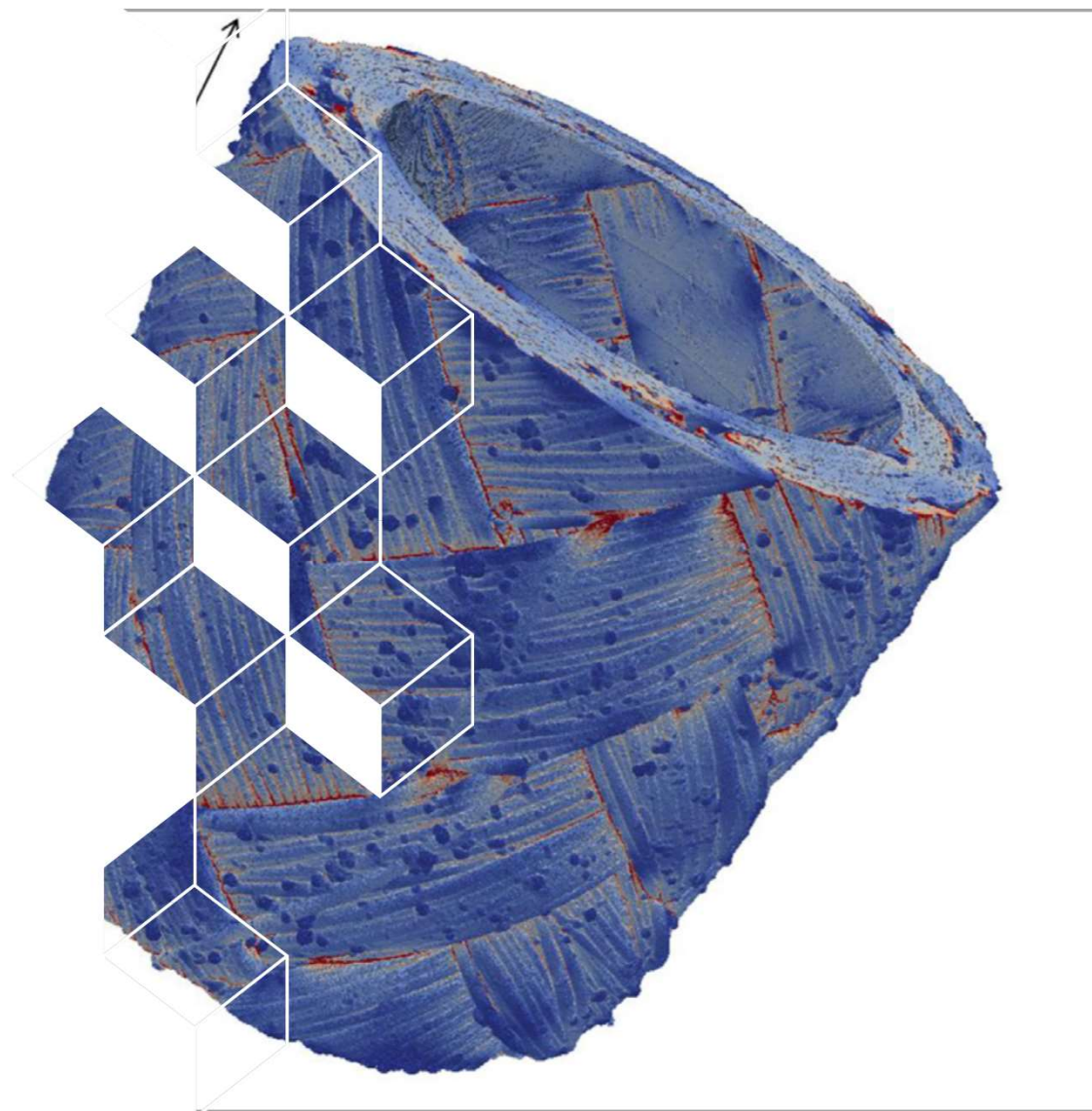




# Introduction à l'homogénéisation numérique

Lionel Gélébart,

Université Paris-Saclay, CEA, SRMA





# Homogénéisation numérique

## Homogénéisation?

Caractère « **Prédictif** » du changement d'échelle

Relations microstructures - cpt méca => Optimisation des matériaux

Remplacer une loi de comportement « phénoménologique »

Identifier une loi de comportement « phénoménologique »

=> Enrichir une base de donnée expérimentale

## Numérique (vs analytique)?

Plus facile !!

Plus général

microstructures complexes,  
comportements complexes,  
quantités locales

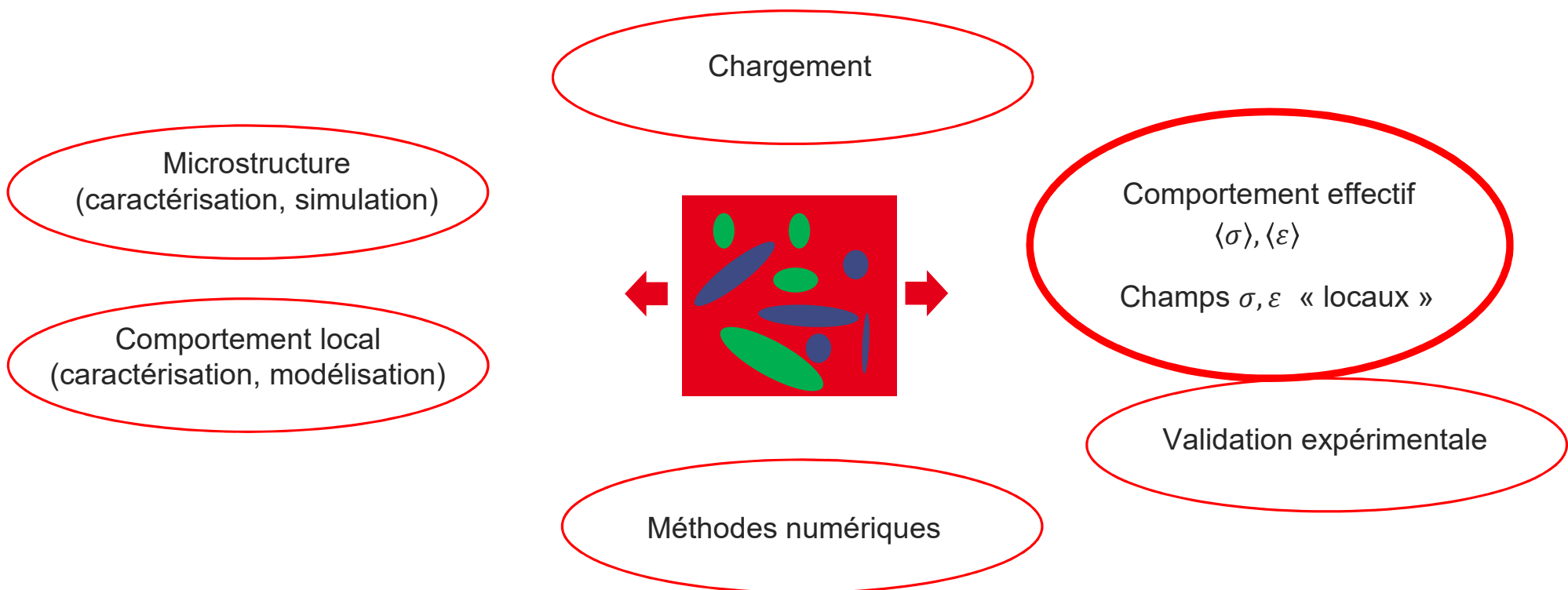
Plus « exact » => référence pour les homog. analytique (complémentarité)

Plus « lourd » !!!





## Homogénéisation numérique



# Plan

## 1. « Rappels théoriques »

Comportement apparent et conditions aux limites

Du comportement apparent au comportement effectif

## 2. Applications

Cas élasticité linéaire : composite SiC/SiC (« cas d'école » + discussions pour élargir)

Cas non-linéaire : Plasticité cristalline dans les polycristaux (résultats et questionnements)

## 3. Méthodes FFT

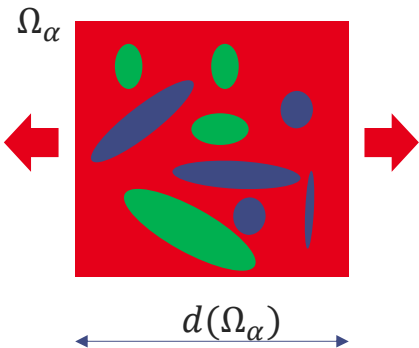
Focus FFT différences finies

+ remarques

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



$\text{div}(\sigma) = 0$   
 $\sigma = \mathbb{C} : \varepsilon$   
 $\varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^{sym}$   
*+chargement*

➤ Définition « **pragmatique** » :  $\langle \sigma \rangle = \mathbb{C}_{CL,\alpha}^{app} \langle \varepsilon \rangle$  (tenseur vu comme une application linéaire)

$$\begin{bmatrix} \langle \sigma \rangle_{11} \\ \langle \sigma \rangle_{22} \\ \langle \sigma \rangle_{33} \\ \langle \sigma \rangle_{12} \\ \langle \sigma \rangle_{13} \\ \langle \sigma \rangle_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \end{bmatrix} \mathbb{C}_{CL,\alpha}^{app} \begin{bmatrix} \langle \varepsilon \rangle_{11} \\ \langle \varepsilon \rangle_{22} \\ \langle \varepsilon \rangle_{33} \\ 2\langle \varepsilon \rangle_{12} \\ 2\langle \varepsilon \rangle_{13} \\ 2\langle \varepsilon \rangle_{23} \end{bmatrix}$$

Notation « Vecteur » des tenseurs symétriques  $\sigma : \varepsilon = [\sigma] \cdot [\varepsilon]$   
 Notation **de Voigt** : x2 sur les cisaillements de la déformation

6 Chargements indépendants  $\Rightarrow$  6 calculs  $\Rightarrow$  6 couples de champs solution  $(\sigma^I, \varepsilon^I)$

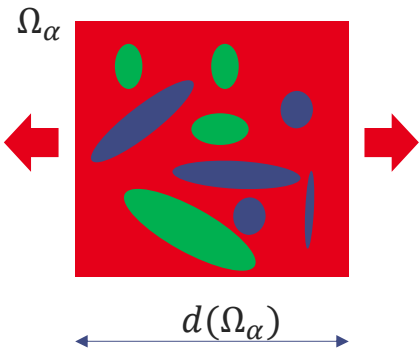
Identification de  $\mathbb{C}_{CL,\alpha}^{app}$  par résolution syst. linéaire 36x36 :  $\langle \sigma^I \rangle = \mathbb{C}_{CL,\alpha}^{app} \langle \varepsilon^I \rangle, \quad I = 1..6$



## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Définition « énergétique » :  $C_{CL,\alpha}^{app*}$  (tenseur vu comme une forme bilinéaire)

Forme bilinéaire symétrique :  $\varphi(\varepsilon^1, \varepsilon^2) = \frac{1}{2} \varepsilon^1 : C : \varepsilon^2 = \frac{1}{2} \sigma^2 : \varepsilon^1$

Définition de  $C_{CL,\alpha}^{app*}$  :  $\langle \varphi \rangle = \frac{1}{2} \langle \varepsilon^1 : C_{CL,\alpha}^{app*} : \varepsilon^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \varepsilon^1 : C : \varepsilon^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \sigma^2 : \varepsilon^1 \rangle$

( $\sigma^1, \varepsilon^1$ ) et ( $\sigma^2, \varepsilon^2$ ) solutions associées à deux chargements

$\text{div}(\sigma) = 0$   
 $\sigma = C : \varepsilon$   
 $\varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^{sym}$   
 + chargement

6 Chargements indépendants  $\Rightarrow$  6 calculs  $\Rightarrow$  6 couples de champs solution ( $\sigma^I, \varepsilon^I$ )

Identification de  $C_{CL,\alpha}^{app*}$  par résolution syst. linéaire 36x36 :

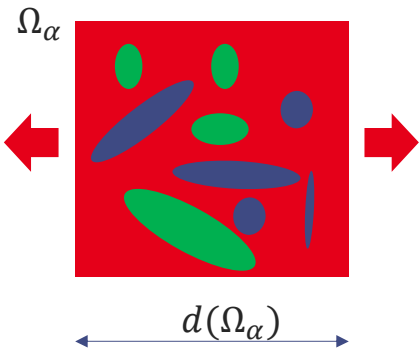
$$\langle \sigma^I : \varepsilon^J \rangle = \langle \varepsilon^I : C_{CL,\alpha}^{app*} : \varepsilon^J \rangle, \quad I = 1..6, J = 1..6$$

$$\frac{1}{2} \langle \varepsilon^J : C : \varepsilon^I \rangle = \frac{1}{2} \langle \varepsilon^I : C : \varepsilon^J \rangle \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{2} \langle \sigma^I : \varepsilon^J \rangle = \frac{1}{2} \langle \sigma^J : \varepsilon^I \rangle \quad \longrightarrow \quad C_{CL,\alpha}^{app*} \text{ est un tenseur symétrique}$$

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Quelle condition pour unifier les 2 définitions avoir  $C_{CL,\alpha}^{app*} = C_{CL,\alpha}^{app}$  ?

$$\langle \sigma^2 : \varepsilon^1 \rangle = \langle \varepsilon^1 \rangle : C_{CL,\alpha}^{app*} : \langle \varepsilon^2 \rangle$$

Fluctuation :  $x' = x - \langle x \rangle$

Propriété :  $\langle xy \rangle = \langle x \rangle \langle y \rangle + \langle x' y' \rangle$

$$\langle x \rangle \langle y \rangle + \langle x' y' \rangle = \langle x \rangle \langle y \rangle + \langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle = \langle x \rangle \langle y \rangle + \langle xy \rangle - 2\langle x \rangle \langle y \rangle + \langle x \rangle \langle y \rangle = \langle xy \rangle$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathbb{C} : \varepsilon \\ \varepsilon &= (\nabla \mathbf{u})^{sym} \\ &+ \text{chargement} \end{aligned}$$

$$\langle \sigma^2 : \varepsilon^1 \rangle = \langle \sigma^2 \rangle : \langle \varepsilon^1 \rangle + \langle \sigma^{2'} : \varepsilon^{1'} \rangle = \langle \varepsilon^1 \rangle : C_{CL,\alpha}^{app} : \langle \varepsilon^2 \rangle + \underbrace{\langle \sigma^{2'} : \varepsilon^{1'} \rangle}_{=0}$$

### Condition de Hill

$$\langle \sigma^{2'} : \varepsilon^{1'} \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \langle \sigma^2 : \varepsilon^1 \rangle = \langle \sigma^2 \rangle : \langle \varepsilon^1 \rangle \quad \Leftrightarrow \quad C_{CL,\alpha}^{app} = C_{CL,\alpha}^{app*}$$

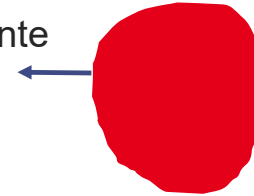
Moy(Energie micro) = Energie « macro »      Equivalence des 2 définitions

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



### Théorèmes de Gauss

$\mathbf{n}$  : normale sortante



$V$  : volume  
 $\partial V$  : contour

- Gauss (déformation) :  $\forall$  champ  $\varepsilon$  symétrique compatible

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{V} \int_V (\nabla \mathbf{u})^s dV = \frac{1}{2V} \int_V u_{i,j} + u_{j,i} dV \stackrel{\text{Gauss}}{=} \frac{1}{2V} \int_{\partial V} u_i \mathbf{n}_j + u_j \mathbf{n}_i dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \mathbf{u} \otimes^s \mathbf{n} dS$$

- Gauss (contrainte) :  $\forall$  champ  $\sigma$  symétrique équilibré

Astuce :  $(\sigma_{ik} x_j)_{,k} = \sigma_{ik,k} + \sigma_{ik} x_{j,k} = 0 + \sigma_{ij}$

Autre propriété utile :

$$\frac{1}{V} \int_{\partial V} \mathbf{x} \otimes \mathbf{n} dS \stackrel{\text{Gauss}}{=} \frac{1}{V} \int_V \nabla \mathbf{x} dV = \mathbf{I}$$

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{V} \int_V (\sigma_{ik} x_j)_{,k} dV \stackrel{\text{Gauss}}{=} \frac{1}{V} \int_{\partial V} \sigma_{ik} x_j \mathbf{n}_k dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\sigma \cdot \mathbf{n}) \otimes \mathbf{x} dS \stackrel{\sigma \text{ symétrique}}{=} \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\sigma \cdot \mathbf{n}) \otimes^s \mathbf{x} dS$$

- Gauss (énergie) :  $\forall$  couple de champs symétriques équilibré ( $\sigma$ ) et compatible ( $\varepsilon$ )

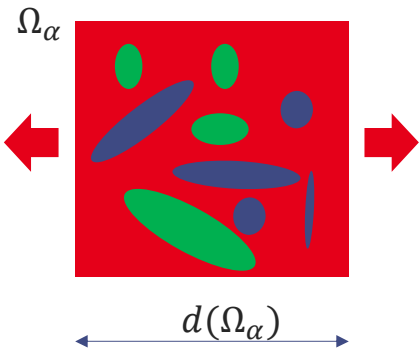
$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} u_{i,j} dV = \frac{1}{V} \int_V (\sigma_{ij} u_i)_{,j} - \underbrace{\sigma_{ij,j}}_{=0} u_i dV \stackrel{\text{Gauss}}{=} \frac{1}{V} \int_{\partial V} \sigma_{ij} u_i \mathbf{n}_j dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\sigma \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{u} dS$$



## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Condition de Hill – quelle conséquence sur le choix des CL?

Rappel Théo. Gauss (énergie) :

$$\langle \sigma : \varepsilon \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma \cdot (\nabla u)^s dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\sigma \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{u} dS \quad \forall \sigma \text{ équilibré et } \varepsilon \text{ compatible}$$

$$(\text{condition de Hill}) \langle \sigma^{1'} : \varepsilon^{2'} \rangle = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\sigma^{1'} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{u}^{2'} dS = 0$$

$\text{div}(\sigma) = 0$   
 $\sigma = \mathbb{C} : \varepsilon$   
 $\varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^{sym}$   
 + *chargement*

$$\Leftrightarrow \frac{1}{V} \int_{\partial V} ((\sigma^1 - \langle \sigma^1 \rangle) \cdot \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{u}^2 - \langle \varepsilon^2 \rangle \cdot \mathbf{x}) dS = 0$$

Condition de Hill

$$\langle \sigma^{1'} : \varepsilon^{2'} \rangle = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{V} \int_{\partial V} ((\sigma^1 - \langle \sigma^1 \rangle) \cdot \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{u}^2 - \langle \varepsilon^2 \rangle \cdot \mathbf{x}) dS = 0$$

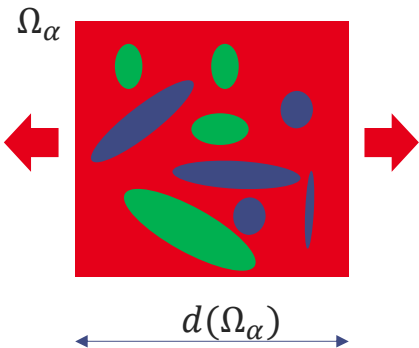
$\forall$  couple de solutions (1 et 2) respectant un certain « type » de CL.

➡ Restriction sur la définition des « types » de CL!

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



$\text{div}(\sigma) = 0$   
 $\sigma = \mathcal{C} : \varepsilon$   
 $\varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^{sym}$   
 + chargement

➤ Type de CL « **cinématique uniforme** » (**KUBC**  $\Leftrightarrow \mathbf{u}(x) = \langle \varepsilon \rangle \cdot x$ )

Pilotage déformation (KUBC- $E^0$ ):  $\mathbf{u}(x) = E^0 \cdot x \quad \forall x \in \partial V$

Propriété :  $\langle \varepsilon \rangle = E^0$  ←  $\langle \varepsilon \rangle \stackrel{\text{Gauss}}{=} \frac{1}{V} \int_{\partial V} \mathbf{u} \otimes^s \mathbf{n} dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} E^0 \cdot x \otimes^s \mathbf{n} dS = E^0$

Pilotage contrainte (KUBC- $\Sigma^0$ ):  $\mathbf{u}(x) = \langle \varepsilon \rangle \cdot x \quad \forall x \in \partial V$

$$\langle \sigma \rangle = \Sigma^0$$

Pilotage par composante possible, mais on doit toujours imposer

➡ Condition de Hill :

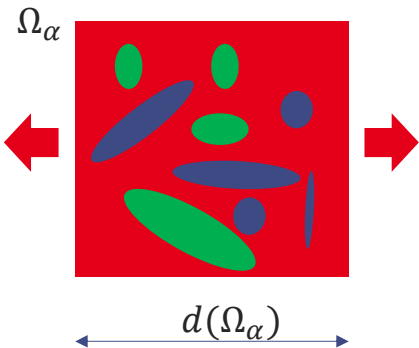
$$\frac{1}{V} \int_{\partial V} ((\sigma^1 - \langle \sigma^1 \rangle) \cdot \mathbf{n}) \cdot \underbrace{(\mathbf{u}^2 - \langle \varepsilon^2 \rangle \cdot x)}_{=0} dS = 0$$

OK  $\forall$  couple de solutions (1 et 2) respectant KUBC

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathcal{C} : \varepsilon \\ \varepsilon &= (\nabla \mathbf{u})^{sym} \\ &+ \text{chargement} \end{aligned}$$

➤ Type de CL « **statique uniforme** » (**SUBC**  $\Leftrightarrow \sigma \cdot \mathbf{n} = \langle \sigma \rangle \cdot \mathbf{n}$ )

Pilotage contrainte (SUBC- $\Sigma^0$ ):  $\sigma \cdot \mathbf{n} = \Sigma^0 \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial V$

Propriété :  $\langle \sigma \rangle = \Sigma^0$  ←  $\langle \sigma \rangle \stackrel{\text{Gauss}}{=} \frac{1}{V} \int_{\partial V} \sigma \cdot \mathbf{n} \otimes^s \mathbf{x} dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \Sigma^0 \cdot \mathbf{n} \otimes^s \mathbf{x} dS = \Sigma^0$

Pilotage déformation (SUBC- $E^0$ ):  $\sigma \cdot \mathbf{n} = \langle \sigma \rangle \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial V$

$$\langle \varepsilon \rangle = E^0$$

Pilotage par composante possible, mais on doit toujours imposer

➡ Condition de Hill :

$$\frac{1}{V} \int_{\partial V} \underbrace{((\sigma^1 - \langle \sigma^1 \rangle) \cdot \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{u}^2 - \langle \varepsilon^2 \rangle \cdot \mathbf{x})}_{=0} dS = 0$$

OK  $\forall$  couple de solutions (1 et 2) respectant SUBC

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



$d(\Omega_\alpha)$

$$\begin{aligned} \text{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathbb{C} : \varepsilon \\ \varepsilon &= (\nabla \mathbf{u})^{sym} \\ &+ \text{chargement} \end{aligned}$$

➤ Type de CL « **périodique** » (PBC)

Pilotage déformation (PBC- $E^0$ ):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x) &= E^0 \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}'(x) \quad \forall x \in \partial V \\ \mathbf{u}' &\text{ périodique} \\ \sigma \cdot \mathbf{n} &\text{ anti-périodique} \end{aligned}$$

Propriété :  $\langle \varepsilon \rangle = E^0$

$$\langle \varepsilon \rangle \stackrel{\text{Gauss}}{=} \frac{1}{V} \int_{\partial V} \mathbf{u} \otimes^s \mathbf{n} dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (E^0 \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}') \otimes^s \mathbf{n} dS = E^0$$

Pilotage contrainte (PBC- $\Sigma^0$ ):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x) &= \langle \varepsilon \rangle \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}'(x) \quad \forall x \in \partial V \\ \mathbf{u}' &\text{ périodique} \\ \sigma \cdot \mathbf{n} &\text{ anti-périodique} \end{aligned}$$

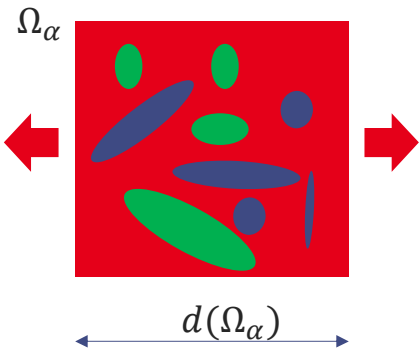
$$\langle \sigma \rangle = \Sigma^0$$

Pilotage par composante possible, mais on doit toujours imposer :

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Type de CL « périodique » (PBC,  $\mathbf{u} = \langle \varepsilon \rangle \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}'$ )

Condition de Hill : 
$$\frac{1}{V} \int_{\partial V} ((\sigma^1 - \langle \sigma^1 \rangle) \cdot \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{u}^2 - \langle \varepsilon^2 \rangle \cdot \mathbf{x}) dS = 0$$

Décomposition de  $\partial V$  par couple de faces opposées :

➡ Exemple pour faces  $x_1 = x_{1min}$ ,  $x_1 = x_{1max}$

$$\begin{aligned} \text{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathbb{C} : \varepsilon \\ \varepsilon &= (\nabla \mathbf{u})^{sym} \\ &+ \text{chargement} \end{aligned}$$

Qtés égales  $\forall (x_2, x_3)$  car **périodicité** de la fluctuation de depl.

$$\int_{x_1=x_{1min}} ((\sigma^1 - \langle \sigma^1 \rangle) \cdot \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{u}^{2'}) dS + \int_{x_1=x_{1max}} ((\sigma^1 - \langle \sigma^1 \rangle) \cdot \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{u}^{2'}) dS = 0$$

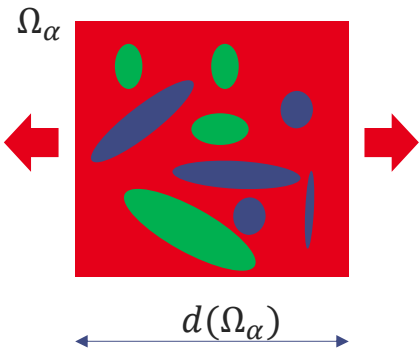
Qtés opposées  $\forall (x_2, x_3)$  car **anti-périodicité** du vecteur contrainte

Condition de Hill : **OK**  $\forall$  couple de solutions (1 et 2) respectant PBC

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )

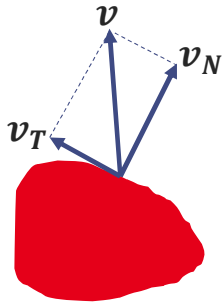


➤ Autres « types » de CL ?

CL Mixtes Normal de type I (NMBC1) [CFM2009, Gélébart, Bornert, Chateau]

Décomposition normale/tangentielle (vs bord) d'un vecteur  $\mathbf{v}$  :

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_N + \mathbf{v}_T \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} \mathbf{v}_N &= (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} && \text{(partie normale)} \\ \mathbf{v}_T &= \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} && \text{(partie tangentielle)} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \text{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathcal{C} : \varepsilon \\ \varepsilon &= (\nabla \mathbf{u})^{sym} \\ &+ \text{chargement} \end{aligned}$$

Proposition NMBC1 :

$$(\sigma \cdot \mathbf{n})_T = (\langle \sigma \rangle \cdot \mathbf{n})_T \quad \text{SUBC sur partie tangentielle}$$

$$\exists X \in S / \mathbf{u}_N = (X \cdot \mathbf{x})_N \quad \sim \text{KUBC sur partie normale}$$

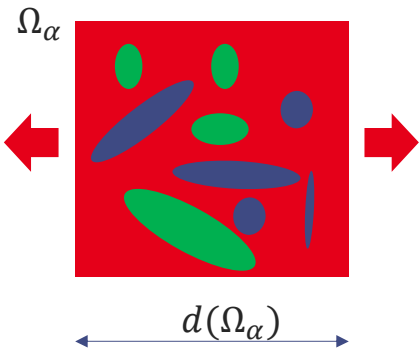
$$+ \text{ pilotage : } \langle \sigma \rangle = \Sigma_0 \quad \text{ou} \quad \langle \varepsilon \rangle = E_0 \quad (\text{ou autre...})$$

Démo critère de Hill : voir annexe

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Autres « types » de CL ?

NMBC1

$$\begin{aligned}(\sigma \cdot \mathbf{n})_T &= (\langle \sigma \rangle \cdot \mathbf{n})_T \\ \exists X \in S / \mathbf{u}_N &= (X \cdot \mathbf{x})_N\end{aligned}$$

SUBC sur partie **tangentielle**  
~KUBC sur partie **normale**

NMBC2

$$\begin{aligned}(\sigma \cdot \mathbf{n})_N &= (\langle \sigma \rangle \cdot \mathbf{n})_N \\ \exists X \in S / \mathbf{u}_T &= (X \cdot \mathbf{x})_T\end{aligned}$$

SUBC sur partie **normale**  
~KUBC sur partie **tangentielle**

$$\begin{aligned}\text{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathbb{C} : \varepsilon \\ \varepsilon &= (\nabla \mathbf{u})^{\text{sym}} \\ &+ \text{chargement}\end{aligned}$$

[CFM2009, Gélébart, Bornert, Chateau]

➡ Alternatives à PBC, compatible Hill  
Utilisable indépendamment de la forme de  $\partial\Omega$

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



### ➤ Cas particulier des matériaux poreux

**SUBC** : impossible, contrainte nulle dans les pores (idem pour NMBC1/2)



**SUBC** - modifié : contrainte homogène sur la matrice uniquement



Nécessite de périodiser les faces opposées pour assurer l'équilibre

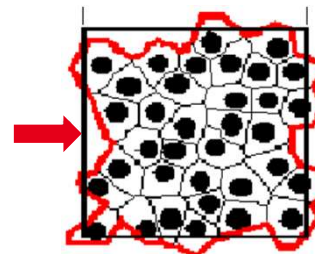
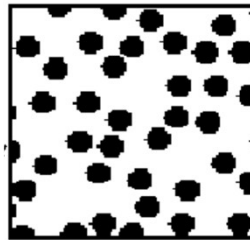
Remarque si pilotage contrainte moyenne :

Contrainte appliquée = contrainte moyenne / fraction de surface solide

⇒ Hill vérifiée (avec précautions particulières)



**SUBC** + bords contournant les porosités!



[Salmi Thèse2012]

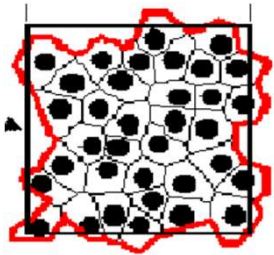


## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )

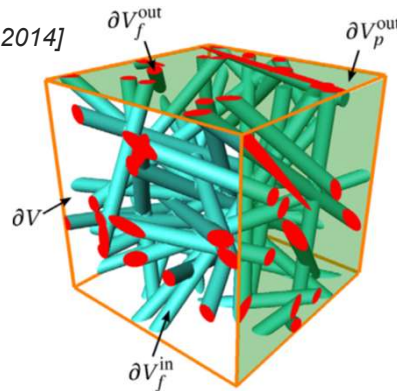
### ➤ Cas particulier des matériaux poreux



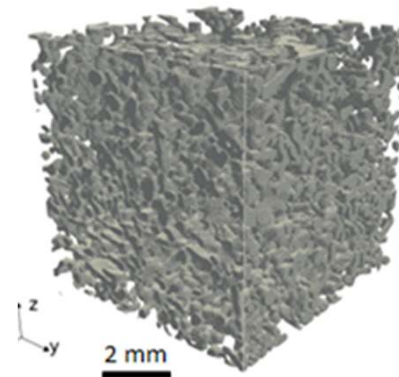
**SUBC** + bords contournant les porosités -> pas toujours possible ( $\mu S$  bipercolée)

Distribution Poissonienne de fibres (infinies!)

[Dirrenberger IJSS2014]

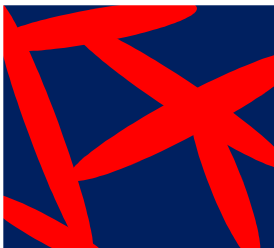


Neige



[Vedrine GRL2024, MECAMAT2025]

Exemple pathologique



**PBC**

Chargement transmis par l'intersection des surfaces solides de faces opposées  
-> Peut être très faible!!



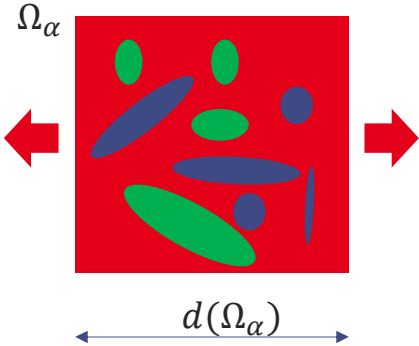
**PBC** + périodisation de la cellule (surfaces opposées)  
pas toujours possible (cf fibres ci-dessus) ni souhaité (expé...)



## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Autres approches ?

Jusqu'à présent :

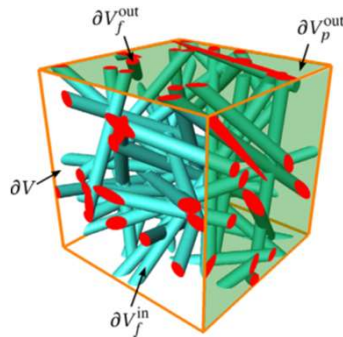
SUBC, KUBC, PBC, NMBC1, NMBC2 :

ensembles de chargements « stables » par combinaison linéaire  
(combinaison linéaire de chargements d'un « type » reste du même « type »)

Autre approche : ex 'PMUBC' - 6 chargements différents (non « liés » ) [Pahr2008]

[Pahr2008]

Utilisation typique -  
microstructures poreuses  
complexes non périodisable

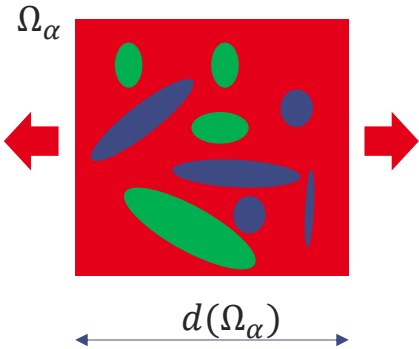


|           | East                                                             | West                                                              | North                                                            | South                                                             | Top                                                              | Bottom                                                            |
|-----------|------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|
| Tensile 1 | $u_1 = {}^0\varepsilon_{11} \frac{l_1}{2}$<br>$t_2 = t_3 = 0$    | $u_1 = -{}^0\varepsilon_{11} \frac{l_1}{2}$<br>$t_2 = t_3 = 0$    | $u_2 = 0$<br>$t_1 = t_3 = 0$                                     | $u_2 = 0$<br>$t_1 = t_3 = 0$                                      | $u_3 = 0$<br>$t_1 = t_2 = 0$                                     | $u_3 = 0$<br>$t_1 = t_2 = 0$                                      |
| Tensile 2 | $u_1 = 0$<br>$t_2 = t_3 = 0$                                     | $u_1 = 0$<br>$t_2 = t_3 = 0$                                      | $u_2 = {}^0\varepsilon_{22} \frac{l_2}{2}$<br>$t_1 = t_3 = 0$    | $u_2 = -{}^0\varepsilon_{22} \frac{l_2}{2}$<br>$t_1 = t_3 = 0$    | $u_3 = 0$<br>$t_1 = t_2 = 0$                                     | $u_3 = 0$<br>$t_1 = t_2 = 0$                                      |
| Tensile 3 | $u_1 = 0$<br>$t_2 = t_3 = 0$                                     | $u_1 = 0$<br>$t_2 = t_3 = 0$                                      | $u_2 = 0$<br>$t_1 = t_3 = 0$                                     | $u_2 = 0$<br>$t_1 = t_3 = 0$                                      | $u_3 = {}^0\varepsilon_{33} \frac{l_3}{2}$<br>$t_1 = t_2 = 0$    | $u_3 = -{}^0\varepsilon_{33} \frac{l_3}{2}$<br>$t_1 = t_2 = 0$    |
| Shear 12  | $u_2 = {}^0\varepsilon_{21} \frac{l_1}{2}$<br>$u_3 = 0, t_1 = 0$ | $u_2 = -{}^0\varepsilon_{21} \frac{l_1}{2}$<br>$u_3 = 0, t_1 = 0$ | $u_1 = {}^0\varepsilon_{12} \frac{l_2}{2}$<br>$u_3 = 0, t_2 = 0$ | $u_1 = -{}^0\varepsilon_{12} \frac{l_2}{2}$<br>$u_3 = 0, t_2 = 0$ | $u_3 = 0$<br>$t_1 = t_2 = 0$                                     | $u_3 = 0$<br>$t_1 = t_2 = 0$                                      |
| Shear 13  | $u_3 = {}^0\varepsilon_{31} \frac{l_1}{2}$<br>$u_2 = 0, t_1 = 0$ | $u_3 = -{}^0\varepsilon_{31} \frac{l_1}{2}$<br>$u_2 = 0, t_1 = 0$ | $u_2 = 0$<br>$t_1 = t_3 = 0$                                     | $u_2 = 0$<br>$t_1 = t_3 = 0$                                      | $u_1 = {}^0\varepsilon_{13} \frac{l_3}{2}$<br>$u_2 = 0, t_3 = 0$ | $u_1 = -{}^0\varepsilon_{13} \frac{l_3}{2}$<br>$u_2 = 0, t_3 = 0$ |
| Shear 23  | $u_1 = 0$<br>$t_2 = t_3 = 0$                                     | $u_1 = 0$<br>$t_2 = t_3 = 0$                                      | $u_3 = {}^0\varepsilon_{32} \frac{l_2}{2}$<br>$u_1 = 0, t_2 = 0$ | $u_3 = -{}^0\varepsilon_{32} \frac{l_2}{2}$<br>$u_1 = 0, t_2 = 0$ | $u_2 = {}^0\varepsilon_{23} \frac{l_3}{2}$<br>$u_1 = 0, t_3 = 0$ | $u_2 = -{}^0\varepsilon_{23} \frac{l_3}{2}$<br>$u_1 = 0, t_3 = 0$ |

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



### ➤ Autres approches ?

Jusqu'à présent : SUBC, KUBC, PBC, NMBC1, NMBC2 :  
ensembles de chargements « stables » par combinaison linéaire  
(combinaison linéaire de chargements d'un « type » reste du même « type »)

Autre approche : ex 'PMUBC' - 6 chargements différents (non « liés ») [Pahr2008]

$$\langle \sigma^I \rangle = C_{CL,\alpha}^{app} \langle \varepsilon^I \rangle \Rightarrow C_{CL,\alpha}^{app} \text{ non symétrique si la cellule n'a pas de symétrie orthotrope (condition de Hill non vérifiée)}$$



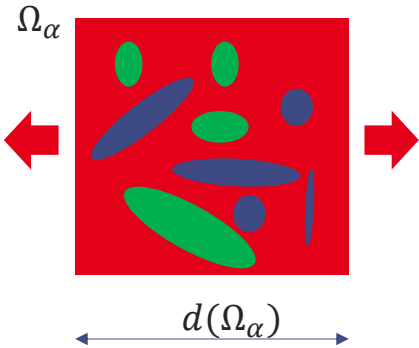
Rigoriste : Ne pas utiliser !

Pragmatique : symétriser  $C_{CL,\alpha}^{app}$  si l'écart à la symétrie est faible

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Quels outils ?

- Codes Éléments Finis

KUBC- $E^0$   
SUBC- $\Sigma^0$   
'PMUBC'

: très simples à mettre en oeuvre

Autres chargement plus délicats (relations cinématiques entre noeuds)



Fonctionnalités  
« homogénéisation »

CAST3M

[www-cast3m.cea.fr](http://www-cast3m.cea.fr)

- Codes Éléments Finis + outils spécifiques

KUBC- $E^0$ , KUBC- $\Sigma^0$ , PBC- $E^0$ , PBC- $\Sigma^0$ , NMBC1- $\Sigma^0$ , NMBC2- $\Sigma^0$ , SUBC- $\Sigma^0$   
Opérateurs @CLDH, @CLDHC, @CLPD, @CLPC, @CLMI1C, @CLMI2C, @CLCH

Opérateur @KEFF :

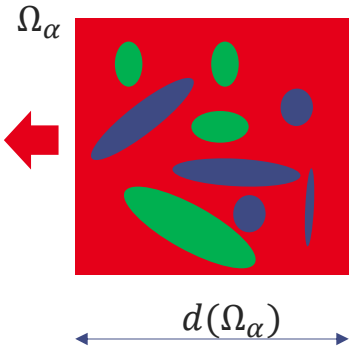
réalise 6 chargements

évalue le Tenseur d'élasticité Apparent  $C_{CL,\alpha}^{app}$

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



### ➤ Quels outils ?

- Codes Eléments Finis + outils spécifiques

**HOMTOOLS**

<https://homtools.lma.cnrs-mrs.fr>

Homogenization Toolbox  
for **ABAQUS**

[S. Lejeunes, S. Bourgeois, LMA]

KUBC, SUBC, PBC

Pilotage  $E^0$  ou  $\Sigma^0$  (par composante)  
(astuce : composantes du chargement moyen comme  
composante de nœuds supplémentaires)

- Codes FFT

**DAMASK**

Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit

[M. Diehl, MPIE]

**CRAFT**

[H. Moulinec, LMA]

**AMITEX**

[L. Gélébart, CEA]

et bien d'autres...

Actuellement : Uniquement PBC mais TRES EFFICACE!!

En cours : SUBC, KUBC etc... (voir partie FFT suite de l'exposé)

# Plan

## 1. « Rappels théoriques »

Comportement apparent et conditions aux limites

Du comportement apparent au comportement effectif

## 2. Applications

Cas élasticité linéaire : composite SiC/SiC (« cas d'école » + discussions pour élargir)

Cas non-linéaire : Plasticité cristalline dans les polycristaux (résultats et questionnements)

## 3. Méthodes FFT

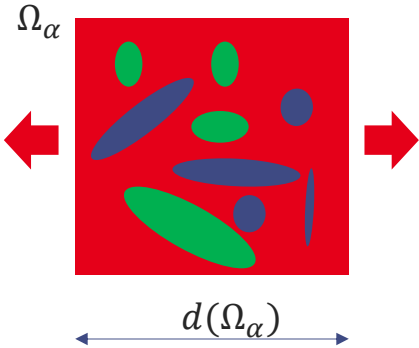
Focus FFT différences finies

+ remarques

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



### Du comportement apparent à l'estimation du comportement effectif



Comportement Apparent = comportement d'un VE ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )

$$\langle \sigma \rangle = C_{CL,\alpha}^{app} \langle \varepsilon \rangle$$

$$C_{CL,\alpha}^{app} \xrightarrow{d(\Omega_\alpha) \rightarrow \infty} C^{eff} : \text{comportement effectif}$$

Cadre : microstructures aléatoires (stationnarité + ergodicité)

VER = Volume Élémentaire Représentatif du **comportement effectif**

VER, suffisamment grand pour que  $C_{CL,\alpha}^{app}$

|                       |  |                                                              |
|-----------------------|--|--------------------------------------------------------------|
| $C_{CL,\alpha}^{app}$ |  | ne dépend plus des CL                                        |
|                       |  | ne dépend plus de $d(\Omega_\alpha)$                         |
|                       |  | ne dépend plus de la réalisation $\alpha$ (tirage aléatoire) |

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



### Du comportement apparent à l'estimation du comportement effectif

Problème :  $d(VER)$  souvent très grand  $\Rightarrow$  simulation difficilement réalisable!!



Solution : **Approche statistique** [*Huet, JMPS1990*]

$$\Omega_0 = \bigcup_{\alpha=1}^N \Omega_\alpha$$

| $\Omega_1$ | $\Omega_2$ | $\Omega_3$ |  |
|------------|------------|------------|--|
|            |            |            |  |
|            |            |            |  |
|            |            |            |  |

□ Définitions de **comportements apparents « statistiques »** ( $\overline{X}_\alpha = (\sum_{\alpha=1}^N X_\alpha)/N$ )

H1:  $\langle \varepsilon \rangle_\alpha = \langle \varepsilon \rangle_0$  deformation moy. identique sur tous les domaines

$$\langle \sigma \rangle_0 = \overline{\langle \sigma \rangle_\alpha} = \overline{C_{CL,\alpha}^{app} : \langle \varepsilon \rangle_\alpha} = \overline{C_{CL,\alpha}^{app}} : \langle \varepsilon \rangle_0$$

$$C_{CL}^{app+} \doteq \overline{C_{CL,\alpha}^{app}}$$

~Voigt sur les  
cpt apparents

H2:  $\langle \sigma \rangle_\alpha = \langle \sigma \rangle_0$  contrainte moy. identique sur tous les domaines

$$\langle \varepsilon \rangle_0 = \overline{\langle \varepsilon \rangle_\alpha} = \overline{S_{CL,\alpha}^{app} : \langle \sigma \rangle_\alpha} = \overline{S_{CL,\alpha}^{app}} : \langle \sigma \rangle_0$$

$$S_{CL}^{app-} \doteq \overline{S_{CL,\alpha}^{app}}$$

$$C_{CL}^{app-} \doteq (S_{CL}^{app-})^{-1}$$

~Reuss sur les cpt apparents

□ Focus SUBC et KUBC



Statut de borne pour  $C_{KUBC}^{app+}$  et  $C_{SUBC}^{app-}$  ?

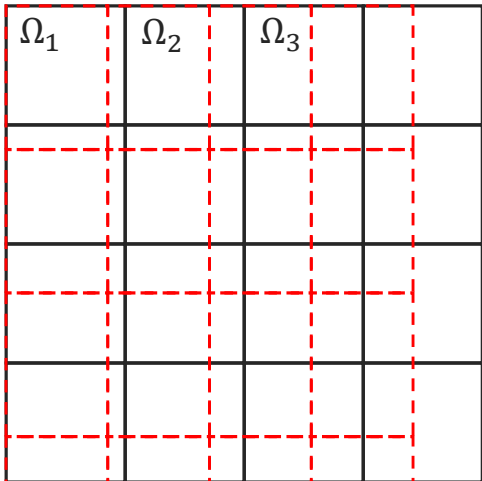


## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



### Du comportement apparent à l'estimation du comportement effectif

$$\Omega_0 = \bigcup_{\alpha=1}^N \Omega_\alpha$$



$$\mathbf{u}^* = E^0 \cdot \mathbf{x}$$

□ Si KUBC- $E^0$  sur  $\Omega_0$

$$\text{sur } \Omega_0 \quad \begin{cases} \operatorname{div}(\sigma) = 0 \\ \sigma = C : \varepsilon \\ \varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^{sym} \\ \mathbf{u} = E^0 \cdot \mathbf{x} \text{ sur } \partial\Omega_0 \end{cases}$$



**Théorème de l'énergie potentielle :**

Sol = Min(Energie de déformation - Travail des Efforts imposés)

$$\mathbf{u} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{u}^* \in \mathcal{U}^0} \left( \frac{1}{2} \langle \varepsilon(\mathbf{u}^*) : C : \varepsilon(\mathbf{u}^*) \rangle \right)$$

$$\mathcal{U}^0 = \{ \mathbf{u}^* \text{ régulier} / \mathbf{u}^* = E^0 \cdot \mathbf{x} \text{ sur } \partial\Omega_0 \}$$

Soit  $\mathbf{u}_\alpha$  solution KUBC- $E^0$  sur  $\Omega_\alpha$

On choisit  $\mathbf{u}^* = \bigcup_{\alpha=1}^N \mathbf{u}_\alpha$  avec  $\mathbf{u}^* = E^0 \cdot \mathbf{x}$  sur  $\partial\Omega_0$

$$\mathbf{u}^* \in \mathcal{U}^0 \text{ donc } \langle \varepsilon(\mathbf{u}) : C : \varepsilon(\mathbf{u}) \rangle \leq \langle \varepsilon(\mathbf{u}^*) : C : \varepsilon(\mathbf{u}^*) \rangle$$

$$\langle \varepsilon(\mathbf{u}) : C : \varepsilon(\mathbf{u}) \rangle = E^0 : C_{KUBC,0}^{app} : E^0 \quad (\text{déf. énergétique de } C_{KUBC,0}^{app})$$

$$\langle \varepsilon(\mathbf{u}^*) : C : \varepsilon(\mathbf{u}^*) \rangle = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha=1}^N V_\alpha \langle \varepsilon(\mathbf{u}_\alpha) : C : \varepsilon(\mathbf{u}_\alpha) \rangle_\alpha$$

$$C_{KUBC,0}^{app} \leq C_{KUBC}^{app+}$$

$$= \sum_{\alpha=1}^N \frac{V_\alpha}{V_0} E^0 : C_{KUBC,\alpha}^{app} : E^0 = E^0 : \overline{C_{KUBC,\alpha}^{app}} : E^0 = E^0 : C_{KUBC}^{app+} : E^0$$

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



### Du comportement apparent à l'estimation du comportement effectif

$$\Omega_0 = \bigcup_{\alpha=1}^N \Omega_\alpha$$

|                          |                          |                          |  |
|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--|
| $\Omega_1$<br>$\sigma_1$ | $\Omega_2$<br>$\sigma_2$ | $\Omega_3$<br>$\sigma_3$ |  |
|                          |                          |                          |  |
|                          |                          |                          |  |
|                          |                          |                          |  |

$$\sigma_\alpha \cdot \mathbf{n} = \Sigma^0 \cdot \mathbf{n} \text{ sur } \partial\Omega_\alpha$$

□ Si SUBC- $\Sigma^0$  sur  $\Omega_0$

$$\text{sur } \Omega_0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\sigma) = 0 \\ \sigma = C : \varepsilon \\ \varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^{sym} \\ \sigma \cdot \mathbf{n} = \Sigma^0 \cdot \mathbf{n} \text{ sur } \partial\Omega_0 \end{array} \right.$$



Soit  $\sigma_\alpha$  solution SUBC- $\Sigma^0$  sur  $\Omega_\alpha$

On choisit  $\sigma^* = \bigcup_{\alpha=1}^N \sigma_\alpha$

$$\sigma^* \in S^0 \text{ donc } \langle \sigma : S : \sigma \rangle \leq \langle \sigma^* : S : \sigma^* \rangle$$

$$\langle \sigma : S : \sigma \rangle = \frac{1}{2} \Sigma^0 : S_{SUBC,0}^{app} : \Sigma^0 \quad (\text{déf. énergétique})$$

$$\langle \sigma^* : S : \sigma^* \rangle = \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha=1}^N V_\alpha \langle \sigma_\alpha : C : \sigma_\alpha \rangle_\alpha$$

$$= \sum_{\alpha=1}^N \frac{V_\alpha}{V_0} \Sigma^0 : S_{SUBC,\alpha}^{app} : \Sigma^0 = \Sigma^0 : \overline{S_{SUBC,\alpha}^{app}} : \Sigma^0 = \Sigma^0 : S_{SUBC}^{app-} : \Sigma^0$$

**Théorème de l'énergie complémentaire :**

Sol = Min(Energie de déformation - Travail des dépl. imposés)

$$\sigma = \operatorname{argmin}_{\sigma^* \in S^0} \left( \frac{1}{2} \langle \sigma^* : S : \sigma^* \rangle \right)$$

$$S^0 = \{ \sigma^* \text{ régulier} / \operatorname{div}(\sigma^*) = 0 \\ \sigma^* \cdot \mathbf{n} = \Sigma^0 \cdot \mathbf{n} \text{ sur } \partial\Omega_0 \}$$

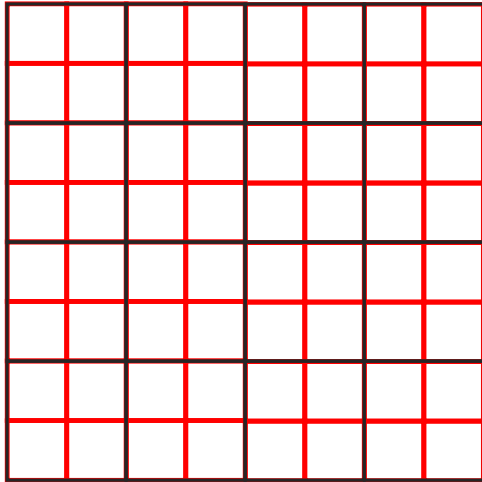
$$S_{SUBC,0}^{app} \leq S_{SUBC}^{app-}$$

$$C_{SUBC}^{app-} \leq C_{SUBC,0}^{app}$$

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



### Du comportement apparent à l'estimation du comportement effectif



□ Effet de taille sur les bornes :

Découpage initial : *gros*

Découpage 2 fois plus fin : *fin*

On montre avec des raisonnements similaires aux précédents [Huet1990] que :

➤ En imposant KUBC- $E^0$  sur  $\Omega_0$  et les  $\Omega_\alpha$

$$C_{KUBC,0}^{app} \leq C_{KUBCgros}^{app+} \leq C_{KUBCfin}^{app+} \leq \dots \leq C^{Voigt} = \langle C \rangle$$

➤ En imposant SUBC- $\Sigma^0$  sur  $\Omega_0$  et les  $\Omega_\alpha$

$$S_{SUBC,0}^{app} \leq S_{SUBCgros}^{app-} \leq S_{SUBCfin}^{app-} \leq \dots \leq S^{Reuss} = \langle S \rangle$$

➤ Si  $d(\Omega_0)$  "suffisamment grand" (VER) alors :  $C_{KUBC,0}^{app} = C^{eff}$  et  $S^{eff} = S_{SUBC,0}^{app}$

REUSS sur comportement apparents SUBC

VOIGT sur comportements apparents KUBC

$$\langle C^{-1} \rangle^{-1} = C^{Reuss} \leq \dots \leq C_{SUBCfin}^{app-} \leq C_{SUBCgros}^{app-} \leq C^{eff} \leq C_{KUBCgros}^{app+} \leq C_{KUBCfin}^{app+} \leq \dots \leq C^{Voigt} = \langle C \rangle$$

$\xleftarrow{d \searrow} \qquad \qquad \qquad \xrightarrow{d \searrow}$



### Du comportement apparent à l'estimation du comportement effectif

Autres résultats importants :

Encadrement des comportements **apparents PBC** (démonstration voir annexe)

$$C_{SUBC,\alpha}^{app} \leq C_{PBC,\alpha}^{app} \leq C_{KUBC,\alpha}^{app}$$

Encadrement des comportements **apparents statistiques PBC**

$$C_{SUBC}^{app+} \leq C_{PBC}^{app+} \leq C_{KUBC}^{app+}$$

$$C_{SUBC}^{app-} \leq C_{PBC}^{app-} \leq C_{KUBC}^{app-}$$

- Valable pour PBC et aussi NMBC1, NMBC2
- Pas de hiérarchie entre les 3

# Plan

## 1. « Rappels théoriques »

Comportement apparent et conditions aux limites

Du comportement apparent au comportement effectif

## 2. Applications

Cas élasticité linéaire : composite SiC/SiC (« cas d'école » + discussions pour élargir)

Cas non-linéaire : Plasticité cristalline dans les polycristaux (résultats et questionnements)

## 3. Méthodes FFT

Focus FFT différences finies

+ remarques



### Composites SiC/SiC

#### SiC (céramique)

- ❑ stabilité en température (vs métaux) 😊
- ❑ fragile (faible déformation élastique, rupture aléatoire) ! 😞



#### Composite

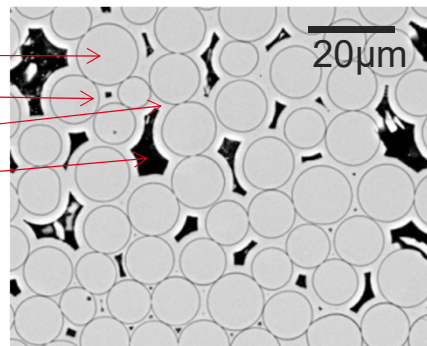
- ❑ Comportement reproductible
- ❑ Déformation à rupture ↗

#### ➤ Un matériau multi-échelles

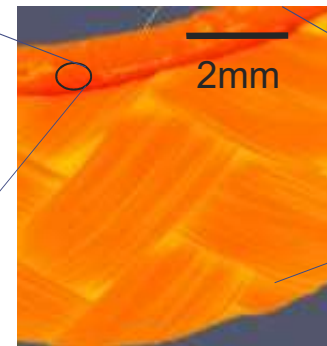
##### Composants

Fibres  
Interphase  
Matrice  
Porosité

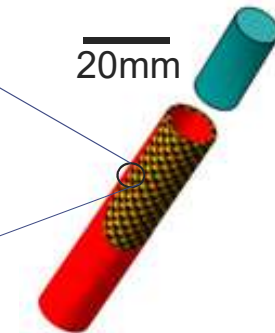
##### Echelle du toron



##### Echelle du motif périodique



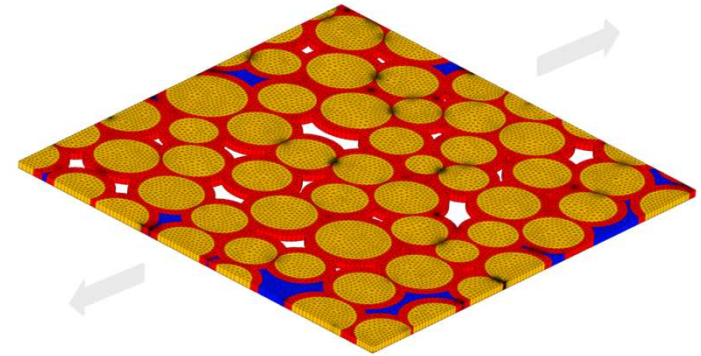
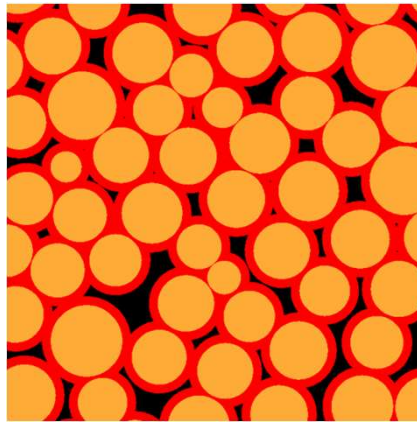
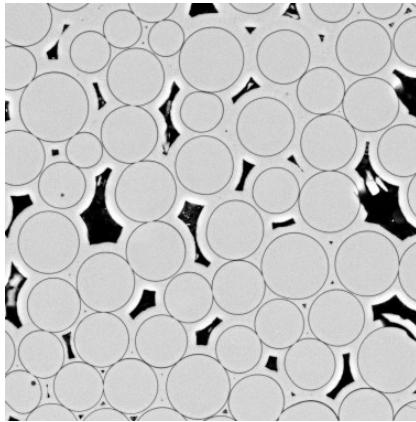
##### Echelle de la structure



## PARTIE 2 – Applications



### Méthodologie classique de l'homogénéisation numérique (à l'échelle du toron)



Caractérisation  
microstructurale

Génération d'une  
microstructure virtuelle

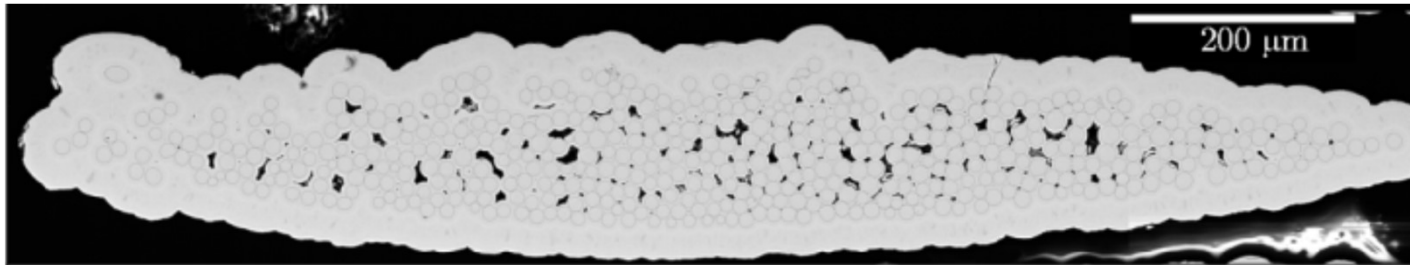
Comportement effectif  
Notion de VE(S)R

## PARTIE 2 – Applications



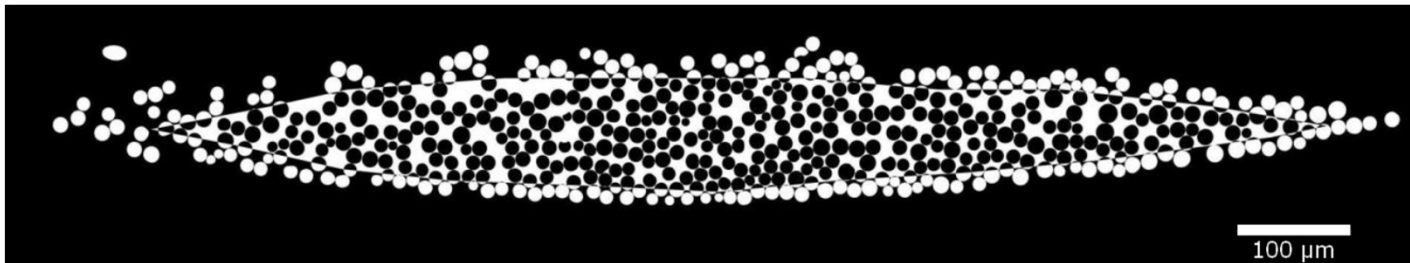
### Caractérisation expérimentale (SiC/SiC)

- Image MEB-FEG, HR (6 torons)

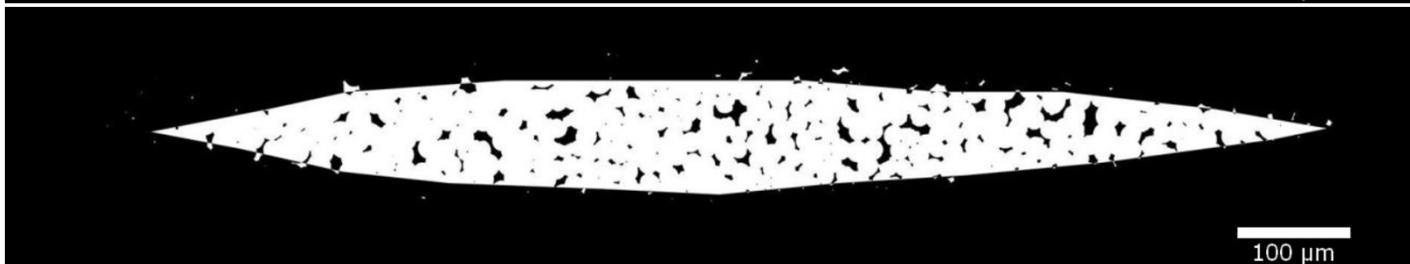


- Segmentation (traitement d'images numériques)

Sélection  
cœur de  
toron



Extraction  
fibres



Extraction  
pores



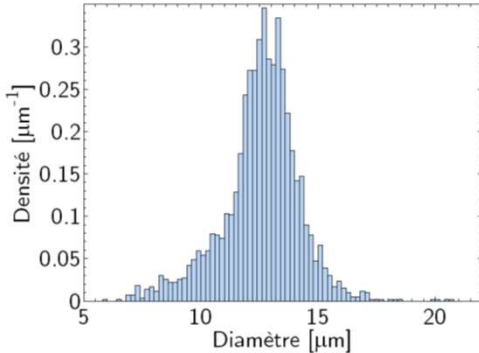
## PARTIE 2 – Applications



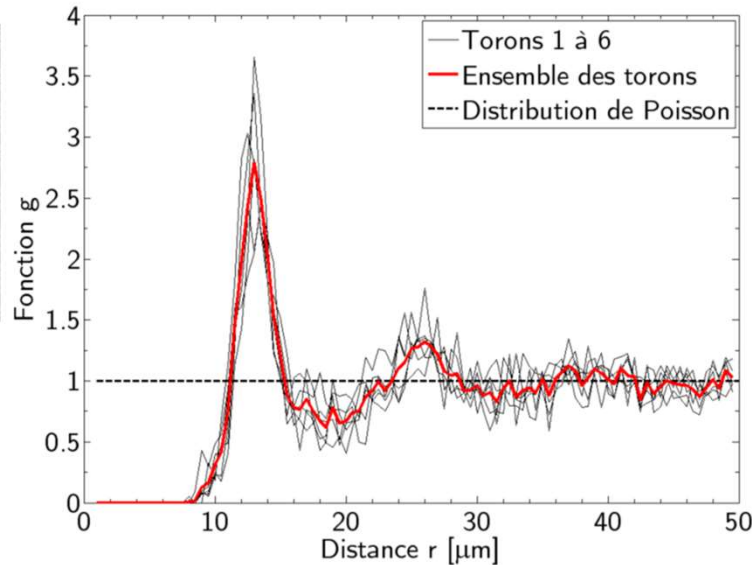
### Caractérisation expérimentale (SiC/SiC)

#### ➤ Descripteurs statistique des **fibres**

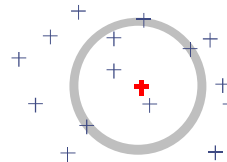
*Diamètres*



*Ex : Fonction de distribution radiale*

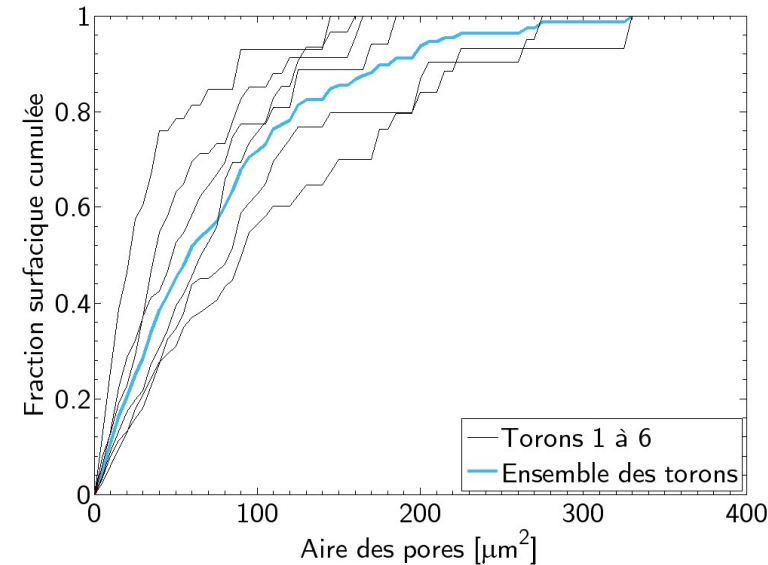


Nombre de centres dans un anneau d'épaisseur  $dr$   
ramenée à une distribution uniforme de points



#### ➤ Description statistique des **pores**

*Aire des pores*



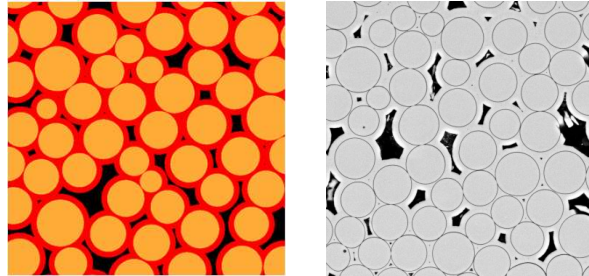
## PARTIE 2 – Applications



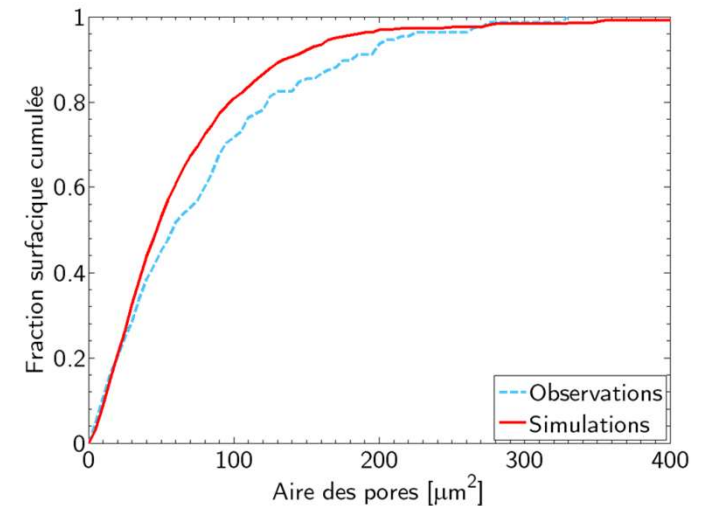
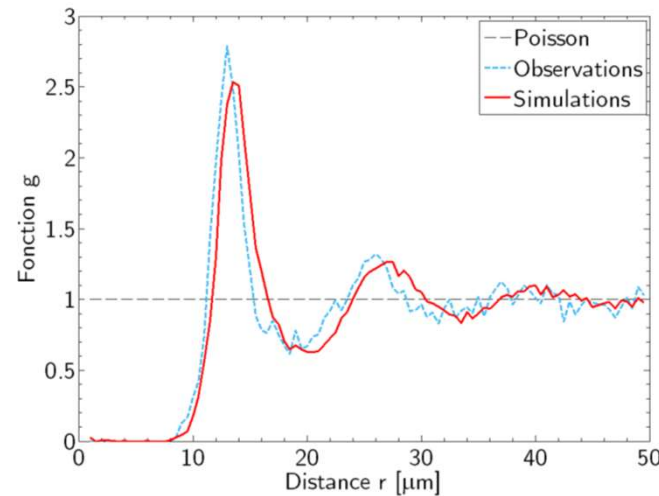
### Génération de microstructures aléatoires (SiC/SiC)

- Distribution aléatoires de fibres (diamètres expé) – processus RSA avec réarrangement
- Epaisseur de matrice constante

Accord qualitatif



Accord quantitatif



## PARTIE 2 – Applications

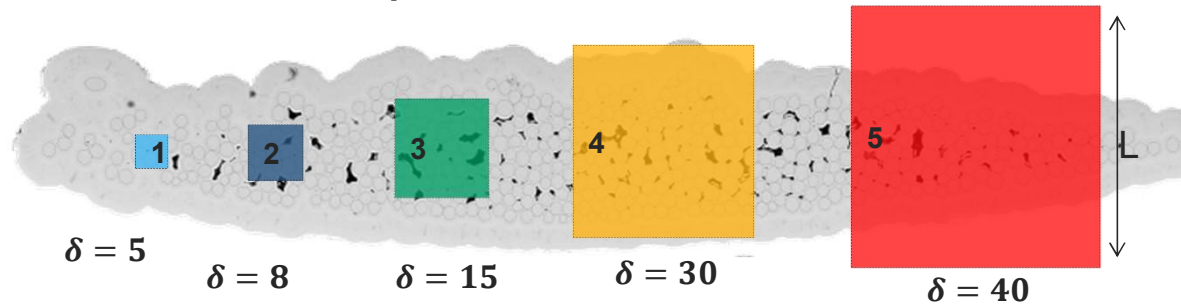


### Comportement effectif – Notion de VE(S)R (SiC/SiC)

- ❑ Comportement des constituants      élasticité isotrope,  
                                                 **faible contraste** fibre/matrice ( $E_m = 404GPa$ ,  $E_f = 354GPa$ ,  $\nu = 0,18$ )  
                                                  $\Rightarrow$  Rôle de la **porosité**?

- ❑ Choix de Taille de VES

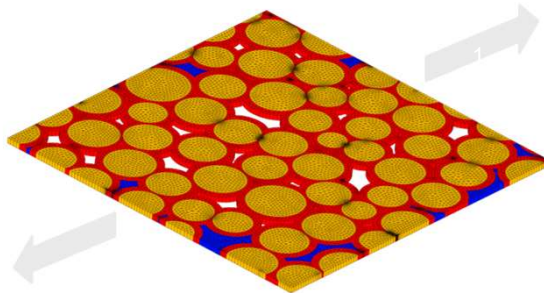
$$\delta = L/R_f$$



- ❑ Choix des CL



CAST3M



- SUBC, NMBC1, NMBC2 : inapplicable (pores débouchants)
- **KUBC**
- **PBC** (pores débouchants = raideur négligeable)
- **'PMUBC'**

- Pour chaque taille de VES -  $N$  réalisations  $\alpha$

Pour chaque réalisation  $\alpha \Rightarrow C_{CL,\alpha}^{app}$

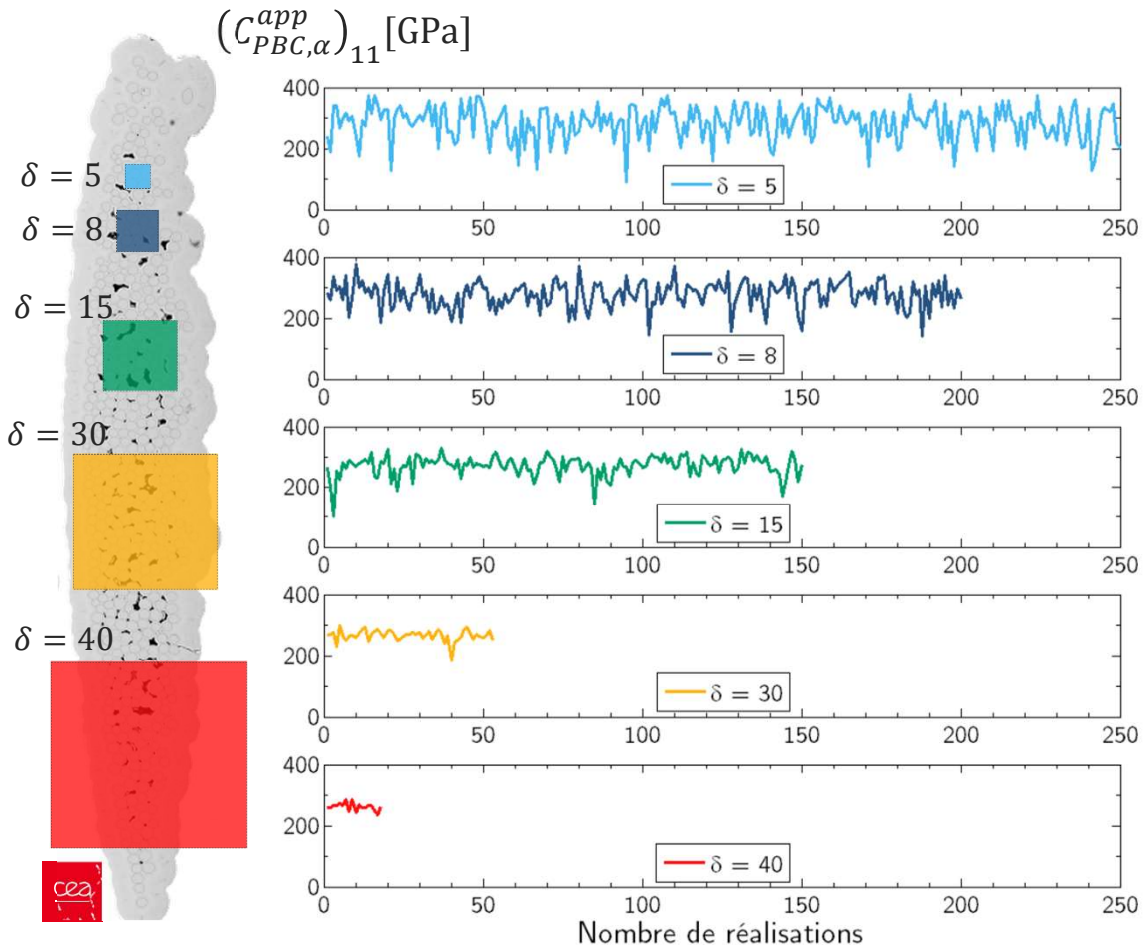
$$\Rightarrow C_{CL}^{app+} = \overline{C_{CL,\alpha}^{app}}$$

(~Voigt des  $C_{CL,\alpha}^{app}$ )

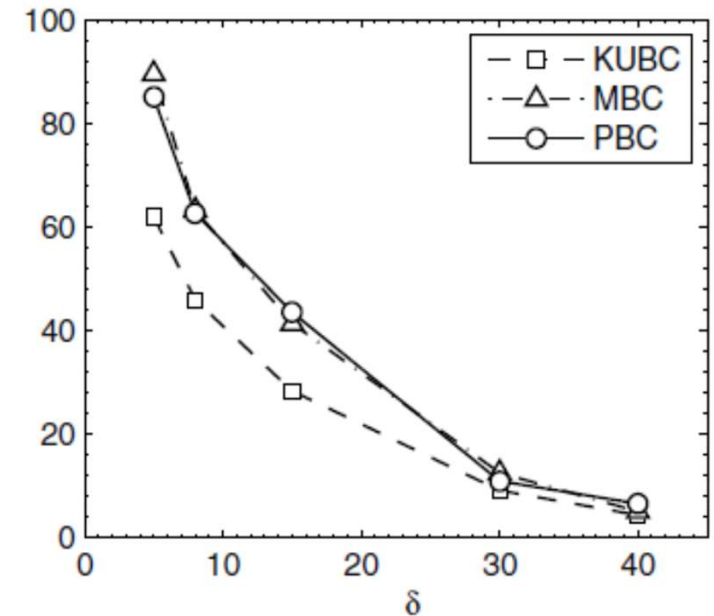
## PARTIE 2 – Applications



### Comportement effectif – Notion de VE(S)R (SiC/SiC)



Nombre de réalisations minimum pour une précision de 2% sur la moyenne statistique

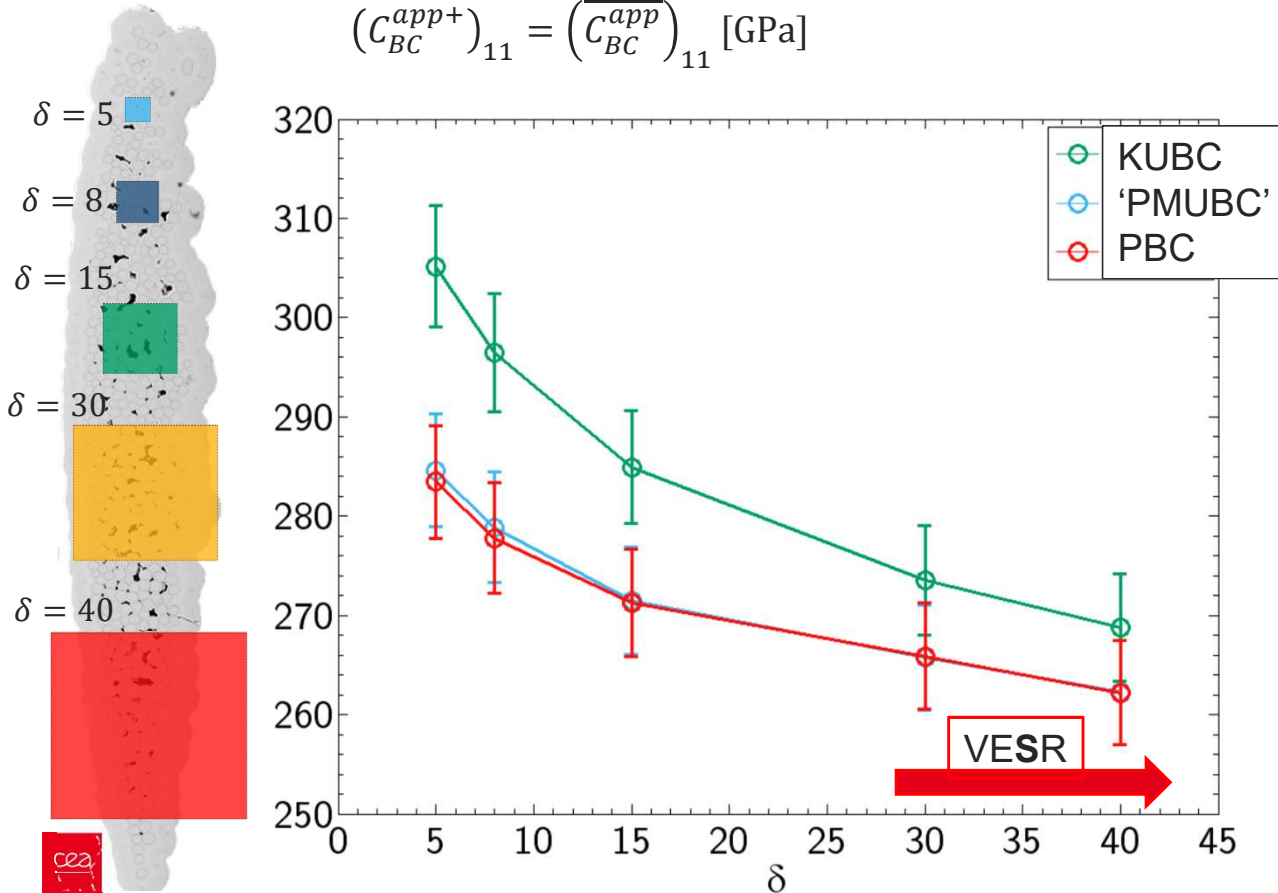


## PARTIE 2 – Applications



### Comportement effectif – Notion de VE(S)R (SiC/SiC)

$$(C_{BC}^{app+})_{11} = (\overline{C_{BC}^{app}})_{11} \text{ [GPa]}$$



Rappels [Huet, JMPS1990]

- $C_{KUBC}^{app+}$  borne sup  
 $C_{SUBC}^{app+} \leq C_{PBC}^{app+} \leq C_{KUBC}^{app+}$
- $C_{KUBC}^{app+} \searrow$  si  $\delta \nearrow$

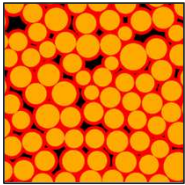
- Pour  $\delta > 30$  : ~ VESR
- Faible écart entre CL
  - Faible sensibilité à  $\delta$

## PARTIE 2 – Applications

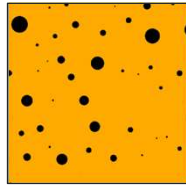


### Comportement effectif – sensibilité à la porosité (SiC/SiC)

Pores CVI

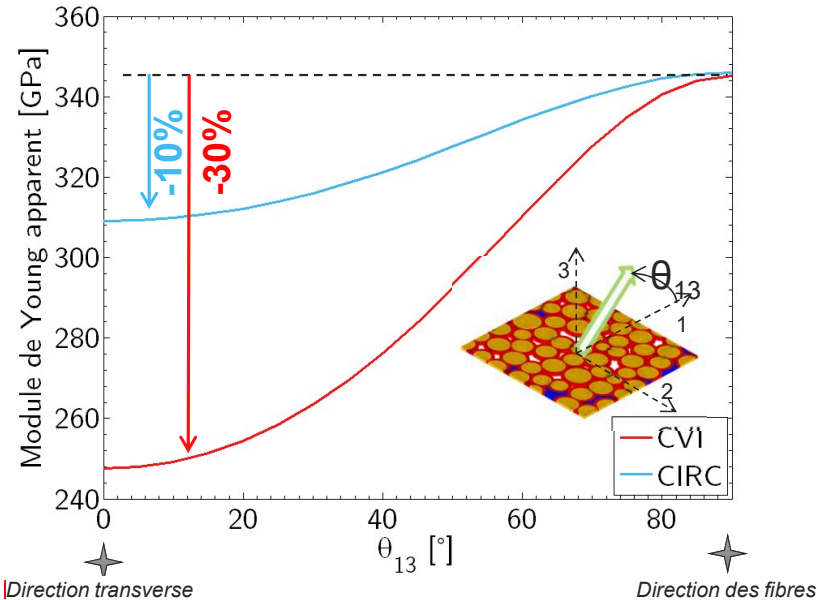


Pores circulaires



(Matrice homogène  $E=370$  GPa)

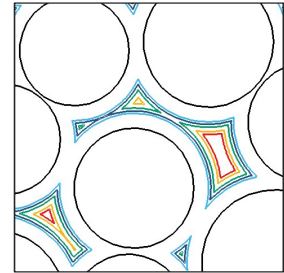
Module d'élasticité apparent



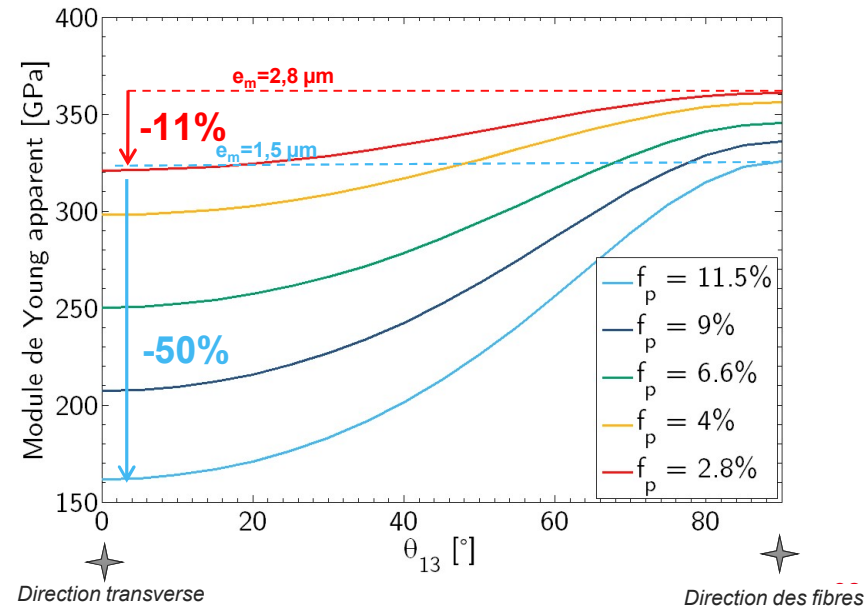
### Effet d'une variation d'épaisseur de matrice

(relation procédé → microstructure → propriété méca)

$e_{\text{matrice}} = 1,5 \mu\text{m}$  à  $2,8 \mu\text{m}$



Module d'élasticité apparent



## PARTIE 2 – Applications



### Comportement effectif – Notion de VER (cas général)

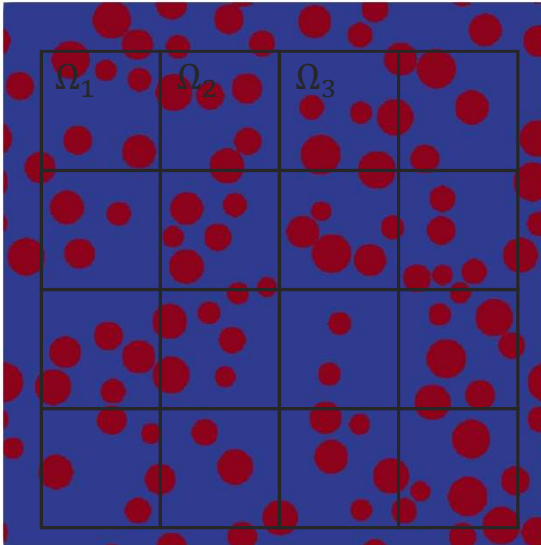
❑ Remarque 1 : Analyse statistique des résultats sur VES [Kanit, IJSS2003]

✓ Pour une quantité additive (+hyp ergodicité, stationarité)

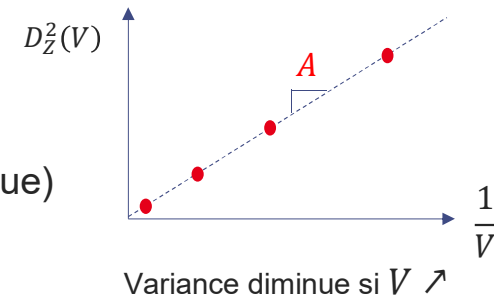
$$D_Z^2(V) = \frac{A}{V}$$

$D_Z^2(V)$  : Variance de  $\bar{Z}_\alpha$ , moyenne de  $Z$  sur les domaines  $\Omega_\alpha$  de volume  $V$

✓ Exemple la fraction volumique  $Z = F$



➤ Détermination de  $A$  (analytique ou numérique)



Précision sur l'évaluation de  $F$  = moyenne sur  $n$  échantillons

$$\varepsilon_{abs}(V) = \frac{2D_F(V)}{\sqrt{n}}$$

$$\varepsilon_{rela}(V) = \frac{2D_F(V)}{F\sqrt{n}}$$



pour un volume  $V$  et une précision  $\varepsilon_{rela} \Rightarrow n_{mini}$   
ou  
pour  $n = 1$  et une précision  $\varepsilon_{rela} \Rightarrow V_{mini}$



## PARTIE 2 – Applications



### Comportement effectif – Notion de VER (cas général)

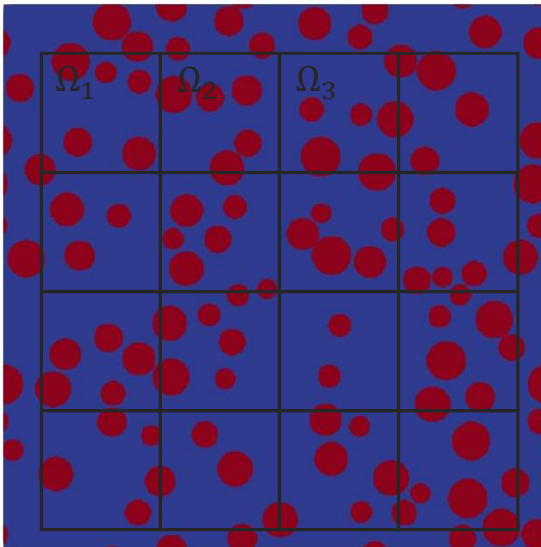
❑ Remarque 1 : Analyse statistique des résultats sur VES [Kanit, IJSS2003]

✓ Pour une **propriété élastique (non additive)**

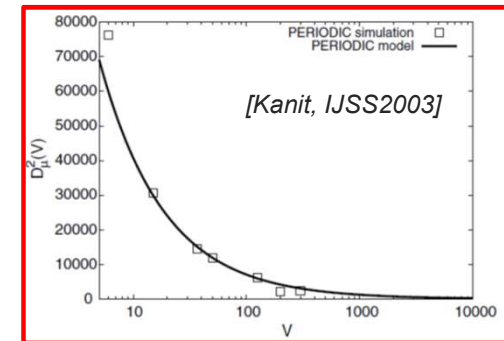
$$D_Z^2(V) = \left(\frac{A}{V}\right)^\alpha$$

$D_Z^2(V)$  : Variance de  $\bar{Z}_\alpha$ , moyenne de  $Z$  sur les domaines  $\Omega_\alpha$  de volume  $V$

✓ Exemple le **module de cisaillement**  $Z = \mu_{PBC}^{app}$



➤ Détermination de  $A$  et  $\alpha$  (numérique)



Précision sur l'évaluation de  $F$  = moyenne sur  $n$  échantillons

$$\varepsilon_{abs}(V) = \frac{2D_{\mu_{PBC}^{app}}(V)}{\sqrt{n}}$$

$$\varepsilon_{rela}(V) = \frac{2D_{\mu_{PBC}^{app}}(V)}{\mu_{PBC}^{app}\sqrt{n}}$$



pour un volume  $V$  et une précision  $\varepsilon_{rela} \Rightarrow n_{mini}$   
ou  
pour  $n = 1$  et une précision  $\varepsilon_{rela} \Rightarrow V_{mini}$

**ATTENTION : ne dit rien sur l'erreur systématique (liée aux CL)**



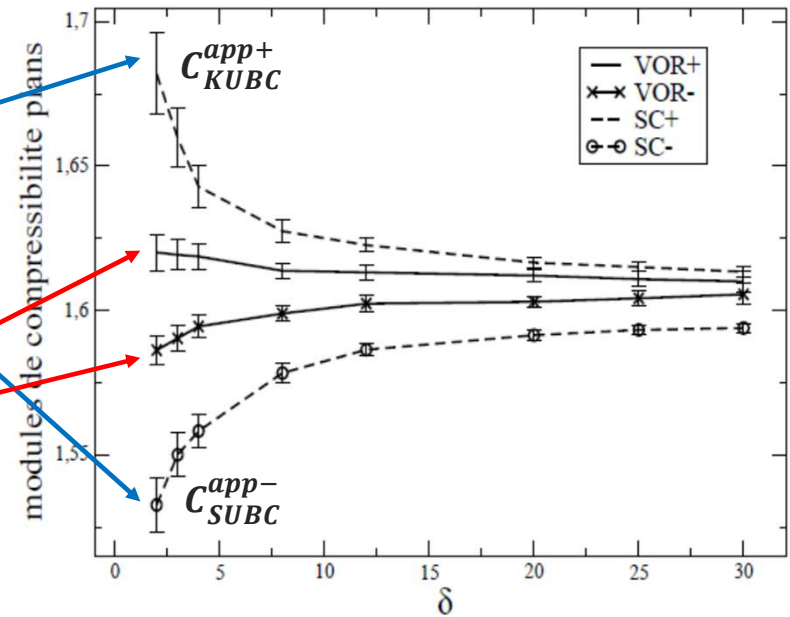
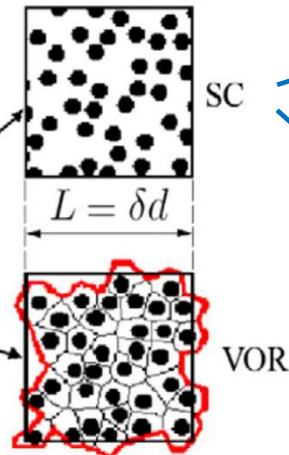
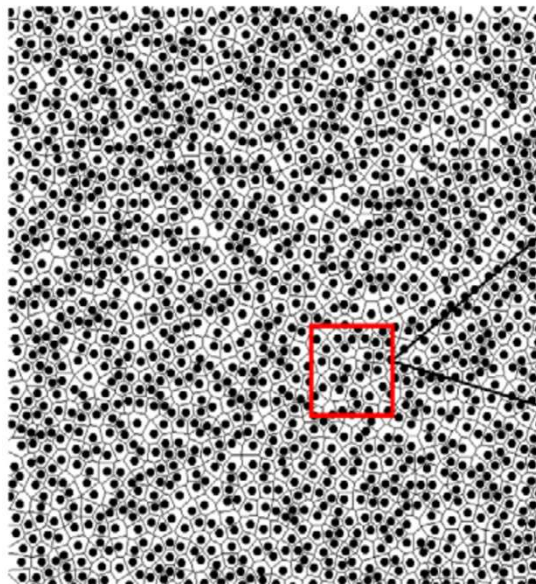
## PARTIE 2 – Applications

### Comportement effectif – Notion de VER (cas général)

❑ Remarque 2 : Optimisation du contour des VES [Salmi, IJSS2012]

$$f_v = 15\%$$

Inclusions rigide (contraste 5)



Bornes + resserrées!!

Estimation PBC : non applicable...

➡ Estimation NMBC1, NMBC2 (applicable sur toute forme de VES)!

## PARTIE 2 – Applications

### Comportement effectif – Notion de VER (cas général)

❑ Remarque 3 : Périodisation des cellules pour simulations PBC

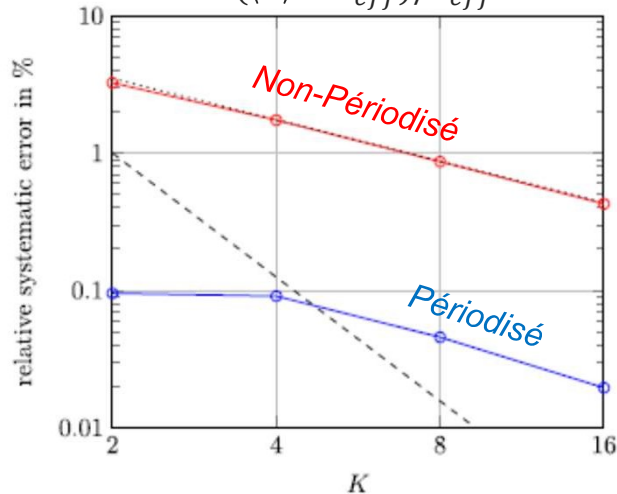
[Schneider et al., JMPS2022]

- ✓ Ecart-type plus faible  
⇒ Moins de calculs à réaliser
- ✓ Erreur « systématique » plus faible  
⇒ Convergence atteinte pour des tailles plus faibles

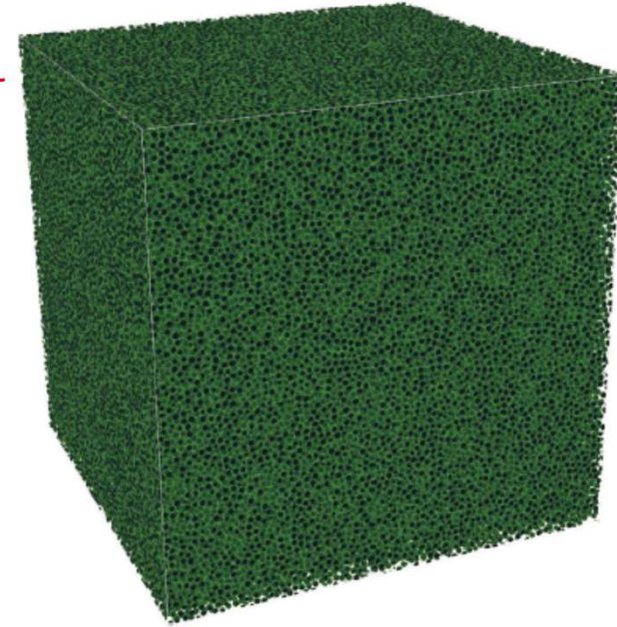
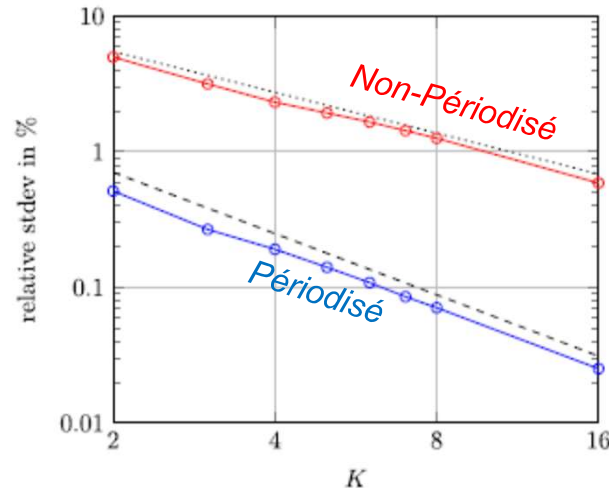
Conductivité thermique ( $\frac{\alpha_{sphere}}{\alpha_{matrice}} = 6$ )

Erreur systématique (vs référence)

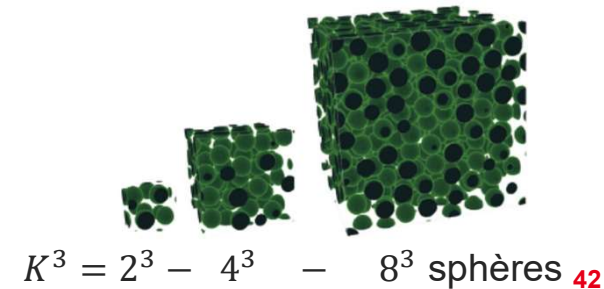
$$(\langle \alpha \rangle - \alpha_{eff}) / \alpha_{eff}$$



Ecart-type relatif



$K^3 = 64^3 = 262144$  sphères  
Référence (VER)



# Plan

## 1. « Rappels théoriques »

Comportement apparent et conditions aux limites

Du comportement apparent au comportement effectif

## 2. Applications

Cas élasticité linéaire : composite SiC/SiC (« cas d'école » + discussions pour élargir)

Cas non-linéaire : Plasticité cristalline dans les polycristaux (résultats et questionnements)

## 3. Méthodes FFT

Focus FFT différences finies

+ remarques



## PARTIE 2 – Applications

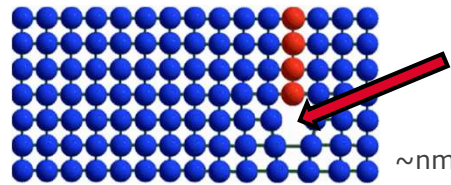


### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Plasticité cristalline : de l'atome au continu en 1 transparent !

➤ Atomic description

$\sim (nm)$

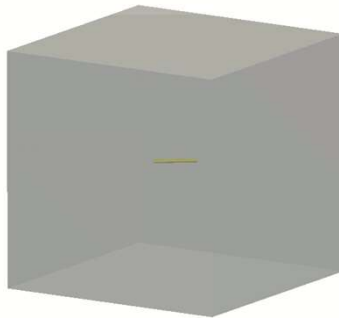


Dislocation (defect)

➤ Dislocation line description

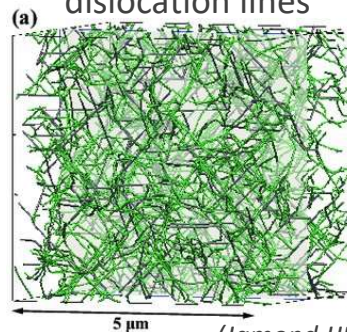
$(\sim \mu m)$

Single dislocation source



(from Numodis website)

Complex distribution of  
dislocation lines



(Jamond IJP2015)

➤ Continuum description

$(\sim \mu m)$

$$\text{CP law} \\ \sigma = c : (\varepsilon - \varepsilon^P)$$

## PARTIE 2 – Applications

### Plasticité cristalline & polycristaux

#### □ Loi de Plasticité cristalline

##### ➤ Système de glissement ( $\mathbf{n}_s, \mathbf{m}_s$ )

$\mathbf{n}_s$ , normale au plan de glissement

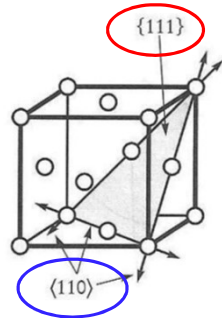
$\mathbf{m}_s$ , direction de glissement

Exemple : FCC crystals

4 planes  $\{111\}$

3 directions  $\langle 110 \rangle$  per plane

→ 12 slip systems

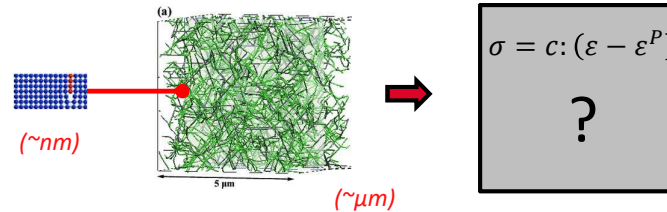


##### ➤ Cisaillement sur un système $s$

$$\gamma_s = \varepsilon^p : (\mathbf{n}_s \otimes^{sym} \mathbf{m}_s)$$

##### ➤ Cission sur un système $s$

$$\tau_s = \sigma : (\mathbf{n}_s \otimes^{sym} \mathbf{m}_s)$$



##### ➤ Modèle Plasticité Cristalline (HPP)

$$\sigma = C : (\varepsilon - \varepsilon^p)$$

$$\dot{\varepsilon}^p = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}_s \mathbf{n}_s \otimes^{sym} \mathbf{m}_s$$

$$\tau_s = \sigma : (\mathbf{n}_s \otimes^{sym} \mathbf{m}_s)$$

##### ➤ + Lois d'écoulement et d'écrouissage

$$\dot{\gamma}_s = \text{sign}(\tau_s) \left( \frac{|\tau_s| - \tau_c}{K} \right)^n$$

$$\dot{\tau}_c = 0$$

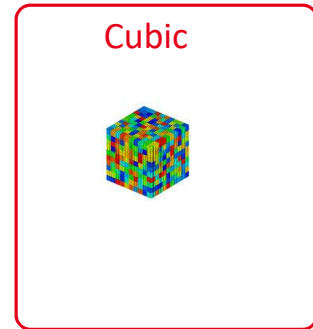
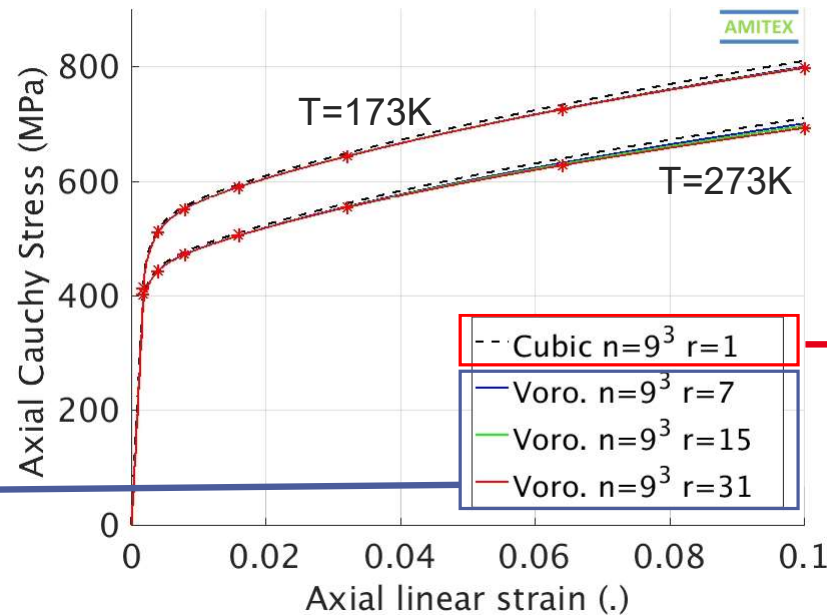
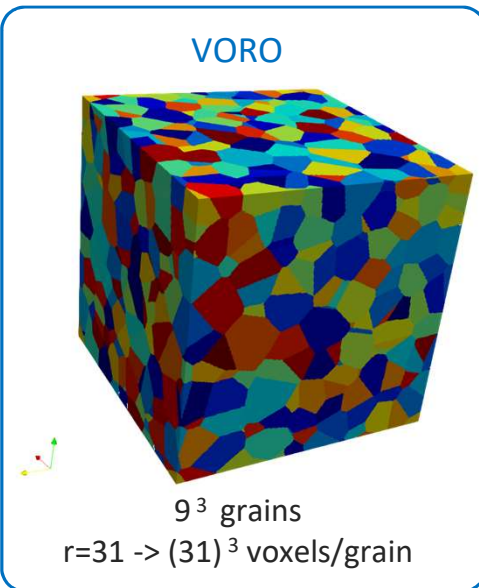
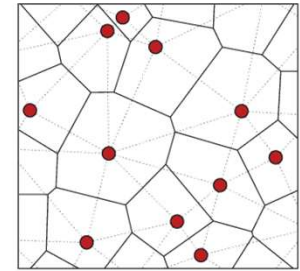
Ici très simple (écrouissage nul), certaines lois 'à bases physiques' sont très complexes

## PARTIE 2 – Applications

### Plasticité cristalline & polycristaux

#### ❑ Polycristaux « denses »

- Loi cristalline Fer-BCC à base physiques (densité dislo., etc..) [Monnet et. Al, JNM2019]
- Représentation « simple » et « usuelle » des polycristaux :
  - ➔ Tessellation de Voronoï (sur distribution aléatoire uniforme de centre)



Avec 1 voxel/grain :

Très bonne approximation !



## PARTIE 2 – Applications



### Plasticité cristalline & polycristaux

#### ❑ Polycristaux « denses »

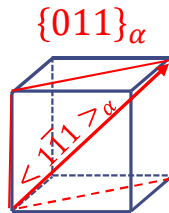
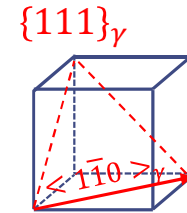
#### ➤ Modification de la représentation du polycristal : idéalisation « bainite »

Neper

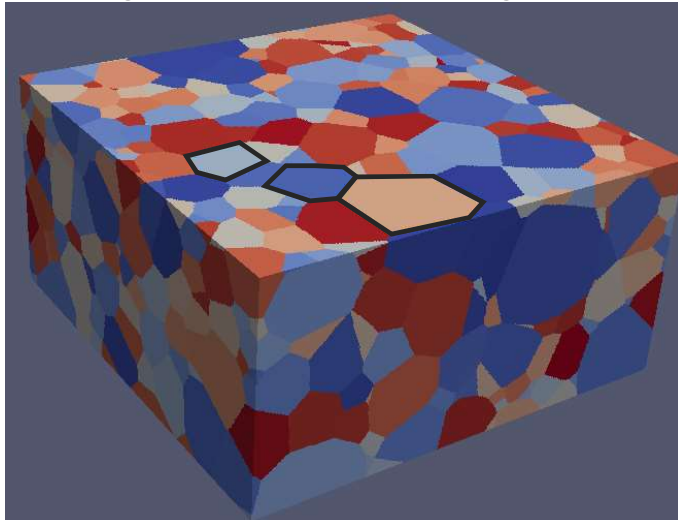
- grains « parent » : découpage de Voronoï (comme précédemment)
- grains « enfant » : sous-découpage en 15 « paquets »

- relations d'orientation « parent » (CFC- $\gamma$ ) / « enfant » (CC- $\alpha$ ) :

Relation de Kurdjumov-Sachs :  $\{111\}_{\gamma} // \{011\}_{\alpha}$  et  $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle_{\gamma} // \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle_{\alpha}$



1000 grains « parents » - Laguerre



15000 grains « enfants »

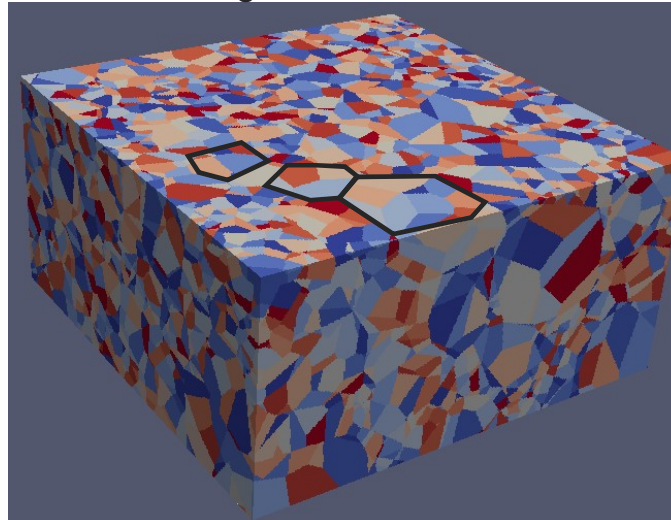


Image  $400^3$   
 $\sim 25^3$  / grain « enfant »

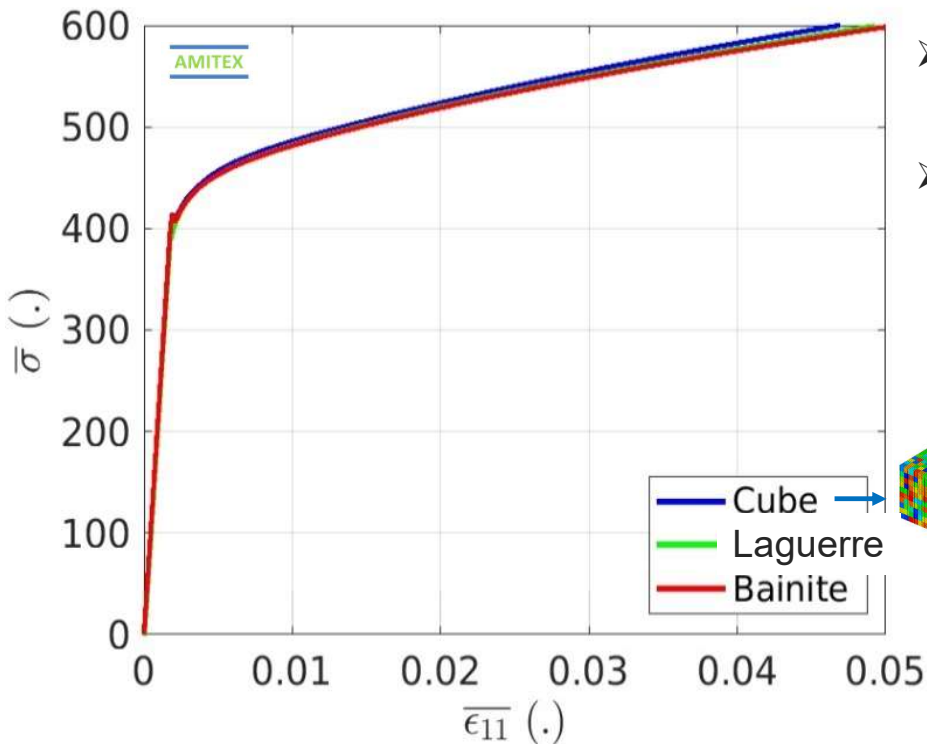
## PARTIE 2 – Applications



### Plasticité cristalline & polycristaux

#### ❑ Polycristaux « denses »

Voronoi (grains « parents ») ~ Bainite (sous-découpage) ~ Grains cubiques à 1 voxel/grain !!



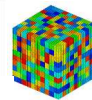
➤ Effet limité de la forme des grains sur **comportement moyen**

➤ **Estimation 1 voxel/grain : très bonne estimation!**

➤ Application : calcul  $FE^2$  ou  $FE/FFT$

$FE$  (structure) /  $FE$  ou **FFT** (microstructure)

Points de Gauss



$10^3$  voxels  
1 voxel/grain



## PARTIE 2 – Applications



### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Polycristaux « denses »

**Comment renforcer le rôle de la « géométrie » des grains ?**

**L** Ajouter une dépendance à la taille :

$$\text{➤ } \tau_0 = \tau_{00} + \frac{k}{\sqrt{d}} \longrightarrow d?$$

$d = \text{cte/grain ?}$

Diamètre de la sphère équivalente (isotrope) ?  
Petit-axe de l'ellipse équivalente (anisotrope) ?

Loi de Hall-Petch macro traduite à l'échelle micro

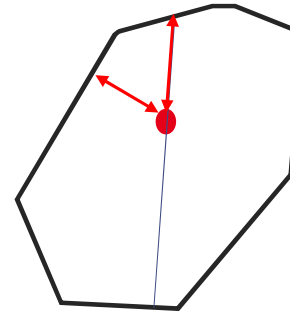
$d = \text{hétérogène ?}$

Distance mini au joint de grain ?  
Distance mini dans la direction de glissement?

...

➤  $\tau_0$  distribuée aléatoirement et hypothèse de maillon le + faible [Gélébart2021]  
(Distribution aléatoire de sources de dislocation)

➤ Modèles de Plasticité à gradient [Gurtin, Forest etc.....]



## PARTIE 2 – Applications



### Plasticité cristalline & polycristaux

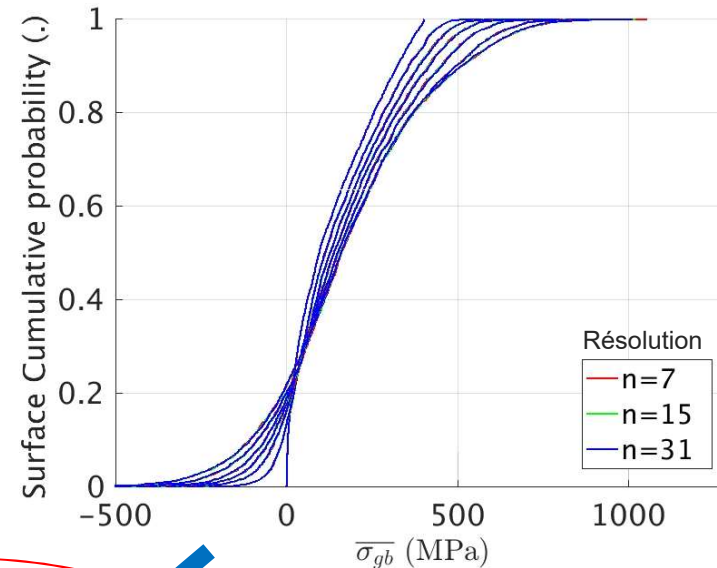
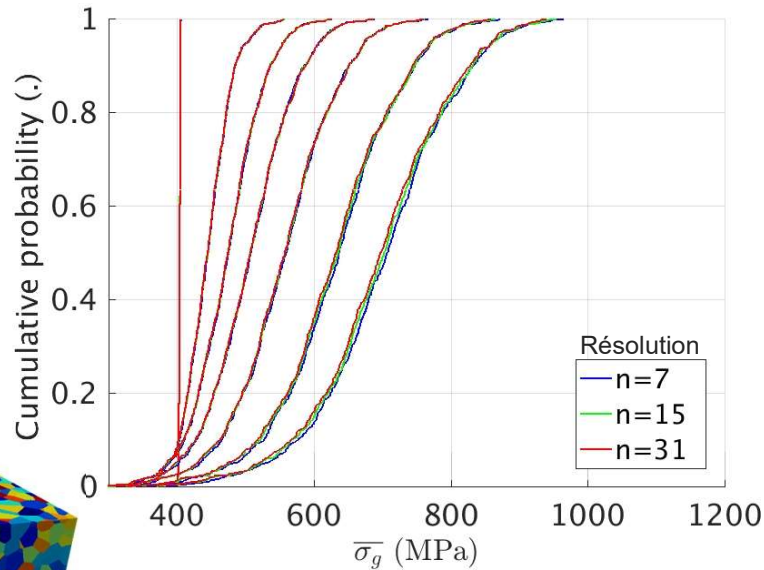
- ❑ Polycristaux « denses » - quantités locales

Contraintes **moyennes par grain**

Voronoi 729 arains

Contraintes **moyennes par Joint de Grain**

4445 JdG



Modèle probabiliste

Rupture **intra**-granulaire

Par ex. [Ren et. al,  
Eng. Frac Mech 2022]

Rupture **inter**-granulaire

## PARTIE 2 – Applications

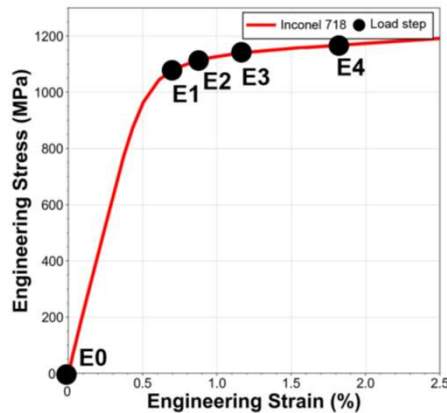
### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Polycristaux « denses » - quantités locales  $\Rightarrow$  **localisation de la plasticité** dans matériaux durcis

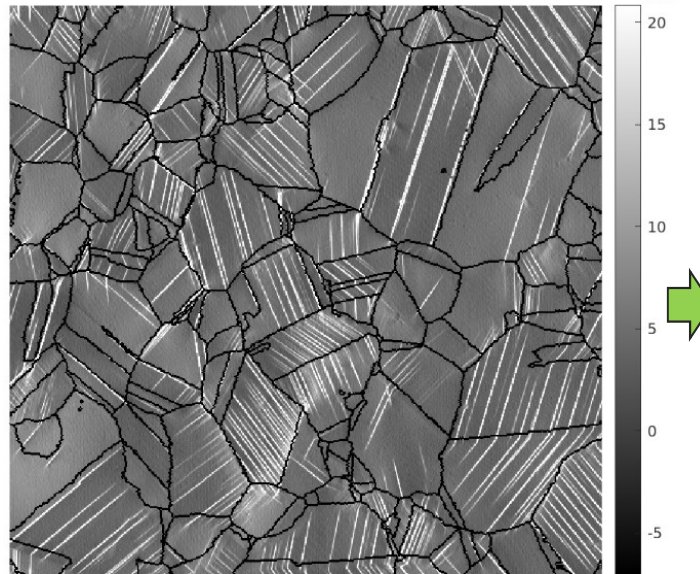
➤ INCONEL 718 **durci par nano-précipitation** [Charpagne & al, Acta Mat 2021]

précipitation de phases  $\gamma'$  et  $\gamma''$  de taille nanométrique (traitement 8h à 720°C puis 8h à 620°C)

✓ Essai mécanique in-situ MEB

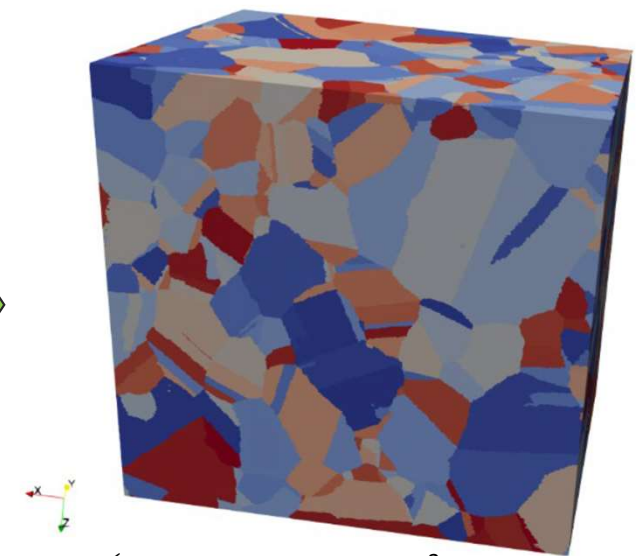


✓ HR-DIC



Déformation axiale  
Etape E1

✓ EBSD – 3D



- ✓ (549x420x526)  $\mu\text{m}^3$
- ✓ ~2000 grains
- ✓ résolution spatiale 1  $\mu\text{m}^3$

## PARTIE 2 – Applications

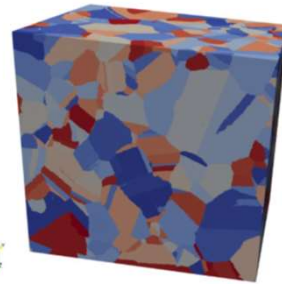


### Plasticité cristalline & polycristaux

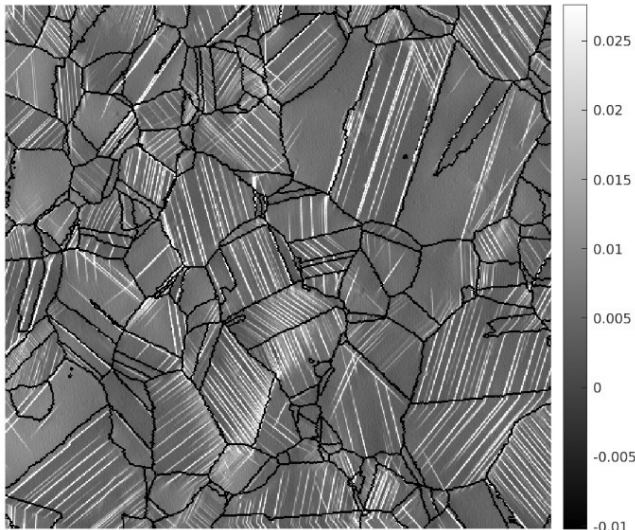
❑ Polycristaux « denses » - quantités locales  $\Rightarrow$  **localisation de la plasticité** dans matériaux durcis

➤ INCONEL 718 **durci par nano-précipitation**

- ✓ Simulation sur les données 3D-EBSD : 549x420x526
- ✓ Lois d'écrouissage à 'bases physiques' (Kocks-Mecking) (*utilisée dans Charpagne & al. Acta Mat, 2021*)

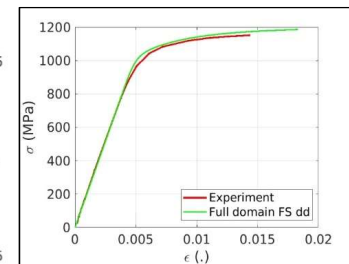
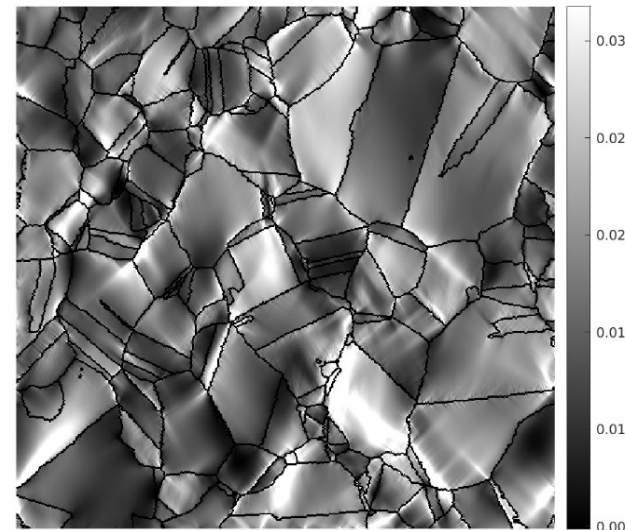


Expérience HR - DIC



Simulation FFT

AMITEX



Déformation axiale  
Etape E3 (1%)



Pas vraiment satisfaisant...



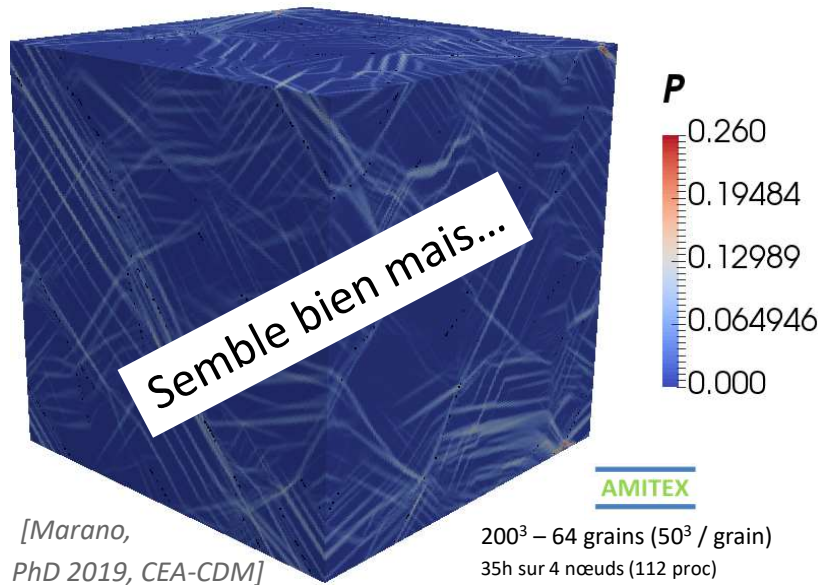
## PARTIE 2 – Applications

### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Polycristaux « denses » - quantités locales  $\Rightarrow$  **localisation de la plasticité** dans matériaux durcis

➤ Plasticité cristalline 'à bases physiques' **AVEC adoucissement**

Plasticité cristalline **avec adoucissement**  
(acier austénitique, [Han, PhD2012, CEA-CDM])

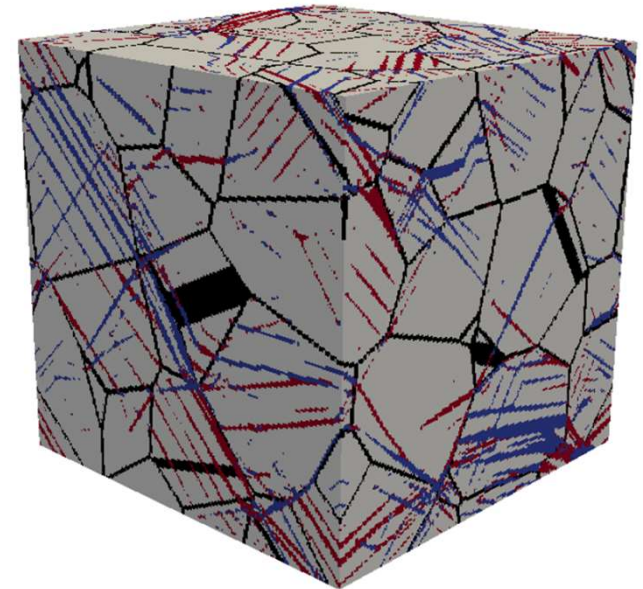


#### Analyse de l'orientation des bandes

~50% Kink bands

~50% Slip bands

Non reporté  
dans expérience 😞



➡ Toujours pas satisfaisant...

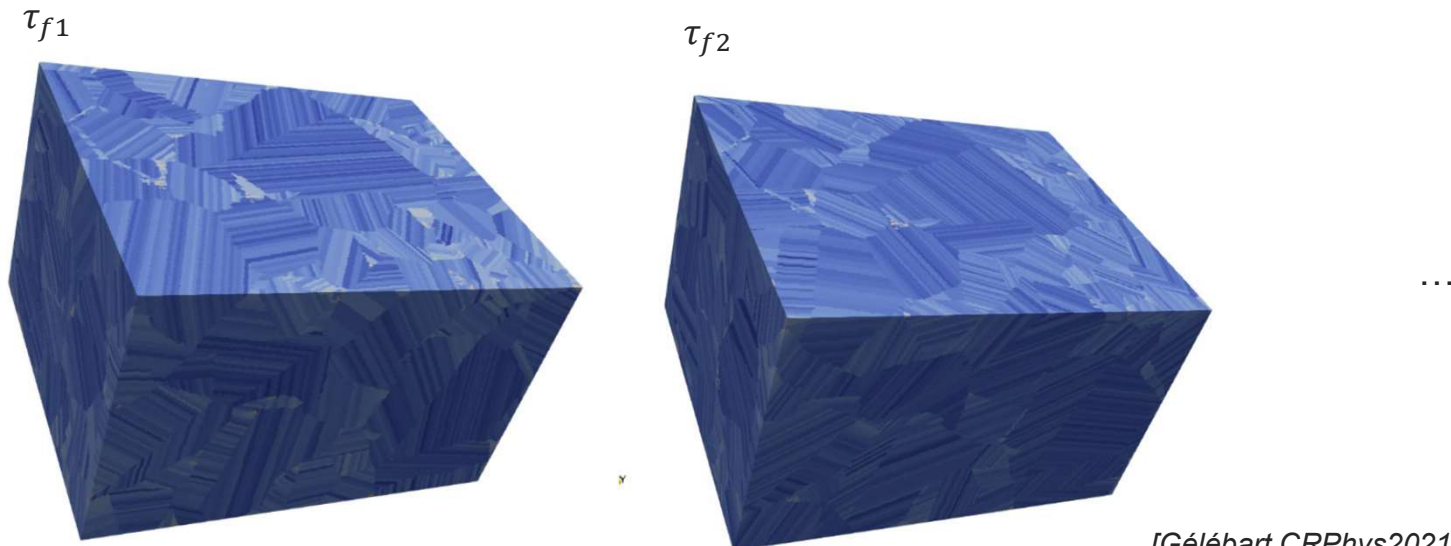


### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Polycristaux « denses » - quantités locales  $\Rightarrow$  **localisation de la plasticité** dans matériaux durcis

#### ➤ Proposition

- ✓ Loi de plasticité cristalline « simple » : **plasticité (quasi) parfaite** (pas d'écrouissage ni adoucissement)  
$$\tau_{0s} = \tau_0 + \tau_{fs} \quad s = 1..12 \text{ (CFC 12 systèmes)}$$
- ✓ Distribution **aléatoire** (Weibull à 2 paramètres) des  $\tau_{fs}$  (homogènes par couche)



## PARTIE 2 – Applications

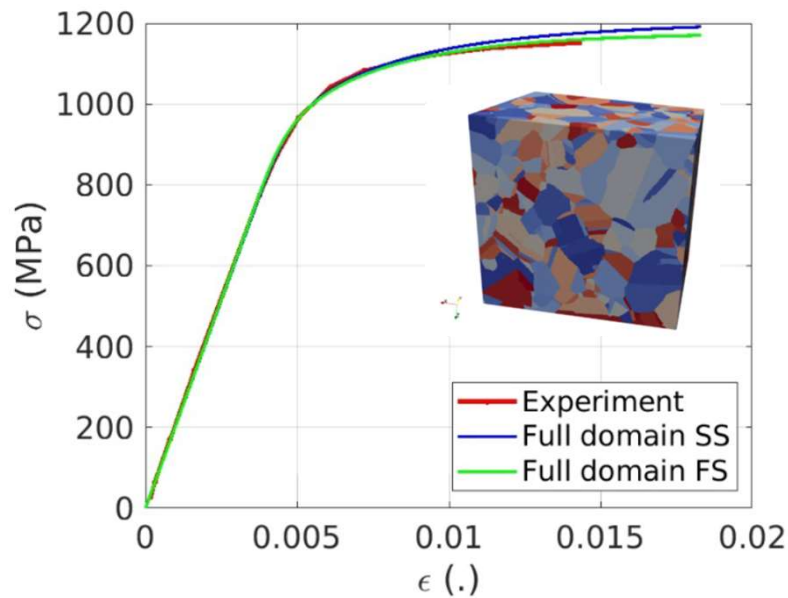


### Plasticité cristalline & polycristaux

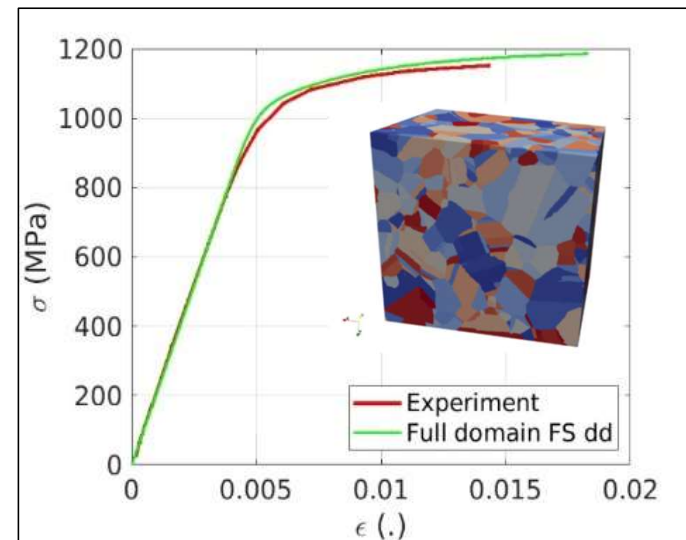
❑ Polycristaux « denses » - quantités locales  $\Rightarrow$  **localisation de la plasticité** dans matériaux durcis

➤ Comportement macroscopique : optimisation 2 paramètres ( $\tau_0$  & paramètre de Weibull)

Exposant de Weibull fixé ( $m = 6$ ) pour avoir Hall-Petch ( $\sigma_y = A + \frac{B}{\sqrt{D_{\text{grain}}}}$ )



Identification Macroscopique : OK



Simulation avec loi de plasticité cristalline  
en densité de dislocations

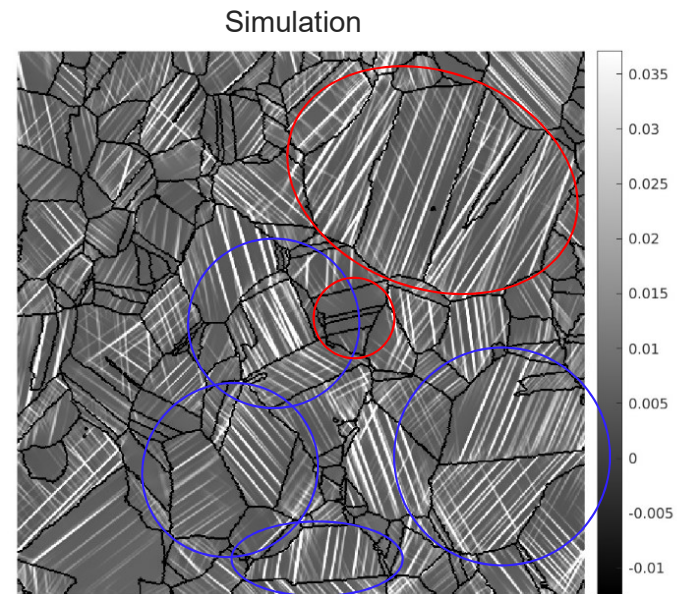
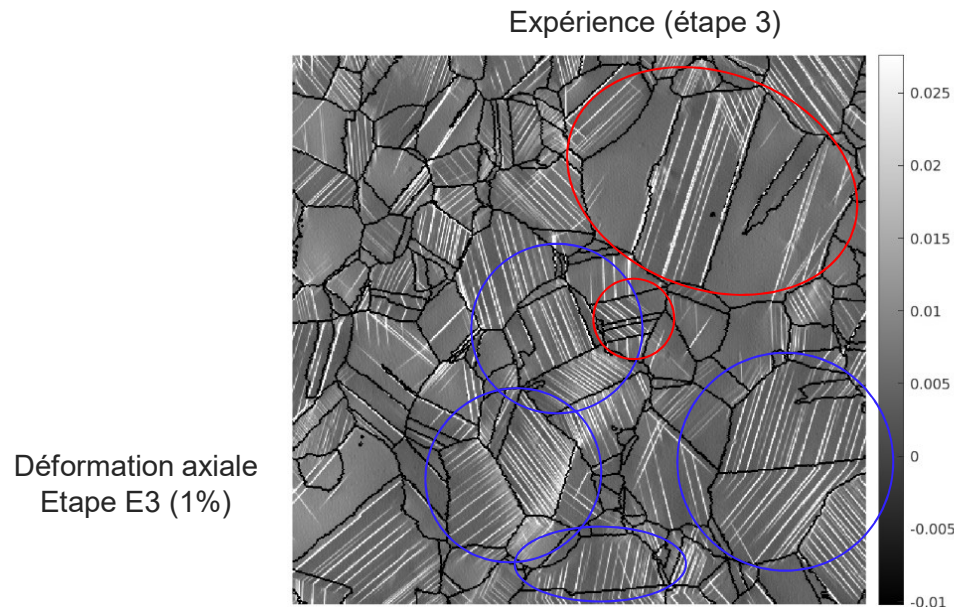
## PARTIE 2 – Applications



### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Polycristaux « denses » - quantités locales  $\Rightarrow$  **localisation de la plasticité** dans matériaux durcis

➤ Déformation en surface



Modèle simple



Accord macro similaire  
Meilleur accord sur les champs

En cours : application fatigue  
Poster M. Musy-Haspel (ONERA)



## PARTIE 2 – Applications

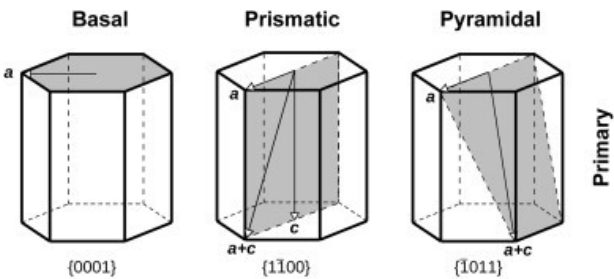
### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Polycristaux « poreux » - exemple de la neige [Poster L. Védérine, CEN Grenoble]

$$\sigma = C : (\varepsilon - \varepsilon^{vp})$$

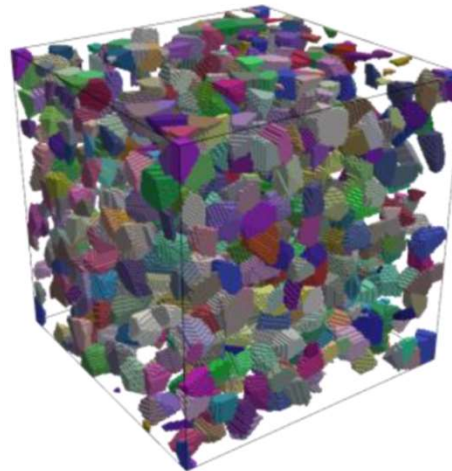
$$\varepsilon^{vp} = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}_s \mathbf{m}_s \otimes^{sym} \mathbf{n}$$

$$\dot{\gamma}_s = \text{sign}(\tau_s) \dot{\gamma}_0 \left( \frac{|\tau_s|}{\tau_0} \right)^n \text{ (Norton)}$$

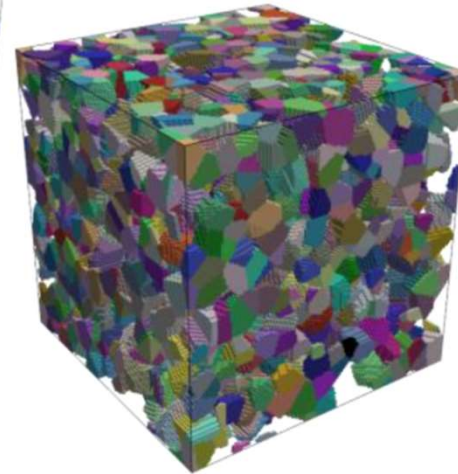


| Family                 | $n^{(k)}$ | $\tau_0^{(k)}$ (MPa) |
|------------------------|-----------|----------------------|
| Basal [0001]<1120>     | 2         | 35                   |
| Prismatic [0110]<2110> | 2,8       | 166                  |
| Pyramidal [1122]<1123> | 4         | 98                   |

$\dot{\gamma}_0 = 1 \text{ s}^{-1}$



$f_{\text{solide}} = 25\%$



$f_{\text{solide}} = 50\%$



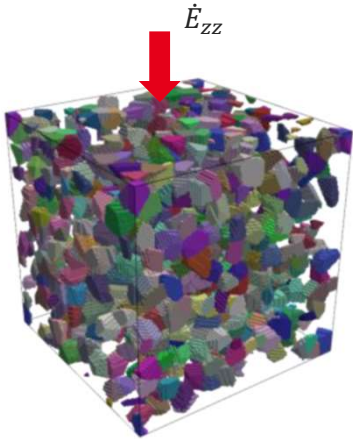
$f_{\text{solide}} = 100\%$

## PARTIE 2 – Applications

### Plasticité cristalline & polycristaux

#### ❑ Polycristaux « poreux » - exemple de la neige

Compression uniaxiale

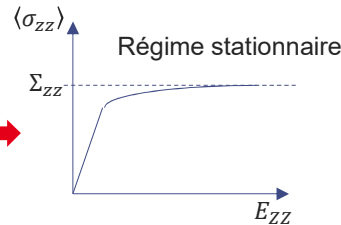


$$\Sigma_{xx} = \Sigma_{yy} = \Sigma_{xy} = \Sigma_{xz} = \Sigma_{yz} = 0$$

CL périodiques (code FFT [AMITEX](#))

| Family                                              | $n^{(k)}$ | $\tau_0^{(k)}$ (MPa) |
|-----------------------------------------------------|-----------|----------------------|
| Basal [0001]<11 $\bar{2}$ 0>                        | 2         | 35                   |
| Prismatic [01 $\bar{1}$ 0]<2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0> | 2,8       | 166                  |
| Pyramidal [11 $\bar{2}$ 2]<11 $\bar{2}$ $\bar{3}$ > | 4         | 98                   |

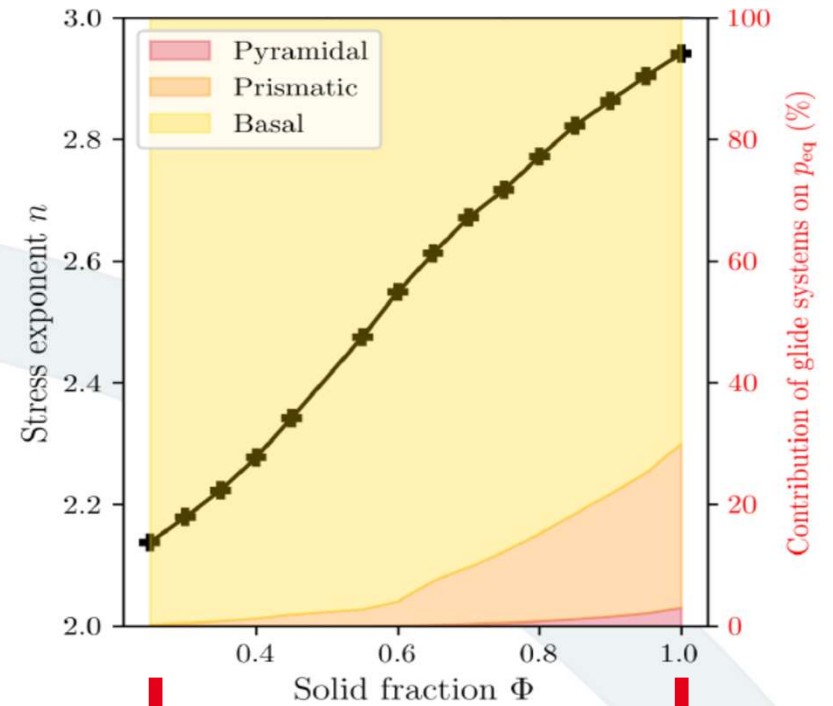
[Poster L. Védérine, CEN Grenoble]



Modèle macro

$$\dot{E}_{zz} = \left( \frac{\Sigma_{zz}}{\Sigma_0} \right)^n$$

#### Transition de l'exposant de Norton macro



Bcp de pores  
**Peu d'incompatibilité interG**  
**~1 seul syst actif**

Matériau dense  
**Fortes incompatibilités interG**  
**Plusieurs syst actifs**

# Plan

## 1. « Rappels théoriques »

Comportement apparent et conditions aux limites

Du comportement apparent au comportement effectif

## 2. Applications

Cas élasticité linéaire : composite SiC/SiC (« cas d'école » + discussions pour élargir)

Cas non-linéaire : Plasticité cristalline dans les polycristaux (résultats et questionnements)

## 3. Introduction aux méthodes FFT

Focus FFT différences finies

+ remarques



## PARTIE 3 – Méthodes FFT



### ➤ Tendances en homogénéisation numérique

Augmenter la taille des cellules  
Augmenter la résolution spatiale  
Comportements complexes

### ➤ Codes EF « standards »

Limite en « taille » et « temps » de calcul

### ➤ Codes FFT (*Moulinec-Suquet 1998*)

Entrée = image 3D (pas de maillage)

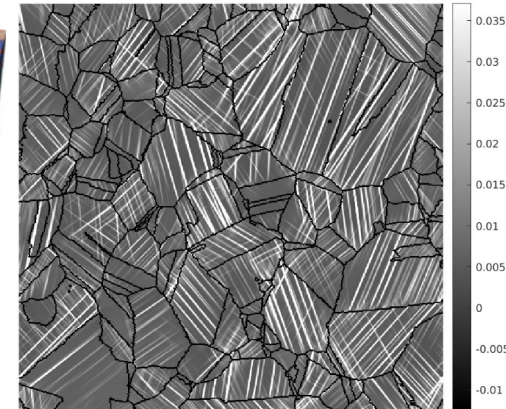
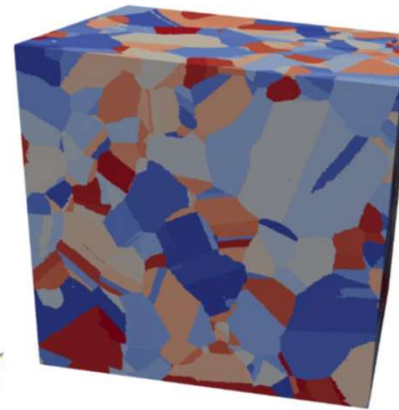
Efficacité > code EF « standard »

Adapté pour :

Implémentation parallèle -> repousse les limites des simus

Extensions à d'autres équations (mécanique non-locale, couplage multi-physiques...)

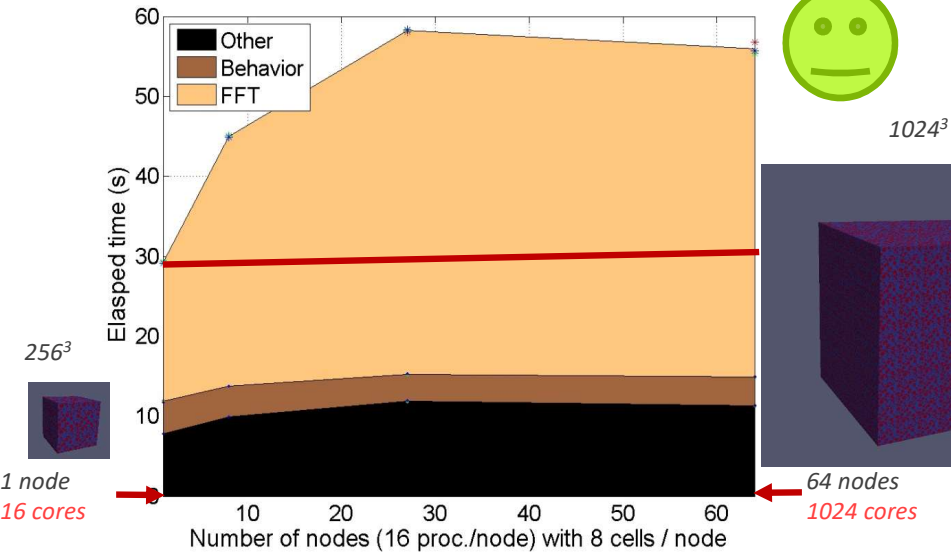
Ex. pour l'étude de la localisation plastique : 3D, >2000 grains  
plasticité cristalline,  
Haute-Résolution



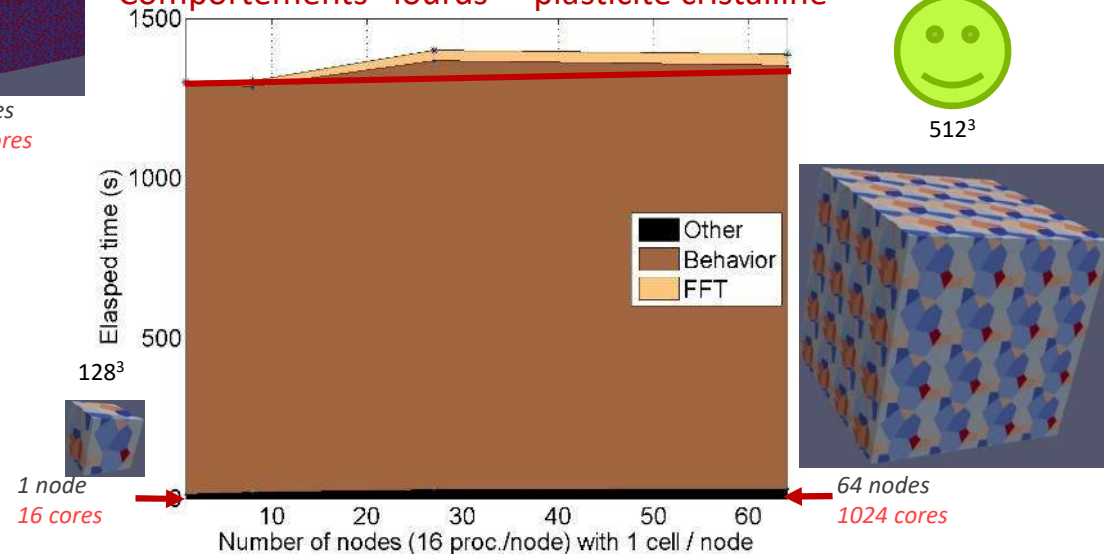
## PARTIE 3 – Méthodes FFT

### □ Parallélisme – scalabilité ‘faible’

Comportements “légers” - élasticité



Comportements “lourds” - plasticité cristalline

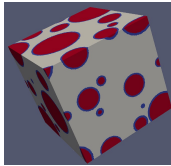


## PARTIE 3 – Méthodes FFT



$$T = G \cdot x + \tilde{T}$$

Problème à résoudre (thermique)



$$\begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{q}) = 0 \\ \mathbf{q} = -\mathbf{k} : \nabla T \\ \nabla T = \mathbf{G} + \nabla \tilde{T} \\ + \text{périodicité} (\Rightarrow \langle \nabla \tilde{T} \rangle = 0) \end{cases}$$

Problème auxiliaire

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{q}) = 0 \\ \mathbf{q} = -\mathbf{k}_0 : \nabla \tilde{T} + \boldsymbol{\tau} \\ + \text{périodicité} \end{cases}$$

Ré-écriture comportement:  $\mathbf{q} = -\mathbf{k}_0 : \nabla \tilde{T} - \underbrace{\mathbf{k} : \nabla T + \mathbf{k}_0 : \nabla \tilde{T}}_{\boldsymbol{\tau}}$



Même problème (ré-écrit)

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{q}) = 0 \\ \mathbf{q} = -\mathbf{k}_0 : \nabla \tilde{T} + \boldsymbol{\tau} \\ \boldsymbol{\tau} = -\mathbf{k} : \nabla T + \mathbf{k}_0 : \nabla \tilde{T} \\ \nabla T = \mathbf{G} + \nabla \tilde{T} \\ + \text{périodicité} \end{cases}$$

Solution ← Opérateur de Green milieu homogène ( $\Gamma_0$ )

$$\nabla \tilde{T} = \Gamma_0 * \boldsymbol{\tau} \quad (\text{Espace réel})$$

$$\begin{cases} \widehat{\nabla \tilde{T}} = \hat{\Gamma}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}} \\ \widehat{\nabla \tilde{T}}(0) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (\text{Espace Fourier})$$

$$\boldsymbol{\tau} = -\mathbf{k} : (\mathbf{G} + \nabla \tilde{T}) + \mathbf{k}_0 : \nabla \tilde{T}$$

Point fixe sur l'équation de Lippmann-Schwinger

$$\nabla \tilde{T}^{n+1} = \Gamma_0 * \boldsymbol{\tau}(\nabla \tilde{T}^n)$$

## PARTIE 3 – Méthodes FFT

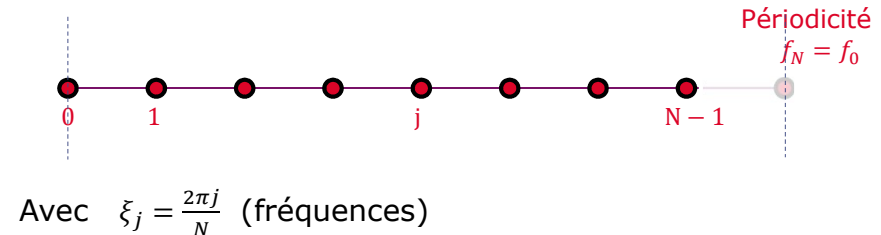


### □ Construction de l'opérateur de Green discret (base Différences Finies)

#### ➤ DFT (**Discrete** Fourier Transform)

$$\hat{f}_k = \sum_{j=0}^{N-1} f_j \exp(-i.k\xi_j) \quad \text{DFT}$$

$$f_j = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{f}_k \exp(i.j\xi_k) \quad \text{DFT}^{-1}$$



$f$  défini sur une grille  $\{0, \dots, N-1\} \Rightarrow \hat{f}$  défini sur une grille  $\{0, \dots, N-1\}$

Propriétés « essentielles » ici :

➤ N-Périodicité  $f_{j+N} = f_j$

➤ Translation  $y_j = f_{j+1} \Rightarrow \hat{y}_k = \hat{f}_k \exp(+i \frac{2\pi k}{N})$

➤ Moyenne  $\hat{f}_0 = N\bar{f}$

## PARTIE 3 – Méthodes FFT



### ➤ Construction de l'opérateur de Green discret (base Différences Finies)

#### ❑ OPERATEURS DE DIFFERENTIATION ET DFT (cas 1D)

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[ \frac{dT}{dx} \right]_j = \frac{1}{dx} (T_{j+1} - T_j) \\ \left[ \frac{dq}{dx} \right]_j = \frac{1}{dx} (q_j - q_{j-1}) \end{array} \right.$$

Rappel Propriété de Translation :  $y_j = f_{j+1} \quad \Rightarrow \quad \widehat{y}_k = \widehat{f}_k \exp\left(+i \frac{2\pi k}{N}\right)$

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[ \frac{dT}{dx} \right]_j = \frac{1}{dx} (T_{j+1} - T_j) \\ \left[ \frac{d\sigma}{dx} \right]_j = \frac{1}{dx} (q_j - q_{j-1}) \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \left[ \frac{dT}{dx} \right]_k = \frac{1}{dx} (\exp(+i \frac{2\pi k}{N}) - 1) \widehat{T}_k = i \frac{2}{dx} \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right) \exp(i \frac{\pi k}{N}) \widehat{T}_k = i \bar{\xi}_k \widehat{T}_k \\ \left[ \frac{dq}{dx} \right]_k = \frac{1}{dx} (1 - \exp(-i \frac{2\pi k}{N})) \widehat{q}_k = i \frac{2}{dx} \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right) \exp(-i \frac{\pi k}{N}) \widehat{q}_k = i \bar{\xi}_k^* \widehat{q}_k \end{array} \right.$$

$$\left[ \frac{dT}{dx} \right]_j = \frac{1}{dx} (T_{j+1} - T_j) = \left[ DFT^{-1} \left( i \bar{\xi} \cdot DFT(T) \right) \right]_j$$

$$\left[ \frac{dq}{dx} \right]_j = \frac{1}{dx} (q_j - q_{j-1}) = \left[ DFT^{-1} \left( i \bar{\xi}^* \cdot DFT(q) \right) \right]_j$$

- $\bar{\xi}(\xi)$  = fréquences **modifiées**
- Il est **équivalent** de calculer le champ de dérivée directement dans l'espace réel ou en passant par Fourier (DFT) : **Pas d'approximation**

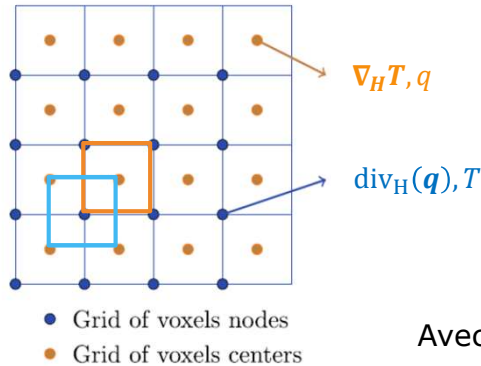


## PARTIE 3 – Méthodes FFT



### □ Construction de l'opérateur de Green discret (base Différences Finies)

#### ➤ OPERATEURS DE DIFFERENTIATION ET DFT - **CAS 3D (schéma DF « hexaèdre »)**



2 grilles 3D décalées  $\{0, \dots, N_1 - 1\} \times \{0, \dots, N_2 - 1\} \times \{0, \dots, N_3 - 1\}$

$\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$  indices dans les grilles 3D

$$\begin{aligned} (\widehat{\nabla_H \tilde{T}})[\mathbf{k}] &= i \hat{T} \xi_H[\mathbf{k}] & (\widehat{\nabla_H \tilde{T}} &= i \hat{T} \xi_H) \\ (\widehat{\text{div}_H(\mathbf{q})})[\mathbf{k}] &= i \hat{q}[\mathbf{k}] \cdot \xi_H^*[\mathbf{k}] & (\widehat{\text{div}_H \mathbf{q}} &= i \hat{q} \cdot \xi_H^*) \end{aligned}$$

Avec  $\xi_H[\mathbf{k}]$  les fréquences modifiées, évaluées par :

$$\xi_H[\mathbf{k}] = \xi_H(\xi[\mathbf{k}]) = \begin{pmatrix} \frac{2}{h_1} \sin\left(\frac{\xi_1[\mathbf{k}]}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_2[\mathbf{k}]}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_3[\mathbf{k}]}{2}\right) \\ \frac{2}{h_2} \cos\left(\frac{\xi_1[\mathbf{k}]}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_2[\mathbf{k}]}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_3[\mathbf{k}]}{2}\right) \\ \frac{2}{h_3} \cos\left(\frac{\xi_1[\mathbf{k}]}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_2[\mathbf{k}]}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_3[\mathbf{k}]}{2}\right) \end{pmatrix} \exp(i \frac{\xi_1[\mathbf{k}] + \xi_2[\mathbf{k}] + \xi_3[\mathbf{k}]}{2})$$

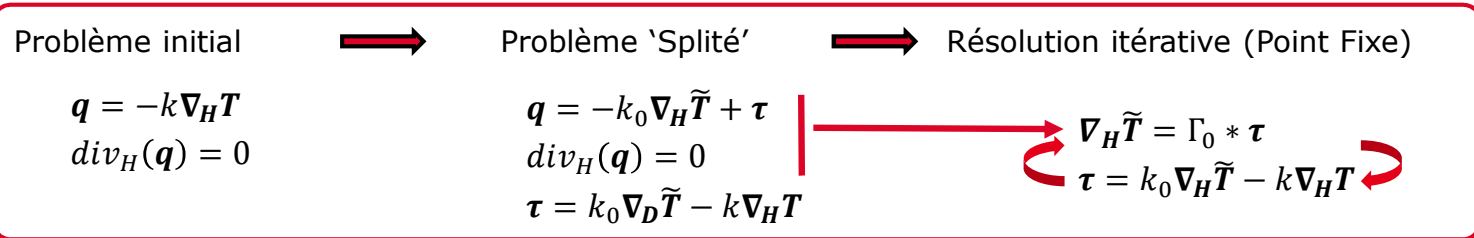
avec les fréquences de Fourier  $\xi[\mathbf{k}] = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\frac{2\pi k_1}{N_1}, \frac{2\pi k_2}{N_2}, \frac{2\pi k_3}{N_3})$   
 $h_1, h_2, h_3$  dimensions des voxels

- **Schéma de Différences Finies ↔ fréquences modifiées  $\xi_H(\xi)$**
- Dérivation **équivalente** dans l'espace réel ou avec DFT/DFT<sup>-1</sup>: **Pas d'approximation**

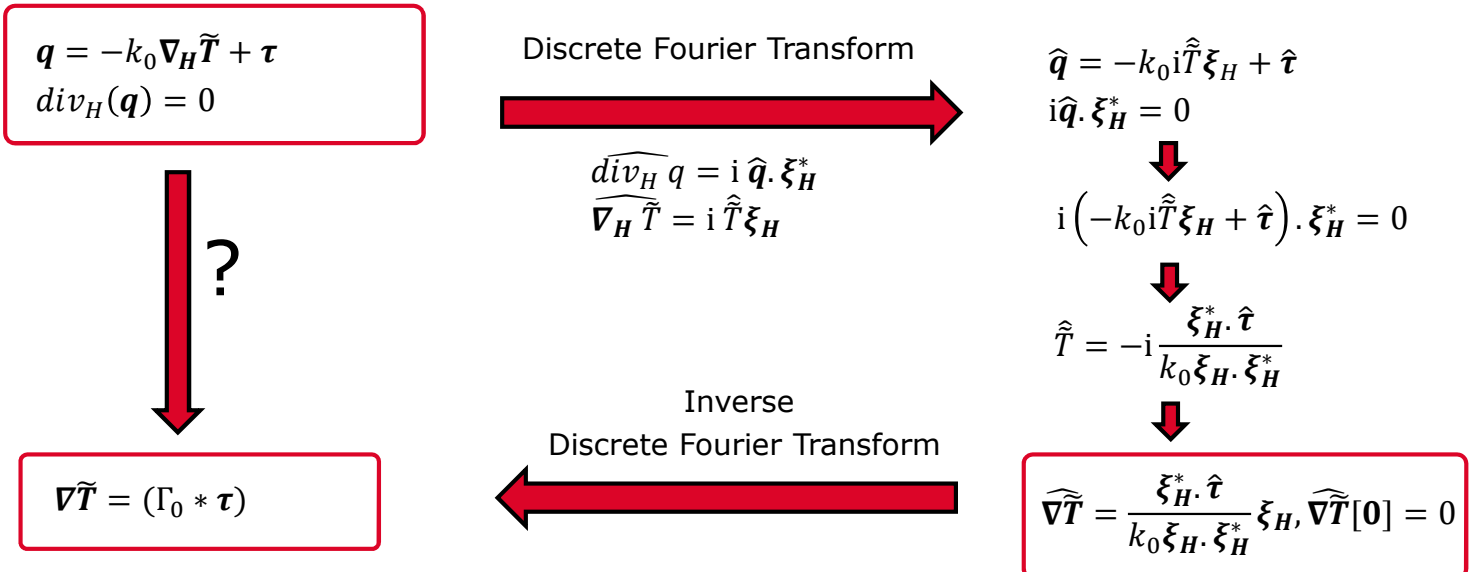
## PARTIE 3 – Méthodes FFT

### □ Construction de l'opérateur de Green discret (base Différences Finies)

#### ➤ RAPPEL ALGORITHME FFT (pb Thermique, CL périodiques : $T = G.x + \tilde{T}$ )



#### ➤ CONSTRUCTION OPERATEUR DE GREEN $\Gamma_0$ ?



## PARTIE 3 – Méthodes FFT



### ❑ CONSTRUIRE SON 1<sup>er</sup> CODE FFT (ici thermique)

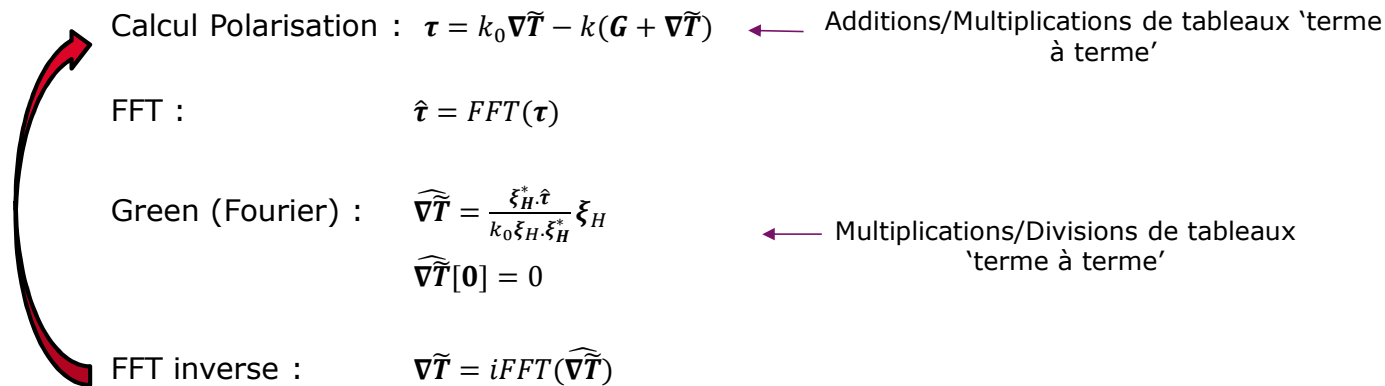
#### ➤ Définition du matériaux, des champs, du chargement



|                                                    |                                              |                                                            |
|----------------------------------------------------|----------------------------------------------|------------------------------------------------------------|
| Construire la grille de propriétés hétérogènes :   | $k$                                          | tableau $(N_1, N_2, N_3)$                                  |
| Construire la grille de fréquences « modifiées » : | $\xi_H$                                      | tableau $(N_1, N_2, N_3, 3)$ (voir définition slide prec,) |
| Déclaration des champs :                           | $\nabla \tilde{T}$ et $\tau$                 | tableaux $(N_1, N_2, N_3, 3)$ , réels                      |
|                                                    | $\widehat{\nabla \tilde{T}}$ et $\hat{\tau}$ | tableaux $(N_1, N_2, N_3, 3)$ , complexes                  |
| Milieu de référence :                              | $k_0 = \frac{\min(k) + \max(k)}{2}$          |                                                            |
| Chargement (grad. Moy. De Température):            | $G (= \langle \nabla T \rangle)$             |                                                            |

#### Initialisation : $\nabla \tilde{T} = 0$

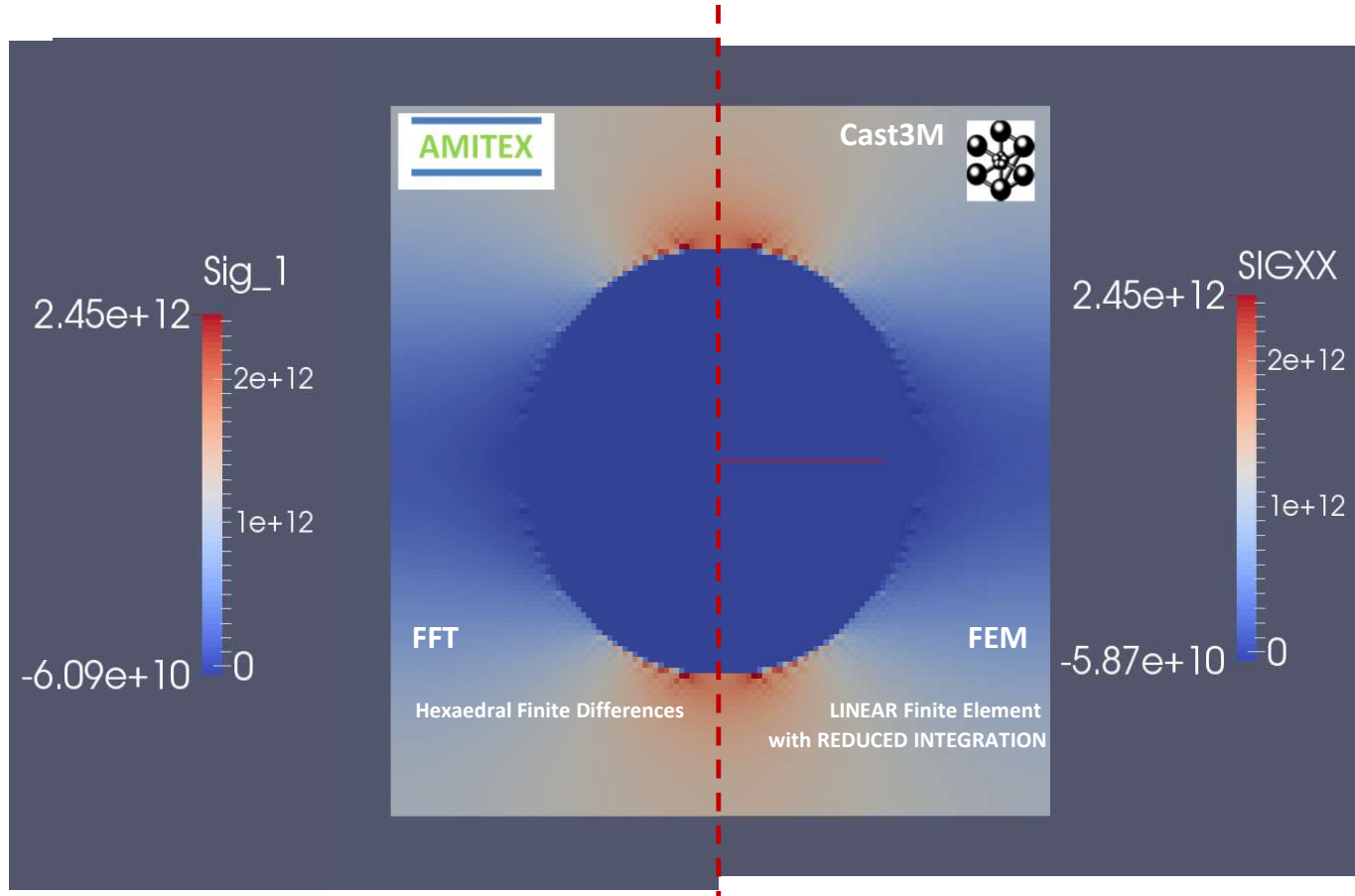
##### ➤ Boucle



## PARTIE 3 – Méthodes FFT



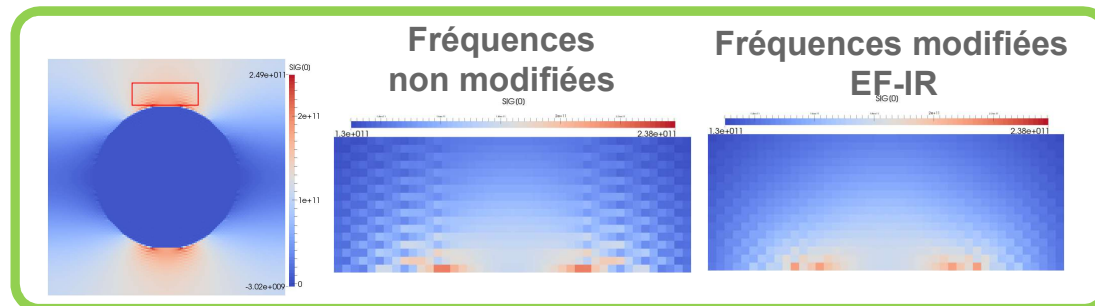
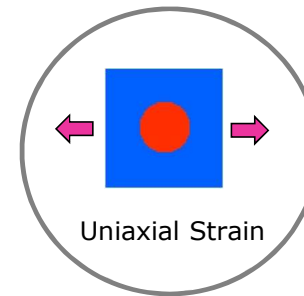
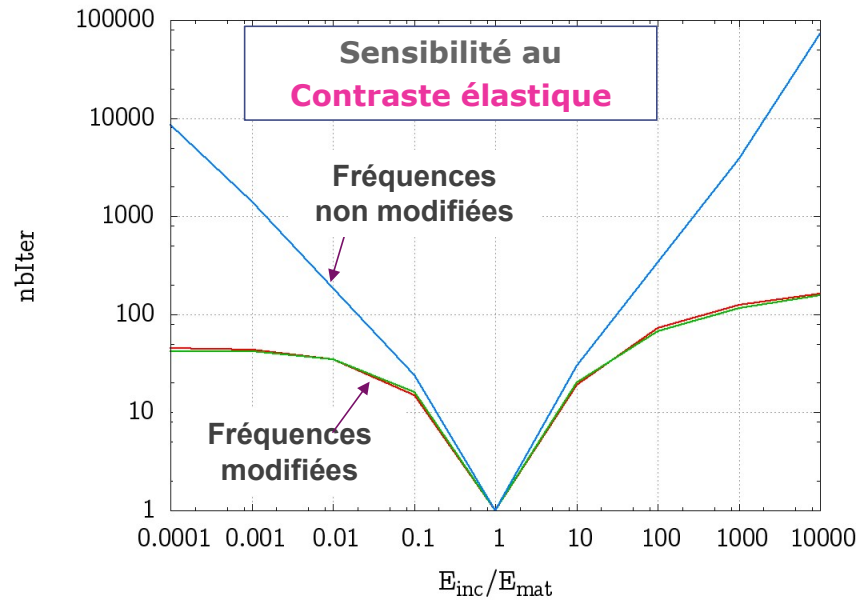
- ❑ Equivalence FFT - Différences Finies « hexaèdre »  $\Leftrightarrow$  FEM - Hexaèdres linéaires à intégration réduite  
*[Schneider, IJNME2017]*



## PARTIE 3 – Méthodes FFT



❑ Fréquences **modifiées** (FD « Hexaèdre »  $\Leftrightarrow$  EF-IR) vs **non modifiées** (version originale [Moulinec, CMAME1998])



Voir aussi [Willot CRAS 2015]

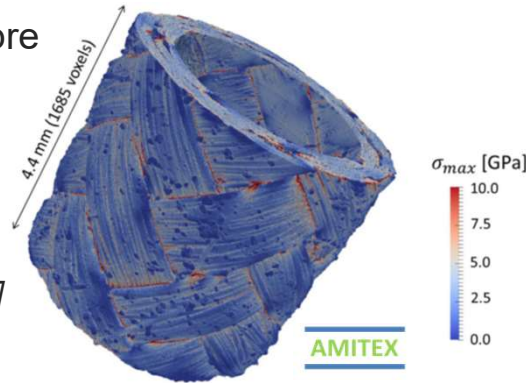
## PARTIE 3 – Méthodes FFT



### □ Conditions aux limites non-périodiques ?

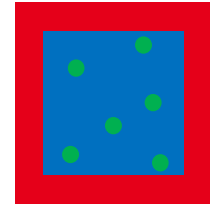
#### ➤ Avec « buffer » pour s'affranchir des CL périodiques

- Neumann : ex bord libre



[Chen&al, IJSS2019]  
Collab Navier (M.  
Bornert, C. Chateau)

- Dirichlet :  
plus complexe...  
plusieurs stratégies...



[Gélébart, CRMéca 2015]

...

[Zecevic, Lebenshon, IJSS2025]

#### ➤ Sans « buffer » : utilisation des Transformées Trigonométriques (Sinus et Cosinus)



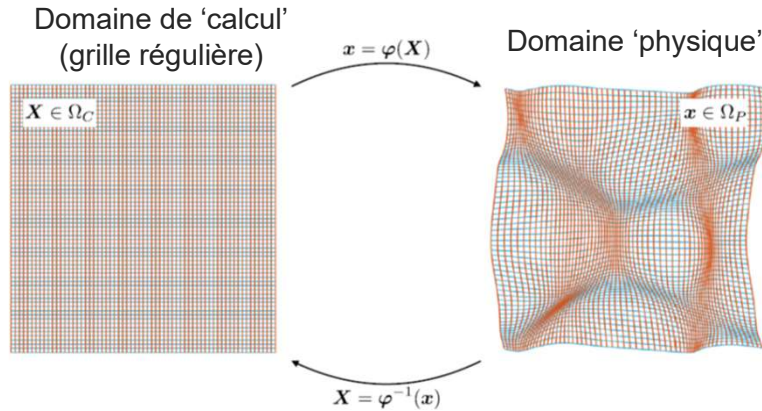
Choix Dirichlet, Neumann,  
périodique sur chacune des 6 faces

Grimm-Strele & Kabel, **2021**, IJNME – Mécanique, Orthogonal mixed BC  
Risthaus & Schneider, **2024**, IJNME – Conductivité, Full Dirichlet, Full Periodicité, Full Neumann  
Morin & Paux, **2024**, CMAME – Conductivité, Full Dirichlet  
Gélébart, **2024**, EJM/A – Conductivité, toute combinaison (Neumann, Dirichlet, périodique)  
Paux, Morin, Gélébart, **2024**, IJNME - Conductivité, toute combinaison (Neumann, Dirichlet, périodique)  
Risthaus, Schneider, **2024**, Comput. Mech., Mécanique, Dirichlet  
Paux, Morin, Gélébart, Sanoko, Magid, **2025**, CMAME, Mécanique, toute combinaison (Neumann, Dirichlet)

## PARTIE 3 – Méthodes FFT



### ❑ Maillage non-régulier ? [Bellis & Ferrier, CMAME2024], [Zecevic et.al, Mech.Mat2022]

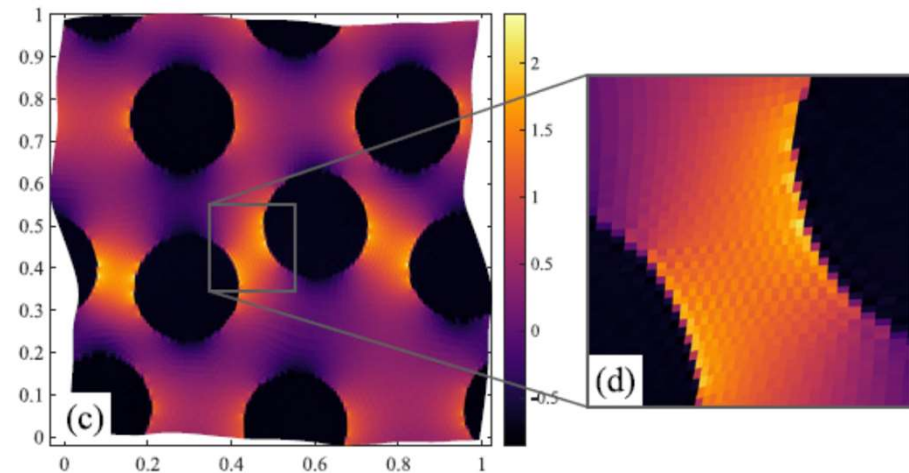
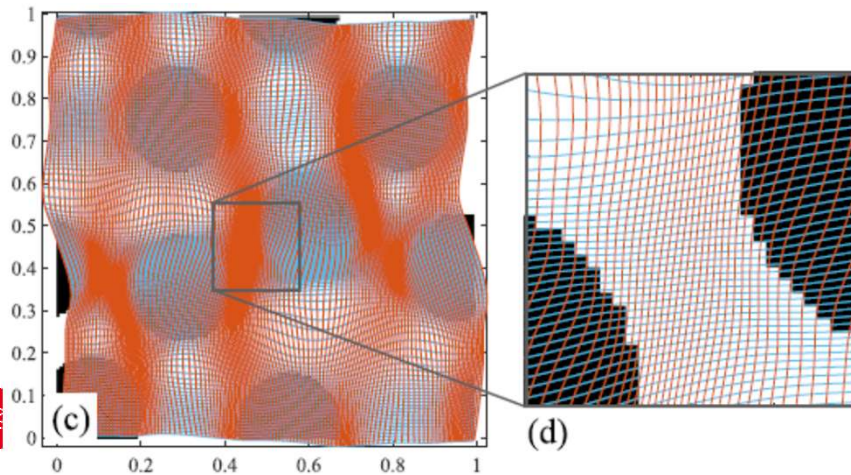


Avantage :

réduction du nombre de voxels

Inconvénient :

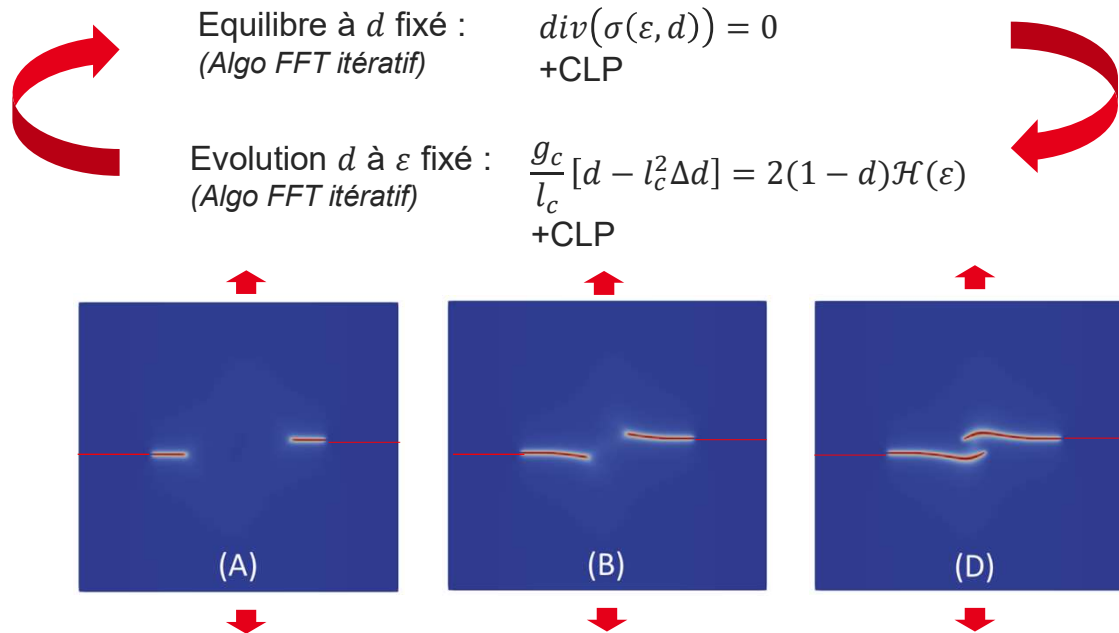
dégradation convergence avec distorsion des éléments





### ❑ Extensions à la mécanique « non-locale » (dans le VE) ?

- Modèle de champ de phase d'endommagement  $d$  (schéma alterné) [Chen CMAME1999, Ernesti CMAME2020]



- Modèles de plasticité cristalline à gradient

[Gurtin, JMPS2002]  $\Rightarrow$  implémentation FFT : [Lebensohn, JMPS2016][Marano, JMPS2019]



## PARTIE 3 – Méthodes FFT



### ❑ Extensions à la mécanique « non-locale » (modèle homogénéisé) ?

#### ➤ Nécessite d'imposer un **gradient de déformation**

Classiquement : déformation moyenne + fluctuation périodique

$$\varepsilon = \langle \varepsilon \rangle + \tilde{\varepsilon}$$

Ajout du gradient de déformation :

$$\varepsilon = \langle \varepsilon \rangle + G \cdot x + \tilde{\varepsilon}$$
$$\text{div}(c : \varepsilon) = 0$$

Pas de modification de l'algorithme!

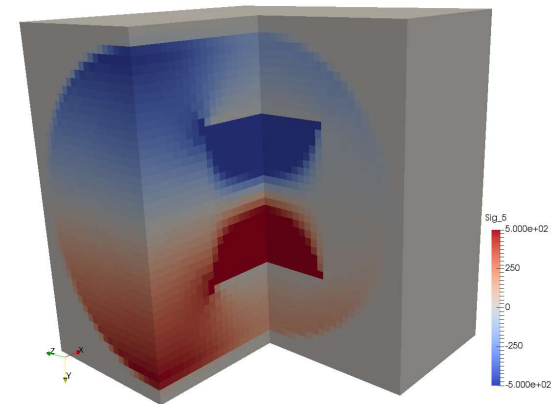
$$\text{div}(c_0 : \tilde{\varepsilon}) + \text{div}(\tau) = 0$$
$$\tau = c : \varepsilon - c_0 : \tilde{\varepsilon}$$

$$\tilde{\varepsilon} = -\Gamma_0 * \tau$$
$$\tau = c : \varepsilon - c_0 : \tilde{\varepsilon}$$

*Flexion de poutre hétérogène (contrainte axiale)*

#### ➤ Applications

- Homogénéisation plaques et poutres [Nguyen IJSS2008] [Gélébart, JTCAM2022]
- Homogénéisation d'ordre supérieur [Dietrich, ENUMATH2017]

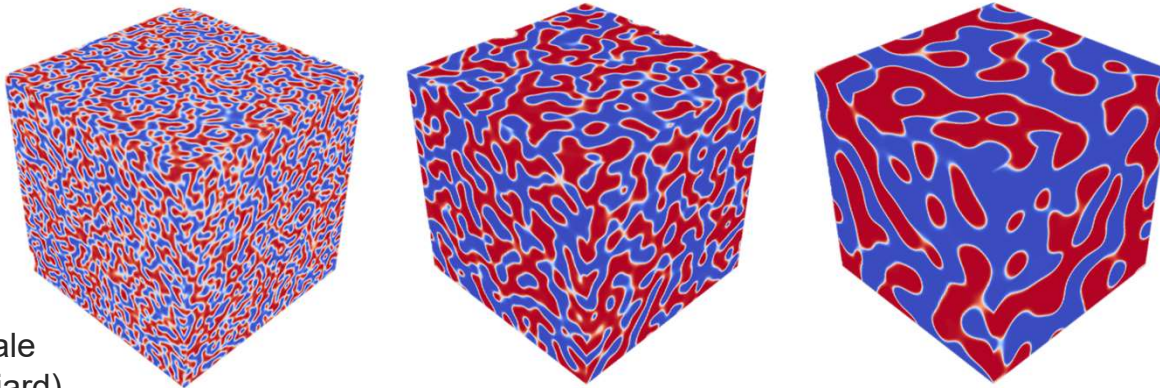


## PARTIE 3 – Méthodes FFT



### ❑ Extensions multi-physiques ?

- Nombreuses applications aux méthodes de champ de phase (métallurgie)



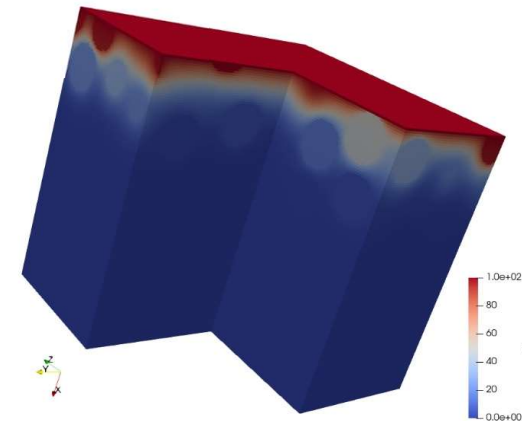
Décomposition spinodale  
(équation de Cahn-Hilliard)

256<sup>3</sup> – 10 machines – 20min   
Collab. J. Boisse LEMTA (U.Lorraine)

- Thermique transitoire (+ CL Dirichlet + DF Tétra [Gélébart CR Méca 2025])

- Magnéto-électro-élasticité [Brenner et al., Smart Material Structures 2010]

3 physiques couplées !!!





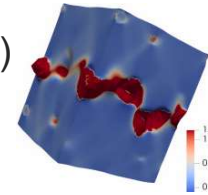
### ❑ CAS DIFFICILES

➤ Quelques cas qui ne convergent pas (ou mal) (LG)

- Grande transformations / polycristal élastique TRES anisotrope (instabilité?) : **NO CONV.**

- Grandes transformations / matrice élastique quasi-incompressible + pores : **NO CONV.**

- Grandes transformations / matrice plastique + pores (convergence **délicate**)



*Hure, JMPS2019]*

- HPP, neige (forte porosité, bipercolée) (convergence **délicate**) ⇒ ajout petite raideur ( $10^{-8}$  raideur du squelette)

*[Vedrine, GRL2024]*

- Doubles contrastes élevés (convergence **délicate**) ⇒ voir algo récent de *[Sab et al., CMAME2024]*

➤ Problème non traité (able?) : prise en compte de ‘contacts’ à l’intérieur de VE poreux

# Plan

## 1. « Rappels théoriques »

Comportement apparent et conditions aux limites

Du comportement apparent au comportement effectif

## 2. Applications

Cas élasticité linéaire : composite SiC/SiC (« cas d'école » + discussions pour élargir)

Cas non-linéaire : Plasticité cristalline dans les polycristaux (résultats et questions)

## 3. Introduction aux méthodes FFT

Focus FFT différences finies

+ remarques

La suite après le SKI!  
En forme pour écouter Sébastien et Martin sur  
homogénéisation analytique en linéaire et non linéaire!!



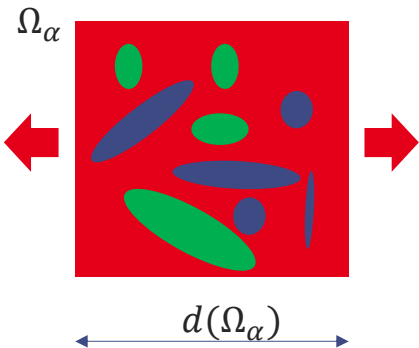
---

# ANNEXES

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Définition « pragmatique » :  $\langle \sigma \rangle = \mathbb{C}_{CL,\alpha}^{app} \langle \varepsilon \rangle$

$\text{div}(\sigma) = 0$   
 $\sigma = \mathbb{C} : \varepsilon$   
 $\varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^{sym}$   
 + *chargement*

$$\begin{bmatrix} \langle \sigma \rangle_{11} \\ \langle \sigma \rangle_{22} \\ \langle \sigma \rangle_{33} \\ \sqrt{2} \langle \sigma \rangle_{12} \\ \sqrt{2} \langle \sigma \rangle_{13} \\ \sqrt{2} \langle \sigma \rangle_{23} \end{bmatrix} = \mathbb{C}_{CL,\alpha}^{app} \begin{bmatrix} \langle \varepsilon \rangle_{11} \\ \langle \varepsilon \rangle_{22} \\ \langle \varepsilon \rangle_{33} \\ \sqrt{2} \langle \varepsilon \rangle_{12} \\ \sqrt{2} \langle \varepsilon \rangle_{13} \\ \sqrt{2} \langle \varepsilon \rangle_{23} \end{bmatrix}$$

Notation « Vecteur » des tenseurs symétriques  $\sigma : \varepsilon = [\sigma] \cdot [\varepsilon]$



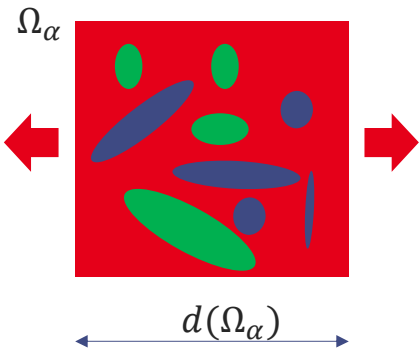
Voigt ou  $\sqrt{2}$   
 Ordre des cisaillements

Sources intarissables d'erreur et de temps perdu !

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Autres « types » de CL ?

NMBC1 - propriétés [CFM2009, Gélébart, Bornert, Chateau]

$$(\sigma \cdot \mathbf{n})_T = (\langle \sigma \rangle \cdot \mathbf{n})_T$$

$$\exists X \in S / \mathbf{u}_N = (X \cdot \mathbf{x})_N$$

SUBC sur partie tangentielle  
~KUBC sur partie normale

$$\text{div}(\sigma) = 0$$

$$\sigma = \mathbb{C} : \varepsilon$$

$$\varepsilon = (\nabla \mathbf{u})^{\text{sym}}$$

+chargement

Propriété 1 :  $\sigma \cdot \mathbf{n} = \langle \sigma \rangle \cdot \mathbf{n} + \tilde{\mathbf{t}} \mathbf{n} \implies \int_{\partial V} \tilde{\mathbf{t}} \mathbf{n} \otimes^s \mathbf{x} dS = 0$

Démo:  $\langle \sigma \rangle = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\sigma \cdot \mathbf{n}) \otimes^s \mathbf{x} dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\langle \sigma \rangle \cdot \mathbf{n} + \tilde{\mathbf{t}} \mathbf{n}) \otimes^s \mathbf{x} dS = \langle \sigma \rangle + \frac{1}{V} \int_{\partial V} \tilde{\mathbf{t}} \mathbf{n} \otimes^s \mathbf{x} dS$

=0

↓  
Gauss (contrainte)

Propriété 2 :  $\mathbf{u} = X \cdot \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{u}}_T \implies \langle \varepsilon \rangle_{ii} = X_{ii}$  (composantes diagonales)  
si V parallélépipède rectangle

Démo:  $\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \mathbf{u} \otimes^s \mathbf{n} dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (X \cdot \mathbf{x}) \otimes^s \mathbf{n} + \tilde{\mathbf{u}}_T \otimes^s \mathbf{n} dS = X + \frac{1}{V} \int_{\partial V} \tilde{\mathbf{u}}_T \otimes^s \mathbf{n} dS$

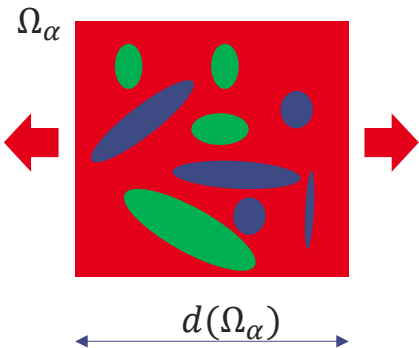
↓  
Gauss (déformation)

Pas de composantes diagonales  
si V parallélépipède rectangle

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



➤ Autres « types » de CL ?

NMBC1 – vérification de la condition de Hill [CFM2009, Gélébart, Bornert, Chateau]

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{\partial V} ((\sigma^1 - \langle \sigma^1 \rangle) \cdot \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{u}^2 - \langle \varepsilon^2 \rangle \cdot \mathbf{x}) dS &= 0 ? \\ &= \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\tilde{t}^1 \mathbf{n}) \cdot (X^2 \cdot \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{u}}_T^2 - \langle \varepsilon^2 \rangle \cdot \mathbf{x}) dS \\ &= \frac{1}{V} (X^2 - \langle \varepsilon^2 \rangle) : \boxed{\int_{\partial V} \tilde{t}^1 \mathbf{n} \otimes^s \mathbf{x} dS} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathbb{C} : \varepsilon \\ \varepsilon &= (\nabla \mathbf{u})^{sym} \\ &+ \text{chargement} \end{aligned}$$

OK  $\forall$  couple de solutions (1 et 2), respectant NMBC1

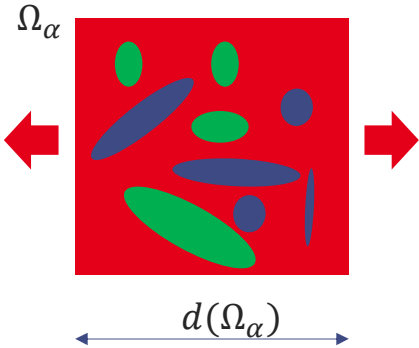
$$\begin{aligned} \langle \sigma^1 : \varepsilon^2 \rangle &= \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\sigma^1 \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{u}^2 dS = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\langle \sigma^1 \rangle \cdot \mathbf{n} + \tilde{t}^1 \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{u}_T^2 + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{X} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{n}) dS \\ &= \frac{1}{V} \int_{\partial V} (\langle \sigma^1 \rangle \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{u}^2 + \tilde{t}^1 (\mathbf{n} \cdot \mathbf{X} \cdot \mathbf{x}) dS \\ \text{Autre démo :} \quad &= \langle \sigma^1 \rangle : \langle \varepsilon^2 \rangle + \frac{1}{V} X : \int_{\partial V} \tilde{t} \mathbf{n} \otimes^s \mathbf{x} dS = \langle \sigma^1 \rangle : \langle \varepsilon^2 \rangle \quad \mathbf{80} \end{aligned}$$



## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )

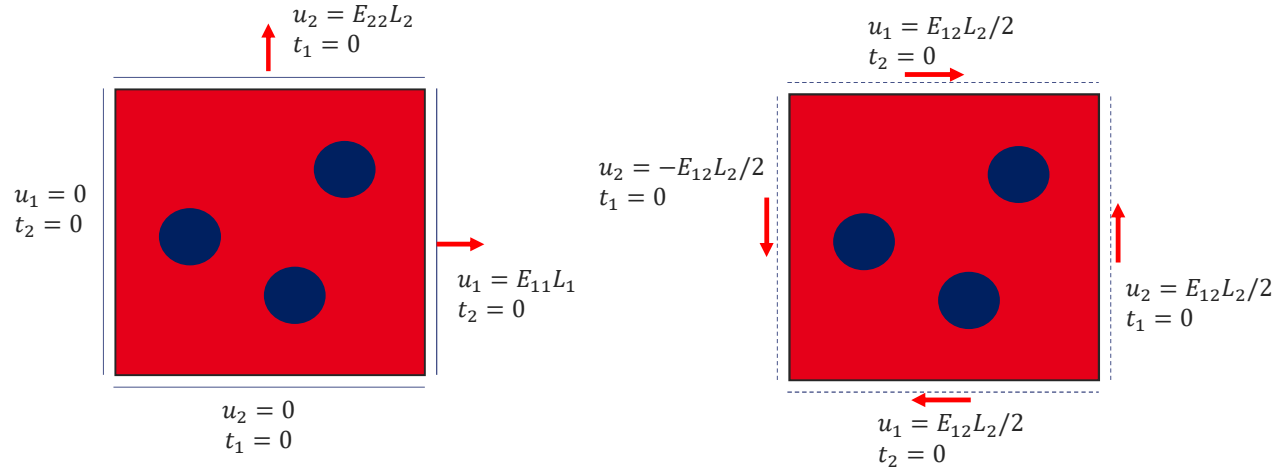


### ➤ Autres approches ?

Jusqu'à présent : SUBC, KUBC, PBC, NMBC1, NMBC2 :  
ensembles de chargements « stables » par combinaison linéaire  
(combinaison linéaire de chargements d'un « type » reste du même « type »)

Autre approche : 'PMUBC' - 6 chargements différents (non « liés ») [Pahr2008]

$\langle \sigma^I \rangle = C_{CL,\alpha}^{app} \langle \varepsilon^I \rangle \Rightarrow C_{CL,\alpha}^{app}$  **non**  
**symétrique** si la cellule n'a pas  
de symétrie orthotrope  
(condition de Hill non vérifiée)

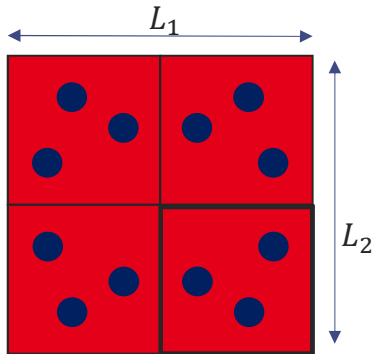


Rigoriste : Ne pas utiliser !  
Pragmatique : symétriser  $C_{CL,\alpha}^{app}$  si l'écart à la symétrie est faible

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



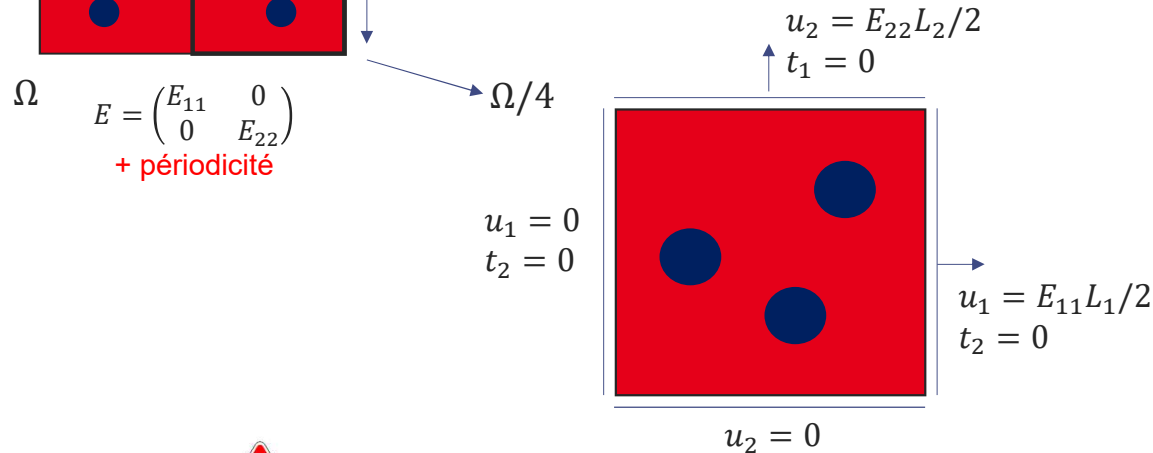
Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



### ➤ Conditions de Symétrie pour une cellule orthotrope soumise à PBC [HMM 2001]

Cas des chargements en déformation  $E_{11}, E_{22}, E_{33}$  (composantes diagonales)

Simulation sur 1/4 de cellule en 2D - 1/8 en 3D!



| $\Omega$                                                                                 |                                                                                          |
|------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$   | $\begin{pmatrix} \sigma_{11} & -\sigma_{12} \\ -\sigma_{12} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$ |
| $\begin{pmatrix} \sigma_{11} & -\sigma_{12} \\ -\sigma_{12} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$   |



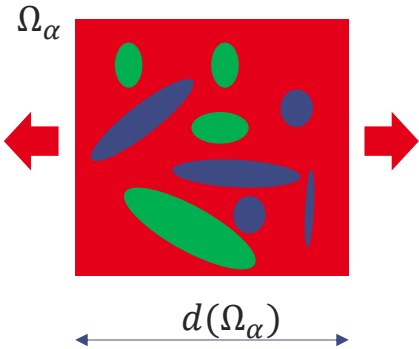
Post-traitement sur la cellule complète  $\Omega \Rightarrow \langle \sigma_{12} \rangle = 0$

[Pahr2008] post-traitement sur le 1/4 de cellule  $\Rightarrow \langle \sigma_{12} \rangle_{\Omega/4} \neq 0$

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



Comportement Apparent (moyen) = comportement d'un Volume Élémentaire  $\Omega_\alpha$  ( $d(\Omega_\alpha) < d_{VER}$ )



### ➤ RESUME

2 définitions possibles

$$\langle \sigma^I : \varepsilon^J \rangle = \langle \varepsilon^I \rangle : \mathcal{C}_{CL,\alpha}^{app*} : \langle \varepsilon^J \rangle \quad (\text{symétrique})$$
$$\langle \sigma^I \rangle = \mathcal{C}_{CL,\alpha}^{app} \langle \varepsilon^I \rangle$$

Equivalence ( $\mathcal{C}_{CL,\alpha}^{app*} = \mathcal{C}_{CL,\alpha}^{app}$ ) si Condition de Hill respectée

3 conditions classiques : SUBC; KUBC, PBC

2 propositions moins classiques : NMBC1, NMBC2 (alternative à PBC)

Difficultés pour les matériaux poreux (porosité débouchante)

SUBC, NMBC1, NMBC2 inutilisable

PBC pas idéal

Alternatives :

périodiser la microstructure...

'PMUBC' (conditions de symétrie) – mais Hill non respecté...

définir un contour autour des porosité (si possible...

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



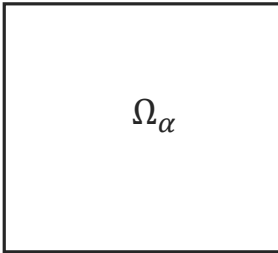
### Du comportement apparent à l'estimation du comportement effectif

□ Pour  $\Omega_\alpha$  donné, peut-on classer les CL ?

Considérons des chargements à déformation moyenne imposée :  $\langle \varepsilon \rangle = E^0$

Théorème minimisation de l'Energie Potentielle

$$\mathbf{u} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{u}^* \in \mathcal{U}_{CL}^{E_0}} \left( \frac{1}{2} \langle \varepsilon(\mathbf{u}^*) : \mathbf{C} : \varepsilon(\mathbf{u}^*) \rangle \right) \quad \longleftrightarrow \quad \frac{1}{2} E^0 : \mathbf{C}_{CL,0}^{app} : E^0 = \min_{\mathbf{u}^* \in \mathcal{U}_{CL}^{E_0}} \left( \frac{1}{2} \langle \varepsilon(\mathbf{u}^*) : \mathbf{C} : \varepsilon(\mathbf{u}^*) \rangle \right)$$



$$\mathcal{U}_{KUBC}^{E_0} \subset \mathcal{U}_{PBC}^{E_0} \subset \mathcal{U}_{SUBC}^{E_0}$$

$$\mathcal{U}_{KUBC}^{E_0} = \{ \mathbf{u}^* \text{ régulier} / \mathbf{u}^* = E^0 \cdot \mathbf{x} \text{ sur } \partial\Omega_\alpha \}$$

$$\mathcal{U}_{SUBC}^{E_0} = \{ \mathbf{u}^* \text{ régulier} / \langle \varepsilon(\mathbf{u}^*) \rangle = \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega_\alpha} \mathbf{u} \otimes^s \mathbf{n} dS = E^0 \}$$

$$\mathcal{U}_{PBC}^{E_0} = \{ \mathbf{u}^* \text{ régulier} / \mathbf{u}^* = E^0 \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^{*'} \text{ et } \mathbf{u}^{*'} \text{ périodique sur } \partial\Omega_\alpha \}$$

Plus l'espace  $\mathcal{U}_{CL}^{E_0}$  est « grand » plus le minimum sera « petit » !

$$\frac{1}{2} E^0 : \mathbf{C}_{CL,\alpha}^{app} : E^0 = \min_{\mathbf{u}^* \in \mathcal{U}_{CL}^{E_0}} \left( \frac{1}{2} \langle \varepsilon(\mathbf{u}^*) : \mathbf{C} : \varepsilon(\mathbf{u}^*) \rangle \right)$$



$$C_{SUBC,\alpha}^{app} \leq C_{PBC,\alpha}^{app} \leq C_{KUBC,\alpha}^{app}$$

- Valable pour NMBC1 et NMBC2
- Pas de classement entre PBC, NMBC1, NMBC2

## PARTIE 1 – « Rappels théoriques »



### Du comportement apparent à l'estimation du comportement effectif

#### ❑ Classement sur les comportement apparents « statistiques »

Rappel, pour un découpage  $\Omega = \bigcup_{\alpha=1}^N \Omega_{\alpha}$  :

$$C_{CL}^{app+} = \overline{C_{CL,\alpha}^{app}}$$

$$S_{CL}^{app-} = \overline{S_{CL,\alpha}^{app}}$$

$$C_{SUBC,\alpha}^{app} \leq C_{PBC,\alpha}^{app} \leq C_{KUBC,\alpha}^{app}$$

$$C_{SUBC}^{app+} \leq C_{PBC}^{app+} \leq C_{KUBC}^{ap}$$

$$C_{SUBC}^{app-} \leq C_{PBC}^{app-} \leq C_{KUBC}^{app-}$$

#### ❑ Encadrement du comportement effectif par les comportement apparents « statistiques » (Rappel)

$$\langle C^{-1} \rangle^{-1} = C^{Reuss} \leq \dots \leq C_{SUBCfin}^{app-} \leq C_{SUBCgros}^{app-} \leq C^{eff} \leq C_{KUBCgros}^{app+} \leq C_{KUBCfin}^{app} \leq \dots \leq C^{Voigt} = \langle C \rangle$$

$\xleftarrow{d \searrow}$ 
 $\xrightarrow{d \searrow}$

REUSS sur comportement  
apparents SUBC

VOIGT sur comportements  
apparents KUBC

## PARTIE 2 – Applications



### Caractérisation expérimentale (cas général)

- Imagerie 2D
    - Microscopie Optique (MO)
    - Microscopie Electronique à Balayage (MEB)
- ➔ Information **incomplète** (sauf si microstructure 2D)

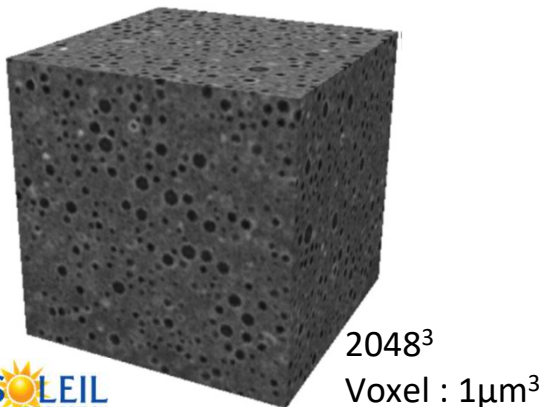
- Imagerie 3D

Méthode **destructive** : MEB (ou MO) + **série de polissage**

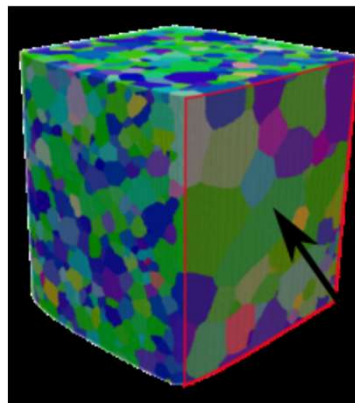
- manuel : [P. Erieau, Thèse 2003]... [Liang Acta Mat. 2021]
- automatique : MEB-FIB (Focus Ion Beam) – zone réduite  
MEB-Laser (*TriBeam UCLA Santa Barbara*)

Méthode **non-destructive** : tomographie X

Mousse syntactique [Charière, IJSS 2020]



Polycrystal Ti [Mesbah, Thèse 2025]



DCT

↓  
Image 3D  
+orientations

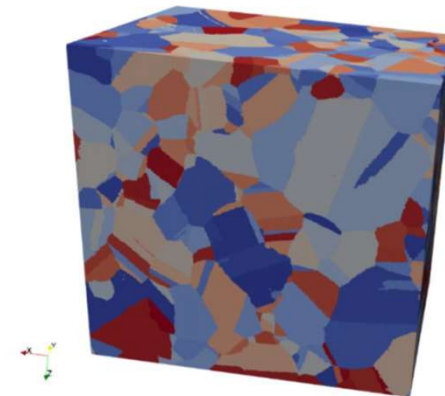


Image 3D des  
orientations

(549x420x526)μm<sup>3</sup>  
~2000 grains  
Voxel : 1μm<sup>3</sup>

[Charpagne Acta. Mat. 2021] 86

## PARTIE 2 – Applications

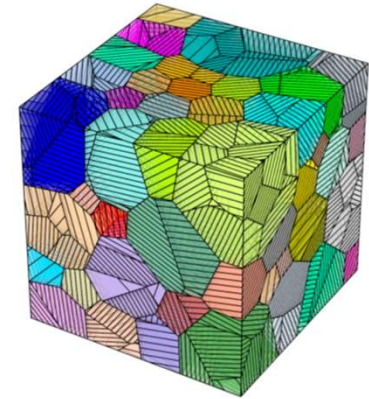
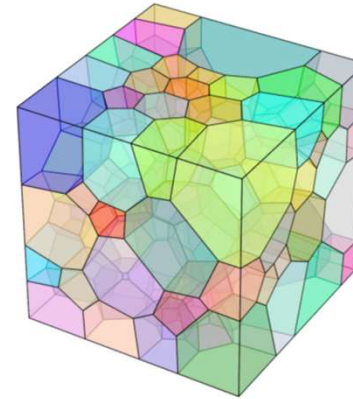


### Génération de microstructures aléatoires (cas général)

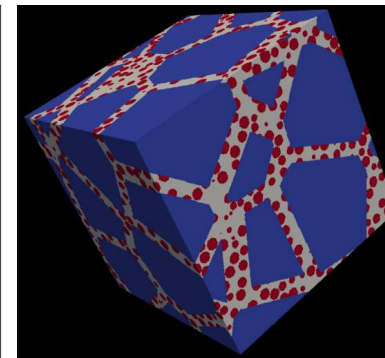
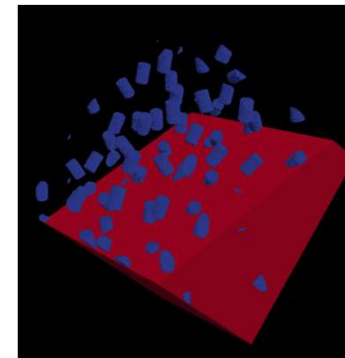
Quelques outils de génération de microstructure (maillage  $\Rightarrow$  EF et/ou voxelisation  $\Rightarrow$  FFT)

Polycristaux

- ❑ **NEPER** [R. Quey] 
  - Découpages cellules de Laguerre / Voronoï
  - Sous-découpage de cellules
  - Optimisation distribution de taille de grain
  - Définition des orientations (textures cristallographiques)
- ❑ **DREAM.3D** [T. Rollett, S. Ghosh]
  - Stop V6  $\Rightarrow$  V7 : licence commerciale...
  - Analyse données EBSD + reconstruction 2D  $\Rightarrow$  3D
  - Génération de microstructures (taille de grain/cristallo)



- ❑ **MEROPE** [M. Josien]  **Cadarache**
  - Laguerre / Voronoï (optimisation taille)
  - Distribution inclusions (formes variées)
  - Combinaison de modèles
  - API python
  - Ne gère pas les orientations cristallos.





## PARTIE 2 – Applications



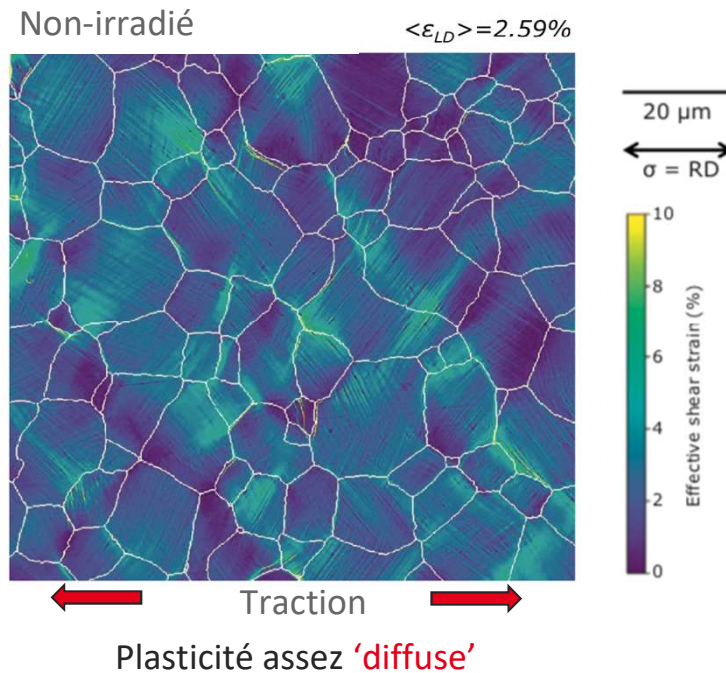
### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Polycristaux « denses » - quantités locales  $\Rightarrow$  **localisation** de la plasticité dans matériaux durcis

➤ Alliage de Zirconium  
durci par irradiation

Mesure de champs de déformation par **HR-DIC**

[Thomas, Acta Materialia 2019]



2MeV Protons  $\text{H}^+$

échantillon

**Post-irradiation**

$\langle \epsilon_{LD} \rangle = 2.0\%$



## PARTIE 2 – Applications



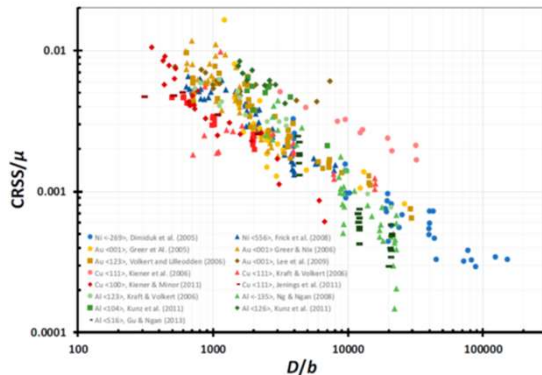
### Plasticité cristalline & polycristaux

❑ Polycristaux « denses » - quantités locales  $\Rightarrow$  **localisation de la plasticité** dans matériaux durcis

➤ Autres résultats : Expériences sur micro-piliers mono-cristallins (compression)

#### Limite d'élasticité

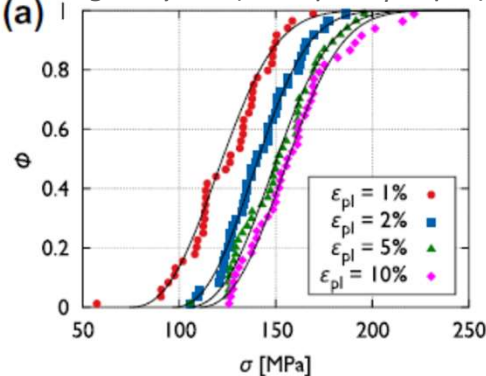
Sensible à la taille  
(various FCC metals)



Shahbeyk, Crystals2019

Valeurs aléatoires

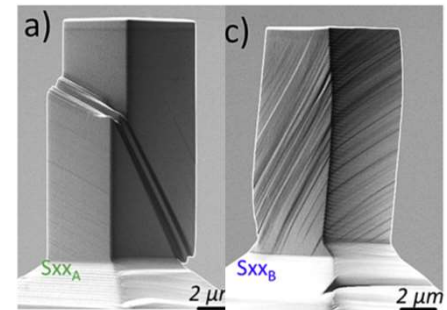
Cu single crystal ( $H=11\mu m$ ,  $\phi=3\mu m$ )  
(a)



Ispanovity, Acta Materialia 2013

Déformation localisée

Cu single crystal



Malyar, Acta Materialia 2017

➤ Simulations DDD sur micro-piliers mono-cristallins (compression)

« Maillon le + faible »

Distribution aléatoire de sources



Sensibilité à la taille  
Valeurs aléatoires

[Ispanovity, Groma & al Acta Materialia 2013]  
[El Awady, Ghoniem & al. Jmps 2009]

## PARTIE 3 – Méthodes FFT

### □ Parallélisme

#### ➤ Décomposition

##### ✓ Décomposition 1D (en tranches, *fftw*)

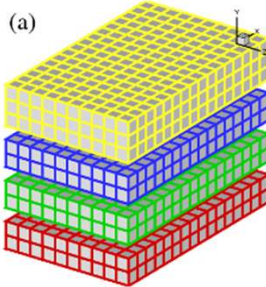


Image  $1024^3$

1024 processus max

Limite rapidement atteinte sur les machines actuelles et futures!

##### ✓ Décomposition 2D (en pincesaux)

Exemple : <http://www.2decomp.org/>

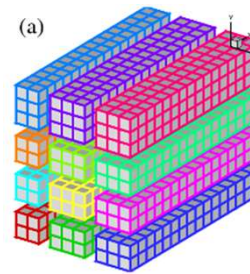


Image  $1024^3$   
 **$1024^2$  processus max**

**Limite repoussée!**

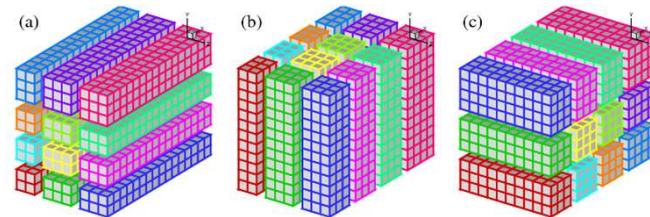
#### ➤ FFT 3D = succession de FFT 1D

Nécessité de transposer les données

##### ➤ Communications (MPI\_ALLTOALL)!

##### ➤ Exemple : Librairie 2decomp

<http://www.2decomp.org/>

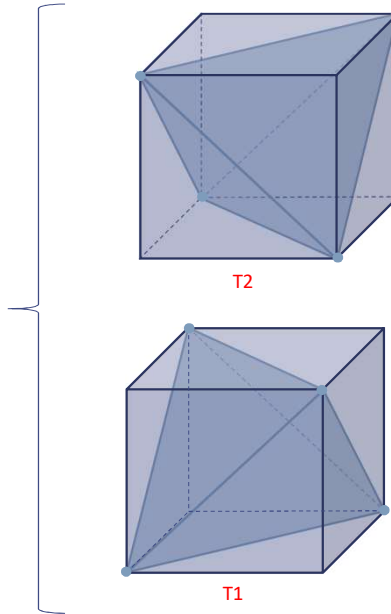
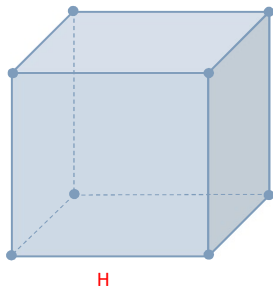


## PARTIE 3 – Méthodes FFT



□ Fréquences **modifiées** – *Nouvelle proposition [A. Finel, CMAME2025] (+ simplification [Gélébart, CRMéca2025])*

[Willot CRAS 2015]



1 « point d'intégration » au centre du voxel

$$\nabla_H T \rightarrow \mathbf{q} = -k \nabla_H T$$

Equilibre aux noeuds:  $\text{div}_H(\mathbf{q}) = 0$

2 « points d'intégration » au centre du voxel

$$\nabla_{T1} T \rightarrow \mathbf{q}_{T1} = -k \nabla_{T1} T$$

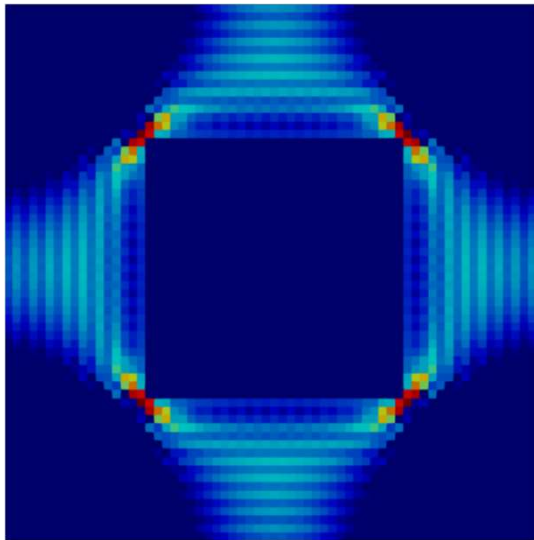
$$\nabla_{T2} T \rightarrow \mathbf{q}_{T2} = -k \nabla_{T2} T$$

Equilibre aux noeuds :  $\frac{1}{2} (\text{div}_{T1}(\mathbf{q}_{T2}) + \text{div}_{T2}(\mathbf{q}_{T1})) = 0$

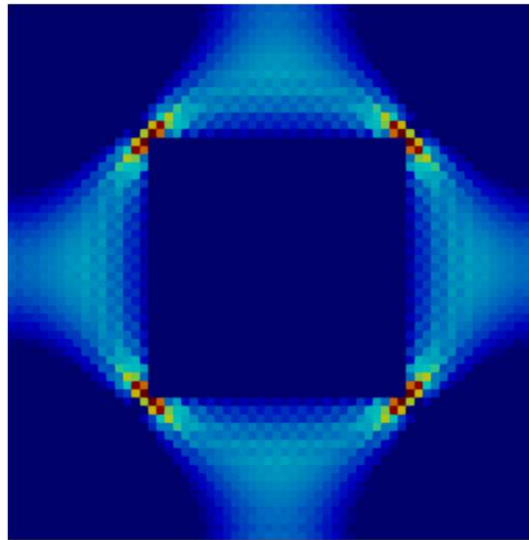


□ Fréquences **modifiées** – *Nouvelle proposition [A. Finel, CMAME2025] (+ simplification [Gélébart, CRMéca2025])*

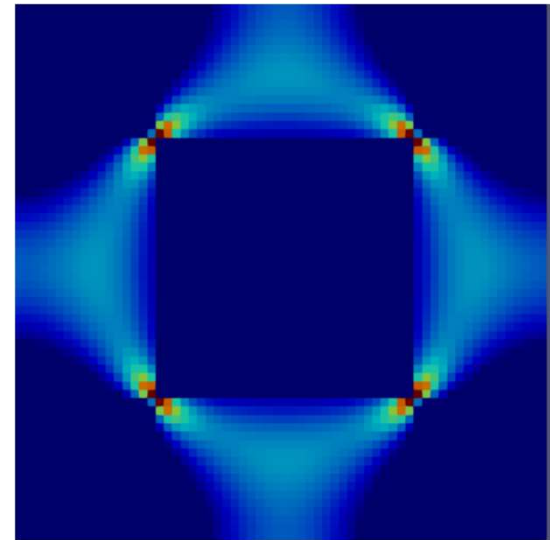
*Inclusion cubique (pore)*  
*Chargement : pression Hydrostatique*  
*Elasticité isotrope*  
*Contrainte de von Mises*



Freq non-modifiées [MS1998]



FD « hexaèdre » [Willot2015]



FD « tétraèdres » [Finel2024]

*Figures [A. Finel, CMAME2025]*