



**HAL**  
open science

# Modélisation du couplage changement de phase-mécanique par la méthode des champs de phases et les techniques d'homogénéisation

Kais Ammar, Benoit Appolaire, Georges Cailletaud, Frédéric Feyel, Samuel Forest

► **To cite this version:**

Kais Ammar, Benoit Appolaire, Georges Cailletaud, Frédéric Feyel, Samuel Forest. Modélisation du couplage changement de phase-mécanique par la méthode des champs de phases et les techniques d'homogénéisation. 9e colloque national en calcul des structures, May 2009, Giens, France. pp.389-394. hal-00399552

**HAL Id: hal-00399552**

**<https://hal.science/hal-00399552>**

Submitted on 26 Oct 2018

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

# Modélisation du couplage changement de phase-mécanique par la méthode des champs de phases et les techniques d'homogénéisation

K. Ammar<sup>1</sup>, B. Appolaire<sup>2</sup>, G. Cailletaud<sup>1</sup>, F. Feyel<sup>1,3</sup>, S. Forest<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Mines ParisTech, Centre des Matériaux / CNRS UMR 7633  
BP 87, 91003 Evry, France.  
{kais.ammar, Georges.Cailletaud, samuel.forest}@ensmp.fr

<sup>2</sup> LSG2M, Ecole des Mines de Nancy, Parc de Saurupt.  
54042 Nancy Cedex, France  
benoit.appolaire@mines.inpl-nancy.fr

<sup>3</sup> ONERA, DMSE LCME.  
29 Ave Div Leclerc, BP 72, 92322 Chatillon, France  
frederic.feyel@onera.fr

---

**Résumé** — Nous présentons un modèle couplé mécanique/champs de phases/diffusion pour les alliages binaires, développé dans le cadre général de la thermodynamique des milieux continus. Ce modèle est basé sur la théorie d'équilibre des microforces, proposée par Gurtin [1]. Pour étudier les effets des contraintes mécaniques sur l'évolution morphologique des microstructures hétérogènes et la cinétique de transformation, des techniques d'homogénéisation, à savoir le modèle de Voigt/Taylor et le modèle de Reuss/Sachs, sont présentées dans la formulation.

**Mots clés** — champs de phases, équilibre des microforces, comportement élastoplastique, techniques d'homogénéisation, méthode des éléments finis.

---

## 1 Introduction

Dans le cadre général de la thermodynamique des milieux continus, nous proposons une formulation théorique et sa programmation par éléments finis de modèles couplés mécanique/champs de phases/diffusion pour les alliages binaires. Cette formulation est basée sur la théorie d'équilibre des microforces, proposée par Gurtin (Gurtin, 1996), où une équation de bilan supplémentaire, fonction du paramètre d'ordre et de son gradient, est introduite.

Ce modèle est bien adapté à l'étude des modèles à interface diffuse à épaisseur non nulle et la compréhension des évolutions morphologiques des microstructures hétérogènes (répartition des précipités et croissance de grains...), dans lequel l'état local d'une microstructure hétérogène est décrit par des champs conservatifs de concentration  $c$ , des champs non-conservatifs de paramètre d'ordre  $\phi$ , associé à la nature des phases, de la déformation élastique  $\xi^e$  et les variables internes  $V_k$  dans le cas d'un matériau écrouissable. La fonctionnelle d'énergie libre totale est basée sur l'approche de Ginzburg-Landau, représentée par une densité d'énergie chimique  $f_0(c, \phi)$ , une densité d'énergie mécanique  $\mathcal{W}(\xi^e, \phi, V_k)$  et un terme quadratique en gradient, relié à l'énergie de l'inter-

face :

$$F(\underline{\xi}^e, c, \phi, \nabla\phi, V_k) = \int [f_0(c, \phi) + \mathcal{W}(\underline{\xi}^e, \phi, V_k) + \frac{\alpha}{2}(\nabla\phi)^2]dV$$

La densité d'énergie chimique est exprimée comme la somme d'une contribution d'une fonction  $g(\phi)$  de type "double puits" pénalisant énergétiquement l'interface et d'une énergie homogène  $f_0(c, \phi)$ . Cette dernière se présente comme l'interpolation des énergies libres des deux phases ( $f_\alpha, f_\beta$ ), par l'intermédiaire d'une fonction polynomiale  $h(\phi)$  [2, 3].

$$f_0(c, \phi) = h(\phi)f_\alpha(c) + [1 - h(\phi)]f_\beta(c) + Wg(\phi)$$

avec  $W$  est la hauteur de la barrière d'énergie entre les deux phases.  $g(\phi)$  et  $h(\phi)$  sont deux polynômes spécifiques, qui ont été choisis sous la forme suivante :

$$h(\phi) = \phi^2(3 - 2\phi) \quad \text{et} \quad g(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2$$

Les densités d'énergie libre des deux phases ( $f_\alpha, f_\beta$ ) ont été décrites par une forme quadratique, fonction seulement de la concentration [4] :

$$f_i(c) = \frac{1}{2}k_i(c - A_i)^2 \quad \text{avec} \quad i = \{\alpha, \beta\}$$

Les constantes  $k_\alpha, k_\beta$  représentent les courbures des énergies libres de chacune des phases, décrites par des paraboles.  $A_\alpha, A_\beta$  sont respectivement les concentrations d'équilibre des deux phases  $\alpha$  et  $\beta$ , données par la courbe de coexistence du diagramme de phase et correspondant aux minima des  $f_\alpha$  et  $f_\beta$ .

Le découplage entre le comportement élastique et l'écroutissage permet d'écrire l'énergie mécanique sous la forme suivante :

$$\mathcal{W} = \mathcal{W}^e(\underline{\xi}^e, \phi) + \mathcal{W}^p(V_k, \phi) = \frac{1}{2}(\underline{\xi} - \underline{\xi}^p - \underline{\xi}^*) : \underline{\underline{C}}_{eff} : (\underline{\xi} - \underline{\xi}^p - \underline{\xi}^*) + \mathcal{W}^p(V_k, \phi)$$

où la déformation totale macroscopique est la somme de la déformation élastique  $\underline{\xi}^e$ , de la déformation plastique  $\underline{\xi}^p$  et de la déformation libre de transformation  $\underline{\xi}^*$  et  $\underline{\underline{C}}_{eff}$  est le tenseur des modules d'élasticité locaux.

## 2 Champs de phases et homogénéisation

Dans le modèle proposé, le comportement élastoplastique de chaque phase est traité indépendamment et le comportement local du matériau s'obtient en utilisant des techniques d'homogénéisation. Deux modèles d'homogénéisation ont été appliqués, à savoir le modèle de Voigt/Taylor et le modèle de Reuss/Sachs, afin de donner une description cohérente de l'interface et remplacer la microstructure hétérogène par un milieu dit homogène équivalent. En conséquence, la densité d'énergie mécanique est définie en fonction des propriétés élastiques et des variables internes des deux phases :

$$\mathcal{W} = \phi \mathcal{W}_\alpha + (1 - \phi) \mathcal{W}_\beta$$

$$\text{avec} \quad \mathcal{W}_k = \frac{1}{2}(\underline{\xi}_k - \underline{\xi}_k^p - \underline{\xi}_k^*) : \underline{\underline{C}}_k : (\underline{\xi}_k - \underline{\xi}_k^p - \underline{\xi}_k^*) + \frac{1}{3}C_k \underline{\alpha}_k : \underline{\alpha}_k + \frac{1}{2}b_k Q_k r_k^2 \quad \text{et} \quad k = \{\alpha, \beta\}$$

avec  $\mathcal{W}_\alpha$  et  $\mathcal{W}_\beta$  sont les densités d'énergie mécanique des deux phases, décrites par des fonctions quadratiques de ces variables.  $\underline{\underline{C}}_k$  et  $\underline{\underline{S}}_k$  sont respectivement les tenseurs d'élasticité et de souplesse de chaque phase,  $V_k = \{\underline{\xi}_k^p, \underline{\alpha}_k, r_k\}$  sont les variables internes pour chaque phase, de nature scalaire ou tensorielle, introduites pour décrire les phénomènes d'écroutissage et  $A_k = (-\underline{\sigma}_k, \underline{X}_k, R_k)$  est l'ensemble des forces thermodynamiques associées aux variables internes.

Le modèle considère soit l'homogénéité des déformations (Voigt/Taylor) soit l'homogénéité des contraintes (Reuss/Sachs) dans l'interface diffuse entre les deux phases. Ainsi, les propriétés mécaniques effectives de la microstructure hétérogène varient continûment entre les propriétés des deux phases en faisant intervenir leur fraction volumique :

#### modèle de Voigt/Taylor

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\varepsilon}}_\alpha &= \underline{\underline{\varepsilon}}_\beta = \underline{\underline{\varepsilon}} \\ \underline{\underline{\sigma}} &= \phi \underline{\underline{\sigma}}_\alpha + (1 - \phi) \underline{\underline{\sigma}}_\beta \end{aligned}$$

$$\underline{\underline{C}}_{eff} = \phi \underline{\underline{C}}_\alpha + (1 - \phi) \underline{\underline{C}}_\beta$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^e = \underline{\underline{C}}_{eff}^{-1} : (\phi \underline{\underline{C}}_\alpha : \underline{\underline{\varepsilon}}_\alpha^e + (1 - \phi) \underline{\underline{C}}_\beta : \underline{\underline{\varepsilon}}_\beta^e)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^p = \underline{\underline{C}}_{eff}^{-1} : (\phi \underline{\underline{C}}_\alpha : \underline{\underline{\varepsilon}}_\alpha^p + (1 - \phi) \underline{\underline{C}}_\beta : \underline{\underline{\varepsilon}}_\beta^p)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \underline{\underline{C}}_{eff}^{-1} : (\phi \underline{\underline{C}}_\alpha : \underline{\underline{\varepsilon}}_\alpha^* + (1 - \phi) \underline{\underline{C}}_\beta : \underline{\underline{\varepsilon}}_\beta^*)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}}_{eff} : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^*)$$

$$\mathcal{W}^e = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^*) : \underline{\underline{C}}_{eff} : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^*)$$

#### modèle de Reuss/Sachs

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\varepsilon}} &= \phi \underline{\underline{\varepsilon}}_\alpha + (1 - \phi) \underline{\underline{\varepsilon}}_\beta \\ \underline{\underline{\sigma}}_\alpha &= \underline{\underline{\sigma}}_\beta = \underline{\underline{\sigma}} \end{aligned}$$

$$\underline{\underline{C}}_{eff} = (\phi \underline{\underline{S}}_\alpha + (1 - \phi) \underline{\underline{S}}_\beta)^{-1}$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^e = \phi \underline{\underline{\varepsilon}}_\alpha^e + (1 - \phi) \underline{\underline{\varepsilon}}_\beta^e$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^p = \phi \underline{\underline{\varepsilon}}_\alpha^p + (1 - \phi) \underline{\underline{\varepsilon}}_\beta^p$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \phi \underline{\underline{\varepsilon}}_\alpha^* + (1 - \phi) \underline{\underline{\varepsilon}}_\beta^*$$

### 3 Modèle couplé mécanique/champs de phases/diffusion

En utilisant le principe des puissances virtuelles, l'équation d'équilibre statique local et la théorie d'équilibre des microforces sont exposées [5, 6]. En outre, cette formulation peut être appliquée aux corps finis de géométries quelconques, dans laquelle des conditions initiales et des conditions aux limites variées périodiques ou non-périodiques en déplacement, en paramètre d'ordre et en concentration sont clairement énoncées [7]. Il s'ensuit que le modèle discret couplé mécanique/champs de phases/diffusion, en régime transitoire, se présente comme suit :

Trouver  $\{\underline{\underline{u}}(\underline{\underline{x}}, t), c(\underline{\underline{x}}, t), \phi(\underline{\underline{x}}, t)\}$  vérifiant

Conditions initiales :  $c(\underline{\underline{x}}, 0) = c_0(\underline{\underline{x}}), \phi(\underline{\underline{x}}, 0) = \phi_0(\underline{\underline{x}}), V_k(\underline{\underline{x}}, 0) = \alpha_0(\underline{\underline{x}})$

à tout instant  $t > 0$

Equilibre statique local :  $\text{div } \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{f}} = 0$  on  $\mathcal{V}$

Conservation de la masse :  $\dot{c} = -\nabla \cdot \underline{\underline{J}}$  on  $\mathcal{V}$

Equilibre des microforces :  $\nabla \cdot \underline{\underline{\xi}} + \underline{\underline{\pi}} = 0$  on  $\mathcal{V}$

Conditions aux limites en :

déplacement :  $\underline{\underline{t}} = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{n}}$  on  $\partial \mathcal{V}$

concentration :  $j = \underline{\underline{J}} \cdot \underline{\underline{n}}$  on  $\partial \mathcal{V}$

paramètre d'ordre :  $\zeta = \underline{\underline{\xi}} \cdot \underline{\underline{n}}$  on  $\partial \mathcal{V}$

où  $\underline{\underline{\pi}}$  est le scalaire microcontrainte,  $\underline{\underline{\xi}}$  est le vecteur microcontrainte et  $\underline{\underline{J}}$  est le flux de matière.

## 4 Lois de comportement, potentiel de dissipation

Les principes de la thermodynamique des processus irréversibles, à savoir le principe de conservation d'énergie et le principe de non-conservation de l'entropie, sont formulés, dans le cas d'une transformation isotherme et en absence des forces d'inertie afin de déterminer les lois d'état du modèle [8, 9]. En postulant l'existence d'un potentiel de dissipation  $\Omega$ , nous déduisons les lois complémentaires relatives aux processus dissipatifs [7]. Les lois de comportement et les lois d'évolution complémentaires s'expriment sous les formes suivantes :

Lois d'état	Lois complémentaires d'évolution
$\underline{\sigma} = \frac{\partial f}{\partial \underline{\varepsilon}}$	$\underline{\xi}^p = \frac{\partial \Omega}{\partial \underline{\sigma}}$
$A_k = \frac{\partial f}{\partial V_k}$	$\dot{V}_k = -\frac{\partial \Omega}{\partial A_k}$
$\underline{\xi}(\phi) = \frac{\partial f}{\partial \nabla \phi}$	$\beta \dot{\phi} = \pi + \frac{\partial f}{\partial \phi}$
$\mu = \frac{\partial f}{\partial c} = \frac{\partial f_0}{\partial c}$	$\underline{J} = -k \nabla \mu = -k \nabla \frac{\partial f_0}{\partial c}$

où  $\beta$  est un paramètre matériau, relié à la mobilité de l'interface et  $\mu$  est le potentiel chimique.  $V_k$  est l'ensemble des variables internes et  $A_k$  sont les forces thermodynamiques associées.

Les lois d'état et les équations d'évolution sont clairement exposées et séparées dans la formulation de sorte que des modèles non-linéaires et fortement couplés puissent être implantés plus facilement dans un code par éléments finis. En conséquence, la dérivation des relations d'état peut être généralisée pour une large classe de comportements des matériaux en présence des processus dissipatifs tels que le transfert thermique et la mécanique, et plus particulièrement la plasticité et l'endommagement.

Le modèle proposé est implémenté dans le code de calcul par éléments finis ZeBuLon [10]. Dans un premier temps, nous construirons, à partir des équations issues de ce modèle, la formulation faible associée. En particulier, nous déduisons à partir du principe des puissances virtuelles les formulations variationnelles de l'équation d'équilibre statique local et l'équation d'équilibre des microforces et nous exhiberons une formulation faible classique de l'équation de la diffusion, en utilisant les conditions aux limites. Dans un second temps, nous utilisons une approximation spatiale par éléments finis et une approximation temporelle par un schéma d'Euler implicite. La méthode standard de Newton-Raphson est employée pour résoudre le système d'équations non linéaires d'une façon itérative, dont trois vecteurs résidus pour les trois degrés de liberté  $(u_i, \phi, c)$  et une matrice tangente de rigidité ont été calculés [7]. La méthode de résolution pour l'intégration globale est basée sur un algorithme implicite de Newton [11].

## 5 Résultats

Le modèle a été appliqué à l'étude de l'effet des contraintes de cohérence sur les équilibres biphasés dans lequel la présence de l'énergie élastique dans l'énergie libre invalide l'application de la règle des phases et empêche l'utilisation de la construction de la tangente commune. En adoptant le modèle de Larché-Cahn [12], mettant en jeu la minimisation de l'énergie libre totale avec énergie élastique, des calculs 3D montrent une bonne concordance de l'équilibre cohérent du système binaire et des propriétés énergétiques en comparant avec les solutions analytiques des

concentrations d'équilibre des deux phases coexistantes (Figures 1 et 2) :

$$c_\alpha = A_\alpha + \frac{(A_\alpha + A_\beta - 2c_0)\Lambda}{2(1-\Lambda)} \quad , \quad c_\beta = A_\beta + \frac{(A_\alpha + A_\beta - 2c_0)\Lambda}{2(1-\Lambda)} \quad (1)$$

avec 
$$\Lambda = \frac{2V_m E (\epsilon^*)^2}{k(1-\nu)(A_\alpha - A_\beta)^2}$$

avec  $z$  est la fraction molaire de la phase  $\alpha$ ,  $E$  est le module d'Young,  $\nu$  est le coefficient de Poisson et  $V_m$  est le volume molaire.  $A_\alpha, A_\beta$  sont respectivement les concentrations d'équilibre incohérent des deux phases  $\alpha$  et  $\beta$ .  $c_\alpha$  et  $c_\beta$  sont leur valeur à l'équilibre cohérent.

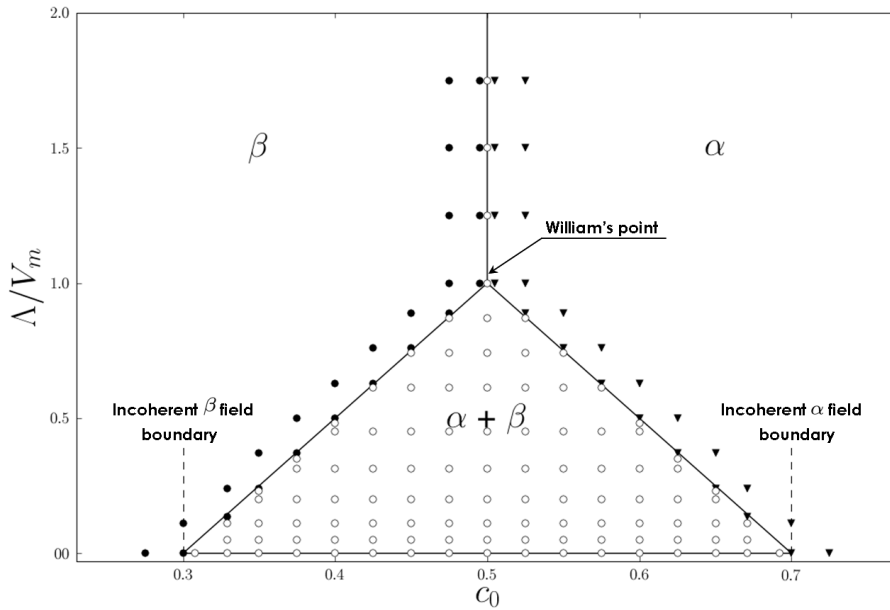


Figure 1 – Diagramme d'équilibre cohérent du système binaire en fonction de la concentration globale  $c_0$  et le ratio de l'énergie élastique  $\Lambda/v_m$ . Le diagramme théorique, obtenu par Larché-Cahn dans [12], est présenté par les lignes noires continues. Des résultats numériques, obtenus en utilisant le modèle de Voigt, ont été représentés par ▼, ● et ○, marquant respectivement les trois régions : la phase  $\alpha$ , la phase  $\beta$  et la phase  $\alpha + \beta$ .

## Références

- [1] M.E. Gurtin. Generalized Ginzburg–Landau and Cahn–Hilliard equations based on a micro-force balance. *Physica D*, 92 :178–192, 1996.
- [2] S.G. Kim, W.T. Kim, and T Suzuki. Interfacial compositions of solid and liquid in a phase-field model with finite interface thickness for isothermal solidification in binary alloys. *Physical Review E*, 58(3) :3316–3323, 1998.
- [3] S.G. Kim, W.T. Kim, and T Suzuki. Phase-field model for binary alloys. *Physical Review E*, 60(6) :7186–7197, 1999.
- [4] B. Echebarria, R. Folch, A. Karma, and M. Plapp. Quantitative phase field model of alloy solidification. *Physical Review E*, 70 :061604–061626, 2004.

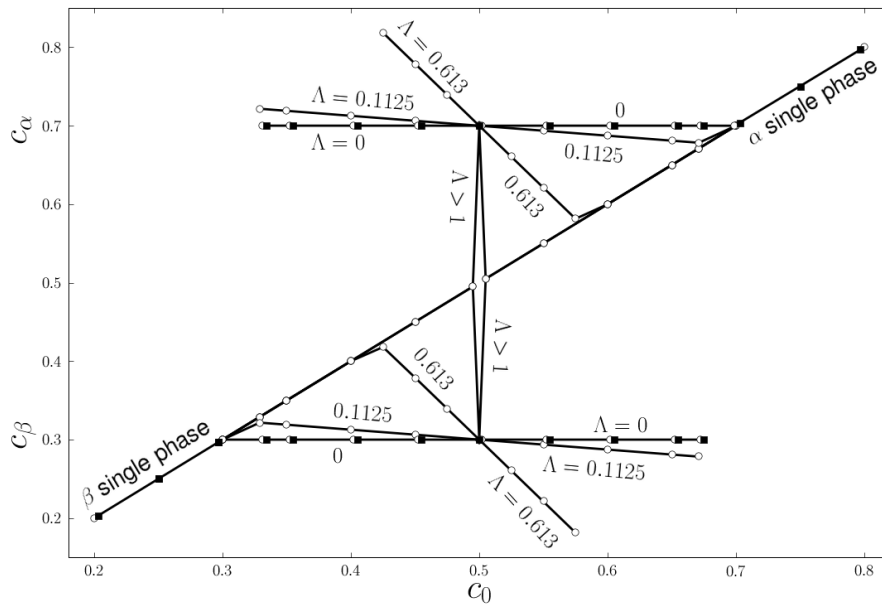


Figure 2 – Compositions d'équilibre des deux phases coexistantes  $C_\alpha$  et  $C_\beta$  en fonction de la concentration initiale  $c_0$ , pour différentes valeurs de  $\Lambda$ ;  $\Lambda = 0, 0.1125, 0.613$  et  $1$ . Les lignes continues représentent les solutions analytiques, données par (1). Les symboles blancs correspondent aux résultats numériques, obtenus par le modèle de Voigt/Taylor. Les symboles noirs représentent les résultats obtenus par le modèle de Reuss/Sachs.

- [5] P. Germain. La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus, première partie : théorie du second gradient. *J. de Mécanique*, 12 :235–274, 1973.
- [6] P Germain. The method of virtual power in continuum mechanics. Part 2 : Microstructure. *SIAM J. Appl. Math.*, 25 :556–575, 1973.
- [7] K. Ammar, B. Appolaire, G. Cailletaud, F. Feyel, and S. Forest. Finite element formulation of a phase field model based on the concept of generalized stresses. *Computational Materials Sciences*, 2009.
- [8] B.D. Coleman and W. Noll. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. *Arch. Rational Mech. and Anal.*, 13 :167–178, 1963.
- [9] B.D. Coleman and M.E. Gurtin. Thermodynamics with internal variables. *The Journal of Chemical Physics*, 47 :597–613, 1967.
- [10] R. Foerch and J. Besson. Large scale object oriented finite element code design. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 142 :165–187, 1997.
- [11] J. Besson, G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, and S. Forest. *Mécanique non linéaire des matériaux*. Hermès Sciences, France, 2001.
- [12] J.W. Cahn and F.C. Larche. A simple model for coherent equilibrium. *Acta Metall.*, 32(11) :1915–1923, 1984.