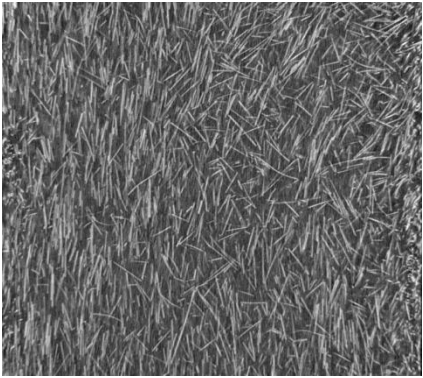
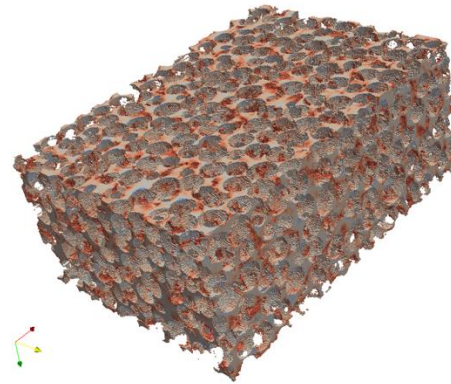


**Homogénéisation par EF, FFT ou Développements
Asymptotiques : *À chaque problème sa méthode, à chaque
méthode ses problèmes***

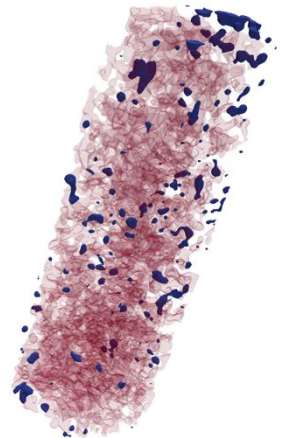
Naït-ali Azdine & al



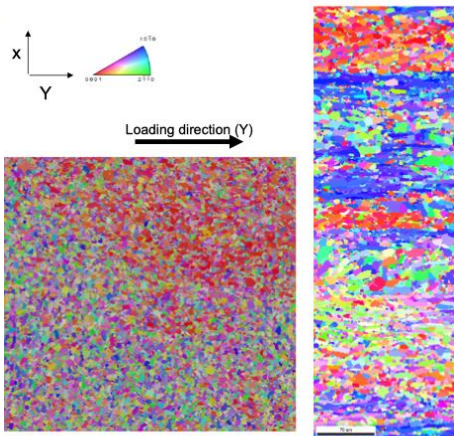
**Composite fibres
courtes**



Mousse polymère

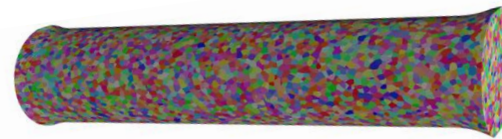


**Ag fritté
nano-pores**



Alliage de titane

- Diversité des méthodes disponibles : Méthodes numériques (FFT;MEF); les approches de champ moyen..
- Besoins spécifiques selon l'échelle : comportement Macro; pb de localisation, non-local...
- Existence de méthodes « clés en main »?
- Toutes les méthodes sont-elles adaptées ?



Fabrication additive

Développement asymptotique

Avec :

S. BEN ELHAJ SALAH;

M. GUEGUEN;

C. NADOT-MARTIN

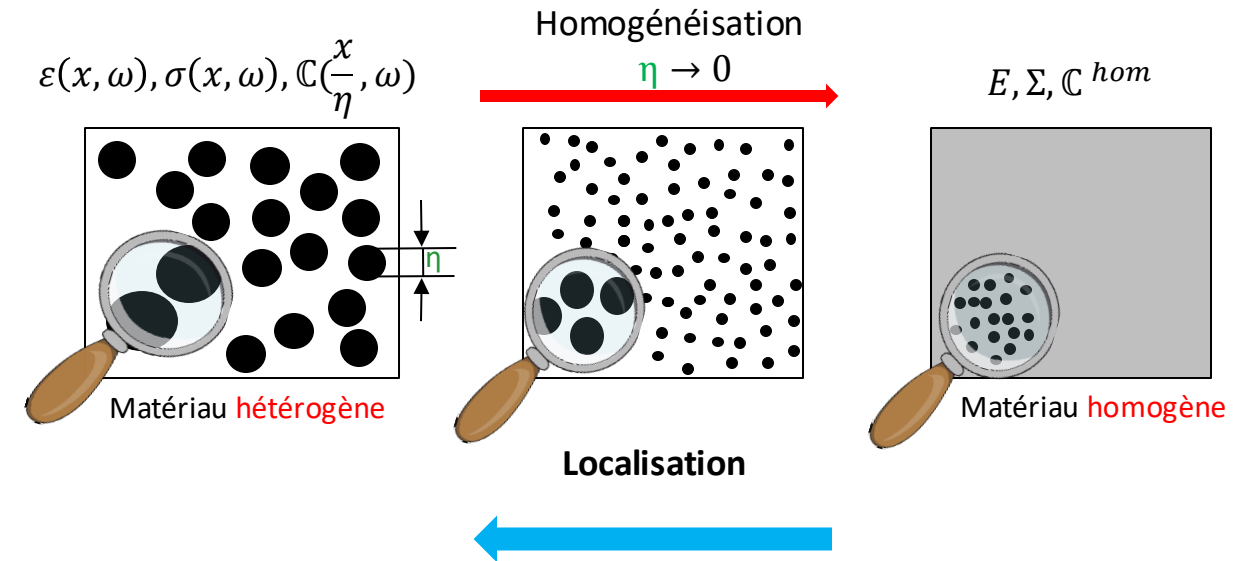
Homogénéisation variationnelle/asymptotique

η : Petit paramètre d'hétérogénéité pour la structure (**inclusions**).

Matériau **homogène** à l'échelle **macroscopique**

↕
technique d'homogénéisation

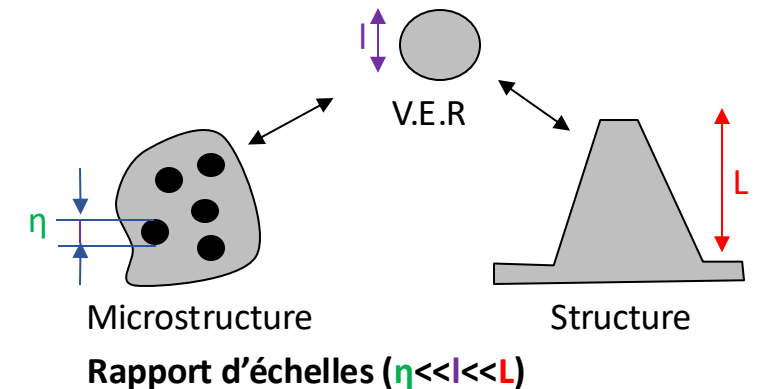
Matériau **hétérogène** à l'échelle **microscopique**



□ Conditions de séparation d'échelles:

On considère:

- ✓ L : Dimension caractéristique de la structure macroscopique
- ✓ l : Taille de V.E.R
- ✓ η : Petit paramètre d'hétérogénéité pour la structure (**inclusions**).

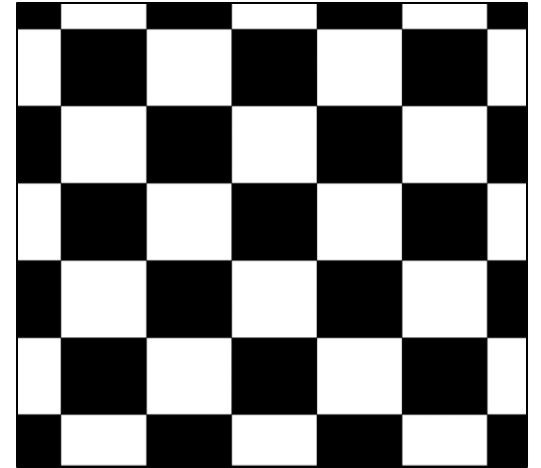


Garder un lien entre les échelles?

❑ Les champs u, ε, σ :

- Fonctions de deux variables (x): macroscopique et (y): microscopique avec :

$$\eta = \frac{x}{y}$$



❑ Développement asymptotique pour les champs de déplacement et des contraintes:

$$\square \quad u^\eta(x) = u^0(x, \frac{x}{\eta}) + \eta u^1(x, \frac{x}{\eta}) + \eta^2 u^2(x, \frac{x}{\eta}) + \eta^3 u^3(x, \frac{x}{\eta}) + \dots$$

$$\square \quad \sigma^\eta(x) = \sigma^0(x, \frac{x}{\eta}) + \eta \sigma^1(x, \frac{x}{\eta}) + \eta^2 \sigma^2(x, \frac{x}{\eta}) + \eta^3 \sigma^3(x, \frac{x}{\eta}) + \dots$$

Quelles hypothèses sur la distribution et/ou la morphologie des inclusions

❑ Les champs u, ε, σ :

- Fonctions de deux variables (x): macroscopique et (y): microscopique avec :

$$\eta = \frac{x}{y}$$

❑ Distribution aléatoire d'inclusions (ω)

- ω : Distribution des centres d'inclusions

❑ Développement asymptotique pour les champs de déplacement et des contraintes:

$$\square \quad u^\eta(x, \omega) = u^0(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta u^1(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta^2 u^2(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta^3 u^3(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \dots$$

$$\square \quad \sigma^\eta(x, \omega) = \sigma^0(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta \sigma^1(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta^2 \sigma^2(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta^3 \sigma^3(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \dots$$

Quelles hypothèses sur la distribution et/ou la morphologie des inclusions

□ Distribution aléatoire d'inclusions (ω)

- Théorie ergodique :

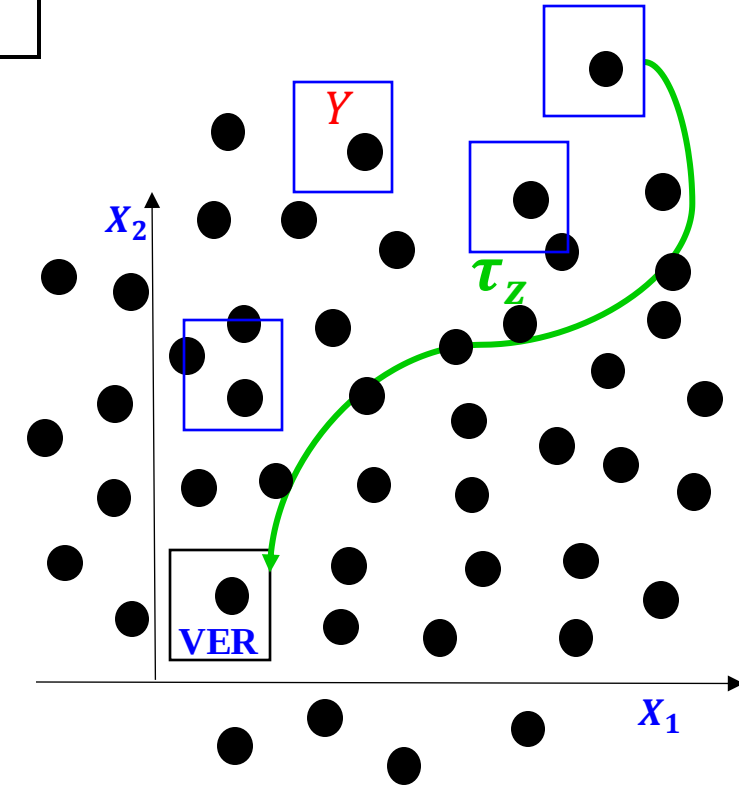
- (A_1) Distribution "riche": $P(\{\omega \in \Omega_p: |Y \cup S(\omega)| > 0\}) = 1$
- (A_2) Stationarité: $\forall z \in \mathbb{Z}^3, \tau_z \# P = P$ où $\tau_z \# P$ est la probabilité image de P par τ_z
- (A_3) Indépendance asymptotique: pour tous les ensembles E et F de A

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} P(\tau_z E \cap F) = P(E)P(F)$$

⇒ Cette notion **d'indépendance** entre plusieurs évènements:

- fait partie des conditions nécessaires à l'existence d'un V.E.R
- permet d'assurer l'ergodicité
- et la **séparation d'échelles**

⇒ **Méthode d'Homogénéisation périodique dans le cas ergodique**



□ Equations en cascade:

$$\text{Ordre } (-1) \quad \begin{cases} \varepsilon_y(u^0) = 0 \\ \text{div}_y(\sigma^0) = 0 \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \boxed{\varepsilon_y(u^0) = 0 \Rightarrow u^0(x, y) = u^0(x)}$$

$$\text{Ordre } (0) \quad \begin{cases} \sigma^0 = \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega)(\varepsilon_x(u^0) + \varepsilon_y(u^1)) \\ \text{div}_x(\sigma^0) + \text{div}_y(\sigma^1) + f(x, \omega) = 0 \end{cases}$$

$$\text{Ordre } (1) \quad \begin{cases} \sigma^1 = \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega):(\varepsilon_x(u^1) + \varepsilon_y(u^2)) \\ \text{div}_x(\sigma^1) + \text{div}_y(\sigma^2) = 0 \end{cases}$$

$$\text{Ordre } (2) \quad \begin{cases} \sigma^2 = \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega):(\varepsilon_x(u^2) + \varepsilon_y(u^3)) \\ \text{div}_x(\sigma^2) + \text{div}_y(\sigma^3) = 0 \end{cases}$$

□ Objectif:

- Trouver U^n , qui minimise la fonction d'énergie $w^{(n)}(u^n)$:

$$w^{(n)}(U^n) = W(u^0, u^1, u^2) = \int_{\Omega \times Y} \frac{1}{2} \left(\varepsilon^\eta(x, \omega) : \mathbb{C} \left(\frac{x}{\eta}, \omega \right) : \varepsilon^\eta(x, \omega) \right) dx dy$$



$$w^{(n)}(U^n) = w(u^0, u^1, u^2, \dots) = \frac{1}{\eta^2} w^{(-2)} + \frac{1}{\eta} w^{(-1)} + w^{(0)} + \eta w^{(1)} + \eta^2 w^{(2)} + \dots$$

□ Conditions aux limites périodiques

- ω : Variable aléatoire: Distribution des centres d'inclusions

□ Les solutions se présentent sous les formes suivantes :

$$1) u^0 \left(x, \frac{x}{\eta}, \omega \right) = U^0(x)$$

$$2) u^1 \left(x, \frac{x}{\eta}, \omega \right) = U^1(x) + \chi^0(y, \omega) : \nabla_x U^0(x)$$

$$3) u^2 \left(x, \frac{x}{\eta}, \omega \right) = U^2(x) + \chi^0(y, \omega) : E^1(x) + \chi^1(y, \omega) : \nabla_x E^0(x)$$



gradient de déformation

□ Ordre 0:

ω : Variable aléatoire

La première équation (ordre de η^0) est donnée par:

$$\begin{aligned} w^{(0)}(u^0, u^1) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega \times Y} [\varepsilon_x(u^0) + \varepsilon_y(u^1)] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : [\varepsilon_x(u^0) + \varepsilon_y(u^1)] dx dy \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega \times Y} \varepsilon_x(u^0) : [\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : [\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \varepsilon_x(u^0) dx dy \end{aligned}$$

Avec $\varepsilon_x(u^0) = E^0(x)$, déformation macroscopique, on obtient:

$$w^{(0)}(u^0, u^1) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{A}^{(0,0)} : E^0(x) dx$$



$\mathbb{A}^{(0,0)}$ Tenseur élastique effectif

Avec

$$\mathbb{A}^{(0,0)} = \int_Y [\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : [\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] dy$$

❑ Ordre 0:

$$w^{(0)}(u^0, u^1) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{A}^{(0,0)} : E^0(x) dx$$

Avec

$$\mathbb{A}^{(0,0)} = \int_Y [1 + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : [1 + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] dy$$

❑ Ordre 1:

$$\eta w^{(1)}(u^0, u^1, u^2) = \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{B}^{(0,1)} : E^1(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{C}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{D}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx$$

Avec

$$\mathbb{B}^{(0,1)} = \int_Y [(1 + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : [(1 + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] dy = \mathbb{A}^{(0,0)}$$

$$\mathbb{C}^{(0,0)} = \int_Y [(1 + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : \chi^0(y, \omega) dy$$

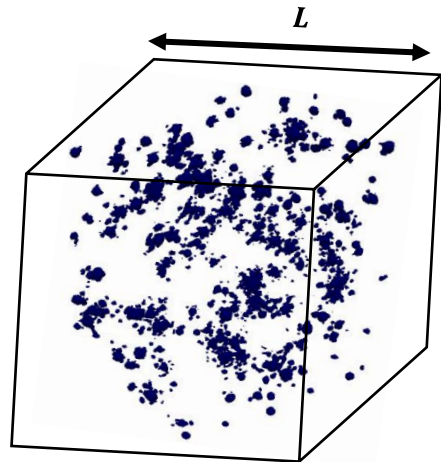
$$\mathbb{D}^{(0,0)} = \int_Y [(1 + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : \nabla_y \chi^1(y, \omega) dy$$

❑ But: évaluation de l'énergie du modèle non local

$$w^{(\eta)}(u^0, u^1, u^2) = W^{(0)} + \eta W^{(1)} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} E^0(x) : \mathbb{A}^{(0,0)} : E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{B}^{(0,1)} : E^1(x) dx + \eta \int_{\Omega \times Y} E^0(x) : \mathbb{C}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{D}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx$$

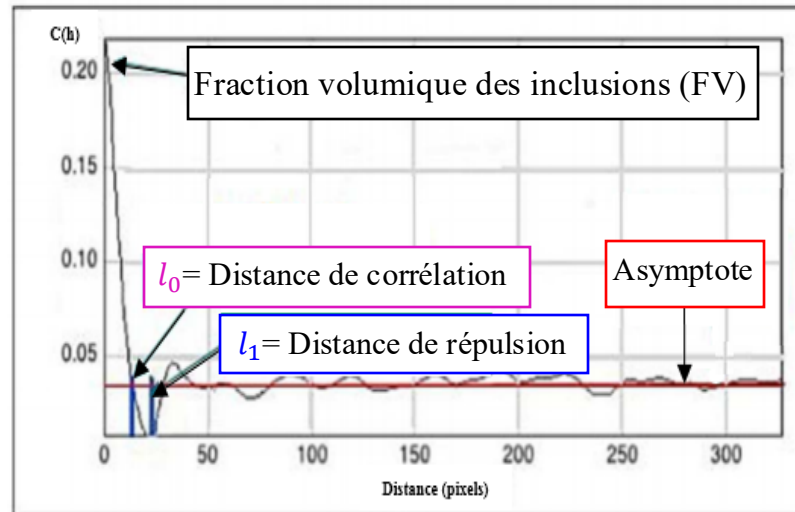
- Microstructures: biphases

- Matériaux virtuels
- **Matériaux réels**



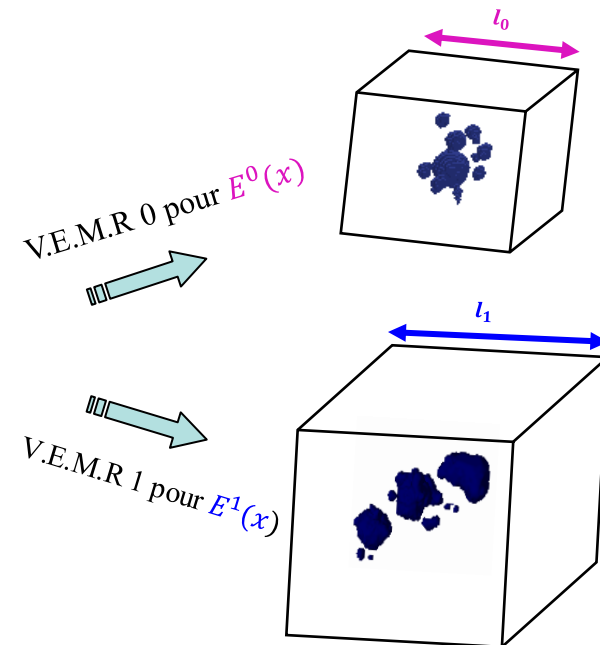
Images issues du tomographe

S. Castagnet et al.
Polymer Testing (2018) 70:255-262



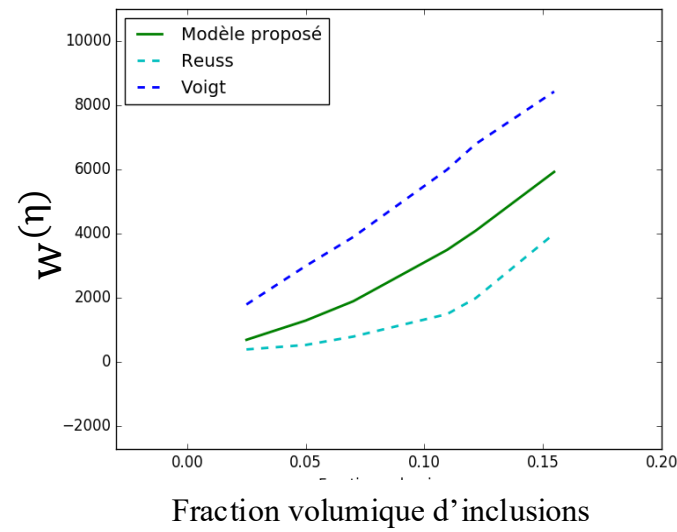
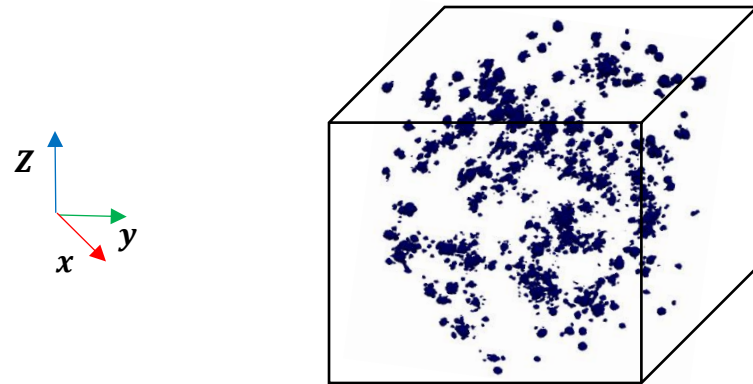
Covariogramme

D. Jeulin.
Statistics and Computing, (2012) 10(2):121-132.

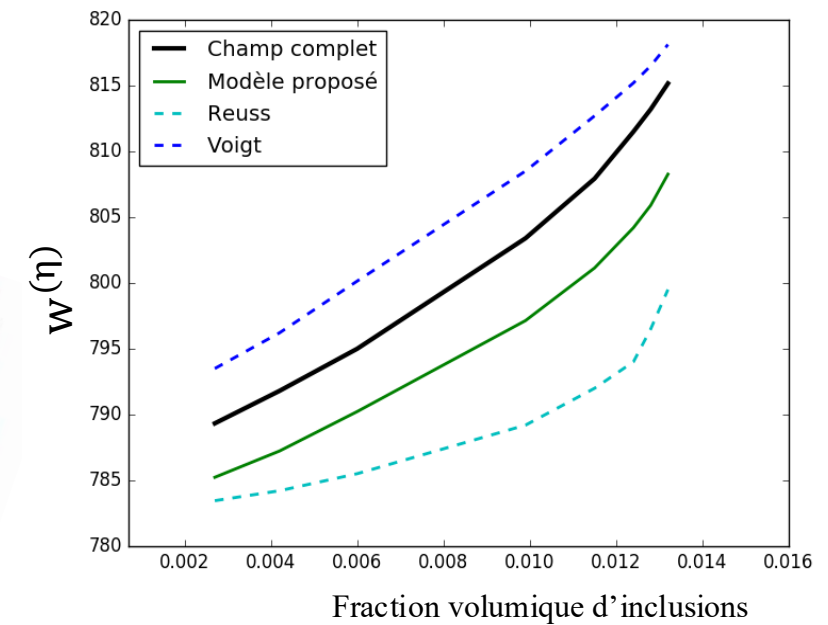
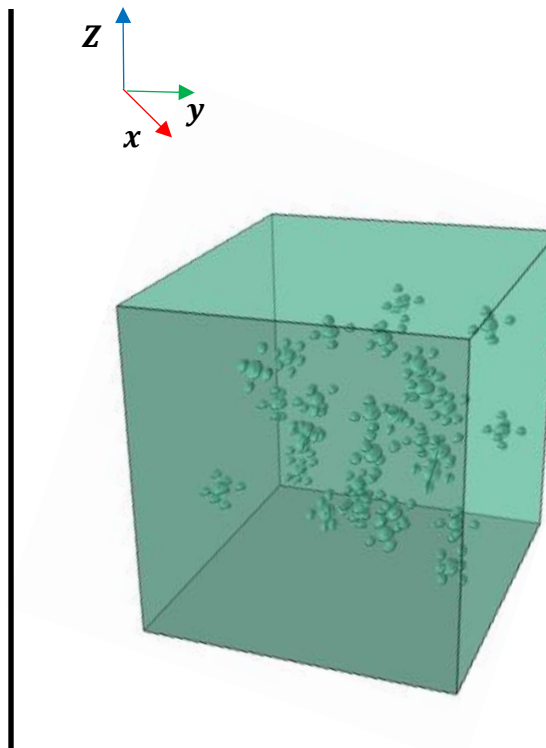


❑ But: évaluation de l'énergie du modèle non local

$$w^{(\eta)}(u^0, u^1, u^2) = W^{(0)} + \eta W^{(1)} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} E^0(x) : \mathbb{A}^{(0,0)} : E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{B}^{(0,1)} : E^1(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{C}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{D}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx$$



• Fuseau de Hill en énergie



Détermination de l'énergie du modèle non local homogénéisé

$$w^{(\eta)}(u^0, u^1, u^2) = W^{(0)} + \eta W^{(1)} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} E^0(x) : \mathbb{A}^{(0,0)} : E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{B}^{(0,1)} : E^1(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{C}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{D}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx$$



- Tenseur d'ordre élevé
- Second gradient
- Tenseur homogénéisé
- Effet non-local



- Tenseur d'ordre trop élevé
- Temps de calcul élevé.
- Tenseur homogénéisé identifié par EF

Transition d'échelle pas terminé

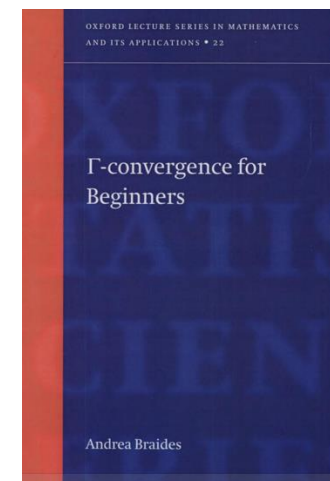
Méthode variationnelle

Avec :

S. BEN ELHAJ SALAH;
M. GUEGUEN;
C. NADOT-MARTIN

Définition (Γ -convergence (séquentielle)). Soit X un espace topologique. Considérons une suite $(F_n)_{n \in \mathbb{N}} : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ et une fonction $F : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. On dit que $(F_n)_{n \in \mathbb{N}}$ Γ -converge séquentiellement vers F en $u \in X$ si les deux assertions suivantes sont vérifiées :

$$\begin{aligned} \forall u_n \rightarrow u \text{ dans } X &\implies F(u) \leq \liminf_{n \rightarrow +\infty} F_n(u_n) \\ \exists (v_n)_{n \in \mathbb{N}} \rightarrow u \text{ dans } X &\text{ tel que } F(u) \geq \limsup_{n \rightarrow +\infty} F_n(v_n) \end{aligned}$$



Lorsque les deux propriétés sont vérifiées pour tout u , on dit alors que $(F_n)_{n \in \mathbb{N}}$ Γ -converge séquentiellement vers F .

□ Estimation de la borne variationnelle de la Γ -limite supérieure

Pour tout couple $(u, v) \in L^2(\Omega, \mathbb{R}^3) \times L^2(\Omega, \mathbb{R}^3)$ et tout $\omega \in \Omega_p$ il **existe une suite** $(u^\eta(x, \omega))_{\eta>0}$ dans $L^2(\Omega, \mathbb{R}^3)$

$$\text{vérifiant: } \begin{cases} u^\eta(x, \omega) \rightharpoonup (u, v) \\ W^{hom}(u, v) \geq \limsup_{\eta \rightarrow 0} W^{(\eta)}(u^\eta(x, \omega)) \end{cases} \quad (1)$$

$$u^\eta(x, \omega) = u^0(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta u^1(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta^2 u^2(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \eta^3 u^3(x, \frac{x}{\eta}, \omega) + \dots$$

□ Estimation de la borne variationnelle de la Γ -limite inférieure

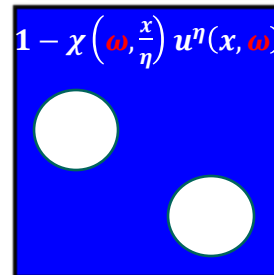
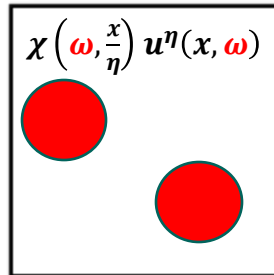
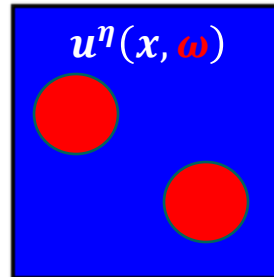
Proposition: Il faut montrer **que pour toute suite** $u^\eta \xrightarrow{n \rightarrow 0} u$, on a:

$$\Gamma - \liminf_{\eta \rightarrow 0} W^{(\eta)}(u^\eta(x, \omega)) \geq W^{hom}(u, v) \quad (2)$$

$$(1) \ \& \ (2) \implies \Gamma - \liminf_{\eta \rightarrow 0} W^{(\eta)}(u^\eta(x, \omega)) \geq W^{hom}(u, v) \geq \limsup_{\eta \rightarrow 0} W^{(\eta)}(u^\eta(x, \omega))$$

□ Compacité

Échelle microscopique

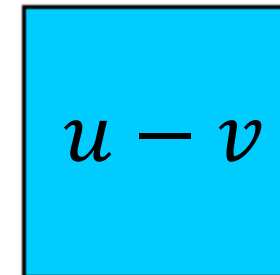
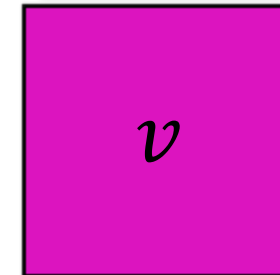
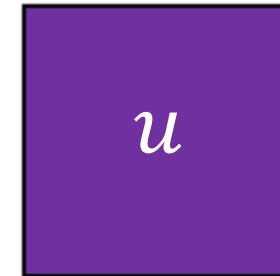


$$\eta \rightarrow 0 \quad \hookrightarrow \quad u^\eta(x, \omega) \rightarrow u \text{ dans } L^2(\Omega, \mathbb{R}^3)$$

$$\eta \rightarrow 0 \quad \hookrightarrow \quad \chi\left(\omega, \frac{x}{\eta}\right) u^\eta(x, \omega) \rightarrow v \text{ dans } L^2(\Omega, \mathbb{R}^3)$$

$$\eta \rightarrow 0 \quad \hookrightarrow \quad 1 - \chi\left(\omega, \frac{x}{\eta}\right) u^\eta(x, \omega) \rightarrow u - v \text{ dans } L^2(\Omega, \mathbb{R}^3)$$

Échelle macroscopique



$$\liminf_{\eta \rightarrow 0} W^{(\eta)}(u^\eta(x, \omega)) \geq W^{hom}(u, v) \geq \limsup_{\eta \rightarrow 0} W^{(\eta)}(u^\eta(x, \omega))$$

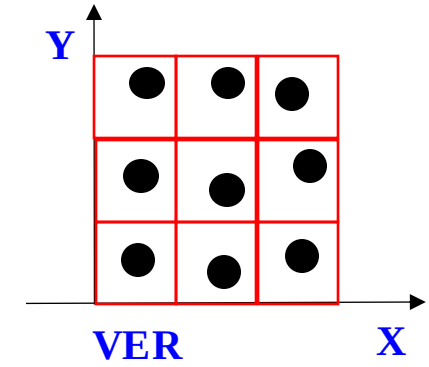
□ Utilisation de l'ergodicité

Processus sous-additif, défini par le système ci-dessous

$$\begin{aligned} S: \mathbb{B}_b(\mathbb{R}^N) &\rightarrow L_p^1(\Omega_p) \\ A &\rightarrow S_A \end{aligned}$$

- i) Si $A \cap B = \emptyset$ alors $S_{A \cup B} = S_A + S_B$
- ii) $\forall A \in \mathbb{B}_b(\mathbb{R}^N) \forall z \in \mathbb{Z}^N \quad S_{A+z} = S_A \circ \tau_z$
- iii) $\exists a \in L_p^1(\mathbb{R}^N)$ tel que $|S_A| \leq a \quad \forall A \subset [0,1]^N, A \in \mathbb{B}_b(\mathbb{R}^N)$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{S_{A_\eta}(\omega)}{|A_\eta|} = \begin{cases} E(S_{VER}) & \text{si le s.d.a est ergodique} \\ E^F(S_{VER}) & \text{sinon} \end{cases}$$



□ Γ – limite de l'énergie $W_{hom}^{(0)}(\mathbf{A}^{(0,0)})$

$$\Rightarrow W_{hom}^{(0)}(\mathbf{A}^{(0,0)}) = \underbrace{\frac{1}{2} E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(\mathbf{u} - \mathbf{v}) : \mathbb{1}_4 : \mathbb{C}^m(x, \omega) : \mathbb{1}_4 : \varepsilon_x(\mathbf{u} - \mathbf{v}) dx \right)}_{\text{Contribution de la matrice}} + \underbrace{\frac{1}{2} E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(\mathbf{v}) : \Theta_1 : \mathbb{C}^i(x, \omega) : \Theta_1 : \varepsilon_x(\mathbf{v}) dx \right)}_{\text{Contribution des inclusions}}$$

□ Γ – limite de l'énergie complète

En sommant les expressions $W_{hom}^{(0)}(\mathbb{A}^{(0,0)})$, $W_{hom}^{(1)}(\mathbb{B}^{(0,1)})$, $W_{hom}^{(1)}(\mathbb{C}^{(0,0)})$ et $W_{hom}^{(1)}(\mathbb{D}^{(0,0)})$

$$W_{hom}(u, v) = W_{hom}^{(0)}(u, v) + W_{hom}^{(1)}(u, v)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2}E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(u-v) : \tilde{\mathbb{C}}_0^m(x, \omega) : \varepsilon_x(u-v) dx \right) + \frac{1}{2}\theta_1^2 E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(v) : \tilde{\mathbb{C}}_0^i(x, \omega) : \varepsilon_x(v) dx \right) \\ &+ E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(u-v) : \tilde{\mathbb{C}}_1^m(x, \omega) : \nabla_x \varepsilon_x(u-v) dx \right) + \theta_1^2 E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(v) : \tilde{\mathbb{C}}_1^i(x, \omega) : \nabla_x \varepsilon_x(v) dx \right) \\ &+ E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(u-v) : \tilde{\mathbb{C}}_2^m(x, \omega) : \nabla_x \varepsilon_x(u-v) dx \right) + \theta_1 \theta_2 E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(v) : \tilde{\mathbb{C}}_2^i(x, \omega) : \nabla_x \varepsilon_x(v) dx \right) \\ &+ E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(u-v) : \tilde{\mathbb{C}}_3^m(x, \omega) : \nabla_x \varepsilon_x(u-v) dx \right) + \theta_1 \theta_3 E \left(\int_{\Omega} \varepsilon_x(v) : \tilde{\mathbb{C}}_3^i(x, \omega) : \nabla_x \varepsilon_x(v) dx \right) \end{aligned}$$

$$\chi^0(x, \omega) \rightarrow E \left(\int_{\Omega} \chi^0(x, \omega) dx \right) = E \left(\int_{\Omega} \left(\int \nabla_x \chi^0(x, \omega) \right) dx \right) = \theta_2$$

↳ θ_2 : la fraction volumique asymptotique de la phase 1 dans le V.E.M.R0

$$\nabla_x \chi^0(x, \omega) \rightarrow E \left(\int_{\Omega} \nabla_x \chi^0(x, \omega) dx \right) = \theta_1$$

↳ θ_1 : la fraction volumique asymptotique de la phase 1 dans le volume total

$$\nabla_x \chi^1(x, \omega) \rightarrow E \left(\int_{\Omega} \nabla_x \chi^1(x, \omega) dx \right) = \theta_3$$

↳ θ_3 : la fraction volumique asymptotique de la phase 1, dans le V.E.M.R1

Obtention de la Γ -limite de l'énergie complète

➤ Proposition d'une première version de modélisation non locale qui fait apparaître le second gradient de déplacement

➤ Mise en œuvre numérique de la première version de modèle:

- Calculs en champs complets dans deux volumes élémentaires

➤ Une nouvelle formulation, macroscopique, non-locale et déterministe

- $W_{hom}(u, v) = W_{hom}^{(0)}(u, v) + W_{hom}^{(1)}(u, v)$

➤ Elaboration d'un élément fini non local enrichi

$$\begin{bmatrix} U_x \\ U_y \\ U_z \\ V_x \\ V_y \\ V_z \end{bmatrix}$$



➤ Tenseur déterministe qui dépend de la microstructure

➤ Fonction historique de l'échelle inférieure

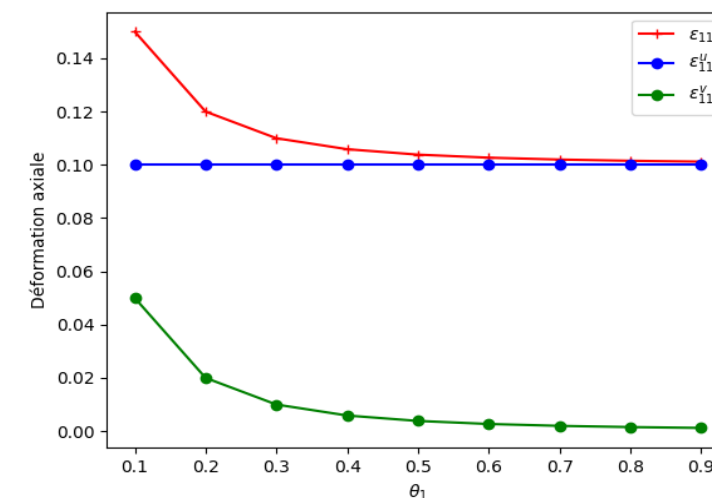
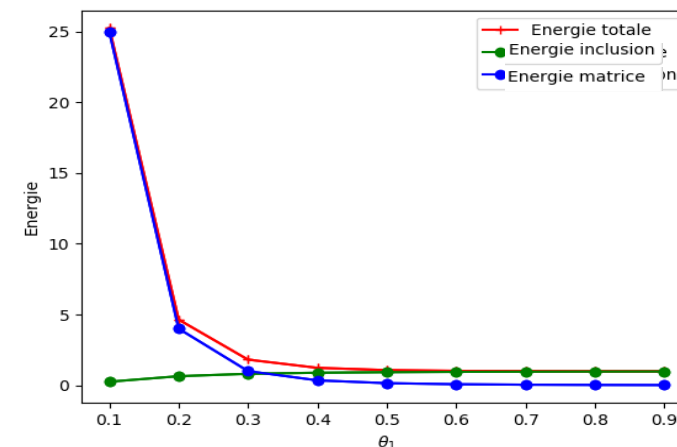
➤ Conservation du second gradient



➤ Simulation pas simple à mettre en place

➤ Besoin d'EF enrichis

➤ Temps de calculs



Fast-Fourier Transform (FFT)

Avec :

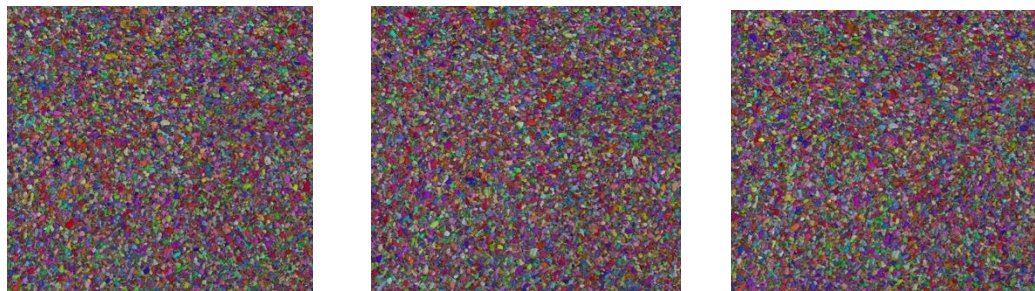
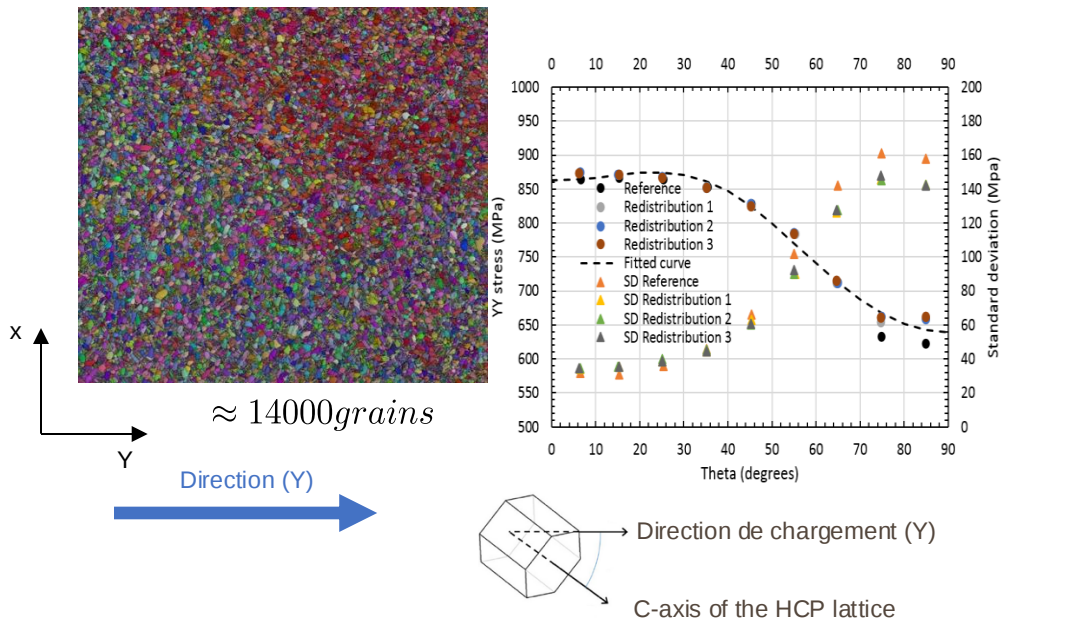
S. HEMERY;

M. GUEGUEN;

P. VILLECHAISE

Comportement des Alliages de Ti

- Effet d'échelles
 - Effet des voisins
- ↳ Macro-zones (MTR)



3D?

Code FFT FoXTroT

Initialisation : $\varepsilon^0(x) = E$

$\sigma^0(x) = \mathbb{C}(x) : \varepsilon^0$

FFT Iteration i+1 : ε^i , σ^i and $\varepsilon^{p,i}$ are done

$\hat{\varepsilon}^i(\xi) = FFT(\varepsilon^i(x))$

$\hat{\varepsilon}^{i+1}(\xi) = -\hat{\Gamma}_0 : \hat{\sigma}^i(\xi) + \hat{\varepsilon}^i(\xi)$, if $\xi \neq 0$

$\hat{\varepsilon}^{i+1}(\xi) = E$, if $\xi = 0$

convergence Test

$\varepsilon^i(\xi) = FFT^{-1}(\hat{\varepsilon}^i(x))$

$\sigma^{i+1}(x) = \mathbb{C}(x) : (\varepsilon^{i+1} - \varepsilon^{p,i} - \varepsilon^{p,i+1} \Delta t)$

$$\dot{\varepsilon}^P(x) = \sum_{s=1}^N m^s(x) \dot{\gamma}^s(x)$$

$$\dot{\gamma}^s(x) = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|m^s(x) : \sigma(x)|}{\tau_0^s} \right)^n \text{sgn}(m^s(x) : \sigma(x))$$

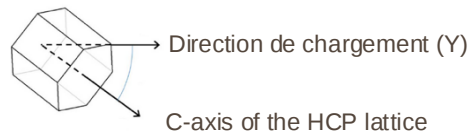
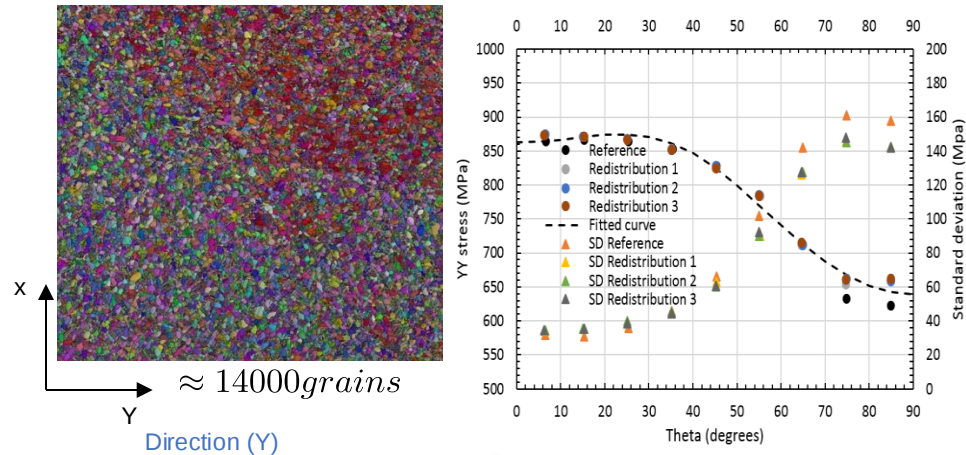
Hémery S., Nait-Ali, A., Villechaise P., Mech. Mater. (2017)

Hémery S., Nait-Ali, A., Gueguen, M. Villechaise P., Materials and Design (2018)

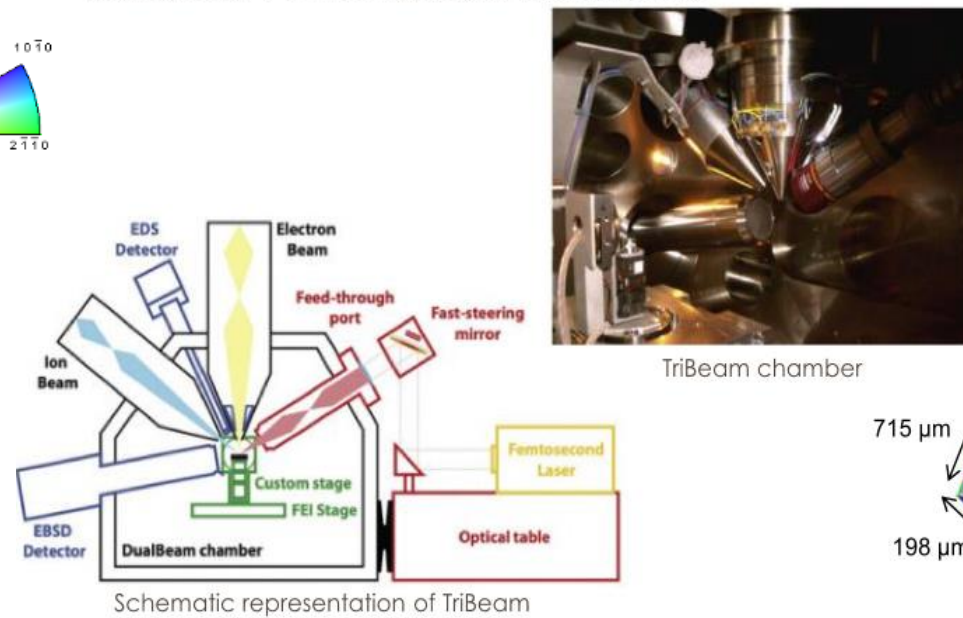
<https://sourcesup.renater.fr/projects/foxtrot>

Comportement des Alliages de Ti

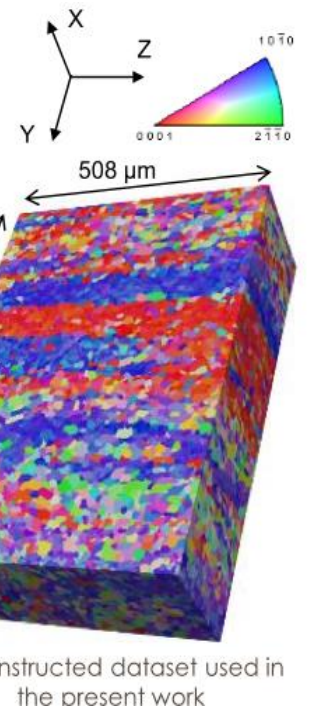
- Effet d'échelles
- Effet des voisins
 - ↳ Macrozones
- Besoin du 3D



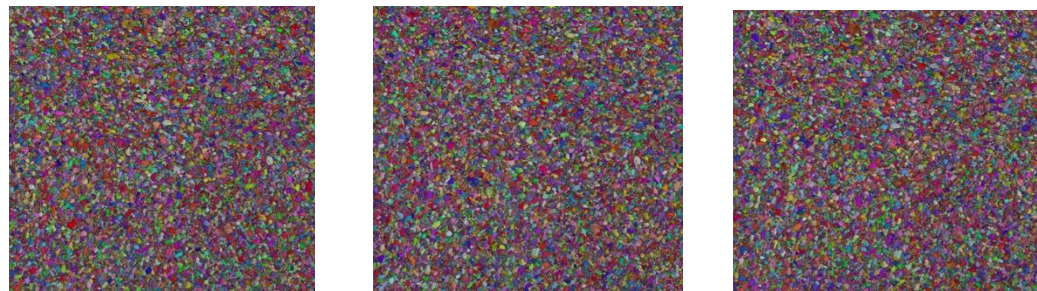
Material: Ti-6Al-4V with equiaxed microstructure



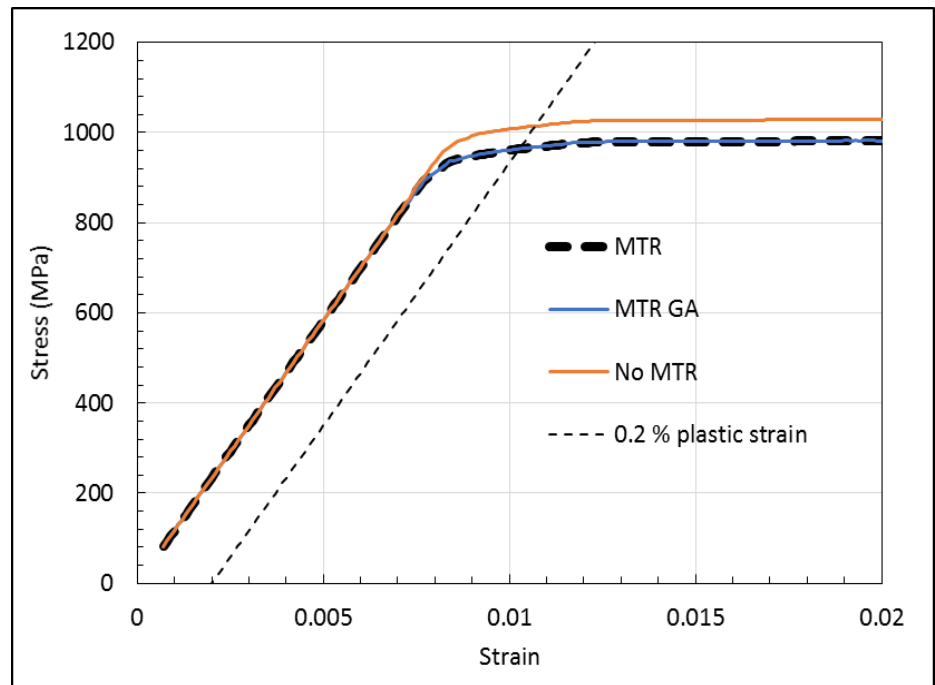
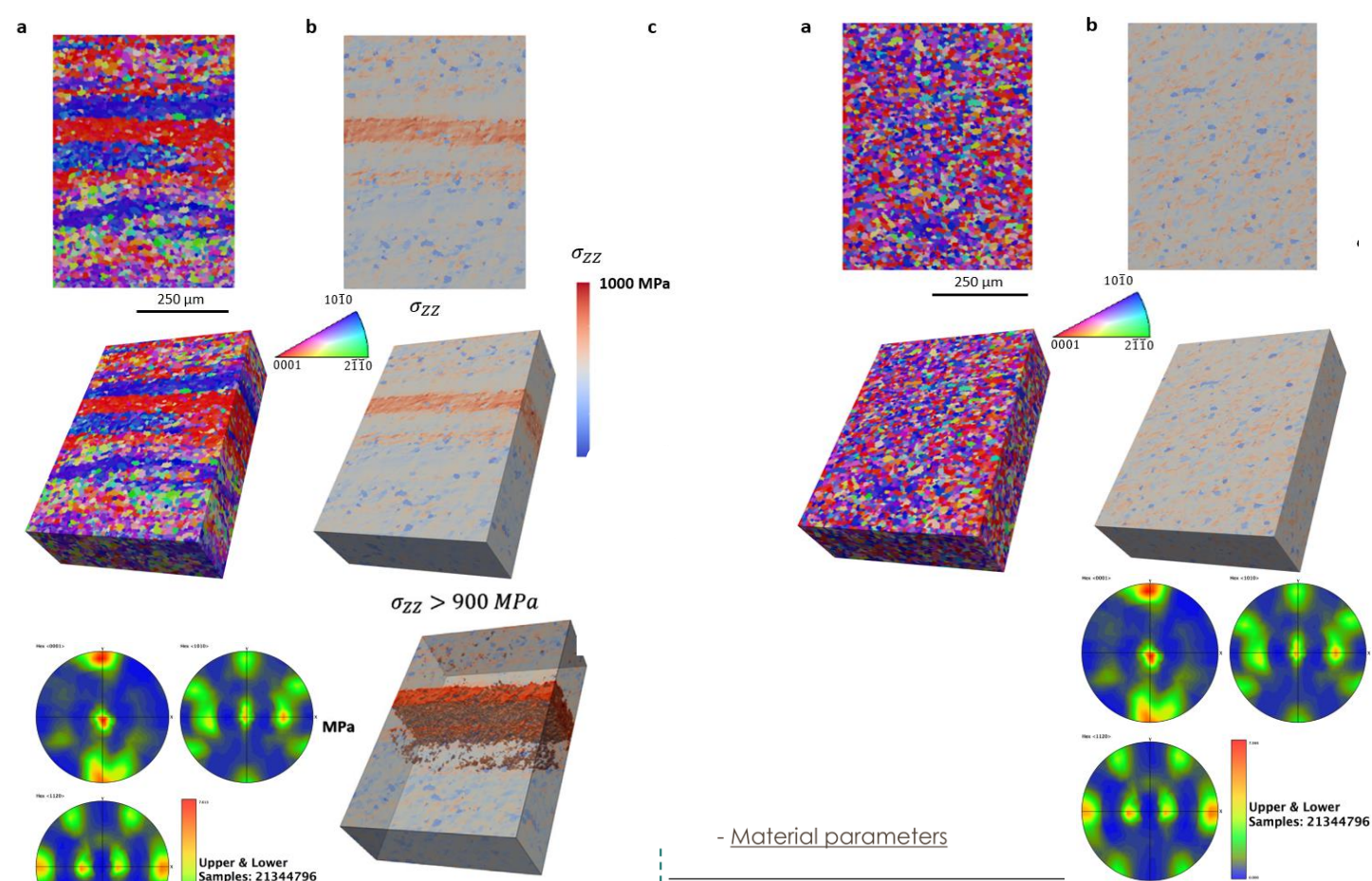
Collaboration UCSB (Santa Barbara)



$\approx 57000 \text{ grains}$
 $\approx 6 \times 10^7 \text{ voxels}$



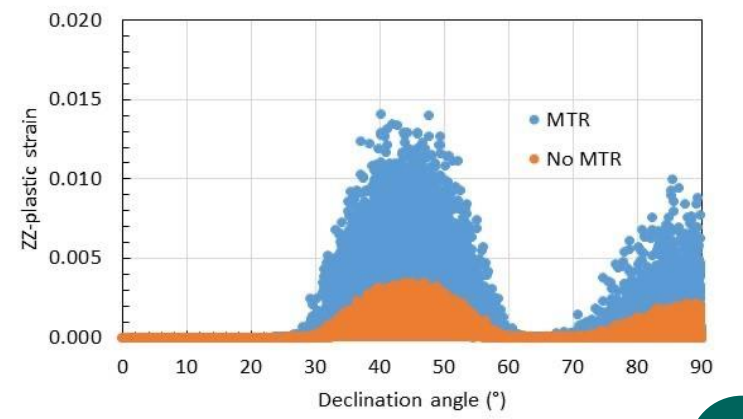
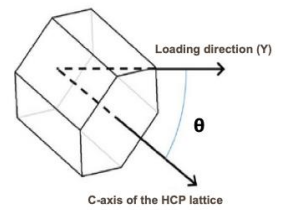
1. Hémery S., Nait-Ali, A., Villechaise P., *Mech. Mater.* (2017)
2. Hémery S., Nait-Ali, A., Gueguen, M. Villechaise P., *Materials and Design* (2018)
3. Hémery S., Nait-Ali, A., et al *acta Mat* 2019
4. <https://sourcesup.renater.fr/projects/foxtrot>



- Material parameters

Parameter	Value
Basal CRSS (τ_0^{Basal})	338 MPa
Prismatic CRSS ($\tau_0^{Prismatic}$)	352 MPa
Pyramidal CRSS ($\tau_0^{Pyramidal}$)	660 MPa
$\dot{\gamma}_0$	10^{-7} s^{-1}
n	0.02

Material parameters extracted from



Strain controlled tensile test at $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$

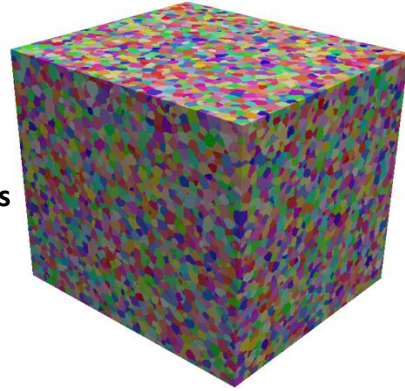
Générer un agrégat virtuel 3D
et des angles d'Euler attribués

Fixer une macro-zone et
redistribuer le grain
totalement ou
partiellement contenu

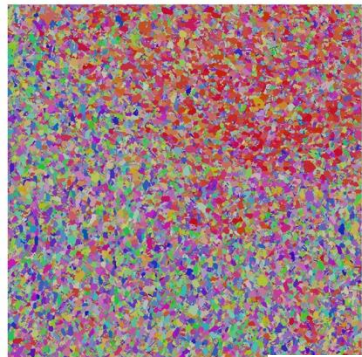
Attribuer de nouvelles
orientations à tous les grains de
la macro-zone

Optimisation de
l'histogramme θ

$5 \cdot 10^4$ grains
 $\approx 6 \cdot 10^7$ Voxels



Orientations de
référence

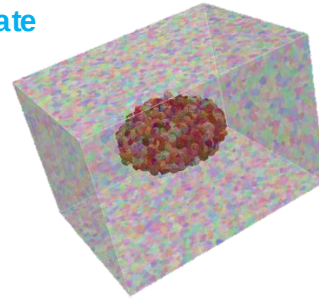


$\phi = (\phi_1, \Phi, \phi_2)$

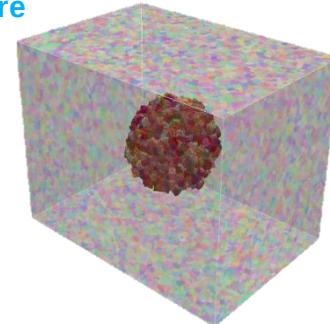
direction (Y)



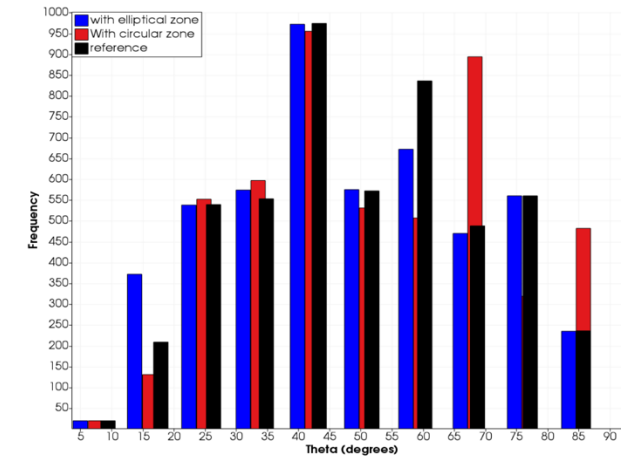
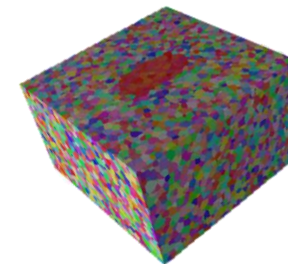
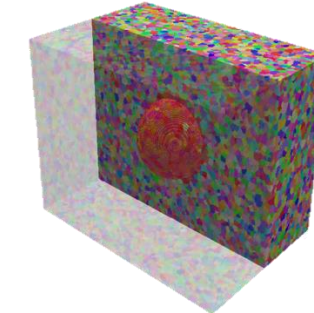
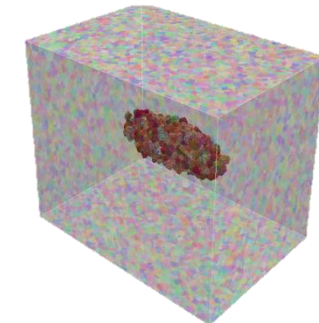
Oblate



Sphère



Ellipse

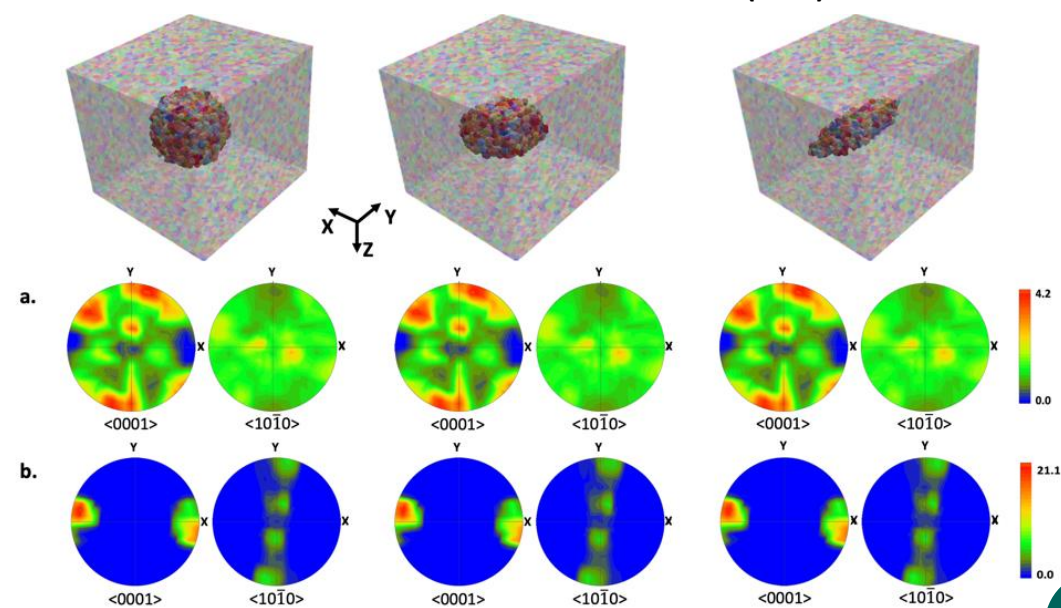
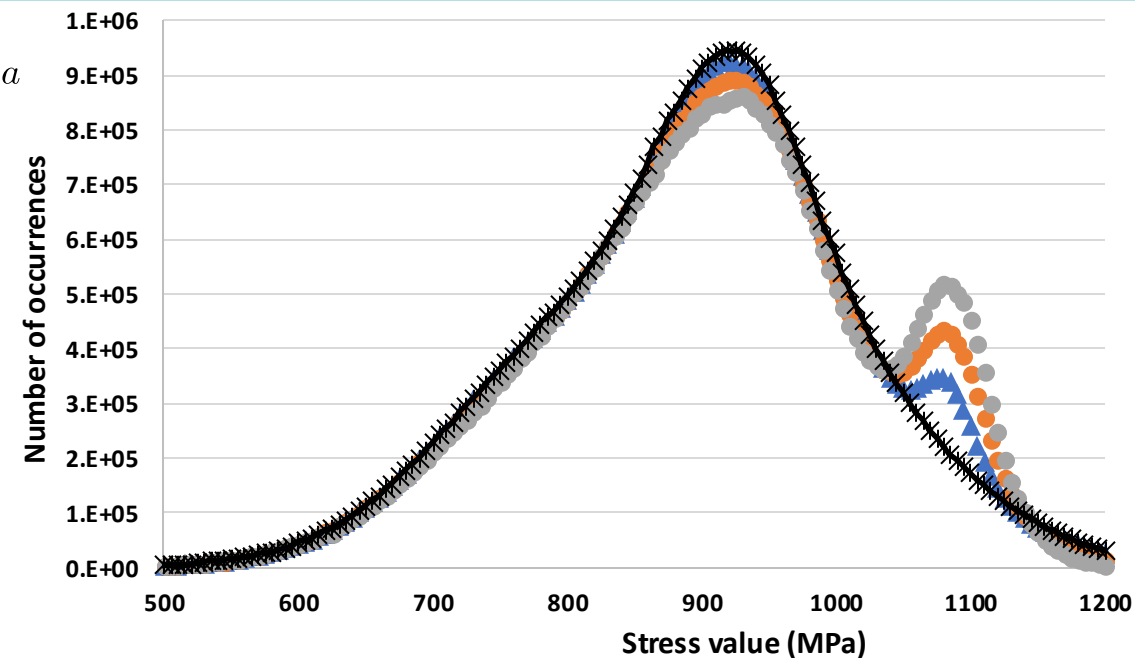
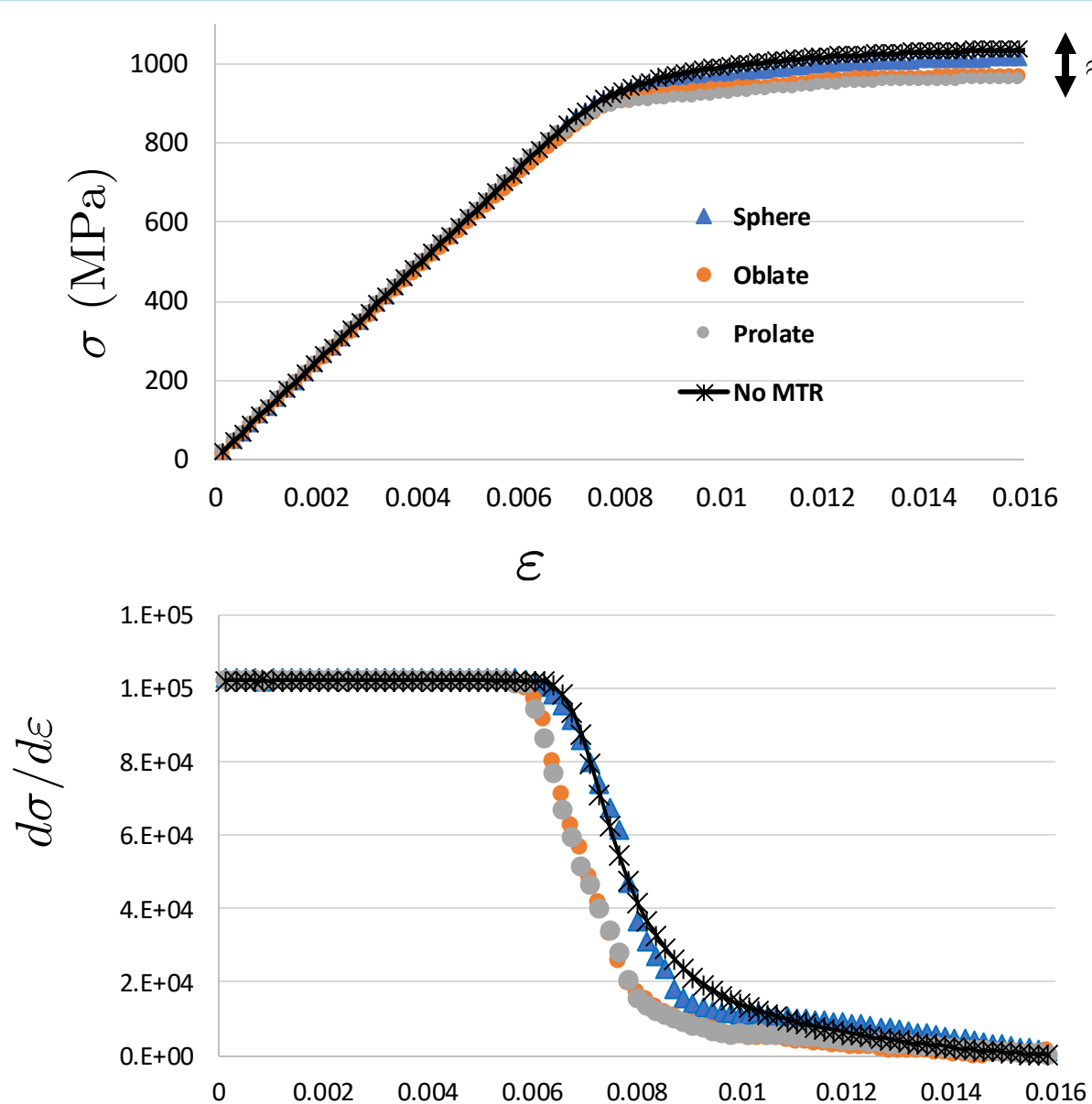


Levenberg Maquardt
algorithm based

$$\alpha \in \operatorname{argmin}_{\alpha} \left(\sum_{i=1}^3 (Hist_{ref} - Hist_{rand}(\phi_i + \alpha_i))^2 \right)$$

$$Hist_{rand}(\phi + \alpha) \approx Hist_{rand}(\phi) + J\alpha$$

$$(J^T J) \alpha = J^T [Hist_{ref} - Hist_{rand}(\phi)],$$



Conclusions



- Rapidité
- Simplicité d'implémentation
- Homogénéisation directe
- Résolution efficace des équations aux dérivées partielles (EDP)



- Limitation à la périodicité [lebensohn2025; Gelebart2024]
- Difficulté pour les géométries complexes
- Difficultés avec les forts gradients de propriétés.
- Plus galère pour les problèmes non linéaires
- Sensibilité à la résolution.

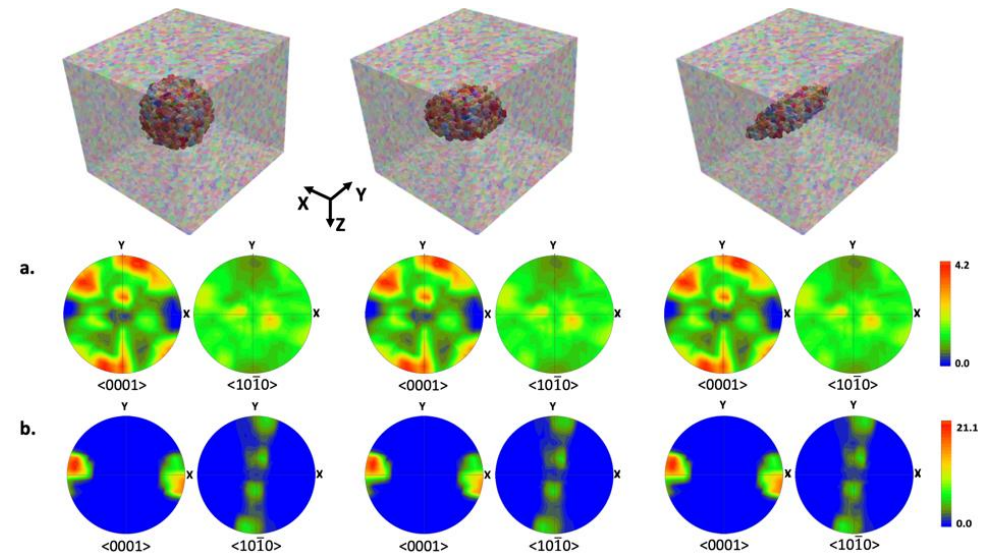
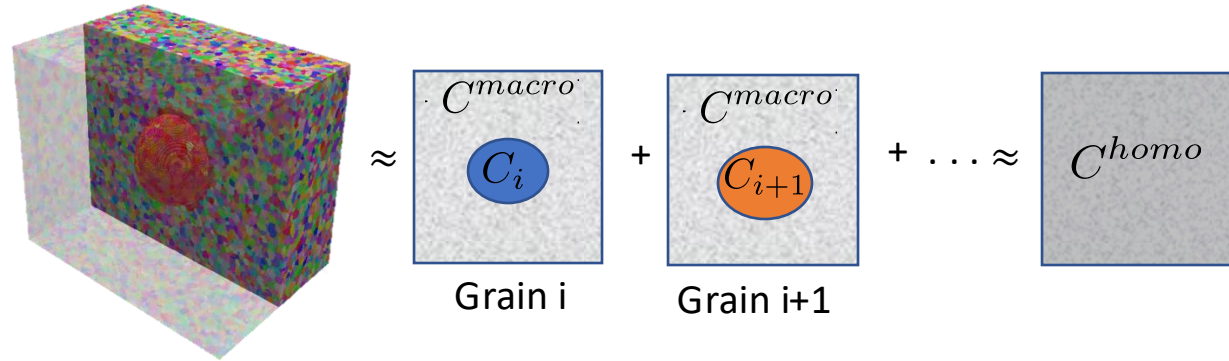


Schéma auto-cohérent

Avec :
S. HEMERY

Représentation selon une approche auto-cohérente.



$$\varepsilon_i = \{\mathbb{I} + \mathbb{P} : [C_i - C^{macro}]\}^{-1} : \varepsilon^0$$

$$\mathbb{P} := \mathbb{S}_{\mathbb{E}} : (C^{macro})^{-1}$$

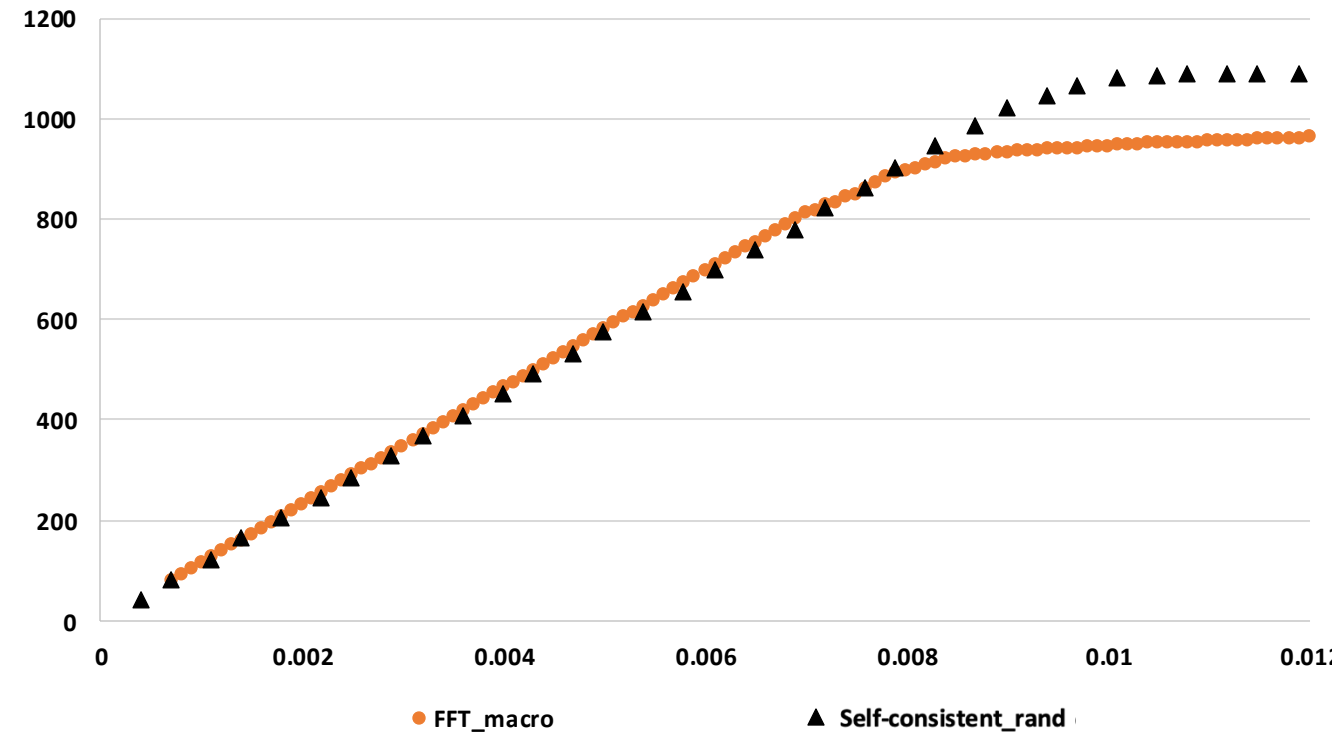
Crystal plasticity model

$$\dot{\gamma}^s(x) = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|m^s(x) : \sigma(x)|}{\tau_0^s} \right)^n \text{sgn}(m^s(x) : \sigma(x))$$

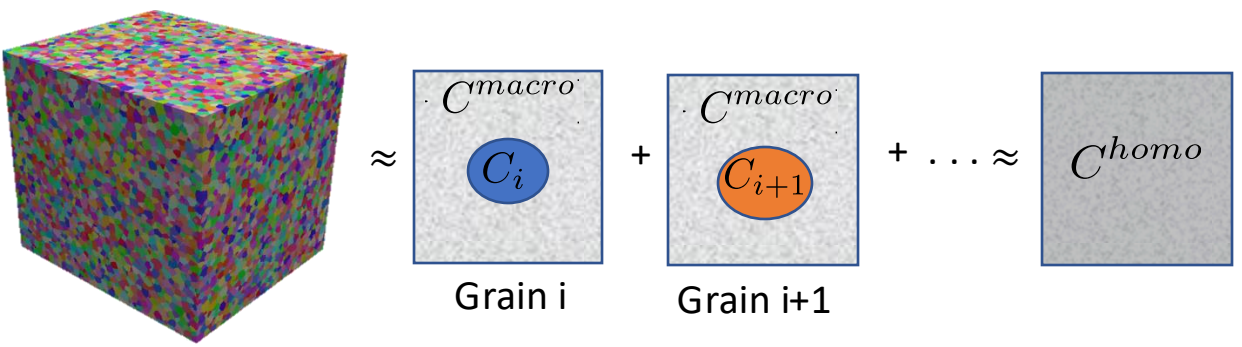
$$\dot{\varepsilon}^p(x) = \sum_{s=1}^N m^s(x) \dot{\gamma}^s(x)$$

➤ Pas d'effet de la macro-zone

ε_i représente la déformation mésoscopique du grain i.



Représentation selon une approche auto-cohérente.



$$\varepsilon_i = \{\mathbb{I} + \mathbb{P} : [C_i - C^{macro}]\}^{-1} : \varepsilon^0$$

$$\mathbb{P} := \mathbb{S}_{\mathbb{E}} : (C^{macro})^{-1}$$

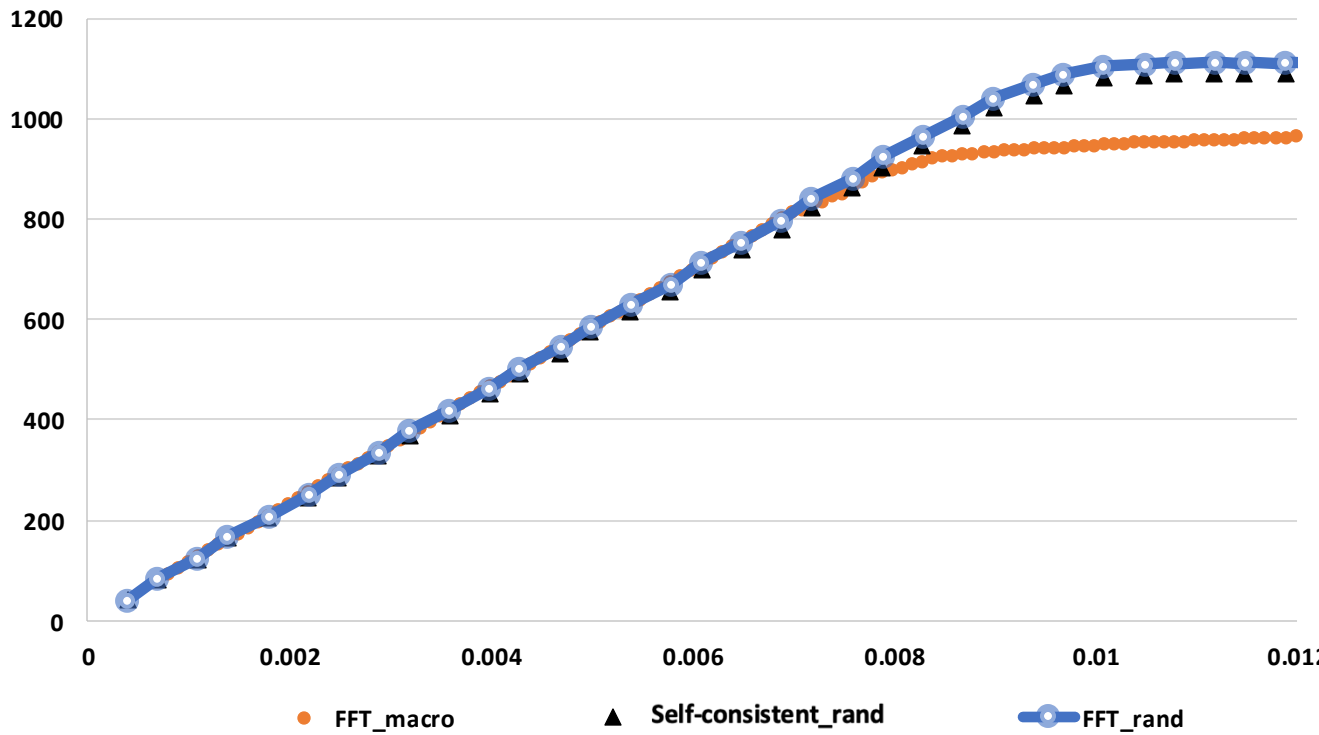
Crystal plasticity model

$$\dot{\gamma}^s(x) = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|m^s(x) : \sigma(x)|}{\tau_0^s} \right)^n sgn(m^s(x) : \sigma(x))$$

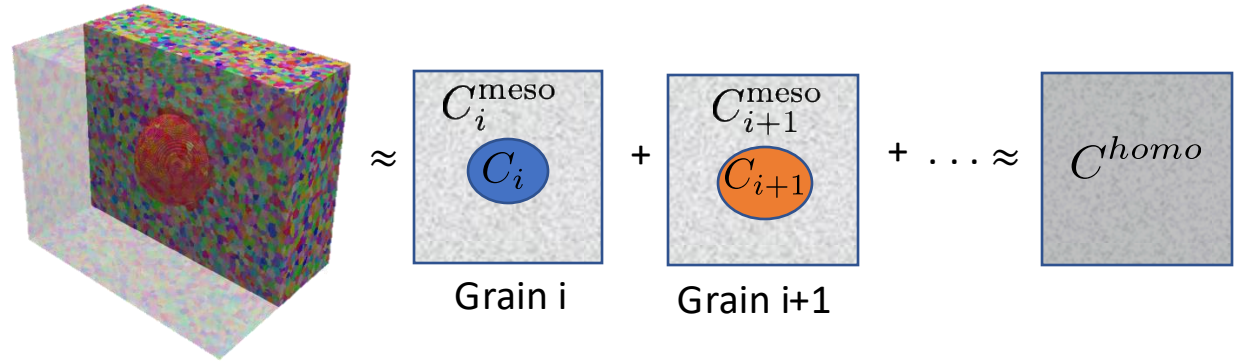
$$\dot{\varepsilon}^p(x) = \sum_{s=1}^N m^s(x) \dot{\gamma}^s(x)$$

- C'est mieux sans macro
- Et maintenant?

ε_i représente la déformation mésoscopique du grain i.



Représentation selon une approche auto-cohérente.



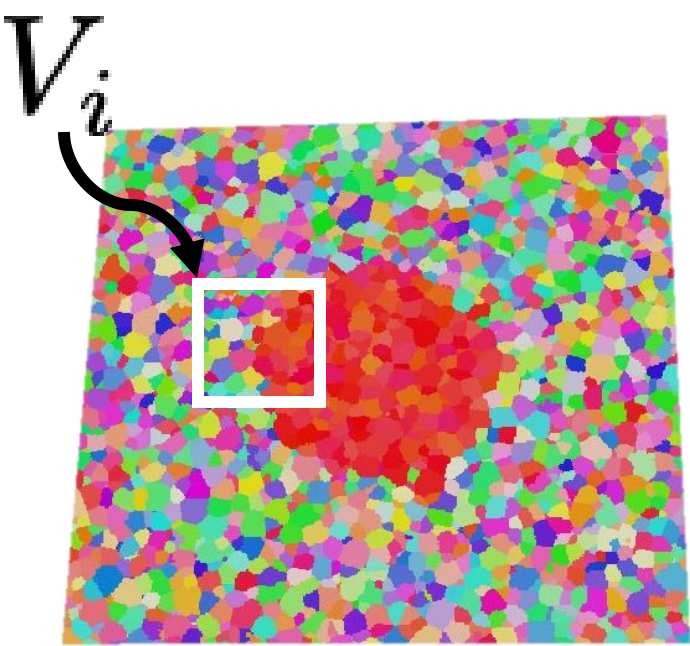
$$\varepsilon_i = \{\mathbb{I} + \mathbb{P} : [C_i - C_i^{\text{meso}}] + \}^{-1} : \varepsilon^0$$

$$\mathbb{P} := \mathbb{S}_{\mathbb{E}} : (C_i^{\text{meso}})^{-1}$$

Crystal plasticity model

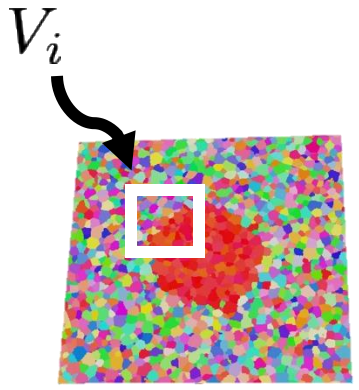
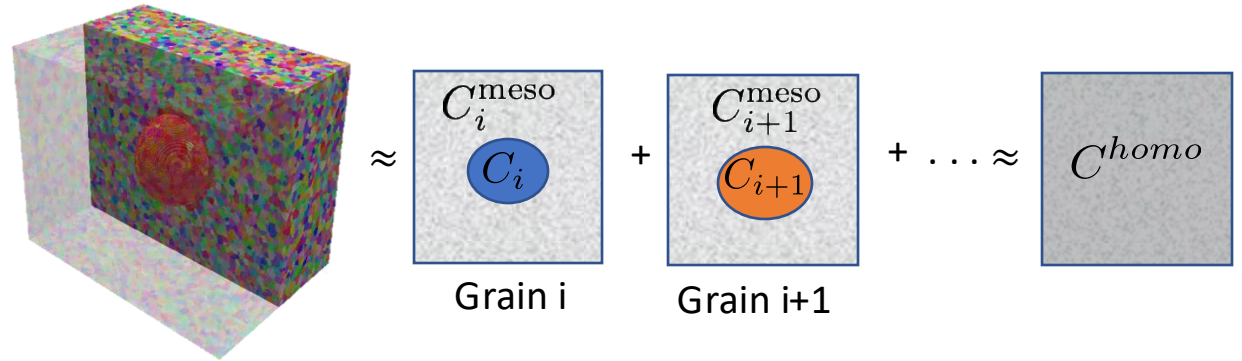
$$\dot{\gamma}^s(x) = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|m^s(x) : \sigma(x)|}{\tau_0^s} \right)^n \text{sgn}(m^s(x) : \sigma(x))$$

$$\dot{\varepsilon}^p(x) = \sum_{s=1}^N m^s(x) \dot{\gamma}^s(x)$$



ε_i représente la déformation mésoscopique du grain i.

Représentation selon une approche auto-cohérente.

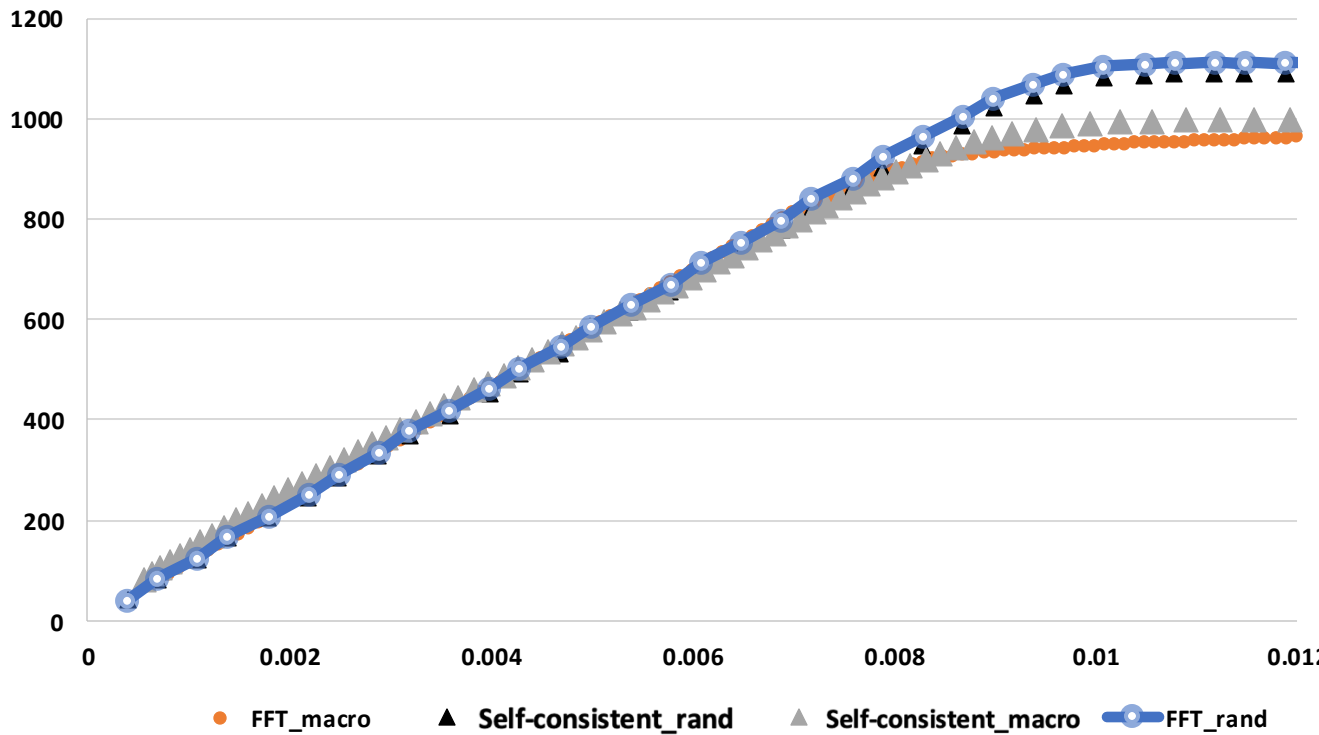


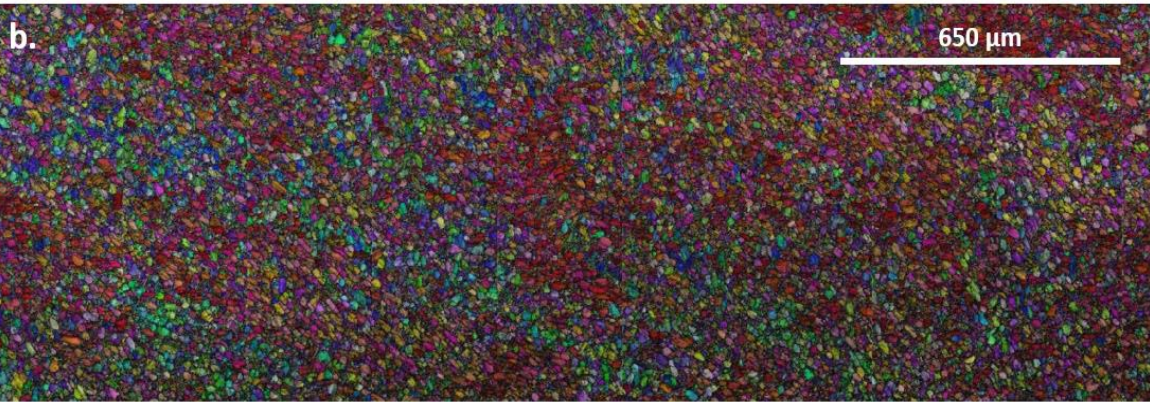
$$\varepsilon_i = \{ \mathbb{I} + \mathbb{P} : [C_i - C_i^{meso}] + \}^{-1} : \varepsilon^0$$
$$\mathbb{P} := \mathbb{S}_{\mathbb{E}} : (C_i^{meso})^{-1}$$

Crystal plasticity model

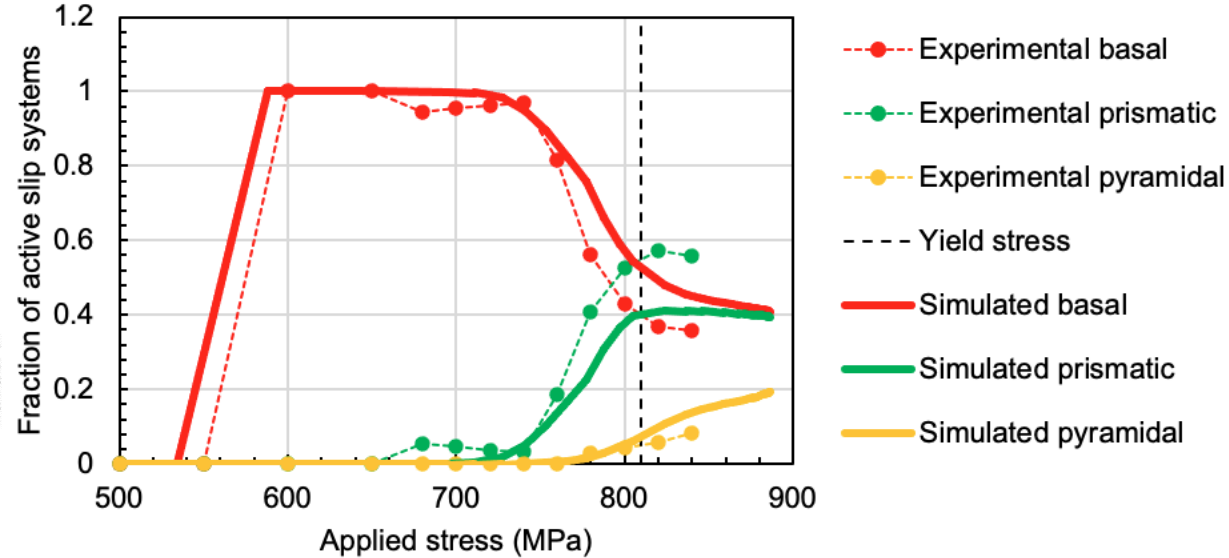
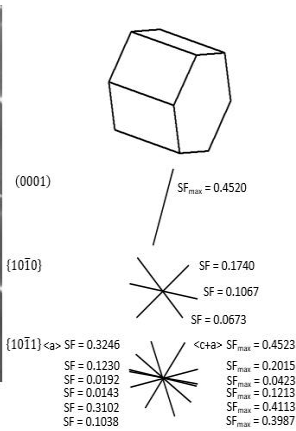
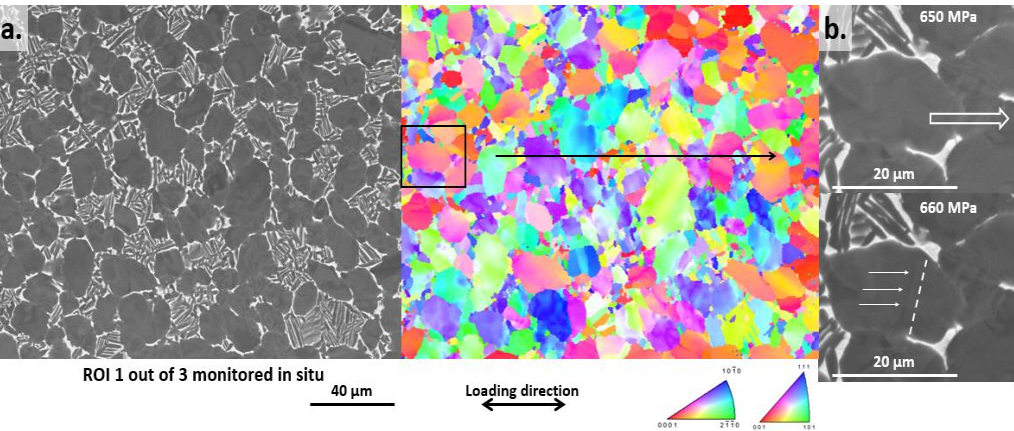
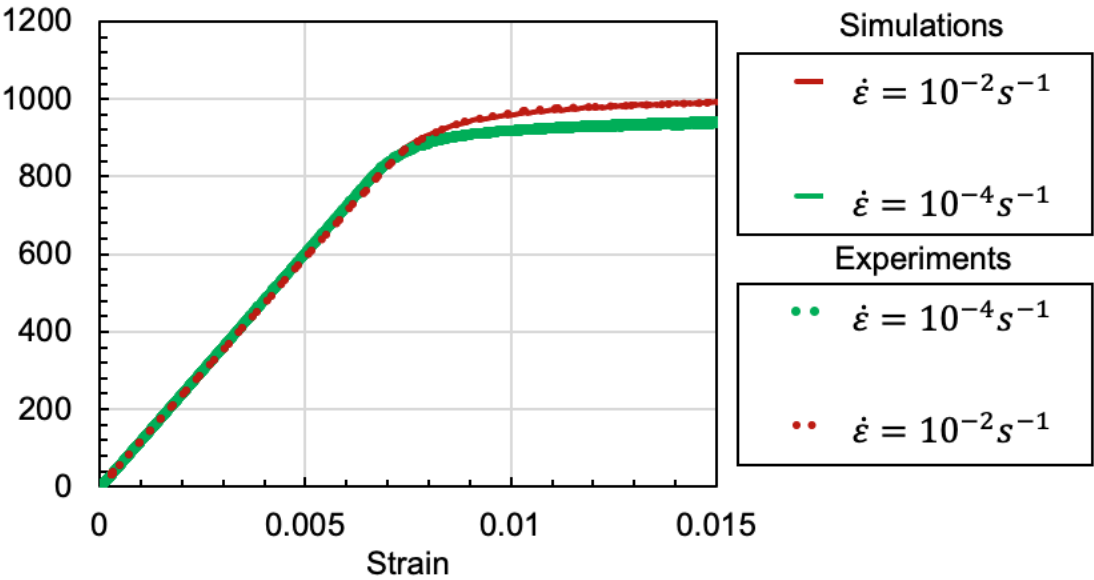
$$\dot{\gamma}^s(x) = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|m^s(x) : \sigma(x)|}{\tau_0^s} \right)^n sgn(m^s(x) : \sigma(x))$$
$$\dot{\varepsilon}^p(x) = \sum_{s=1}^N m^s(x) \dot{\gamma}^s(x)$$

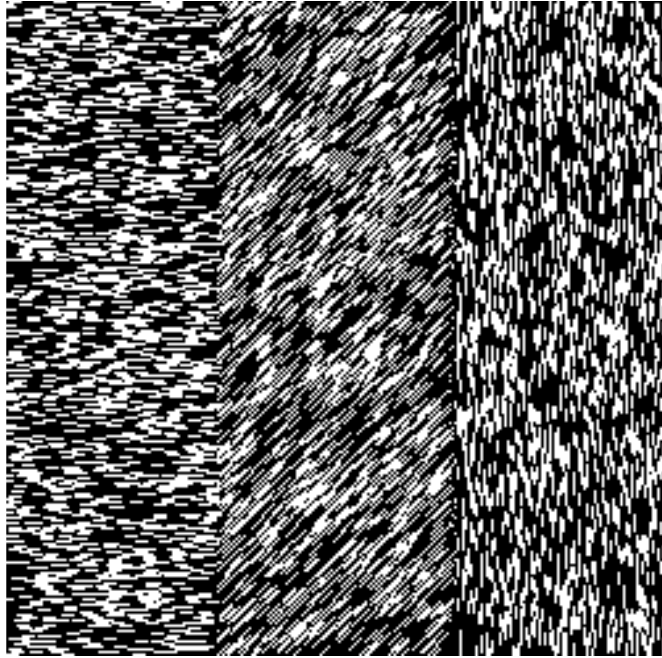
ε_i représente la déformation mésoscopique du grain i.





Activité de glissement expérimentale VS simulée





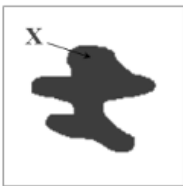
MÉTHODE MORPHOLOGIQUE?

- Covariogramme
- Tenseur de structure

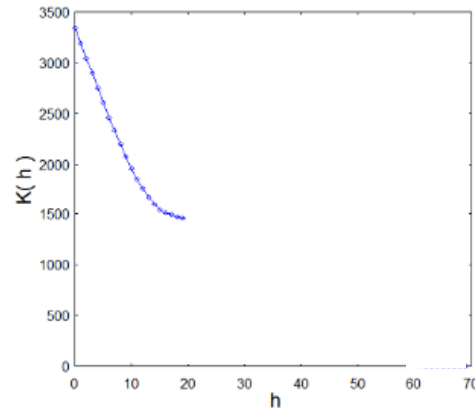
Avec :

H. EL MANSORY;
M. GUEGUEN;
D. HALM

Covariogramme



$h = 0$



Avec Z un domaine borné, X un ensemble dans Z et $h = (|h|, \alpha)$ un vecteur de $\mathbb{R}^d$:

- Covariogramme géométrique

- $K_X(h) = \mu_d(X \cap X_h)$

→ Mesure de l'intersection entre X et sa translation X_h

- Covariance

$$C_X(x, x+h) = P\{x \in X, x+h \in X\}$$

→ Probabilité qu'un point et sa translation soient dans X

Si X est stationnaire

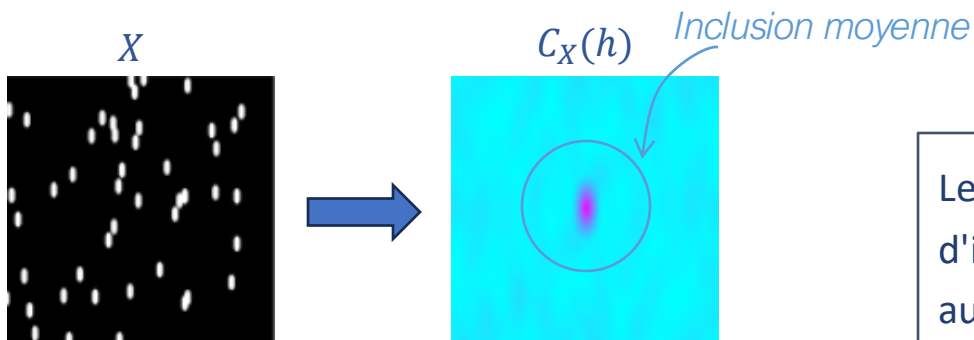
$$C_X(x, x+h) = C_X(h)$$

- Si X est ergodique:

$$C(h) = \frac{K_X(h)}{\mu_d(Z)} = V_f(X \cap X_{-h}), \quad C(0) = V_f(X)$$

Covariogramme [P. Doumalin et al]

Exemple:

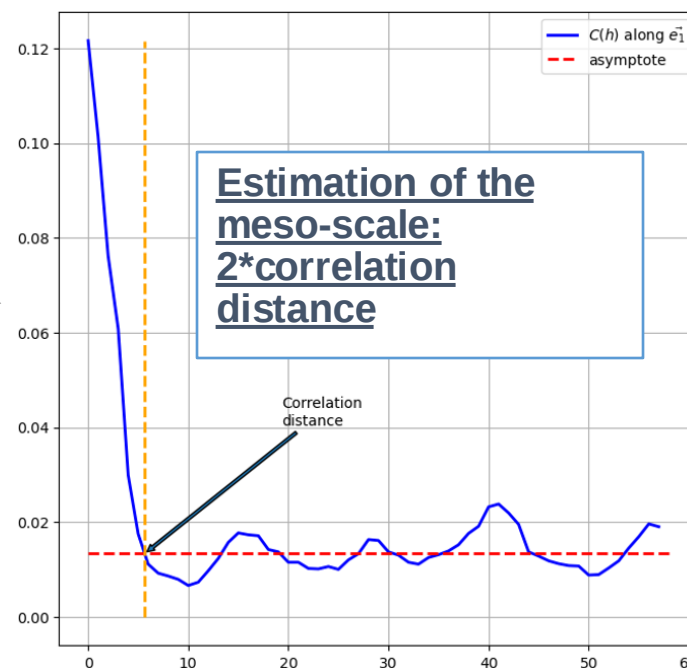
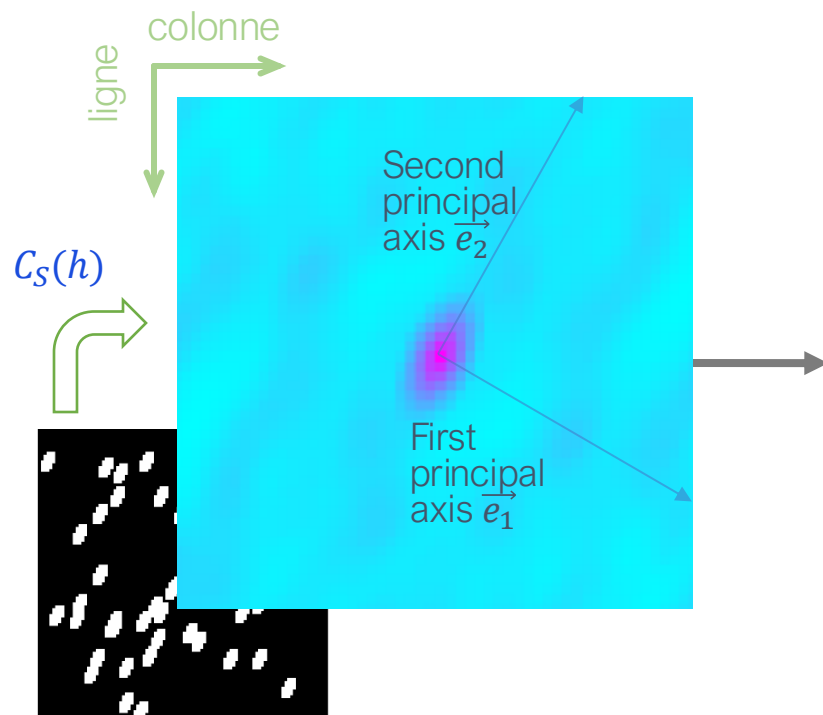


Le covariogramme donne la distribution de l'ensemble aléatoire d'inclusions. Le centre donne la forme moyenne des inclusions, liée aux axes principaux et à l'échelle méso.

A lot of other data:

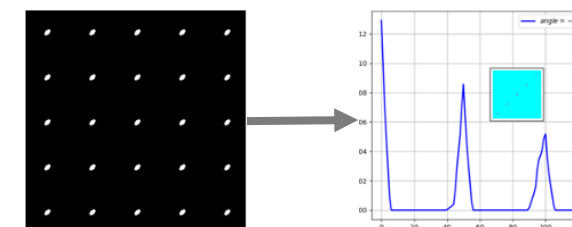
- Volume fraction
- Orientation
- Presence of scales or periodicity
- ... (see Fig 36.1)

Covariogramme



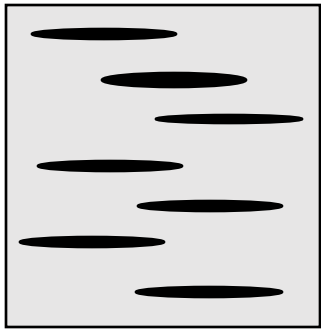
Is there a way to resume
the covariogram
description in only one
data ?

*Fa covariogram and its projection along 90° , 45° , 0° and -45° oriented axis.
Post-treatment computed on the 90° projection*



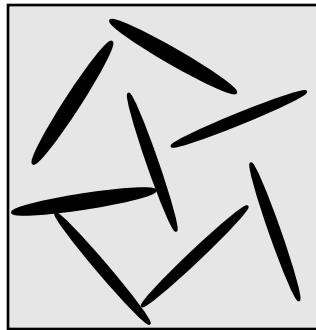
*Fig 36.2: Projection of a covariogram,
computed on a periodic image*

Unidirectionnel



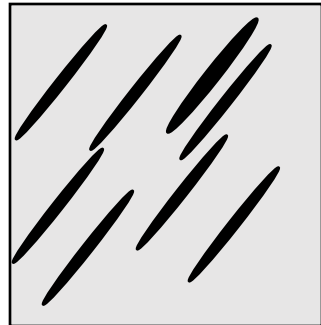
$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Isotrope

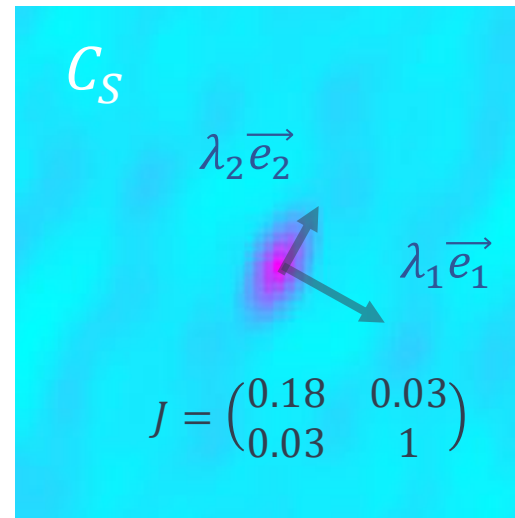


$$J = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{pmatrix}$$

Unidirectionnel



$$J = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$$



Axe principal orienté selon les vecteurs propres du tenseur de structure du covariogramme

$$J = \begin{pmatrix} J_{xx} & -J_{xy} \\ -J_{yx} & J_{yy} \end{pmatrix}, \text{ avec}$$

$$\begin{cases} J_{xx} = \int_S y^2 \cdot C(h(x, y)) dx dy \\ J_{xy} = \int_S xy \cdot C(h(x, y)) dx dy \\ J_{yy} = \int_S x^2 \cdot C(h(x, y)) dx dy \end{cases}$$

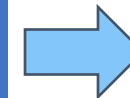


→ L'orientation θ le long du deuxième vecteur propre.

$$\theta = \arctan \left(\frac{\vec{e}_2 \cdot \vec{y}}{\vec{e}_2 \cdot \vec{x}} \right)$$

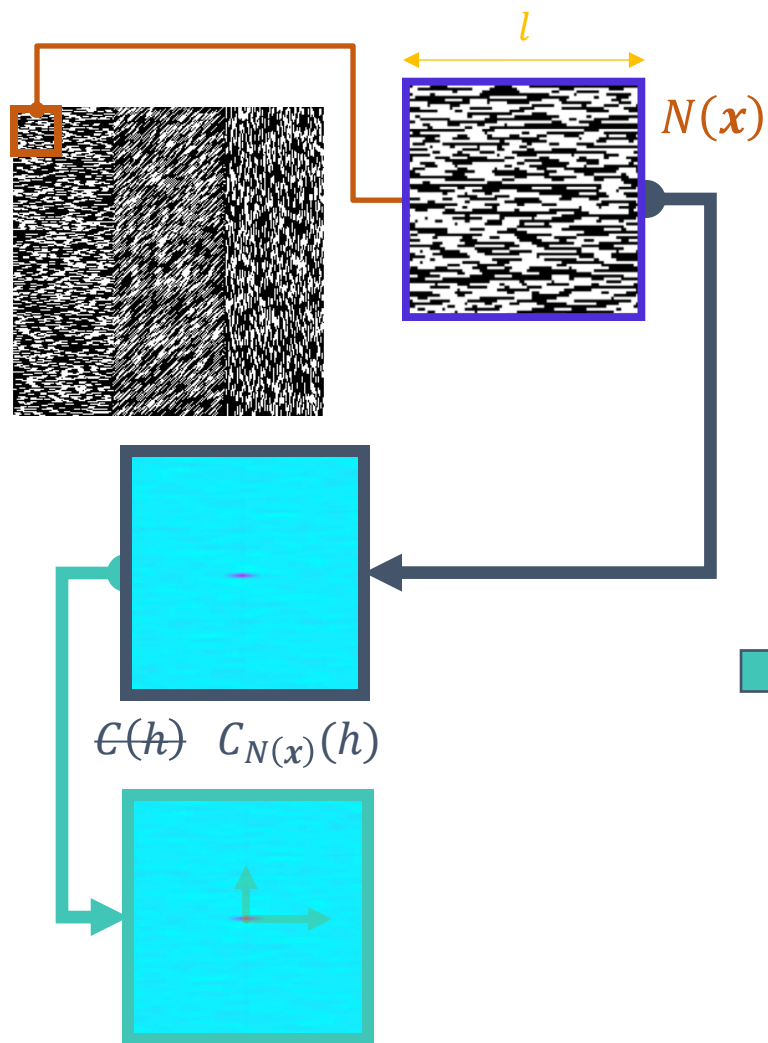
→ Le facteur de cohérence f (anisotropie) basé sur le rapport des valeurs propres.

$$f = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \begin{cases} f = 1 : \\ \text{full anisotropy} \\ f = 0 : \\ \text{No anisotropy} \end{cases}$$



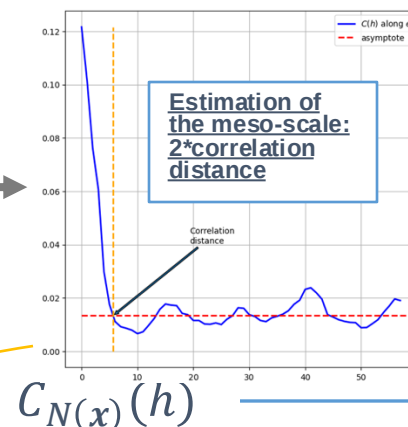
Description explicite de la morphologie moyenne des inclusions (forme et orientation)

Méthode:

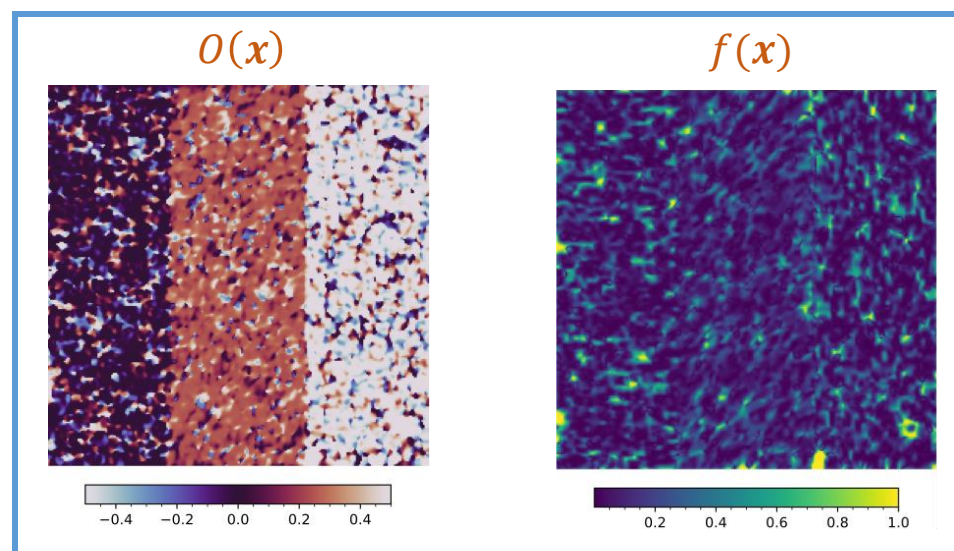


Pour tous les points :
Sélection du voisinage (carré violet)

$$N(x) = \left\{ x + \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix}, -\frac{l}{2} \leq k_x, k_y \leq \frac{l}{2} \right\}$$

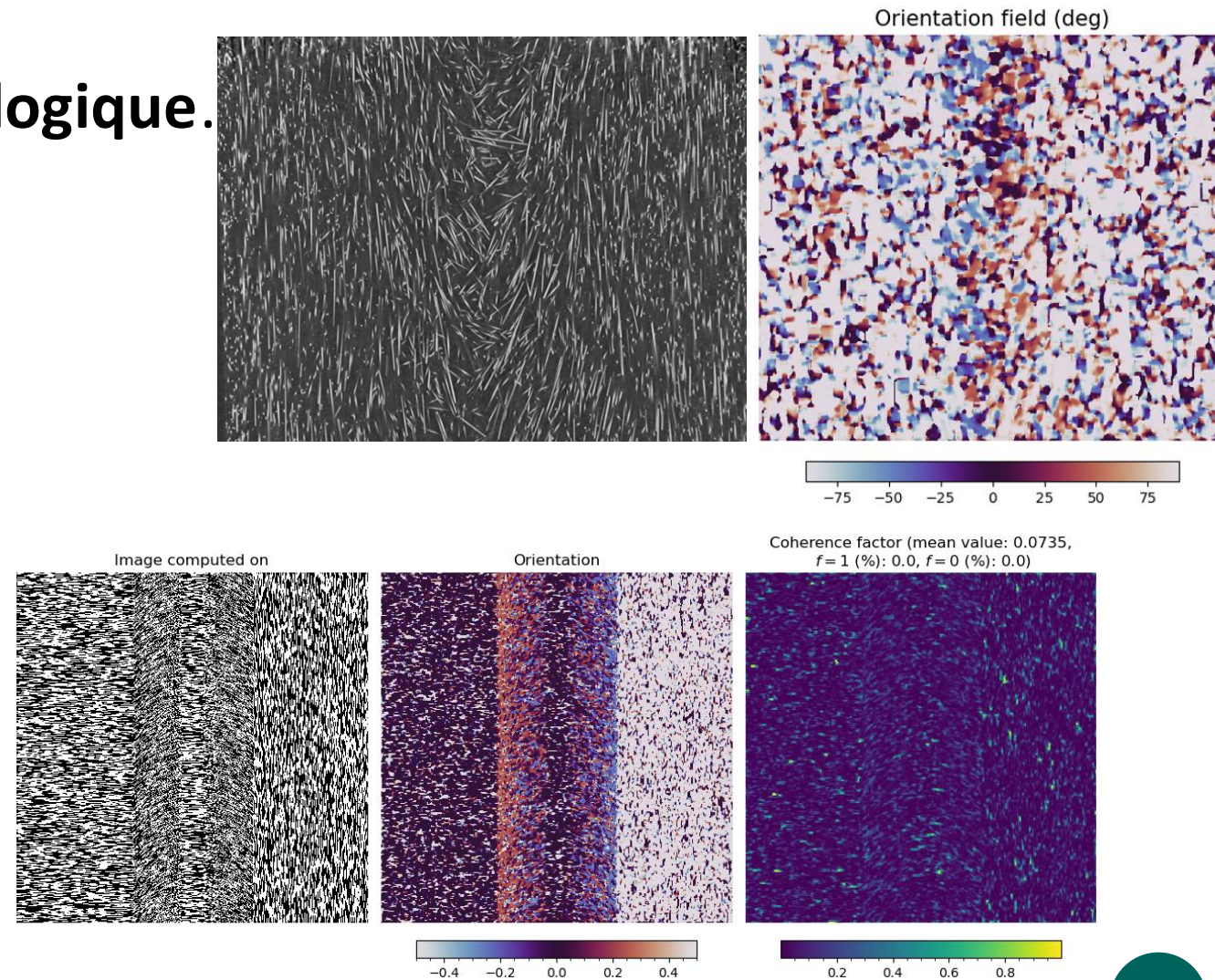


Ici, l ,
représente
l'échelle méso.



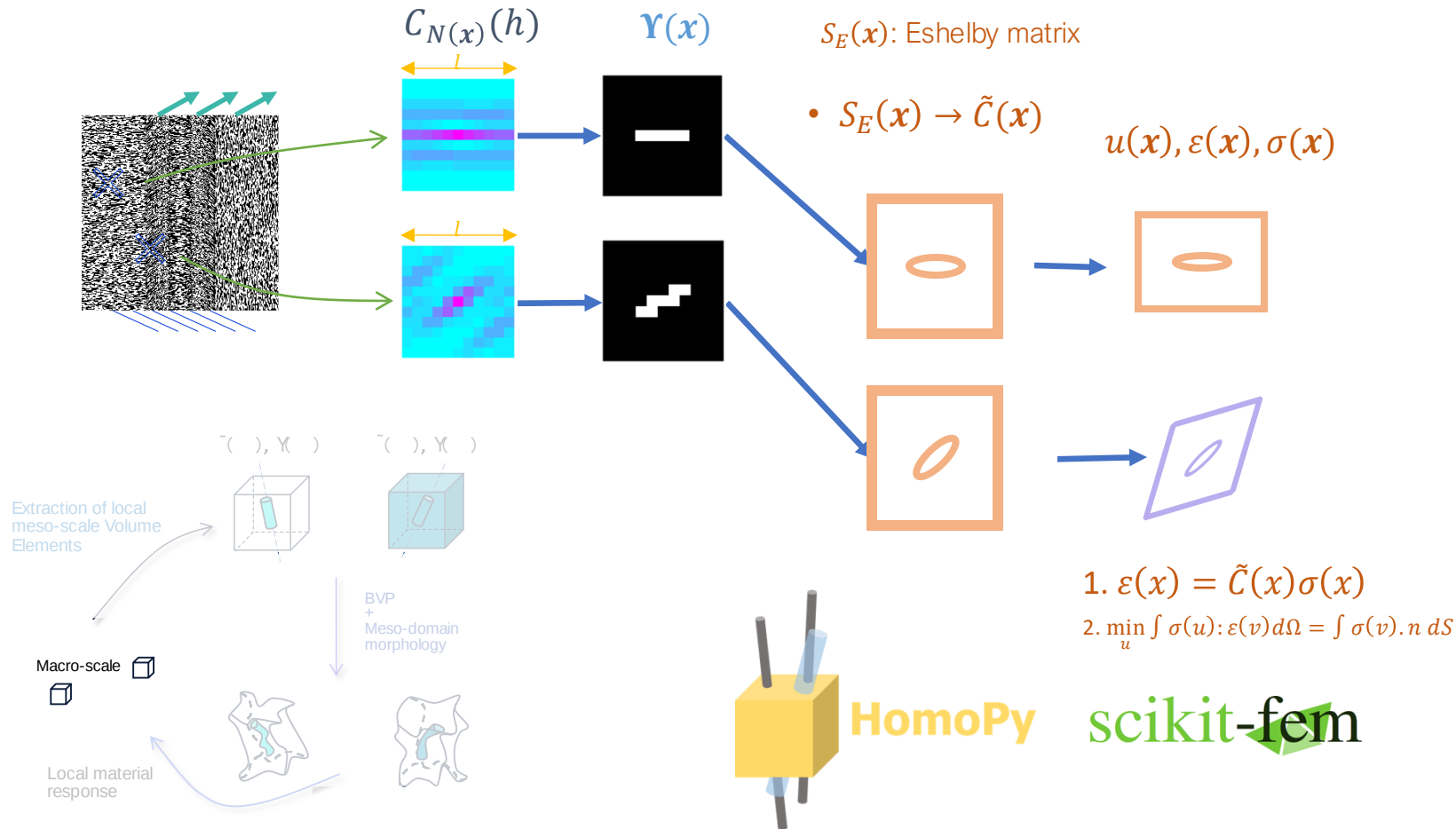
Description
locale de la
morphologie
obtenue

- Homogénéisation locale
- Mise en place du modèle morphologique.



Homogénéisation locale

[Scikit-fem] Gustafsson, T., & McBain, G. D. (2020). scikit-fem: A Python package for finite element assembly. Journal of Open Source Software, 5(52), 2369. <https://doi.org/10.21105/joss.02369>



Homogénéisation locale :

Morphologie locale de la microstructure: $\Upsilon(x)$
 $\tilde{C} \rightarrow \tilde{C}(x)$

Deux méthodes :

1. Relation analytique $\varepsilon(x) = \tilde{C}^{-1}(x)\sigma_0$
2. [Scikit-fem] : Méthode des éléments finis

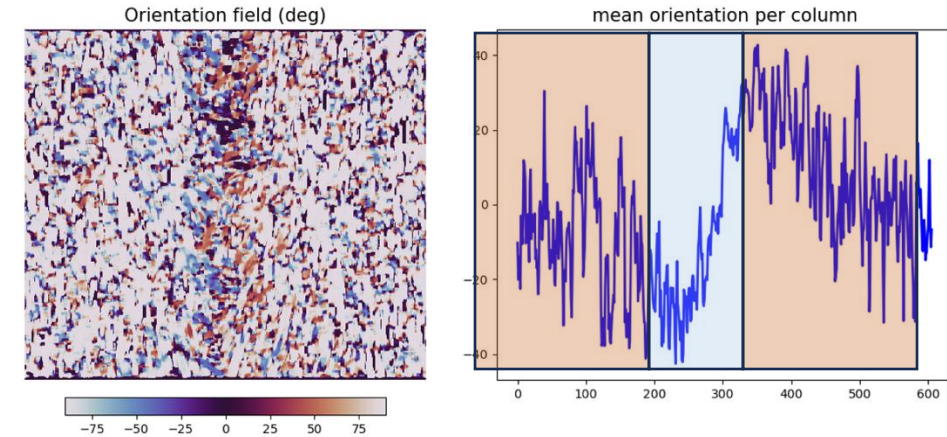
Définition du problème aux limites :

- Méthode analytique : mêmes conditions aux limites (C.L.) pour tous les points (hypothèse de milieu infini)
- Méthode FEM : les conditions aux limites sont définies sur les frontières à l'échelle macroscopique

MODÈLE Morpho : $\Upsilon(x)$

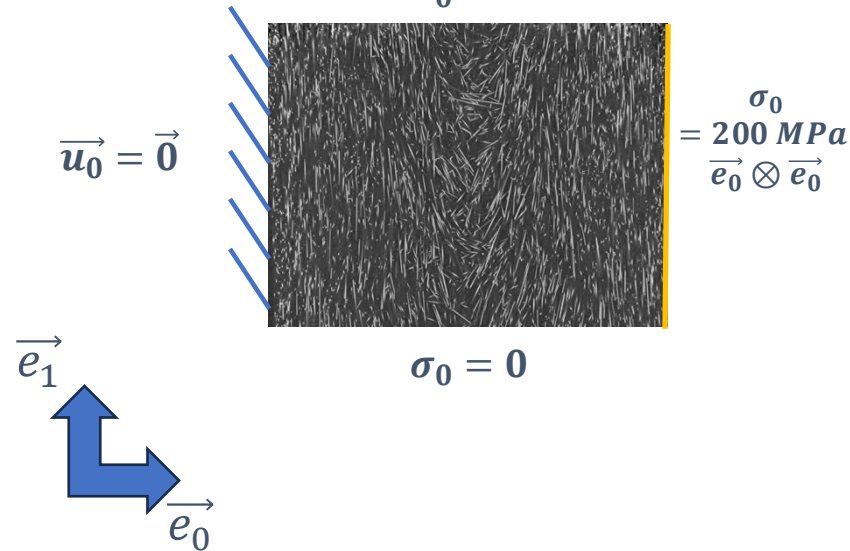
[Homopy] Nicolas Christ. (2023). Extraweich/homopy: v1.1.0 (1.1.0). Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7967631>

[Scikit-fem] Gustafsson, T., & McBain, G. D. (2020). scikit-fem: A Python package for finite element assembly. *Journal of Open Source Software*, 5(52), 2369. <https://doi.org/10.21105/joss.02369>

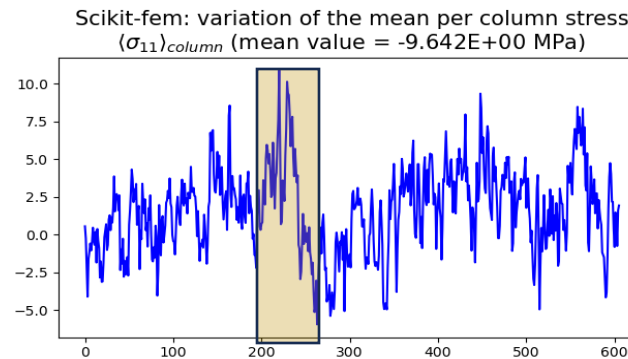
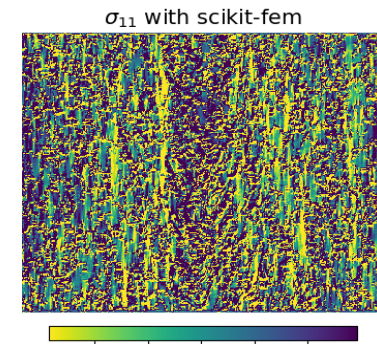
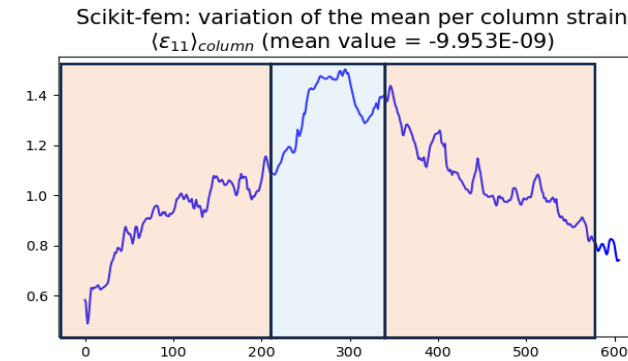
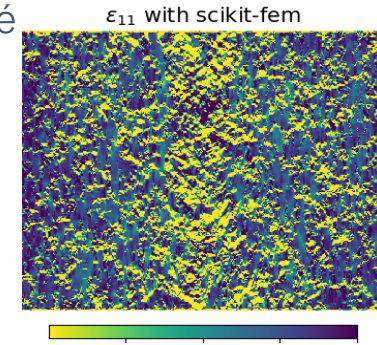
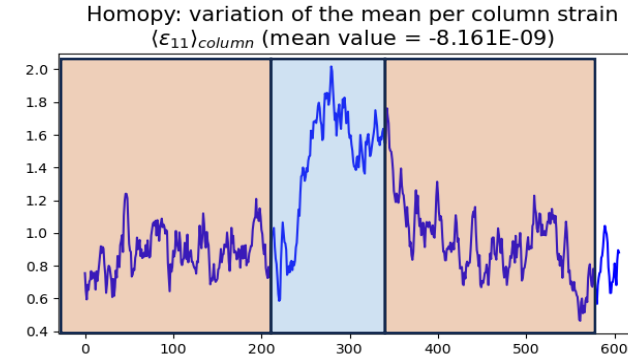
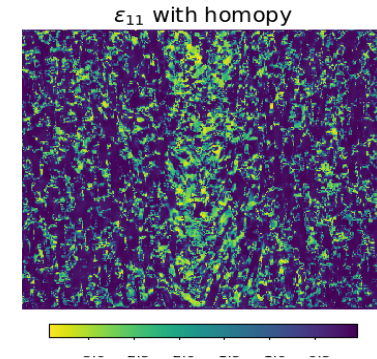


$\Upsilon(x)$

$$\sigma_0 = 0$$



- Zones macroscopiques détectées.
- La moyenne des déformations par colonne (Fem) est plus lisse en raison des degrés de liberté dépendants.



Concentration de contrainte détectée
Jusqu'à 10 fois la contrainte moyenne.

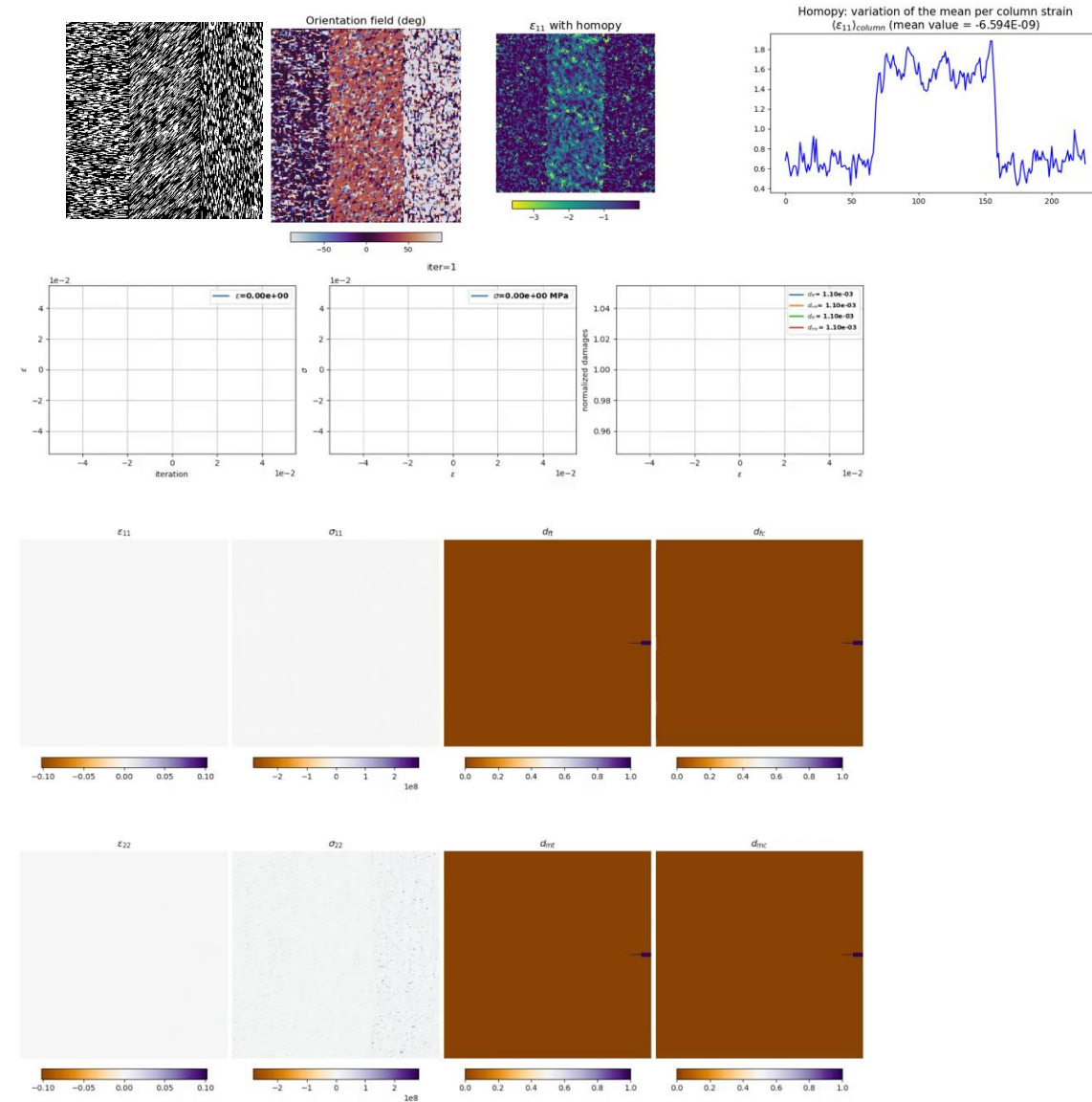
Conclusions



- Utilisation directe sur l'image brute
- Morphologie locale avec J
- Effets non locaux pris en compte
- Implémentation simplifiée



- Toujours la question de la taille de fenêtre
- Passage en endommagement en prometteur mais....
- Besoin mémoire important





« Il n'y a pas de bonnes ou de mauvaises homogénéisations. Moi, si je devais résumer ma vie aujourd'hui avec vous, je dirais que ce sont d'abord des rencontres avec des méthodes. »

Merci