

Introduction au calcul de microstructures

Samuel Forest, Georges Cailletaud

Centre des Matériaux/UMR 7633
Ecole des Mines de Paris/CNRS
BP 87, 91003 Evry, France
Samuel.Forest@ensmp.fr



Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

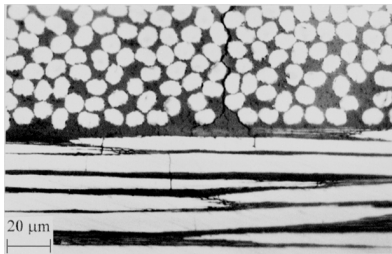
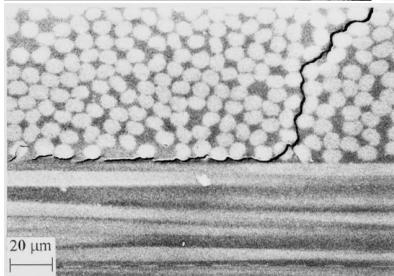
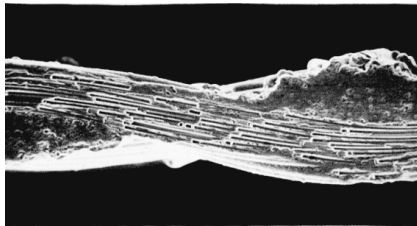
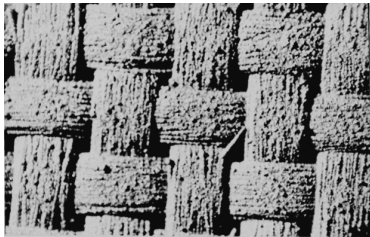
Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

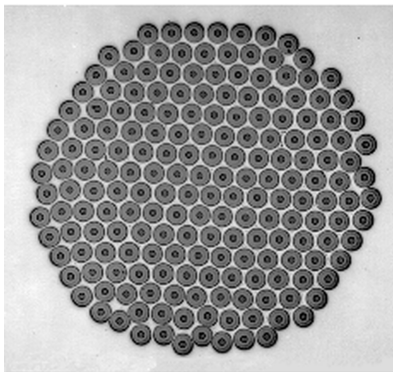
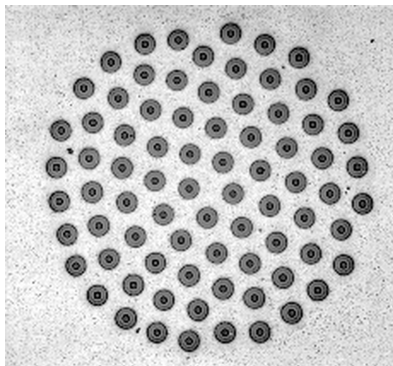
Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Matériaux composites



Composites à matrice métallique



Long fiber composites SiC-Ti (fiber diameter : $500\text{ }\mu\text{m}$)

Morphologie polycristalline



zinc coating

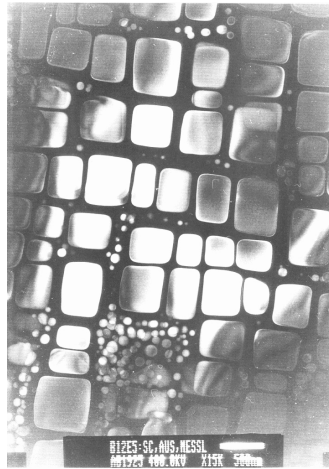


shape memory alloy Cu-Zn-Al

Microstructures biphasées



Titanium alloy Ti6242

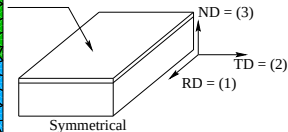
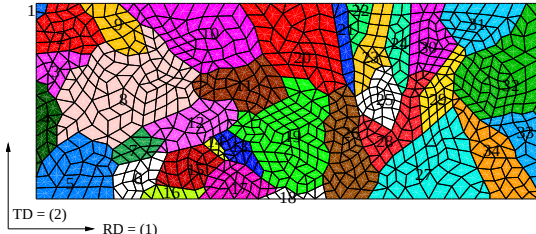


nickel-base single crystal superalloy

Caractérisation des revêtements

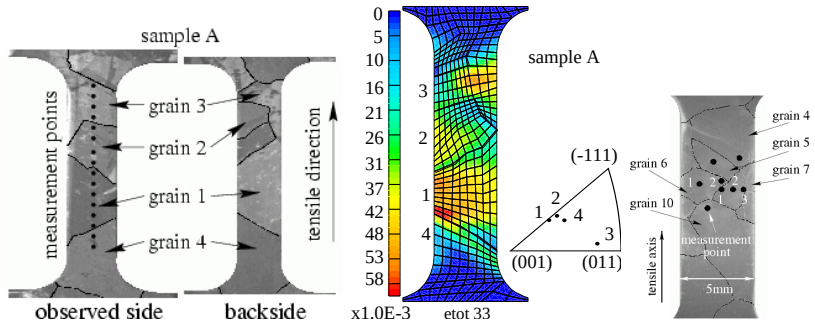


revêtement de tôle
galvanisée
analyse EBSD

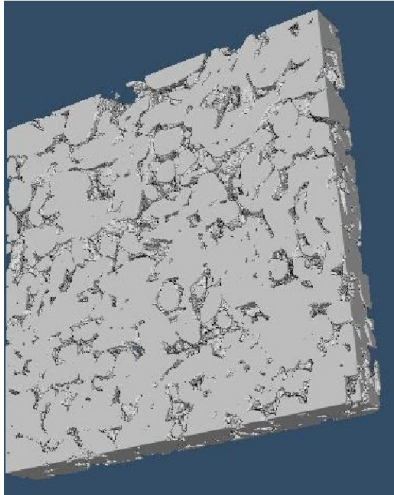


géométrie 2D mais modes de déformation 3D!

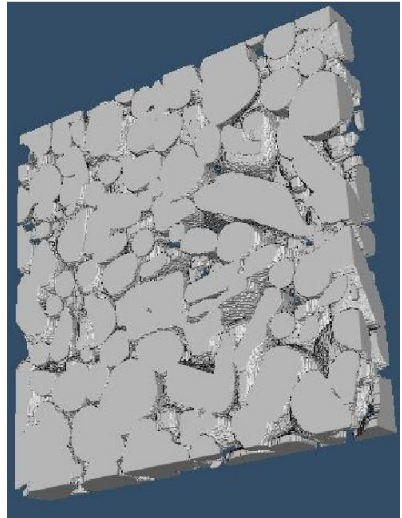
Matériaux multicristallins



Matériaux quasi-transparents



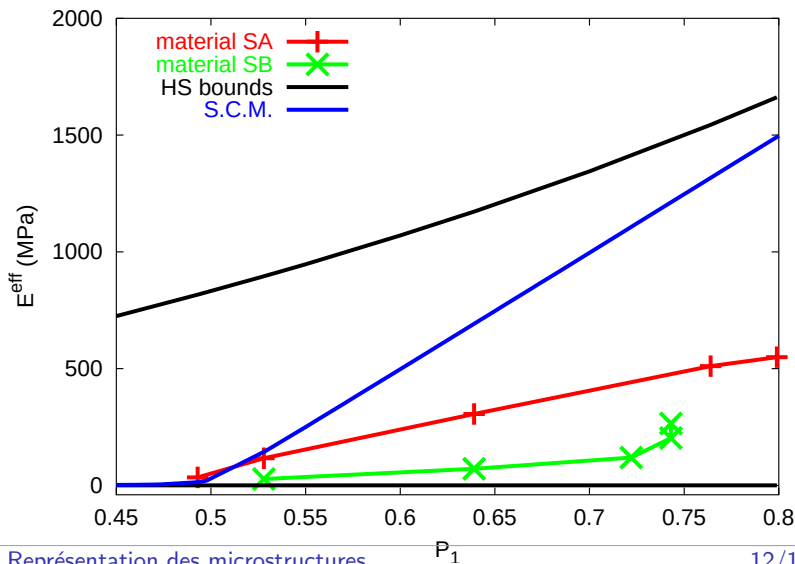
Matériau A



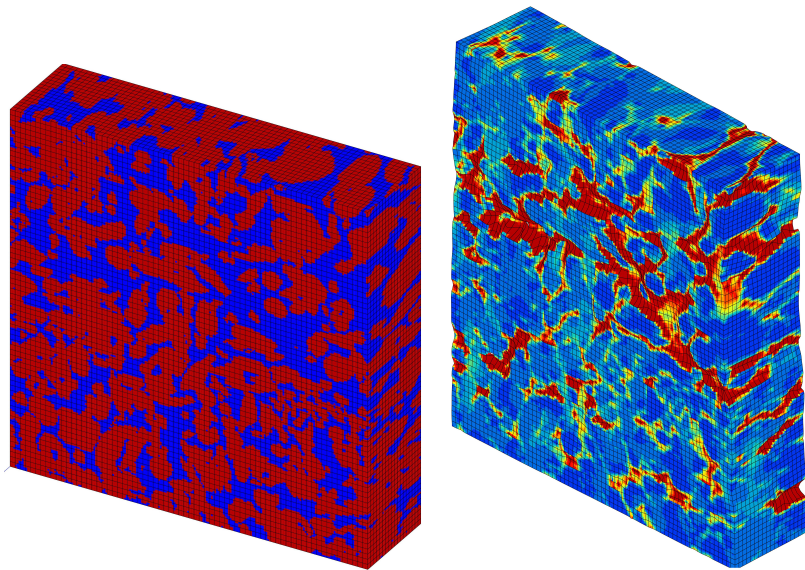
Matériau B

microscopie confocale $250 \times 250 \times 30 \mu m^3$

Influence de la morphologie sur les propriétés élastiques



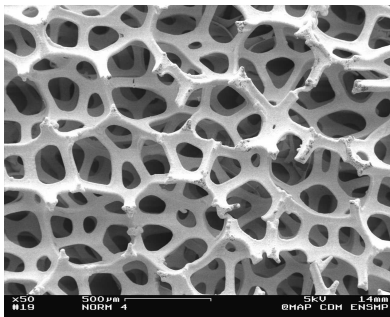
Calcul de microstructures



Matériaux à fort contraste de propriétés

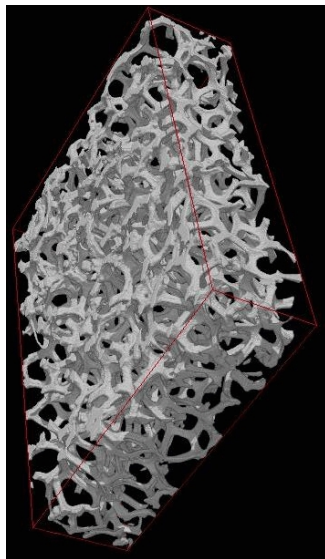
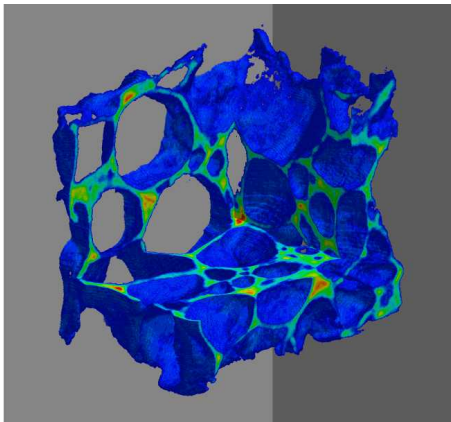


mousse d'aluminium



mousse de nickel

Tomographie aux rayons X



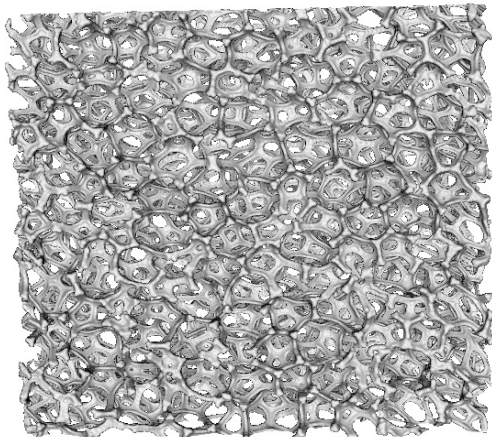
manip

▶ animate

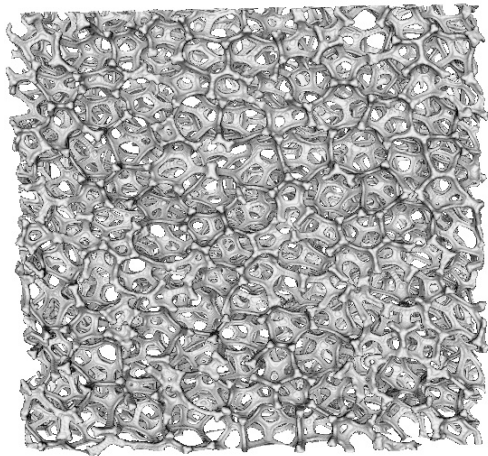
résultat

▶ animate

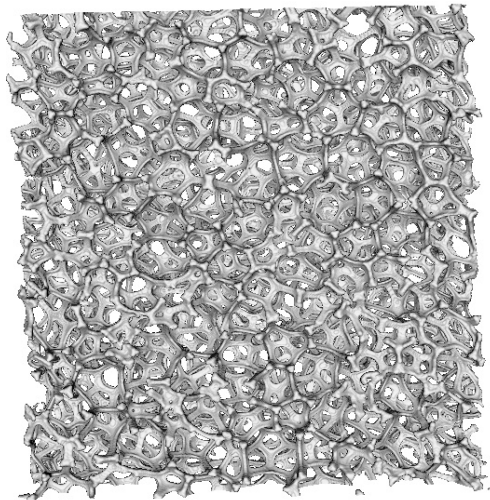
Tomographie aux rayons X in situ



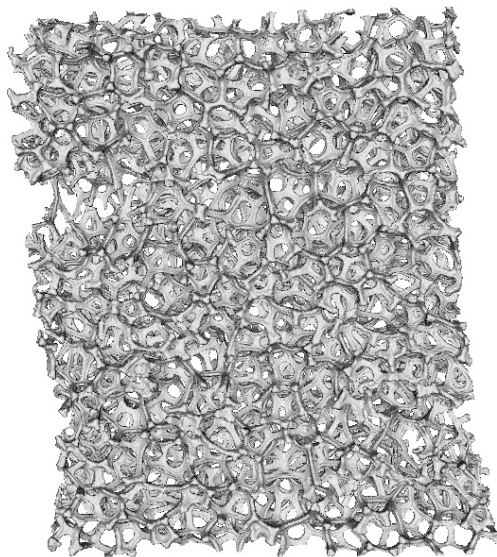
Tomographie aux rayons X in situ



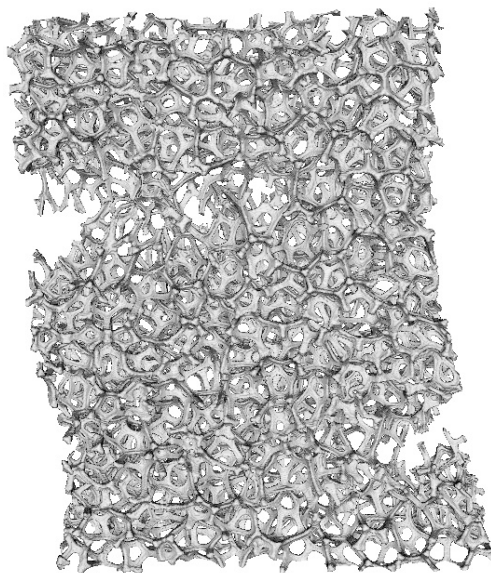
Tomographie aux rayons X in situ



Tomographie aux rayons X in situ



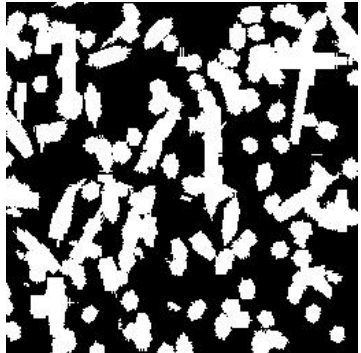
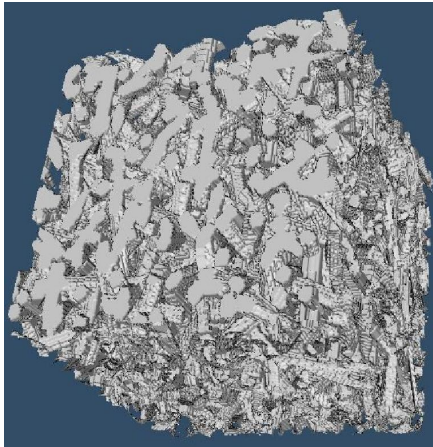
Tomographie aux rayons X in situ



Plan

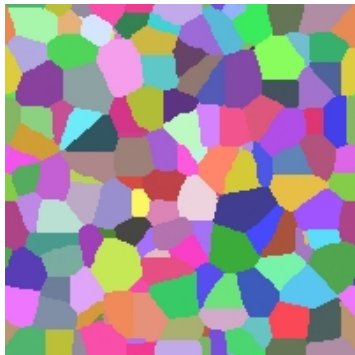
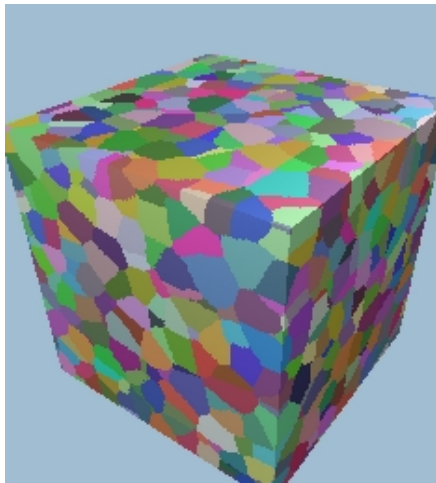
- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Modèles aléatoires pour les matériaux composites



schémas booléens (morphologie mathématique)

Modèles aléatoires pour les polycristaux



Mosaïques de Voronoi

Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Objectifs du calcul de microstructures

- **Comportement mécanique des matériaux hétérogènes**
 - ★ compréhension des mécanismes locaux de déformation et de rupture
 - ★ influence de la morphologie des phases : calcul de VER
 - ★ lien avec les méthodes d'homogénéisation :
 - * tester les estimations disponibles
 - * faire des prédictions avec un minimum d'approximations, en respectant les bornes!
 - * cas des constituants à fort contraste de propriétés
 - ★ informations supplémentaires : variance des champs, dispersion, hétérogénéités locales
- **Calcul de petites structures**
 - ★ mini-éprouvettes, couches minces, matériaux à gros grains, MEMS
 - ★ zones de concentration de contraintes
- **Endommagement des matériaux** gouverné par les valeurs maximales, non par les valeurs moyennes

Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Notion de Milieu Homogène Equivalent

- Contraintes et déformations locales

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \underline{\underline{c}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$$

- Contraintes et déformations globales

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\sigma}} dV = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle, \quad \underline{\underline{E}} = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}} dV = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle$$

- Tenseurs de concentration

si l'on sait résoudre le problème sur V à $\underline{\underline{E}}$ imposé, $\exists \underline{\underline{A}}$ tel que

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \underline{\underline{A}}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}}$$

- Loi de comportement macroscopique

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \langle \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{E}} \rangle = \underline{\underline{C}}^{eff} : \underline{\underline{E}}$$

$$\underline{\underline{C}}^{eff} = \langle \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}} \rangle$$

ce n'est pas la moyenne des modules!

Comment imposer une déformation moyenne à un volume?

- Conditions de déformations homogènes au contour (*kinematic uniform boundary conditions*, KUBC)
- Conditions de contraintes homogènes au contour (*traction uniform boundary conditions*, SUBC)
- Conditions de périodicité
- Conditions mixtes

Conditions de déformations homogènes au contour (KUBC)

$$\underline{\mathbf{u}} = \underline{\tilde{\mathbf{E}}} \cdot \underline{\mathbf{x}}, \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in \partial V, \quad u_i = E_{ij} x_j$$

$$\langle \underline{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \underline{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}} dV = \underline{\tilde{\mathbf{E}}}$$

Preuve (théorème de la divergence) :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{ij} \rangle &= \frac{1}{V} \int_V u_{(i,j)} dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} u_{(i} n_{j)} dS \\ &= E_{(ik} \frac{1}{V} \int_{\partial V} x_k n_{j)} dS = E_{(ik} \frac{1}{V} \int_V x_{k,j)} dV \\ &= E_{(ik} \delta_{kj)} = E_{ij} \end{aligned}$$

Moyenne du travail des forces internes :

$\underline{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}^*$ un champ de contrainte statiquement admissible (à divergence nulle)

$\underline{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}'$ un champ de déformation compatible satisfaisant les conditions aux limites KUBC

$$\langle \underline{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}^* : \underline{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}' \rangle = \underline{\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}} : \underline{\tilde{\mathbf{E}}}$$

où le tenseur de contrainte macroscopique est défini par $\underline{\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}} = \langle \underline{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}^* \rangle$

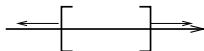
Théorème de la divergence

Stokes, Gauss ...

$$\int_V u_{,i} dV = \int_{\partial V} u n_i dV$$

où $u_{,i} = \frac{\partial u}{\partial x_i}$

$$1D : \int_a^b u'(x) dx = [u]_a^b$$



return

Conditions de contraintes homogènes au contour (SUBC)

$$\underline{\mathbf{t}} = \underline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}} = \underline{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}}, \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in \partial V, \quad t_i = \Sigma_{ij} n_j$$

$$\langle \underline{\boldsymbol{\sigma}} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \underline{\boldsymbol{\sigma}} dV = \underline{\boldsymbol{\Sigma}}$$

Preuve (divergence theorem) :

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{ij} \rangle &= \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} dV = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ik} \delta_{kj} dV = \frac{1}{V} \int_V (\sigma_{ik} x_j)_{,k} dV \\ &= \frac{1}{V} \int_{\partial V} \sigma_{ik} x_j n_k dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \Sigma_{ik} x_j n_k dS = \Sigma_{ij} \end{aligned}$$

Moyenne du travail des forces internes :

$\underline{\boldsymbol{\sigma}}^*$ un champ de contrainte statiquement admissible (à divergence nulle)
et satisfaisant les conditions aux limites SUBC

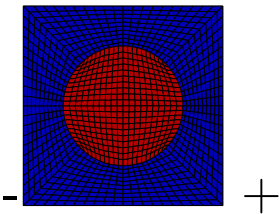
$\underline{\boldsymbol{\epsilon}}'$ un champ de déformation compatible

$$\langle \underline{\boldsymbol{\sigma}}^* : \underline{\boldsymbol{\epsilon}}' \rangle = \underline{\boldsymbol{\Sigma}} : \underline{\mathbf{E}}$$

où la déformation macroscopique est définie par $\underline{\mathbf{E}} = \langle \underline{\boldsymbol{\epsilon}}' \rangle$

Conditions de périodicité

$\underline{\underline{u}} = \underline{\underline{\tilde{E}}} \cdot \underline{\underline{x}} + \underline{\underline{v}}$ où $\underline{\underline{v}}$ est une fluctuation périodique



$$\underline{\underline{v}}(\underline{\underline{x}}^+) = \underline{\underline{v}}(\underline{\underline{x}}^-), \quad \underline{\underline{u}}(\underline{\underline{x}}^+) - \underline{\underline{u}}(\underline{\underline{x}}^-) = \underline{\underline{\tilde{E}}} \cdot (\underline{\underline{x}}^+ - \underline{\underline{x}}^-)$$

$\Rightarrow \underline{\underline{u}}$ n'est pas périodique!!!

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}^-) \cdot \underline{\underline{n}}^- = -\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}^+) \cdot \underline{\underline{n}}^+, \quad (\underline{\underline{n}}^- = -\underline{\underline{n}}^+)$$

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{\underline{\tilde{E}}}$$

Preuve : $\langle v_{i,j} \rangle = \frac{1}{V} \int_V v_{i,j} dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} v_i n_j dS = 0$

Moyenne du travail des forces internes :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{\tilde{E}}}$$

où la déformation macroscopique est définie par

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle$$

Exemple

calculer les propriétés effectives élastique d'un composite dans l'approximation périodique...

propriétés locales

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix}$$

propriétés effectives

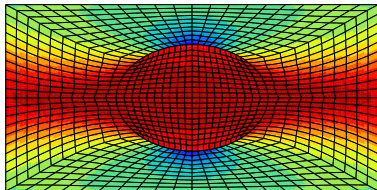
$$\begin{bmatrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{33} \\ \Sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ 2E_{12} \end{bmatrix}$$

Extension simple

imposer $\langle \underline{\varepsilon} \rangle$, calculer $\langle \underline{\sigma} \rangle$...

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

KUBC



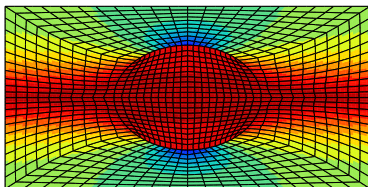
$$\Sigma_{11} = C_{11}$$

$$\Sigma_{22} = C_{12}$$

$$\Sigma_{33} = C_{13}$$

$$\Sigma_{12} = 0$$

conditions de périodicité



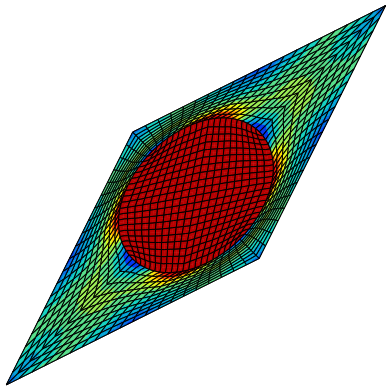
Cisaillement simple

$$\tilde{\mathbf{E}} = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

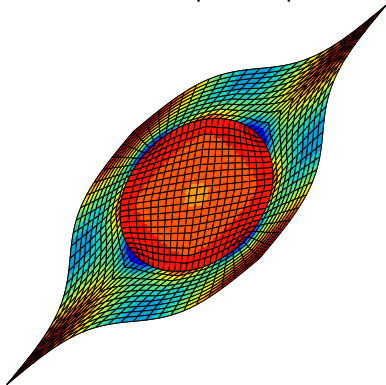
$$\Sigma_{11} = \Sigma_{22} = \Sigma_{33} = 0$$

$$\Sigma_{12} = C_{44}$$

conditions homogènes au
contour



conditions périodiques



Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Elasticité non linéaire

- potentiel d'élasticité local convexe

$$\underline{\sigma} = W'(\underline{\varepsilon}) = \frac{\partial W}{\partial \underline{\varepsilon}}$$

- potentiel d'élasticité global convexe

$$\underline{\Sigma} = W^{eff'}(\underline{\mathbf{E}}) = \frac{\partial W^{eff}}{\partial \underline{\mathbf{E}}}$$

- potentiel dual local convexe

$$\underline{\varepsilon} = W^{*'}(\underline{\sigma}) = \frac{\partial W^*}{\partial \underline{\sigma}}$$

$$W^*(\underline{\sigma}) = \max_{\underline{\varepsilon}} (\underline{\sigma} : \underline{\varepsilon} - W(\underline{\varepsilon}))$$

- potentiel dual global convexe

$$\underline{\mathbf{E}} = \frac{\partial W^{eff*}}{\partial \underline{\Sigma}}$$

Théorème de l'énergie potentielle

problème aux limites

$$\operatorname{div} \underline{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\mathbf{f}} = 0$$

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}} = W'(\underline{\boldsymbol{\varepsilon}})$$

$$\underline{\mathbf{u}} = \underline{\mathbf{u}}^d \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in \partial V$$

Le théorème de l'énergie potentielle stipule alors que la solution $\underline{\mathbf{u}}$ sur V minimise l'énergie potentielle $\mathcal{F}$:

$$\mathcal{F}(\underline{\mathbf{u}}') = \int_V (W(\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}') - \underline{\mathbf{f}} \cdot \underline{\mathbf{u}}') dV$$

par rapport aux champs de déplacement cinématiquement admissibles $\underline{\mathbf{u}}'$. On dit que $\underline{\mathbf{u}}'$ est cinématiquement admissible s'il vérifie les conditions aux limites $\underline{\mathbf{u}} = \underline{\mathbf{u}}^d$ sur ∂V

Conséquence du théorème de l'énergie potentielle

conditions aux limites homogènes au contour en déformation

$$\underline{\mathbf{u}}^d = \underline{\mathbf{E}} \cdot \underline{\mathbf{x}} \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in \partial V$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\mathbf{c}}} : \underline{\underline{\varepsilon}} dV &= \frac{1}{2} \int_V \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} dV = V \frac{1}{2} \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{\mathbf{E}}} = \frac{1}{2} V \underline{\underline{\mathbf{E}}} : \underline{\underline{\mathbf{C}}} : \underline{\underline{\mathbf{E}}} \\ &\leq \frac{1}{2} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}}' : \underline{\underline{\mathbf{c}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}' dV \end{aligned}$$

fonction test

$$\underline{\mathbf{u}}' = \underline{\mathbf{E}} \cdot \underline{\mathbf{x}} \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in V$$

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}} : \underline{\underline{\mathbf{C}}} : \underline{\underline{\mathbf{E}}} \leq \underline{\underline{\mathbf{E}}} : \langle \underline{\underline{\mathbf{c}}} \rangle : \underline{\underline{\mathbf{E}}}, \quad \forall \underline{\underline{\mathbf{E}}}$$

borne supérieure de Voigt pour les propriétés effectives

Théorème de l'énergie complémentaire

problème aux limites

$$\operatorname{div} \underline{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\mathbf{f}} = 0$$

$$\underline{\varepsilon} = W^{*'}(\underline{\boldsymbol{\sigma}})$$

$$\underline{\mathbf{T}} = \underline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}} = \underline{\mathbf{T}}^d \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in \partial V$$

La solution en contrainte $\underline{\boldsymbol{\sigma}}$ minimise alors la fonctionnelle :

$$\mathcal{F}^*(\underline{\boldsymbol{\sigma}}^*) = \int_V W^*(\underline{\boldsymbol{\sigma}}^*) dV$$

pour tout champ de contrainte $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^*$ statiquement admissible (i.e. autoéquilibré ($\operatorname{div} \underline{\boldsymbol{\sigma}}^* + \underline{\mathbf{f}} = 0$) et vérifiant les conditions aux limites $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^* \cdot \underline{\mathbf{n}} = \underline{\mathbf{T}}^d$)

Conséquence du théorème de l'énergie complémentaire

conditions aux limites homogènes au contour en contraintes

$$\underline{\mathbf{T}}^d = \underline{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \underline{\mathbf{x}} \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in \partial V$$

$$\frac{1}{2} \int_V \underline{\boldsymbol{\sigma}} : \underline{\mathbf{s}} : \underline{\boldsymbol{\sigma}} dV = \frac{1}{2} V \underline{\boldsymbol{\Sigma}} : \underline{\mathbf{S}} : \underline{\boldsymbol{\Sigma}} \leq \frac{1}{2} \int_V \underline{\boldsymbol{\sigma}}^* : \underline{\mathbf{s}} : \underline{\boldsymbol{\sigma}}^* dV$$

fonction test

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}}^* = \underline{\boldsymbol{\Sigma}}$$

$$\underline{\boldsymbol{\Sigma}} : \underline{\mathbf{S}} : \underline{\boldsymbol{\Sigma}} \leq \underline{\boldsymbol{\Sigma}} : \langle \underline{\mathbf{s}} \rangle : \underline{\boldsymbol{\Sigma}}, \quad \forall \underline{\boldsymbol{\Sigma}}$$

borne inférieure de Reuss

Application à l'élasticité linéaire isotrope

- bornes pour le module de cisaillement

$$\langle \frac{1}{\mu} \rangle^{-1} \leq \mu^{eff} \leq \langle \mu \rangle$$

$$\langle \mu \rangle = f\mu_1 + (1-f)\mu_2, \quad \langle \frac{1}{\mu} \rangle = f\frac{1}{\mu_1} + (1-f)\frac{1}{\mu_2}$$

- bornes pour le module de compressibilité

$$\langle \frac{1}{k} \rangle^{-1} \leq k^{eff} \leq \langle k \rangle$$

- bornes non optimales pour le module d'Young

$$\langle E^{-1} \rangle^{-1} \leq E^h \leq \left(\frac{1}{3} \langle \mu \rangle^{-1} + \frac{1}{9} \langle k^{-1} \rangle \right)^{-1}$$

Bornes de Hashin/Shtrikman en élasticité isotrope

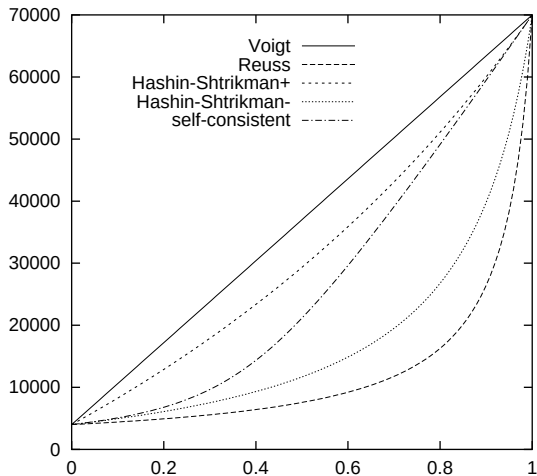
hypothèse supplémentaire : répartition isotrope des phases
bornes supérieures de HS

$$k^{HS+} = \left(f_1 k_1 + \frac{f_2 k_2}{1 + \alpha_1 \frac{k_2 - k_1}{k_1}} \right) \left(f_1 + \frac{f_2}{1 + \alpha_1 \frac{k_2 - k_1}{k_1}} \right)^{-1}$$

$$\mu^{HS+} = \left(f_1 \mu_1 + \frac{f_2 \mu_2}{1 + \beta_1 \frac{\mu_2 - \mu_1}{\mu_1}} \right) \left(f_1 + \frac{f_2}{1 + \beta_1 \frac{\mu_2 - \mu_1}{\mu_1}} \right)^{-1}$$

$$\alpha = \frac{3k}{3k + 4\mu}, \quad \beta = \frac{6(k + 2\mu)}{5(3k + 4\mu)}$$

Fuseau de Hill



mélange isotrope de deux phases isotropes et incompressibles
($\mu_1 = 70000\text{MPa}$ et $\mu_2 = 4000\text{MPa}$)

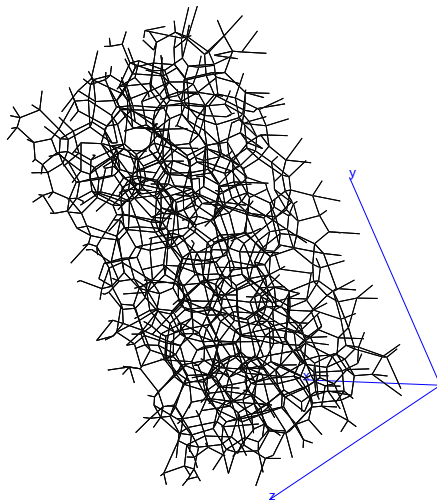
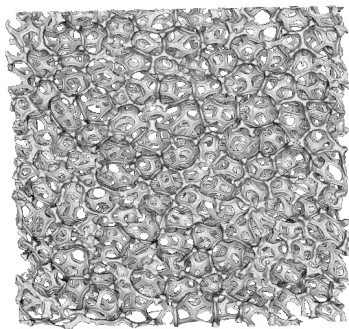
Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Plan

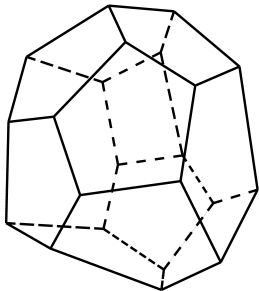
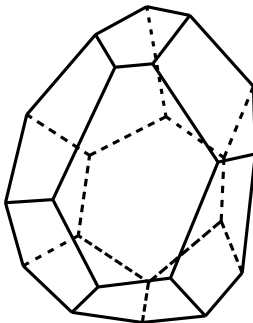
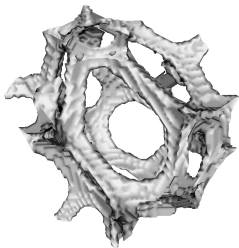
- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Maillage de microstructures (1)

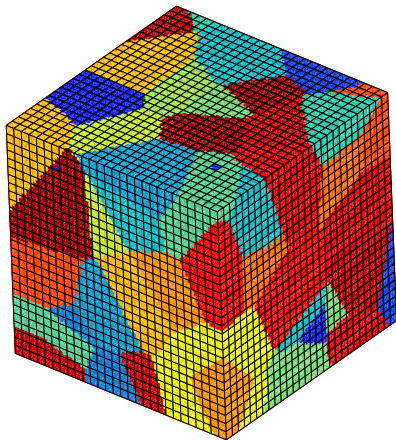


réseaux de poutres

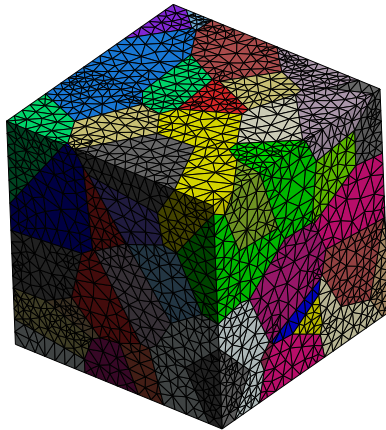
Morphologie des cellules d'une mousse



Maillage de microstructures (2)



éléments multiphasés



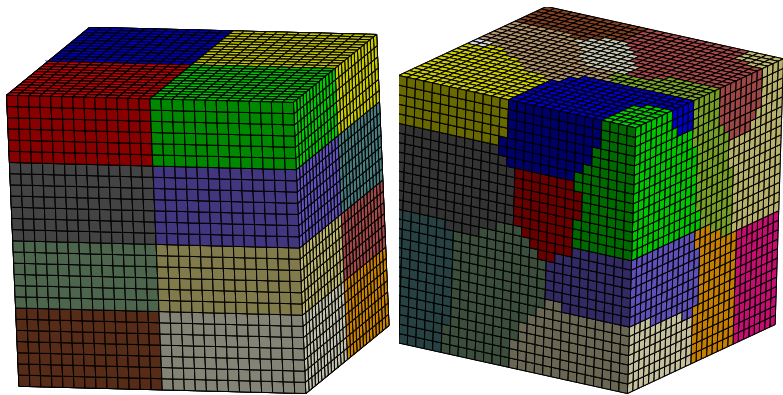
maillage libre

Calcul parallèle (1)



64 PC bipro
Pentium IV
768 Mo
30 Go

Calcul parallèle (2)

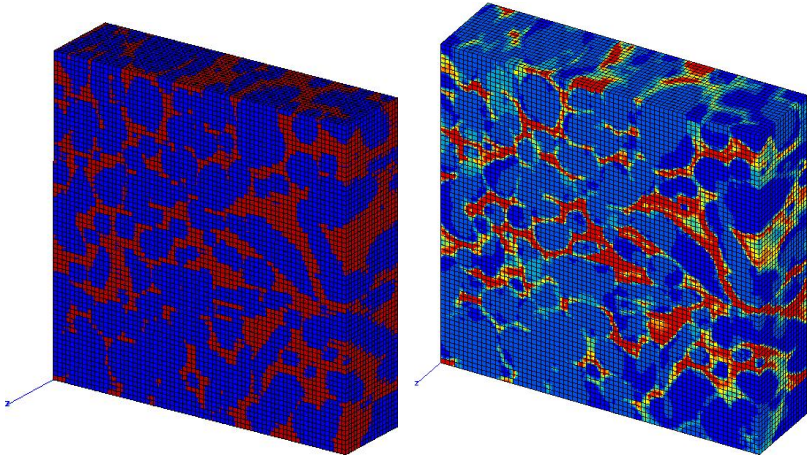


Méthode de décomposition de domaine

Plan

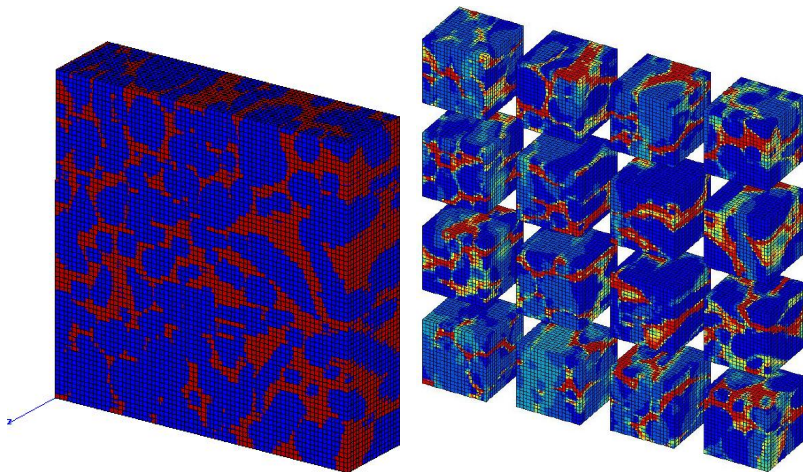
- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Propriétés apparentes, propriétés effectives (1)



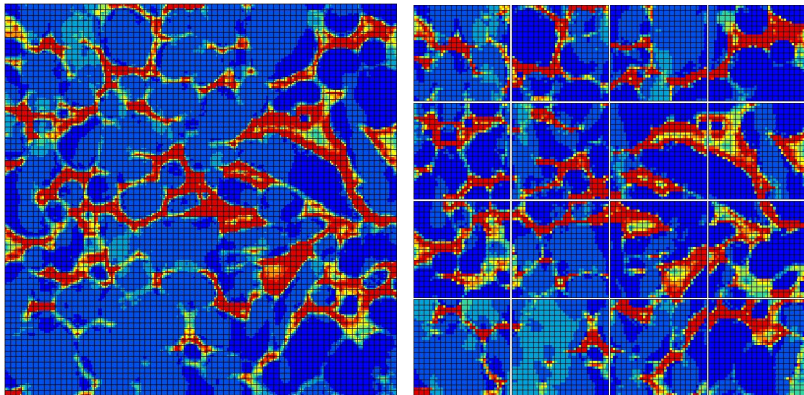
Calcul du module d'Young apparent en SUBC pour un volume de microstructure : $\tilde{\mathbf{C}}_{SUBC}^{app}$

Propriétés apparentes, propriétés effectives (2)



Calcul du module d'Young apparent en SUBC pour un volume de microstructure et pour une partition du volume en 16 sous-volumes

Propriétés apparentes, propriétés effectives (3)



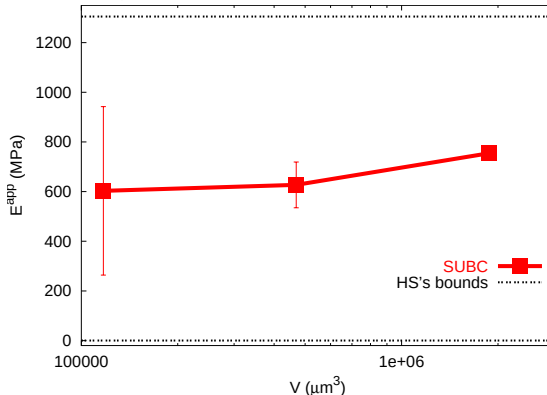
Calcul du module d'Young apparent en SUBC pour un volume de microstructure et pour une partition du volume en 16 sous-volumes

Propriétés apparentes, propriétés effectives (4)

Premier théorème de Huet :

$$\overline{\underset{\sim}{\mathbf{C}}}_{SUBC}^{app} \leq \underset{\sim}{\mathbf{C}}_{SUBC}^{app}$$

$$\text{avec } \overline{\underset{\sim}{\mathbf{C}}}_{SUBC}^{app} = \frac{1}{n} \sum_{i=1,n} \underset{\sim}{\mathbf{C}}_{SUBC}^{app,i}$$



Propriétés apparentes, propriétés effectives (5)

Premier théorème de Huet :

$$\overline{\mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app}} \leq \mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app} \leq \mathfrak{C}_{\approx KUBC}^{app} \leq \overline{\mathfrak{C}_{\approx KUBC}^{app}}$$

$$\text{avec } \overline{\mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1,n} \mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app,i}$$

Propriétés apparentes, propriétés effectives (6)

Premier théorème de Huet :

$$\overline{\mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app}} \leq \mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app} \leq \mathfrak{C}_{\approx KUBC}^{app} \leq \overline{\mathfrak{C}_{\approx KUBC}^{app}}$$

avec $\overline{\mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1,n} \mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app,i}$

Second théorème de Huet :

$$\overline{\mathfrak{C}_{\approx SUBC}^{app}} \leq \mathfrak{C}_{\approx}^{eff} \leq \overline{\mathfrak{C}_{\approx KUBC}^{app}}$$

Vers une définition du VER

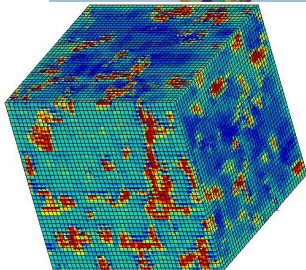
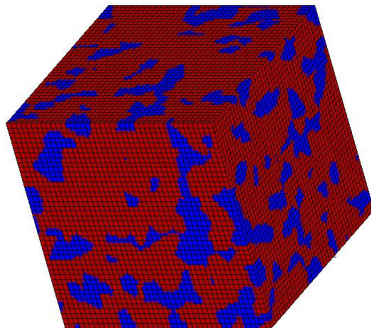
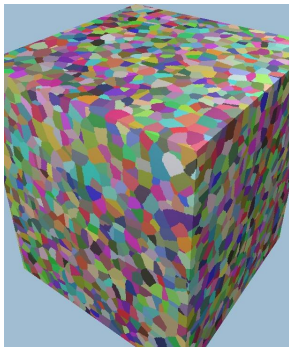
- ❶ “sufficiently large, sufficiently small...” $l \ll l_{RVE} \ll L_\omega$
- ❷ les propriétés apparentes ne dépendent plus du type de conditions aux limites appliquées au volume (définition déterministe) [Sab, 1992]
- ❸ *“the smallest material volume element of the composite for which the usual spatially constant “overall modulus” macroscopic constitutive representation is a sufficiently accurate model to represent the mean constitutive response”*

[Drugan, Willis, 1996]
- ❹ question pratique : peut-on estimer les propriétés effectives en calculant sur des volumes plus petits que la taille déterministe du VER?
 $\Rightarrow$ oui, avec une approche statistique [Kanit et al., 2003]

Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Mosaïques de Voronoi



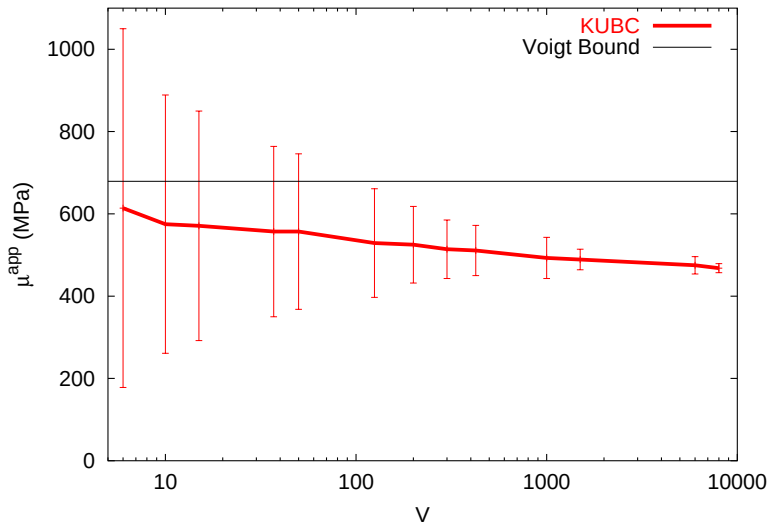
phase dure : $E = 2500$ MPa, $\nu = 0.3$

$\lambda = 2.44$ W/mK,

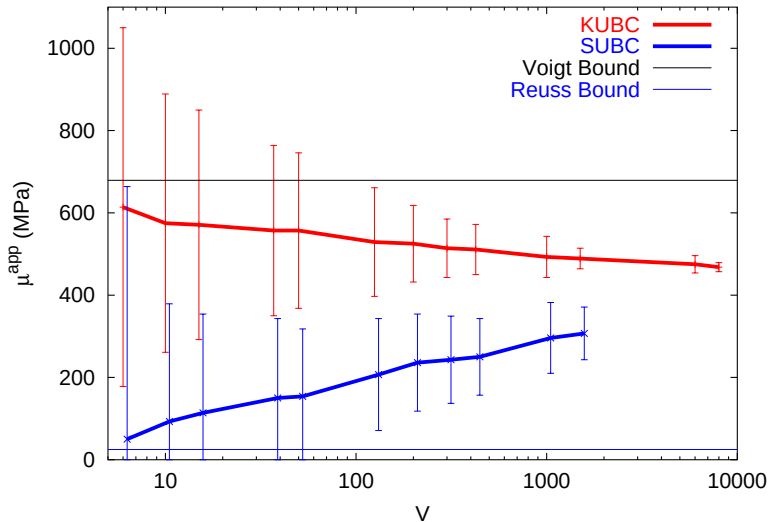
phase molle : $E = 25$ MPa, $\nu = 0.49$

$\lambda = 0.0244$ W/mK,

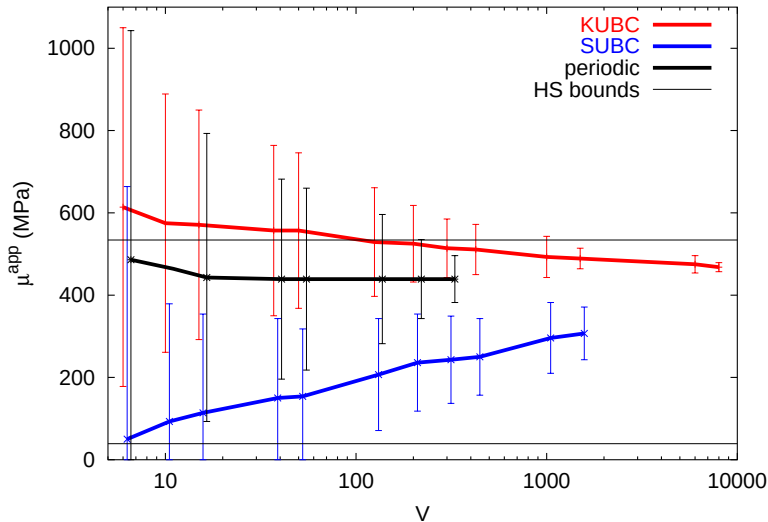
Module de cisailment



Module de cisailment



Module de cisailment



VER et portée intégrale

$Z(x)$ une variable aléatoire (fraction volumique, module d'Young...)

La variance $D_Z^2(V)$ de la propriété apparente Z pour un volume V est de la forme

$$D_Z^2(V) = D_Z^2 \frac{A_3}{V}$$

où D_Z^2 est la variance locale (ponctuelle) de Z :

$$D_Z^2 = P(1 - P) \text{ pour la fraction volumique } (Z = P)$$

$$D_\mu^2 = P(1 - P)(\mu_1 - \mu_2)^2 \text{ pour un biphasé}$$

et A_3 s'appelle *portée intégrale*

Pour la fraction volumique ($Z = P$) et les mosaïques de Voronoi,
 $A_3 = 1.18$

[Gilbert, 1962]

Définition statistique du VER

Pour un nombre suffisant de réalisations n , la propriété apparente moyenne $\bar{Z}$ est dans l'intervalle de confiance

$$Z^{eff} \pm \frac{2D_Z(V)}{\sqrt{n}}$$

La précision relative sur la moyenne est donc (théorie de l'échantillonnage) The relative precision on the mean is therefore :

$$\epsilon_{rel} = \frac{2D_Z(V)}{\sqrt{n}Z^{eff}} = \frac{2D_Z\sqrt{(\frac{A_3}{V})^\alpha}}{\sqrt{n}Z^{eff}}$$

Pour une précision donnée et un nombre de réalisations, la taille du VER est définie par

$$V_{RVE} = A_3 \left(\frac{4D_Z^2}{n\epsilon_{rel}^2 Z^{eff}} \right)$$

Taille de VER pour les mosaïques de Voronoi

ϵ_{rel} (%)	μ	k	λ	P
1	71253	13340	5504	2000
5	2850	534	220	80

V_{RVE} pour $n = 10$, conditions aux limites périodiques

$$V_{RVE}(\mu) > V_{RVE}(k) > V_{RVE}(\lambda) > V_{RVE}(P)$$

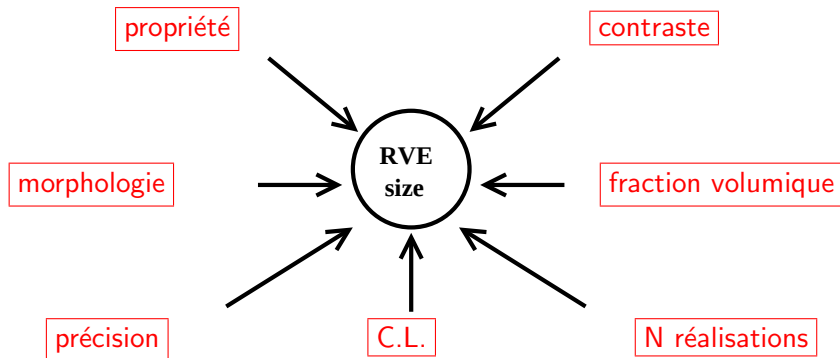
$$V_{RVE}(1\%) > V_{RVE}(5\%)$$

ϵ_{rel} (%)	μ	λ	k	P
1	1300	765	400	150
5	52	30	16	6

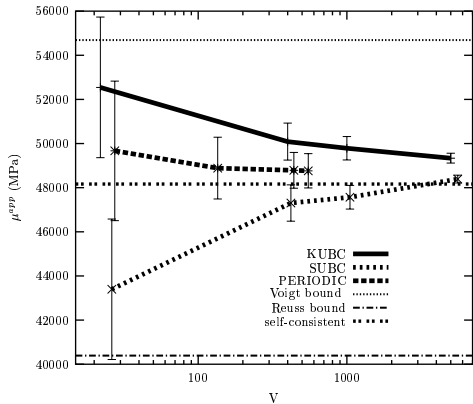
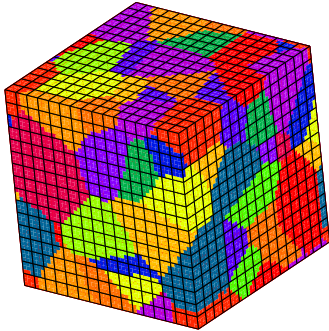
Nombre de réalisations pour V (*sans biais*) = 125, conditions aux limites périodiques

$$n_{\mu} > n_{\lambda} > n_k > n_P$$

La taille de VER dépend de ...



VER pour le polycristal de cuivre isotrope

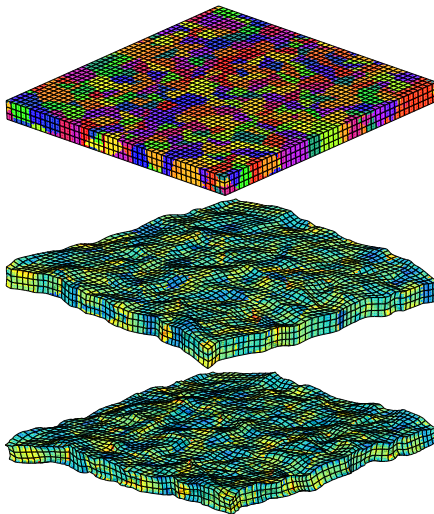


$$C_{11} = 168400 \text{ MPa}, \quad C_{12} = 121400 \text{ MPa}, \quad C_{44} = 75390 \text{ MPa}, \quad a = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) = 3.2$$

$$D_{\mu}^2 = \langle (\mathbf{c} : \mathbf{c})_{1212} \rangle - \langle c_{1212} \rangle^2, \quad \langle c_{1212} \rangle = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})$$

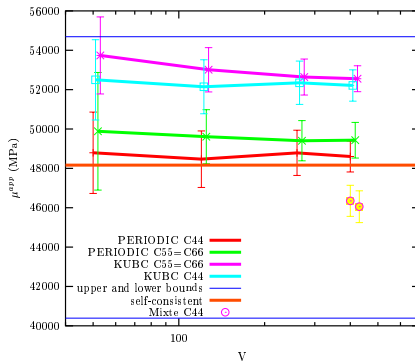
$$\langle (\mathbf{c} : \mathbf{c})_{1212} \rangle = \frac{1}{35}(-6C_{44}C_{12} - 4C_{12}C_{11} + 2C_{12}^2 + 2C_{11}^2 + 6C_{11}C_{44} + 15C_{44}^2)$$

VER et couches minces



C.L. périodiques ou mixtes

calculs avec un grain dans l'épaisseur...



... mais trois grains dans l'épaisseur suffisent!

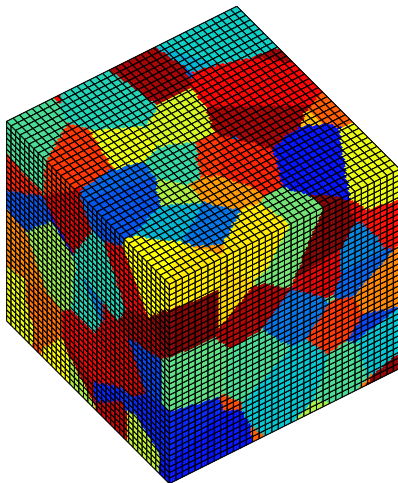
Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

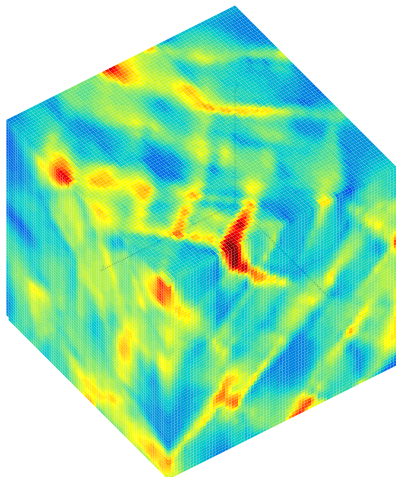
Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Polycristaux élastoplastiques

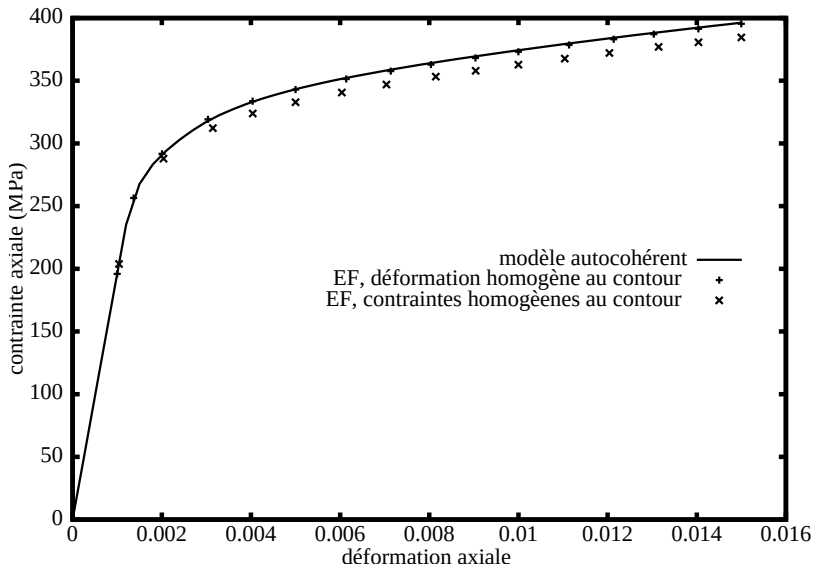


RVE for the polycrystal

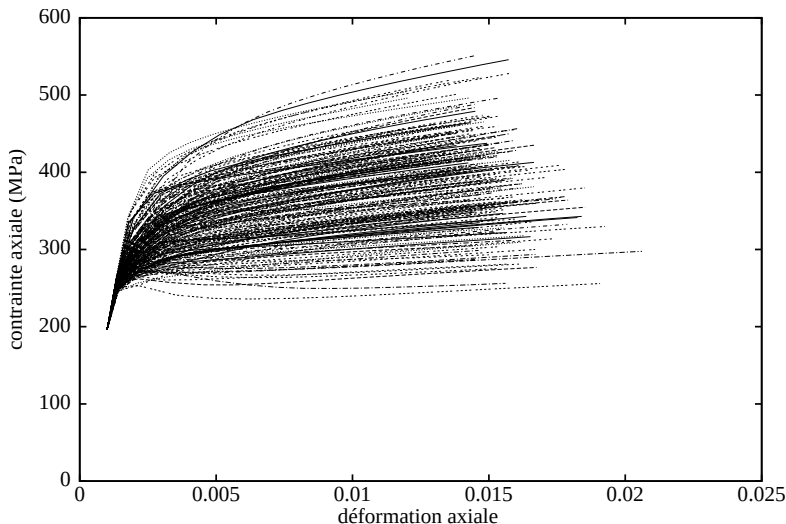


déformation plastique cumulée

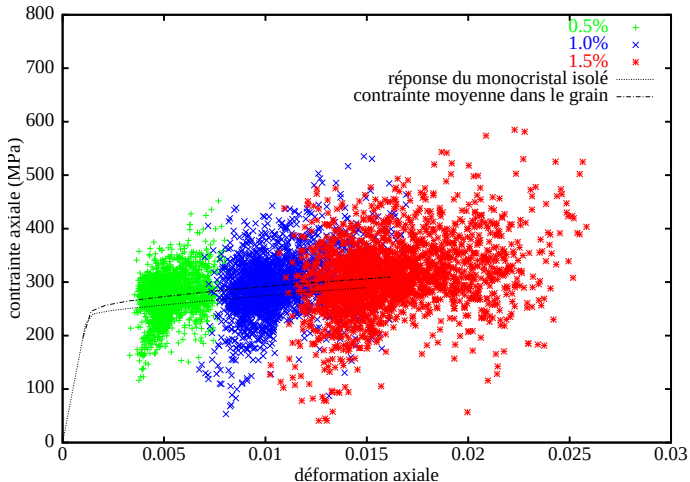
Agrégats polycristallins : échelle macroscopique



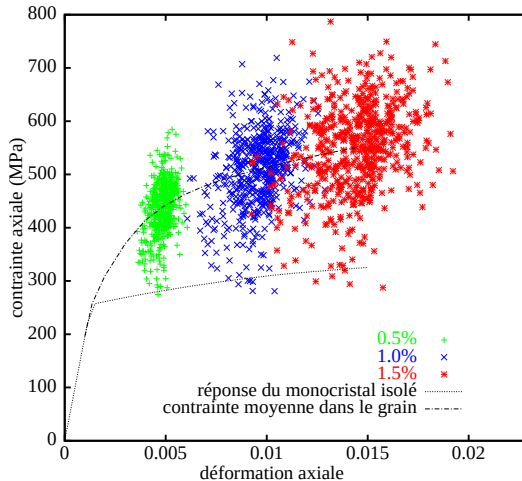
Agrégats polycristallins : réponse moyenne par grain



Agrégats polycristallins : échelle intragranulaire, grain 1



Agrégats polycristallins : échelle intragranulaire, grain 2



Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Ingrédients des schémas simplifiés de l'homogénéisation

- Grandeurs macroscopiques

$$\underline{\underline{\Sigma}}, \underline{\underline{E}}, \underline{\underline{E}}^p$$

- Grandeurs moyennes par phase

$$\underline{\underline{\sigma}}^g, \underline{\underline{\varepsilon}}^{pg}, \gamma^{sg}$$

- Modèle de Taylor

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{pg} = \underline{\underline{E}}^p \implies \underline{\underline{\sigma}}^g \neq \underline{\underline{\Sigma}}$$

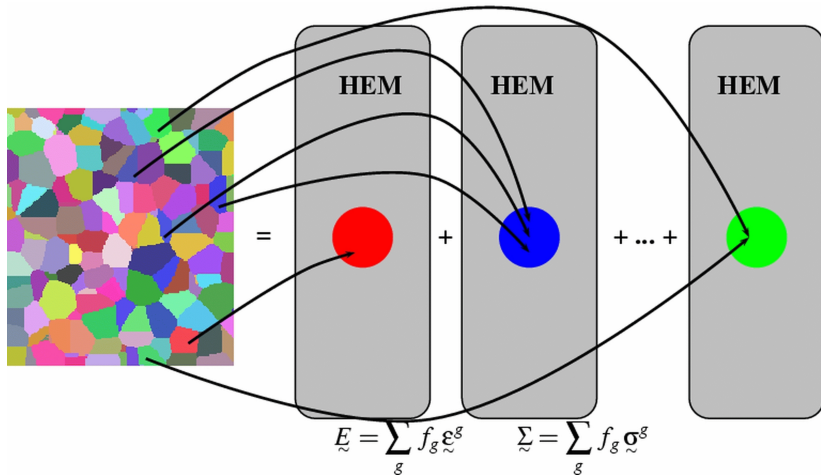
- Modèle statique

$$\underline{\underline{\sigma}}^g = \underline{\underline{\Sigma}} \implies \underline{\underline{\varepsilon}}^{pg} \neq \underline{\underline{E}}^p$$

- Estimations autocohérentes

$$\underline{\underline{\sigma}}^g \neq \underline{\underline{\Sigma}}, \quad \underline{\underline{\varepsilon}}^{pg} \neq \underline{\underline{E}}^p$$

Schéma autocohérent



Règles de changement d'échelle

- approximations sécantes, tangentes

$$\dot{\tilde{\Sigma}} = \tilde{\mathbf{L}}^{eff} : \dot{\tilde{\mathbf{E}}}$$

- estimations de Lin, Kröner (proches de Taylor)

$$\dot{\tilde{\sigma}} = \dot{\tilde{\Sigma}} + \mu(\dot{\tilde{\mathbf{E}}}^P - \dot{\tilde{\varepsilon}}^P)$$

- estimation de Berveiller et Zaoui

$$\tilde{\sigma} = \tilde{\Sigma} + \mu\alpha(\tilde{\mathbf{E}}^P - \tilde{\varepsilon}^P)$$

coefficient d'accommodation élastoplastique α variant typiquement de 1 à 0.01

- limitations : élastoviscoplasticité, chargements radiaux et monotones, pas de morphologie réelle, interaction limitée entre grains, estimations des hétérogénéités...

Identification des règles de changement d'échelle

$$\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{\mathbf{E}}^e + \tilde{\mathbf{E}}^p, \quad \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} = \tilde{\mathbf{C}} : \tilde{\mathbf{E}}^e, \quad \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} = \sum_{g=1}^{N_g} f_g \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^g, \quad \dot{\tilde{\mathbf{E}}}^p = \sum_{g=1}^{N_g} f_g \dot{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}}^{pg}$$

$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^g \longrightarrow \dot{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}}^{pg}$ selon les lois de comportement de la plasticité cristalline

un exemple de règle de transition d'échelle paramétrée efficace :

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^g = \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} + C \left(\tilde{\mathbf{B}} - \tilde{\boldsymbol{\beta}}^g \right), \quad \tilde{\mathbf{B}} = \sum_{g=1}^{N_g} f_g \tilde{\boldsymbol{\beta}}^g, \quad \dot{\tilde{\boldsymbol{\beta}}}^g = \dot{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}}^{pg} - D \dot{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}}_{eq}^{pg} \tilde{\boldsymbol{\beta}}^g$$

variables d'accommodation intragranulaire $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ avec une loi d'évolution non linéaire

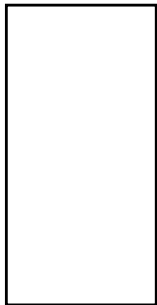
paramètres de changement d'échelle : $C, D \neq$ paramètres matériau

procédure d'identification, approche inverse

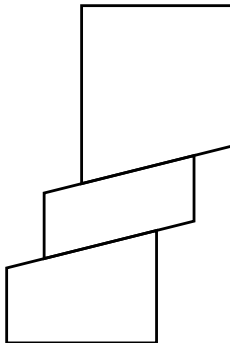
Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

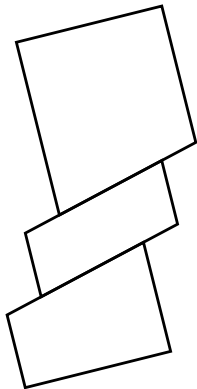
Notion de rotation de réseau cristallin



traction simple

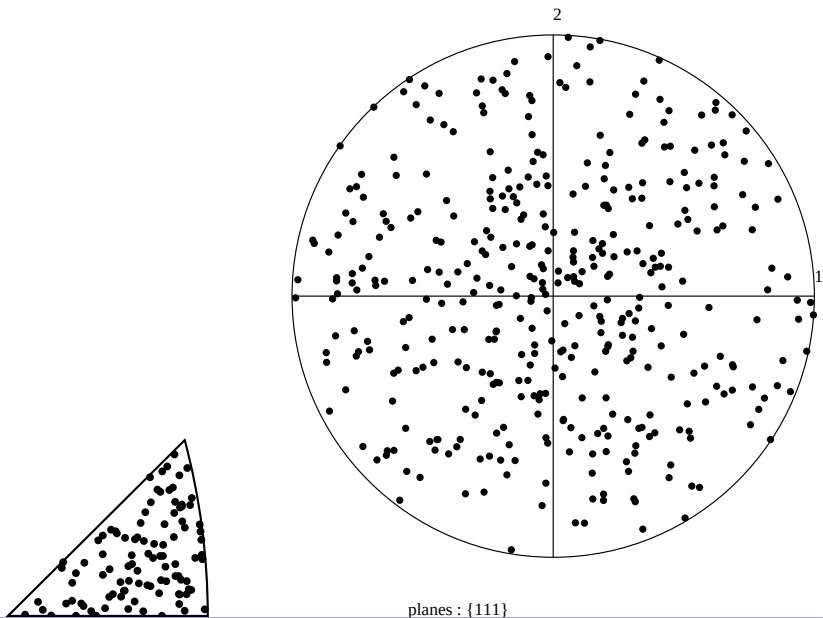


glissement plastique

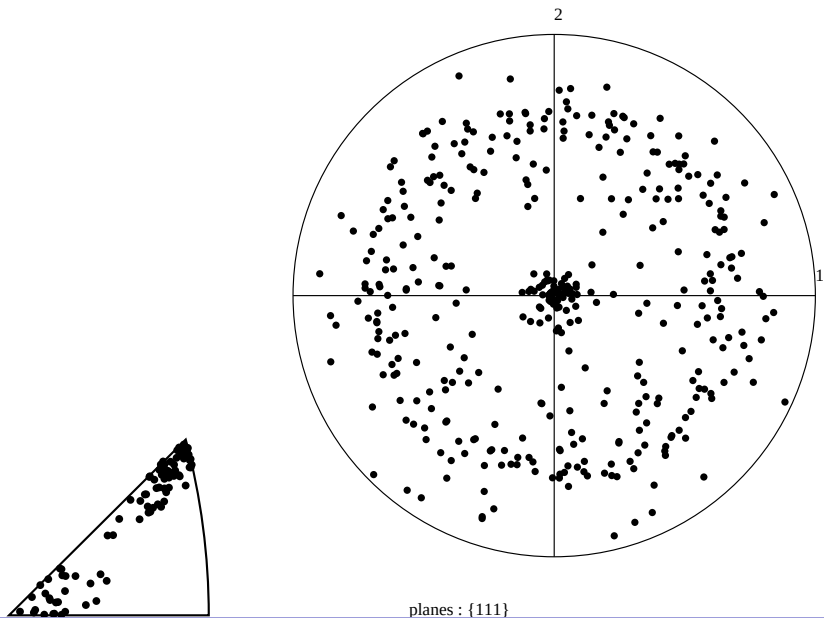


mouvement de corps rigide

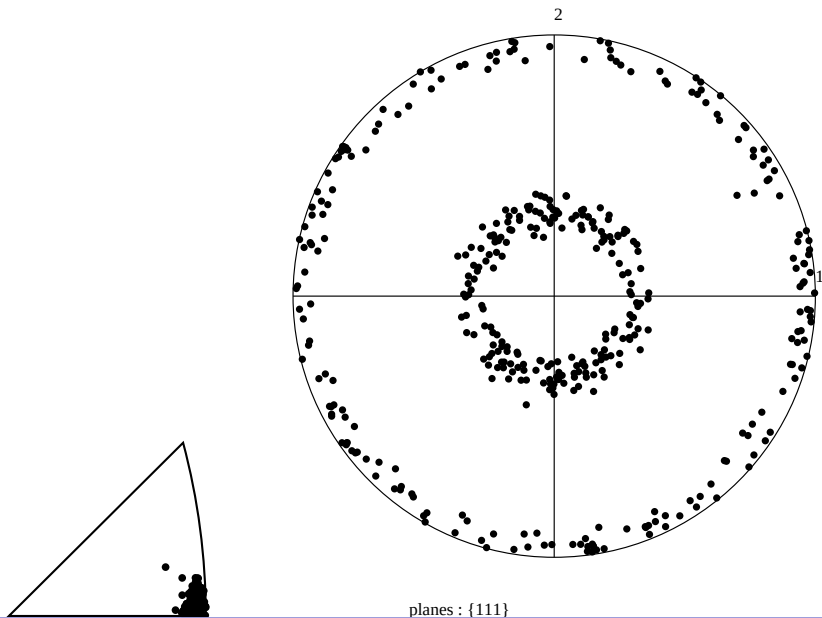
Evolution de texture (C.F.C.)



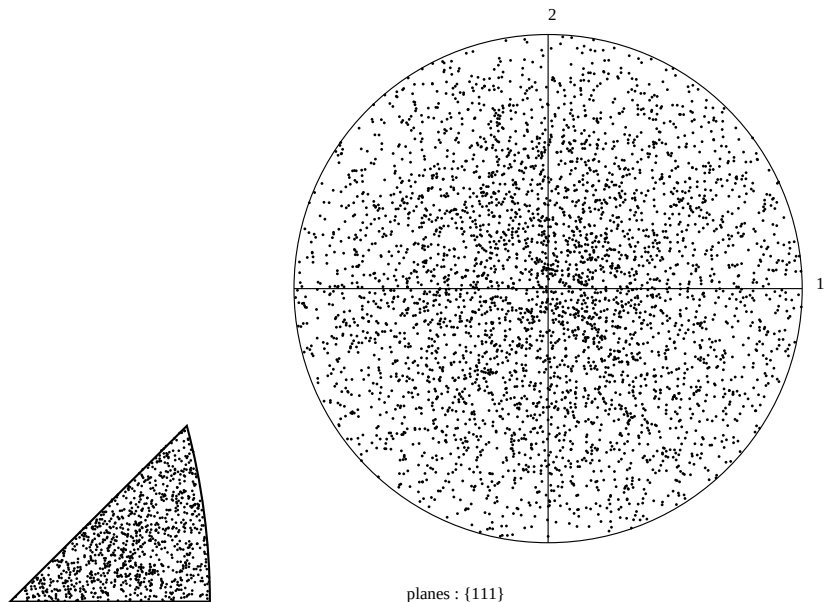
Evolution de texture (C.F.C.) (traction $F_{33} = 1.7$)



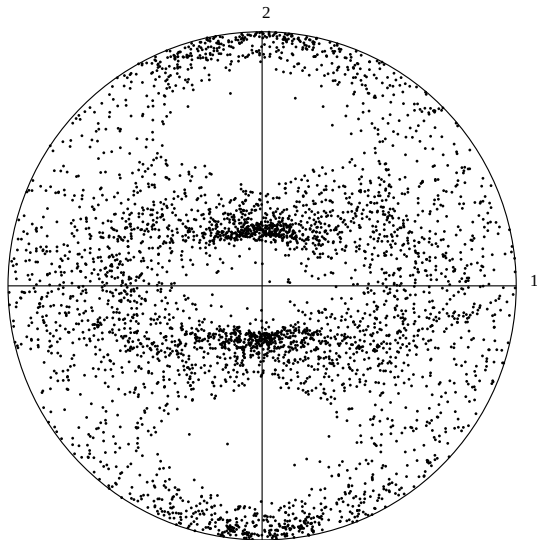
Evolution de texture (C.F.C.) (compression $F_{33} = 0.3$)



Evolution de texture (C.F.C.)

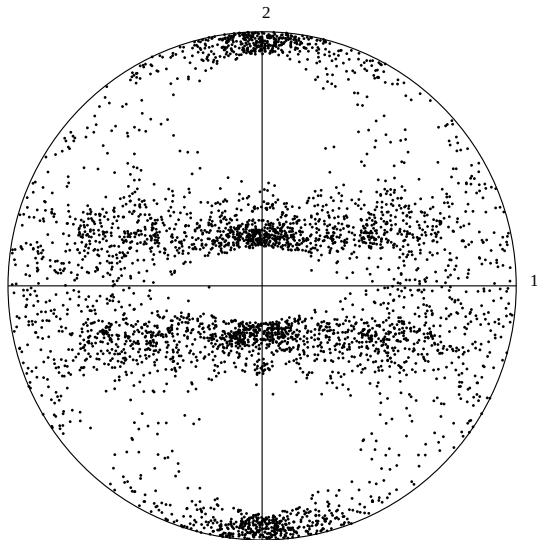


Evolution de texture (C.F.C.) (laminage $F_{33} = 0.66$)



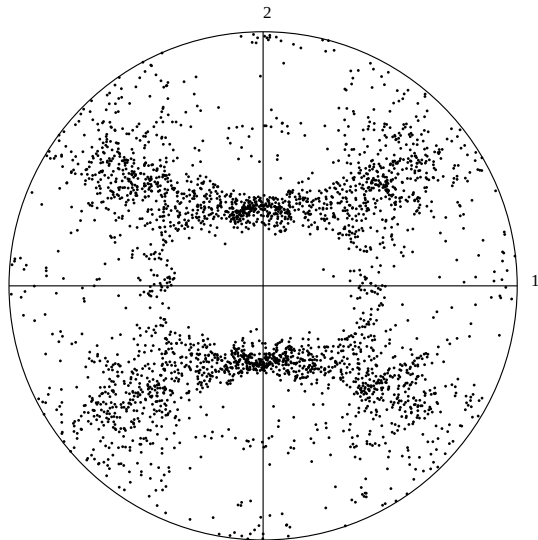
planes : $\{111\}$

Evolution de texture (C.F.C.) (laminage $F_{33} = 0.43$)



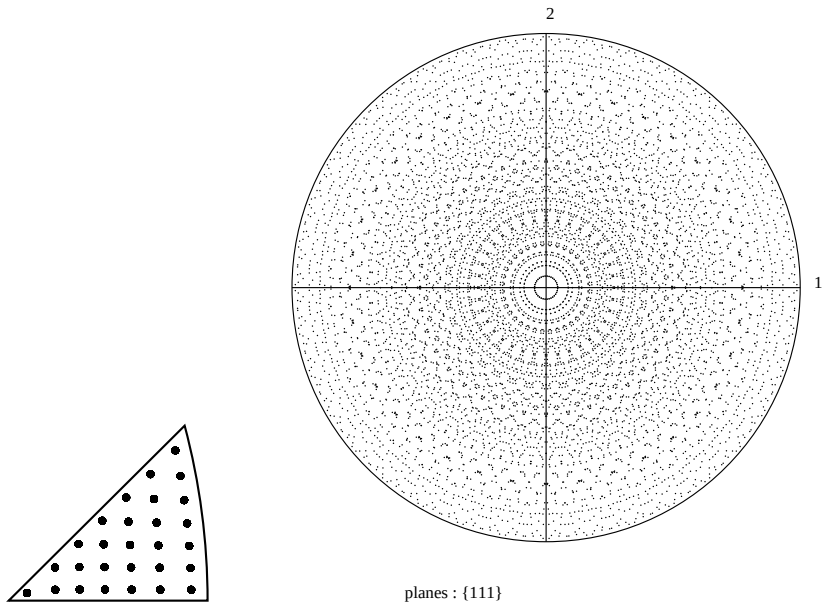
planes : $\{111\}$

Evolution de texture (C.F.C.) (laminage $F_{33} = 0.43$)

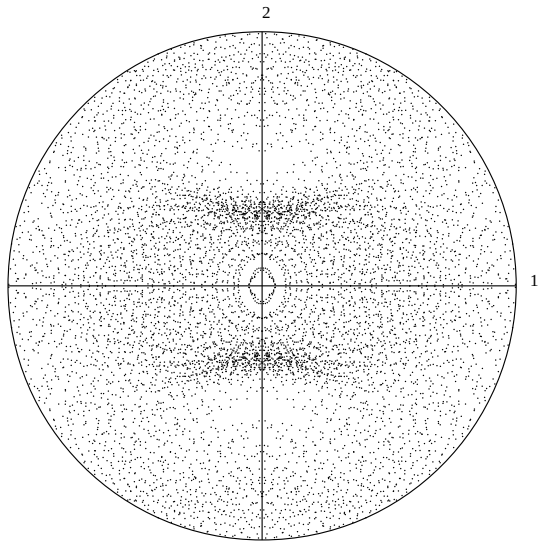


planes : {200}

Evolution de texture (C.F.C.)

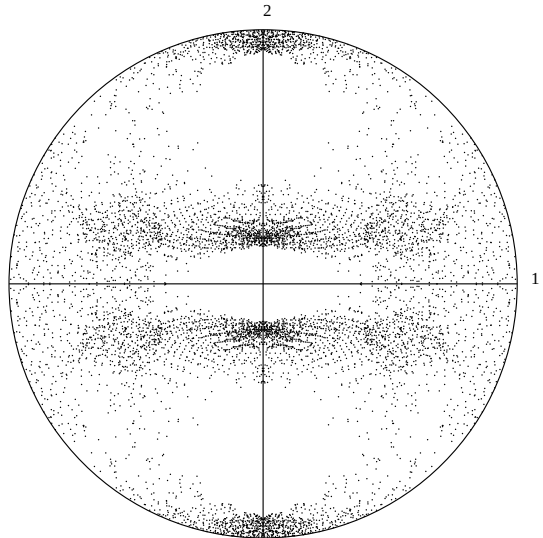


Evolution de texture (C.F.C.) (laminage $F_{33} = 0.88$)



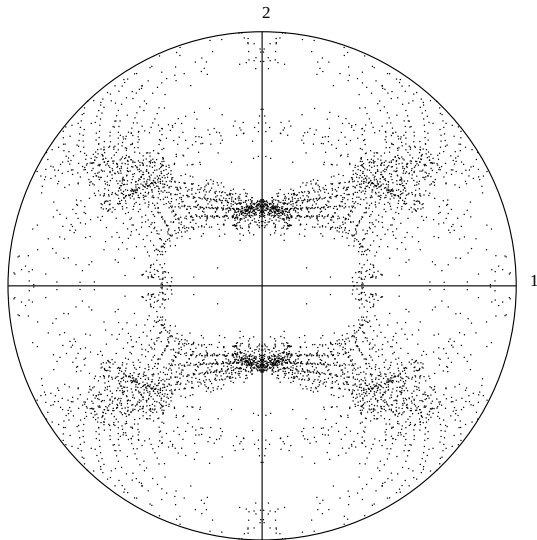
planes : $\{111\}$

Evolution de texture (C.F.C.) (laminage $F_{33} = 0.43$)



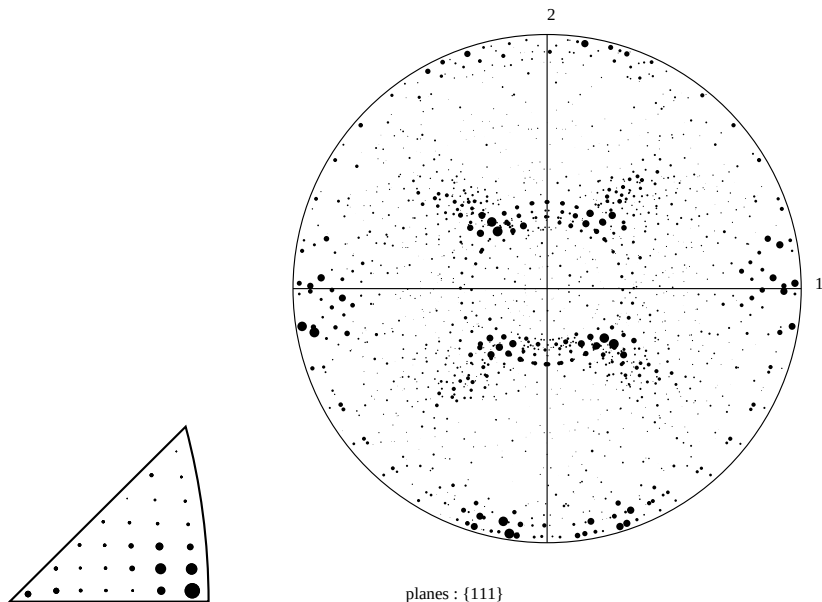
planes : $\{111\}$

Evolution de texture (C.F.C.) (laminage $F_{33} = 0.43$)

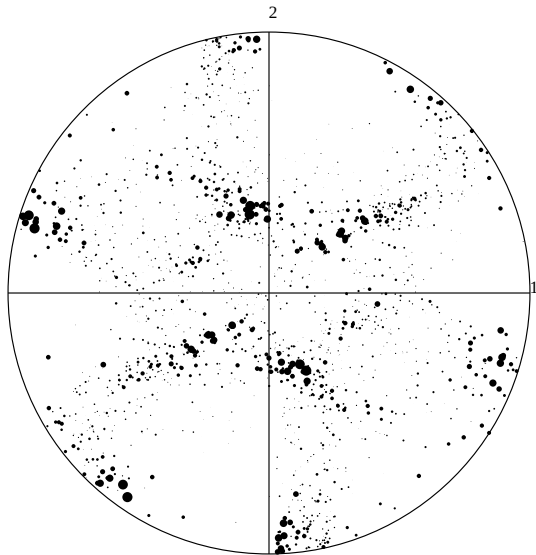


planes : {200}

Evolution de texture (C.F.C.) (matériau anisotrope)

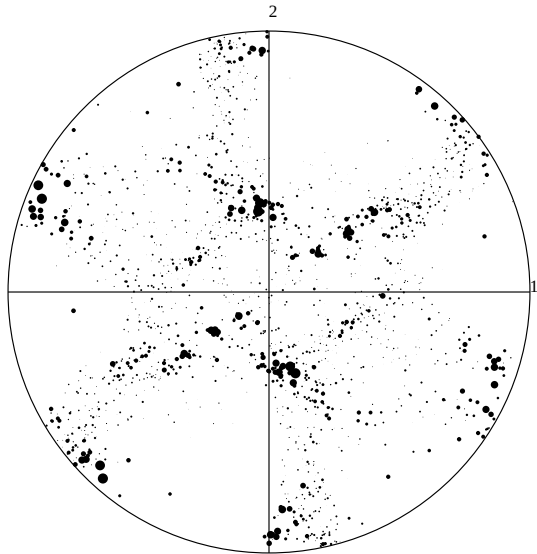


Evolution de texture (C.F.C.) (torsion $F_{12} = 0.55$)



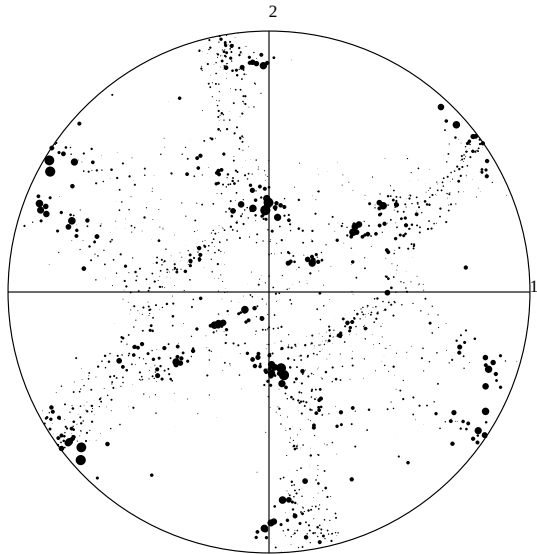
planes : $\{111\}$

Evolution de texture (C.F.C.) (torsion $F_{12} = 0.77$)



planes : $\{111\}$

Evolution de texture (C.F.C.) (torsion $F_{12} = 1.00$)



planes : $\{111\}$

Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Limites de l'homogénéisation classique

- **non séparabilité des échelles** : *structures à gros grains*

$$l < L_{VER} < L_{\omega}$$

la taille des hétérogénéités est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de variation des champs appliqués

- **effet de taille de constituants** : taille de grain, taille de particule, de fibre
la mécanique des milieux continus classique est insensible à la taille absolue des constituants...
- **un remède** : la mécanique des milieu continus généralisés

Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Champ de déplacement local polynomial

MHS de type Cosserat, cellule élémentaire 2D et carrée :

$$\underline{\mathbf{U}}(\underline{\mathbf{x}}) = \langle \underline{\mathbf{u}} \rangle, \quad \underline{\Phi}(\underline{\mathbf{x}}) = \frac{6}{l^2} \langle (\underline{\mathbf{y}} - \underline{\mathbf{x}}) \times \underline{\mathbf{u}} \rangle$$

champ local polynomial de degré 3:

$$\begin{cases} u_1^* = B_{11}y_1 + B_{12}y_2 - C_{23}y_2^2 + 2C_{13}y_1y_2 + D_{12}(y_2^3 - 3y_1^2y_2) \\ u_2^* = B_{12}y_1 + B_{22}y_2 - C_{13}y_1^2 + 2C_{23}y_1y_2 - D_{12}(y_1^3 - 3y_1y_2^2) \end{cases}$$

Lien entre les coefficients du polynôme et les déformations macroscopiques

$$E_{ij} = B_{ij}/l, \quad \Phi - \Omega = \frac{D_{12}}{10l}$$

$$\underline{\mathbf{K}} = -\frac{2C_{13}}{l^2}\underline{\mathbf{e}}_1 + \frac{2C_{23}}{l^2}\underline{\mathbf{e}}_2$$

Conditions de Hill–Mandel généralisées

$$\langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{u}}^*) \rangle = \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{K}}$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}^s = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle, \quad \underline{\underline{\Sigma}}^\times = \langle 60y_1y_2(\sigma_{22} - \sigma_{11}) - 30\sigma_{12}(y_1^2 - y_2^2) \rangle$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle, \quad M_{32} = \langle \sigma_{22}y_1 \rangle$$

Cas périodique:

$$\underline{\underline{u}} = \underline{\underline{u}}^* + \underline{\underline{v}}$$

$\underline{\underline{v}}$ ne doit pas contribuer à $\underline{\underline{E}}$ et $\underline{\underline{K}}$

ni à l'énergie: $\int_{\partial V} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{\underline{v}} \, dS = 0$

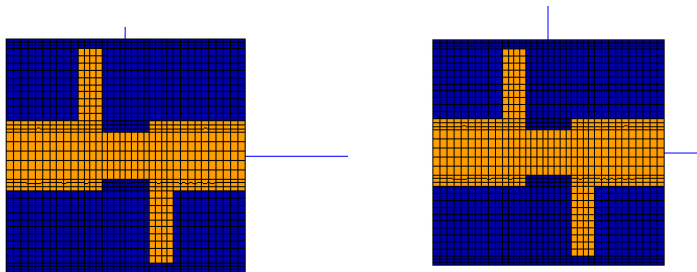
cas particulier: $\underline{\underline{v}}^+ = \underline{\underline{v}}^-$, $\underline{\underline{t}}^+ = -\underline{\underline{t}}^-$

Propriétés élastiques effectives du MHS de Cosserat

$$\begin{bmatrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} \\ M_{31} \\ M_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_{1111} & Y_{1122} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ Y_{1122} & Y_{1111} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Y_{1212} & Y_{1221} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Y_{1221} & Y_{2121} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{3131} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{3232} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{12} \\ E_{21} \\ K_{31} \\ K_{32} \end{bmatrix}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



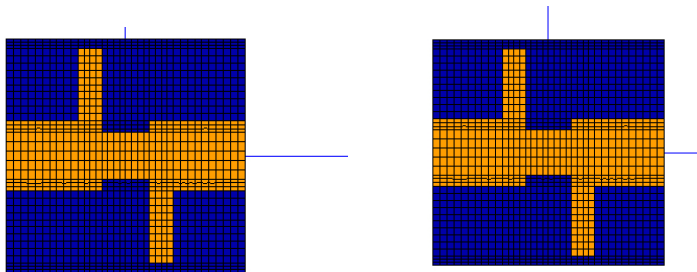
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



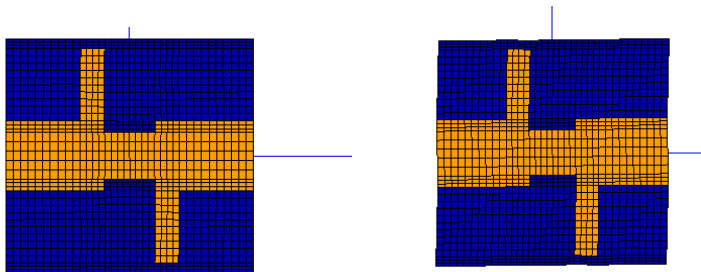
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



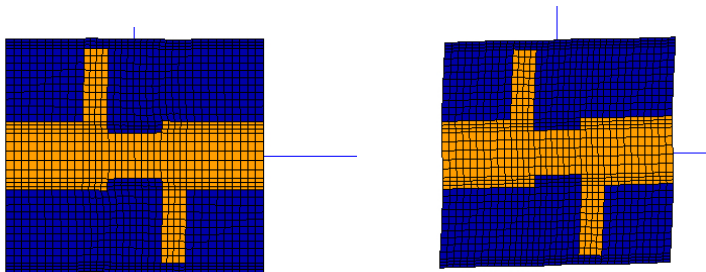
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



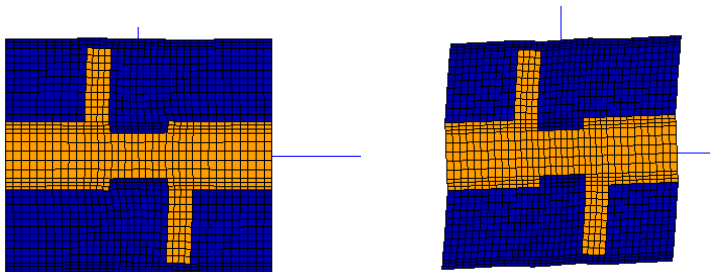
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



◀ start

▶ animate

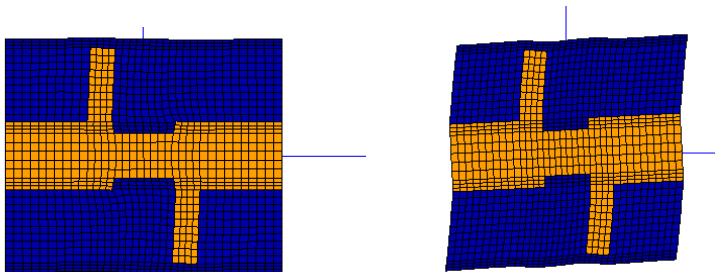
▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



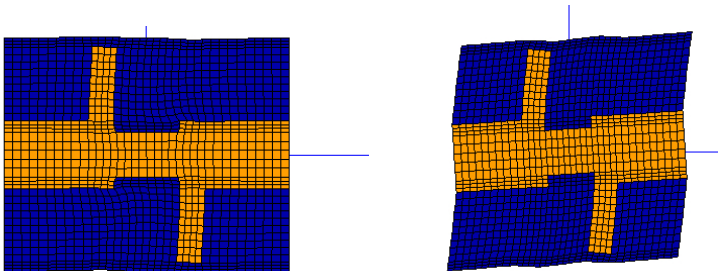
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



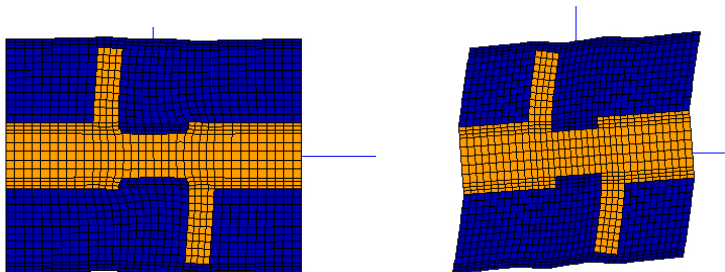
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



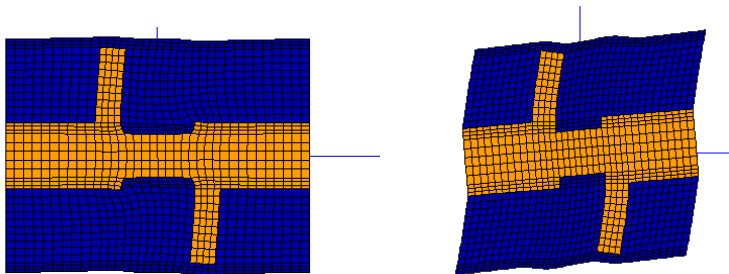
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



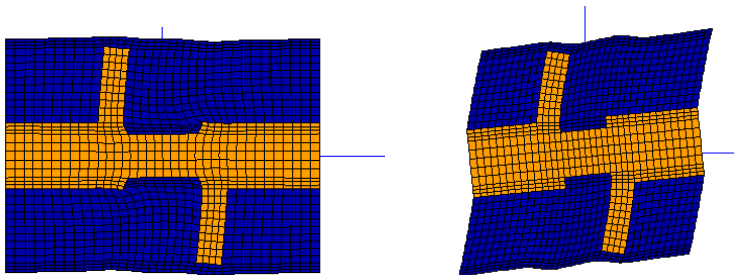
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



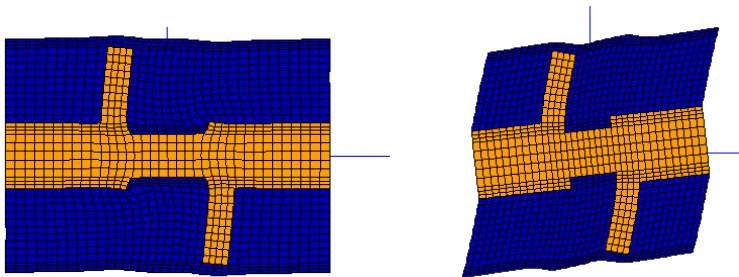
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



◀ start

▶ animate

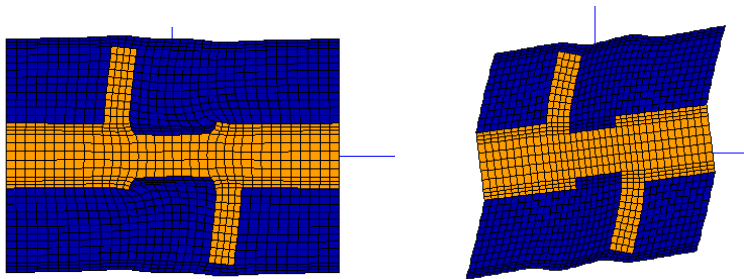
▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



◀ start

▶ animate

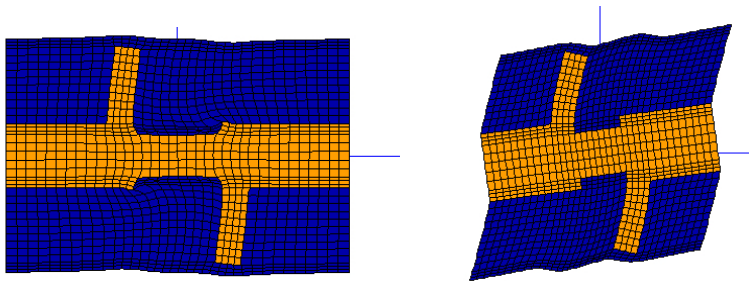
▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



◀ start

▶ animate

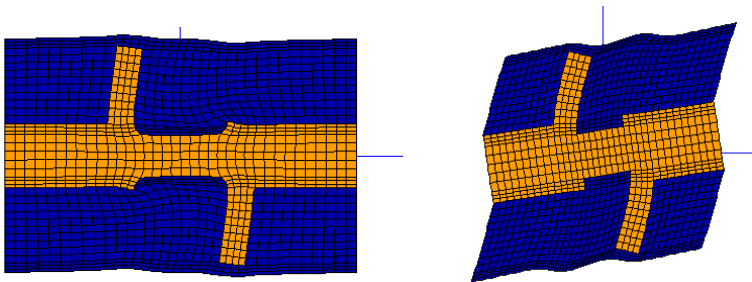
▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



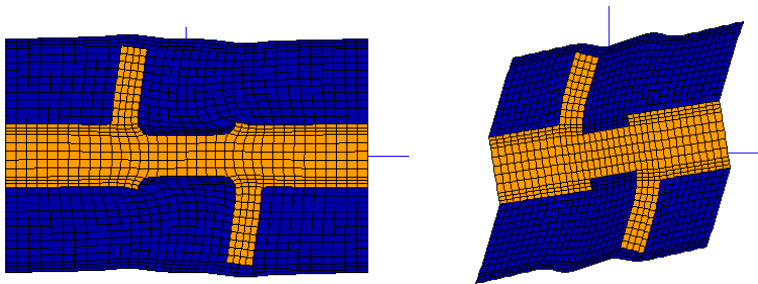
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



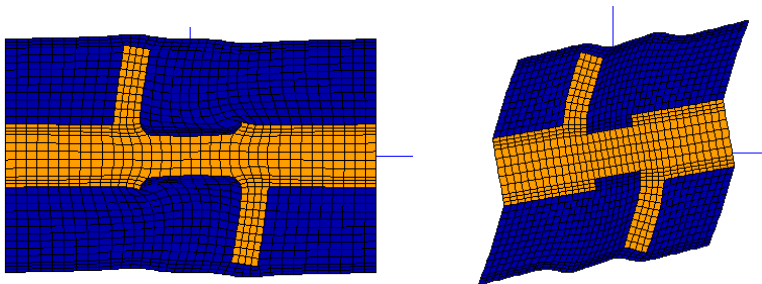
◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



◀ start

▶ animate

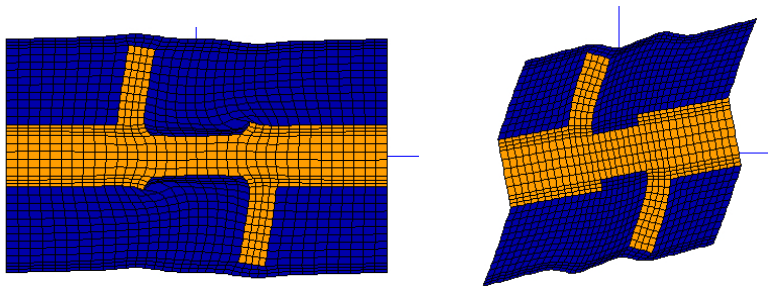
▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



◀ start

▶ animate

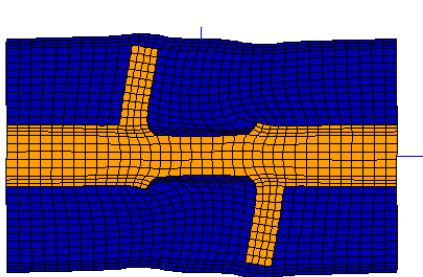
▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

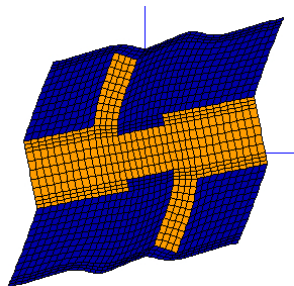
Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



◀ start ▶ animate ▶ end

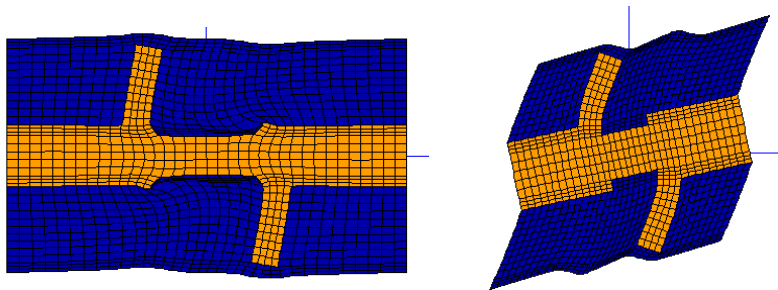
$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$



$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés

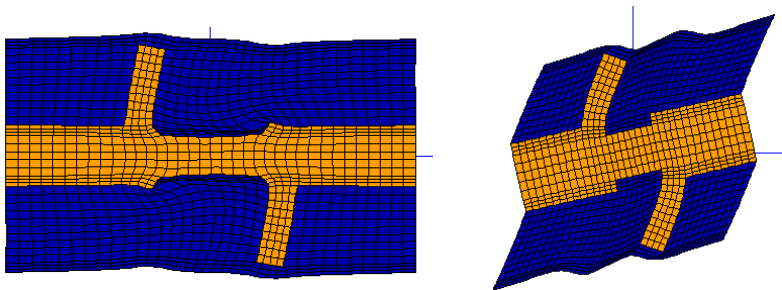


$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés



◀ start

▶ animate

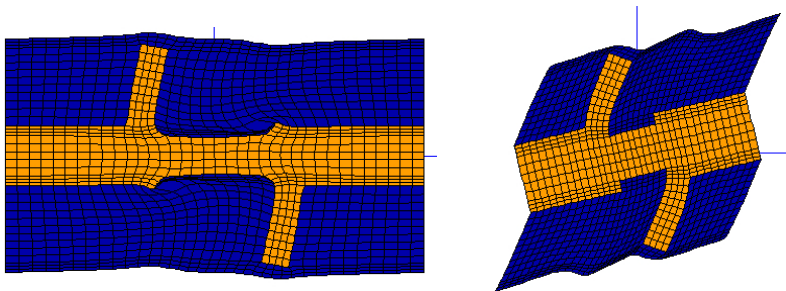
▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Homogénéisation périodique classique

extension et cisaillement simples moyens imposés

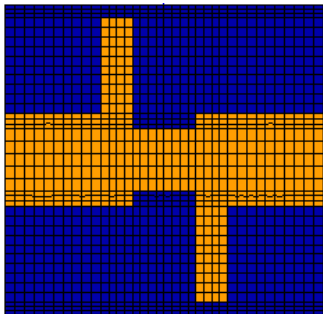


◀ start ▶ animate ▶ end

$$E_{11} = \langle \varepsilon_{11} \rangle = 1$$

$$E_{12} = \langle \varepsilon_{12} \rangle = \frac{1}{2}$$

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

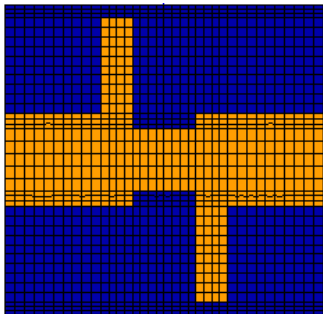
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

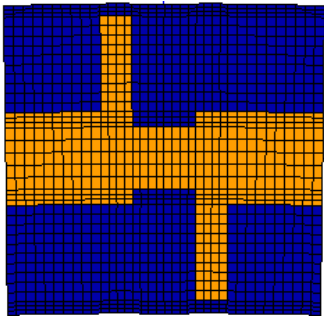
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

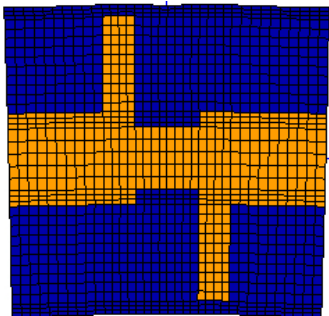
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

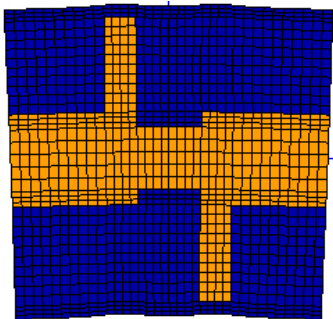
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11} y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

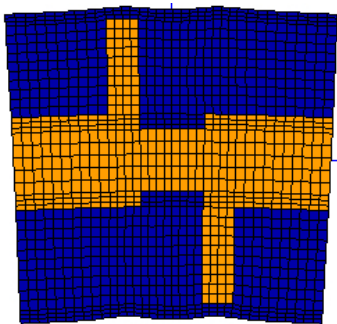
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11} y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

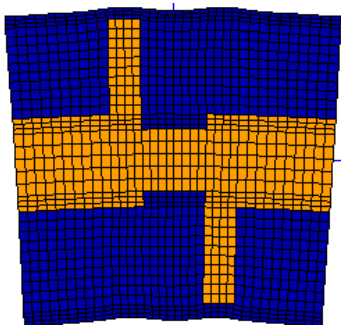
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11} y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

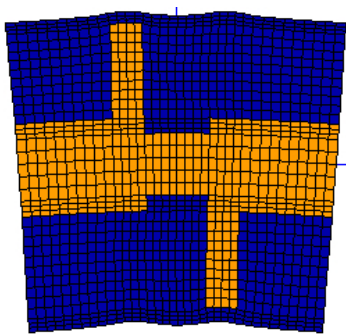
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

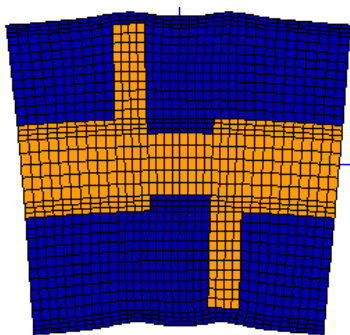
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

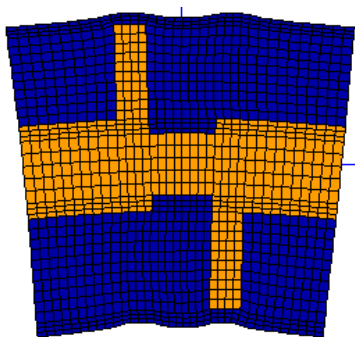
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



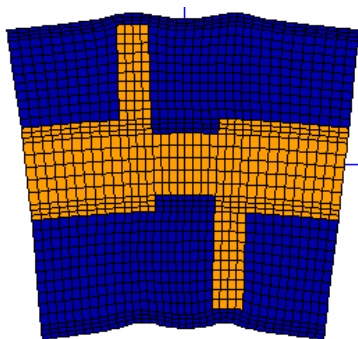
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

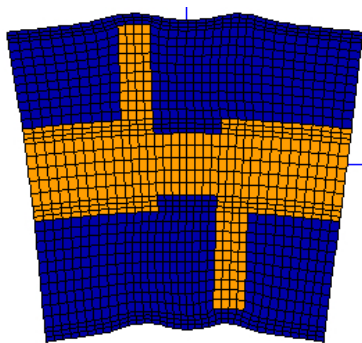
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

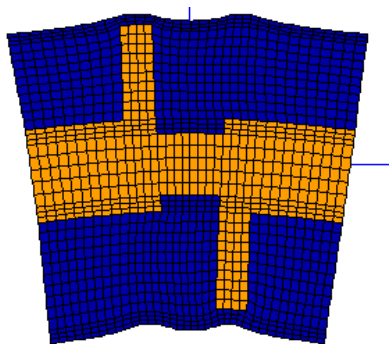
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



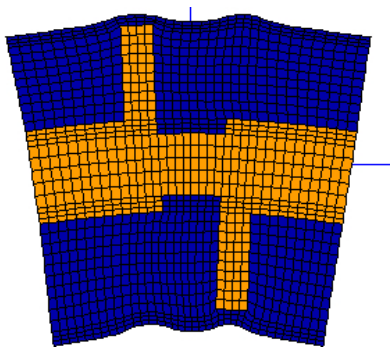
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



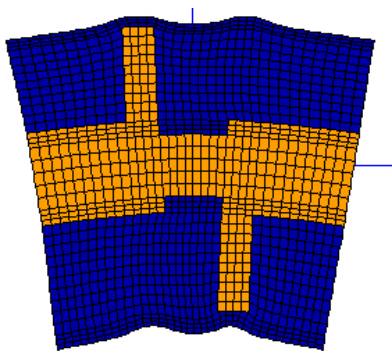
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



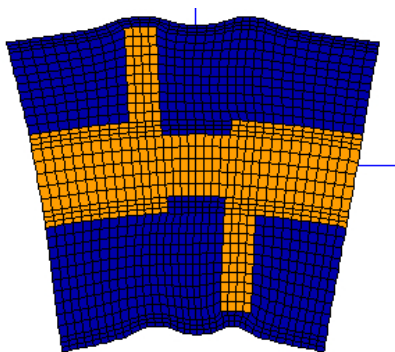
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

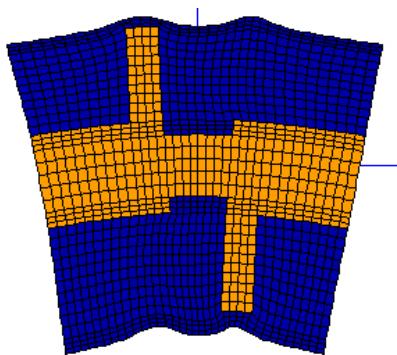
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start

▶ animate

▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



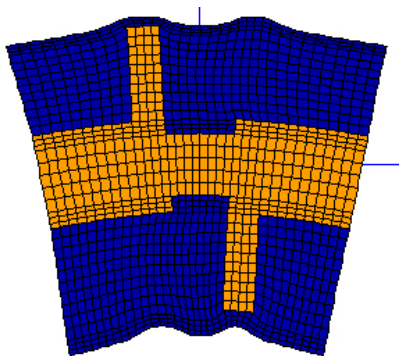
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



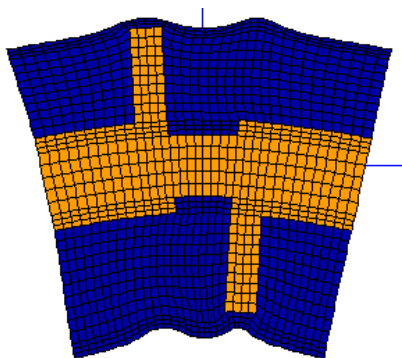
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



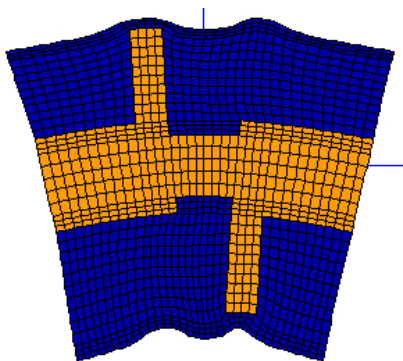
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



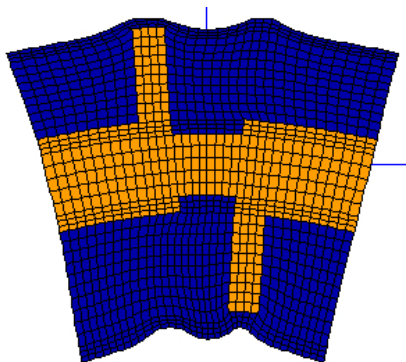
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

Construction d'un milieu homogène de substitution de Cosserat



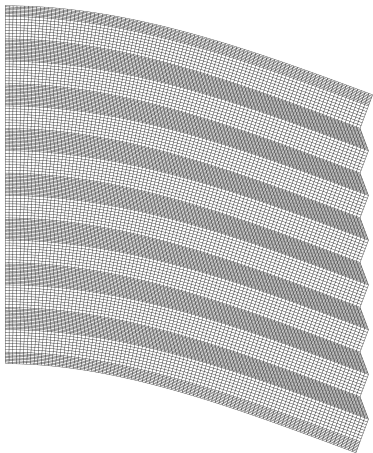
courbure moyenne imposée

$$K_{31} = -1$$

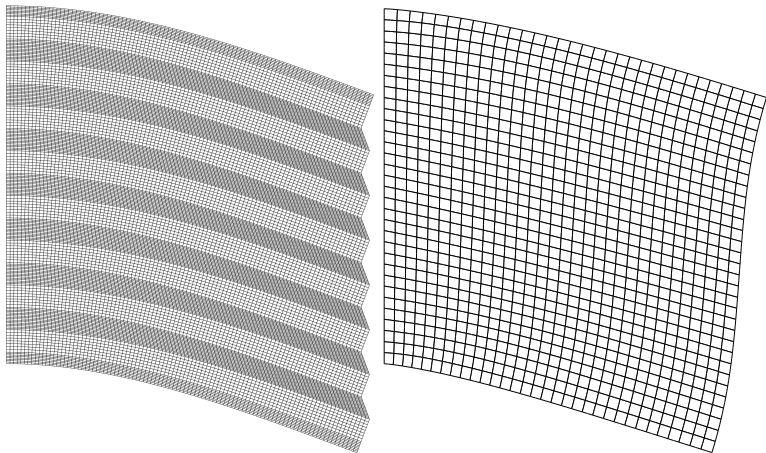
$$M_{31} = \langle -\sigma_{11}y_2 \rangle$$

◀ start ▶ animate ▶ end

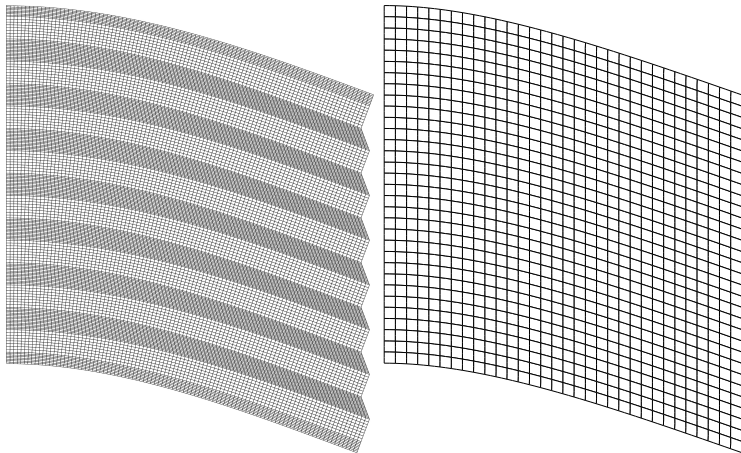
Homogénéisation d'un stratifié



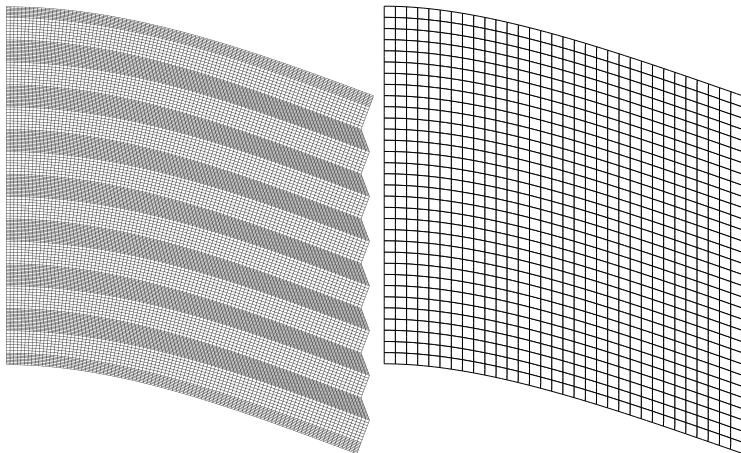
Homogénéisation d'un stratifié



Homogénéisation d'un stratifié



Homogénéisation d'un stratifié

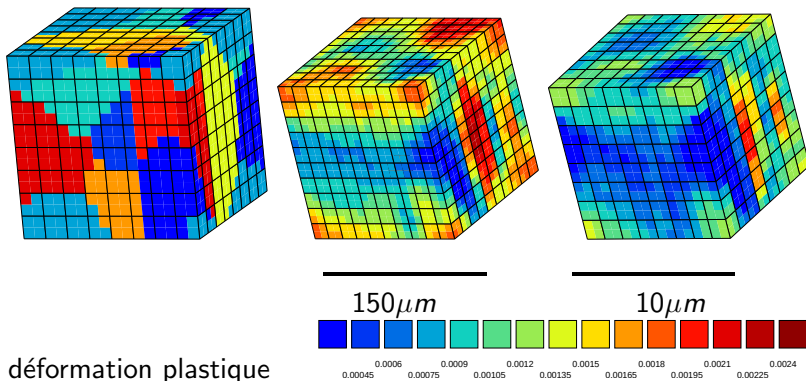


conditions aux limites supplémentaires (encastrement 2D/3D)!

Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Effet de taille de grain dans les polycristaux



Plan

- 1 Représentation des microstructures
 - Microstructures réelles
 - Modèles aléatoires
- 2 Mécanique des microstructures
 - Conditions aux limites sur la cellule élémentaire
 - Bornes
- 3 Volumes élémentaires représentatifs
 - Outils numériques du calcul de microstructures
 - Propriétés apparentes, propriétés effectives
 - VER pour des biphasés élastiques et pour les polycristaux
- 4 Homogénéisation en non linéaire : l'exemple du polycristal
 - Hétérogénéités dans un polycristal
 - Modèles simplifiés de l'homogénéisation
 - Cas des transformations finies : évolution de texture
- 5 Les frontières de l'homogénéisation
 - Les structures "à gros grains"
 - Effets de taille absolue de microstructures
- 6 Conclusions

Conclusions

- **taille de VER** : 1 gros calcul = N plus petits + CL périodiques
- **modèles simplifiés de l'homogénéisation** pour le dimensionnement des composites (linéaires, non linéaires)
- **optimisation** de la morphologie des phases pour une propriété visée, déjà en cours pour les stratifiés, redoutable en 3D imagerie 3D + morphologie mathématique
- **effets d'échelles** dans les matériaux et les structures (joint de culasse, chambres de combustion multiperforées...)
- **endommagement, rupture** durée de vie des matériaux hétérogènes