



**HAL**  
open science

# Une méthode incrémentale pour l'homogénéisation de polycristaux thermo-viscoélastiques

Quoc Huy Vu, Renald Brenner, Olivier Castelnau, Hervé Moulinec

► **To cite this version:**

Quoc Huy Vu, Renald Brenner, Olivier Castelnau, Hervé Moulinec. Une méthode incrémentale pour l'homogénéisation de polycristaux thermo-viscoélastiques. CFM 2011 - 20ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2011, Besançon, France. hal-03422494

**HAL Id: hal-03422494**

**<https://hal.science/hal-03422494>**

Submitted on 9 Nov 2021

**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.

# Une méthode incrémentale pour l'homogénéisation viscoélastique linéaire de polycristaux

Q. H. Vu<sup>a,b</sup>, R. Brenner<sup>a</sup>, O. Castelnau<sup>b</sup> et H. Moulinec<sup>c</sup>

a. *Laboratoire des Propriétés Mécaniques et Thermodynamiques des Matériaux, 99 av. J-B. Clément, 93430 Villetaneuse*

b. *Laboratoire Procédés et Ingénierie en Mécanique et Matériaux, PIMM - ENSAM, 151 Bd. de l'Hôpital, 75013 Paris*

c. *Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique, 31 chemin Joseph-Aiguier 13402 Marseille cedex 20*

## Résumé :

*Nous présentons le développement d'une méthode incrémentale pour l'estimation du comportement homogénéisé de polycristaux thermo-viscoélastiques anisotropes. Cette procédure repose sur l'équivalence entre la méthode de collocation et une approche à variables internes (Mandel, 1966 ; Ricaud et Masson, 2009). La méthode est étendue aux comportements avec écrouissages isotrope et cinématique. Les estimations seront confrontées aux calculs numériques en champs complets (FFT).*

## Abstract :

*We present the development of an incremental method to estimate the effective behavior of thermo-viscoelastic anisotropic polycrystals. This procedure is based on the equivalence between the collocation method and an internal variables approach (Mandel, 1966 ; Ricaud and Masson, 2009). The method is extended to the case with isotropic and kinematic hardenings. The estimates will be confronted with full-field numerical calculations (FFT) on the representative microstructure.*

**Mots clefs :** collocation method ; incremental method ; hardening

## 1 Introduction

Pour estimer le comportement viscoélastique linéaire homogénéisé des milieux hétérogènes, on utilise classiquement la transformée de Laplace-Carson. Cette dernière permet de transformer le comportement viscoélastique linéaire en élastique linéaire fictif dans l'espace de Laplace-Carson. Les modèles d'homogénéisation linéaire sont ensuite appliqués à ce matériau hétérogène fictif. Les propriétés viscoélastiques effectives sont déduites par l'inversion de la transformée de Laplace-Carson des propriétés fictives. Cette procédure d'inversion est souvent effectuée en utilisant la méthode de collocation. Les inconvénients de cette méthode résident dans le fait que pour chaque cas de chargement, différentes intégrales analytiques doivent être réalisées pour estimer les champs moyens locaux au sein de chaque constituant et la réponse globale du matériau. En conséquence, le comportement global qui en résulte ne peut pas être introduit dans les codes éléments finis pour calculs de structures. En outre, cette méthode exige que l'approche d'homogénéisation choisie doive correspondre au chargement imposé (approche en contrainte si chargement en contrainte et vice versa). Ainsi, cela rend la méthode peu pratique à utiliser.

Pour surmonter ces limitations, Mandel (1966) [1] et Ricaud et Masson (2009) [3] ont montré l'équivalence entre la méthode de collocation couplée à la transformée de Laplace-Carson et une formulation à variable internes dans le cas des matériaux composites à deux phases isotropes.

Dans ce cadre, nous développons cette nouvelle méthode plus loin pour le cas de composites n-phases anisotropes. La nouvelle formulation est illustrée pour les matériaux polycristallins. Les résultats

de simulation sont confrontés à ceux obtenus avec la méthode de collocation classique et les calculs aux champs complets (FFT) [2]. Cette nouvelle méthode est ensuite étendue au comportement viscoélasticité linéaire avec écrouissages isotrope et cinématique. Les estimations sur polycristaux sont également comparées avec FFT.

## 2 Développement d'une formulation incrémentale à variables internes à partir de la méthode de collocation

### 2.1 Homogénéisation d'un milieu viscoélastique hétérogène

Considérons un milieu hétérogène composé des phases avec un comportement viscoélastique de Maxwell, la vitesse de déformation moyenne dans chaque phase s'écrit :

$$\dot{\varepsilon} = \mathbf{S}_r^e : \dot{\sigma} + \mathbf{S}_r^v : \sigma \quad (1)$$

avec  $\mathbf{S}_r^e$  et  $\mathbf{S}_r^v$  sont respectivement les tenseurs de souplesse élastique et visqueuse de la phase  $r$ . La déformation au temps  $t$  est calculée de (1) comme suivant :

$$\varepsilon(t) = \int_0^t \mathbf{S}_r(t-u) : d\sigma(u) + \mathbf{S}_r(t) : \sigma(0) \quad (2)$$

avec  $\mathbf{S}_r(t) = \mathbf{S}_r^e + \mathbf{S}_r^v.t$ . Pour résoudre une tel problème d'homogénéisation, on fait recours classiquement à la *transformée de Laplace-Carson*.

Notons par  $f^*(p) = p \int_0^\infty f(t)e^{-pt}dt$  la transformée de Laplace-Carson d'une quelconque fonction du temps  $f(t)$ , liée au paramètre  $p$ , la forme dans l'espace Laplace-Carson de (2) s'écrit :

$$\varepsilon^* = \mathbf{S}_r^* : \sigma^* \quad (3)$$

Dans l'espace Laplace-Carson, le problème viscoélastique est réduit à celui linéaire élastique classique. On peut donc résoudre ce problème d'homogénéisation fictif avec les schémas d'homogénéisation linéaire classique. Ensuite, il faut inverser la solution de l'espace Laplace-Carson à l'espace réel. Pour ce faire, on utilise souvent la méthode de collocation [4].

### 2.2 Méthode de collocation classique

Le matériau hétérogène considéré est maintenant soumis à un chargement macroscopique en contrainte défini par la fonction du temps  $\bar{\sigma}(u)$ , ( $0 \leq u \leq t$ ). La réponse macroscopique en déformation est désignée par la fonction du temps  $\bar{\varepsilon}(t)$  et s'écrit :

$$\bar{\varepsilon}(t) = \int_0^t \tilde{\mathbf{S}}(t-u) : d\bar{\sigma}(u) + \tilde{\mathbf{S}}(t) : \bar{\sigma}(0) \quad (4)$$

La fonction  $\tilde{\mathbf{S}}(t)$  est ensuite décomposée en séries de Prony comme suivant :

$$\tilde{\mathbf{S}}(t) \approx \tilde{\mathbf{S}}^{ap}(t) = \tilde{\mathbf{S}}^e + \tilde{\mathbf{S}}^v t + \sum_{s=1}^S \mathbf{S}_{\tau_s} (1 - e^{-\frac{t}{\tau_s}}) \quad (5)$$

avec  $\tau_s$  sont  $S$  temps de relaxation choisis arbitrairement,  $\tilde{\mathbf{S}}^e$  et  $\tilde{\mathbf{S}}^v$  sont respectivement les tenseurs de souplesse élastique et visqueuse homogénéisés en cas purement élastique et purement visqueux.

Les coefficients  $\mathbf{S}_{\tau_s}$  sont identifiés par la relation de collocation :

$$\tilde{\mathbf{S}}^{*ap} \left( \frac{1}{\tau_s} \right) = \tilde{\mathbf{S}}^* \left( \frac{1}{\tau_s} \right) \quad (6)$$

Les coefficients  $\mathbf{S}_{\tau_s}$  nous permettent ensuite d'approximer la fonction de fluage  $\tilde{\mathbf{C}}(t)$  et de calculer la réponse macroscopique par intégrale analytique.

## 2.3 De la méthode de collocation classique à une formulation incrementale à variables internes

En substituant  $\tilde{\mathbf{S}}(t)$  par sa fonction approximée dans le calcul de la déformation macroscopique et en développant, nous obtenons finalement :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = \tilde{\mathbf{S}}^e : \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) + \sum_{s=1}^S \mathbf{S}_{\tau_s} : \boldsymbol{\beta}_{\tau_s}(t) + \tilde{\mathbf{S}}^v : \boldsymbol{\xi}(t) \quad (7)$$

avec  $\boldsymbol{\beta}_{\tau_s}(t)$  et  $\boldsymbol{\xi}(t)$  sont respectivement solution des équations différentielles suivantes :

$$\dot{\boldsymbol{\beta}}_{\tau_s}(t) + \frac{1}{\tau_s} \boldsymbol{\beta}_{\tau_s}(t) = \frac{1}{\tau_s} \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) \quad ; \quad \dot{\boldsymbol{\xi}}(t) = \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) \quad (8)$$

En cas de chargement macroscopique en déformation ( $\bar{\boldsymbol{\sigma}}(t)$  inconnue), l'évolution de  $\boldsymbol{\beta}_{\tau_s}(t)$  and  $\boldsymbol{\xi}(t)$  est modifiée comme :

$$\dot{\boldsymbol{\beta}}_{\tau_s}(t) + \frac{1}{\tau_s} \boldsymbol{\beta}_{\tau_s}(t) = \frac{1}{\tau_s} \tilde{\mathbf{C}}^e : \left( \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) - \sum_{s'=1}^S \mathbf{S}_{\tau_{s'}} : \boldsymbol{\beta}_{\tau_{s'}}(t) - \tilde{\mathbf{S}}^v : \boldsymbol{\xi}(t) \right) \quad (9)$$

$$\dot{\boldsymbol{\xi}}(t) = \tilde{\mathbf{C}}^e : \left( \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) - \sum_{s=1}^S \mathbf{S}_{\tau_s} : \boldsymbol{\beta}_{\tau_s}(t) - \tilde{\mathbf{S}}^v : \boldsymbol{\xi}(t) \right) \quad (10)$$

La contrainte moyenne dans la phase  $r$  est reliée à celle macroscopique par :

$$\boldsymbol{\sigma}_r(t) = \int_0^t \mathbf{B}_r(t-u) : d\bar{\boldsymbol{\sigma}}(u) + \mathbf{B}_r(t) : \bar{\boldsymbol{\sigma}}(0) \quad (11)$$

avec  $\mathbf{B}_r(t)$  le tenseur de localisation de contrainte de la phase  $r$ .

Après développement, nous obtenons :

$$\boldsymbol{\sigma}_r(t) = \mathbf{B}_r^e : \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t) - \sum_{s=1}^S \mathbf{B}_{\tau_s} : \boldsymbol{\beta}_{\tau_s}(t) \quad (12)$$

La déformation moyenne locale se calcule par résolution de l'équation différentielle (1).

## 3 Homogénéisation du comportement viscoélastique avec écrouissages

### 3.1 Loi de comportement viscoélastique avec écrouissage pour monocristal

Considérons un comportement viscoélastique linéaire pour monocristal comme suivant :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(x) = \mathbf{S}^e(x) : \dot{\boldsymbol{\sigma}}(x) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(x) \quad (13)$$

où  $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^v(x) = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)}(x) \mathbf{R}_s^{(k)}$ , avec  $K$  le nombre de systèmes de glissement et  $\mathbf{R}_s^{(k)}$  le tenseur Schmid.

La vitesse de glissement  $\dot{\gamma}^{(k)}(x)$  sur un système de glissement  $k$  est calculée par :

$$\dot{\gamma}^{(k)}(x) = \dot{\gamma}_0^{(k)} \frac{\tau^{(k)}(x) - X^{(k)}(x)}{\tau_0^{(k)}(x)} \quad (14)$$

avec :

$$\dot{\gamma}_0^{(k)}(x) = (\tau_{sta}^{(k)} - \tau_0^{(k)}(x)) \sum_{l=1}^K h^{(k,l)} |\dot{\gamma}^{(l)}(x)| \quad (15)$$

$$\dot{X}^{(k)}(x) = c^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}(x) - d^{(k)} X^{(k)}(x) |\dot{\gamma}^{(k)}(x)| - e^{(k)} |X^{(k)}(x)|^m \text{sign}(X^{(k)}(x)) \quad (16)$$

$$\tau^{(k)}(x) = \mathbf{R}_s^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}(x) \quad (17)$$

En faisant l'hypothèse de champs moyens par phase, la loi viscoélastique pour la phase  $r$  se réécrit :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{S}_r^e : \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{S}_r^v(t) : \boldsymbol{\sigma} + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 \quad (18)$$

avec :

$$\mathbf{S}_r^v(t) = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}_0^{(k)} \frac{\mathbf{R}_s^{(k)} \otimes \mathbf{R}_s^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \quad (19)$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 = - \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}_0^{(k)} \frac{X^{(k)} \mathbf{R}_s^{(k)}}{\tau_0^{(k)}} \quad (20)$$

Comme précédemment dans le cas sans écrouissage, on fait recours à la transformée de Laplace-Carson et la loi constitutive dans l'espace Laplace-Carson devient thermo-élastique linéaire :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^* = \mathbf{S}_r^* : \boldsymbol{\sigma}^* + \boldsymbol{\varepsilon}_0^* \quad (21)$$

Par conséquent, le comportement macroscopique s'écrit :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* = \tilde{\mathbf{S}}^* : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0^* \quad (22)$$

avec :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0^* = \sum_{r=1}^N f_r \mathbf{B}_r^{*T} : \boldsymbol{\varepsilon}_{0r}^* \quad ; \quad \boldsymbol{\sigma}_r^* = \mathbf{B}_r^* : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* + \mathbf{D}_r^* : (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0^* - \boldsymbol{\varepsilon}_{0r}^*) \quad (23)$$

où  $\mathbf{D}_r^*$  étant un tenseur d'ordre 4 introduit au problème d'homogénéisation thermo-élastique.

On constate dans la loi constitutive (18) que  $\mathbf{S}_r^v(t)$  est fonction du temps. Par conséquent, les coefficients  $\mathbf{S}_{\tau_s}$  et la souplesse visqueuse homogénéisée  $\tilde{\mathbf{S}}^v$  varient. Donc, on ne peut plus effectuer la procédure d'homogénéisation de la même façon que précédemment. Supposons que dans un incrément du temps suffisamment petit, on peut considérer les coefficients constants, la formulation pour le cas thermo-élastique est finalement modifiée comme suivant :

- Champs macroscopiques :

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \tilde{\mathbf{S}}^e : \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}} + \sum_{s=1}^S (\mathbf{S}_{\tau_s})_m : \Delta \boldsymbol{\beta}_{\tau_s} + (\tilde{\mathbf{S}}^v)_m : \Delta \boldsymbol{\xi} + \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 \quad (24)$$

où :

$$(\mathbf{S}_{\tau_s})_m = \left( (\mathbf{S}_{\tau_s})_{t_n} + (\mathbf{S}_{\tau_s})_{t_{n+1}} \right) / 2 \quad ; \quad (\tilde{\mathbf{S}}^v)_m = \left( (\tilde{\mathbf{S}}^v)_{t_n} + (\tilde{\mathbf{S}}^v)_{t_{n+1}} \right) / 2 \quad (25)$$

$$\dot{\boldsymbol{\beta}}_{\tau_s} + \frac{1}{\tau_s} \boldsymbol{\beta}_{\tau_s} = \frac{1}{\tau_s} \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad ; \quad \dot{\boldsymbol{\xi}} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad (26)$$

Similairement, la déformation thermoélastique macroscopique est calculée par :

$$\Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 = \sum_{r=1}^N f_r \left( \mathbf{B}_r^{eT} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{0r} - \sum_{s=1}^S (\mathbf{B}_{r\tau_s}^T)_m : \Delta \boldsymbol{\chi}_{r\tau_s} \right) \quad (27)$$

avec  $\boldsymbol{\chi}_{r\tau_s}$  sont les nouvelles variables internes liées à l'écrouissage cinématique dans les phases et sont calculées par :

$$\dot{\boldsymbol{\chi}}_{r\tau_s} + \frac{1}{\tau_s} \boldsymbol{\chi}_{r\tau_s} = \frac{1}{\tau_s} \boldsymbol{\varepsilon}_{0r} \quad (28)$$

- Champs locaux :

$$\begin{aligned} \Delta \boldsymbol{\sigma}_r = & \left( \mathbf{B}_r^e : \Delta \bar{\boldsymbol{\sigma}} - \sum_{s=1}^S (\mathbf{B}_{r\tau_s})_m : \Delta \boldsymbol{\beta}_{\tau_s} \right) + \left( \mathbf{D}_r^e : \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 - \sum_{s=1}^S (\mathbf{D}_{r\tau_s})_m : \Delta \boldsymbol{\theta}_{\tau_s} \right) \\ & + \left( \mathbf{D}_r^e : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{0r} - \sum_{s=1}^S (\mathbf{D}_{r\tau_s})_m : \Delta \boldsymbol{\chi}_{r\tau_s} \right) \end{aligned} \quad (29)$$

avec  $\theta_{\tau_s}$  sont les variables internes reliées à l'écroissage cinématique macroscopique et sont calculées par :

$$\dot{\theta}_{\tau_s} + \frac{1}{\tau_s} \theta_{\tau_s} = \frac{1}{\tau_s} \bar{\varepsilon}_0 \quad (30)$$

Les déformations thermoélastique et totale dans chaque phase sont calculées à partir de (20) et (18).

## 4 Validation numérique de la méthode incrémentale

### 4.1 Microstructure et chargement

Afin de valider la nouvelle méthode incrémentale, on a choisi de résoudre de problème d'homogénéisation sur une microstructure polycristalline 2D (figure 1). Cette microstructure est composée de 2 phases ( $r = 2$ ) avec 2 systèmes de glissement perpendiculaires dans chaque phase. La direction de glissement est exclusivement parallèle à l'axe  $e_3$  (antiplan). Les angles  $\beta^{(r)}$  sont pris respectivement :  $\beta^{(1)} = 0^\circ$  and  $\beta^{(1)} = 90^\circ$ . Ce choix a pour but de valider rapidement la méthode par des calculs non coûteux et ne constitue en aucun cas une limitation de la méthode. Les paramètres choisis pour les systèmes de

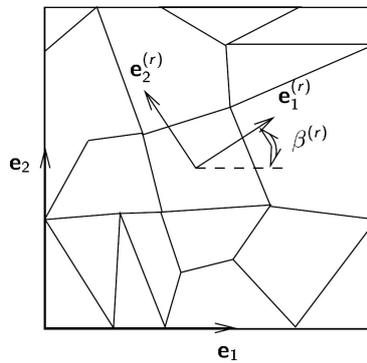


FIGURE 1 – Microstructure polycristalline 2D - Chargement antiplan

glissement en cas avec écroissages sont les suivants :

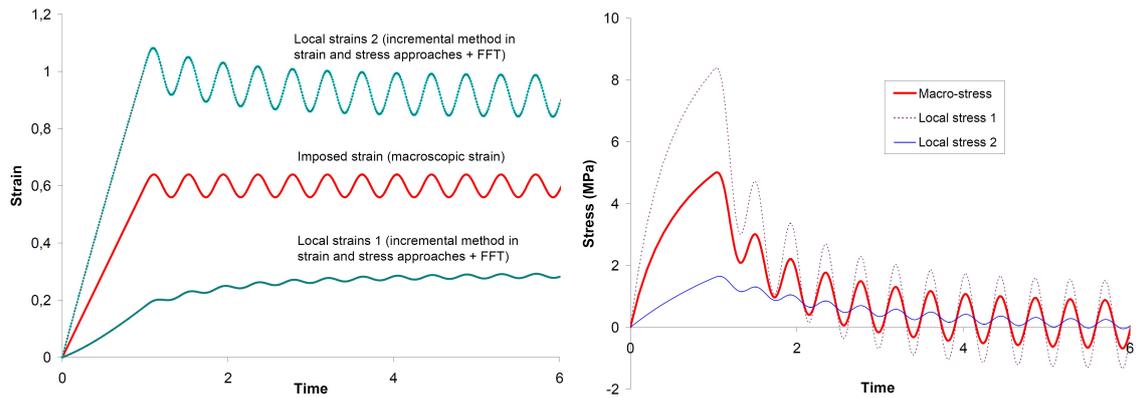
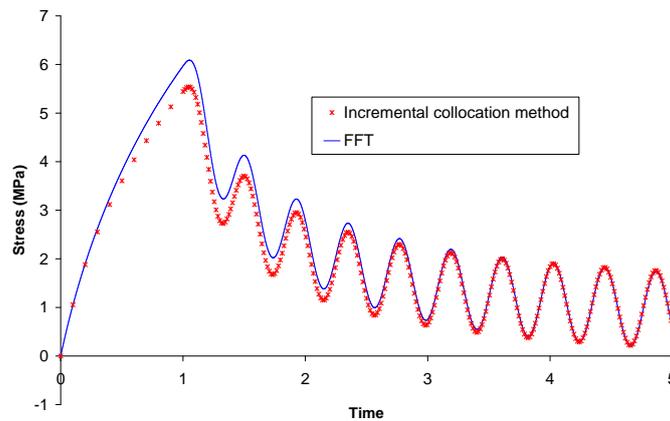
$$\mu_e^{(1,2)} = (1, 100)\text{GPa}; \dot{\gamma}^{(1,2)} = (1, 1); \tau_0^{initial(1,2)} = (2, 20)\text{GPa/s}; \tau_{sta}^{(1,2)} = (4, 30)\text{GPa/s}; h^{(k,l)} = 2; c^{(k)} = 5; d^{(k)} = 10; m = 1; e^{(k)} = 0; n^{(k)} = 1$$

### 4.2 Résultats numériques et discussion

La méthode incrémentale a été implémentée en utilisant FORTRAN90. Compte tenu de la microstructure choisie, le schéma auto-cohérent a été retenu pour l'homogénéisation dans l'espace Laplace-Carson. Plusieurs nombres de points de collocation compris entre  $10 \div 20$  ont été testés, ce qui donne les mêmes résultats d'homogénéisation.

On a effectué une simulation pour le chargement en déformation  $\bar{\varepsilon}_{13}$ . En cas sans écroissages, les résultats obtenus avec la méthode incrémentale ont été comparés à ceux obtenus avec la méthode de collocation classique et la méthode de référence en champs complets (FFT), et sont présentés sur la figure 2. Nous constatons que les résultats obtenus avec les 3 méthodes coïncident, ce qui valide la méthode incrémentale (pour la réponse en contrainte, nous ne traçons que les courbes issues d'une seule méthode afin de mieux voir les résultats).

Pour le comportement avec écroissages, les résultats sont confrontés à ceux de référence obtenus avec FFT (figure 3). Nous remarquons qu'avec écroissages, les résultats obtenus avec la méthode incrémentale diffèrent légèrement de ceux obtenus avec FFT. Ceci est attribué à la fluctuation intraphase des champs qui n'est pas prise en compte dans la méthode incrémentale (utilisant champs moyens). Pour les calculs FFT,  $|\dot{\gamma}^{(k)}(x)|$  est calculé sur chaque point du système de glissement  $k$ . Par contre, avec notre méthode incrémentale, nous ne calculons que la moyenne  $|\langle \dot{\gamma}^{(k)} \rangle|$  sur le système de glissement  $k$ , ce qui conduit à une sous-estimation du comportement effectif. Toutefois, une bonne concordance entre les 2 méthodes est constatée, ce qui valide la méthode incrémentale dans le cas du comportement avec écroissages.

FIGURE 2 – Cas sans écrouissages : Chargement  $\bar{\varepsilon}_{13}$  - Réponse en contrainte et déformationFIGURE 3 – Cas avec écrouissages : Chargement  $\bar{\varepsilon}_{13}$  - Réponse en contrainte macroscopique

## 5 Conclusions et perspectives

Nous avons développé une méthode d'homogénéisation incrémentale pour le comportement viscoélastique, basée sur l'équivalence entre la méthode de collocation et une formulation à variables internes. La nouvelle méthode a été validée sur les matériaux polycristallins, en comparant avec des méthodes de référence, dans les cas du comportement sans et avec écrouissages. Une extension de la méthode au comportement non linéaire est en cours de développement, dans laquelle on introduit une procédure de linéarisation affine à chaque incrément du chargement.

## Références

- [1] Mandel J. 1966 Cours de Mécanique des milieux continus, Gauthier-Villars, Paris
- [2] Moulinec H, Suquet P. 1998 A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* pp. 69-94, vol. 157
- [3] Ricaud J.M, Masson R. 2009 Effective properties of linear viscoelastic heterogeneous media : Internal variables formulation and extension to ageing behaviours *International Journal of Solids and Structures* pp. 1599-1606, vol. 46
- [4] Schapery R. 1962 Approximate methods of transform inversion for viscoelastic stress analysis *U.S. Nat. Congr. Appl. Mech. ASME 4th* pp. 1075-1085, vol. 2