E. Sanchez-Palencia, A. Zaoui, Homogenization techniques for composite media, in: *Lecture Notes in Physics*, Vol. 272, Springer, Berlin, 1987.
- [54] M. Sauzay, P. Gilormini, Surface and cyclic microplasticity, *Fatigue Fract. Engrg. Mater. Struct.* 23 (2000) 573–580.
- [55] K. Schmidegg, Finite element simulation of local deformations in polycrystals comparison to experimental results, Diplomarbeit, Montanuniversität Leoben, 2000.
- [56] J.S. Stölken, Finite element simulation of a 1000 grain virtual test sample, in: J. Bassani, H. Gao, L. Kubin, R.L.P. Selinger (Eds.), *Material Research Society Fall Meeting, Symposium Z: Multiscale Materials Modeling*, Boston, 27 November–1 December, 2000.
- [57] P. Suquet, *Continuum Micromechanics*, in: *CISM Courses and Lectures*, Vol. 377, Springer Verlag, Berlin, 1997.
- [58] C. Teodosiu, J. Raphanel, L. Tabourot, Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multi-crystals, in: C. Teodosiu, F. Sidoroff (Eds.), *Large Plastic Deformations MECAMAT'91*, Balkema, Rotterdam, 1993, pp. 153–158.
- [59] J.F. Thompson, B.K. Soni, N.P. Weatherill, *Handbook of Grid Generation*, CRC Press, 1999.
- [60] Y. Wang, A.G. Khachatryan, J.W. Morris Jr., A two-dimensional analysis of the evolution of coherent precipitates in elastic media, *Acta Metall. Mater.* 41 (1993) 325–336.
- [61] A. Ziegenbein, H. Neuhäuser, J. Thesing, R. Ritter, H. Wittich, E. Steck, M. Levermann, Local plasticity of Cu–Al polycrystals – measurements and FEM simulation, *J. Phys. IV France* 8 (1998) 407–412.