

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



MEMOIRE

Présenté



AU DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE
FACULTE DES SCIENCES
UNIVERSITE HADJ LAKHDAR - BATNA

Pour obtenir le titre de

MAGISTER EN MICROSTRUCTURE ET MECANIQUE DES
MATERIAUX

Présenté par :

BOUDERSSA NAFISSA

THEME

**Détermination des propriétés macroscopiques
d'un matériau biphasique à microstructure
aléatoire en utilisant la notion du volume
élémentaire représentatif**

Soutenu publiquement le :... / /

Devant le jury composé de :

Dr. BOUZIDA Belkacem	Professeur, Université de Batna	Président
Dr. MADANI Salah	Professeur, Université de Batna	Encadreur
Dr. DJEBAILI Hamid	Professeur, Université de Khenchela	Examineur
Dr. DJABALLAH Yacine	M.Conférences, Université de Batna	Examineur

2012/2013

Remerciements

Cette thèse doit beaucoup aux nombreuses personnes qui m'ont encouragé, soutenu et conforté au long de toutes ces années. Qu'elles trouvent dans ce travail l'expression de mes plus sincères remerciements.

Je tiens tout d'abord à adresser mes plus vifs remerciements au Professeur MADANI Salah qui est en grande partie à l'initiative de cette thèse, m'a soutenue tout au long de mon travail et de m'avoir guidé dans la conduite de ce travail.

Mes remerciements s'adressent également aux enseignants du département de physique pour m'avoir donné des cours et des renseignements.

Je n'oublie pas mes parents, mes frères et mes sœurs pour leur contribution, leur soutien et leur patience.

Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à mon mari et tous mes proches et amis, qui m'ont toujours soutenue et encouragée au cours de la réalisation de ce mémoire.

Merci à tous et à toutes.

BOUDERSSA Nafissa

Sommaire

Nomenclature	iv
Liste des figures.....	vi
Liste des tableaux	viii

Introduction générale	1
-----------------------------	---

Chapitre I : structure des matériaux métalliques à différentes échelles

I.1. Échelle atomique des matériaux métalliques	4
I.2. Structure intra-granulaire.....	5
I.3. Échelle des grains ou microstructure.....	8
I.4. Macrostructure.....	9
I.4.a-Structures de fonderie.....	9
I.4.b- Structures de forge	9
I.5- Relations structure propriétés	11
I.5.1- Déformation et systèmes de glissement	11
I.5.1.a-Structure cubique à faces centrées	12
I.5.1.b-Structure cubique centrée	12
I.5.2. Critère de plasticité du monocristal	13
I.5.2.1. Critère de plasticité de Von Mises	14
I.5.2.2. Critère de Tresca	14

Chapitre II : la simulation numérique en science des matériaux :

II.1. Qu'est-ce que la simulation numérique ?	17
II. 2. Différence entre la simulation numérique et la modélisation	18
II. 3. Avantages de la simulation	18
II. 4. Limites de la simulation numérique	19
II. 5. Échelles de la simulation numérique.....	19
II. 6. les trois échelles de la simulation numérique.....	20
II. 6.1.Échelle nanoscopique ou atomique.....	20

II. 6.2. Échelle mésoscopique	20
II. 6.3. Échelle macroscopique	21
II. 7. Présentation de trois méthodes de simulation.....	22
II. 7.1. Dynamique moléculaire (DM)	22
II. 7.1.1. Définition	22
II. 7.1.2. Principe de base.....	23
II. 7.1.3. Algorithme	23
II.7.2. Dynamique des dislocations discrètes (DDD)	25
II. 7.3. Méthode des éléments finis –MEF	28

Chapitre III : Techniques d’homogénéisation

III.1. Introduction	32
III.2. Volume Elémentaire Représentatif (V.E.R)	32
III.3. Méthode d’homogénéisation	33
III.3.1. Etapes d’homogénéisation	34
III.3.1.1. Représentation	36
III.3.1.2. Localisation	36
III.3.1.3. Homogénéisation	37
III.3.2. Méthodes usuelles d’homogénéisation.....	39
III.3.2.1. Solution diluée	39
III.3.2.2. Approche auto-cohérente	40
III.3.2.3. Modèle de Mori-Tanaka	41
III.3.2.4. Bornes de Voigt et Reuss.....	42
III.3.2.5. Bornes optimales de Hashin-Shtrikman-Walpole	43

I. Chapitre IV : Modélisation numérique

IV.1. Description de l’outil numérique ZEBULON	47
IV.2. Présentation du problème	49
IV.2.1. Conditions aux limites.....	51
IV.2.1.1. Déformations uniformes aux frontières (KUBC).....	51
IV.2.1.2. Conditions périodiques (PERIODIC).....	52
IV.2.1.3. Propriétés macroscopiques.....	52
IV.2.2. Les bornes de Voigt et Reuss.....	53
IV.3. Présentation des résultats	55

Conclusion générale 68

Bibliographie

Nomenclature

V : volume occupé par les atomes dans la maille.

\vec{n}_i : vecteur normal au Plan de glissement

E_{ij} : champ de déformation

x_j : point imposé

Σ_{ij} : champ de contrainte uniforme

σ_{ijph} : contraintes locales de la phase «ph»

ϵ_{ijph} : Déformations locales de la phase «ph»

C_{ijklph} : tenseur de rigidité

S_{ijklph} : tenseur de souplesse

(ϵ_{ijph}) : Déformations moyennes locales de chaque phase

(σ_{ijph}) : Contraintes moyennes locales de chaque phase

σ_{ijT} : Contraintes macroscopiques imposées

L_{ij} : Déformations macroscopiques

A_{ijklph} : tenseurs de localisation des déformations

B_{ijklph} : tenseurs de concentration des contraintes

(σ_{ij}) : tenseur des contraintes moyennes (macroscopiques)

(ϵ_{ij}) : tenseur des déformations moyennes (macroscopiques)

I_{ijkl} : tenseur unité d'ordre 4

C_{ijkl} : tenseur de rigidité équivalent

E : Module de Young

ν : Coefficient de Poisson

S : surface

n : La fluctuation

E_{ijk} : Conditions aux limites en compressibilité

$E_{ij\mu}$: Conditions aux limites en cisaillement

k_{app} : module de compressibilité apparent

μ_{app} : module de cisaillement apparent

k_{sup} : borne supérieure de Voigt (Coefficient de compressibilité)

k_{inf} : borne inferieur de Reuss (coefficient de compressibilité)
 μ_{sup} : Borne supérieur de Voigt (Coefficient de cisaillement)
 μ_{inf} : Borne inferieur de Reuss (Coefficient de cisaillement)
 k_j : Coefficient de compressibilité ($j=m$ (matrice) ; $j=i$ (inclusion))
 μ_j : Coefficient de cisaillement ($j=m$ (matrice) ; $j=i$ (inclusion))
 k_{HS^+} : borne de Hashin et Shtrikman supérieur (Coefficient de compressibilité)
 k_{HS^-} : borne de Hashin et Shtrikman inferieur (Coefficient de compressibilité)
 μ_{HS^+} : borne de Hashin et Shtrikman supérieur (Coefficient de cisaillement)
 μ_{HS^-} : borne de Hashin et Shtrikman inferieur (Coefficient de cisaillement)
 k_{AC} : module de compressibilité du modèle auto cohérent
 μ_{AC} : module de cisaillement du modèle auto cohérent
 c : Contraste
 k_{eff} : module de compressibilité effective calculé par Zebulon
 μ_{eff} : module de cisaillement effectif calculé par Zebulon

Liste des figures

Figure 1.1 : du micro au macrostructure [3]

Figure 1.2 : Principales structures cristallines des métaux [3]

Figure 1.3 : (a) solution solide d'insertion (b) solution solide de substitution.

Figure 1.4 : Précipités γ' , ou Ni_3TiAl dans une matrice de Nickel [4]

Figure 1.5 : Représentations schématiques des différents précipités (a) précipité cohérent avec distorsion du réseau, (b) précipité semi-cohérent, (c) précipité incohérent

Figure 1.6 : Fonte à graphites sphéroïdal [4]

Figure 1.7: Macrographie d'un acier réfractaire moulé et Schématisation de zones de cristallisation à l'échelle du lingot [4]

Figure 1.8 : Structure de fonderie, (a) alliage d'aluminium coulé dans un godet, les grains se sont développés à partir des surfaces vers le centre du godet, (b) aube de turbine réalisée par fonderie avec un front de solidification contrôlé. Les grains ont un axe principal aligné avec celui de l'aube [4]

Figure 1.9 : Exemples de macrostructures de forge. (a) microstructure d'un acier ferrito-perlitique [5], (b) macrostructure de ce même acier. Les zones riches en ferrite et riches en perlite se répartissent en bandes qui se déforment et se courbent lors de la forge du composant. (c) microstructure d'un alliage de Titane TA6V. (d) macrostructure du même alliage à l'issue de la mise en forme [6].

Figure 1.10 : Déformation plastique par glissement le long des plans cristallins préférentiels [7].

Figure 2.1 : Étendues des échelles de temps et d'espace. [9]

Figure 2.2 : Deux représentations de l'étendu des phénomènes observables dans la nature dans les échelles de temps et d'espace. [8]

Figure 2.3 : Visualisation des atomes déplacés dans une cascade de déplacement dans un alliage Fe-0,2 %Cu pour deux distributions initiales de vitesses différentes [9]

Figure 2.4 : Simulation de la plasticité dans un monocristal de cuivre [9]

Figure 2.5 : Diagramme de principe d'une simulation en dynamique des dislocations [18]

Figure 2.6 : Visualisation par éléments finis de la distribution des contraintes
Dans une bielle

Figure 2.7 : Schéma récapitulatif des principales étapes et des principaux concepts de la simulation par éléments finis [19].

Figure. 3.1 – Échelles du matériau.

Figure 3.2 – Une structure constituée d'un matériau hétérogène

Figure. 3.3 – Modèle auto-cohérent. [23]

Figure. 3.4 – Illustration des bornes de Voigt et Reuss.

Figure. 3.5 – Illustration des bornes Hashin et Shtrikman [23]

Figure 4-1 – Interface Graphique « Z-master ».

Figure 4.2 – Microstructure ferrito-perlitique étudiée.

Figure 4.3 – Microstructure étudiée après maillage.

Figure 4.4 – Microstructure déformée pour le calcul de k : KUBC

Figure 4.5 – Microstructure déformée pour le calcul de k : PERIODIC.

Figure 4.6 - Microstructure déformée pour le calcul de μ : KUBC.

Figure 4.7 - Microstructure déformée pour le calcul de μ : PERIODIC.

Figure 4.8 – Microstructure déformée pour le calcul de k : KUBC.

Figure 4.9 – Microstructure déformée pour le calcul de k : PERIODIC.

Figure 4.10 - Microstructure déformée pour le calcul de μ : KUBC.

Figure 4.11 - Microstructure déformée pour le calcul de μ : PERIODIC

Figure 4.12 – Distribution des contraintes de Von Mises pour le calcul de k
KUBC, cas 1

Figure 4.13 – Distribution des contraintes de Von Mises pour le calcul de k
PERIODIC, cas 1

Figure 4.14 - Evolution du module de compressibilité apparent k en fonction de N

Figure 4.15 - Module Evolution du module de cisaillement apparent μ en fonction N

Figure 4.16 - Evolution du module de compressibilité apparent k en fonction de N

Figure 4.17 - Evolution du module de cisaillement apparent μ en fonction N

Liste des tableaux :

Tableau 4.1 – Propriétés des constituants pour les trois cas considérés

Tableau 4.2 - Propriétés des deux phases pour les deux cas de contraste étudiés.

Tableau 4.3 - Bornes de Voigt, Reuss

INTRODUCTION GENERALE

Dans ces dernières années, la modélisation occupe une place de plus en plus importante dans la recherche en science des matériaux. Ceci s'explique non seulement par l'amélioration continue des performances des calculateurs, mais aussi par la disponibilité de nouveaux codes et techniques de calculs. Il est désormais possible de déterminer les propriétés d'une large gamme de matériaux avec une précision suffisante pour être confrontée à l'expérience, à la fois à une échelle microscopique mais aussi méso et macroscopique [1].

Observé « à l'œil nu » un matériau apparaît, la plupart du temps, comme un milieu homogène [2]. Cette homogénéité apparente est liée à l'échelle d'observation choisie. En effet, les matériaux sont tous hétérogènes à une certaine échelle. Les différentes échelles d'hétérogénéité sont liées à leurs constituants élémentaires (granulats et ciments dans les bétons, fibres et résine dans un matériau composite thermoplastique, cristaux dans un matériau métallique,...). L'homogénéisation a pour but de remplacer ce matériau hétérogène par un milieu homogène de comportement équivalent.

La connaissance et la maîtrise, toujours plus grande des relations entre la structure microscopique de ces matériaux, telle qu'elle résulte de leurs procédés d'élaboration et de transformation, et leur comportement macroscopique, constituent aujourd'hui un défi majeur pour les scientifiques et les industriels et leurs confèrent la possibilité d'élaborer des matériaux aux propriétés et aux performances voulues.

En effet, la prévision des propriétés physiques macroscopiques des matériaux hétérogènes, à partir de modèles basés sur des observations expérimentales de leur microstructure, répond à un objectif pratique évident pour la conception de matériaux présentant des propriétés optimales.

L'objectif principal de ce travail est la détermination des propriétés effectives d'une microstructure biphasée, par une approche numérique.

La méthode de résolution retenue est celle des éléments finis avec des conditions aux limites spécifiques aux techniques d'homogénéisation. Les propriétés macroscopiques effectives de la microstructure étudiée sont obtenues par la détermination d'une taille représentative de la microstructure simulée, pour la propriété estimée. On parle, donc, de Volume Élémentaire Représentatif (VER).

On commence, dans le premier chapitre, par donner des notions générales sur la structure des matériaux métalliques à différentes échelles.

Le deuxième chapitre est dédié à la simulation numérique en science des matériaux, cela nous permettra de faire la distinction entre les différentes échelles dans la modélisation. Le chapitre 3 est consacré aux techniques d'homogénéisation. On commence par donner la notion de volume élémentaire représentatif, les étapes à suivre pour effectuer une homogénéisation et on termine avec les techniques d'homogénéisation simplifiée ou modèles à " Bornes " qui donnent un encadrement du comportement mécanique du matériau composite par des comportements mécaniques limites (bornes). La borne de Reuss obtenue en associant en série deux phases et par équivalence au modèle du module transverse équivalent de la loi des mélanges. Celle de Voigt est obtenue en associant en parallèle les deux phases et par équivalence au modèle du module longitudinal équivalent de la loi des mélanges.

Le dernier chapitre sera consacré à la modélisation numérique des microstructures étudiées. Le code d'éléments finis Zebulon, qui tient en compte les conditions aux limites d'homogénéisation, est utilisé. La géométrie des microstructures et les propriétés des deux phases des différents cas traités sont détaillés. Les différents résultats des propriétés apparentes et effectives obtenus sont présentés pour chaque cas.

Et enfin une interprétation de ces résultats et une conclusion générale viennent clôturer ce travail.

Chapitre I

structure des matériaux métalliques à différentes échelles

I.1. Échelle atomique des matériaux métalliques.

I.2. Structure intra-granulaire

I.3. Échelle des grains ou microstructure

I.4. Macrostructure

I.4.a-Structures de fonderie

I.4.b- Structures de forge

I.5- Relations structure propriétés

I.5.1- Déformation et systèmes de glissement

I.5.1.a-Structure cubique à faces centrées

I.5.1.b-Structure cubique centrée

I.5.2. Critère de plasticité du monocristal

I.5.2.1. Critère de plasticité de Von Mises

I.5.2.2. Critère de Tresca

L'évolution spectaculaire de la diversité et des performances des matériaux est due à une compréhension et à une maîtrise de plus en plus fines de leur structure, ainsi que des relations entre structure et propriétés d'emploi.

Les matériaux solides sont répartis en trois groupes : les métaux, les céramiques et les polymères. Une telle répartition repose essentiellement sur la structure atomique et la composition chimique de ces solides. La plupart des matériaux appartiennent à l'un de ces trois groupes, mais il existe aussi des matériaux dits intermédiaires. En outre, il existe trois autres types de matériaux synthétiques : les composites, les semi-conducteurs et les biomatériaux.

I.1. Échelle atomique des matériaux métalliques:

Quand un matériau est cristallisé cela signifie que les atomes sont arrangés de manière périodique en suivant un motif de base. Le type de motif définit la structure des matériaux.

Les métaux purs, à l'état solide, cristallisent presque tous dans trois structures principales : la structure cubique centrée (CC) (fer α , Zr ...), la structure cubique à faces centrées (CFC) (aluminium, fer γ , cuivre, nickel...) et la structure hexagonale compacte (HC) (zinc, titane, cobalt), **Figure 1.1**.

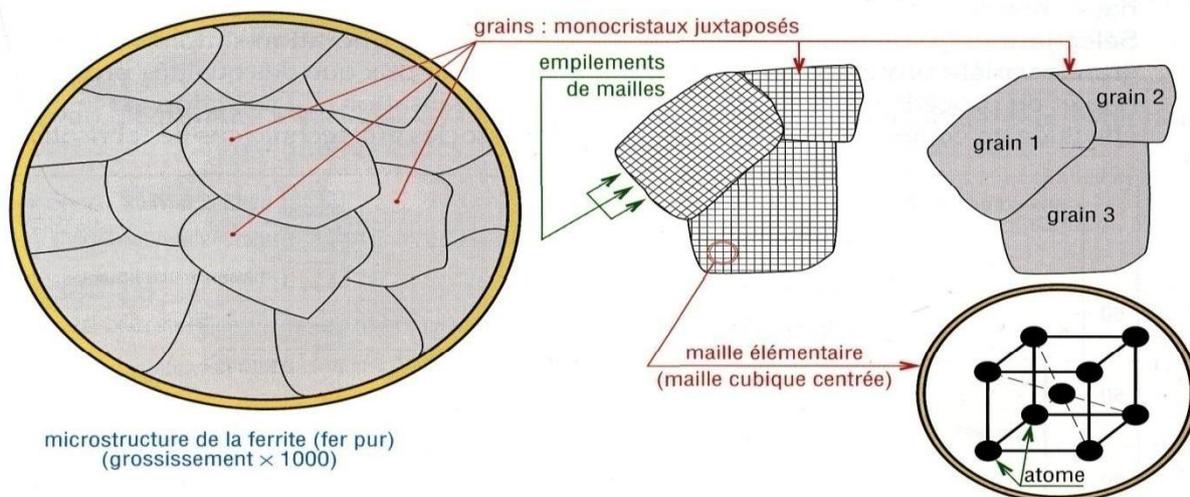


Figure 1.1 : du micro au macrostructure [3].

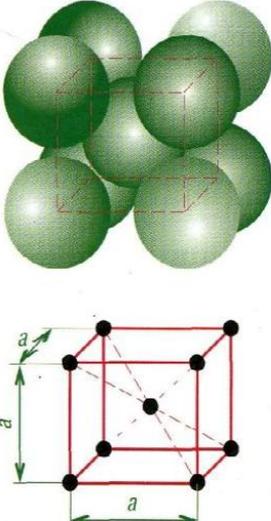
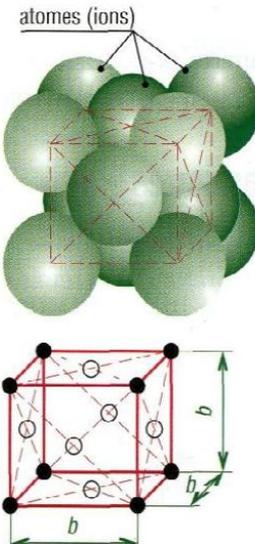
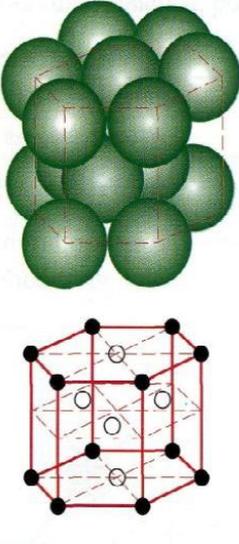
type	maille cubique centrée	maille cubique à face centrée	maille hexagonale compacte
forme de la maille			
volume occupé par les atomes dans la maille	$V = 0,68 a^3$ 2 atomes par maille	$V = 0,74 b^3$ 4 atomes par maille	$V = 0,74 \text{ vol. de la maille}$ 6 atomes par prisme
exemples	fer α , Mn, Cr, W, Mo, V, Nb, Li, Zr, Ta, Ba, Ti (> 882 °C)...	fer γ , Al, Cu, Ag, Co, Pb, Ni, Au, Pt, Sr...	Mg, Zn, Cd, Be, Co (< 419 °C), Ti (< 882 °C)...
propriétés	haute résistance peu ductile	résiste au cisaillement très ductile	fragile peu ductile

Figure 1.2 : Principales structures cristallines des métaux [3].

I.2. Structure intra-granulaire :

Les métaux sont rarement utilisés à l'état pur, mais sous forme d'alliage binaires, ternaires ou encore plus complexe (Al-Cu, Fe-C, Fe-Ni-Cr, Ni-Ti-Al, ...).

Dans un métal pur A on peut ajouter des atomes étrangers B sans modifier la structure cristalline du métal de base A: l'élément B entre en solution dans A, il forme la solution solide AB. L'atome étranger B est un élément d'alliage.



L'élément majeur A s'appelle solvant

L'élément mineur B s'appelle soluté.

Dans certains cas, par exemple Au et Ag, l'addition d'atomes B au métal A est possible sans limitation; les deux métaux A et B sont miscibles en toutes proportions: A et B forment une **solution solide continue**.

Cependant, dans la plus part des cas il existe une concentration limite CB au-delà de laquelle la structure est modifiée. Dans l'intervalle de concentration allant de A pur à l'alliage AB de concentration CB, il existe une solution solide dite **terminale**, car elle apparaît aux extrémités du diagramme d'équilibre.

Au de la de CB, A et B peuvent encore former une solution solide ayant une structure cristalline différente de celle de A pur et appelée **solution solide intermédiaire**. On observe aussi des solutions de A et B dont l'existence n'est possible que sur un domaine de concentration limité (quelque % ou moins) ou très limité : on dit alors que A et B forment un **composé intermédiaire**, caractérisé généralement par une formule moléculaire A_xB_y .

Les atomes des éléments d'alliage B peuvent entrer en solution dans le métal A soit en se substituant aux atomes A aux nœuds du réseau de celui-ci, soit en se plaçant dans les interstices (vides) du réseau A. D'où deux grandes classes de solutions solides suivant que l'élément d'alliage est en substitution ou en insertion dans le réseau.

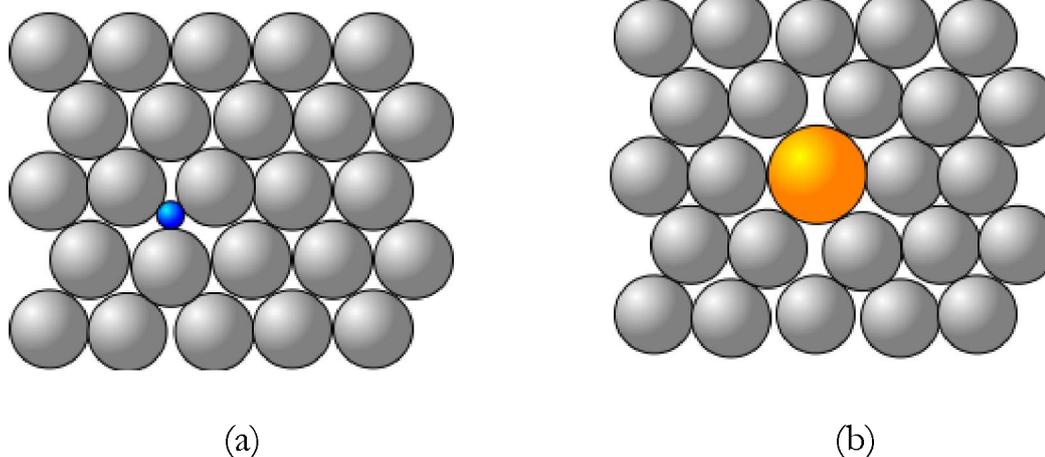


Figure 1.3 : (a) solution solide d'insertion (b) solution solide de substitution

Précipités cohérents

Lorsque la quantité d'éléments d'alliage en solution solide augmente, on peut former des structures intermédiaires appelées solutions solides ordonnées. Dans ce cas, tous les plans cristallographiques sont communs entre la matrice et la solution solide ordonnée, qu'on appelle aussi parfois précipité cohérents.

Les « précipités » γ' dans les superalliages à base de Nickel, utilisés pour les pièces mécaniques soumises à de très fortes températures et contraintes et avec des durées de fonctionnement importantes, sont de bonnes exemples. On réalise par exemple des disques de turbines de réacteurs d'avion avec ces matériaux.

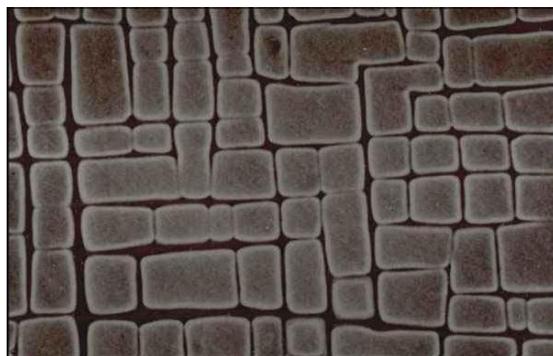
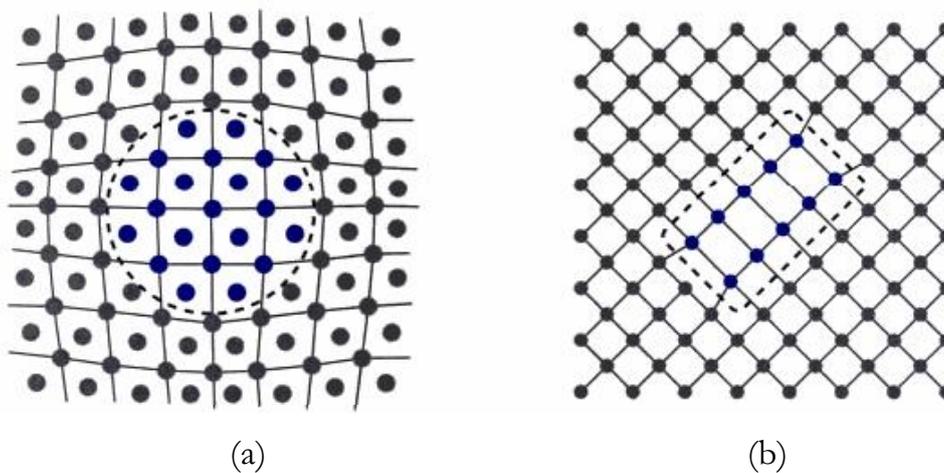
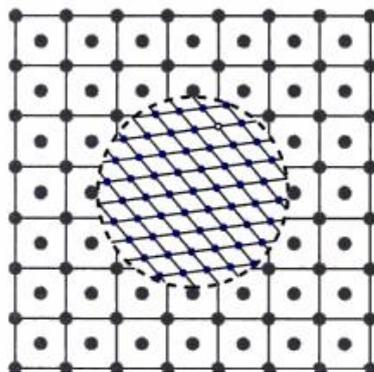


Figure 1.4 : Précipités γ' , ou Ni_3TiAl dans une matrice de Nickel [4]

Précipités incohérents

Lorsque les précipités ou les particules de seconde phase grossissent, ils perdent alors leur cohérence avec le réseau du métal de base. On parle alors de précipité semi-cohérent ou incohérent. Les précipités semi-cohérents ne présentent de cohérence cristallographique avec la matrice que sur certains plans, et les précipités incohérents n'ont aucune relation cristallographique avec la matrice, **figure 1.5.**





(c)

Figure 1.5 : Représentations schématiques des différents précipités
 (a) précipité cohérent avec distorsion du réseau, (b) précipité semi-cohérent, (c) précipité incohérent

La structure des matériaux biphasés influe considérablement sur le comportement du matériau.

Ainsi une fonte grise à graphites lamellaires est-elle fragile tandis qu'une fonte à graphite sphéroïdal peut se déformer plastiquement. C'est en vue d'améliorer telle ou telle propriété mécanique que l'on fait évoluer ces structures.

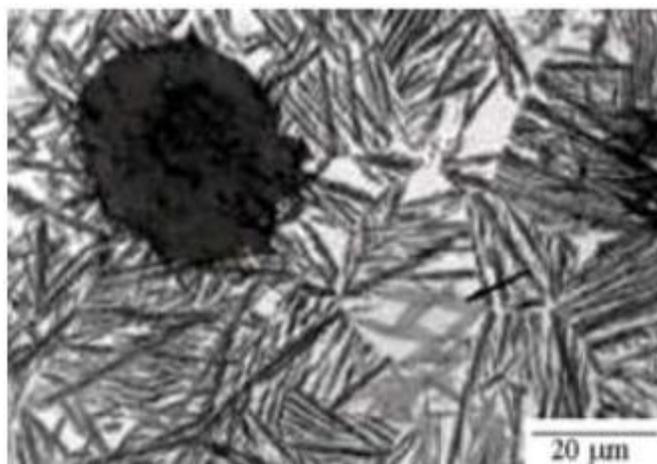


Figure 1.6 : Fonte à graphites sphéroïdal [4]

I.3. Échelle des grains ou microstructure :

Le matériau est constitué d'un ensemble de cristallites appelés grains dont l'orientation cristalline peut être quelconque ou non. Lorsque la taille de grain diminue la limite d'élasticité augmente. Le procédé thermomécanique mis en œuvre pour réaliser le matériau permet de faire varier la taille des grains. On peut par

exemple par tréfilage intense réduire la dimension de grains de ferrite dans un acier de 50 μm à 300 nm.

La distribution statistique des orientations cristallines des grains s'appelle la *texture cristalline*.

Lorsque toutes les orientations cristallines sont équiprobables, la texture est *isotrope*.

La forme des grains peut également être *anisotrope*, (grains allongés dans une direction particulière), on parlera alors de *texture morphologique*.

I.4. Macrostructure :

Enfin, dans la plupart des composants, des macro-structures se développent à l'échelle du composant. Elles proviennent du procédé de mise en forme. Les plus spectaculaires sont souvent les structures de fonderie et les structures de forge.

I.4.a-Structures de fonderie

Lors de l'élaboration d'un alliage, le matériau est porté à l'état liquide puis il est coulé dans une lingotière ou moulé pour obtenir une pièce de forme.

Dans le cas de la coulée statique en lingotière, la structure macroscopique de l'alliage dépend à la fois de la vitesse de germination et de la vitesse des échanges thermiques (nature et épaisseur de la paroi de la lingotière). Si on considère une tranche à mi-hauteur de la lingotière on observe généralement trois zones de cristallisation différentes, comme cela est présenté sur l'illustration suivante :

Zone I (peau) :

Au début de la solidification, le refroidissement est intense au niveau de la paroi, il y a une forte surfusion, les germes de cristallisation sont très nombreux donc la croissance des grains est très limitée : les cristaux formés sont équiaxes, de faible taille et leur orientation est quelconque.

Zone II (zone basaltique) :

Au fur et à mesure que la peau se solidifie, la surfusion s'abaisse, le pouvoir de germination diminue donnant lieu à des grains de forme allongée colonnaire.

Zone III (zone centrale de solidification équiaxe) :

Le lingot se décolle progressivement de la paroi et les échanges thermiques se font plus lentement. La solidification se fait dans un liquide à température quasi-homogène : la cristallisation est équiaxe.

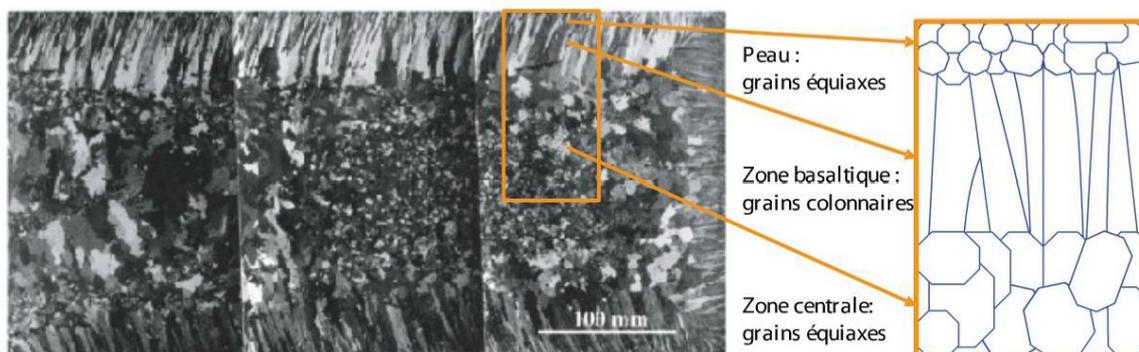


Figure 1.7: Macrographie d'un acier réfractaire moulé et Schématisation de zones de cristallisation à l'échelle du lingot [4]



(a)



(b)

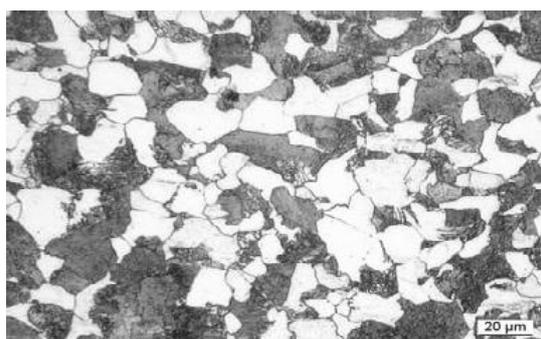
Figure 1.8 : Structure de fonderie, (a) alliage d'aluminium coulé dans un godet, les grains se sont développés à partir des surfaces vers le centre du godet, (b) aube de turbine réalisée par fonderie avec un front de solidification contrôlé. Les grains ont un axe principal aligné avec celui de l'aube [4]

Ainsi les aubes de turbine des réacteurs d'avion, avant d'être monocristallines ont été à structure colonnaires. Chaque aube ne contient que quelques grains, et ces grains sont orientés morphologiquement et cristallographiquement selon l'axe de

l'aube (**Figure 1.8b**). On peut également réaliser des monocristaux, comme les blocs de silicium avec lesquels sont réalisés des composants pour l'électronique.

I.4.b- Structures de forge

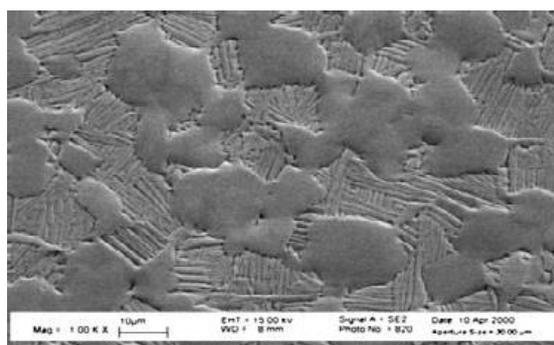
On peut voir se développer aussi des macrostructures dans des matériaux forgés. Si le matériau présente au départ une certaine hétérogénéité (structure en bande pour un acier ferrito-perlitique par exemple), cette hétérogénéité subsiste après la mise en forme mais conserve la mémoire de la déformation qui a été subie lors de la forge par le matériau.



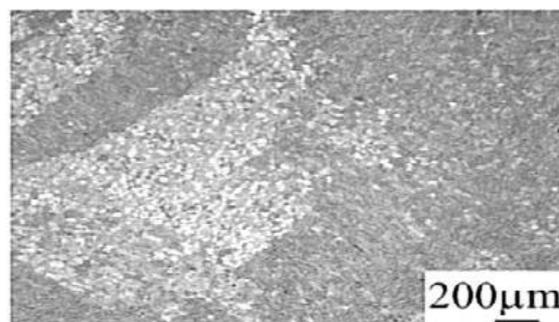
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 1.9 : Exemples de macrostructures de forge. (a) microstructure d'un acier ferrito-perlitique [5], (b) macrostructure de ce même acier. Les zones riches en ferrite et riches en perlite se répartissent en bandes qui se déforment et se courbent lors de la forge du composant. (c) microstructure d'un alliage de Titane TA6V. (d) macrostructure du même alliage à l'issue de la mise en forme [6].

I.5- Relations structure propriétés

I.5.1- Déformation et systèmes de glissement

La déformation plastique d'un monocristal est définie comme étant le glissement des dislocations sur des plans cristallographiques. Le glissement se

produit préférentiellement selon les plans denses et les directions denses. D'après la loi de Schmid, un système est activé et participe à la déformation plastique du monocristal quand sa contrainte de cisaillement atteint une valeur critique. Cette valeur critique correspond à la contrainte nécessaire pour enclencher les premiers glissements cristallographiques. Au delà de cette valeur, le matériau entre dans le domaine plastique et se déforme de façon permanente.

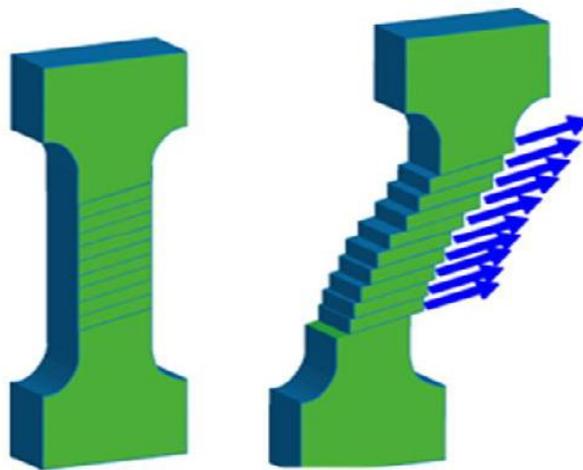


Figure 1.10 : Déformation plastique par glissement le long des plans cristallins préférentiels [7]

On appelle système de glissement, la combinaison d'un plan de glissement et d'une direction de glissement située dans ce plan. Le nombre de systèmes de glissement possibles pour une structure cristalline donnée fournit une première indication sur la ductilité de cette structure.

I.5.1.a-Structure cubique à faces centrées : Dans ce cas, Il y a douze systèmes de glissement possibles. Les plans denses sont de type (111) et les directions denses de type $[110]$.

I.5.1.b-Structure cubique centrée : pour cette structure les plans denses sont de type (110) et les directions denses de type $[111]$.

Ceci conduit à tirer quelques règles pour la représentation du comportement d'un cristal métallique.

Le comportement élastique doit posséder les symétries de la structure du cristal.

La déformation plastique correspond au glissement relatif de plans cristallins et se fait donc sans changement de volume.

Le glissement se fait selon des plans et des directions discrètes de l'espace, qui sont les plans et directions denses de la structure cristalline.

I.5.2. Critère de plasticité du monocristal :

Compte tenu de ce qui a été rappelé plus haut, on peut proposer un critère de plasticité pour le monocristal.

- Supposons que l'on connaisse l'expression du tenseur des contraintes dans le repère du cristal : σ
- Supposons que l'on se donne les directions normales aux plans de glissement \vec{n}_i
- Supposons également que pour chaque plan de glissement i on se donne les directions de glissement associées \vec{g}_{ij}
- Alors la composante de cisaillement τ (ou scission résolue) sur chaque plan de glissement et selon chacune des directions de glissement se calcule comme suit :

$$\tau = \sigma \vec{n}_i \vec{g}_{ij} \quad (1.1)$$

Parmi l'ensemble des systèmes de glissement, la plasticité se produira sur le système qui subit le cisaillement maximum, soit :

$$\tau_{max} = \max_i [\max_j [\sigma \vec{n}_i \vec{g}_{ij}]] \quad (1.2)$$

On pourra écrire que le glissement se produit lorsque la contrainte de cisaillement sur le système de glissement le plus favorablement orienté atteint une valeur critique : soit

$\tau_{max} < \tau_c$ le comportement est élastique

$\tau_{max} = \tau_c$ glissement plastique

I.5.2.1. Critère de plasticité de Von Mises

Le critère de plasticité de Von Mises permet de déterminer le seuil d'écoulement plastique d'un matériau métallique polycristallin isotrope. C'est un critère énergétique. Le matériau est supposé entrer en plasticité lorsque son énergie élastique de cisaillement atteint une valeur seuil.

Enoncé du critère

Pour un tenseur des contraintes diagonal le critère de Von Mises s'écrit :

$$\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \sigma_2 & \\ & & \sigma_3 \end{pmatrix}_{(e_1, e_2, e_3)} \quad \text{soit } \sigma_{eq} = \sqrt{\frac{1}{2}((\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2)} \quad (1.3)$$

Alors si $\sigma_{eq} < Re$ le comportement est élastique

Si $\sigma_{eq} = Re$ écoulement plastique

I.5.2.2. Critère de Tresca

Un second critère, le critère de Tresca, est également couramment employé pour les métaux isotropes. C'est un critère en contrainte. Dans ce cas là, la plasticité est supposée se produire lorsque la contrainte de cisaillement maximale atteint une valeur seuil.

Enoncé du critère de Tresca

le critère de Tresca s'écrit :

pour tout $\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \sigma_2 & \\ & & \sigma_3 \end{pmatrix}_{(e_1, e_2, e_3)}$ avec $\sigma_1 < \sigma_2 < \sigma_3$

Alors si $|\sigma_3 - \sigma_1| < R_e$ le comportement est élastique

Si $|\sigma_3 - \sigma_1| = R_e$ écoulement plastique

CHAPITRE II

**LA SIMULATION NUMERIQUE EN
SCIENCE DES MATERIAUX**

Chapitre II

la simulation numérique en science des matériaux

II.1. Qu'est-ce que la simulation numérique ?

II.2. Différence entre la simulation numérique et la modélisation

II.3. Avantages de la simulation

II.4. Limites de la simulation numérique

II.5. Échelles de la simulation numérique

II.6. Pour les matériaux, on distingue généralement trois échelles spécifiques en espace et en temps

II.6.1. Échelle nanoscopique ou atomique

II.6.2. Échelle mésoscopique

II.6.3. Échelle macroscopique

II.7. Présentation de trois méthodes de simulation

II.7.1. Dynamique moléculaire (DM)

II.7.1.1. Définition

II.7.1.2. Principe de base

II.7.2. Algorithme

II.7.3. Dynamique des dislocations discrètes (DDD)

II.7.4. Méthode des éléments finis –MEF

Dans ces dernières années, l'évolution des outils de la recherche (tant numériques qu'expérimentaux) dans des domaines aussi variés que la mécanique, la physique, la chimie et la biologie a permis aux chercheurs d'envisager l'étude du comportement d'un matériau au plus près de son environnement réel d'utilisation.

Dans le cas particulier de la science des matériaux, de nouveaux outils numériques ont ainsi été développés pour répondre aux besoins croissants de la recherche et de l'industrie. Ces outils numériques initialement développés comme une aide à la compréhension des phénomènes sont progressivement devenus des outils prédictifs. Actuellement, les modélisations et simulations numériques permettent d'effectuer des expériences à moindre coût ou même des expérimentations impossibles à réaliser.

II.1. Qu'est-ce que la simulation numérique ? [8]

La simulation numérique désigne l'exécution d'un programme informatique sur un ordinateur ou réseau en vue de simuler un phénomène physique réel et complexe (par exemple : chute d'un corps sur un support mou, résistance d'une plateforme pétrolière à la houle, fatigue d'un matériau sous sollicitation vibratoire, usure d'un roulement à billes...).

Les simulations numériques scientifiques reposent sur la mise en œuvre de modèles théoriques utilisant souvent la technique des éléments finis. Elles servent donc à étudier le fonctionnement et les propriétés d'un système modélisé ainsi qu'à en prédire son évolution. On parle également de calcul numérique. Les interfaces graphiques permettent la visualisation des résultats des calculs par des images de synthèse.

Aujourd'hui, la simulation numérique est utilisée dans de nombreux domaines de recherche et développement : mécanique, mécanique des fluides, science des matériaux, astrophysique, physique nucléaire, aéronautique, climatologie, météorologie, physique théorique, mécanique quantique, biologie, chimie... ainsi qu'en sciences humaines : démographie, sociologie...

II.2. Différence entre la simulation numérique et la modélisation

Souvent, on confond régulièrement les termes de **modélisation** et de **simulation**, or, ces termes recouvrent des réalités bien différentes même si elles sont liées d'une certaine manière. Toutes deux ont pour objet de fournir une représentation mathématique de phénomènes physiques ou de lois de comportement.

La modélisation consiste à mettre sous une forme analytique simple un phénomène physique en utilisant des lois physiques. La représentation mathématique étant issue d'une théorie physique rigoureuse, on parle de modèle car il possède, dans ce cas, un sens physique réel.

Lorsque la représentation mathématique est issue de l'observation ou de l'expérience, la formulation mathématique est le plus souvent empirique et n'a pas toujours une signification physique rigoureuse.

C'est le cas par exemple des lois de comportement utilisées en mécanique. Le plus souvent, ces lois ne font que représenter le plus fidèlement possible les variations observées. On parle alors plutôt de *simulation*.

La simulation peut s'exercer du réel vers la modèle ou l'inverse. Dans le premier cas, on parle de modèles descriptifs et dans le second cas de modèles prédictifs

II.3. Avantages de la simulation :

La simulation numérique présente les avantages suivants par rapport à l'expérimentation réelle :

- Elle est beaucoup moins coûteuse qu'une expérimentation réelle, cependant il faut noter que certaines simulations ont un coût très élevé (même s'il reste faible devant celui de l'expérimentation). Ceci explique que les utilisateurs de la simulation, en particulier lorsqu'elle utilise des moyens de calcul exceptionnels, sont les industries à forte valeur ajoutée (aéronautique et espace, nucléaire) ou à risque élevé (militaire).
- Elle est souvent plus rapide à mettre en œuvre

- Elle permet d'évaluer l'influence des différents paramètres expérimentaux, seuls ou couplés, avec un minimum d'essais
- Elle permet d'effectuer des expériences irréalisables techniquement

II.4. Limites de la simulation numérique

Les limites de la simulation numérique sont de trois ordres.

Tout d'abord, certains phénomènes sont encore mal compris. Ils sont donc difficilement traduisibles en équations, qui sont le seul moyen de communiquer avec l'ordinateur.

En outre, certains modèles requièrent des puissances de calcul indisponibles actuellement. Dans certains domaines, il est possible de simuler étape par étape alors que la totalité reste d'une inatteignable complexité. On a alors recours à des « codes systèmes » qui s'alimentent des codes simulant chaque composant à partir de modèles obtenus à l'aide d'équations.

En plus, l'ordinateur permet aujourd'hui de simuler des phénomènes très complexes tel qu'un avion complet mais la puissance reste encore insuffisante pour représenter l'ensemble des phénomènes météorologiques : la simulation de l'évolution du temps reste encore très difficile au delà de quelques heures.

Enfin, il existe une limite d'ordre théorique. Comme le nombre d'opérations nécessaires à la résolution d'un modèle croît exponentiellement en fonction du degré de précision que l'on demande, certains modèles mathématiques ne peuvent pas être résolus par un ordinateur en un temps raisonnable.

II.5. Échelles de la simulation numérique

La maîtrise, la prédiction et l'optimisation des processus de conception des matériaux passent par la compréhension des phénomènes et des mécanismes intervenant à différentes échelles, en espace comme en temps. La figure 2.1 présente l'étendu des phénomènes observables dans la nature dans les échelles de temps et d'espace.

La simulation numérique ne peut traiter une telle variété de phénomènes à l'aide d'une seule technique. Pour chaque type de phénomène et en fonction des

échelles de temps et d'espace mis en jeu, on dispose de modèles ou de simulations spécifiques et donc de codes spécifiques.

II.6. les trois échelles de la simulation numérique: [8]

- l'échelle nanoscopique ou atomique ;
- l'échelle mésoscopique ;
- l'échelle macroscopique.

Dans pour l'analyse et la compréhension des propriétés macroscopiques observées, il est impératif de déterminer les échelles où agit chaque mécanisme.

II. 6.1. Échelle nanoscopique ou atomique

Elle concerne les phénomènes se déroulant à l'échelle de l'atome ; l'élément de base est l'atome et la dimension caractéristique est le paramètre de maille du réseau cristallin. On peut considérer la structure électronique des atomes, c'est le cas des méthodes *ab initio* où l'on tente de résoudre l'équation de Schrödinger, ou considérer l'atome comme une entité unique, c'est le cas de la *dynamique moléculaire* et de certaines méthodes de Monte-Carlo [8]. Les capacités actuelles de calculs ne permettent pas de traiter, de matière virtuelle, un nombre considérable d'atomes et donc des volumes importants, les dimensions maximales restant actuellement de l'ordre de 0,1 μm de côté et le nombre d'atomes traités reste largement inférieur au nombre d'Avogadro..

II. 6.2. Echelle mésoscopique

Lorsque les échelles de temps et d'espace dépassent la centaine de picosecondes et la centaine de nanomètres, la simulation à l'échelle atomique s'avère impossible. Lorsque, de plus, l'échelle spatiale ne dépasse pas la centaine de microns, on parle d'échelle mésoscopique. Elle est équivalente à l'échelle de la microstructure. A ce niveau, on traitera les joints de grains, les dislocations, les précipités...etc.

On peut citer particulièrement deux méthodes utilisées en simulation, les *méthodes de champ de phase*, pour l'étude des évolutions de phases

thermodynamiques et, d'autre part, la *dynamique des dislocations discrètes* (DDD), destinée à la simulation de la déformation plastique.

II.6.3. Échelle macroscopique

Il existe des simulations numériques qui permettent de prévoir les phénomènes qui se manifestent à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire à l'échelle du produit (du cm au m, de la seconde au siècle). Ainsi, ni la microstructure ni les phénomènes ne sont explicitement représentés ; seule est prise en compte leur influence sur les quantités macroscopiques au niveau d'un élément de volume. Par exemple, dans le cas de la mécanique des milieux continus, ces quantités sont des contraintes et des déformations, et on utilise pour cela des modèles d'élasticité, de plasticité, de viscosité, d'endommagement, etc.

La méthode la plus simple est la méthode aux *différences finis MDF* pour les calculs plus complexes, on lui préfère la méthode des *éléments finis MEF*.

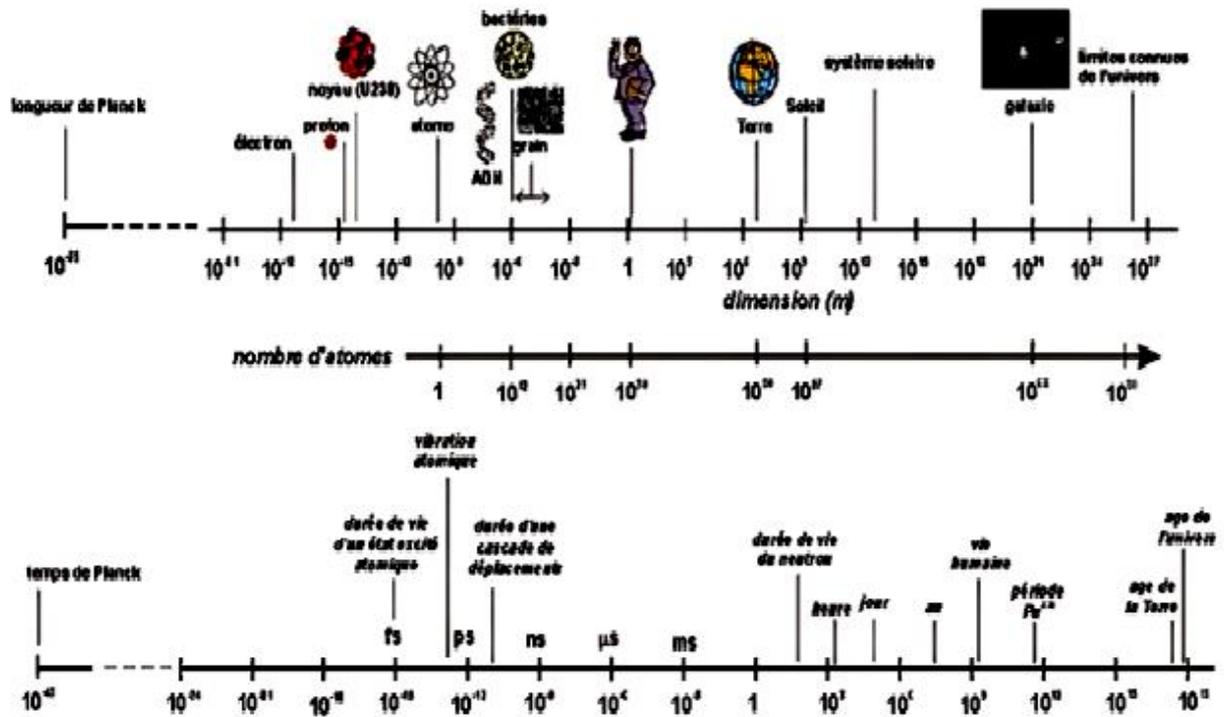


Figure 2.1 : Étendues des échelles de temps et d'espace. [9]

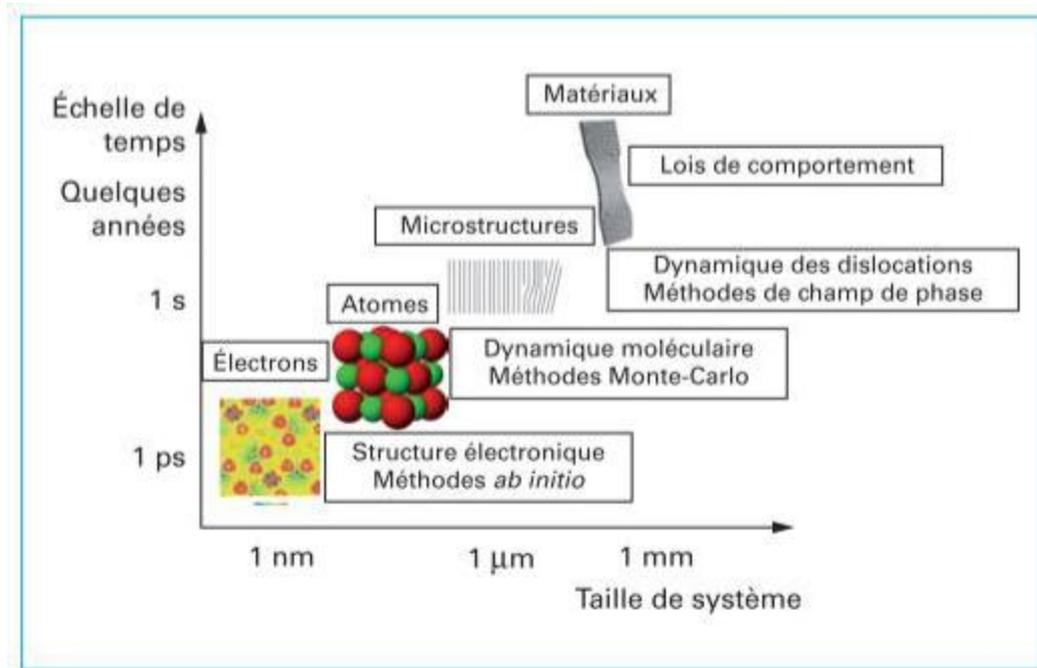


Figure 2.2 : Deux représentations de l'étendu des phénomènes observables dans la nature dans les échelles de temps et d'espace.[8]

II.7. Présentation de trois méthodes de simulation

Dans ce qui suit nous allons présenter brièvement une méthode pour chaque échelle.

II.7.1. Dynamique moléculaire (DM):[9]

Le comportement d'un système de particules composé de noyaux, d'atomes, d'électrons et de photons est en principe décrit par les lois de la mécanique quantique relativiste. Toute autre description à un niveau supérieur, comme les atomes et molécules au lieu des noyaux et électrons ou la dynamique classique au lieu de la dynamique quantique, représente une approximation.

L'utilisation de la dynamique moléculaire (DM) date des années 1950, et l'intérêt pour cette technique ne cesse de croître dans la communauté des matériaux.

II.7.1.1.1. Définition

La dynamique moléculaire consiste à étudier la trajectoire d'un ensemble d'atomes en appliquant les lois de la mécanique classique newtonienne c.a.d à simuler les mouvements atomiques au cours du temps.

II.7.1.2. Principe de base

Un calcul de dynamique moléculaire consiste tout d'abord à créer un milieu numérique constitué par un ensemble d'atomes disposés selon une certaine structure représentative du milieu réel que l'on cherche à simuler (par exemple, une structure périodique représentative de la maille cristallographique du matériau). On y introduit un (ou des) potentiel(s) d'interaction et des conditions initiales représentatives (une certaine température par exemple). La connaissance des positions de tous les atomes à un instant donné t permet de calculer à partir des potentiels les forces qui s'exercent sur chacun des autres atomes et donc leurs accélérations respectives.

À partir des positions (et des vitesses) à l'instant t , on calcule à l'aide d'un algorithme d'intégration temporel les positions et les vitesses à un instant $t + dt$. À chaque instant, on peut calculer l'énergie potentielle du système à partir du potentiel d'interaction. Chaque atome de la molécule est considéré comme une masse ponctuelle dont le mouvement est déterminé par l'ensemble des forces exercées sur lui par les autres atomes en fonction du temps (échelle de temps atomique : 1 femtosec = 10^{-15} s)

Les forces exercées sont considérées comme constantes.

La molécule est donc perçue comme une entité dynamique dont les atomes modifient leurs positions spatiales au cours du temps.

II.7.1.3. Algorithme

Au temps t , chaque atome i , de coordonnées x_i, y_i, z_i et de masse m_i subira une accélération a_i telle que

$$\vec{f}_i = m_i \vec{a}_i \quad (2.1)$$

m_i : Masse de l'atome i

\vec{a}_i : Accélération de l'atome i

\vec{f}_i : Force agissant sur l'atome i

La dynamique moléculaire permet de calculer la force exercée sur chaque atome et fournit différentes informations sur la trajectoire (vitesse et position des atomes pendant un intervalle de temps spécifique, de l'ordre de 1 à 100 ps).

La force $F(i)$ qui s'exerce sur un atome i de coordonnées $r(i)$ au temps t est déterminée par dérivation de la fonction énergie potentielle.

$$\vec{F}_i = - \frac{d\vec{E}(r_1, \dots, r_n)}{dr_i(t)} \quad (2.2)$$

E : fonction de l'énergie potentielle totale d'interaction

r_i : coordonnées cartésiennes de l'atome i

$$\vec{F}_i = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} \quad (2.3)$$

On peut alors intégrer les équations de mouvement et obtenir une trajectoire de chaque atome en fonction du temps. Pour cela, on utilise l'algorithme de Verlet.

Il consiste à calculer:

- Les accélérations atomiques à partir des forces s'exerçant sur chaque atome et des masses atomiques.
- Les vitesses de chaque atome à partir des accélérations atomiques.
- Les positions des atomes à partir des vitesses atomiques:

La **figure 2.3** représente un exemple d'utilisation de la dynamique moléculaire

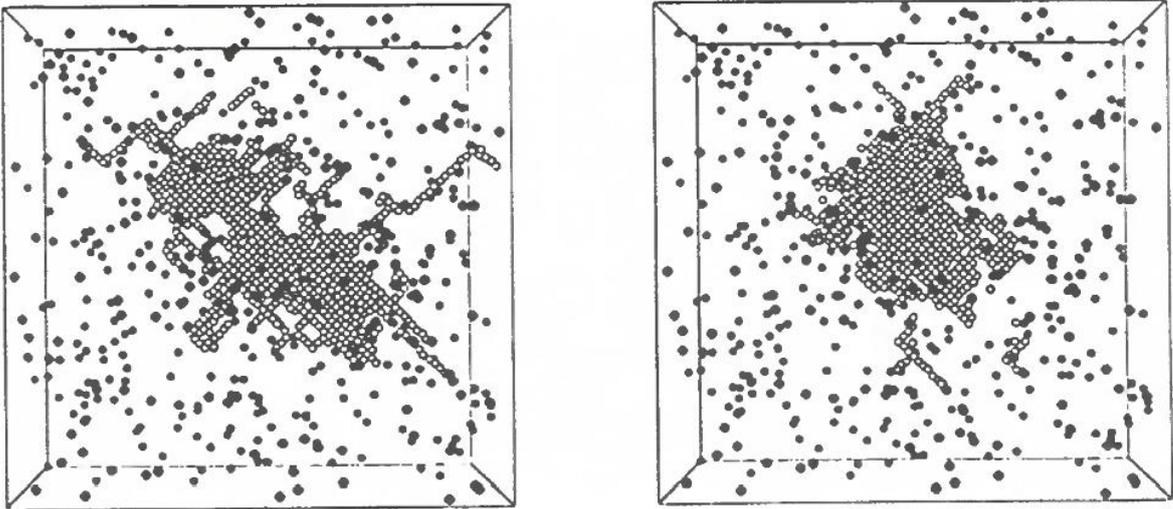


Figure 2.3 : Visualisation des atomes ce déplaçant dans une cascade de déplacement dans un alliage Fe-0,2 %Cu pour deux distributions initiales de vitesses différentes [9]

II.7.2. Dynamique des dislocations discrètes (DDD)

Les dislocations sont des défauts linéaires, présents dans les matériaux cristallins, et sont la cause physique des déformations plastiques. Lorsqu'un matériau est sollicité mécaniquement, les dislocations présentes dans ce matériau se mettent en mouvement, ce qui induit directement la déformation plastique.

La dynamique des dislocations ou dynamique des dislocations discrète, souvent abrégée en DD ou DDD, consiste à suivre l'évolution d'un ensemble de dislocations au cours du temps. Cette simulation permet de modéliser la déformation plastique des matériaux cristallins, à une échelle micrométrique.

Les premières simulations (à 2Dimensions) de dislocations datent des années 60 (L. M. Brown [10], A.J.Foreman [11-12], D.J.Bacon [13] ; à partir des années 90, grâce aux produit informatique, de nouveaux modèles, en particulier en 3D, font leur apparition (G.Canova [14-15-16-17]).

Bien qu'il existe plusieurs familles de codes numériques traitant la dynamique des dislocations, tous reposent sur le même principe: la discrétisation des lignes, la cinétique des segments et les conditions aux limites.

La DD permet donc de tester les réponses d'une microstructure de dislocations d'un matériau soumis à une sollicitation mécanique donnée. Pour ce faire, dans un code de DD il faut introduire les éléments suivants [18] :

- Une modélisation des dislocations, qui implique généralement une triple discrétisation :

- des lignes de dislocation découpées en un ensemble de « segments de dislocation », traités comme des inclusions élastiques plongées dans un milieu continu élastique.
- du temps en pas dont la durée est généralement comprise entre 10^{-10} et 10^{-8} s.
- des positions atteignables par ces dislocations, qui doivent correspondre à celles d'un réseau homothétique de la maille cristalline du matériau simulé.

- La théorie des dislocations, qui fournit les éléments nécessaires pour décrire le comportement individuel des segments de dislocation avec entre autres :

- les lois de mobilité, déterminant la vitesse d'une dislocation en fonction de la contrainte effective qu'il subit.
- les interactions entre dislocations par le biais de leurs champs de contrainte, énergies de ligne, etc.
- la gestion du glissement dévié, ou la possibilité d'une dislocation de changer de plan de glissement.

Une fois le modèle de DD en place, la simulation doit tenir compte des considérations microstructurales (taille et forme de la boîte de simulation) et environnementales (conditions aux limites) de chaque cas étudié. Ainsi, dans certains cas on pourra s'intéresser au comportement à cœur du matériau, et l'on introduira des conditions aux limites périodiques ; dans d'autres, on s'intéressera plutôt au comportement d'un élément microstructural tel qu'un grain ou une latte, avec des conditions aux limites adaptées.

La mise en place d'une simulation nécessite aussi des informations sur la nature et la distribution des éléments de la microstructure autres que les

dislocations ayant un impact sur la plasticité, tels que des précipités ou des défauts d'irradiation. Ces informations, seront issues soit des observations expérimentales, soit des simulations aux échelles inférieures.

Elles seront introduites par des règles locales d'interaction entre ces éléments et les segments de dislocations.

La **figure 2.4** représente un exemple de simulation de la plasticité dans un monocristal de cuivre [9]

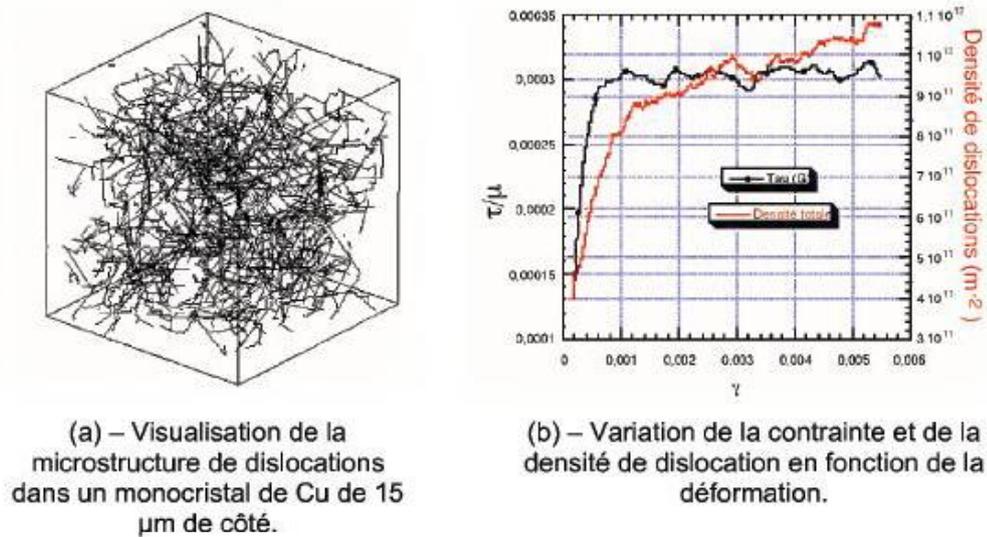


Figure 2.4 : Simulation de la plasticité dans un monocristal de cuivre [9]

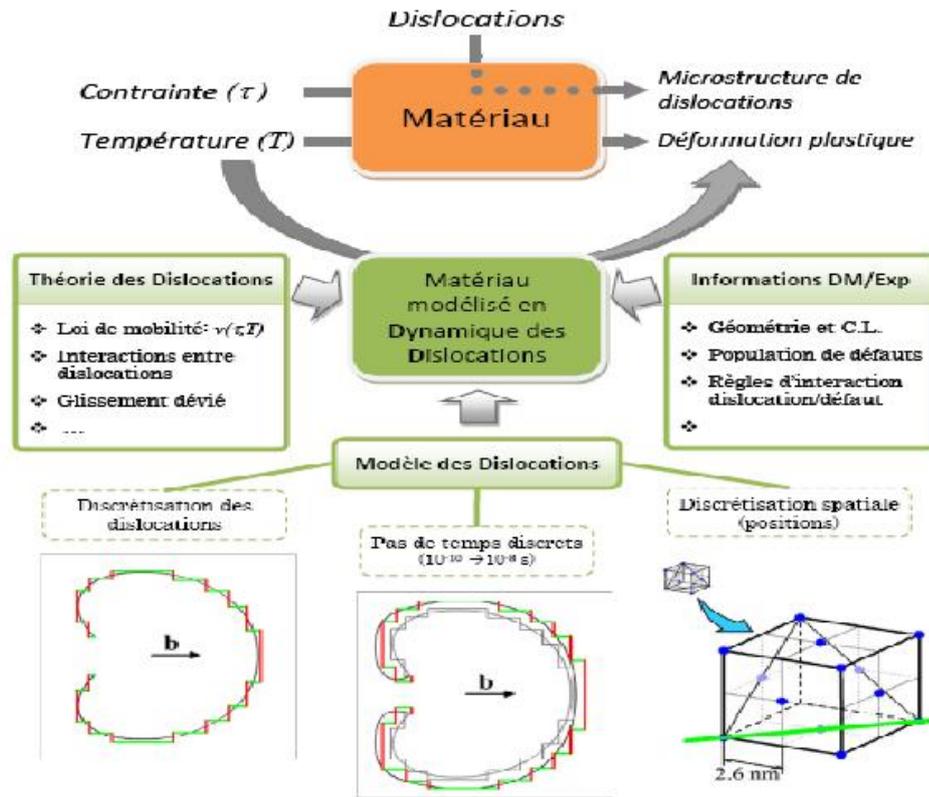


Figure 2.5 : Diagramme de principe d'une simulation en dynamique des dislocations [18]

II.7.3. Méthode des éléments finis -MEF-

La figure 2.6 illustre l'application de la méthode des éléments finis au calcul du comportement mécanique d'une structure.

Dans ce cas, on cherche à résoudre pour l'ensemble de la structure l'équation générale

$$\{F\} = [k] \{e\} \quad (2.4)$$

Où $\{F\}$ représente le tenseur des forces appliquées, $\{e\}$ le tenseur des déplacements et $[k]$ la matrice de raideur de la structure, qu'il faudra déterminer.

Pour cela on considère que la matrice de la raideur de la structure est donnée par la somme des matrices de raideur de chaque maille.

$$[k] = \sum_{i=1}^M [K_i] \quad (2.5)$$

En tenant compte de la continuité entre les mailles, on calcule le déplacement e_i de chaque nœud (le déplacement d'un point quelconque de la maille étant calculé par une combinaison linéaire du déplacement des nœuds de la maille).

Du déplacement, on en déduit la déformation, puis la contrainte d'où la matrice de raideur associée, en tenant compte des conditions aux limites initiales :

- Aux nœuds bloqués, le déplacement est nul : $\{e_b\}=0$
- Aux nœuds où les forces extérieures sont appliquées, la contrainte est connue.

On obtient un système d'équation qui conduit à la matrice de raideur du système. Cette matrice est de très grande taille : $2N \times 2N$ si N est le nombre de nœuds.

Cette méthode est une approximation de la réalité. Les déformations calculées sont exactes aux nœuds mais approchées entre les nœuds en raison des interpolations linéaires ; les contraintes calculées sont moyennées et constantes à l'intérieure de la maille. La précision finale du calcul dépend donc de la finesse du maillage : plus celui-ci sera fin et plus le calcul sera précis .

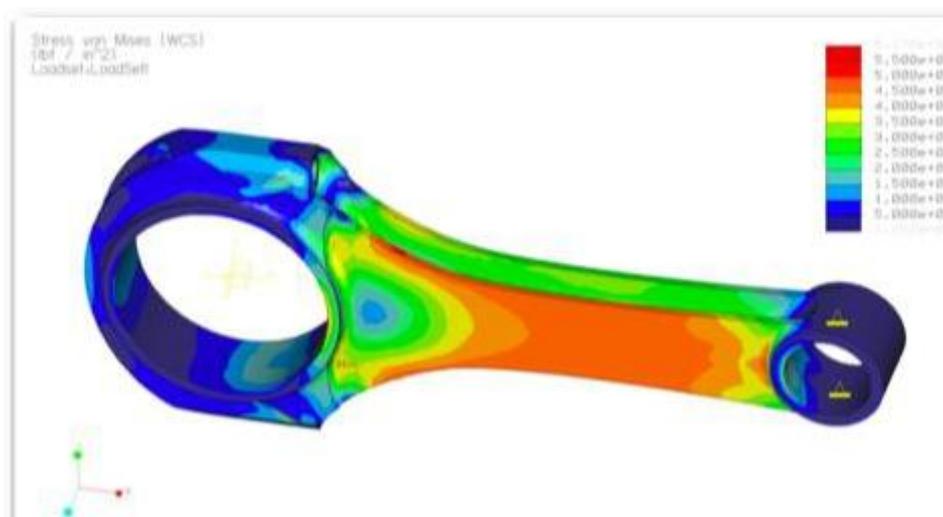


Figure 2.6 : Visualisation par éléments finis de la distribution des contraintes dans une bielle

On peut citer parmi les principaux codes de calculs de structure par éléments finis : code_Aster d'EDF, CASTEM2000 du CEA, ZeBuLoN de l'Écoles de Mines de Paris et divers codes commerciaux comme Abaqus et ICAB.

Les différentes étapes de la simulation, ainsi que les concepts correspondants, sont récapitulés sur la **Figure 2.7**

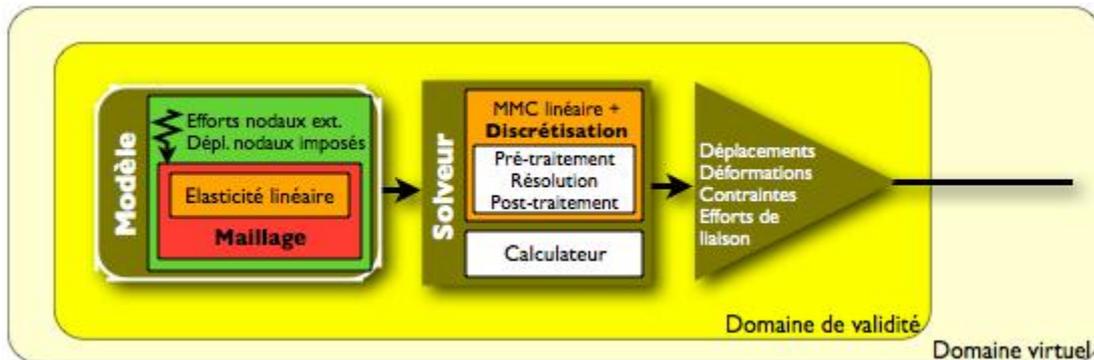


Figure 2.7 : Schéma récapitulatif des principales étapes et des principaux concepts de la simulation par éléments finis. [19]

CHAPITRE III

TECHNIQUES D'HOMOGENEISATION

Chapitre III

Techniques d'homogénéisation

III.1. Introduction

III.2. Volume élémentaire représentatif (V.E.R)

III.3. Méthode d'homogénéisation

III.3.1. Étapes d'homogénéisation

III.3.1.1. Représentation

III.3.1.2. Localisation

III.3.1.3. Homogénéisation

III.3.2. Techniques et Méthodes d'Homogénéisation

III.3.2.1. Méthodes d'homogénéisation basées sur les hypothèses de Voigt et Reuss

III.3.2.2. Méthodes d'homogénéisation faisant appel au tenseur d'Eshelby

III.3.2.2.1. Approche Auto-Cohérente

III. 3.2.2.2. Bornes optimales de Hashin-Shtrikman-Walpole

III.1. Introduction :

Le comportement mécanique d'un matériau hétérogène exige l'analyse de sa microstructure et la résolution d'un problème microscopique. La méthode d'homogénéisation permet d'estimer les propriétés macroscopiques d'un matériau hétérogène à partir des propriétés des différentes phases qui le constituent et de certains paramètres caractérisant leur répartition spatiale. L'objectif est de remplacer le matériau hétérogène réel par un matériau homogène équivalent de même structure à l'échelle macroscopique. La procédure d'homogénéisation repose sur le choix d'un volume élémentaire qui doit être représentatif des hétérogénéités du matériau appelé volume élémentaire représentatif (V.E.R). Ce volume doit être :

Suffisamment grand pour que les résultats restent inchangés pour un volume plus grand. Il doit contenir toutes les hétérogénéités dans la microstructure.

Suffisamment petit pour que l'on puisse considérer que la sollicitation qu'il subit reste macroscopiquement homogène.

Les méthodes de traitements des matériaux hétérogènes [20], [21], distinguent trois étapes principales :

- L'étape de la représentation
- L'étape de la localisation
- L'étape d'homogénéisation :

Ces trois étapes seront détaillé plus tard

III.2. Volume élémentaire représentatif (V.E.R)

Le Volume Elémentaire Représentatif (VER) joue un rôle important dans la mécanique et la physique des milieux hétérogènes aléatoires dans le but de déterminer leurs propriétés effectives.

Toute structure hétérogène est représentée par trois longueurs caractéristiques : L lié à l'échelle de la structure macroscopique, d associé à la taille des hétérogénéités (taille des inclusions) et l se situant entre l'échelle microscopique et l'échelle

macroscopique. Le choix de d est crucial car il dépend directement des phénomènes physiques étudiés.

On peut ainsi définir un Volume Élémentaire Représentatif ou V.E.R du matériau hétérogène. Celui-ci doit être caractéristique de la microstructure du matériau. Il est ensuite remplacé par un Milieu Homogène Équivalent (MHE) qui n'est autre qu'un milieu ayant les mêmes propriétés effectives que le V.E.R. Il peut donc en tout état de cause représenter le matériau.

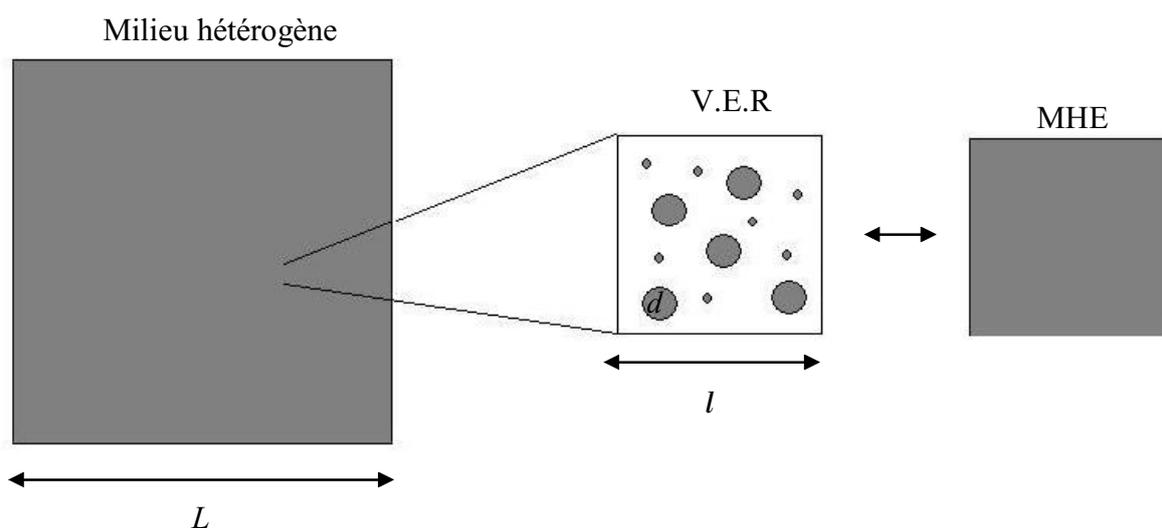


Figure. 3.1 – Échelles du matériau.

Le choix du V.E.R est très important. Ainsi si le matériau a une répartition périodique des hétérogénéités, la cellule de base du V.E.R possédera un arrangement elle aussi périodique. Dans le cas des milieux hétérogènes, bien que deux V.E.R voisins soit très différents leur comportement macroscopique lui sera le même [22].

III.3. Méthode d'homogénéisation

Les matériaux composites sont formés d'au moins deux matériaux. Ils peuvent être plus ou moins complexes. Ils sont constitués de différentes phases (matériaux) qui possèdent leurs propres caractéristiques.

Modéliser par éléments finis une grande structure faite d'inclusions peut s'avérer très difficile et coûteuse en temps de calcul. Tout d'abord, il faut savoir mailler avec précision la structure et ensuite savoir gérer les conditions aux limites qui sont appliquées. C'est pourquoi, il est intéressant d'homogénéiser. Il s'agit de trouver un matériau équivalent qui présente, de façon macroscopique, le comportement mécanique du composite.

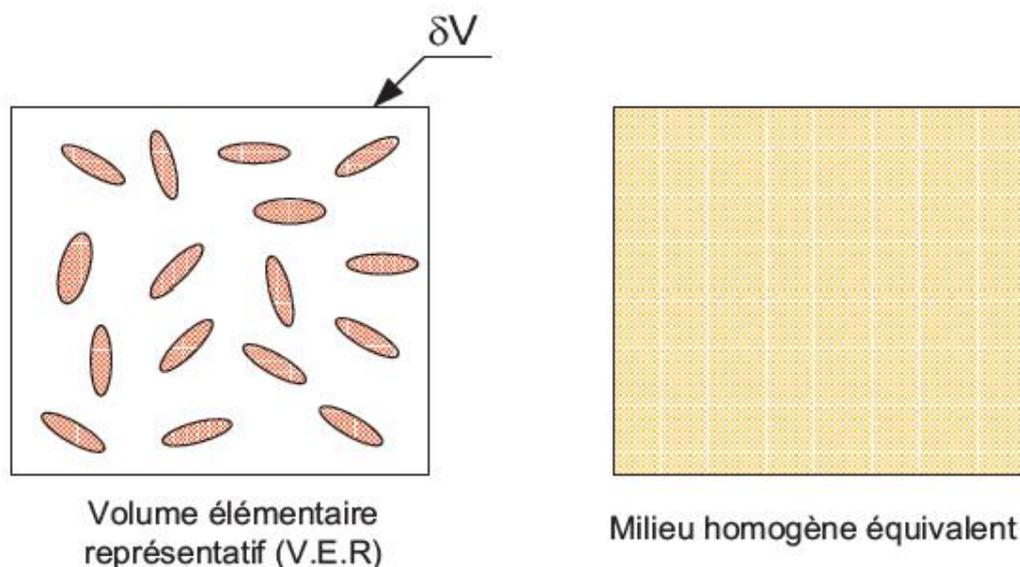


Figure 3.2 – Une structure constituée d'un matériau hétérogène

III.3.1. Étapes d'homogénéisation

Le comportement mécanique d'un matériau hétérogène exige l'analyse de sa microstructure et la résolution d'un problème microscopique. La méthode d'homogénéisation permet d'estimer les propriétés macroscopiques d'un matériau hétérogène à partir des propriétés des différentes phases qui le constituent et de certains paramètres caractérisant leur répartition spatiale. L'objectif est de remplacer le matériau hétérogène assemblage complexe de nombreux éléments homogènes de petite taille, de caractéristiques mécaniques et géométriques variables de l'un à l'autre. La procédure d'homogénéisation repose sur le choix d'un volume élémentaire qui doit être représentatif des hétérogénéités du matériau appelé volume élémentaire représentatif (V.E.R). Ce volume doit être :

- suffisamment grand pour que les résultats restent inchangés pour un volume plus grand. Il doit contenir toutes les hétérogénéités dans la microstructure.
- suffisamment petit pour que l'on puisse considérer que la sollicitation qu'il subit reste macroscopiquement homogène.

Les méthodes de traitement des matériaux hétérogènes distinguent trois étapes principales [23]

- **L'étape de la représentation** : définition des phases, description de leurs répartitions spatiales et de leur comportement mécanique.
- **L'étape de la localisation** : cette étape est aussi la plus « importante », au sens où c'est souvent celle qui pose le plus de problème. Elle consiste à relier l'évolution de l'état individuel de chacune des phases à l'évolution macroscopique de l'état mécanique imposé par le chargement.
- **L'étape d'homogénéisation** : elle consiste à moyenniser les champs des phases sur l'ensemble du V.E.R.

Nous rappelons ci-dessous les détails de chacune de ces étapes d'homogénéisation. On considère un chargement correspondant à des conditions aux limites homogènes. La surface extérieure ∂V du V.E.R peut être soumise à un déplacement u , tel que :

$$u_i = E_{ij} \times x_j \quad x \in \partial V \quad (3.1)$$

qui générerait un champ de déformation E_{ij} uniforme dans tout le volume V .

Les conditions aux limites de force imposée, compatibles avec un champ de contrainte uniforme \sum_{ij} sont définies telles que :

$$\sigma_{ij} \times n_j = \sum_{ij} \times n_j \quad x \in \partial V \quad (3.2)$$

Si on considère un matériau hétérogène comportant N phases différentes. L'indice « m » signifie la phase de la matrice, l'indice « ph » signifie la phase de l'inclusion et V_f est la fraction volumique associée aux renforts (inclusion).

III.3.1.1. Représentation

Dans l'étape de représentation, le nombre des phases contenues dans le V.E.R est très important. On doit déterminer la nature des paramètres permettant la description des phases correspondantes, ensuite, caractériser le comportement mécanique de chaque phase et enfin décrire la géométrie et la proportion de chaque phase. Pour une détermination exacte du comportement effectif du matériau composite, il est nécessaire de connaître de manière précise la répartition spatiale des phases. La fraction volumique de renforts est le paramètre commun à tous les modèles. Le comportement microscopique élastique de chaque phase « ph » est donné par :

$$\sigma_{ij}^{ph} = C_{ijkl}^{ph} \times \varepsilon_{ij}^{ph} \quad (3.3)$$

$$\varepsilon_{ij}^{ph} = S_{ijkl}^{ph} \times \sigma_{ij}^{ph} \quad (3.4)$$

$$C_{ijkl}^{ph} = S_{ijkl}^{ph -1} \quad (3.5)$$

Où :

- σ_{ij}^{ph} et ε_{ij}^{ph} représentent les contraintes et déformations locales de la phase «ph».
- C_{ijkl}^{ph} et S_{ijkl}^{ph} est respectivement le tenseur de rigidité et le tenseur de souplesse de la phase « ph ».

III.3.1.2. Localisation

Le but étant d'assimiler globalement le V.E.R à la particule macroscopique dont il exprime la microstructure, on peut considérer que les sollicitations aux quelles il est soumis découlent des valeurs prises, au sein de la pièce étudiée, par les grandeurs macroscopiques (contraintes, des formations). C'est-à-dire, on recherche des relations entre déformations moyennes locales de chaque phase (ε_{ij}^{ph}) et déformations macroscopiques L_{ij} imposées, ou contraintes moyennes locales de chaque phase (σ_{ij}^{ph}) et σ_{ij}^T contraintes macroscopiques imposées.

Les grandeurs moyennes sont définies par :

$$\left(\varepsilon_{ij}^{\text{ph}} \right) = \frac{1}{v} \times \int_v \varepsilon_{ij}^{\text{ph}} \, dv \quad (3.6)$$

$$\left(\sigma_{ij}^{\text{ph}} \right) = \frac{1}{v} \times \int_v \sigma_{ij}^{\text{ph}} \, dv \quad (3.7)$$

Les relations de localisation des déformations et de concentration des contraintes à partir des quantités moyennes sont :

$$\left(\varepsilon_{ij}^{\text{ph}} \right) = A_{ijkl}^{\text{ph}} \times L_{ij} \quad (3.8)$$

$$\left(\sigma_{ij}^{\text{ph}} \right) = B_{ijkl}^{\text{ph}} \times \sigma_{ij}^T \quad (3.9)$$

Où : A_{ijkl}^{ph} et B_{ijkl}^{ph} désignent respectivement les tenseurs de localisation des déformations et de concentration des contraintes. [23]

3.1.3. Homogénéisation

L'analyse qui précède débouche donc sur deux séries de relations très différentes entre grandeurs locales et globales :

- ✓ Les relations directes de moyennes, de validité très générale.
- ✓ Les relations de localisation, découlant, elles, d'une modélisation spécifique.

La dernière étape celle de l'homogénéisation, vice à l'expression du comportement du milieu homogène équivalent .Elle consiste à déterminer le comportement équivalent du matériau hétérogène.

Les propriétés effectives de ce matériau relient le champ de contrainte moyenne (σ_{ij}) au champ de déformation moyenne (ε_{ij}), calculés dans un V.E.R.

$$\left(\sigma_{ij} \right) = \sum_{\text{ph}=1}^N V_f \left(\sigma_{ij}^{\text{ph}} \right) \quad (3.10)$$

$$\left(\varepsilon_{ij} \right) = \sum_{\text{ph}=1}^N V_f \left(\varepsilon_{ij}^{\text{ph}} \right) \quad (3.11)$$

A partir des conditions aux limites imposées (équations (3.1) et (3.2)), il est possible de démontrer que les contraintes et les déformations locales doivent vérifier les relations :

$$\sigma_{ij} = (\sigma_{ij}) \quad (3.12)$$

$$L_{ij} = (\epsilon_{ij}) \quad (3.13)$$

Grâce aux équations (3.8), (3.9), (3.10), (3.11), (3.12) et (3.13) on peut déduire les propriétés des tenseurs A_{ijkl}^{ph} et B_{ijkl}^{ph} :

$$\sum_{ph=1}^N V_f A_{ijkl}^{ph} = I_{ijkl} \quad (3.14)$$

$$\sum_{ph=1}^N V_f B_{ijkl}^{ph} = I_{ijkl} \quad (3.14)$$

I_{ijkl} : est le tenseur unité d'ordre 4.

La relation constitutive pour le matériau hétérogène est donnée par :

$$(\sigma_{ij}) = C_{ijkl} \times (\epsilon_{ij}) \quad (3.15)$$

En utilisant les équations (3.8),(3.9), (3.10),(3.11), (3.12),(3.13), (3.14) et (3.15) on obtient le tenseur de rigidité équivalent C_{ijkl} qui s'exprime en fonction des tenseurs de rigidité C_{ijkl}^{ph} de chaque phase « ph » et des tenseurs de localisation A_{ijkl}^{ph} de la déformation dans chaque phase « ph » :

$$\sum_{ph=1}^N V_f (\sigma_{ij}^{ph}) = C_{ijkl} \times (\epsilon_{ij})$$

$$\sum_{ph=1}^N V_f C_{ijkl}^{ph} (\epsilon_{ij}^{ph}) = C_{ijkl} \times L_{ij}$$

$$\sum_{ph=1}^N V_f C_{ijkl}^{ph} A_{ijkl}^{ph} * L_{ij} = C_{ijkl} \times L_{ij}$$

$$C_{ijkl} = \sum_{ph=1}^N V_f \times C_{ijkl}^{ph} \times A_{ijkl}^{ph}$$

$$C_{ijkl} = \sum_{ph=1}^N V_f \times C_{ijkl}^{ph} \times A_{ijkl}^{ph} \quad (3.16)$$

Le tenseur de rigidité équivalent d'un matériau hétérogène dépend donc du tenseur de localisation. Ce tenseur de localisation dépend de chaque modèle d'homogénéisation.

III.3.2. Méthodes usuelles d'homogénéisation

Pour estimer des propriétés mécaniques effectives d'un matériau hétérogène, il existe beaucoup de méthodes d'homogénéisation dans la bibliographie. Dans la littérature on distingue les méthodes suivantes : la solution diluée, la méthode Aute-cohérente, le modèle de Mori-Tanaka, les bornes de Voigt et Reuss ainsi que les bornes optimales de Hashin-Shtrikman-Walpole.

III.3.2.1. Solution diluée :

Dans cette solution, chaque inclusion est considérée comme noyée dans un milieu infini ayant les propriétés de la matrice. La solution diluée est donc valable s'il n'y a aucune interaction entre les inclusions, c'est-à-dire si elles sont suffisamment éloignées les unes des autres. Par conséquent, elle s'applique seulement aux matériaux hétérogènes contenant une faible fraction volumique d'inclusion f_1 .

Dans le cas d'un composite à 2 phases (matrice en phase 1 et inclusion en phase 2), en supposant que les inclusions sont sphériques de comportement élastique linéaire isotrope, les coefficients de compressibilité K et de cisaillement μ équivalents sont donnés par les relations suivantes [24] :

$$K^{dl} = K_1 + f_2 \frac{(K_2 - K_1)(3K_1 + 4\mu_1)}{(3K_2 + 4\mu_1)} \quad (3.17)$$

$$\frac{\mu^{dl}}{\mu_1} = 1 - \frac{15(1-\nu_1)(1-\frac{\mu_2}{\mu_1})f_2}{7-5\nu_1+2(4-5\nu_1)\frac{\mu_2}{\mu_1}} \quad (3.18)$$

III.3.2.2. Approche auto-cohérente

Dans cette méthode, pour tenir compte de l'interaction entre les constituants du milieu hétérogène, on suppose que le milieu entourant chaque inclusion est un milieu infini possédant les caractéristiques du matériau homogénéisé recherché. Pour un composite biphasé, avec des inclusions sphériques, une solution analytique permet d'exprimer les caractéristiques élastiques recherchées [25] :

$$K^{AC} = K_1 + f_2 \frac{(K_2 - K_1)(3K^{AC} + 4\mu^{AC})}{(3K_2 + 4\mu^{AC})} \quad \dots\dots\dots(3.19)$$

$$\mu^{AC} = \mu_1 + f_2(\mu_2 - \mu_1) \frac{15(1-\nu^{AC})}{\mu^{AC}(7-5\nu^{AC}) + 2(4-5\nu^{AC})\mu_2} \quad \dots\dots\dots(3.20)$$

Où K^{AC} et μ^{AC} représentent respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement équivalents.

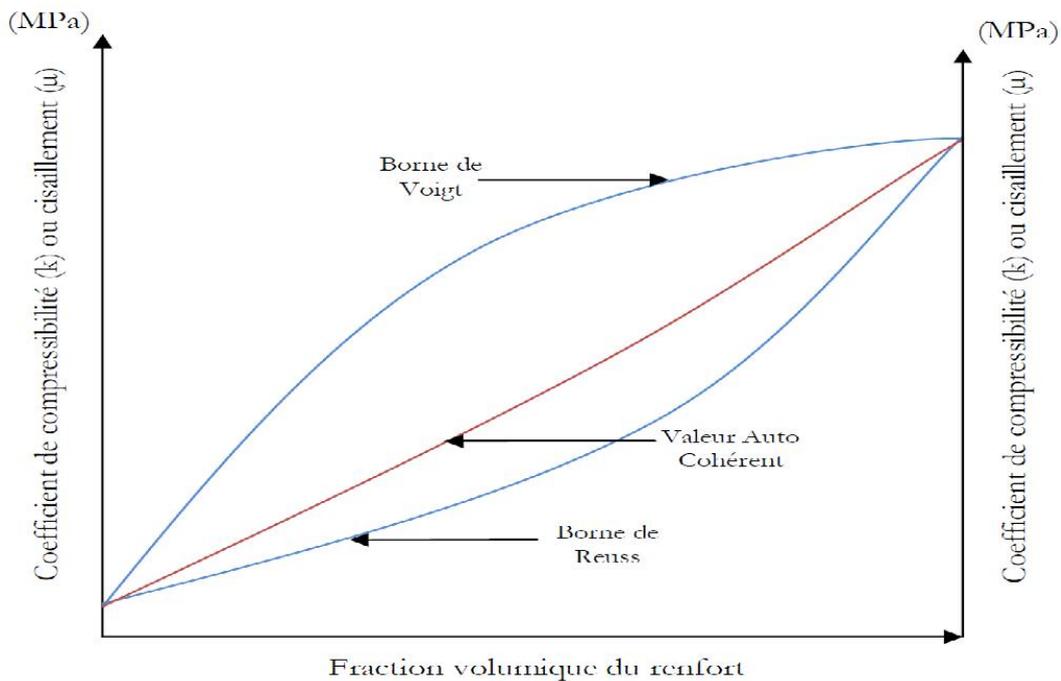


Figure. 3.2 – Modèle auto-cohérent.

III.3.2.3. Modèle de Mori-Tanaka :

En 1973, Mori et al. ont proposé une méthode de calcul de la contrainte moyenne et de l'énergie élastique stockée dans la matrice d'un matériau contenant une fraction volumique d'inclusions. Benveniste a ensuite publié une interprétation claire de ce modèle. Dans ce modèle, le renfort est noyé dans un milieu infini ayant les propriétés de la matrice. Le V.E.R. est soumis à l'infini à la déformation moyenne de la matrice in-situ dans le composite.

Pour un composite élastique linéaire à deux phases avec des inclusions sphériques, le module de compressibilité équivalent K^{MT} et le module de cisaillement équivalent μ^{MT} sont définis par les relations suivantes :

$$K^{MT} = K_1 + f_2 \frac{K_1(K_2 - K_1)}{[(1-f_2)(K_2 - K_1)\alpha_1 + K_1]} \quad (3.21)$$

$$\mu^{MT} = \mu_1 + f_2 \frac{\mu_1(\mu_2 - \mu_1)}{[(1-f_2)(\mu_2 - \mu_1)\beta_1 + \mu_1]} \quad (3.22)$$

OÙ les paramètres α_1 et β_1 valent :

$$\alpha_1 = \frac{3K_1}{3K_1 + 4\mu_1} \quad (3.23)$$

$$\beta_1 = \frac{6(K_1 + 2\mu_1)}{5(3K_1 + 4\mu_1)} \quad (3.24)$$

III.3.2.4. Bornes de Voigt et Reuss :

La borne de Voigt résulte d'une approche en déformation, qui suppose que la déformation est constante dans toutes les phases et égale à la déformation macroscopique imposée E_{ij}

Soit dans chaque phases « ph » : $\varepsilon_{ij\text{ph}} = E_{ij}$. Le tenseur de localisation de la déformation est réduit partout au tenseur unité $A_{ijkl\text{ph}} = I_{ijkl}$.

La borne de Reuss est l'approche duale, approche en contrainte qui considère que la contrainte est constante dans toutes les phases et égale à la contrainte macroscopique imposée Σ_{ij} . Soit dans chaque phase « ph » : $\underline{\sigma}_{\text{ph}} = \Sigma_{ij}$ et le tenseur de localisation de contrainte est réduit partout au tenseur unité $B_{ijkl\text{ph}} = I_{ijkl}$

Voigt et Reuss donnent deux bornes supérieure et inférieure du comportement équivalent.

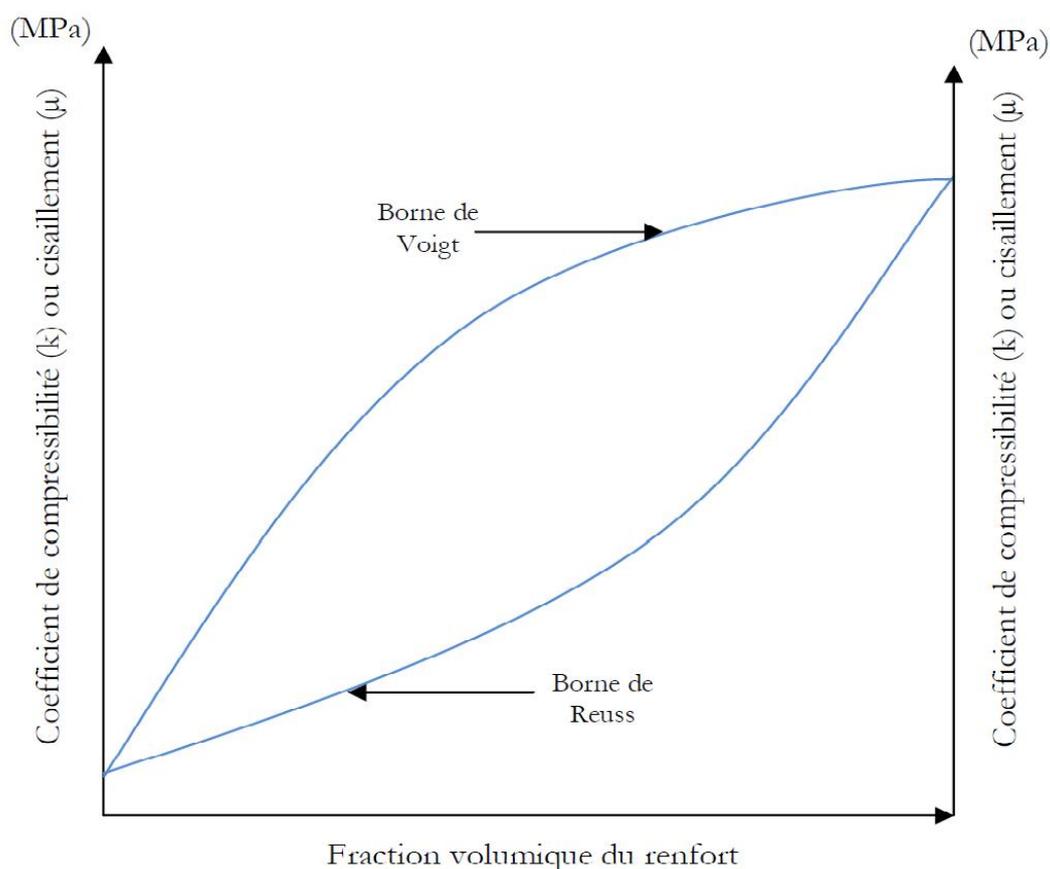


Figure. 3.3 – Illustration des bornes de Voigt et Reuss [23]

III. 3.2.5. Bornes optimales de Hashin-Shtrikman-Walpole

Le schéma de Hashin-Shtrikman-Walpole (H.S.W) est le même que pour la méthode Auto-Cohérente mais le matériau homogène équivalent entourant les différents constituants est remplacé par un matériau de comparaison. Si le matériau de comparaison est plus "raide", on trouve la borne supérieure de la rigidité du composite, par contre, si le matériau de comparaison est plus "souple", on aboutit à la borne inférieure de la rigidité du composite. Ces bornes conduisent à des prédictions plus resserrées que celles fournies par les bornes de Voigt et Reuss [23] .

Les solutions pour un composite de deux phases avec une inclusion sphérique sont :

$$K_{min}^{HSW} = K_1 + f_2 \frac{K_1(K_2 - K_1)}{K_1 + \alpha_1(1 - f_2)(K_2 - K_1)} \quad (3.25)$$

$$K_{max}^{HSW} = K_2 + (1 - f_2) \frac{K_2(K_1 - K_2)}{K_2 + \alpha_2 f_2(K_1 - K_2)} \quad (3.26)$$

Le module de compressibilité équivalente du composite vérifie :

$$K_{min}^{HSW} \leq K \text{ composite} \leq K_{max}^{HSW} \quad \text{avec} \quad \alpha_r = \frac{3k_r}{3k_r + 4\mu_r}$$

$$\mu_{min}^{HSW} = \mu_1 + f_2 \frac{\mu_1(\mu_2 - \mu_1)}{\mu_1 + \beta_1(1 - f_2)(\mu_2 - \mu_1)} \quad (3.27)$$

$$\mu_{max}^{HSW} = \mu_2 + (1 - f_2) \frac{\mu_2(\mu_1 - \mu_2)}{\mu_2 + \beta_2 f_2(\mu_1 - \mu_2)} \quad (3.28)$$

Et le module de cisaillement équivalent du composite se situe entre ces deux bornes :

$$\mu_{min}^{HSW} \leq \mu \text{ composite} \leq \mu_{max}^{HSW} \quad \text{avec} \quad \beta_r = \frac{6(k_r + 2\mu_r)}{5(3k_r + 4\mu_r)}$$

Si on suppose que la matrice est la phase la plus souple, d'après l'interprétation de Benveniste [26] sur le modèle de Mori-Tanaka, on peut montrer que le modèle de Mori-Tanaka, correspond à la borne inférieure de H.W.S.

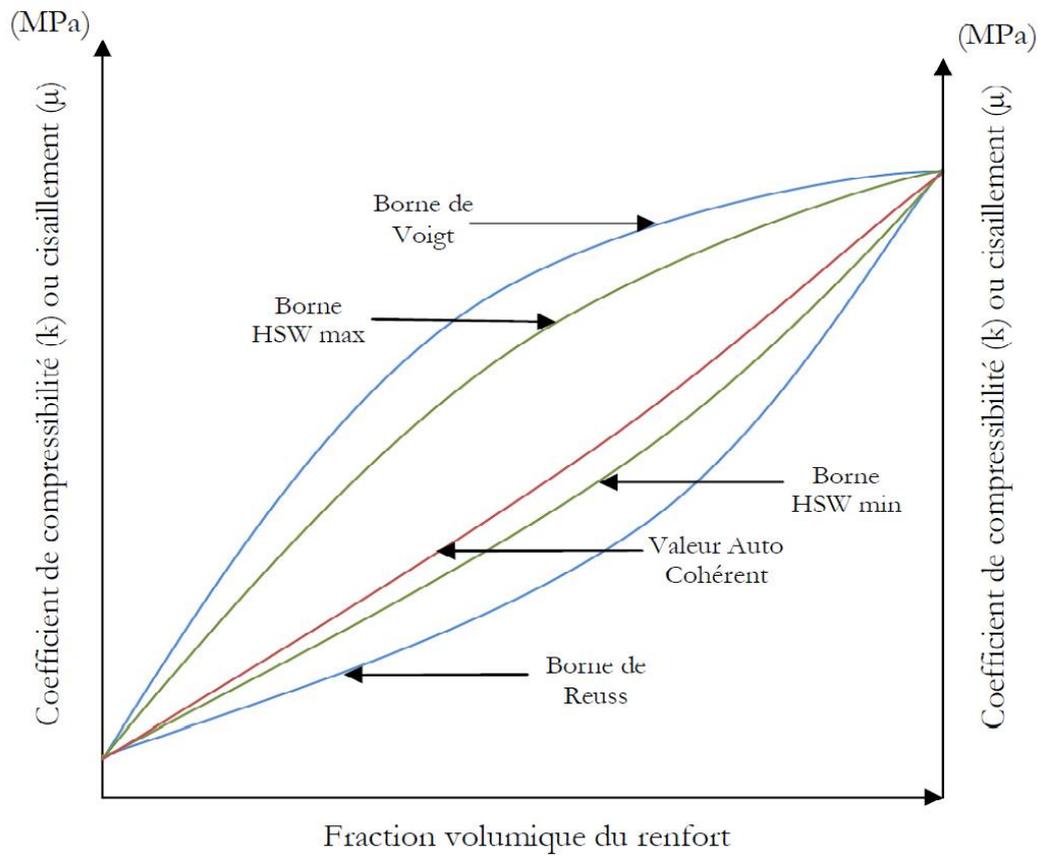


Figure. 3.4 –Illustration des bornes Hashin et Shtrikman [23]

CHAPITRE IV
MODELISATION NUMERIQUE

Chapitre IV

Modélisation numérique

IV .1. Description de l'outil numérique ZEBULON

IV .2. Présentation du problème

IV . 2.1. Conditions aux limites

IV . 2.2. Les bornes de Voigt et Reuss

IV .3. Présentation des résultats

IV .1. Description de l'outil numérique ZEBULON

Développé conjointement par l'ONERA, Northwest Numerics (Seattle, USA), et le Centre des Matériaux de Paris, et adapté aux problèmes de mécanique non linéaire, programmé en C++, ZéBuLoN présente une structure modulaire orientée objet, qui comprend principalement [27] :

- Z-master : interface graphique de pré et post-traitement. Z-master est aujourd'hui distribué sous deux versions: Z-master2D, qui comprend un mailleur bidimensionnel ouvrant sur des constructions tridimensionnelles par extrusion, et Z-master3D, qui intègre les mailleurs BLSurf (tridimensionnel surfacique) et GHS3D (tridimensionnel volumique) développés à l'INRIA;
- Z-solve: solveur numérique;
- Z-psolve: solveur numérique parallèle;
- Z-post: post-traitement séquentiel ou parallèle, qui propose un dépouillement des résultats de façon globale ou locale;
- Z-sim: simulateur visant, avant d'entreprendre un calcul de structure complet, à tester les lois de comportement sur un élément de volume;
- Z-optim: optimiseur adapté à la résolution des problèmes inverses, à la caractérisation des matériaux, et à l'optimisation de structures;
- Z-mat: une librairie matériau particulièrement fournie, qui permet de concevoir des lois de comportement complexes par le biais d'une interface modulable orientée objet, reposant sur le langage utilisateur ZebFront.

Des années de recherche ont abouti à l'élaboration d'une bibliothèque matériau comptant un nombre considérable de lois de comportement sans équivalent sur le marché, conjuguée à des méthodes d'intégration robustes ainsi qu'à des procédures performantes d'identification de coefficients.

Dans le souci de mettre à disposition ces produits de la recherche, des travaux ont récemment été entrepris afin de coupler Z-mat avec les grands codes

de calcul du marché. C'est ainsi qu'ont été développés les modules Z-aba (pour Abaqus), Z-marc, Z-ansys, Z-samcef, Z-aster.

Pour répondre à toutes les demandes, Zébulon est distribué sous UNIX/Linux, Windows, Sun, Hewlett Packard, Silicon Graphics et IBM [28].

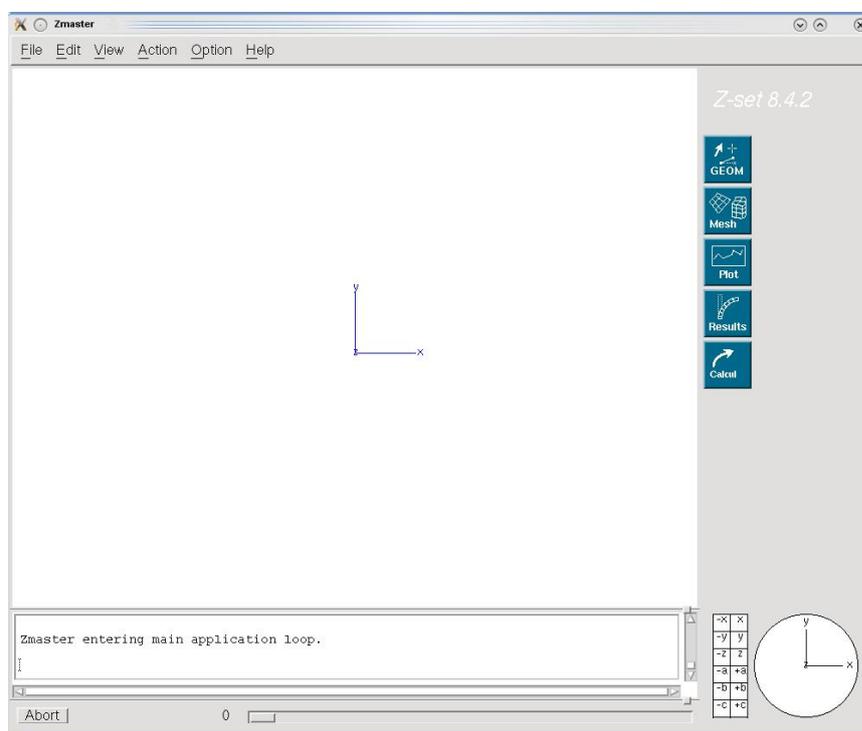


Figure 4-1 –Interface Graphique « Z-master ».

IV .2. Présentation du problème

Le but principal de ce travail est la détermination des propriétés effectives, par une approche d'homogénéisation numérique, d'une structure biphasique ferrito-perlitique. Pour évaluer l'effet du contraste, deux cas sont étudiés.

Le premier cas : la phase noire (1) est la perlite, noyée dans la phase blanche (2) qui est la ferrite, figure (4.2).

Le deuxième cas : la phase noire (1) est la ferrite, noyée dans la phase blanche (2) qui est la perlite.

Les propriétés des deux phases sont représentées dans le tableau (4.1).

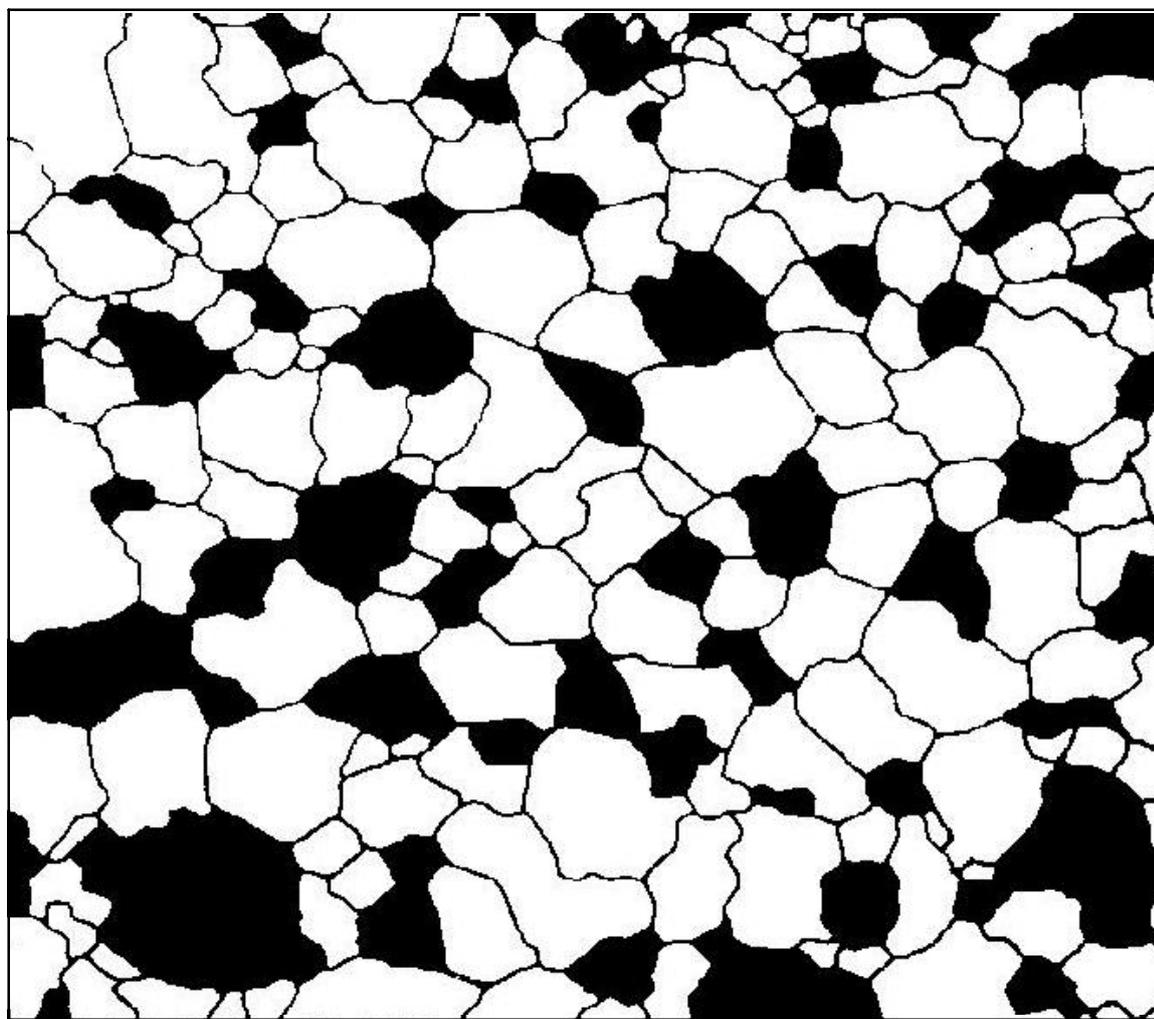


Figure 4.2 – Microstructure ferrito-perlitique étudiée.

L'image de la figure 4.2 a été traitée numériquement et ensuite subdivisée comme suit :

Image 1	Image 2	Image 9	Image 10
Image 3	Image 4	Image 11	Image 12
Image 5	Image 6	Image 13	Image 14
Image 7	Image 8	Image 15	Image 16

Image 17 = Assemblage des images (1+2+3+4+5+6+7+8)

Image 18 = Assemblage des images (9+10+11+12+13+14+15+16)

Image 19 = Assemblage des images (1+2+3+4)

Image 20 = Assemblage des images (5+6+7+8)

Image 21 = Assemblage des images (9+10+11+12)

Image 22 = Assemblage des images (13+14+15+16)

Image 23 = Assemblage des images (1+3)

Image 24 = Assemblage des images (2+4)

Image 25 = Assemblage des images (5+7)

Image 26 = Assemblage des images (6+8)

Image 27 = Assemblage des images (9+11)

Image 28 = Assemblage des images (10+12)

Image 29 = Assemblage des images (13+15)

Image 30 = Assemblage des images (14+16)

Image 31 = Image de la figure 4.2

En tout 31 images sont utilisées pour la détermination des courbes des propriétés apparentes et par conséquent l'évaluation des propriétés effectives du matériau, à savoir le module de compressibilité k et le coefficient de cisaillement μ . Pour chaque volume plusieurs réalisations sont considérées.

	Cas 1		Cas 2	
	Phase 1	Phase 2	Phase 1	Phase 2
Module de Young (E) (GPa)	1200	207	207	1200
Coefficient de poisson (ν)	0.3	0.27	0.27	0.3

Tableau 4.1 – Propriétés des constituants pour les deux cas considérés

IV .2.1. Conditions aux limites

La connaissance des conditions aux limites est essentielle en homogénéisation. En effet, c'est grâce à celles-ci que tous les résultats reposent.

Nous nous limiterons ici aux deux conditions aux limites utilisées lors de notre étude : les déformations uniformes aux frontières (Kinematic Uniform Boundary Condition, KUBC) et le champ de déplacement aux frontières périodique (PERIODIC).

IV .2.1.1. Déformations uniformes aux frontières (KUBC)

Le déplacement u_i est imposé au point x_j le long de la frontière ∂S tel que :

$$u_i = E_{ij} \times x_j \quad x_j \in \partial S \quad (4.1)$$

E_{ij} est un tenseur symétrique d'ordre deux ne dépendant pas de x_j . Ceci implique :

$$(\sigma_{ij}) = \frac{1}{s} \times \int_s \varepsilon_{ij} \, dS = E_{ij} \quad (4.2)$$

Le tenseur des contraintes macroscopique est maintenant défini par la moyenne :

$$(\sigma_{ij}) = \frac{1}{s} \times \int_s \sigma_{ij} \, dS \quad (4.3)$$

IV .2.1.2. Conditions périodiques (PERIODIC)

Le champ de déplacement sur toute la surface S prend la forme suivante :

$$u_i = E_{ij} \times x_j + \underline{v} \quad x \in \partial S \quad (4.4)$$

Où la fluctuation \underline{v} est périodique et prend la même valeur pour deux points homologues du contour extérieur de la surface.

IV .2.1.3. Propriétés macroscopiques

Dans ce paragraphe, on définit les valeurs spécifiques que doivent prendre les conditions aux limites suivant le problème posé. Ces valeurs nous permettront la détermination des propriétés isotropes élastiques de nos cellules. Dans le cas de conditions aux limites KUBC et PERIODIC décrites précédemment on prend, pour le cas d'une microstructure 2D :

$$E_{ij}^k = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad E_{ij}^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

On peut donc définir à présent le module de compressibilité apparent k^{app} et le module de cisaillement apparent μ^{app} , pour le cas KUBC, par :

$$k^{app} = \frac{1}{2} \text{trace} (\sigma_{ij}) = \frac{1}{2} (\sigma_{11} + \sigma_{22}) \quad (4.6)$$

$$\mu^{app} = (\sigma_{12}) \quad (4.7)$$

Et pour le cas les conditions aux limites PERIODIC Par :

$$k^{app} = \frac{1}{2} \text{trace} (\sigma_{ij}) = \frac{1}{2} (\sigma_{11} + \sigma_{22}) \quad (4.8)$$

$$\mu^{app} = 2(\sigma_{12}) \quad (4.9)$$

Le recueil de tous les résultats obtenus, nous permettra de tracer les graphes des propriétés apparentes afin de déterminer les propriétés effectives.

IV .2 .2. Les bornes de Voigt et Reuss

Les bornes supérieures de Voigt, pour les deux propriétés k et μ , sont évaluées pour les deux cas traités, par les formules:

$$k_{sup} = k_m \times V_m + k_i \times V_i \quad (4.10)$$

$$\mu_{sup} = \mu_m \times V_m + \mu_i \times V_i \quad (4.11)$$

Où :

k_{sup} : Borne supérieur de Voigt (Coefficient de compressibilité)

μ_{sup} : Borne supérieur de Voigt (Coefficient de cisaillement)

k_j : Coefficient de compressibilité ($j=m$ ferrite ; $j=i$ perlite)

μ_j : Coefficient de cisaillement ($j=m$ ferrite ; $j=i$ perlite)

V_j : Fraction volumique de matrice ($j=m$ ferrite ; $j=i$ perlite)

Et celles des bornes inférieures de Reuss sont données par :

$$\frac{1}{k_{inf}} = \frac{V_m}{k_m} + \frac{V_i}{k_i} \quad (4.12)$$

$$\frac{1}{\mu_{inf}} = \frac{V_m}{\mu_m} + \frac{V_i}{\mu_i} \quad (4.13)$$

Où :

k_{inf} : borne inferieur de Reuss (coefficient de compressibilité)

μ_{inf} : borne inferieur de Reuss (Coefficient de cisaillement)

Avec les formules permettant le calcul des modules k et μ pour chaque phase :

$$k_j = \frac{E_j}{2 \times (1 + \nu_j) \times (1 - 2\nu_j)} \quad j = m, i \quad (4.14)$$

$$\mu_j = \frac{E_j}{2 \times (1 + \nu_j)} \quad j = m, i \quad (4.15)$$

Où :

E_j : Module d'Young de la phase j

ν_j : Coefficient de poisson de la phase j

Dans le tableau suivant, les différentes propriétés mécaniques du matériau pour les deux cas étudiés sont présentées.

	Cas 1		Cas 2	
	K (GPa)	μ (GPa)	k(GPa)	μ (GPa)
Ferrite	177,165	81,49	1153,84	472,44
Perlite	1153,84	472,44	177,165	81,49

Tableau 4.2 - Propriétés des deux phases pour les deux cas de contraste étudiés.

Le tableau suivant résume toutes les valeurs des bornes citées ci-dessus pour les deux cas étudiés :

	Cas 1		Cas 2	
	K (GPa)	μ (GPa)	k(GPa)	μ (GPa)
Borne Voigt	489,701	206,594	841,304	347,336
Borne Reuss	242,980	110,841	417,438	186,351

Tableau 4.3 - Bornes de Voigt, Reuss

IV .3. Présentation des résultats

Nous commençons par présenter une illustration de la microstructure déformée, avant et après application des différentes conditions aux limites

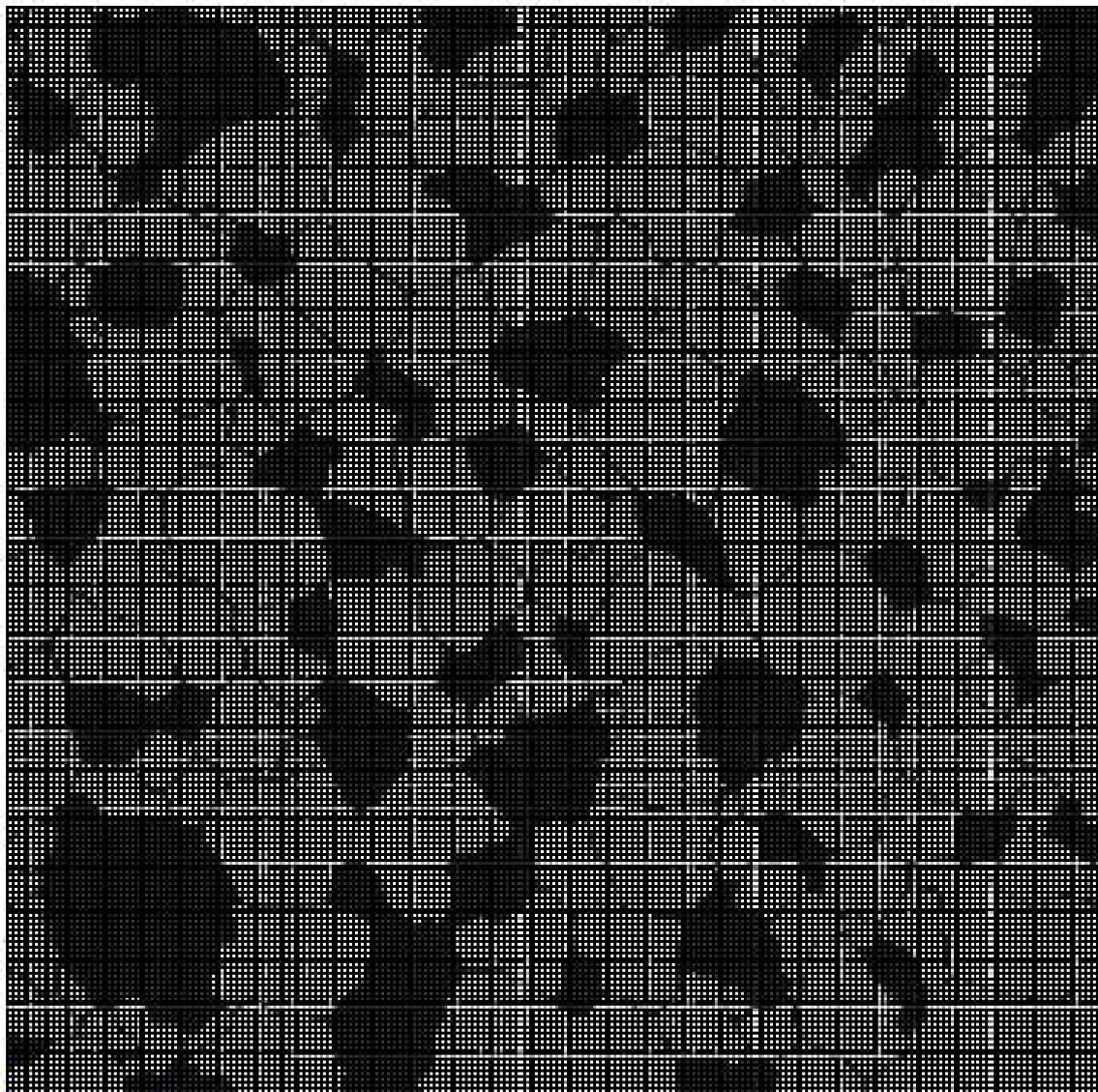


Figure 4.3 – Microstructure étudiée après maillage.

Cas 1

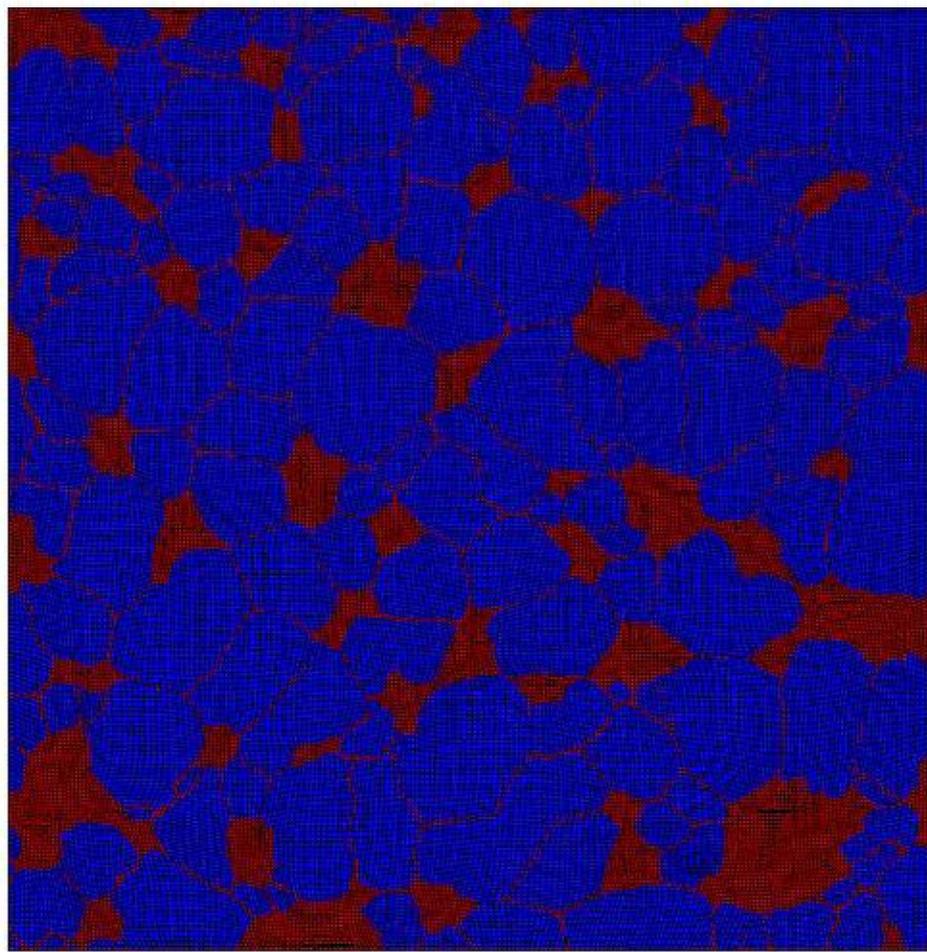


Figure 4.4 – Microstructure déformée pour le calcul de k : KUBC.

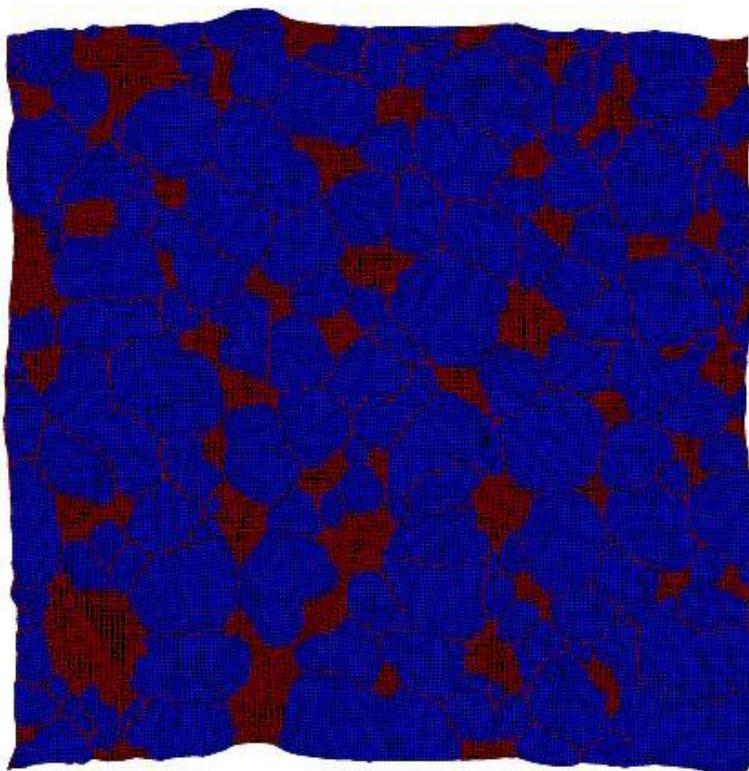


Figure 4.5 – Microstructure déformée pour le calcul de k : PERIODIC.

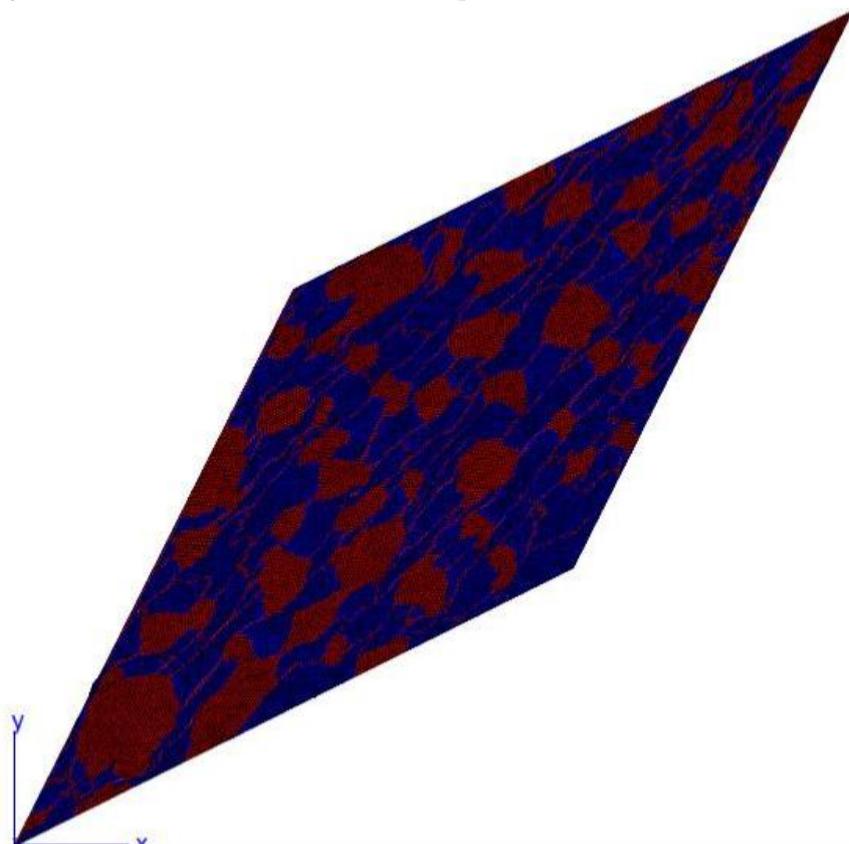


Figure 4.6 - Microstructure déformée pour le calcul de μ : KUBC.

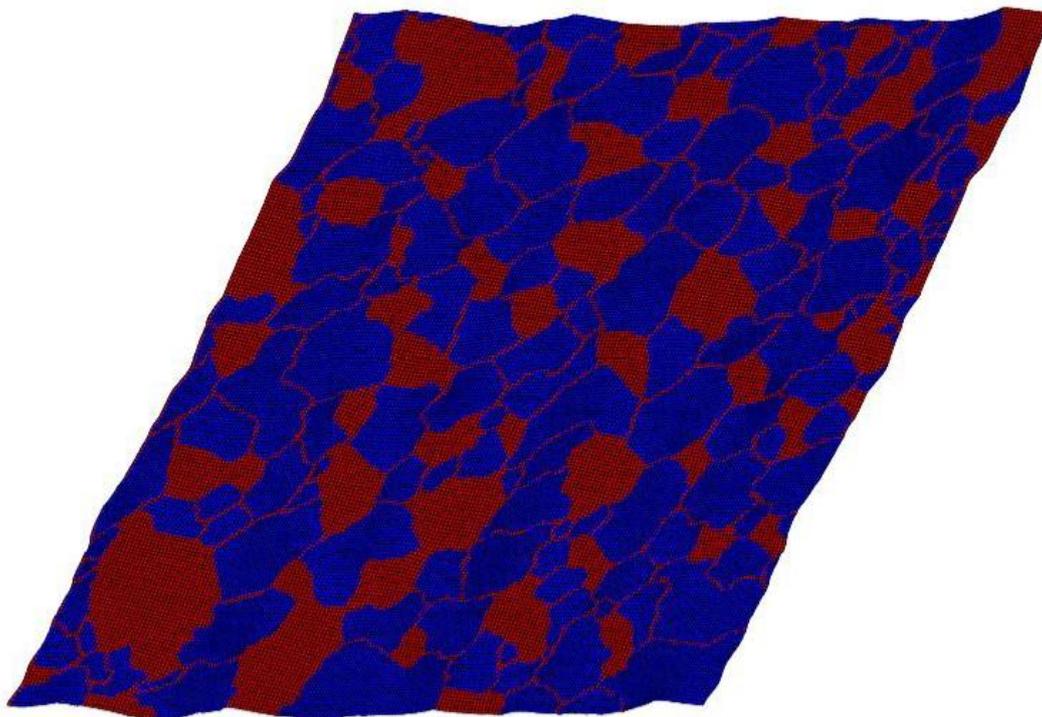


Figure 4.7 - Microstructure déformée pour le calcul de μ : PERIODIC.

Cas 2

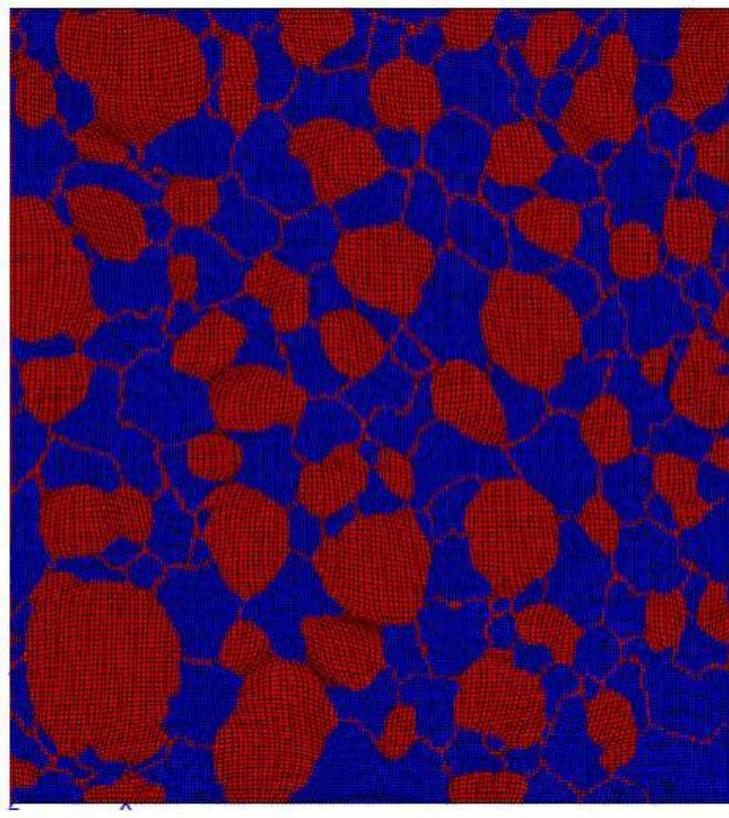


Figure 4.8 – Microstructure déformée pour le calcul de k : KUBC.

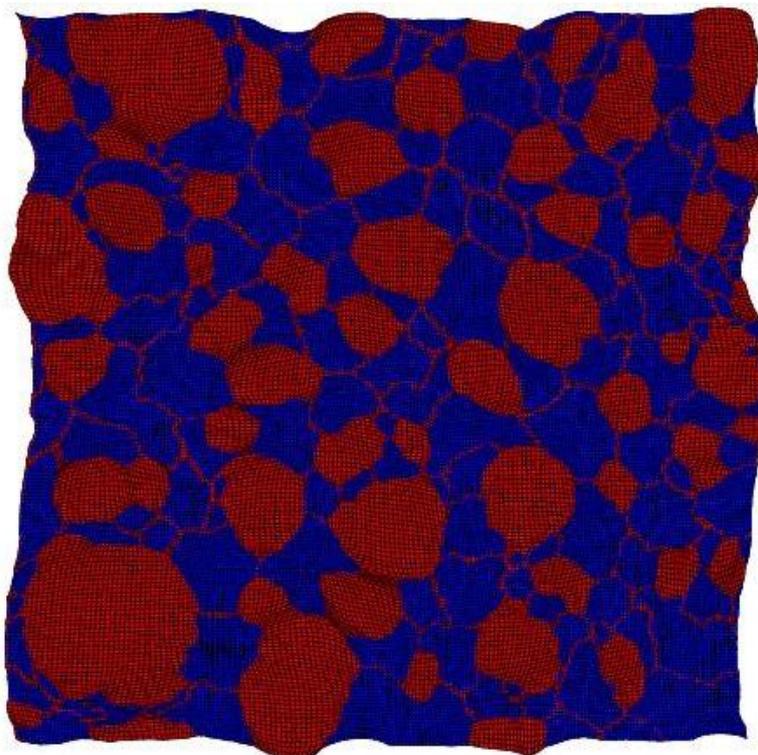


Figure 4.9 – Microstructure déformée pour le calcul de k : PERIODIC.

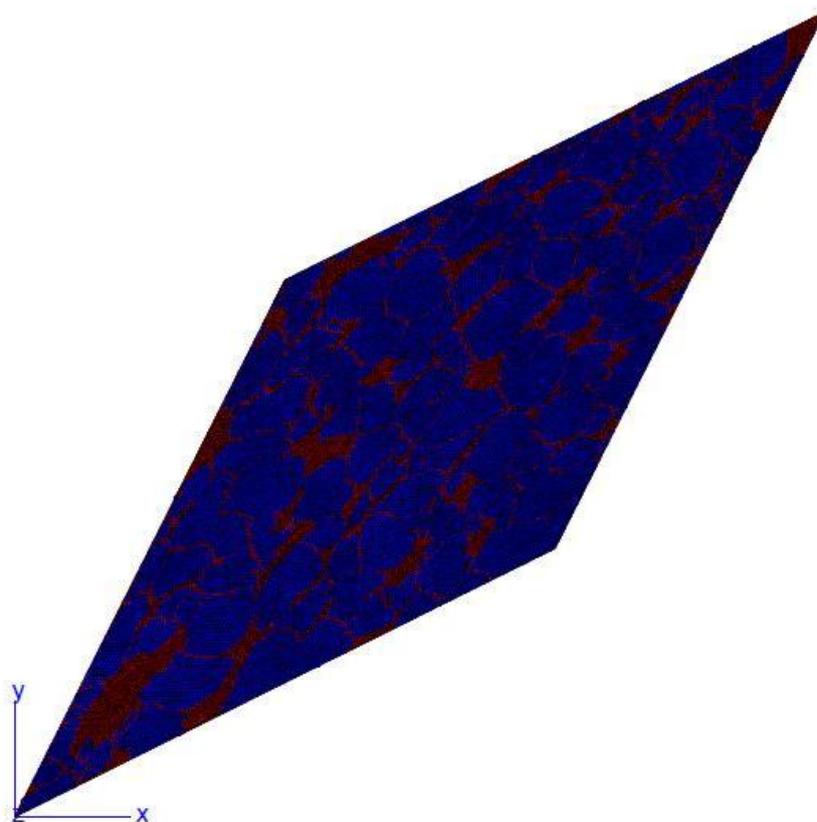


Figure 4.10 - Microstructure déformée pour le calcul de μ : KUBC.

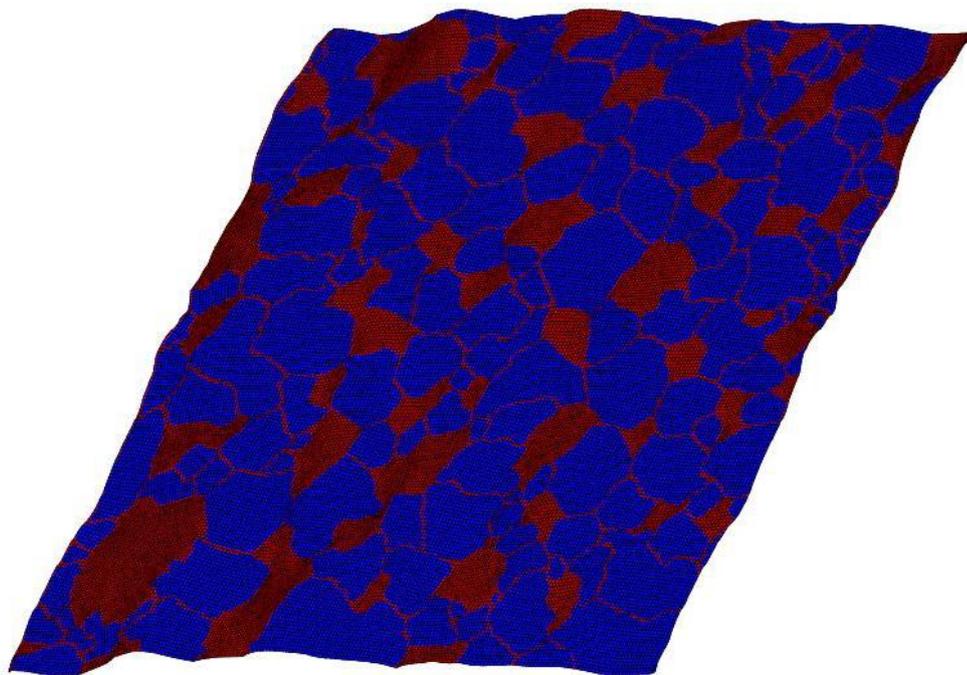
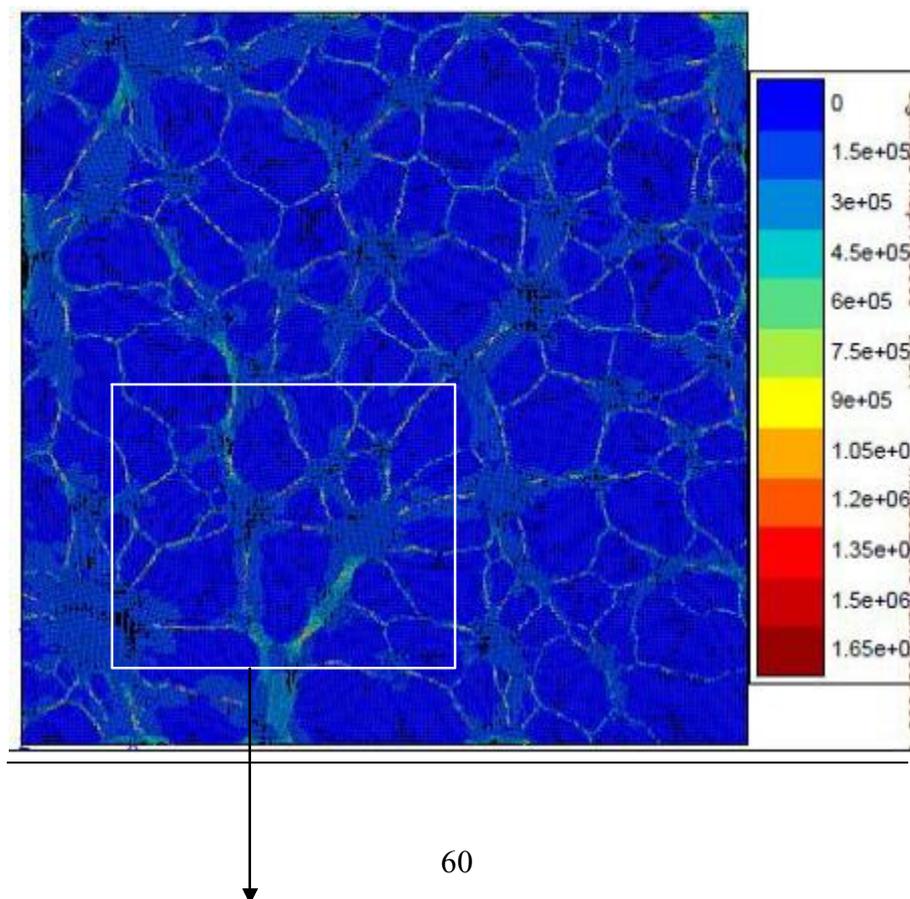


Figure 4.11 - Microstructure déformée pour le calcul de μ : PERIODIC.

Distribution des contraintes de Von Mises



Photozoom

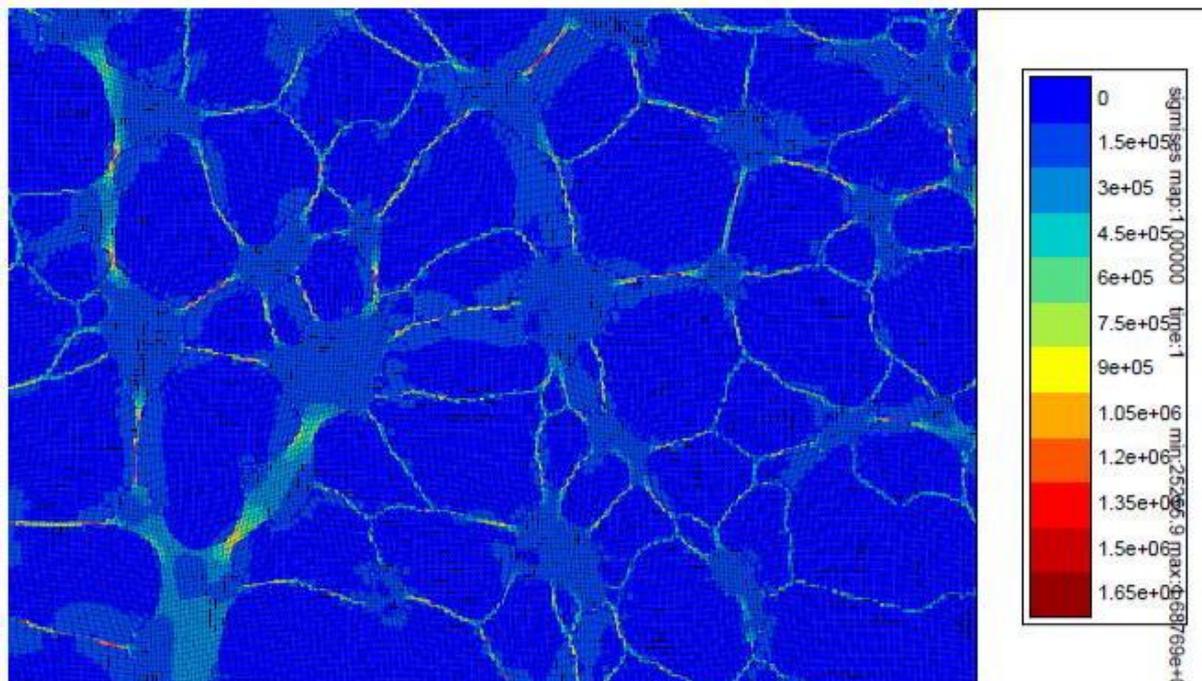
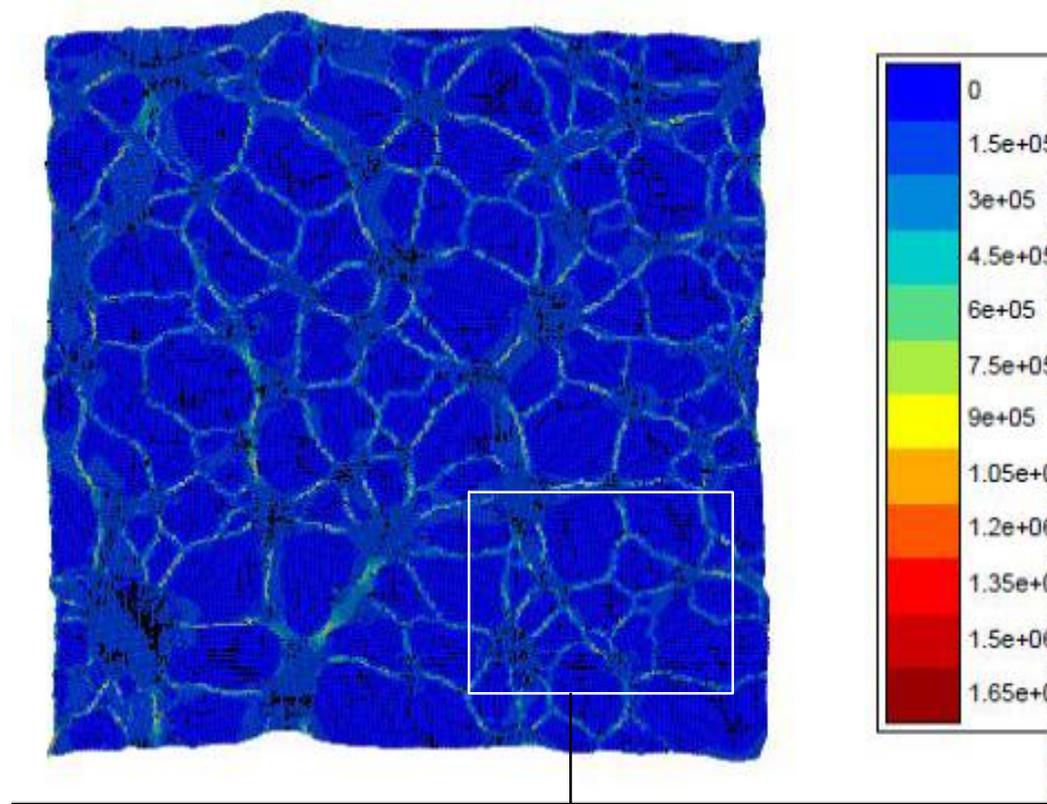


Figure 4.12 – Distribution des contraintes de Von Mises pour le calcul de k KUBC, cas 1



Photozoom

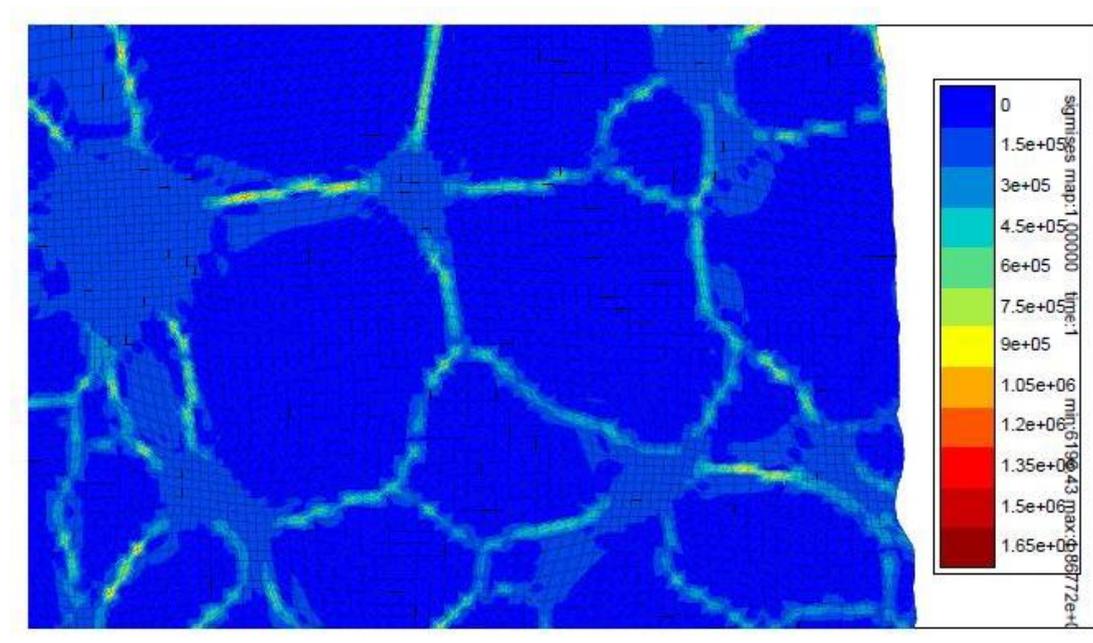


Figure 4.13 – Distribution des contraintes de Von Mises pour le calcul de k PERIODIC, cas 1

Evolution du module de compressibilité apparent k et du module de cisaillement apparent μ en fonction de N (fraction considérée)

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus des coefficients apparents des deux modules k et μ pour les deux cas étudiés. Nous regroupons dans le même graphe, les valeurs obtenues par les deux conditions aux limites utilisées afin de nous permettre la détermination du VER et les propriétés effectives souhaitées, figures (4.14 à 4.17).

1^{er} cas :

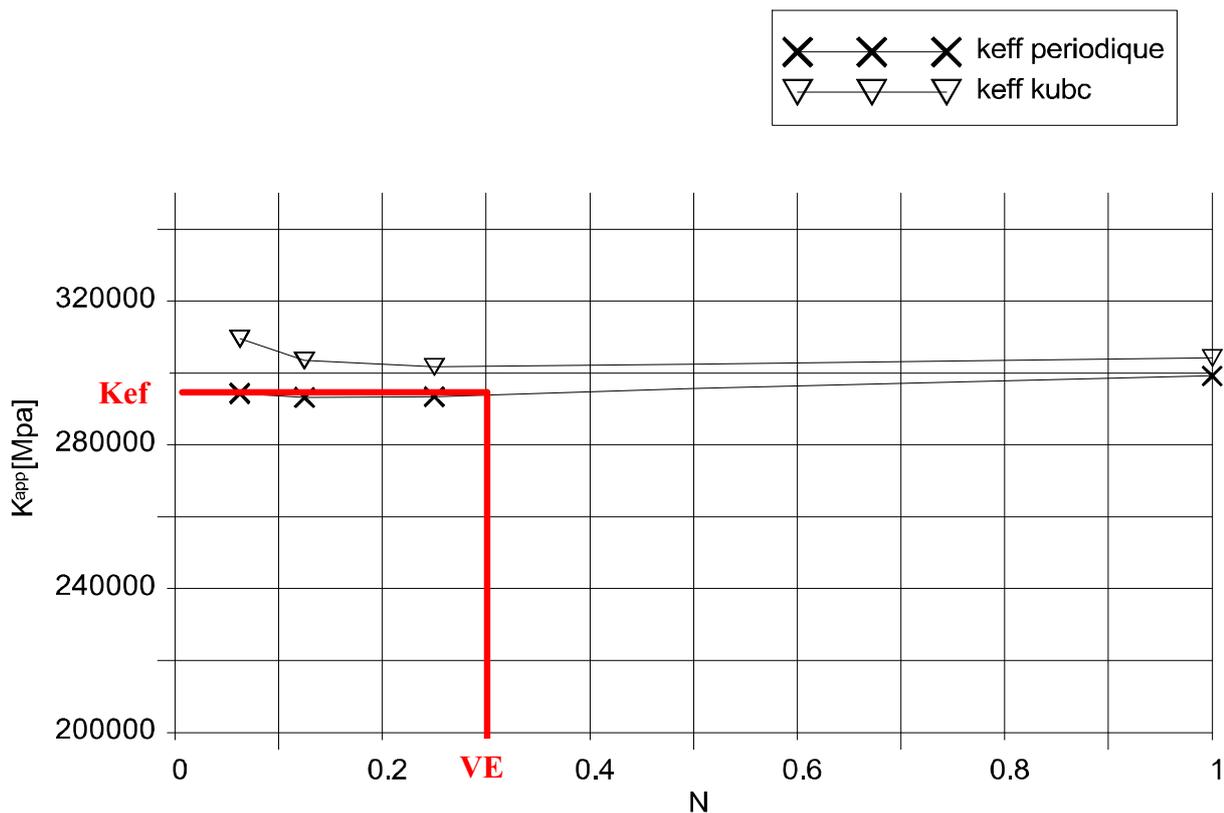


Figure 4.14 - Evolution du module de compressibilité apparent k en fonction de N

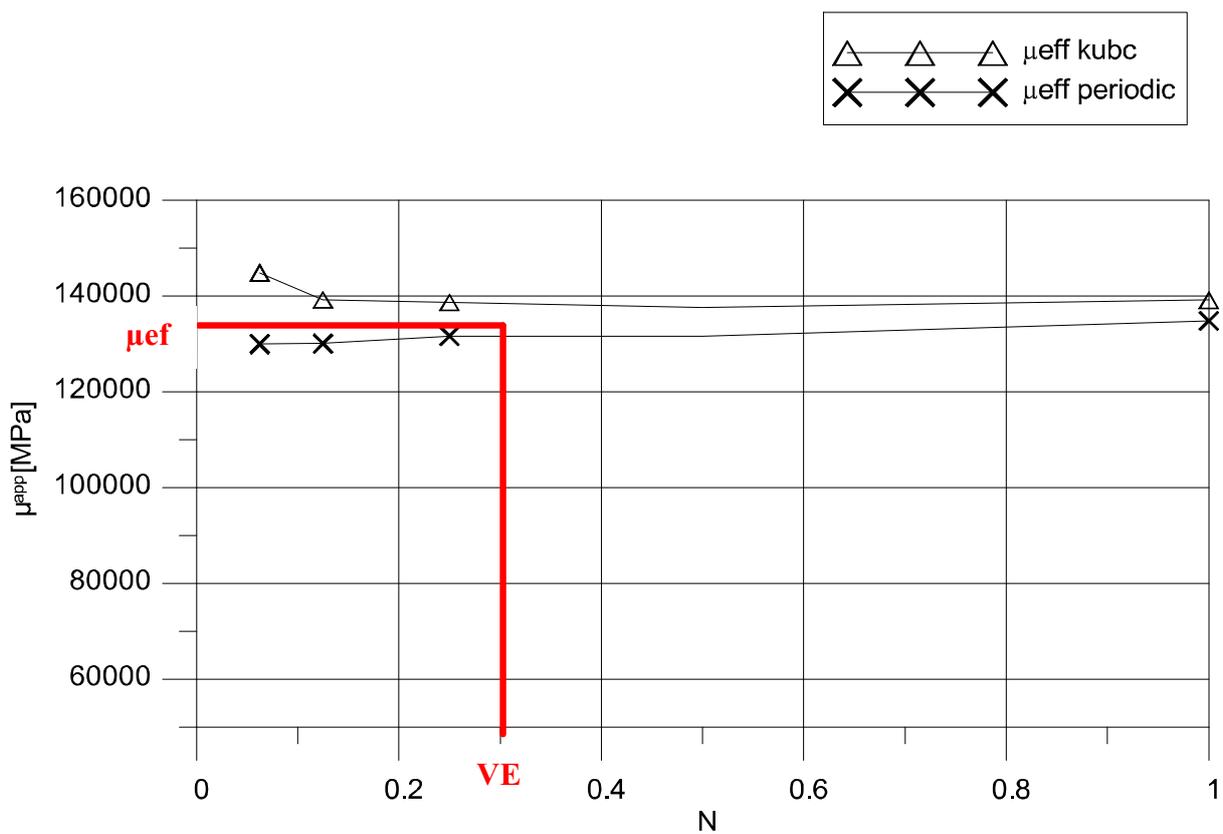


Figure 4.15 - Module Evolution du module de cisaillement apparent μ en fonction N

2^{ème} cas :

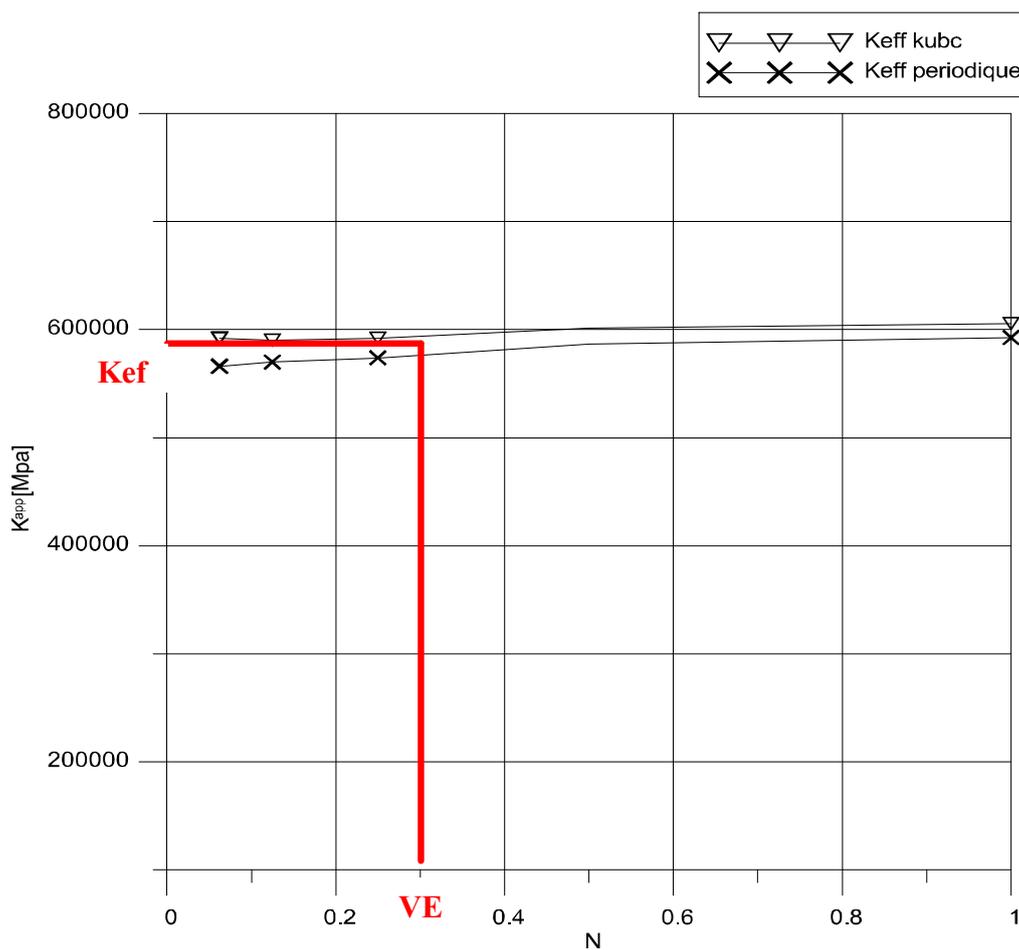


Figure 4.16 - Evolution du module de compressibilité apparent k en fonction de N

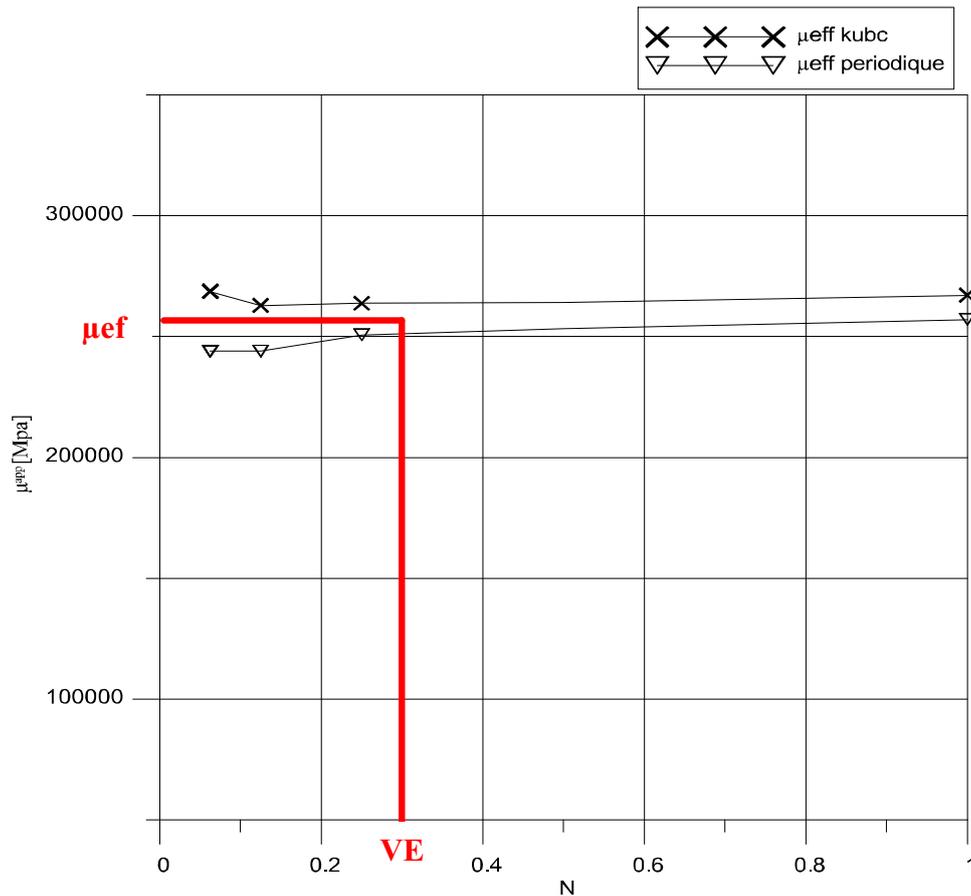


Figure 4.17 - Evolution du module de cisailment apparent μ en fonction N

Interprétation des résultats :

1. les figures (4.4-11) traduisent bien les conditions aux limites choisies ce qui confirme en partie la validation des résultats obtenus pour k_{eff} et μ_{eff} .
2. d'après les distributions des contraintes de Von Mises (figures 4.12-13), on remarque bien une concentration de contraintes au niveau des joints de grains moins rigides que les phases.
3. d'après les figures 4.14-17, on estime que les deux modules étudiés convergent vers les mêmes limites pour de larges volumes, qui représentent les valeurs effectives recherchées. Ces valeurs effectives sont comparées aux bornes de Voigt-Reuss. Tous les résultats obtenus sont cernés par ces bornes, ce qui prouve la bonne qualité des résultats obtenus.

4. d'après les figures 4.14-17, on estime que le volume élémentaire représentatif est à environ 0.3 c'est-à-dire approximativement le 1/3 de la surface de l'image étudiée (image 31).

5. de même d'après les figures précédemment citées, les propriétés effectives de matériaux étudiés cas 1 et cas 2 sont :

	Cas 1	Cas 2
K_{eff} (GPa)	300	580
μ_{eff}	137	255

CONCLUSION GENERALE

Ce travail vient compléter les travaux entamés par l'équipe Comportement mécanique et caractérisation qui effectue des travaux de recherche en homogénéisation au sein du Laboratoire de Mécanique des Structures et Matériaux (LaMSM) de l'université de Batna.

L'homogénéisation a pour but de remplacer un matériau ou une structure hétérogène par un milieu homogène de comportement équivalent.

En choisissant une image type présentant une structure ferrito-perlitique, des simulations numériques basées sur la méthode des éléments finis sont réalisées pour deux différentes conditions aux limites : kubc et périodique. Des valeurs moyennes des modules apparents k_{app} et μ_{app} en fonction de la taille du volume sont obtenues. On constate que ces valeurs diminuent lorsque la taille du domaine augmente pour toutes les conditions aux limites.

Les deux modules étudiés convergent vers les mêmes limites pour de larges volumes, qui représentent les valeurs effectives recherchées. Ces valeurs effectives sont comparées aux bornes de Voigt-Reuss. Tous les résultats obtenus sont cernés par ces bornes, ce qui prouve la bonne qualité des résultats obtenus.

En fin, nous espérons une continuité à ce travail et nous proposons comme futur travail, l'étude d'autres cas de fractions volumiques ainsi que l'effet du contraste pour des phases partant des plus molles aux plus dures.

Bibliographie

- [1] Laurent Pizzagalli et all, [http://pc-web.cemes.fr/Personnel/douin/Modelisation %20 materiaux % 20 et %20 defauts.pdf](http://pc-web.cemes.fr/Personnel/douin/Modelisation%20materiaux%20et%20defauts.pdf), Modélisation des matériaux et de leurs défauts
- [2] <http://www.f2m.cnrs-bellevue.fr/spip.php?article101>
- [3] http://www.zpag.net/Tecnologies_Industrielles/Materiaux_Generalite.htm
- [4] Sylvie-pommier livre <<science des matériaux >> université pierre et marie curie (2005/ 2006).
- [5] Rami HAMAM, thèse doctorat <<Simulation de la propagation des fissures par fatigue dans les toiles des roues de train sous chargement à amplitude variable>>, Laboratoire de Mécanique et Technologie ENS CACHAN/CNRS/UMR 8535, (2006)
- [6] Kristell LE BIAVANT-GUERRIER, Garde de docteur <<étude de l'amorçage de fissures de fatigue dans le TI-6AL-4V>> École centrale paris UMR 8579, (2000)
- [7] http://umvf.univ-nantes.fr/odontologie/enseignement/chap4/site/html/3_41_3.html
- [8] Mireille DEFRANCESCHI, Modélisation et simulation numériques en chimie du solide : principes et applications, Techniques de l'Ingénieur,(2013) page (18)
- [9] Jacky RUSTE, La Simulation Numérique en science des matériaux : principes et applications EDF R&D, (2007)
- [10] L.M.BROWN- the self stress of dislocations and the shape of extended nodes, phil. Mag, 10, 444-446, (1964)
- [11] A.J.FOREMAN, M.J.MAKIN-Dislocation movement through random arrays of obstacles, Phil.Mag. 13, 911-924 (1966)
- [12] A.J.FOREMAN-The bowing of a dislocation segment, Phil.Mag. 15, 1011-1021 (1967)
- [13] D.J.BACON-A method for describing a flexible dislocation, phys. Stat.? Sol., 23, 527 (1967)

- [14] M.C. Fivel, T.J. Gosling and G.R. Canova, Implementing image stresses in a 3D dislocation simulation, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 4(6), pp.581-596, (1996).
- [15] D. Weygand, Y. Brechet, J. Lepinoux; a Vertex Simulation of Grain Growth in 2D and 3D; *Advanced Engineering Materials Volume 3, Issue 1-2*, pages 67–71, January, (2001)
- [16] L. P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincere, V. Pontikis and Y. Bréchet in "Nonlinear Phenomena in Materials Science II", G. Martin and L. P. Kubin (Eds), *Transtech (CH-Aedemansdorf) Solid State Phenomena*, 23&24, p. 455, *Dislocation microstructures and plastic flow: A 3D simulation*, (1992)
- [17] M. Mareschal and B. L. Holian, B. Devincere, V. Pontikis, Y. Bréchet, G. Canova, M. Condat and L. P. Kubin, *NATO-ASI Series B: Physics - Vol. 292 Three-dimensional simulations of plastic flow in crystals in "Microscopic simulations of complex hydrodynamic phenomena"*, (Plenum, 1991).
- [18] Daniel GARCIA-RODRIGUEZ, THÈSE Pour obtenir le grade de DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE << Optimisation d'un code de dynamique de dislocations pour l'étude de la plasticité des aciers ferritiques >> (2011).
- [19] Lionel Gendre ; *La simulation multi-échelles* 2011
- [20] A.ZAOUI , *Matériaux hétérogènes et composites*, École polytechnique. (1997)
- [21] M.Bornert, T.Bretheau et P.Gilormini, *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 : Matériaux aléatoire élastiques et milieux périodiques*, Hermès science. (2001)
- [22] Vincent Marcadon Sujet de thèse «Effets de taille et d'interphase sur le Comportement mécanique de nano composites particulières» à L'ECOLE POLYTECHNIQUE, page 21, (2005).
- [23] NGUYEN Huy Gia, thèse doctorat « Approche micromécanique pour la modélisation du comportement élastique des composites: application aux

mortiers de résine », page 34.41.43, Laboratoire de Mécanique et Matériaux du Génie Civil, (2008).

- [24] J. Aboudi, A unified micromechanical Approach, mechanics of composite materials, Elsevier. (1991)
- [25] NGUYEN HUY Gia, Grade de docteur de l'université de Cergy-pontoise <<Approche micromécanique pour la modélisation du comportement élastoplastique des composites : application aux mortiers de résine>>, laboratoire de mécanique et matériaux du Génie civil-L2MGC- EA4114 (2008),
- [26] Y. Benveniste, A new approach to the application of mori-tanaka's theory in composite materials. Mechanics of Materials 6: 147-157(1987)
- [27] site internet zebulon
- [28] Centre des matériaux Pierre Marie Fourt, «Zébulon code calcule »Site web http://www.mat.ensmp.fr/Competences/fr_zebulon.php.

RESUME

L'homogénéisation a pour but de remplacer un matériau ou une structure hétérogène par un milieu homogène de comportement équivalent. L'estimation numérique des propriétés effectives des matériaux hétérogènes à morphologie aléatoires à partir de leurs lois constitutives et de la distribution des différentes composantes de la microstructure est le sujet principal de cette étude.

En choisissant une image type présentant une structure ferrito-perlitique, des simulations numériques basées sur la méthode des éléments finis sont réalisées pour deux différentes conditions aux limites. Des valeurs moyennes des modules apparents en fonction de la taille du volume sont obtenues.

Mots clé

Matériau biphasique, simulation, homogénéisation, volume élémentaire représentatif, propriétés effectives, conditions aux limites, bornes.

ملخص

يقصد بالتجانس استبدال مادة أو بنية غير متجانسة ببنية أخرى متجانسة السلوك أو ما يعادلها. التقدير العددي للخصائص الفعلية للمواد الغير المتجانسة و عشوائية الشكل من خلال التوزيع المجهري لمختلف مكوناتها وقوانينها الأساسية هو الموضوع الرئيسي لهذه الدراسة.

باختيار صورة نموذجية للفولاذ مكونة من الفريت والبرليت، يتم القيام بعمليات محاكاة عددية اعتماداً على طريقة العناصر المحدودة مع شرطين حدين مختلفين لحساب قيم ظاهرية بدلالة الحجم.