



HAL
open science

Développement et applications d'une technique de modélisation micromécanique de type "FFT" couplée à la mécanique des champs de dislocations

Komlan Sénam Djaka

► **To cite this version:**

Komlan Sénam Djaka. Développement et applications d'une technique de modélisation micromécanique de type "FFT" couplée à la mécanique des champs de dislocations. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université de Lorraine, 2016. Français. NNT : 2016LORR0250 . tel-01531528

HAL Id: tel-01531528

<https://theses.hal.science/tel-01531528>

Submitted on 1 Jun 2017

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.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le **08 décembre 2016**
pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université de Lorraine

(Spécialité : Mécanique des matériaux)

par

Komlan Sénam DJAKA

Développement et applications d'une technique de modélisation micromécanique de type "FFT" couplée à la mécanique des champs de dislocations

Composition du jury

Rénald BRENNER	Directeur de Recherche CNRS, Université Pierre et Marie Curie	Rapporteur
Marc FIVEL	Directeur de Recherche CNRS, Université de Grenoble Alpes	Rapporteur
Ricardo LEBENSOHN	Directeur de Recherche, Los Alamos National Laboratory, USA	Examinateur
Marion MARTINY	Professeur, Université de Lorraine	Examinateur
Lionel GELEBART	Ingénieur de recherche HDR, CEA Saclay	Examinateur
François WILLOT	Chargé de Recherche, Ecoles des Mines de Paris	Examinateur
Stéphane BERBENNI	Directeur de Recherche CNRS, Université de Lorraine	Directeur
Vincent TAUPIN	Chargé de Recherche CNRS, Université de Lorraine	Co-directeur
Alain JACQUES	Directeur de Recherche CNRS, Université de Lorraine	Invité

Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux — UMR CNRS 7239
Pôle M4 : Matière, Matériaux, Métallurgie, Mécanique

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein du Laboratoire d'Etude de Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3 UMR CNRS 7239) à l'Université de Lorraine. Cette thèse a été cofinancée par la région Lorraine et l'ANR au travers du Laboratoire d'Excellence Design d'Alliages Métalliques pour l'Allègement des Structures (LabEx DAMAS) qui est commun au LEM3 et à l'IJL.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon directeur de thèse Monsieur Stéphane BERBENNI, Directeur de recherche au CNRS, et à mon co-directeur de thèse Monsieur Vincent TAUPIN, Chargé de recherche CNRS, pour m'avoir confié ce travail de recherche. Cela a été un agréable plaisir de travailler sous votre direction. Je vous remercie pour la confiance que vous avez eue en moi et la patience dont vous avez fait preuve à mon égard. Merci également pour votre disponibilité et vos précieux conseils qui resteront gravés dans ma mémoire.

Je remercie particulièrement Monsieur Marc FIVEL, Directeur de Recherche CNRS, et Monsieur Rénald BRENNER, Directeur de Recherche CNRS pour avoir accepté d'évaluer ce travail. J'adresse mes remerciements à Madame Marion MARTINY et Messieurs Ricardo LEBENSOHN, François WILLOT, Lionel GELEBART et Alain JACQUES pour avoir accepté participer à mon jury de thèse.

Je remercie également Messieurs Claude FRESSENGEAS, Aurélien VILLANI et Laurent CAPOLUNGO avec qui j'ai collaboré durant ces trois années de thèse.

J'adresse mes remerciements à tout le personnel du LEM3, notamment aux secrétaires et aux informaticiens qui ont contribué à la bonne marche de ce travail. Merci également à mes collègues doctorants qui m'ont soutenu et aidé pendant ces années de thèse.

Pour finir, j'adresse un sincère remerciement à ma famille qui a été toujours là pour me soutenir. Merci à Jean Claude ADAMADU et Olivier AGNIGBANKOU.

Je dédie cette thèse :

à ma fiancée,

à ma maman,

à la mémoire de mon père,

à mes frères et sœurs.

Résumé

Dans ce mémoire, des méthodes spectrales basées sur la transformée de Fourier rapide ("fast Fourier transform" en anglais notée "FFT") sont développées pour résoudre les équations de champs et d'évolution des densités de dislocations polarisées ou géométriquement nécessaires dans la théorie de la mécanique des champs de dislocations ("Field Dislocations Mechanics" en anglais et notée "FDM") et de son extension phénoménologique et mésoscopique ("Phenomenological Mesoscopic Field Dislocations Mechanics" en anglais et notée "PMFDM"). Dans un premier temps, une approche spectrale a été développée pour résoudre les équations élasto-statiques de la FDM pour la détermination des champs mécaniques locaux provenant des densités de dislocations polarisées et des hétérogénéités élastiques présentes dans les matériaux de microstructure supposée périodique et au comportement élastique linéaire. Les champs élastiques sont calculés de façon précise et sans oscillation numérique même lorsque les densités de dislocations sont concentrées sur un seul pixel (pour les problèmes à deux dimensions) ou sur un seul voxel (pour les problèmes à trois dimensions). Ces résultats sont obtenus grâce à l'application de formules de différenciation spatiale pour les dérivées premières et secondes dans l'espace de Fourier basées sur des schémas à différences finies combinées à la transformée de Fourier discrète. Les résultats obtenus portent sur la détermination précise des champs élastiques des dislocations individuelles de types vis et coin, et des champs élastiques d'interaction entre des inclusions de géométries variées et différentes distributions de densités de dislocations telles que les dipôles ou les boucles de dislocations dans un matériau composite biphasé et des microstructures tridimensionnelles. Dans un second temps, une approche spectrale a été développée pour résoudre de façon rapide et stable l'équation d'évolution spatio-temporelle des densités de dislocations dans la théorie FDM. Cette équation aux dérivées partielles, de nature hyperbolique, requiert une méthode spectrale avec des filtres passe-bas afin de contrôler à la fois les fortes oscillations inhérentes aux approches FFT et les instabilités numériques liées à la nature hyperbolique de l'équation de transport. La validation de cette approche a été effectuée par des comparaisons avec les solutions exactes et les méthodes éléments finis dans le cadre de la simulation des phénomènes physiques d'annihilation ou d'extension/annihilation de boucles de dislocations. En dernier lieu, une technique numérique pour la résolution des équations de la PMFDM est développée dans le cadre d'une formulation FFT pour un comportement élasto-visco-plastique avec la prise en compte de la contribution des dislocations géométriquement néces-

saires et statistiquement stockées ainsi que des conditions de saut de la distorsion plastique aux interfaces de type joint de grains ou joint de phases. Cette technique est par la suite appliquée à la simulation de la déformation plastique de structures modèles telles que des microstructures périodiques à canaux et des polycristaux métalliques.

Abstract

Fast Fourier transform (FFT)-based methods are developed to solve both the elasto-static equations of the Field Dislocation Mechanics (FDM) theory and the dislocation density transport equation of polarized or geometrically necessary dislocation (GND) densities for FDM and its mesoscopic extension, i.e. the Phenomenological Mesoscopic Field Dislocations Mechanics (PMFDM). First, a numerical spectral approach is developed to solve the elasto-static FDM equations in periodic media for the determination of local mechanical fields arising from the presence of both polarized dislocation densities and elastic heterogeneities for linear elastic materials. The elastic fields are calculated in an accurate fashion and without numerical oscillation, even when the dislocation density is restricted to a single pixel (for two-dimensional problems) or a single voxel (for three-dimensional problems). These results are obtained by applying the differentiation rules for first and second derivatives based on finite difference schemes together with the discrete Fourier transform. The results show that the calculated elastic fields with the present spectral method are accurate for different cases considering individual screw and edge dislocations, the interactions between inhomogeneities of various geometries/elastic properties and different distributions of dislocation densities (dislocation dipoles, polygonal loops in two-phase composite materials). Second, a numerical spectral approach is developed to solve in a fast, stable and accurate fashion, the hyperbolic-type dislocation density transport equation governing the spatial-temporal evolution of dislocations in the FDM theory. Low-pass spectral filters are employed to control both the high frequency oscillations inherent to the Fourier method and the fast-growing numerical instabilities resulting from the hyperbolic nature of the equation. The method is assessed with numerical comparisons with exact solutions and finite element simulations in the case of the simulation of annihilation of dislocation dipoles and the expansion/annihilation of dislocation loops. Finally, a numerical technique for solving the PMFDM equations in a crystal plasticity elasto-viscoplastic FFT formulation is proposed by taking into account both the time evolutions of GND and SSD (statistically stored dislocations) densities as well as the jump condition for plastic distortion at material discontinuity interfaces such as grain or phase boundaries. Then, this numerical technique is applied to the simulation of the plastic deformation of model microstructures like channel-type two-phase composite materials and of polycrystalline metals.

Table des matières

Remerciements	i
Dédicace	iii
Résumé	v
Abstract	vii
Table des matières	xii
Notations	1
Introduction	3
1 Etat de l'art sur la plasticité cristalline et les méthodes actuelles de modélisation	9
1.1 Objectifs	9
1.2 Glissement cristallographique et dislocations	10
1.2.1 Lignes de glissement et dislocations	10
1.2.2 Dislocations individuelles et vecteur de Burgers	10
1.2.3 Champs élastiques des dislocations	14
1.2.4 Dislocations parfaites et systèmes de glissement : Cas des structures CFC (cubiques à faces centrées)	22
1.2.5 Formulations mécaniques classiques de la plasticité cristalline par glissement dans les structures CFC	23
1.3 Comportement mécanique des matériaux hétérogènes et des polycristaux	31
1.3.1 Modèles micromécaniques à champs moyens	32
1.3.2 Modèles micromécaniques à champs complets	33
1.4 Limites des modèles classiques de plasticité cristalline	37
1.5 Description de différentes techniques de modélisation actuelles de la plasticité cristalline	40
1.5.1 Méthode discrète : la Dynamique des Dislocations Discrètes (ou DDD)	40
1.5.2 Méthodes de champ de phase	41
1.5.3 Les théories statistiques de dislocations	44

1.5.4	Théories de la plasticité à gradient	45
1.6	Conclusions	49
2	Mécanique des Champs de Dislocations et extensions	52
2.1	Objectifs	52
2.2	Représentation continue des dislocations : Cinématique et incompatibilité du réseau cristallin	53
2.3	Introduction du tenseur densité de dislocation	55
2.4	Equations élasto-statiques de la Mécanique des Champs de Dislocations	56
2.4.1	Equations des champs élasto-statiques	56
2.4.2	Décomposition de Stokes-Helmholtz et équations de Poisson	57
2.4.3	Détermination de la distorsion plastique	58
2.4.4	Equations de Navier pour les champs de distorsions élastiques compatibles	59
2.4.5	Cas des dislocations vis et coins en élasticité linéaire et homogène	60
2.4.6	Résolution des équations élasto-statiques de la FDM par la méthode des éléments finis	63
2.5	Equations d'évolution de la FDM	66
2.5.1	Flux de vecteur de Burgers et vitesse de distorsion plastique	66
2.5.2	Equation d'évolution des densités de dislocations en excès	67
2.5.3	Hypothèse constitutive sur la détermination de la distorsion plastique compatible	68
2.5.4	Dissipation et vitesse de dislocation en excès	70
2.5.5	Résolution de l'équation de transport des densités de dislocations par la méthode des éléments finis	71
2.6	La Mécanique des Champs de Dislocations mésoscopique et phénoménologique (PMFDM)	74
2.7	Version réduite de la mécanique des champs de dislocations	76
2.8	Conditions de continuité aux interfaces de discontinuité supposées fixes	76
2.8.1	Condition de compatibilité cinématique de Hadamard	76
2.8.2	Continuité tangentielle de la distorsion plastique et élastique	78
2.9	Conclusions	79
3	Méthode spectrale de résolution numérique des équations élasto-statiques de la Mécanique des Champs de Dislocations	82
3.1	Objectifs	82
3.2	Revue bibliographique sur les méthodes micromécaniques à base de FFT et problématiques actuelles	84
3.3	Méthode spectrale pour la résolution des champs élasto-statiques en élasticité linéaire et homogène	86
3.3.1	Solution des équations de type Poisson dans l'espace de Fourier	87
3.3.2	Solution des équations de type Navier élastique homogène dans l'espace de Fourier	87
3.3.3	Détermination des contraintes	88

3.4	Méthode spectrale pour la résolution des champs élasto-statiques en élasticité linéaire et hétérogène	89
3.4.1	Equations de champs de la FDM en élasticité hétérogène et tenseur de polarisation	89
3.4.2	Equation intégrale de type Lippmann-Schwinger	90
3.4.3	Transformation dans l'espace de Fourier de l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger avec champs incompatibles	91
3.5	Implémentation numérique	91
3.5.1	Transformation de Fourier discrètes (DFT)	91
3.5.2	Algorithme de résolution dans le cas hétérogène	92
3.5.3	Différentes approximations pour les formules de différenciation dans l'espace de Fourier	94
3.6	Résultats numériques	96
3.6.1	Résultats en élasticité homogène	96
3.6.2	Résultats en élasticité hétérogène	107
3.7	Conclusions	125
4	Résolution de l'équation de transport des densités de dislocations par une approche spectrale de type Transformée de Fourier Rapide	128
4.1	Objectifs	128
4.2	Equation de transport de densités de dislocations	130
4.2.1	Rappel de l'équation de transport de densités de dislocations	130
4.2.2	Problème à deux dimensions (2D)	130
4.2.3	Problème à une dimension (1D)	132
4.2.4	Formulation explicite de l'équation de transport	134
4.3	Méthode spectrale	134
4.3.1	Approche spectrale classique pour l'équation de transport	134
4.3.2	Approche spectrale avec filtres pour la résolution de l'équation de transport des densités de dislocations	135
4.3.3	Implémentation numérique	136
4.4	Validation de la méthode spectrale pour l'équation de transport à une dimension	137
4.4.1	Configuration à une dimension	137
4.4.2	Approche FFT classique (cas 1)	138
4.4.3	Approche spectrale avec le filtre exponentiel (cas 2)	139
4.4.4	Approche spectrale FFT avec le filtre cosinus (cas 3)	142
4.4.5	Comparaison avec les résultats éléments finis (cas de l'annihilation)	144
4.5	Application aux boucles de dislocations bidimensionnelles et tridimensionnelles	146
4.5.1	Extension et annihilation d'une boucle polygonale en deux dimensions	146
4.5.2	Rétrécissement d'une boucle polygonale en trois dimensions	149
4.6	Discussion	152
4.7	Conclusions	154

5	Implémentation numérique de la mécanique des champs de dislocations dans un cadre Elasto-Visco-Plastique FFT à l'échelle mésoscopique	156
5.1	Objectifs	156
5.2	Rappel des équations du modèle EVP-FFT	157
5.2.1	Relations constitutives et vitesse de déformation plastique	157
5.2.2	Résolution de l'équation d'équilibre dans l'espace de Fourier par le schéma Lagrangien augmenté	159
5.2.3	Algorithme de résolution	161
5.3	Extension du modèle EVP-FFT à la mécanique des champs de dislocations à l'échelle mésoscopique avec la théorie RPMFDM	165
5.3.1	Définition de la vitesse des dislocations géométriquement nécessaires	165
5.3.2	Nouveau calcul de la dérivée de la vitesse de déformation plastique prenant en compte le terme $\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}$	167
5.3.3	Résolution de l'équation de transport dans l'espace de Fourier	168
5.3.4	Nouvel algorithme de résolution EVP-RPMFDM-FFT	169
5.3.5	Implémentation de la condition de continuité tangentielle aux interfaces d'un matériau composite biphasé	171
5.4	Applications numériques	174
5.4.1	Détermination des paramètres de la loi d'écroutissage de Voce et effet de l'écroutissage latent pour un monocristal d'Aluminium	175
5.4.2	Etude de la réponse d'un matériau composite modèle : une microstructure périodique à canaux	177
5.4.3	Application à un polycristal d'Aluminium	184
5.5	Conclusions	189
	Conclusion générale et perspectives	193
	A Algorithme basique FFT de Moulinec-Suquet en élasticité linéaire	218
	B Schémas différences finies centrées pour des dérivées partielles	220
	C Schéma différence finie centrée tournée "Rotated scheme"	221
	D Phénomène de Gibbs	224
	E Stabilité des filtres spectraux	226
	F Temps de calculs et valeurs optimales de ε_M pour l'approche spectrale avec le filtre exponentiel	228

Table des figures

1.1	Observation expérimentale (AFM) de lignes de glissement à la surface d'un monocristal de Cu-30at% Zn déformé à 19.4% en traction à 77K [243].	10
1.2	Observation expérimentale du développement d'une source de Frank-Read à la surface d'un échantillon d'Aluminium [155]. Grossissement (a) $\times 800$ et (b) $\times 350$	11
1.3	(a) : Modèle d'un réseau cubique simple et parfait. (b) : Dislocation coin positive DC formée en insérant un demi-plan supplémentaire d'atomes en ABCD. (c) : Dislocation vis DC formée en déplaçant les faces ABCD d'un côté par rapport à l'autre suivant la direction AB. (d) : Arrangement en spirale des atomes adjacents à la ligne DC dans le cas de la dislocation vis [110].	12
1.4	(a) et (c) : Circuits de Burgers autour d'une dislocation vis et d'une dislocation coin. (b) et (d) : Mêmes circuits de Burgers dans un cristal parfait où le défaut de fermeture représente le vecteur de Burgers [110].	13
1.5	Mouvement d'une dislocation coin sous l'action d'une contrainte de cisaillement représentée par les flèches. (a) : x représente le demi-plan atomique supplémentaire initial. (b) : Le demi-plan x se déplace, d'un vecteur de Burgers \mathbf{b} , vers la droite et se lie avec la partie inférieure du plan y , la partie supérieure du plan y devient le demi-plan supplémentaire. (c) : répétition du même processus en (a) et (b). Le plan z devient le demi plan supplémentaire. (d) : Formation d'une marche sur la surface libre. [110]	14
1.6	(a) : Cristal contenant une dislocation vis AB. (b) : Cylindre déformé de manière à obtenir la même distorsion créée par la dislocation vis dans (a) [110].	16
1.7	(a) : Cristal contenant une dislocation coin. (b) : Cylindre déformé de manière à obtenir la même distorsion créée par la dislocation coin représentée sur la figure (a) [110].	17
1.8	Profils des composantes T_{xy} , T_{xx} et T_{yy} du champ de contraintes générées par une dislocation coin dans le plan (xy) [101].	17
1.9	Mouvement d'une dislocation coin dans un cristal sous l'action d'une contrainte de cisaillement τ_a [110].	18
1.10	Forces considérées dans l'étude de l'interaction entre deux dislocations coins parallèles [110].	19

1.11	Profil de la force d'interaction F_x par unité de longueur entre deux dislocations coins de vecteurs lignes et de vecteurs de Burgers parallèles. La courbe A en ligne continue représente la variation de F_x dans le cas de deux dislocations de mêmes signes. La courbe B en ligne pointillée représente la variation de F_x dans la cas de deux dislocations de signes opposés [110].	20
1.12	Dislocations vis et coin parallèle à une surface libre, et leurs dislocations images [101].	21
1.13	(a) Glissement des plans (111) dans les métaux CFC. (b) Tétraèdre de Thompson décrivant les dislocations parfaites et partielles [216].	23
1.14	Boucle de dislocations L de surface de coupure S avec un vecteur de ligne \mathbf{t} [20].	24
1.15	Influence des paramètres θ_0^s , θ_1^s et τ_1^s sur la loi d'écroissage de Voce [219].	29
1.16	Etude de l'hétérogénéité du glissement plastique dans un volume élémentaire représentatif (VER) représentant un agrégat polycristallin pour deux maillages EF différents : (a) maillage grossier : VER à 5832 éléments quadratiques, (b) maillage fin : VER à 19683 éléments quadratiques [17].	34
1.17	Comparaison des courbes contraintes-déformations dans chaque grain obtenues avec les méthodes à champs moyens et la méthode à champs complet par EF dans un VER constitué de 200 grains orientés aléatoirement et soumis à une déformation macroscopique homogène. (a) : Solution obtenue avec la méthode à champs moyens à l'aide du modèle auto-cohérent de Berveiller-Zaoui [28]. (b) : Solution obtenue par EF montrant une dispersion plus prononcée des champs intergranulaires [18].	35
1.18	Résultats des simulations du laminage d'un polycristal d'aluminium contenant 100 grains et discrétisé en $32 \times 32 \times 32$ éléments (voxels dans le cas de la FFT). A gauche : distributions des déformations plastiques accumulées (a) et des contraintes (c) obtenues par FFT. A droite : distributions des déformations plastiques accumulées (b) et des contraintes (d) obtenues par EF. Les comparaisons ont été effectuées à une même échelle, seules les valeurs maximales et minimales diffèrent. Les temps de calcul sont de 3 heures pour la FFT et de 5 jours pour la méthode EF [183].	36
1.19	Observation expérimentale d'une structure de murs de dislocations dans un monocristal de Si sollicité en traction-compression cyclique à haute température [146].	37
1.20	Micrographie optique de cellules géantes de dislocations après croissance d'un monocristal de GaAs. La dimension moyenne des cellules varie en fonction inverse de la contrainte interne. Insert : cellules de dislocations visualisées par imagerie aux rayons-X : les lignes sombres sont l'image des distorsions de réseau au voisinage de dislocations [174].	38

1.21 (a) : Matériau composite modèle constitué des plaques non déformables parfaitement liées à une matrice monocristalline déformable.	
(b) : Matrice cisailée sur un système de glissement unique et courbure de la matrice à proximité des plaques avec création des GNDs [14].	39
1.22 (a) : Configuration initiale montrant des segments de dislocations.	
(b) : Microstructure obtenue après écrouissage [226].	42
1.23 Figure montrant le développement d'une boucle de dislocation interagissant avec des précipités le long d'un plan de glissement illustrant l'écrouissage d'Orowan. Les numéros indiquent la forme des boucles en fonction du temps [234].	43
1.24 Description des dislocations par une plaquette d'inclusion entourée d'une ligne de dislocation dans les méthodes de champ de phase.	
(a) : La ligne de dislocation ABC se terminant à la surface du cristal aux points A et C. (b) : Boucle de dislocations représentée par une plaquette d'inclusion cohérente. \mathbf{b} représente le vecteur de Burgers et d est l'épaisseur de la plaquette de vecteur normal \mathbf{n} [234].	43
1.25 Evolution de la distribution des densités d'obstacles ρ en fonction de la déformation moyenne Γ au cours de la formation des canaux de glissement dans les zones à fortes densités de dislocations [15].	44
1.26 Effets de l'échelle de longueur l/a , où l est la longueur interne phénoménologique du modèle de plasticité à gradient de Fleck et Hutchinson, sur le couple de torsion Q d'un fil mince en cuivre de rayon constant a . Q_0 représente le couple de référence, n est un paramètre d'écrouissage et μ est un coefficient de couplage (cf. [70]).	46
1.27 Configuration initiale de densités de dislocations obtenue par la dynamique des dislocations discrètes (en haut à gauche) à partir de laquelle les valeurs initiales des variables de champ (ρ , $ \varrho $, q , ϱ_s , ϱ_e) de la théorie continue de dynamique des dislocations sont obtenues (cf. [198]).	47
1.28 Effet de l'épaisseur s d'un canal de fraction volumique constante $f_W = 0.1$ sur la courbe contrainte-déformation macroscopique. model 1 : plasticité conventionnelle, model 2 : plasticité conventionnelle avec les conditions de saut aux interfaces., model 3a et model 3b : mécanique des champs de dislocations avec les conditions de saut aux interfaces et avec la prise en compte de sources de dislocations par des profils initiaux de déformation plastique correspondant à des empilements de dislocations [209].	49
2.1 Représentation des différentes configurations du cristal contenant une dislocation vis [208].	54
2.2 Cristal de volume V avec les conditions aux limites mixtes en contrainte $\mathbf{t}^d = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ et en déplacement \mathbf{u}^d sur la frontière ∂V	57
2.3 Figure illustrant les normales aux frontières d'un cristal contenant une dislocation vis α_{33}	61

2.4	Figure illustrant les normales aux frontières d'un cristal contenant une dislocation coin α_{13}	63
2.5	Lignes de dislocations traversant la surface S délimitée par une courbe fermée C	67
2.6	Simulation d'une source de Frank-Read obtenue par la résolution de l'équation de transport (2.73) [223].	69
2.7	Figure montrant la dépendance à l'échelle de longueur des densités de dislocations polarisées et de la vitesse de distorsion plastique [211].	75
2.8	Figure montrant l'interface I entre deux sous-domaines H^- vers H^+ , avec un vecteur normal \mathbf{n} . Le vecteur \mathbf{l} est un vecteur appartenant à l'interface. Le circuit de Burgers C délimite la surface S de vecteur normal $\mathbf{n} \times \mathbf{l}$ [189].	77
3.1	Composantes des contraintes de cisaillement T_{13} et T_{23} normalisées par μ pour une dislocation vis : FFT avec $\alpha_{33}(\mathbf{x})$ donnée par l'équation (3.28) (ligne continue rouge) vs. Solution analytique obtenue par la technique de l'opérateur de Riemann-Graves (ligne en pointillés [1]).	98
3.2	Composantes des contraintes de cisaillement T_{13} et T_{23} normalisées par μ pour une densité de dislocations vis régularisée avec une fonction Gaussienne : FFT (ligne continue rouge) vs. Solution analytique obtenue par la technique de l'opérateur de Riemann-Graves (ligne en pointillés) [101].	99
3.3	Comparaison des cartes de contraintes de cisaillement T_{13} (a, b) et T_{23} (c, d) (normalisées par μ) pour une distribution Gaussienne de densité de dislocations vis ($\sigma = 0.1r_0$), obtenues par FFT avec 1024×1024 pixels (a, c) et par EF avec 1024×1024 pixels (b, d), avec deux éléments triangulaires linéaires par pixel.	101
3.4	Comparaison des cartes de rotations élastiques ω_{31}^e (a, b) et ω_{32}^e (c, d) (en radians) pour une distribution Gaussienne de densité de dislocations vis ($\sigma = 0.1r_0$), obtenues par FFT avec 1024×1024 pixels (a, c) et par EF avec 1024×1024 pixels (b, d), avec deux éléments triangulaires linéaires par pixel.	102
3.5	Contours des contraintes : (a) T_{11} et (b) T_{12} normalisées par μ pour une dislocation coin obtenue par la présente méthode FFT avec 1024×1024 pixels.	103
3.6	Profils des contraintes : (a) T_{11} , T_{22} et (b) T_{12} normalisées par μ pour une dislocation coin : FFT (ligne continue) vs. Solution analytique (ligne en pointillés) [101].	104
3.7	Solutions T_{13} et T_{23} présentant des oscillations numériques obtenues avec la méthode FFT classique, pour une densité de dislocations vis α_{33} définie sur un seul pixel au centre de la cellule unitaire. La solution analytique est représentée par les lignes en pointillés.	105

3.8	Solutions T_{13} et T_{23} dénuées d'oscillations numériques obtenues avec la présente approche FFT, pour une densité de dislocations vis α_{33} définie sur un seul pixel au centre de la cellule unitaire. La solution analytique est représentée par les lignes en pointillés.	106
3.9	Profils des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel au centre d'une inclusion circulaire de rayon $R = 80\delta$. Pour les simulations, une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels a été adoptée. Les constantes élastiques des phases sont définies par $\mu_I = 2.3001 \times 10^2$ MPa, $\nu_I = 0.3647$ avec $\mu_I/\mu_M = 0.01$, $\nu_M = \nu_I$. L'erreur admissible pour le critère de convergence $\epsilon = 10^{-6}$. (a) : Solution $P - LS$ (lignes continues vertes) avec de fortes oscillations numériques vs. solutions analytiques AS (lignes pointillées). (b) : Solution $P_C - LS_R$ (lignes continues bleues) et solution $P_C - LS$ (lignes continues rouges) vs. solutions analytiques AS (lignes pointillées).	109
3.10	Profils des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel au centre d'une inclusion circulaire de rayon $R = 80\delta$. Pour les simulations, une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels a été adoptée. Les constantes élastiques des phases sont définies $\mu_I = 2.3001 \times 10^6$ MPa, $\nu_I = 0.3647$ avec $\mu_I/\mu_M = 100$, $\nu_M = \nu_I$. L'erreur admissible pour le critère de convergence $\epsilon = 10^{-6}$. (a) : Solution $P - LS$ (lignes continues vertes) avec de fortes oscillations numériques vs. solutions analytiques AS (lignes pointillées). (b) : Solution $P_C - LS_R$ (lignes continues bleues) et solution $P_C - LS$ (lignes continues rouges) vs. solutions analytiques AS (lignes pointillées).	110
3.11	Zooms des profils T_{11} (normalisés par μ_M) dans l'inclusion reflétant l'apparition de petites oscillations avec la procédure $P_C - LS$ (lignes rouges continues) contrairement à la procédure $P_C - LS_R$ (lignes bleues continues). (a) : Solution $P_C - LS$ avec $\mu_I/\mu_M = 0.01$, (b) : Solution $P_C - LS_R$ avec $\mu_I/\mu_M = 0.01$, (c) : Solution $P_C - LS$ avec $\mu_I/\mu_M = 100$ et (d) : Solution $P_C - LS_R$ avec $\mu_I/\mu_M = 100$	112
3.12	Cartes 2D des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues avec la procédure $P_C - LS_R$ dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel au centre d'une inclusion circulaire de rayon $R = 80\delta$, noyée dans une phase matrice discrétisée avec une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels. L'erreur admissible pour le critère de convergence $\epsilon = 10^{-6}$. Les résultats sont obtenus avec la procédure $P_C - LS_R$. (a) et (b) : $\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\mu_I/\mu_M = 0.1$. (c) et (d) : $\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\mu_I/\mu_M = 10$. (e) et (f) : $\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\mu_I/\mu_M = 1$	114

- 3.13 Etude comparative des nombres d'itérations nécessaires aux procédures P_C-LS_R et P_C-LS pour converger, selon différents contrastes mécaniques k , dans le cas de l'interaction entre une inclusion circulaire et une densité de dislocations coin située dans la matrice d'un matériau composite. Les simulations ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-6}$ et une contrainte macroscopique imposée non nulle $\bar{T}_{11} = 1MPa$ [53]. 116
- 3.14 Cartes 2D des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues avec la procédure P_C-LS_R dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel situé à une distance de 120δ du centre d'un trou circulaire de rayon $R = 80\delta$, dans une phase matrice ($\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\nu_M = 0.3647$) discrétisée avec une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels. Les simulations ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-6}$ et une contrainte macroscopique imposée non nulle $\bar{T}_{11} = 1MPa$ 117
- 3.15 Profils des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues avec la procédure P_C-LS_R dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel situé à une distance de 120δ du centre d'un trou circulaire de rayon $R = 80\delta$, dans une matrice ($\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\nu_M = 0.3647$). La cellule est discrétisée avec une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels. Les simulations ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-6}$ et une contrainte macroscopique imposée non nulle $\bar{T}_{11} = 1MPa$. Solution P_C-LS_R (lignes continues bleues) vs. solutions analytiques AS (lignes en pointillés). 118
- 3.16 Profils des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenus dans le cas d'un dipôle de dislocations coins α_{13} défini sur un seul pixel et contraint à l'interface de discontinuité entre l'inclusion circulaire de rayon $R = 80\delta$ et la matrice. Une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels a été adoptée. Les constantes élastiques sont $\mu_I = 2.3001 \times 10^6$ MPa, $\nu_I = 0.3647$ avec $\mu_I/\mu_M = 0.1$, $\nu_M = \nu_I$. Les simulations ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-8}$. (a) : Composante de contrainte T_{11} obtenue avec une contrainte de traction macroscopique $\bar{T}_{11} = 0.01E_M$. (b) : Composante de contrainte T_{12} obtenue avec une contrainte de cisaillement macroscopique $\bar{T}_{12} = \bar{T}_{21} = 0.01E_M$. Solution P_C-LS_R (lignes continues bleues) vs. solution dans le cas hétérogène pur sans dipôle de dislocation obtenue avec la procédure LS_R (lignes continues rouges) [53]. 120

- 3.17 Illustration schématique de la boucle rectangulaire de dislocations autour d’une inclusion cubique de coté $C = 20\delta$ noyée dans la phase matrice d’un matériau composite 3D. La boucle rectangulaire de dislocations est définie par les vecteurs ligne et de Burgers représentés respectivement par \mathbf{t} et \mathbf{b} . La boucle est composée successivement d’un segment vis positif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_1 , d’un segment coin positif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_2 , d’un segment vis négatif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_1 et d’un segment coin négatif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_2 121
- 3.18 Cartes des contraintes T_{11} , T_{33} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues dans le cas d’une boucle rectangulaire de dislocations contraint par une inclusion cubique de coté $C = 20\delta$ noyée dans la phase matrice (figure 3.17) d’un matériau composite 3D discrétisé avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128$ voxels. Les propriétés élastiques de l’inclusion cubique et de la matrice sont données par $\mu_I = 2.3001 \times 10^5$ MPa, $\nu_I = 0.3647$ avec $\mu_I/\mu_M = 10$, $\nu_M = \nu_I$. Les simulations numériques ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-8}$ et une contrainte de cisaillement macroscopique imposée $\bar{T}_{12} = \bar{T}_{21} = 0.01E_M$. (a) : Composante T_{11} dans le plan $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3)$. (b) et (c) : Composantes T_{12} et T_{13} dans le plan $(\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ 122
- 3.19 Calcul des contraintes internes dans une matrice contenant des inclusions cubiques entourées de boucles polygonales de dislocations. (a) : La cellule unitaire est discrétisée avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128 = 2097152$ voxels avec une taille de voxel de 10^{-9} m et contient $8 \times 8 \times 8 = 512$ inclusions cubiques (couleur verte). La fraction volumique des inclusions est de 0.15. Les inclusions cubiques de taille $8 \pm 3 \times 10^{-9}$ m sont entourées de 3 ± 1 boucles de dislocations (couleur grise) chacune. Les boucles prismatiques de dislocations ont un vecteur de Burgers suivant la direction \mathbf{e}_3 , de norme $b = 4.05 \times 10^{-10}$ m. Champs de contraintes internes T_{33} normalisées par μ_M , respectivement, pour cinq contrastes mécaniques différents k : 0.9 (b), 0.1 (c), 10 (d), 0.01 (e) et 100 (f). 124
- 4.1 Boucle polygonale initiale de dislocation composée successivement d’un segment vis positif en bas, d’un segment coin positif à droite, d’un segment vis négatif en haut et d’un segment coin négatif à gauche. Les vecteurs ligne et de Burgers de la dislocation sont représentés respectivement par \mathbf{t} et \mathbf{b} . Les vitesses des segments coin et vis sont spécifiées respectivement par \mathbf{v}^e et \mathbf{v}^s . Cette configuration suggère une extension équiaxiale de la boucle polygonale. 132
- 4.2 Distribution d’une densité de dislocations coin α pour la simulation du mécanisme d’annihilation d’un dipôle de dislocations. La densité est composée de deux demi-sinusoides de signes opposés avec des vitesses de normes constantes v_0 et de signes opposés selon l’équation (4.6). 133

4.3	Distribution spatiale de la densité de dislocations α obtenue avec l'approche FFT classique sans filtre (cas 1) à un temps $t = 9.203 \times 10^{-11}s$. Apparition des oscillations de Gibbs bien avant l'annihilation des densités de dislocations α de signes opposés. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $c = 0.25$ [52].	138
4.4	Distribution spatiale de la densité de dislocations α dans la configuration 1D à quatre étapes différentes jusqu'à l'annihilation complète : (a) : $t = 9.2 \times 10^{-10}s$, (b) : $t = 2.76 \times 10^{-9}s$, (c) : $t = 3.37 \times 10^{-9}s$ et (d) : $t = 4.93 \times 10^{-9}s$. Comparaisons entre l'approche spectrale avec le filtre exponentiel et la solution exacte. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$, $c = 0.25$ et $\varepsilon_M = 0.2$ [52].	140
4.5	A gauche : influence de p sur la stabilité numérique du problème d'annihilation 1D avec $\varepsilon_M = 0.2$ à $t = 3.68 \times 10^{-10}s$ bien avant annihilation : (a) : $p = 2$ et (c) : $p = 3$. A droite : influence de ε_M avec $p = 1$, dès l'apparition du choc à $t = 2.76 \times 10^{-9}s$: (b) : $\varepsilon_M = 0.5$ et (d) : $\varepsilon_M = 10^{-2}$. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $c = 0.25$ [52].	142
4.6	Distribution spatiale de la densité de dislocations lors du problème d'annihilation 1D à deux étapes différentes : (a) : $t = 3.68 \times 10^{-10}s$, (b) : $t = 9.81 \times 10^{-9}s$. Equivalence entre le filtre cosinus et le filtre exponentiel. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$, $c = 0.25$ et $\varepsilon_M \simeq 0.08$ [52].	143
4.7	Distribution spatiale de la densité de dislocations α dans la configuration 1D à quatre étapes différentes jusqu'à l'annihilation complète : (a) : $t = 9.2 \times 10^{-10}s$, (b) : $t = 2.76 \times 10^{-9}s$, (c) : $t = 3.37 \times 10^{-9}s$ et (d) : $t = 4.93 \times 10^{-9}s$. Comparaisons entre l'approche spectrale avec le filtre exponentiel et les simulations LS et GLS. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$, $c = 0.25$, $\varepsilon_M = 0.2$ et $\gamma = 0.1$ [52].	145
4.8	Evolution du temps CPU et de l'erreur quadratique (par comparaison avec la solution exacte) en fonction du nombre de Courant c et du nombre de pixel/élément N , obtenue avec l'approche FFT avec le filtre exponentiel (à gauche) et la méthode élément fini GLS (à droite) pour la simulation 1D du transport d'une sinusoïde sur un long trajet [52].	146

4.9	Extension de la boucle polygonale décrite dans la figure 4.1 à cinq étapes différentes jusqu'à la complète annihilation due aux conditions aux limites périodiques, avec l'approche spectrale FFT avec le filtre exponentiel et la méthode élément fini GLS : Les résultats FFT sont à gauche et les résultats EF-GLS sont à droite. (a, b) : $t = 0s$, (c, d) : $t = 1.104 \times 10^{-9}s$, (e, f) : $t = 2.33 \times 10^{-9}s$, (g, h) : $t = 4.54 \times 10^{-9}s$ et (i, j) : $t = 7.363 \times 10^{-9}s$. Les paramètres de la simulation sont $N_{tot} = 512 \times 512$ pixels, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $c = 0.05$. La distribution spatiale de $ \boldsymbol{\alpha} $ est obtenue avec $\varepsilon_M = 0.6$ pour l'approche FFT et $\gamma = 0.05$ pour la méthode EF-GLS [52].	148
4.10	Boucle initiale de dislocation composée de deux demi-boucles rectangulaires respectivement dans les plans de normales \mathbf{x}_2 et \mathbf{x}_3 . Les vecteurs ligne et de Burgers sont représentés respectivement par \mathbf{t} et \mathbf{b} . Les vitesses de chaque segment sont spécifiées par \mathbf{v}^s pour les segments vis et par \mathbf{v}^e pour les segments coins [52].	150
4.11	Rétrécissement d'une boucle polygonale 3D (comme définie dans la figure 4.10) obtenue avec l'approche spectrale FFT filtrée. Les résultats numériques sont montrés à six différentes étapes jusqu'à la complète annihilation de la boucle : (a) : $t = 0s$, (b) : $t = 4.9087 \times 10^{-10}s$, (c) : $t = 2.4543 \times 10^{-9}s$, (d) : $t = 3.6815 \times 10^{-9}s$, (e) : $t = 7.3631 \times 10^{-9}s$ et (f) : $t = 1.2271 \times 10^{-8}s$. Les paramètres de la simulation sont $N_{tot} = 128 \times 128 \times 128$ voxels, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $c = 0.25$. La distribution spatiale de $ \boldsymbol{\alpha} $ est obtenue avec $\varepsilon_M = 0.2$ [52].	151
5.1	Représentation vectorielle de la force thermodynamique \mathbf{F}^α , de la force de glissement \mathbf{g} ($\mathbf{g} \parallel \mathbf{v}$), de la direction dilatante \mathbf{d} et de la vitesse des dislocations \mathbf{v} ($\mathbf{d} \perp \mathbf{v}$).	166
5.2	Figure illustrant la cellule unitaire de la microstructure à canaux (lamins) en Aluminium constituée d'un canal (en couleur rouge) au milieu des précipités (lamellaires) purement élastiques (en couleur bleue).	172
5.3	Courbes macroscopiques $\langle T_{33} \rangle$ vs. $\langle \varepsilon_{33} \rangle$ obtenues avec le modèle 1 lors de la traction uniaxiale d'un monocristal d'Aluminium pour trois différentes orientations cristallographiques ($\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ et $\langle 123 \rangle$). Comparaisons avec les résultats expérimentaux reportés dans [105].	176
5.4	Effet de l'érouissage latent a_{latent} sur l'érouissage d'un monocristal d'Aluminium en traction uniaxiale. (a) : $a_{latent} = 0.5$. (b) : $a_{latent} = 1.0$. (c) : $a_{latent} = 1.5$. (d) : $a_{latent} = 1.7$	177
5.5	Effet de la fraction volumique des précipités sur les courbes macroscopiques $\langle T_{13} \rangle$ vs $\langle \varepsilon_{13} \rangle$ obtenues avec le modèle 1 pour trois différentes fractions de précipités : $f = 0$ (cas du monocristal), $f = 0.3$ et $f = 0.6$	178

5.6	Comparaisons des profils de contrainte T_{13} , de contrainte interne $T_{13} - \langle T_{13} \rangle$, de distorsion plastique U_{13}^p , de la vitesse de distorsion plastique \dot{U}_{13}^p et de la vitesse de distorsion plastique due aux SSDs L_{13}^p obtenus par les modèles 1, 2a, et 2b avec une fraction volumique $f = 0.3$ et après 0.2% de déformation.	180
5.7	Comparaisons des courbes macroscopiques $\langle T_{13} \rangle$ vs. $\langle \varepsilon_{13} \rangle$ obtenues avec les modèles 1, 2a, et 2b dans le cas d'une fraction volumique $f = 0.3$. Le modèle 2b donne un durcissement plus important du fait de la condition d'interface sur la vitesse de distorsion plastique associée aux SSDs et aux GNDs.	181
5.8	Comparaison des distributions des densités de dislocations obtenues avec le modèle 1 (à partir de l'équation d'incompatibilité) et les modèles 2a et 2b (à partir de l'équation de transport des densités de dislocations et de l'équation d'incompatibilité) après 0.06% de déformation macroscopique, pour une fraction volumique $f = 0.3$. Les interfaces canal/précipités sont délimitées par des lignes pointillées en couleur magenta.	183
5.9	(a) : Polycristal d'Aluminium périodique constitué de 100 grains équiaxes (Voronoi périodique) et avec une texture initiale aléatoire. (b) : Coupe oblique du polycristal défini en (a).	185
5.10	Distributions de GNDs après 0.1% de déformation macroscopique. (a) : Distributions de GNDs localisées aux joints de grains avec la relation d'incompatibilité $\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{rot} \mathbf{U}^p$ à partir du modèle 1. (b) : Distribution de GNDs obtenues à partir de l'équation de transport $\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot} (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v} + \mathbf{L}^p)$ à partir du modèle 2a.	185
5.11	Evolution de $\ \boldsymbol{\alpha}\ /b$ au milieu de la cellule unitaire, le long de l'axe x_3 à 0.02% et 0.1% de déformation macroscopique pour les modèles 1 et 2a.	186
5.12	Cartes des champs locaux de contraintes T_{33} , de contraintes internes T_{33}^{int} et de déformations plastiques U_{33}^p à 0.1% de déformation macroscopique. A gauche : Résultats obtenus avec le modèle 1. A droite : résultats obtenus avec le modèle 2a.	187
5.13	Comparaisons des réponses macroscopiques en traction $\langle T_{33} \rangle$ vs $\langle \varepsilon_{33} \rangle$ obtenues avec le modèle 1 et le modèle 2a.	188
5.14	Evolution des champs locaux (a) : \dot{U}_{33}^p , (b) : U_{33}^p , (c) : T_{33} et (d) : T_{33}^{int} le long d'une ligne passant par le milieu de la cellule unitaire le long de l'axe x_3 , à 0.02% et 0.1% de déformation macroscopique.	189
C.1	Pixel avec les cotés parallèles aux axes du repère Cartésien (\mathbf{e}_1 ; \mathbf{e}_2). Superposition d'une base (\mathbf{f}_1 ; \mathbf{f}_2) pivotée de 45° par rapport à (\mathbf{e}_1 ; \mathbf{e}_2). Les champs de contraintes et de déformations sont évalués au centre \mathbf{x} du pixel. Le champ de déplacement est exprimé dans les coins du pixel.	223

Liste des tableaux

1.1	Liste des systèmes de glissement pour les cristaux CFC.	23
4.1	Comparaison des temps de calcul (en secondes) entre l'approche FFT et la méthode EF-GLS, en fonction du nombre de voxels (N_{tot}) et pour un seul pas de temps, dans le cas de l'annihilation et du rétrécissement de la boucle polygonale 3D [52].	153
5.1	Légende des algorithmes 2 et 3.	163
5.2	Angles d'Euler (convention de Bunge) en degré pour trois différentes orientations cristallographiques correspondant à une traction suivant l'axe x_3 dans le repère de l'échantillon pour un monocristal d'Aluminium.	175
5.3	Paramètres matériau et de simulation de la traction uniaxiale du monocristal d'Aluminium.	176
5.4	Paramètres identifiés et utilisés pour la suite en ce qui concerne la loi d'écrouissage de Voce pour la simulation de la traction uniaxiale du monocristal d'Aluminium.	176
5.5	Paramètres du filtre exponentiel et nombre de Courant (cf. chapitre 4).	178
F.1	Temps CPU et valeurs optimales de ε_M (méthode FFT avec le filtre exponentiel) en fonction du nombre de points de Fourier et du nombre de Courant, dans le cas de l'annihilation de dislocation dans la configuration 1D	228

Notations

Dans tout ce document, un symbole en gras représente un tenseur ou un vecteur. La partie symétrique d'un tenseur \mathbf{A} est dénotée \mathbf{A}_{sym} . Sa partie anti-symétrique est \mathbf{A}_{skew} et sa transposée est représentée par \mathbf{A}^t . Le tenseur $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$, avec sa notation indicielle dans un repère Cartésien rectangulaire $A_{ik}B_{kj}$, représente le produit scalaire de \mathbf{A} et \mathbf{B} . D'autre part, le vecteur $\mathbf{A} \cdot \mathbf{V}$, avec une notation indicielle dans un repère Cartésien rectangulaire $A_{ij}V_j$ dénote le produit scalaire du tenseur \mathbf{A} et du vecteur \mathbf{V} . $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ écrit sous la forme indicielle dans un repère Cartésien rectangulaire $A_{ij}B_{kl}$, représente le produit tensoriel de deux tenseurs \mathbf{A} et \mathbf{B} . D'autre part, si \mathbf{A} et \mathbf{B} représentent deux vecteurs, $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ s'écrit sous la forme indicielle dans un repère Cartésien rectangulaire A_iB_j . Le symbole ":" représente le produit contracté de deux tenseurs de second ordre $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij}B_{ij}$ dans un repère Cartésien rectangulaire, ou le produit d'un tenseur d'ordre supérieur avec un tenseur de second ordre $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ijkl}B_{kl}$. Le produit vectoriel d'un tenseur de second ordre \mathbf{A} et d'un vecteur \mathbf{V} , les opérations de divergence \mathbf{div} et de rotationnel \mathbf{rot} sur les tenseurs de second ordre sont définies ligne par ligne, par analogie au cas vectoriel. Ainsi, pour tout vecteur de base \mathbf{e}_i du repère de référence, on a :

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{V})^t \cdot \mathbf{e}_i = (\mathbf{A}^t \cdot \mathbf{e}_i) \times \mathbf{V} \quad (1)$$

$$(\mathbf{div} \mathbf{A})^t \cdot \mathbf{e}_i = \mathbf{div}(\mathbf{A}^t \cdot \mathbf{e}_i) \quad (2)$$

$$(\mathbf{rot} \mathbf{A})^t \cdot \mathbf{e}_i = \mathbf{rot}(\mathbf{A}^t \cdot \mathbf{e}_i). \quad (3)$$

En notation indicielle dans un repère Cartésien rectangulaire, on a :

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{V})_{ij} = e_{jkl}A_{ik}V_l \quad (4)$$

$$(\mathbf{div} \mathbf{A})_i = A_{ij,j} \quad (5)$$

$$(\mathbf{rot} \mathbf{A})_{ij} = e_{jkl}A_{il,k} \quad (6)$$

où e_{jkl} est la notation indicielle du tenseur de permutation de Levi-Civita \mathbf{X} . Les dérivées partielles spatiales sont indiquées par une virgule suivi de l'indice de la composante.

Introduction générale

La plasticité cristalline est basée sur le mouvement des dislocations sous l'action de leur propre contrainte interne et d'une contrainte extérieure appliquée. Dans les théories conventionnelles de plasticité, les interactions entre dislocations sont supposées négligeables devant la friction de réseau et la densité d'obstacles à leurs mouvements (atomes en solution, précipités, forêt de dislocations ...). Cela suppose que la déformation plastique résulte d'un grand nombre de glissements cristallographiques, distribués indépendamment, de sorte que les dislocations qui en sont responsables peuvent être considérées indépendamment les unes des autres, et qu'il n'existe pas de corrélation entre elles. Les propriétés mécaniques du matériau sont alors obtenues en faisant la moyenne des mécanismes microscopiques individuels de déformation plastique. La théorie conventionnelle implique alors une transition directe de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique et aboutit à des modèles locaux, reliant par exemple les vitesses de déformation plastique aux champs de contraintes appliquées.

Cependant, dans la réalité, il existe des cas où les interactions entre les dislocations sont assez considérables devant la friction du réseau et devant les autres obstacles à leurs mouvements. En effet, l'augmentation de la déformation plastique entraîne la multiplication des dislocations qui deviennent plus nombreuses et forment alors des structures corrélées sous l'action de leur champ d'interactions élastiques, à une échelle de longueur intermédiaire qui échappe à toute observation à l'échelle macroscopique. Ceci est justifié par la naissance des murs réguliers de dislocations lors d'essais de fatigue, ou encore l'apparition des bandes de glissement localisées à la surface des monocristaux. Dès lors, l'application des opérations de moyenne effectuées à l'échelle microscopique sur le mouvement des dislocations n'est plus valable dans ces cas, d'où la nécessité d'utiliser les théories qui prennent en compte le passage à une échelle intermédiaire et qui rendent compte des dislocations polarisées ou géométriquement nécessaires [14].

Il existe des méthodes récentes de plasticité cristalline telles que les méthodes de la mécanique statistique [92, 59, 243], de champs de phase [190, 126], de dynamique des dislocations discrètes (DDD) [133, 12, 48, 85] et des méthodes à gradients ou à milieux continus généralisés [8, 74]... qui tiennent compte de la formation des structures des dislocations ainsi que des interactions entre ces dernières.

Récemment, une théorie élasto-plastique basée sur les champs continus de dislocations, et tenant compte de l'échelle de longueur intermédiaire introduite de manière phénoménologique, a été développée par Acharya [1, 193, 7] sous le nom de "Mécanique des Champs de Dislocations" ou "Field Dislocation Mechanics (FDM)" en anglais, pour rendre compte des distributions inhomogènes des dislocations. La théorie FDM s'appuie sur l'idée selon laquelle, les structures émergentes de dislocations sont définies non de manière statistique par une longueur de ligne de dislocation par unité de volume, mais en tenant compte de leur orientation et de leur nature sur une surface de dimensions appropriées, au travers d'un "tenseur densité de dislocation" [177, 31, 51, 171, 237, 129, 128]. La FDM permet de déterminer les contraintes internes à longues portées dues aux incompatibilités de distorsion élastique (distorsion du réseau cristallin) associées à la présence des densités de dislocations géométriquement nécessaires ("Geometrically necessary Dislocations" en anglais ou GNDs) encore appelées densités de dislocations en excès ou polarisées. Elle permet également de prendre en compte le mouvement des dislocations envisagé de manière collective et interprété comme un phénomène de transport des densités de dislocations à travers une équation aux dérivées partielles de type hyperbolique [171, 2, 224, 223]. Dans cette équation, les vitesses des densités de dislocations au sein du matériau dérivent de l'action des forces motrices de type Peach-Koehler aux travers des relations constitutives appropriées [2].

La théorie FDM a été déjà appliquée à la plasticité à l'échelle mésoscopique sous le nom de "Phenomenological Mesoscopic Field Dislocation Mechanics" en anglais ou (PMFDM) en anglais (ou "Mécanique des Champs de Dislocation Mésoscopique et Phénoménologique" en français) [5, 193, 7]. Les méthodes FDM et PMFDM ont permis d'appréhender certains aspects complexes du processus de déformation élasto-plastique, tels que les effets de taille [7, 213, 209], l'organisation des structures de dislocations [212, 80, 45] et l'érouissage cinématique induit de manière naturelle par la distribution des densités de dislocations de type GNDs [209, 214, 189]. Motivé par ses capacités prédictives, plusieurs modèles inspirés de la FDM ont été récemment développés, prenant en compte des phénomènes physiques couplés aux dislocations. Ainsi, la FDM a été étendue aux problèmes de rupture couplée à la plasticité, où les fissures sont décrites de manière continue par une nouvelle densité de défauts [81]. D'autres types de défauts cristallins ont été également étudiés par la suite, comme les désinclinaisons pour obtenir les rotations élastiques incompatibles occasionnées aux joints de grains [82, 210]. Plus récemment, ce sont les densités de désinclinaisons généralisées qui sont introduites pour rendre compte de façon continue, les discontinuités de la distorsion élastique qui peuvent survenir aux niveaux des hétéro-interfaces, des pointes de macles... [6, 24].

Les théories de la FDM et PMFDM ainsi que ses modèles dérivés ont été implémentés numériquement avec la méthode des éléments finis (EF) de l'échelle nanométrique à l'échelle mésoscopique [1, 2, 193, 7]. Les applications sont généralement limitées aux structures de petites dimensions telles que les films minces et les nanostructures. De nos jours, l'application de la FDM à l'étude des agrégats polycris-

tallins tridimensionnels demeure très limitée car les méthodes éléments finis exigent des ressources numériques et informatiques considérables.

Une alternative très attractive à la méthode EF est une méthode de calcul basée sur les Transformées de Fourier Rapides (ou "Fast Fourier Transforms" (FFT) en anglais) qui sont utilisées pour la résolution des équations d'équilibre de la mécanique des milieux continus pour déterminer les propriétés effectives et les champs locaux dans les polycristaux et les matériaux composites [166, 169, 170, 167, 65, 98, 137, 161, 176, 11]. En effet, les schémas numériques de type FFT permettent de résoudre l'équation de type Lippmann-Schwinger [166] qui découlent des problèmes élastiques hétérogènes, grâce à l'utilisation des fonctions de Green modifiées d'un milieu de référence choisi de manière optimale. Les champs élastiques résultants sont obtenus dans l'espace réel grâce à l'utilisation de la transformée de Fourier inverse. Parmi les schémas itératifs les plus connus on peut citer le "schéma basique" et le "schéma accéléré" [167, 65, 137, 228]. La convergence de ces schémas itératifs est basée sur la réalisation de l'équilibre des contraintes dans l'espace de Fourier et dépend fortement du contraste du module d'élasticité et du choix du milieu de référence. D'autres schémas numériques plus raffinés et plus adaptés aux contrastes mécaniques infinis entre phases ont été récemment développés. Notamment, les schémas du "Lagrangien augmenté" [161], du "gradient conjugué" [247, 34] et de type "polarisation" [164]. Le principal intérêt des approches FFT réside dans l'optimisation du temps de calcul [167, 183, 141, 58]. Ses inconvénients demeurent (i) : le besoin de disposer d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) ou cellule unitaire de type périodique et (ii) : l'émergence d'oscillation numérique liée aux transformées de Fourier près des régions à forts gradients spatiaux (interfaces de discontinuité physique, défauts cristallins), qu'il est nécessaire de traiter.

Motivé par la précision et la rapidité des schémas de type FFT utilisés dans l'étude des composites et des polycristaux, nous nous intéressons exclusivement dans cette thèse au développement d'une technique de modélisation micromécanique à champs complets de type FFT, pour la résolution des équations de la FDM et de la PMFDM. En effet, une telle technique de modélisation de type FFT vise clairement l'optimisation des temps de calculs, de telle sorte que la modélisation des agrégats polycristallins devienne plus accessible pour cette théorie récente. Cette technique de modélisation répondra précisément aux interrogations sur l'utilisation de la FFT pour la résolution des équations des champs élastiques et de transport des densités de dislocations, de façon aussi précise que la méthode EF, mais avec une efficacité remarquable en terme de temps de calculs.

Au vue de ces objectifs, ce mémoire sera organisé en cinq chapitres :

Le premier chapitre présente l'état de l'art sur la plasticité cristalline des métaux et alliages de type CFC (cubique à faces centrées) et les méthodes actuelles de modélisation. Dans un premier temps les mécanismes de déformation plastique par glissement des dislocations dans les métaux et alliages de type CFC, ainsi que la

formulation classique de la plasticité cristalline seront rappelés. Ensuite, les modèles micromécaniques à champs moyens et à champs complets pour la prédiction du comportement des agrégats polycristallins seront brièvement décrits. En dernier lieu, les formulations de plasticité cristalline plus récentes, prenant en compte la formation des structures de dislocations polarisées et les interactions entre celles-ci à une échelle intra-granulaire ou intra-phase seront introduites.

Le deuxième chapitre est consacré à la présentation des fondements de la théorie de la mécanique des champs de dislocations. Nous montrerons que la mécanique des champs de dislocations est basée sur la notion de représentation continue de dislocations au travers d'un tenseur densités de dislocations auxquelles sont associées les distorsions élastiques/plastiques incompatibles. Ensuite, nous introduirons la décomposition de Stokes-Helmholtz de la distorsion élastique pour pouvoir déterminer de façon unique les champs de déformations élastiques et de contraintes dûs à la présence d'une densité de dislocations au sein du cristal [2]. Nous introduirons également l'équation de transport des densités de dislocations et le calcul des forces motrices associées au phénomène de mouvement des dislocations dans un cadre thermodynamique. Dans ce chapitre, nous rappellerons les formulations variationnelles pour la résolution des champs élastiques et de l'équation de transport des densités de dislocations par élément finis. En dernier lieu nous présenterons l'extension mésoscopique de la mécanique des champs de dislocations et les conditions de continuité aux interfaces introduites par Acharya [3].

Le troisième chapitre aborde la question de la détermination précise des champs élastiques générés par la présence des densités de dislocations, par une approche FFT sans développement d'oscillation numérique résultant des discontinuités induites par les défauts dans les matériaux élastiques linéaires homogènes et hétérogènes. Nous montrerons l'intérêt d'utiliser les transformées de Fourier discrètes ("Discrete Fourier Transforms" en anglais ou DFT) couplées aux techniques de différences finies centrées ou centrées tournées pour le calcul des dérivées partielles spatiales. Dans le cas homogène, l'approche sera validée par des comparaisons avec la méthode des éléments finis (EF) et les solutions analytiques en terme de précision et de temps de calcul, dans le cas particulier des dislocations individuelles de types vis et coin. Dans le cas d'un couplage entre hétérogénéités élastiques et distribution de dislocations, la détermination des champs élastiques est basée sur l'utilisation d'un schéma itératif basé sur l'algorithme à point fixe (schéma basique) développé initialement par Moulinc et Suquet [166, 167] pour un matériau hétérogène élastique et périodique. La validation de cette approche se fera par des comparaisons avec les solutions analytiques rapportées dans [55, 56] pour les matériaux composites élastiques, linéaires et hétérogènes de type matrice/inclusion, contenant différentes distributions spatiales de densités de dislocations polarisées.

Dans le quatrième chapitre, il sera question de développer une approche spectrale de type FFT pour résoudre de façon rapide et stable, l'équation de type hyperbolique, gouvernant l'évolution spatio-temporelle des densités de dislocations de la

FDM. Cette approche FFT purement cinématique sera validée par des comparaisons avec la solution exacte et la solution EF dans le cas unidimensionnel, correspondant à l'annihilation d'un dipôle de dislocations. D'autres cas physiques tels que l'extension et l'annihilation des boucles de dislocations en 2D et 3D seront également rapportés et comparés aux approximations EF.

Le cinquième chapitre est dédié au développement d'une technique numérique pour la résolution des équations de la PMFDM dans le cadre d'une formulation FFT élasto-visco-plastique (EVP-FFT). Le développement sera basé sur l'utilisation des approches spectrales des chapitres 3 et 4, respectivement, sur la résolution des champs élasto-statiques en élasticité hétérogène, mais avec un schéma itératif plus raffiné tel que le schéma du Lagrangien augmenté, et sur la résolution de l'équation de transport des densités de dislocations géométriquement nécessaires, avec la prise en compte de la contribution des densités de dislocations statistiquement stockées (ou Statistically Stored Dislocations : SSDs en anglais). Le développement prendra également en compte les conditions interfaciales aux interfaces de type joints de grains ou de phases. La technique sera par la suite appliquée à la modélisation de la déformation plastique des agrégats polycristallins et des microstructures périodiques à canaux de type CFC. Nous étudierons particulièrement la formation des structures de GNDs, les effets de la prise en compte des conditions de continuité tangentielle aux interfaces sur les champs mécaniques.

Le présent mémoire s'achève par une conclusion générale, suivie de perspectives à moyen et à long termes sur l'extension des méthodes développées dans cette thèse de doctorat à des cas numériques et des microstructures réelles plus complexes.

Chapitre 1

Etat de l'art sur la plasticité cristalline et les méthodes actuelles de modélisation

1.1 Objectifs

Ce premier chapitre présente une revue bibliographique sur la déformation plastique des métaux et alliages à structure cubique à faces centrées (CFC). Dans ces types de matériaux, la déformation plastique se manifeste par la présence des défauts cristallins tels que les défauts ponctuels (lacunes, atomes interstitiels, ...), linéaires (dislocations) et surfaciques (macles, joints de grains, joints de phases, ...). Dans cette thèse, nous nous intéressons particulièrement à la déformation plastique basée sur le glissement des dislocations. La première partie de ce chapitre s'intéresse donc au mécanisme de déformation plastique par glissement dans les métaux et alliages de type CFC, qui inclut la définition des dislocations, de leurs champs élastiques et de leurs interactions élastiques, des systèmes de glissement, ainsi que la formulation classique de la plasticité cristalline. La deuxième partie aborde l'application de la plasticité cristalline aux agrégats polycristallins en décrivant plus particulièrement les modèles à champs moyens et à champs complets. La troisième partie énumère les limites des modèles classiques, notamment leur incapacité à rendre compte de la formation de structures de dislocations, des effets de taille... . Le chapitre se termine par un descriptif des formulations de plasticité cristalline plus complexes, prenant en compte la formation des structures de dislocations et les effets d'interactions entre celles-ci sur les champs mécaniques intra-granulaires.

1.2 Glissement cristallographique et dislocations

1.2.1 Lignes de glissement et dislocations

L'activité plastique a été tout d'abord observée sur les éprouvettes des métaux et alliages cristallins déformées au cours des essais mécaniques. Ces observations menées à l'aide des techniques expérimentales (MET : "Microscopie Electronique en Transmission", MEB : "Microscopie Electronique à Balayage", EBSD : "Electron Back Scattered Diffraction" (Diffraction d'électrons rétrodiffusés en français) [111], AFM : "Atomic Force Microscopy" (Microscopie à force atomique en français) [227, 79, 180], ...) ont révélé l'apparition de bandes de glissement qui montrent la présence de dislocations et leur glissement plastique qui se manifeste par l'apparition de marches en surface lorsque les dislocations sortent de l'échantillon (figure 1.1) [114, 157, 175, 243, 157, 175]. Au cours de leur mouvement, les dislocations s'anihilent et se multiplient. L'un des phénomènes de multiplication des dislocations est la formation de la boucle de Frank-Read [78]. Ce mécanisme a été par exemple observé dans un échantillon de Silicium avec des précipités de Cuivre (Cu) [49], ou encore dans l'Aluminium (Al) (figure 1.2) [155]. Pour comprendre ces mécanismes de glissement, nous allons nous intéresser d'abord à la définition des dislocations individuelles, et aux champs élastiques qu'elles génèrent dans un contexte d'élasticité linéaire.

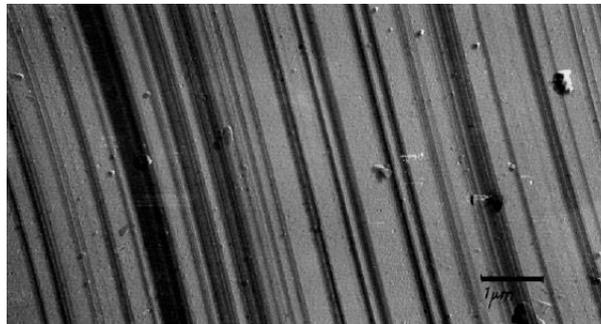


FIGURE 1.1 – Observation expérimentale (AFM) de lignes de glissement à la surface d'un monocristal de Cu-30at% Zn déformé à 19.4% en traction à 77K [243].

1.2.2 Dislocations individuelles et vecteur de Burgers

La notion de dislocation a été introduite par Volterra [230] en 1907. Les dislocations sont classées en dislocations de type coin et de type vis. La description de la géométrie des dislocations est présentée dans la figure 1.3. Cette description est faite à partir d'un modèle d'arrangement atomique dans une structure cubique

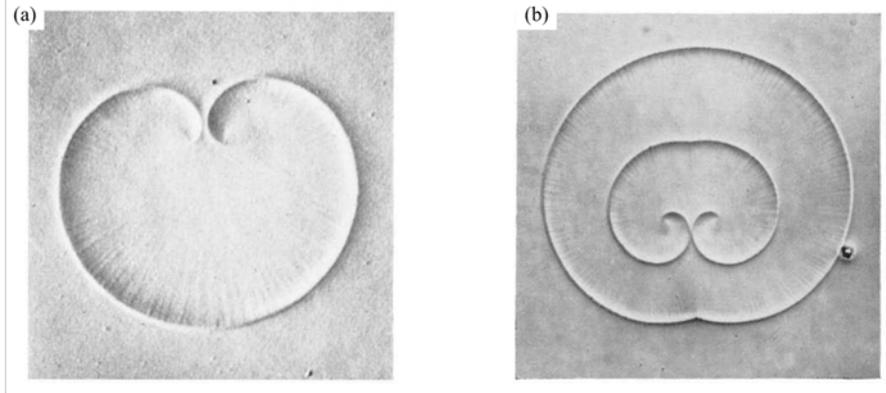


FIGURE 1.2 – Observation expérimentale du développement d’une source de Frank-Read à la surface d’un échantillon d’Aluminium [155]. Grossissement (a) $\times 800$ et (b) $\times 350$.

simple (figure 1.3(a)), où les liaisons entre les atomes sont représentées par des ressorts souples.

L’arrangement des atomes autour d’une dislocation coin est expliqué sur la figure 1.3(b), où l’on suppose que toutes les liaisons le long du plan ABCD sont coupées et que les faces du cristal sont séparées de sorte qu’un demi-plan supplémentaire d’atomes peut être inséré dans la fente. Les faces de la fente sont donc déplacées d’une distance interatomique. La plus grande perturbation des atomes de par leur position normale par rapport à leurs voisins s’effectue dans la zone proche de la ligne DC. Cette ligne est appelée dislocation coin et est représentée usuellement par le symbole \perp .

L’arrangement des atomes autour d’une dislocation vis peut être simulé en déplaçant le cristal d’un côté du plan ABCD par rapport à l’autre côté, dans la direction AB comme dans la figure 1.3(c). Les plans atomiques parallèles, qui sont initialement perpendiculaires à la ligne DC, sont donc transformés en surface hélicoïdale. La nature spirale est clairement démontrée par la position des atomes dans la figure 1.3(d). La ligne DC représente une dislocation vis représentée usuellement par le symbole \odot .

Considérons un cristal contenant une dislocation vis représentée par la figure 1.4(a). Le circuit de Burgers est la courbe fermée MNO PQ (orientée selon la règle du tire-bouchon de Maxwell) obtenue en se déplaçant par sauts successifs égaux à une distance interatomique autour de la dislocation vis. Dans un cristal parfait, cette même courbe n’est pas fermée (figure 1.4(b)). Le défaut de fermeture MQ parallèle à la ligne de la dislocation représente le vecteur de Burgers de la dislocation noté \mathbf{b} . Nous déduisons de cette illustration que les dislocations vis ont un vecteur de Burgers parallèle au vecteur ligne de la dislocation. Ce même processus appliqué à une

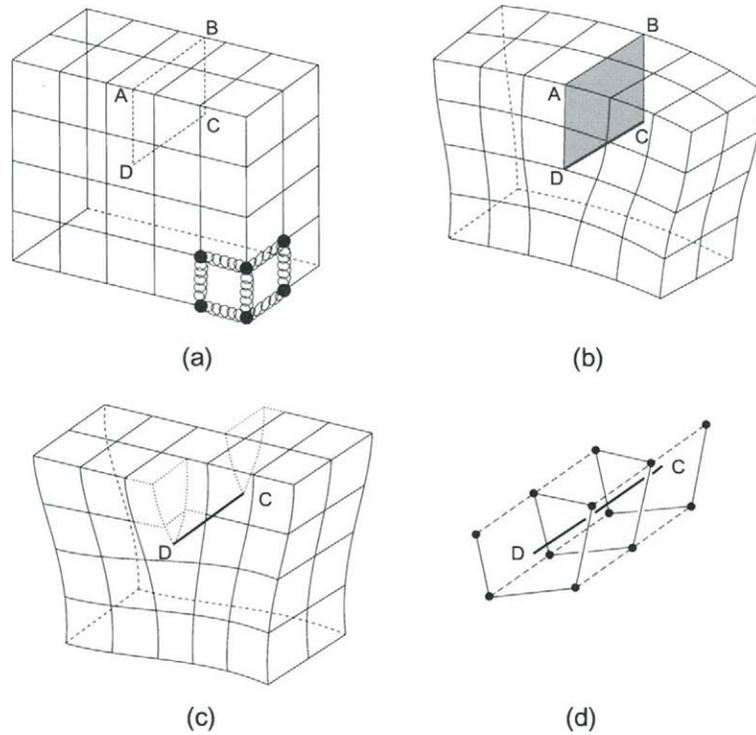


FIGURE 1.3 – (a) : Modèle d'un réseau cubique simple et parfait. (b) : Dislocation coin positive DC formée en insérant un demi-plan supplémentaire d'atomes en ABCD. (c) : Dislocation vis DC formée en déplaçant les faces ABCD d'un côté par rapport à l'autre suivant la direction AB. (d) : Arrangement en spirale des atomes adjacents à la ligne DC dans le cas de la dislocation vis $[110]$.

dislocation coin dans les figures 1.4(c) et (d), permet d'affirmer que les dislocations coins ont un vecteur de Burgers perpendiculaire au vecteur ligne de dislocation. Toutefois, il existe des dislocations mixtes, possédant à la fois un caractère vis et coin.

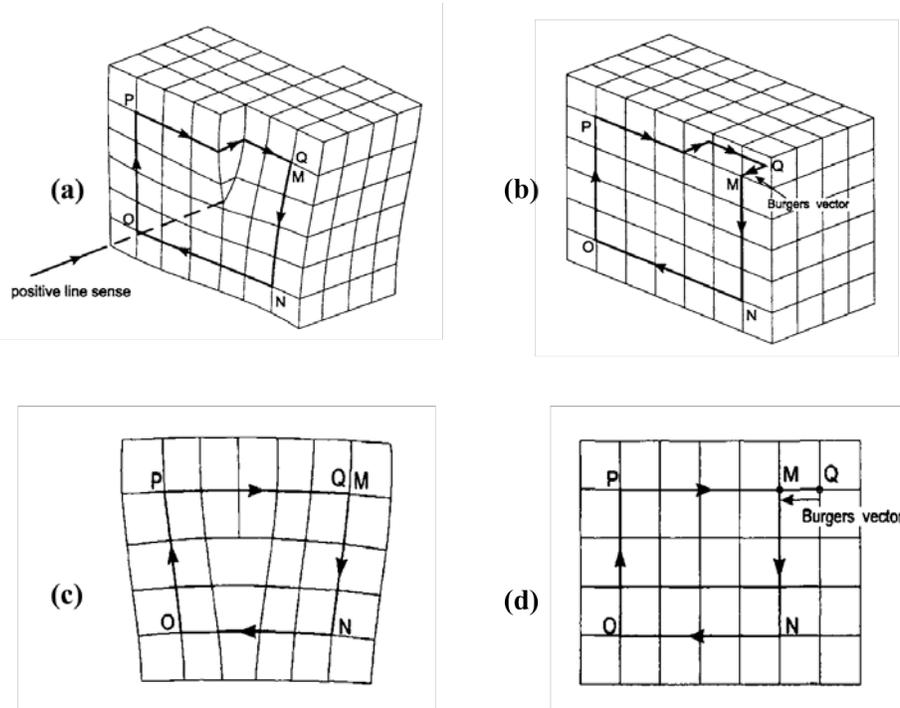


FIGURE 1.4 – (a) et (c) : Circuits de Burgers autour d’une dislocation vis et d’une dislocation coin. (b) et (d) : Mêmes circuits de Burgers dans un cristal parfait où le défaut de fermeture représente le vecteur de Burgers [110].

Le processus de déformation plastique par glissement des dislocations est illustré par la figure 1.5 dans le cas d’une dislocation coin. Nous considérons le demi-plan supérieur x introduit initialement par la présence de la dislocation coin (figure 1.5(a)). Lorsque la contrainte appliquée au matériau (représentée par des flèches) atteint une valeur critique, les atomes du plan y se rompent le long du plan de cisaillement. Le plan y devient le demi-plan supérieur et les atomes du demi-plan x se lient à ceux du plan inférieur y (cas des atomes 1 et 2 de la figure 1.5(b)). Au fur et à mesure que ce processus se répète, la dislocation se déplace jusqu’à former une marche visible lorsqu’elle rencontre une surface libre. Cette marche, dont la largeur est égale à une distance interatomique, correspondant à l’amplitude du vecteur de Burgers \mathbf{b} , représente la ligne de glissement évoquée plus haut.

Le déplacement du demi-plan supplémentaire s’effectue le long d’un plan appelé plan de glissement. Le plan de glissement n’est pas unique et dépend du type de dislocation et du type de cristal. Il est important de retenir que la direction de glissement d’une dislocation est toujours parallèle à son vecteur de Burgers.

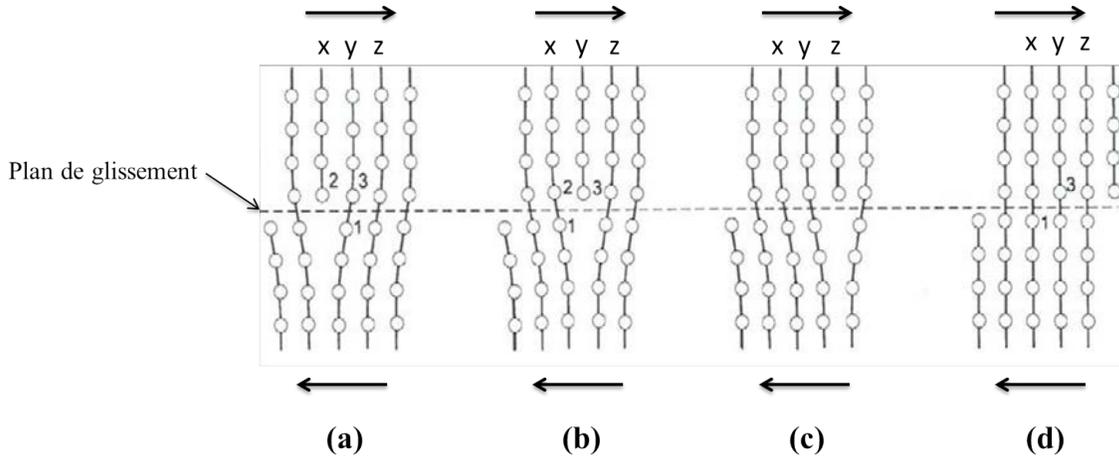


FIGURE 1.5 – Mouvement d’une dislocation coin sous l’action d’une contrainte de cisaillement représentée par les flèches. (a) : x représente le demi-plan atomique supplémentaire initial. (b) : Le demi-plan x se déplace, d’un vecteur de Burgers \mathbf{b} , vers la droite et se lie avec la partie inférieure du plan y , la partie supérieure du plan y devient le demi-plan supplémentaire. (c) : répétition du même processus en (a) et (b). Le plan z devient le demi plan supplémentaire. (d) : Formation d’une marche sur la surface libre. [110]

1.2.3 Champs élastiques des dislocations

1.2.3.1 Dislocations rectilignes et infinies

La distorsion élastique autour d’une dislocation vis rectiligne infinie peut être représentée par un cylindre dans un corps élastique comme sur la figure 1.6(b), déformé de manière à obtenir la même distorsion créée par la dislocation vis AB décrite sur la figure 1.6(a). Au centre du cylindre, il existe une région où l’arrangement atomique est très fortement perturbé. Cette région s’appelle le cœur de la dislocation de rayon r_0 . Dans cette partie du cristal, la théorie élastique linéaire ne s’applique pas car les déformations sont trop importantes et singulières. Par contre, à une distance r (supérieure à r_0) du centre, le cristal suit une distorsion élastique qui est décrite en élasticité linéaire. L’analyse de la configuration présentée sur la figure 1.6(b) montre qu’il n’existe pas de déplacement dans les directions x et y mais seulement selon l’axe z , ce qui correspond à une déformation antiplane :

$$u_x = u_y = 0, \quad u_z \neq 0 \quad (1.1)$$

De plus, le déplacement dans la direction z augmente uniformément de zéro à b lorsque θ varie de zéro à 2π :

$$u_z = \frac{b\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1}(y/x). \quad (1.2)$$

Les composantes du champ de déformations élastiques s'écrivent dans le repère Cartésien (x,y,z) sous la forme suivante [101, 110] :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^e &= \varepsilon_{yy}^e = \varepsilon_{zz}^e = \varepsilon_{xy}^e = \varepsilon_{yx}^e = 0 \\ \varepsilon_{xz}^e &= \varepsilon_{zx}^e = -\frac{b}{4\pi} \frac{y}{(x^2 + y^2)} \\ \varepsilon_{yz}^e &= \varepsilon_{zy}^e = \frac{b}{4\pi} \frac{x}{(x^2 + y^2)}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Dans le cas d'un comportement élastique, linéaire et isotrope, le champ de contraintes peut être évalué à partir de la loi de Hooke sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} T_{xx} &= T_{yy} = T_{zz} = T_{xy} = T_{yx} = 0 \\ T_{xz} &= T_{zx} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{(x^2 + y^2)} \\ T_{yz} &= T_{zy} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{(x^2 + y^2)}, \end{aligned} \quad (1.4)$$

où, μ représente le module de cisaillement du matériau. La dislocation vis génère donc des contraintes de cisaillement hors plan par rapport au plan perpendiculaire à sa ligne de dislocation.

La distorsion élastique autour d'une dislocation coin rectiligne infinie peut également être représentée par un cylindre dans un corps élastique de rayon R , déformé de manière à obtenir la même distorsion créée par la dislocation coin (figure 1.7(b)). Le champ de contraintes généré par une dislocation coin est plus complexe que dans le cas d'une dislocation vis. L'observation de la figure 1.7(b) montre que le déplacement et les déformations suivant l'axe z sont nuls ($u_z = 0$, $\varepsilon_{zx}^e = 0$), contrairement aux déplacements suivant les axes x et y ($u_x \neq 0$, $u_y \neq 0$), ce qui correspond à une déformation plane. La dislocation coin provoque des contraintes de cisaillement et des contraintes normales dans le plan xy . Ces contraintes s'écrivent sous la forme suivante [110] :

$$\begin{aligned} T_{xz} &= T_{zx} = T_{yz} = T_{zy} = T_{yx} = 0 \\ T_{xx} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ T_{yy} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ T_{xy} &= T_{yx} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ T_{zz} &= \nu(T_{xx} + T_{yy}), \end{aligned} \quad (1.5)$$

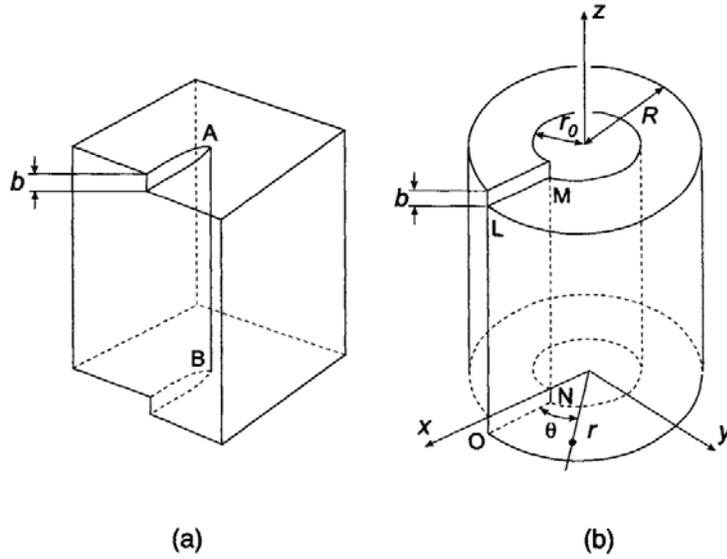


FIGURE 1.6 – (a) : Cristal contenant une dislocation vis AB. (b) : Cylindre déformé de manière à obtenir la même distorsion créée par la dislocation vis dans (a) [110].

où, ν représente le coefficient de Poisson du matériau. Les détails sur la dérivation de ces champs élastiques peuvent être retrouvés dans [101, 110]. Les profils des champs de contraintes T_{xy} , T_{xx} et T_{yy} sont montrés dans le plan (xy) sur la figure 1.8.

1.2.3.2 Force motrice de glissement d'une dislocation

L'application d'une contrainte de cisaillement suffisante τ_a à un cristal contenant une dislocation coin provoque le mouvement de cette dernière sur son plan de glissement. Les deux parties du cristal contenant la dislocation coin se déplacent d'un vecteur de Burgers \mathbf{b} (figure 1.9). Le travail W_a de la contrainte τ_a appliquée au cristal s'écrit sous la forme :

$$W_a = \tau_a b L l. \quad (1.6)$$

Ce travail est alors égal à celui d'une force F_m nécessaire pour déplacer la dislocation de longueur l sur toute la longueur L du cristal :

$$\tau_a b l L = F_m L \quad \implies \quad \frac{F_m}{l} = \tau_a b. \quad (1.7)$$

F_m/l représente la force par unité de longueur exercée par la contrainte τ_a sur la ligne de la dislocation. Etant donné que la dislocation se déplace sur son plan de glissement, nous avons seulement besoin de considérer la contrainte de cisaillement sur ce plan. Les composantes normales au plan de glissement ne contribuent pas au mouvement de la dislocation. De plus, dans cet exemple, seules les composantes de

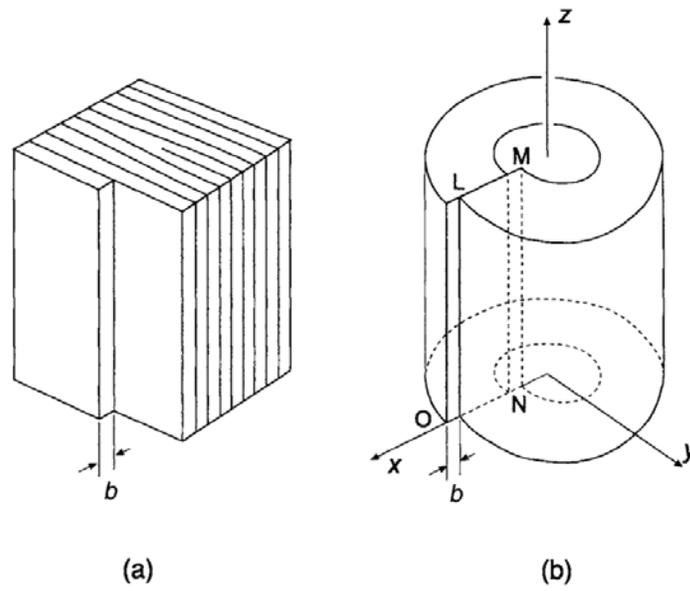


FIGURE 1.7 – (a) : Cristal contenant une dislocation coin. (b) : Cylindre déformé de manière à obtenir la même distorsion créée par la dislocation coin représentée sur la figure (a) [110].

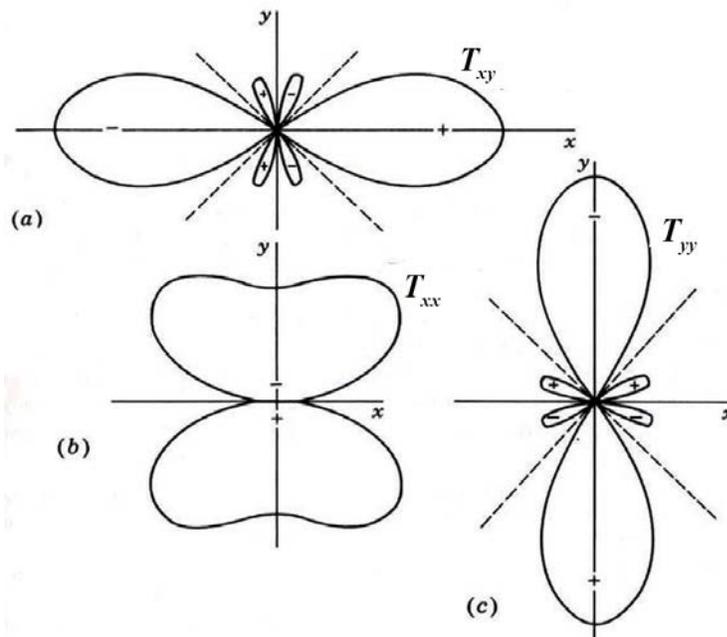


FIGURE 1.8 – Profils des composantes T_{xy} , T_{xx} et T_{yy} du champ de contraintes générées par une dislocation coin dans le plan (xy) [101].

la contrainte de cisaillement dans la direction du vecteur de Burgers \mathbf{b} contribuent au mouvement de la dislocation.

La force agissant sur la dislocation prend alors une forme plus générale appelée force de Peach-Koehler, donnée par l'équation de Peach-Koehler [179] sous la forme :

$$\mathbf{F}_m = (\mathbf{T} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{t}, \quad (1.8)$$

où \mathbf{T} est la contrainte de Cauchy, $\mathbf{T} \cdot \mathbf{b}$ est la force locale par unité de longueur le long de la ligne de dislocation normale au vecteur de Burgers (figure 1.9) et \mathbf{t} est le vecteur ligne de dislocation normale à la direction de \mathbf{F}_m .

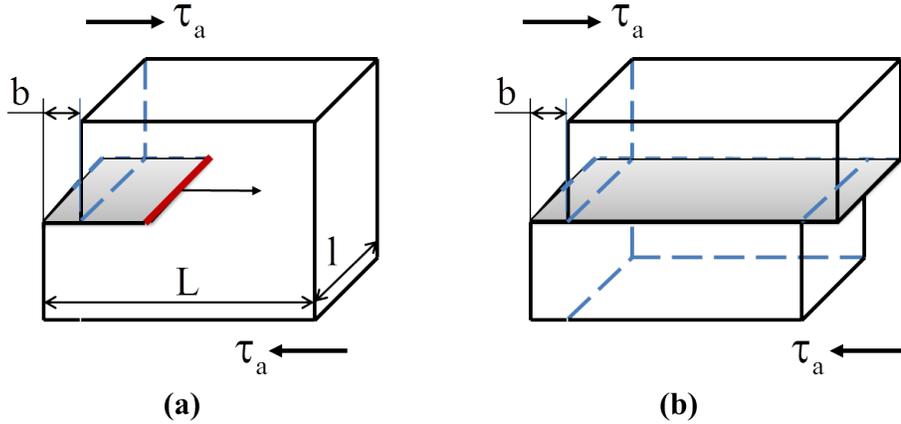


FIGURE 1.9 – Mouvement d'une dislocation coin dans un cristal sous l'action d'une contrainte de cisaillement τ_a [110].

1.2.3.3 Force d'interaction entre dislocations

Toute dislocation présente dans un cristal crée autour d'elle une contrainte à longue distance. Ce champ de contrainte exerce sur les autres dislocations une force appelée force d'interaction. Pour comprendre ce concept, considérons par exemple deux dislocations coins de vecteurs lignes parallèles à l'axe z (figure 1.10). La dislocation (1) génère un champ de contrainte que la dislocation (2) perçoit sous forme d'une force de Peach-Koehler. Les composantes de cette force sont obtenues après calculs sous la forme suivante [110] :

$$\begin{aligned} F_x &= T_{xy}b = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ F_y &= -T_{xx}b = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \end{aligned} \quad (1.9)$$

où, T_{xx} et T_{xy} sont les composantes du champ de contrainte générée par la dislocation (1). Étant donné qu'une dislocation peut se glisser lors du mécanisme de glissement seulement dans le plan contenant son vecteur ligne et son vecteur de Burgers, la composante la plus importante de la force d'interaction dans la description du comportement de la dislocation (1) est F_x tracée sur la figure 1.11 en fonction de x . Le signe de F_x est inversé si les dislocations (1) et (2) sont de signes opposés.

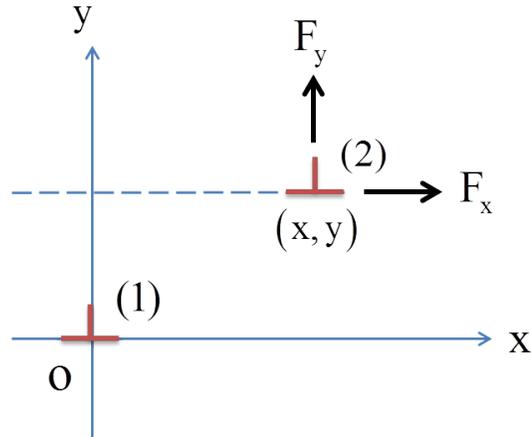


FIGURE 1.10 – Forces considérées dans l'étude de l'interaction entre deux dislocations coins parallèles [110].

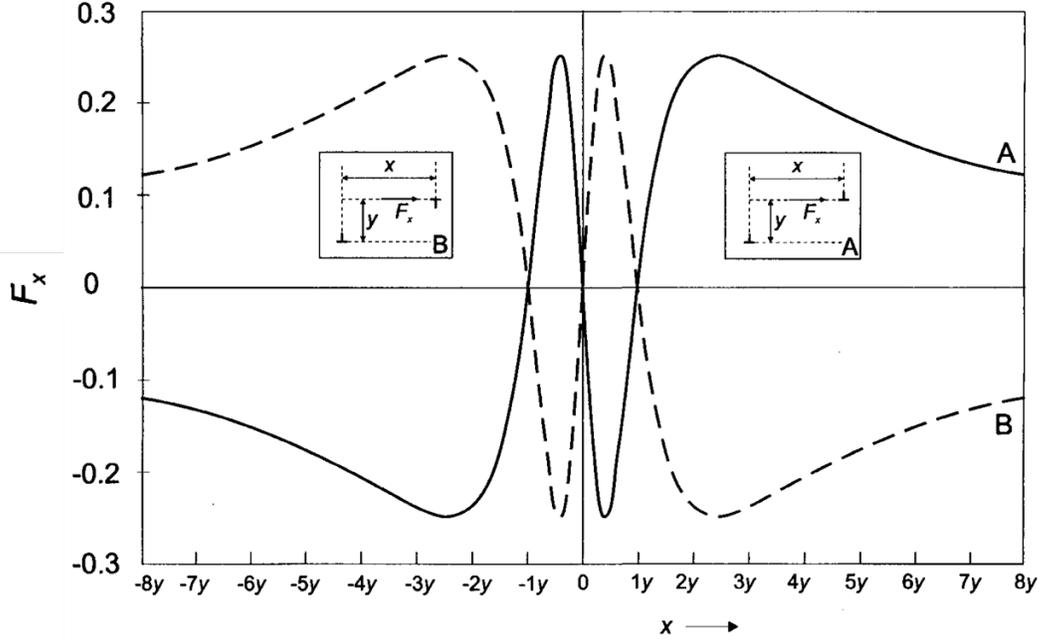


FIGURE 1.11 – Profil de la force d'interaction F_x par unité de longueur entre deux dislocations coins de vecteurs lignes et de vecteurs de Burgers parallèles. La courbe A en ligne continue représente la variation de F_x dans le cas de deux dislocations de mêmes signes. La courbe B en ligne pointillée représente la variation de F_x dans la cas de deux dislocations de signes opposés [110].

1.2.3.4 Forces images

Lorsqu'une dislocation est proche d'une surface libre, elle est attirée par cette dernière par une force dite force image [150, 151]. De la même manière, une dislocation est repoussée par une surface rigide. Pour expliquer ce phénomène, considérons le cas d'une dislocation rectiligne vis parallèle à une surface libre plane comme montré sur la figure 1.12(a). Les conditions aux limites à la surface libre nécessitent $T_{zx} = T_{yx} = T_{xx} = 0$. Cette condition est remplie que lorsqu'on superpose la contrainte générée par la dislocation vis à celle d'une dislocation imaginaire vis de signe contraire définie de l'autre côté du matériau à $x = -d$ (figure 1.12(a)). Dans cette situation, la solution requise pour la contrainte dans le matériau ($x > 0$) est donc [110] :

$$\begin{aligned}
 T_{zx} &= -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{((x-d)^2 + y^2)} + \frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{((x+d)^2 + y^2)} \\
 T_{zy} &= \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x-d}{((x-d)^2 + y^2)} - \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x+d}{((x+d)^2 + y^2)}.
 \end{aligned} \tag{1.10}$$

La force par unité de longueur induite par la surface libre sur la dislocation vis dans la direction x est obtenue à partir du second terme de T_{zy} en $x = d$ et $y = 0$. Elle représente simplement la force de la dislocation imaginaire vis à $x = -d$ et s'écrit :

$$F_x = -\frac{\mu b^2}{4\pi d}. \quad (1.11)$$

Dans le cas d'une dislocation rectiligne coin (figure 1.12(b)), la superposition du champ de contrainte d'une dislocation imaginaire coin annule la contrainte T_{xx} à $x = 0$, contrairement à T_{yx} . Lorsqu'on ajoute les termes supplémentaires pour vérifier les conditions aux limites, la contrainte de cisaillement dans le matériau est égale à :

$$T_{yx} = \frac{\mu b(x-d)}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x-d)^2 - y^2}{((x-d)^2 + y^2)^2} - \frac{\mu b(x+d)}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x+d)^2 - y^2}{((x+d)^2 + y^2)^2} - \frac{\mu b d}{\pi(1-\nu)} \frac{(x-d)(x+d)^3 - 6x(x+d)y^2 + y^4}{((x+d)^2 + y^2)^3}. \quad (1.12)$$

Le premier terme de cette équation représente la contrainte en absence de surface libre, le second terme est la contrainte de la dislocation imaginaire à $x = -d$, et le troisième terme est la contrainte nécessaire pour que $T_{yx} = 0$ à $x = 0$. La force par unité de longueur induite par la surface sur la dislocation coin est obtenue pour $x = d$ et $y = 0$ dans le deuxième et le troisième termes. Cette force représente simplement la force de la dislocation imaginaire coin et s'écrit :

$$F_x = -\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)d}. \quad (1.13)$$

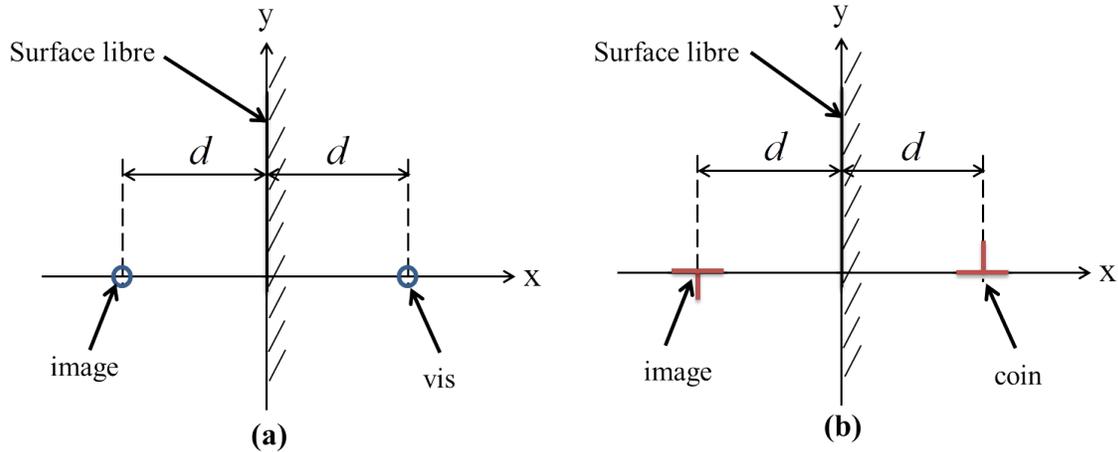


FIGURE 1.12 – Dislocations vis et coin parallèle à une surface libre, et leurs dislocations images [101].

1.2.4 Dislocations parfaites et systèmes de glissement : Cas des structures CFC (cubiques à faces centrées)

Le vecteur de Burgers le plus court dans les structures CFC est de type $\frac{1}{2}[110]$ où $[]$ décrit la direction de glissement dans le repère du cristal. Le glissement dû au mouvement de ce type de vecteur de Burgers laisse à longue distance un cristal parfait. C'est la raison pour laquelle la dislocation associée à ce vecteur de Burgers est appelée dislocation parfaite. Les dislocations parfaites glissent dans les plans dits octaédriques de type (111) qui sont les plus denses dans la maille cristalline. Une dislocation parfaite peut se décomposer en deux partielles de Shockley. Une faute d'empilement existe dans le plan de glissement entre ces deux partielles. Lors du glissement des partielles, on parle de partielle de tête et de partielle de queue et la faute d'empilement entre les deux partielles est d'autant plus grande que la partielle de tête est loin de la partielle de queue.

L'empilement des atomes dans la structure CFC peut être modélisé par des sphères rigides dans une séquence QRSQRS... comme schématisé sur la figure 1.13a. Dans cette structure, l'empilement compact des atomes se fait dans le plan (111). Les dislocations parfaites de vecteur de Burgers QQ, c'est-à-dire les vecteurs $\frac{1}{2}[110]$, occupent donc un tétraèdre régulier ABCD (figure 1.13b). Les quatre différents plans de la famille (111) sont parallèles à chacune des 4 faces du tétraèdre (tétraèdre de Thompson). Les arêtes de ce dernier (AB, BC, ...) sont parallèles aux directions des vecteurs de Burgers de type $[110]$ propres aux dislocations parfaites. Le mouvement après cisaillement des deux plans Q et R produit un déplacement dans la direction de glissement. On s'aperçoit que le mouvement des atomes R se fait d'abord par le passage aux sites S le long de la vallée entre deux atomes Q et ensuite vers le site R en passant par la deuxième vallée (figure 1.13a). De même, les vecteurs de Burgers des dislocations partielles $\frac{1}{6}[112]$ sont définis par les lignes qui lient chaque sommet au centre de chaque face ($Q\beta$, $Q\gamma$, ...). Cette dislocation amène les atomes R en position S et transforme l'empilement QRSQRS... en QRSQRS.... Ce passage par les plans S introduit, donc, une faute d'empilement dans le cristal tout en introduisant des dislocations partielles dites de Shockley. Par exemple, la dissociation d'une dislocation parfaite AB en deux dislocations partielles dans le plan (111) est définie par la réaction $AB = A\delta + \delta B$ dans le plan ABC et $AB = A\gamma + \gamma B$ dans le plan ABD.

Dans les matériaux CFC, il existe 12 systèmes de glissement pour les dislocations parfaites : 4 plans de type (111) avec chacun 3 directions de type $[110]$. Ces systèmes de glissement sont listés dans le tableau 1.1 en utilisant la notation de Schmid et Boas [199]. Les lettres (A, B, C, D) désignent les plans de glissement et les chiffres (1 à 6) les directions de glissement.

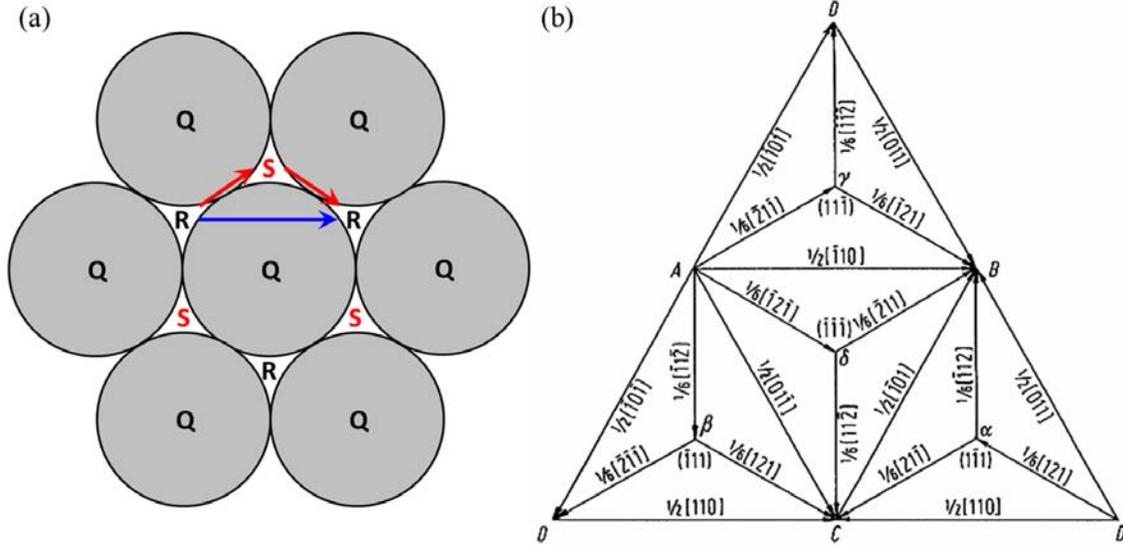


FIGURE 1.13 – (a) Glissement des plans (111) dans les métaux CFC. (b) Tétrahédre de Thompson décrivant les dislocations parfaites et partielles [216].

Plan	Direction	Notation*	Plan	Direction	Notation*
(111)	$[0\bar{1}1]$	B2	($\bar{1}11$)	$[0\bar{1}1]$	A2
(111)	$[10\bar{1}]$	B4	($\bar{1}11$)	$[\bar{1}01]$	A3
(111)	$[\bar{1}10]$	B5	($\bar{1}11$)	$[110]$	A6
($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	$[0\bar{1}\bar{1}]$	D1	($11\bar{1}$)	$[0\bar{1}\bar{1}]$	C1
($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	$[\bar{1}0\bar{1}]$	D4	($11\bar{1}$)	$[\bar{1}10]$	C5
($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	$[110]$	D6	($11\bar{1}$)	$[101]$	C3

TABLE 1.1 – Liste des systèmes de glissement pour les cristaux CFC.
* Schmid et Boas [199].

1.2.5 Formulations mécaniques classiques de la plasticité cristalline par glissement dans les structures CFC

1.2.5.1 Boucles de dislocations et cinématique du glissement

Considérons ici une boucle générale de dislocations de surface de coupe S entourée par une ligne L (figure 1.14). Le vecteur normal \mathbf{n} à la surface S et le vecteur ligne \mathbf{t} sont orientés selon la convention utilisée par Peach-Koehler [179] et Kröner [128]. La figure 1.14 montre le sens de la normale extérieure \mathbf{n} et le sens positif du circuit de Burgers. Les déplacements sont obtenus en déplaçant la partie

supérieure de la surface S (dénotée S^+ avec la normale \mathbf{n}^+) par rapport à la partie inférieure (dénotée S^- avec la normale \mathbf{n}^-) avant de les recoller ensemble.

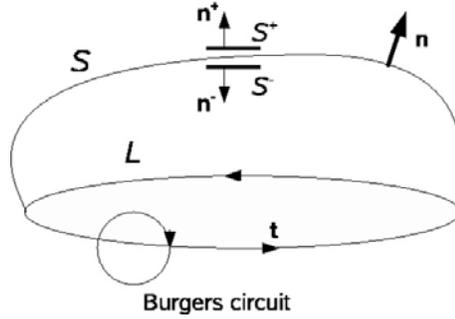


FIGURE 1.14 – Boucle de dislocations L de surface de coupure S avec un vecteur de ligne \mathbf{t} [20].

L'expression du champ de distorsion plastique $\mathbf{U}^p(\mathbf{x})$ induit par la boucle L est singulière sur la surface S . En se référant à [125], $\mathbf{U}^p(\mathbf{x})$ s'écrit sous la forme indicielle suivante :

$$U_{ij}^p(\mathbf{x}) = b_i n_j \delta(\mathbf{S}), \quad (1.14)$$

où $\delta(\mathbf{S})$ est la fonction de Dirac dans la direction \mathbf{n} , infinie lorsque \mathbf{x} appartient à S et zéro dans le cas contraire :

$$\delta(\mathbf{S}) \equiv \int_S \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dS(\mathbf{x}'). \quad (1.15)$$

Considérons un monocristal de volume V possédant N systèmes de glissement définis par une normale au plan de glissement \mathbf{n}^s et une direction de glissement \mathbf{m}^s sur le système de glissement s . Les directions de glissement sont parallèles au vecteur de Burgers, telles que $\mathbf{b}^s = b\mathbf{m}^s$. Lorsqu'on considère plusieurs boucles de dislocations dans V , l'équation (1.14) appliquée au monocristal prend une forme plus généralisée :

$$U_{ij}^p(\mathbf{x}) = \sum_{s=1}^N b_i^s n_j^s \delta(\mathbf{S}^s). \quad (1.16)$$

Si de plus, le vecteur de Burgers possède la même norme b sur chaque système de glissement (ce qui est généralement le cas des structures CFC), on obtient une valeur moyenne de la distorsion plastique. D'après l'équation (1.16), cette valeur moyenne s'écrit :

$$U_{ij}^p = b \sum_{s=1}^N m_i^s n_j^s \frac{1}{V} \int_V \delta(\mathbf{S}^s) dV. \quad (1.17)$$

De cette opération de moyenne sur \mathbf{U}^p , on peut définir le glissement plastique moyen γ^s associé à un ensemble de boucles de dislocations sur chaque système de glissement

s :

$$\gamma^{(s)} = \frac{b}{V} \int_V \delta(\mathbf{S}^s) dV. \quad (1.18)$$

\mathbf{U}^p devient alors :

$$U_{ij}^p = \sum_{s=1}^N \gamma^s m_i^s n_j^s. \quad (1.19)$$

En supposant que la variation dans le temps des vecteurs \mathbf{n}^s et \mathbf{m}^s est négligeable devant celle de γ^s , la vitesse de distorsion plastique prend la forme suivante [13] :

$$L_{ij}^p = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s m_i^s n_j^s, \quad (1.20)$$

où $\dot{\gamma}^s$ représente le taux de glissement plastique sur le système de glissement s . D'après ce qui précède, et dans le cadre des petites déformations et rotations, on peut à présent définir le gradient de vitesse comme étant la somme de la vitesse de distorsion plastique L_{ij}^p et de la vitesse de distorsion élastique \dot{U}_{ij}^e . Il s'écrit :

$$\dot{u}_{i,j} = \dot{U}_{ij} = \dot{U}_{ij}^e + L_{ij}^p, \quad (1.21)$$

où la vitesse de distorsion totale $\dot{\mathbf{U}}$ peut encore s'écrire comme :

$$\dot{U}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij} + \dot{\omega}_{ij}. \quad (1.22)$$

$\dot{\varepsilon}_{ij}$ et $\dot{\omega}_{ij}$ représentent, respectivement, les tenseurs de vitesse de déformation totale (symétrique) et de vitesse de rotation totale (antisymétrique). Dans le cadre d'un problème élasto-plastique, ils se décomposent en une partie élastique ($\dot{\varepsilon}_{ij}^e$ et $\dot{\omega}_{ij}^e$) et en une partie plastique ($\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ et $\dot{\omega}_{ij}^p$) :

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{ij} &= \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p, \\ \dot{\omega}_{ij} &= \dot{\omega}_{ij}^e + \dot{\omega}_{ij}^p. \end{aligned} \quad (1.23)$$

$\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ et $\dot{\omega}_{ij}^p$ représentent, respectivement, les parties symétrique et antisymétrique de la vitesse de distorsion plastique. Elles s'écrivent sous la forme :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \frac{1}{2} (L_{ij}^p + L_{ji}^p) = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s R_{ij}^s, \quad (1.24)$$

et :

$$\dot{\omega}_{ij}^p = \frac{1}{2} (L_{ij}^p - L_{ji}^p) = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s S_{ij}^s, \quad (1.25)$$

où R_{ij}^s est le tenseur d'orientation symétrique ou tenseur de Schmid et S_{ij}^s est le tenseur d'orientation antisymétrique. Ces deux tenseurs ne dépendent que de l'orientation du réseau cristallin dans le volume V du cristal supposé homogène et s'écrivent :

$$\begin{aligned} R_{ij}^s &= \frac{1}{2} (m_i^s n_j^s + m_j^s n_i^s), \\ S_{ij}^s &= \frac{1}{2} (m_i^s n_j^s - m_j^s n_i^s). \end{aligned} \quad (1.26)$$

D'après l'équation (1.26), on peut donc remarquer que la trace du tenseur $\dot{\varepsilon}^p$ est nulle. Cela traduit la condition d'incompressibilité de la déformation plastique.

1.2.5.2 Thermodynamique du glissement et forces motrices

Les considérations thermodynamiques sur la dissipation mécanique globale D dans le volume V du cristal vont permettre de calculer la force motrice associée au glissement en plasticité cristalline classique. Cette dissipation qui doit être positive ou nulle d'après le second principe de la thermodynamique (cf. inégalité de Clausius-Duhem), s'écrit sous la forme suivante d'après [187] :

$$D = \int_V T_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} dV - \int_V \dot{\phi} dV, \quad (1.27)$$

où T_{ij} est le tenseur des contraintes de Cauchy, $\dot{\varepsilon}_{ij}$ est le taux de déformation totale et ϕ est la densité d'énergie élastique stockée. En supposant que ϕ est seulement fonction de la déformation élastique ε_{ij}^e , on peut écrire :

$$D = \int_V T_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} dV - \int_V \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} \dot{\varepsilon}_{ij}^e dV. \quad (1.28)$$

Lorsqu'il n'y a pas d'activité plastique $D = 0$, dans ce cas $\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^e$ et le tenseur des contraintes est donné par :

$$T_{ij} = \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e}. \quad (1.29)$$

La dissipation D se met sous la forme suivante :

$$D = \int_V T_{ij} (\dot{\varepsilon}_{ij} - \dot{\varepsilon}_{ij}^e) dV = \int_V T_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^p dV. \quad (1.30)$$

En substituant l'expression de $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ de l'équation (1.24) dans cette dernière équation, il vient :

$$D = \int_V \sum_{s=1}^N T_{ij} R_{ij}^s \dot{\gamma}^s dV = \int_V \sum_{s=1}^N \tau^s \dot{\gamma}^s dV, \quad (1.31)$$

où $\tau^s = \mathbf{T} : \mathbf{R}^s$ représente la cission résolue sur le système s . Cette cission résolue τ^s correspond à la force motrice thermodynamique conjuguée au taux de glissement $\dot{\gamma}^s$ (flux). Cette formulation doit être complétée par les lois constitutives sur l'évolution du glissement qui dépend également de l'état d'écrouissage sur chaque système de glissement.

1.2.5.3 Evolution du glissement

D'après le critère de Schmid, un système s est potentiellement actif lorsque la cission résolue τ^s sur ce système atteint un seuil critique τ_c^s également appelé cission résolue critique, qui traduit la résistance au glissement des dislocations.

Dans le cas où l'écoulement est indépendant du temps physique, l'activité des systèmes de glissement dans les structures CFC est décrite par les relations suivantes

[27] :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}^s = 0 & \text{si } \tau^s < \tau_c^s, & \text{(systèmes inactifs)} \\ \dot{\gamma}^s = 0 & \text{si } \tau^s = \tau_c^s \text{ et } \dot{\tau}^s < \dot{\tau}_c^s, & \text{(systèmes potentiellement actifs)} \\ \dot{\gamma}^s > 0 & \text{si } \tau^s = \tau_c^s; \dot{\tau}^s = \dot{\tau}_c^s & \text{(systèmes actifs)} \end{cases} \quad (1.32)$$

Lorsque l'écoulement est de nature viscoplastique, le concept de système de glissement actif n'est plus pertinent car tous les systèmes sont actifs, mais seulement certains d'entre eux auront une vitesse de glissement significative (si la loi d'écoulement viscoplastique est sans seuil). Dans ce cas, l'écoulement est décrit par la loi d'Orowan qui traduit la cinétique des dislocations et qui donne lieu à une loi puissance pour les métaux CFC [68] :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau^s|}{\tau_c^s} \right)^{1/m} \text{sgn}(\tau^s), \quad (1.33)$$

où l'exposant m est un paramètre de sensibilité à la vitesse de déformation, $\dot{\gamma}_0$ est le taux de glissement de référence et τ_c^s est la cission de référence dépendant de l'état d'écrouissage du matériau [68]. Le symbole " $\text{sgn}(x)$ " signifie le signe de la quantité x .

1.2.5.4 Lois d'écrouissage couramment utilisées en plasticité cristalline pour un monocristal CFC

Le phénomène d'écrouissage sur chaque système de glissement est modélisé par l'évolution de la cission critique τ_c^s . Le glissement plastique sur un système s entraîne non seulement l'écrouissage de ce système, mais de tous les autres systèmes. Pour un monocristal CFC, l'écrouissage dépend des densités de dislocations statistiquement stockées (ou SSDs : "Statistically Stored Dislocations" en anglais) notées ρ^s sur chaque système de glissement s [68, 207]. τ_c^s peut être défini de façon phénoménologique au travers d'une matrice d'écrouissage $h^{ss'}$ telle que :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_{s'} h^{ss'} \dot{\gamma}^{s'}. \quad (1.34)$$

Les composantes diagonales de $h^{ss'}$ correspondent à l'écrouissage propre d'un système et les autres composantes définissent l'écrouissage latent dû aux interactions entre les systèmes de glissement.

Il existe plusieurs modèles d'écrouissage qui utilisent différentes définitions de la matrice $h^{ss'}$. Pour les structures CFC, on peut mentionner les modèles développés par Franciosi [76, 75] et Tabourot et al. [207], où la cission critique sur un système s est définie par la relation classique de Mecking-Kocks [123, 160] :

$$\tau_c^s = \tau_0^s + \mu b \sqrt{\sum_{s'} a^{ss'} \rho^{s'}}. \quad (1.35)$$

où :

- τ_0^s représente la cission critique de référence du monocristal. Elle correspond à la contrainte de Peierls ou la contrainte de friction de réseau. Sa valeur est très faible pour les métaux CFC,
- μ est le module de cisaillement en élasticité isotrope,
- b est le module du vecteur de Burgers,
- $a^{ss'}$ est la matrice d'anisotropie du glissement multiple due aux interactions entre les systèmes s et s' . Elle est issue des travaux de Franciosi [76, 75]. Elle a été récemment améliorée grâce aux résultats de dynamique des dislocations discrètes [153] qui ont mis en évidence la forte interaction entre systèmes de type colinéaire,
- ρ^s est la densité de dislocations statistiques sur le système de glissement s' . L'évolution de ρ^s peut être donnée par la relation suivante d'après [64, 160] :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^s} - 2y_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s|. \quad (1.36)$$

où $2y_c \rho^s$ représente un terme correspondant à l'annihilation des dipôles de dislocations, avec y_c la distance critique d'annihilation. $1/L^s$ représente le terme de création et de stockage des SSDs, où L^s est leur libre parcours moyen défini par :

$$\frac{1}{L^s} = \frac{\sqrt{\sum_{i \neq s} \rho^i}}{K}, \quad (1.37)$$

où K est un paramètre correspondant au stockage des dislocations. Plus il est faible, plus le nombre de dislocations stockées sera important. En introduisant les deux dernières expressions dans l'équation de la cission critique (équation (1.35)) et en la différenciant par rapport au temps, on en déduit la matrice d'écroissage qui est de la forme :

$$h^{ss'} = \frac{\mu}{2 \sqrt{\sum_k a^{sk} \rho^k}} a^{ss'} \left(\frac{1}{L^{s'}} - 2y_c \rho^{s'} \right) \quad (1.38)$$

Une autre loi d'écroissage est celle de Voce [229] basée également sur la relation de Kocks-Mecking [123, 160]. Dans cette loi, l'évolution des dislocations est décrite en terme de taux de glissement total accumulé et la contrainte seuil est définie par la loi de Taylor [215]. Une version plus généralisée de cette loi a été proposée par Tomé et al. [218] pour l'étude des polycristaux de type CFC, avec une fonction d'écroissage définie par la loi empirique suivante [218] :

$$\hat{\tau}_c^s = \tau_0^s + (\tau_1^s + \theta_1^s \Gamma) \left(1 - \exp \left(-\frac{\theta_0^s \Gamma}{\tau_1^s} \right) \right), \quad (1.39)$$

où :

- τ_0^s est la cission critique de référence,
- θ_0^s est le taux d'écroissage initial,

- τ_1^s et θ_1^s déterminent les caractéristiques asymptotiques de l'écouissage,
- Γ est le glissement accumulé dû aux SSDs défini par :

$$\Gamma = \sum_{s=1}^N \gamma^s. \quad (1.40)$$

L'évolution de la cission critique est obtenue par la relation :

$$\dot{\tau}_c^s = \frac{d\hat{\tau}_c^s}{d\Gamma} \sum_{s'} a^{ss'} \dot{\gamma}^{s'}. \quad (1.41)$$

L'influence des paramètres θ_0^s , θ_1^s et τ_1^s sur l'écouissage est montrée sur la figure 1.15 [219]. $\theta_0^s \geq \theta_1^s \geq 0$ et $\tau_1^s \geq 0$ correspond à l'augmentation de la limite d'écoulement et la diminution de l'écouissage qui tend vers une saturation linéaire. $\tau_1^s = 0$ conduit à un écouissage linéaire correspondant au cas limite de cette loi. $\theta_0^s = \theta_1^s = \tau_1^s = 0$ correspond à un écouissage rigide parfaitement plastique. Cette loi d'écouissage sera reconsidérée dans la suite de ce document au chapitre 5.

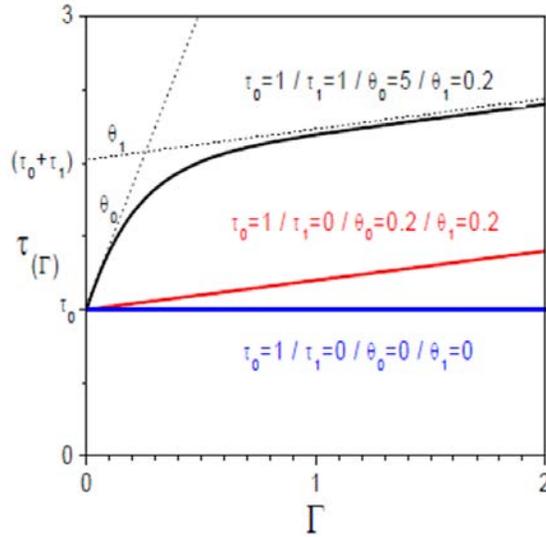


FIGURE 1.15 – Influence des paramètres θ_0^s , θ_1^s et τ_1^s sur la loi d'écouissage de Voce [219].

1.2.5.5 Lois de comportement d'un monocristal CFC en petites déformations

Dans le cas d'un comportement élasto-plastique indépendant du temps, la loi de comportement d'un monocristal s'écrit de façon incrémental sous la forme suivante :

$$\dot{T}_{ij} = L_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}, \quad (1.42)$$

où, \mathbf{L} et $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ représentent, respectivement, les modules tangents et le taux de déformation totale. En considérant l'équation (1.23) et la loi de Hooke, le taux de contrainte $\dot{\mathbf{T}}$ s'écrit :

$$\dot{T}_{ij} = C_{ijkl}\dot{\varepsilon}_{kl}^e = C_{ijkl}(\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_{kl}^p), \quad (1.43)$$

où, \mathbf{C} représente le tenseur des modules élastiques. A partir de cette dernière équation, la détermination de l'expression du module tangent \mathbf{L} nécessite une réécriture de $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ en fonction de $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$. En effet, en considérant les relations (équation (1.24)) et (équation (1.34)) pour les systèmes actifs, on trouve une expression du taux de glissement $\dot{\gamma}^r$ sur chaque système de glissement r en fonction de $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ sous la forme [148, 27] :

$$\dot{\gamma}^r = \sum_{s=1}^N K^{rs} \mathbf{R}^s : \mathbf{C} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (1.44)$$

où,

$$K^{rs} = \sum_{r=1}^N (h^{rs} + \mathbf{R}^r : \mathbf{C} : \mathbf{R}^s)^{-1}. \quad (1.45)$$

On déduit l'expression du tenseur des modules tangents sous la forme suivante, en considérant les équations (1.44) et (1.45) :

$$\mathbf{L} = \mathbf{C} - \sum_{r=1}^N \sum_{s=1}^N K^{rs} (\mathbf{C} : \mathbf{R}^r) \otimes (\mathbf{R}^s : \mathbf{C}). \quad (1.46)$$

Le tenseur \mathbf{L} dépend de l'état de contrainte local et des conditions de plasticité telles que l'orientation des systèmes de glissement actifs et l'état d'écroutissage au travers de la matrice h^{rs} (cf. equation (1.34) par exemple).

Pour un monocristal dont le comportement dépend du temps (comportement élasto-viscoplastique), l'équation de comportement local incrémental de type Maxwellien entre le tenseur des taux de déformations totales $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et le tenseur des taux de contraintes $\dot{\mathbf{T}}$ s'écrit :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{T}} + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p, \quad (1.47)$$

où $\mathbf{S} = \mathbf{C}^{-1}$ est le tenseur des complaisances élastiques et $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ représente le taux de déformations viscoplastiques tel que $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{T})$ est généralement non-linéaire en contraintes. Pour un état de déformation donné, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ peut être linéarisé par un développement de Taylor au premier ordre (linéarisation affine [158]) comme suit :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \mathbf{m}^t : \mathbf{T} + \dot{\eta}, \quad (1.48)$$

où \mathbf{m}^t est le tenseur des complaisances tangentes défini pour un état de contraintes donné par :

$$\mathbf{m}^t = \frac{\partial \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{T})}{\partial \mathbf{T}}, \quad (1.49)$$

et $\dot{\eta}$ est le terme extrapolé après coup défini par :

$$\dot{\eta} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - \mathbf{m}^t : \mathbf{T}. \quad (1.50)$$

Dans le cas où $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ est défini avec une loi puissance (équations (1.24) et (1.33)), les expressions de \mathbf{m}^t et $\dot{\eta}$ s'écrivent :

$$\mathbf{m}^t = n\dot{\gamma}_0 \sum_{s=1}^N \frac{|\tau^s|^{n-1}}{(\tau_c^s)^n} \mathbf{R}^s \otimes \mathbf{R}^s, \quad (1.51)$$

et

$$\dot{\eta} = (n-1)\dot{\gamma}_0 \sum_{s=1}^N \frac{|\tau^s|^n}{(\tau_c^s)^n} \mathbf{R}^s \operatorname{sgn}(\tau^s), \quad (1.52)$$

1.2.5.6 Evolution de la texture cristallographique

Il est aussi important de prendre en compte l'évolution de la texture cristallographique des métaux au cours de la déformation plastique. L'orientation du réseau cristallin est définie par les angles d'Euler de Bunge ($\varphi_1, \phi, \varphi_2$) [36] par rapport au repère de l'échantillon. L'évolution de cette orientation est basée sur le tenseur taux de rotation élastique (équation (1.23)) qui s'écrit encore sous la forme suivante, en considérant l'équation (1.25) [201] :

$$\dot{\omega}_{ij}^e = \dot{\omega}_{ij} - \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s S_{ij}^s. \quad (1.53)$$

L'évolution des angles d'Euler $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ en fonction du tenseur $\dot{\boldsymbol{\omega}}^e$ est donnée par :

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_1 &= -\dot{\omega}_{12}^e - \dot{\varphi}_2 \cos \phi \\ \dot{\phi} &= -\dot{\omega}_{23}^e \cos \varphi_1 + \dot{\omega}_{13}^e \sin \varphi_1 \\ \dot{\varphi}_2 &= -\frac{1}{\sin \phi} (\dot{\omega}_{13}^e \cos \varphi_1 + \dot{\omega}_{23}^e \sin \varphi_1). \end{aligned} \quad (1.54)$$

Dans le cas où $\phi = 0$, une indétermination se présente dans l'évolution de $\dot{\varphi}_2$. L'évolution des angles d'Euler se calcule alors par les formules suivantes :

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_1 &= -\frac{\dot{\omega}_{12}^e}{2} \\ \dot{\phi} &= -\dot{\omega}_{23}^e \cos \varphi_1 + \dot{\omega}_{13}^e \sin \varphi_1 \\ \dot{\varphi}_2 &= -\frac{\dot{\omega}_{12}^e}{2}. \end{aligned} \quad (1.55)$$

1.3 Comportement mécanique des matériaux hétérogènes et des polycristaux

Les matériaux hétérogènes et polycristallins jouent un rôle fondamental en tant que matériaux structurels et fonctionnels dans les applications technologiques ac-

tuelles et futures. Les propriétés mécaniques d'un polycristal plastiquement déformable sont dictées, d'une part par la structure et la dynamique des défauts cristallins (dislocations, joints de grains) et d'autre part par la taille, la morphologie spatiale, la distribution et l'orientation des grains ou des phases cristallins qui le constituent, c'est-à-dire par la texture cristallographique. D'un point de vue expérimental, des techniques puissantes ont été développées pour caractériser complètement les textures polycristallines en trois dimensions (3D) et pour suivre leur évolution. A titre d'exemple, on peut citer l'outil combinant à la fois la technique FIB ("Focus-Ion-Beam" en anglais ou "Rayonnement à faisceau ionisant" en français) et la technique EBSD ("Electron Back-Scattering Diffraction" en anglais ou Diffraction d'électrons retrodiffusés en français) pour la caractérisation des orientations locales avec une résolution spatiale nanométrique en 3D [220]. Il existe également des techniques par diffraction des rayons X (DRX) pour mesurer les positions, les orientations cristallographiques [136] et les déformations élastiques locales d'un grain déformé dans un agrégat [178] à une échelle de résolution spatiale micrométrique. D'un point de vue modélisation, il existe deux catégories d'approches mécaniques. Il y a les approches à champs moyens qui se basent sur le calcul des propriétés mécaniques effectives et la détermination de l'évolution de la texture cristallographique par les techniques d'homogénéisation. La méthode la plus connue est le schéma auto-cohérent [29, 245, 246]. Il y a également des approches à champs complets basées sur l'utilisation de méthode des éléments finis (EF) [162, 17, 18] et plus récemment sur les approches de type transformées de Fourier rapides (FFT : Fast Fourier Transforms en anglais) [137, 141, 183, 138, 140] pour prédire les comportements plastiques des polycristaux à une échelle intragranulaire.

1.3.1 Modèles micromécaniques à champs moyens

La détermination de l'évolution de la texture et des propriétés mécaniques effectives dans les modèles à champs moyens est basée sur la méthode d'homogénéisation de type auto-cohérent. Cette méthode a été initialement proposée par Hershey [99] et Kröner [127] pour les matériaux hétérogènes élastiques linéaires, avant d'être étendue aux comportements incrémentaux de types élasto-plastique par Hill [100] et visco-plastique par Hutchinson [113]. Ces méthodes sont basées sur le problème d'hétérogénéité ellipsoïdale d'Eshelby [62, 172]. Le modèle élasto-plastique de Hill a été ensuite amélioré par Hutchinson [112] pour simuler la déformation d'un agrégat de grain CFC, puis par Berveiller et Zaoui avec une loi d'interaction sécante plus simple à utiliser pour les chargements proportionnels [28]. En outre, Masson et al. [158] ont développé une formulation affine qui peut s'appliquer pour plusieurs types de loi de comportement en non-linéaire. Le modèle auto-cohérent visco-plastique de Molinari et al. [163] a permis de développer une formulation tangente basée sur l'approximation tangente de la relation non-linéaire entre la contrainte et le taux de déformation par un module tangent pour la modélisation du comportement mécanique et des évolutions des textures en grandes déformations. Ce schéma a été

amélioré par Lebensohn et Tomé [143, 219] pour simuler le comportement des matériaux hexagonaux (zirconium). Des approches variationnelles du type second ordre ont été également développées afin d'obtenir les estimations rigoureuses pour les potentiels de dissipation effectifs [182, 144].

Dans le cas d'un comportement élastique-viscoplastique à l'échelle des phases ou des grains, le problème devient plus compliqué. La complexité est principalement due à la nature différentielle des équations constitutives qui impliquent différents ordres de dérivation temporelle des champs de déformations et/ou de contraintes. Le comportement homogénéisé (ou effectif) du milieu homogène équivalent au polycristal hétérogène n'est alors pas un comportement aussi simple que le comportement du monocristal. Pour remédier à ce problème, différentes approches ont été proposées. A titre d'exemple, on peut mentionner le modèle auto-cohérent à 1 site récemment développé dans [19, 196, 22] et qui est bien adapté aux microstructures désordonnées telles que les polycristaux métalliques. Pour un comportement élasto-viscoplastique avec une viscoplasticité non-linéaire de type sécante et affine, la méthode à "champs translatsés" [22, 156, 21] a été développée avec succès.

1.3.2 Modèles micromécaniques à champs complets

Afin d'améliorer l'estimation des interactions inter-granulaires des matériaux hétérogènes, des modèles micromécaniques à champs complets ont été proposés avec le développement du calcul numérique. La plupart de ces modèles sont souvent de type éléments finis (EF) [162, 17, 18]. Plus récemment, des méthodes basées sur la FFT ont été introduites pour l'étude des microstructures périodiques [137, 141, 183, 138, 140].

Pour obtenir des approximations plus fines, chaque cristal constituant l'agrégat polycristallin est maillé. A chaque point du maillage, les équations précédentes de la plasticité cristalline sont appliquées et la loi de comportement macroscopique du polycristal est obtenue par calcul mécanique sur l'ensemble des points. Ces modèles ont permis de calculer les incompatibilités de la déformation et d'appréhender l'activité plastique à chaque point du maillage. La figure 1.16 montre un exemple de l'hétérogénéité plastique intragranulaire dans un VER contenant 238 grains pour deux cas de maillages obtenus par EF. Une comparaison entre les approches à champs complets et à champs moyens réalisée dans [28] avec les mêmes lois de comportement, montre une dispersion plus importante des champs intergranulaires dans les résultats EF pour 200 grains dans un polycristal soumis à une déformation macroscopique homogène (figure 1.17). Cependant, la question sur la représentativité d'un polycristal dans les approches à champs complets se pose. En effet, pour avoir une représentation plus réaliste d'un polycristal, il faut un nombre important de grains, et chaque grain doit avoir un nombre suffisant de points d'intégrations, et cela implique donc des coûts de calculs considérables. Dans ces conditions, les ap-

proches FFT se sont démarquées des méthodes EF par leur efficacité en terme de temps de calcul et de mémoire. A titre de comparaison, la figure 1.18 montre la distribution des champs de déformations plastiques accumulées et des champs de contraintes obtenus par FFT (figure 1.18(a) et (c)) et par EF (figure 1.18(b) et (d)) dans un polycristal d'Aluminium soumis à une contrainte de laminage et contenant 100 grains [183] discrétisé en $32 \times 32 \times 32$ éléments (voxels dans le cas de la FFT). On dénote une même précision dans les deux cas d'approches, contrairement aux temps de calcul qui sont de 3 heures pour la FFT et de 5 jours pour la méthode EF, sur une machine Intel[®] Xeon[®] muni de 8 processeurs et 16 GB de mémoire partagée. Toutefois, les deux méthodes sont utilisées de façon complémentaire dans la communauté mécanique des matériaux pour traiter différents problèmes aux limites.

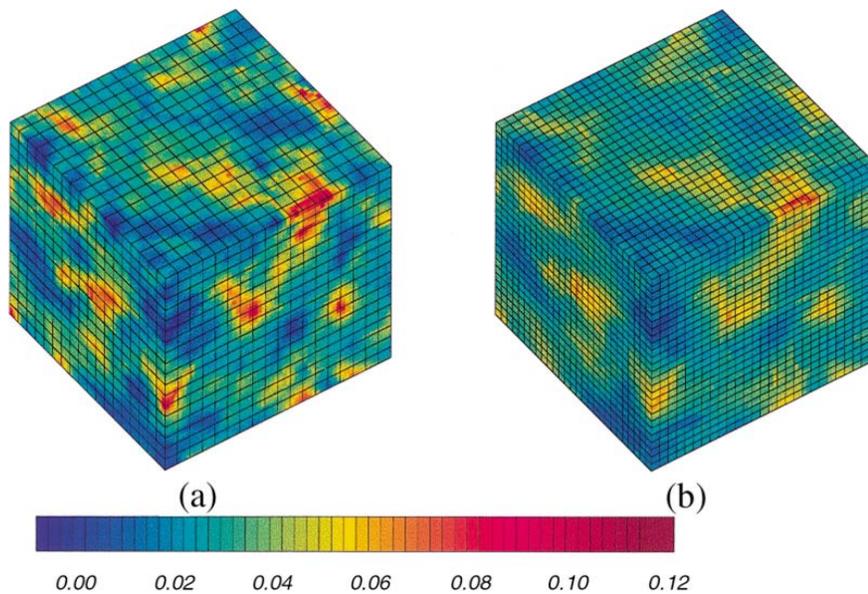
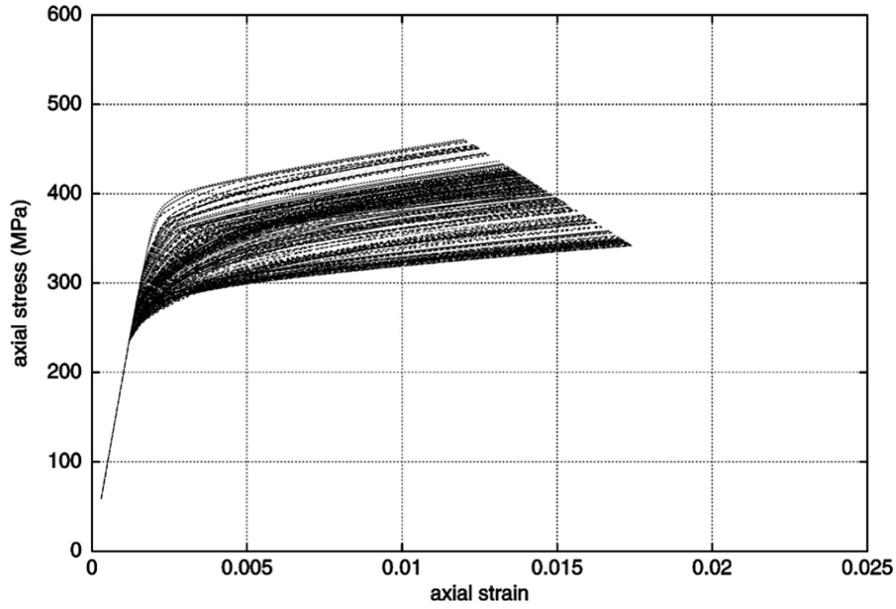
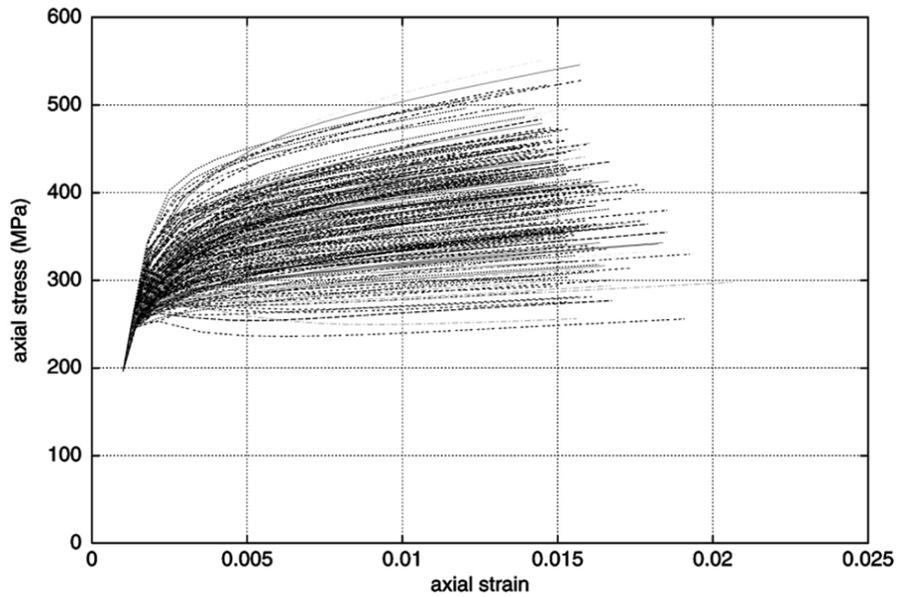


FIGURE 1.16 – Etude de l'hétérogénéité du glissement plastique dans un volume élémentaire représentatif (VER) représentant un agrégat polycristallin pour deux maillages EF différents : (a) maillage grossier : VER à 5832 éléments quadratiques, (b) maillage fin : VER à 19683 éléments quadratiques [17].



(a)



(b)

FIGURE 1.17 – Comparaison des courbes contraintes-déformations dans chaque grain obtenues avec les méthodes à champs moyens et la méthode à champs complet par EF dans un VER constitué de 200 grains orientés aléatoirement et soumis à une déformation macroscopique homogène. (a) : Solution obtenue avec la méthode à champs moyens à l'aide du modèle auto-cohérent de Berveiller-Zaoui [28]. (b) : Solution obtenue par EF montrant une dispersion plus prononcée des champs intergranulaires [18].

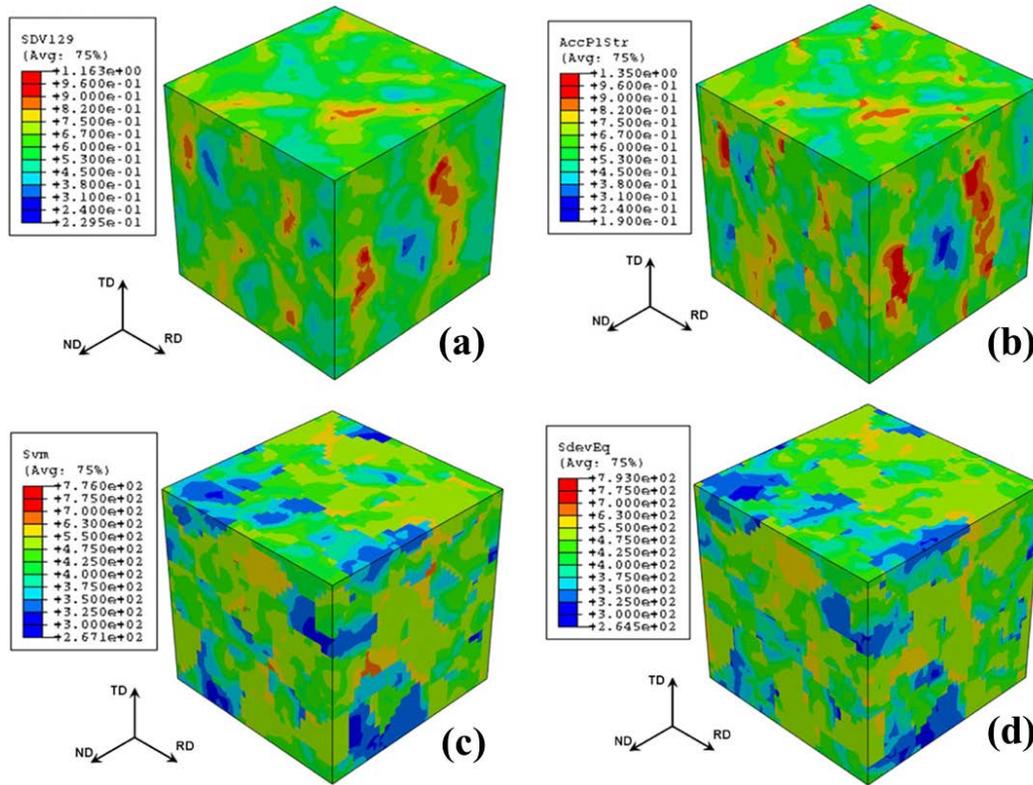


FIGURE 1.18 – Résultats des simulations du laminage d’un polycristal d’aluminium contenant 100 grains et discrétisé en $32 \times 32 \times 32$ éléments (voxels dans le cas de la FFT). A gauche : distributions des déformations plastiques accumulées (a) et des contraintes (c) obtenues par FFT. A droite : distributions des déformations plastiques accumulées (b) et des contraintes (d) obtenues par EF. Les comparaisons ont été effectuées à une même échelle, seules les valeurs maximales et minimales diffèrent. Les temps de calcul sont de 3 heures pour la FFT et de 5 jours pour la méthode EF [183].

1.4 Limites des modèles classiques de plasticité cristalline

Les sections précédentes ont montré que les modèles de plasticité cristalline et polycristalline classiques sont capables de déterminer le comportement macroscopique et le comportement des grains en fonction de leur orientation cristallographique dans les agrégats polycristallins à l'aide des modèles micromécaniques à champs moyens (auto-cohérents) ou à champs complets (EF, FFT). Ils permettent également d'appréhender les hétérogénéités intergranulaires et intragranulaires observées expérimentalement par les techniques FIB, EBSD, DRX,

Les théories classiques sont basées sur le principe de déformation ou de glissement plastique moyen sur chaque système de glissement au travers des équations (1.17) et (1.18). Cela suppose que les dislocations d'un système de glissement peuvent être considérées indépendamment des autres et qu'il n'existe pas de corrélations entre elles. La déformation plastique résulte alors d'un grand nombre d'évènements décorrélés. L'utilisation de ces théories est donc justifiée dans les matériaux où les interactions entre les dislocations sont négligeables.

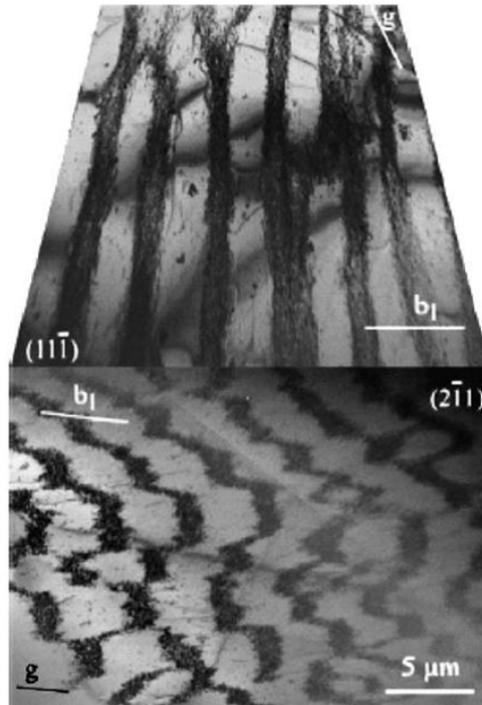


FIGURE 1.19 – Observation expérimentale d'une structure de murs de dislocations dans un monocristal de Si sollicité en traction-compression cyclique à haute température [146].

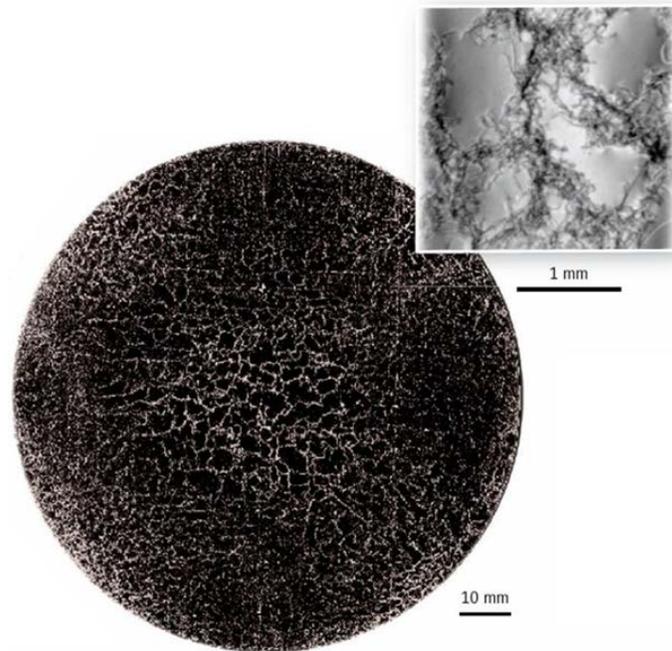


FIGURE 1.20 – Micrographie optique de cellules géantes de dislocations après croissance d’un monocristal de GaAs. La dimension moyenne des cellules varie en fonction inverse de la contrainte interne. Insert : cellules de dislocations visualisées par imagerie aux rayons-X : les lignes sombres sont l’image des distortions de réseau au voisinage de dislocations [174].

Cependant, les opérations de moyennes directes ne sont pas toujours vérifiées lorsque les dislocations se multiplient, s’annihilent et forment des structures au fur et à mesure que la déformation plastique augmente. Ces structures se forment à une échelle de longueur mésoscopique, observables à l’aide de la Microscopie Electronique à Transmission (MET). En effet, la naissance de murs réguliers de dislocations lors d’essais de fatigue sur le Silicium (figure 1.19) [146], ou l’apparition des bandes de glissement localisées à la surface d’un monocristal de Cu-30at% Zn (figure 1.1) [243] ou encore la formation des cellules de dislocations dans un monocristal d’arséniure de gallium (GaAs) comme reporté sur la figure 1.20 [174], sont autant d’exemples qui justifient la formation des structures de dislocations internes qui s’organisent de manières corrélées. Dans ces situations, les opérations de moyennes ne sont plus justifiées, et le passage de l’échelle microscopique à l’échelle macroscopique doit inclure un passage à l’échelle mésoscopique, où les opérations de moyenne sont effectuées sur un volume élémentaire représentatif à cette échelle [134].

En plus de la formation des structures de dislocations, les théories classiques ne prennent pas bien en compte les effets des interfaces de type joints de grains qui sont en général représentées par des interfaces mécaniques simplifiées. On dénote également la sous-estimation des contraintes intragranulaires. Les théories classiques

connaissent également leurs insuffisances dans la prise en compte des effets de tailles et de longueurs internes liés à l'activité plastique dans le matériau. Elles sont également incapables de prendre en compte l'activité des dislocations géométriquement nécessaires (GNDs : "Geometrically Necessary Dislocations" en anglais) qui se créent pour une accommodation géométrique des courbures de réseaux cristallins qui interviennent au cours de la déformation plastique. Ce type de phénomène est illustré sur la figure 1.21 due à Ashby [14] dans le cas du cisaillement d'un matériau composite constitué de plaques non déformables parfaitement liées à une matrice monocristalline déformable plastiquement (figure 1.21(a)). A proximité des plaques, la matrice ne peut pas être cisailée, elle est donc obligée de se courber, et cette courbure est géométriquement accommodée par la création des GNDs (figure 1.21(b)).

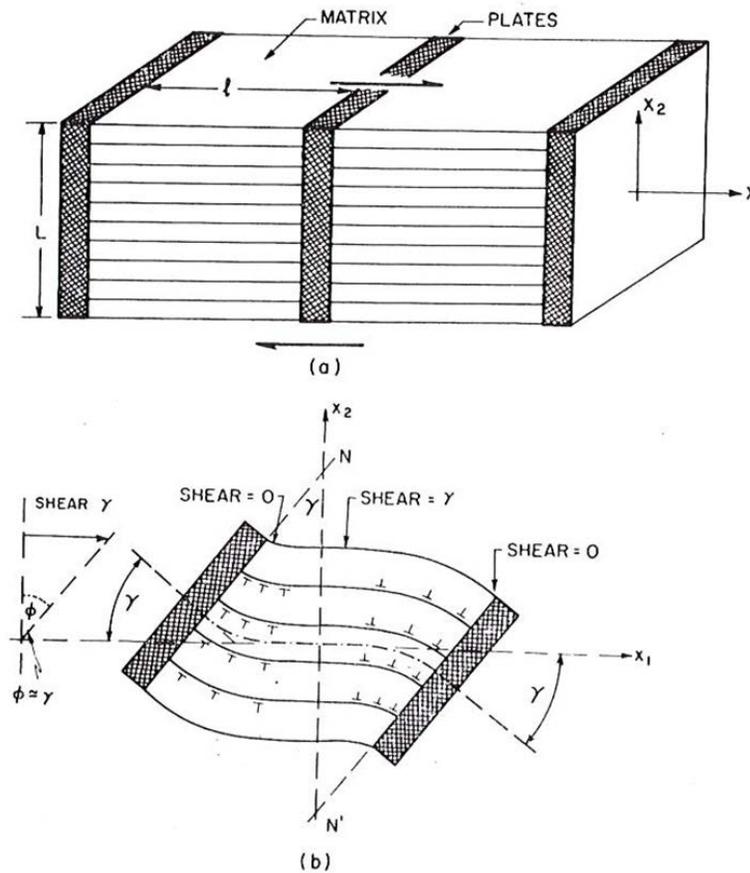


FIGURE 1.21 – (a) : Matériau composite modèle constitué des plaques non déformables parfaitement liées à une matrice monocristalline déformable. (b) : Matrice cisailée sur un système de glissement unique et courbure de la matrice à proximité des plaques avec création des GNDs [14].

Pour prendre en compte tous ces aspects de la déformation plastique à l'échelle intra-granulaire (ou intra-phase) qui échappent à la théorie classique de la plasticité

cristalline, différentes techniques sont actuellement développées. Il y a les techniques de simulations purement discrètes comme la statique et la Dynamique Moléculaire (DM) [72, 118, 41] qui permettent de comprendre les mécanismes de formation et d'interaction de dislocations partielles ou parfaites avec d'autres défauts tels que les joints de grains, les solutés ... aux échelles nanométriques. Nous ne nous intéressons pas aux mécanismes de la plasticité à ces échelles fines et donc nous ne pousserons pas plus en avant la description de ces techniques dans ce manuscrit. Une autre technique discrète puissante de nos jours avec la capacité de calcul actuelle est la Dynamique des Dislocations Discrètes (DDD) [133, 12, 48], où les dislocations sont représentées par des segments discrets ou des nœuds auxquels on affecte un vecteur ligne et un vecteur de Burgers, ainsi qu'un plan de glissement.

La technique des champs de phase appliquée aux dislocations [190, 126, 67] est également une technique récente qui comme la DDD permet de suivre l'évolution des boucles de dislocations dans un milieu élastique linéaire, mais se base sur une fonctionnelle d'énergie et une représentation des dislocations par une distribution de déformations libres de contraintes (ou "eigenstrain").

Ces techniques précédentes ne font pas de différences entre les distributions de SSDs et de GNDs. D'autres techniques statistiques et continues peuvent alors être développées pour étendre la théorie continue de la plasticité. Nous avons :

- les théories de mécanique statistique de dislocations [92, 242, 243],
- les théories à gradients [84, 108, 5, 94, 69],
- les théories continues de dynamique des dislocations [123, 104, 135, 132, 244, 103],
- la mécanique des champs de dislocations [1, 193, 7].

Une brève description des modèles discrets comme la DDD, des modèles de champ de phase et des modèles continus à base de GNDs sera présentée dans la prochaine section. Notons que ce travail de thèse est basé sur la théorie de la mécanique des champs de dislocations qui constitue une théorie continue de plasticité intégrant les GNDs et où les équations et les conditions aux limites forment un problème aux limites bien posé au niveau des champs mécaniques.

1.5 Description de différentes techniques de modélisation actuelles de la plasticité cristalline

1.5.1 Méthode discrète : la Dynamique des Dislocations Discrètes (ou DDD)

Le progrès des techniques numériques et l'efficacité des ordinateurs, ont favorisé le développement de la dynamique des dislocations discrètes (DDD) qui permet

d'étudier les formations de jonctions et donc de l'écroissage, les effets de tensions de lignes et des contraintes à longue portée des dislocations et de résoudre un grand nombre de problème en mécanique des matériaux [9, 10, 38, 133, 232, 222, 226, 50, 12, 48, 95].

Dans la dynamique des dislocations discrètes (DDD), les dislocations sont représentées par des segments discrets ou des nœuds auxquels on affecte un vecteur ligne et un vecteur de Burgers, ainsi qu'un plan de glissement (figure 1.22 (a)). Les champs élastiques à longue portée sont obtenus en superposant les champs individuels de chaque segment de dislocations. Cette superposition se fait incrémentalement dans le temps. A chaque incrément de temps, les contraintes et les déformations dues à l'arrangement des dislocations au travers des phénomènes de multiplication et d'annihilation (figure 1.22), ainsi que la force de Peach-Kœhler nécessaire à leurs mouvements sont déterminées en fonction des conditions aux limites imposées et des relations constitutives sur la vitesse des dislocations et les relations entre force et vitesse (loi de mobilité des dislocations). Ce processus est répété à chaque pas de temps avec la nouvelle structure de dislocations jusqu'à ce que l'état de contraintes souhaité soit atteint.

Au cours de cette dernière décennie, la méthode DDD est devenue un outil numérique puissant notamment en France (équipes Kubin, Devincere et Fivel) permettant d'appréhender la plasticité à l'échelle mésoscopique [67]. Elle vient également combler l'écart existant entre les simulations atomistiques (statique et dynamique moléculaires) et les théories continues de dislocations. La DDD est ainsi capable de retrouver naturellement les effets de taille [63, 16]. On dénote également des couplages de la DDD avec les éléments finis [222], les simulations atomistiques [203, 43] et la plasticité cristalline [231, 40]. Récemment, un couplage avec les méthodes spectrales de type FFT a été proposé dans le but de réduire le temps de calcul des champs de contraintes internes générés par les dislocations [26, 85].

Avec les moyens de calculs numériques actuels, la taille des cellules élémentaires utilisées est faible (de l'ordre de $10\mu m^3$) [133]. Ces limites sont dues au nombre croissant des segments de dislocations qu'il est nécessaire de traiter lorsque la déformation augmente. Afin de garder un temps de calcul raisonnable, de grandes vitesses de déformations sont également employées. Pour les mêmes raisons, la plupart des codes DDD se limitent à l'élasticité isotrope, car les calculs en élasticité anisotrope nécessitent des temps de calculs plus élevés [35].

1.5.2 Méthodes de champ de phase

Les méthodes de champ de phase ("PFM : Phase Field Method" en anglais) sont des outils puissants pour décrire les microstructures de solidification et les microstructures issues de transitions de phase à l'état solide. Les principales applications

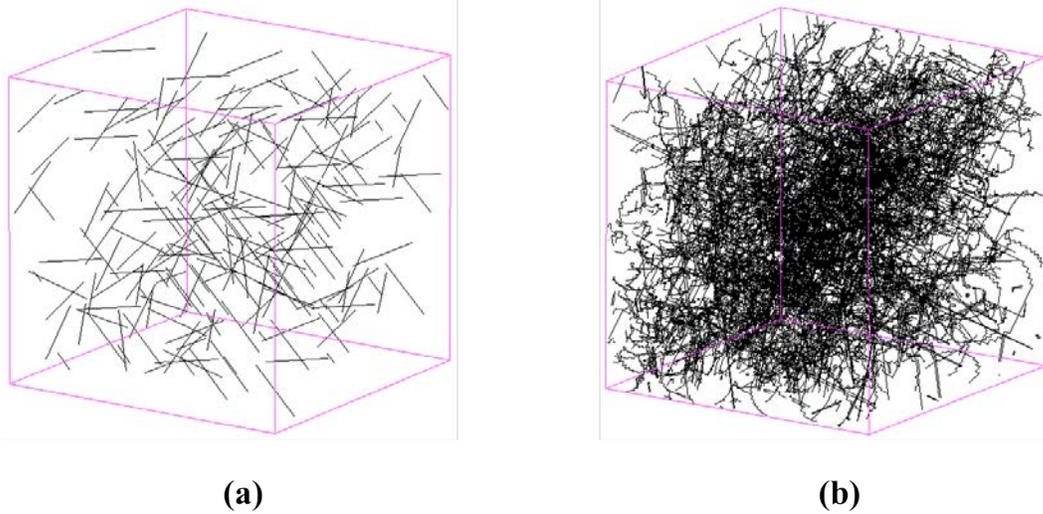


FIGURE 1.22 – (a) : Configuration initiale montrant des segments de dislocations. (b) : Microstructure obtenue après écrouissage [226].

des méthodes de champ de phase sont réalisées dans l'étude de la solidification dendritique [120, 121], de la solidification directionnelle [236, 32, 181], des joints de grains [44, 122, 119], des transformations à trois phases [205, 217]. Les méthodes de champ de phase sont capables d'appréhender les phénomènes physiques tels que l'interaction entre des boucles de dislocations et les précipités le long d'un plan de glissement, illustrant par exemple le mécanisme d'écrouissage d'Orowan comme le montre la figure 1.23 [234]. Les principales contributions dans le domaine des dislocations ont été apportées par Wang et al. [234, 233, 235] et Rodney et al. [191]. Ces auteurs se sont basés sur l'idée de Nabarro [173] selon laquelle une boucle de dislocation peut être décrite comme une plaquette d'inclusion cohérente, entourée d'une boucle de dislocations, avec une déformation libre de contrainte ("eigenstrain") reliée au vecteur de Burgers de la boucle de dislocations et à la normale au plan de glissement (cf. figure 1.24). L'ingrédient essentiel des modèles de champ de phase est la fonctionnelle d'énergie libre (constituée de trois types d'énergie : énergie cristalline, élastique et à gradient) qui entre dans la formulation de l'équation cinétique pour la description de la dynamique des dislocations. Depuis 2002, une nouvelle technique à champ de phase connue sous le nom de "champ de phase cristallin" a été également développée. Elles se différencie des méthodes de champ de phase classiques en utilisant une description de la matière à l'échelle atomique [61, 60, 204].

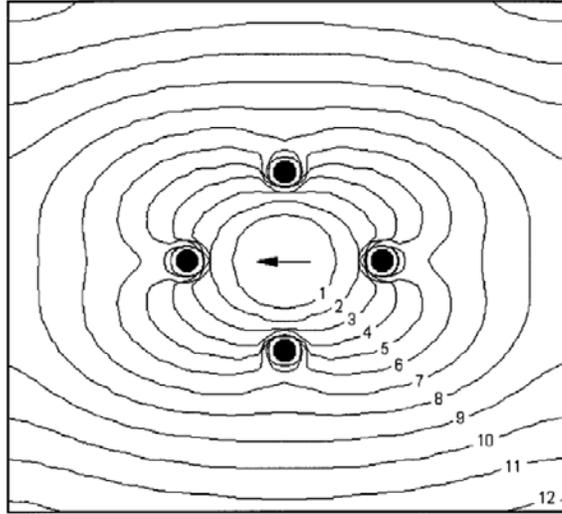


FIGURE 1.23 – Figure montrant le développement d’une boucle de dislocation interagissant avec des précipités le long d’un plan de glissement illustrant l’écroutissage d’Orowan. Les numéros indiquent la forme des boucles en fonction du temps [234].

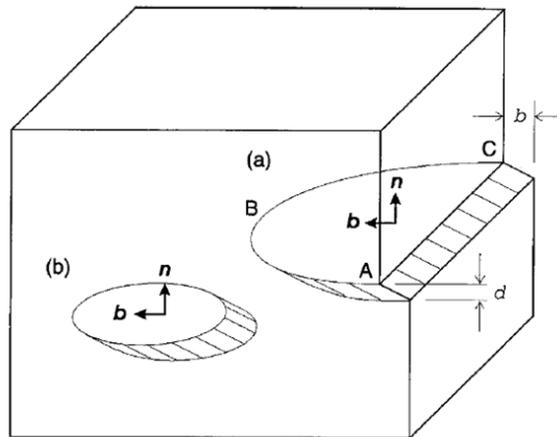


FIGURE 1.24 – Description des dislocations par une plaquette d’inclusion entourée d’une ligne de dislocation dans les méthodes de champ de phase. (a) : La ligne de dislocation ABC se terminant à la surface du cristal aux points A et C. (b) : Boucle de dislocations représentée par une plaquette d’inclusion cohérente. \mathbf{b} représente le vecteur de Burgers et d est l’épaisseur de la plaquette de vecteur normal \mathbf{n} [234].

1.5.3 Les théories statistiques de dislocations

Les principaux investigateurs de cette méthode sont Groma [92], El-Azab [59], Zaiser [242, 243]. Les méthodes statistiques permettent d'étudier la formation des structures de dislocations et la dynamique de l'écoulement plastique. La figure 1.25 donne un exemple d'application des méthodes statistiques sur la prédiction de l'évolution des densités d'obstacles aux dislocations, lors de la formation des canaux de glissement dans les zones à fortes concentrations de densités de dislocations [15]. Les théories statistiques se basent sur l'argument selon lequel la distribution des dislocations dans un cristal est de nature statistique. Le comportement plastique d'un cristal déformé dépend alors des propriétés statistiques de l'ensemble de dislocations plutôt que sur l'emplacement précis de la dislocation individuelle. Ainsi, un ensemble d'arrangements de dislocations statistiquement équivalentes est considéré et un grand nombre de densités de dislocations est défini par des moyennes d'ensemble en prenant en compte les fonctions de corrélations spatiales. La description de l'évolution spatio-temporelle des microstructures est obtenue par la résolution des équations différentielles stochastiques. Le principal défi des théories statistiques réside dans la caractérisation physique des différents termes source (qui prennent en compte la nucléation et l'annihilation des dislocations) et la dérivation des fonctions de corrélation (qui caractérisent l'organisation spatiale des dislocations) qui ne sont pas résolues dans ces traitements, mais obtenues soit de manière phénoménologique ou soit par simulations de type DDD ou encore expérimentalement.

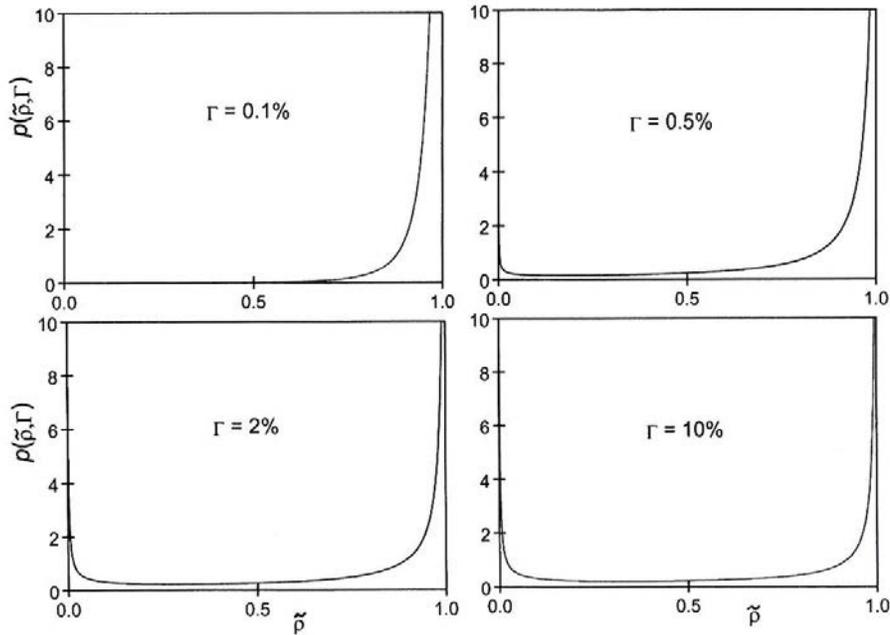


FIGURE 1.25 – Evolution de la distribution des densités d'obstacles ρ en fonction de la déformation moyenne Γ au cours de la formation des canaux de glissement dans les zones à fortes densités de dislocations [15].

1.5.4 Théories de la plasticité à gradient

Elles ont été proposées pour la première fois par Aifantis [168], avant d’être étendues par plusieurs auteurs [84, 108, 5, 94, 69]. Dans sa théorie, Aifantis introduit les modèles à gradient de variables internes telles que les gradients de déformations plastiques pour appréhender les effets d’interactions entre les structures de dislocations dans les métaux [14]. La théorie d’Aifantis se base sur les lois de comportement élasto-plastiques, tout en introduisant un terme additionnel dans le seuil de plasticité sous la forme du Laplacien de la déformation plastique accumulée. D’autre part, Fleck et Hutchinson [70] ont utilisé les termes du second gradient de déformations pour expliquer des effets d’échelle de longueur observés lors de la torsion d’un fil mince de cuivre (figure 1.26), en se basant sur la dépendance de l’écroutissage plastique des gradients de déformations [69, 70]. Plus tard, Acharya et Bassani [4] ont proposé un modèle qui s’appuie sur l’idée selon laquelle, la distribution des dislocations géométriquement nécessaires peut être obtenue à partir de la mesure de l’incompatibilité du réseau cristallin. L’échelle de longueur du matériau est introduite sous forme de mesure du gradient d’incompatibilité dans la loi d’écroutissage, pour rendre compte à la fois de l’effet des GNDs et des SSDs [5]. Une amélioration de la théorie de Fleck et Hutchinson [70] basée sur l’utilisation de la forme généralisée de la loi d’écoulement plastique de Von Mises pour introduire les gradients de déformations a été proposée plus tard par les mêmes auteurs [71]. Il existe également des modèles récemment proposés par Gurtin et Needleman [93] qui prennent en compte les conditions de saut aux interfaces de type joints de grains. Leur modèle introduit l’utilisation d’un système de microforces sous forme de contraintes ou de forces internes, dont l’équilibre modifie les conditions de plasticité sur chaque système de glissement. D’autres théories de type Cosserat ou micromorphe existent également pour rendre compte des effets de taille sur la contrainte d’écoulement dans les polycristaux [46] et les structures à canaux [73, 47].

Bien que les théories continues de plasticité soient basées sur les dislocations géométriquement nécessaires, l’introduction des longueurs internes reste toutefois phénoménologique. Ces théories n’ont pas été quantitativement dérivées sur des considérations prenant en compte les mécanismes de création de dislocations ainsi que leur propagation (lois d’évolution dans le temps du tenseur de Nye par exemple).

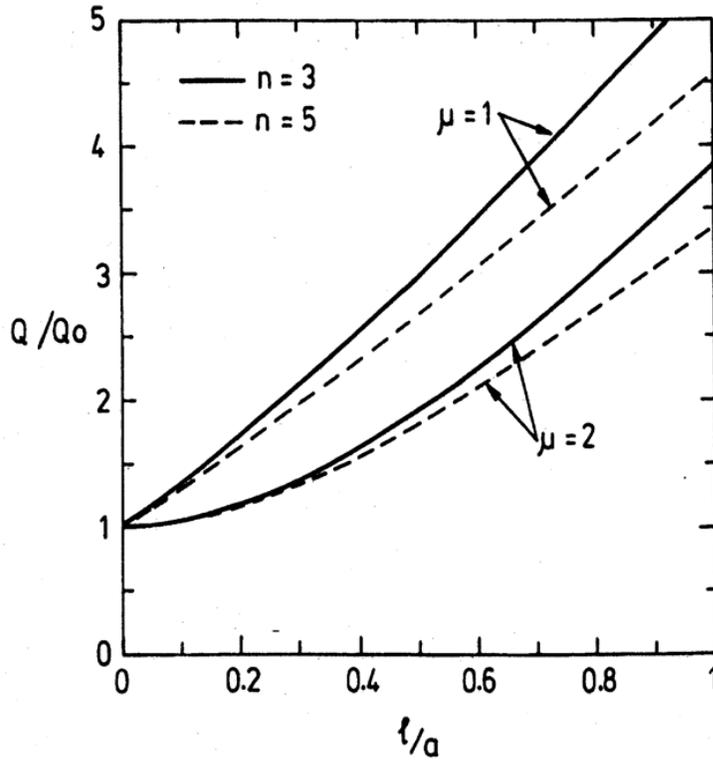


FIGURE 1.26 – Effets de l’échelle de longueur l/a , où l est la longueur interne phénoménologique du modèle de plasticité à gradient de Fleck et Hutchinson, sur le couple de torsion Q d’un fil mince en cuivre de rayon constant a . Q_0 représente le couple de référence, n est un paramètre d’écouissage et μ est un coefficient de couplage (cf. [70]).

1.5.4.1 Les théories continues de dynamique des dislocations

Les théories continues de dynamiques des dislocations décrivent l’évolution des microstructures de dislocations en terme de variables internes de champs continus, pour lesquels une équation d’évolution est formulée. Historiquement, on distingue le modèle à variable simple initialement introduit par Gilman et développé par Kocks, Mecking et d’autres auteurs [123, 132]. Il existe également des modèles thermodynamiques qui prennent en compte le transport et l’organisation spatiale des dislocations par une minimisation de l’énergie interne [135, 104]. On distingue aussi les théories continues des dislocations de type Kröner [177, 128, 171, 125, 130], qui se basent sur l’utilisation du tenseur densité de dislocations et l’équation de transport des dislocations de Kröner. Récemment, une théorie d’ordre supérieur basée sur la moyenne statistique des systèmes de dislocations a été introduite [244, 103, 197, 102, 198]. Dans cette théorie d’ordre supérieur, les champs continus de densités de disloca-

tions sont constitués de deux variables de champs : la densité totale et la densité de rotation définies dans un espace de dimension supérieure qui, au-delà des points spatiaux, contient également une ligne d'orientation des dislocations comme dimension supplémentaire. Compte tenu du coût de calcul très élevé de cette formulation, des approches simplifiées ont été dérivées de cette formulation initiale et permettent d'obtenir des informations réduites sur les variables de champs [103, 197]. Un outil numérique a été récemment développé par Sandfeld et al. [198] pour la conversion d'une représentation discrète de dislocations obtenue par la dynamique des dislocations discrètes (DDD) en une représentation continue (cf figure 1.27), ce qui permet une comparaison entre la DDD et le modèle continu d'ordre supérieur.

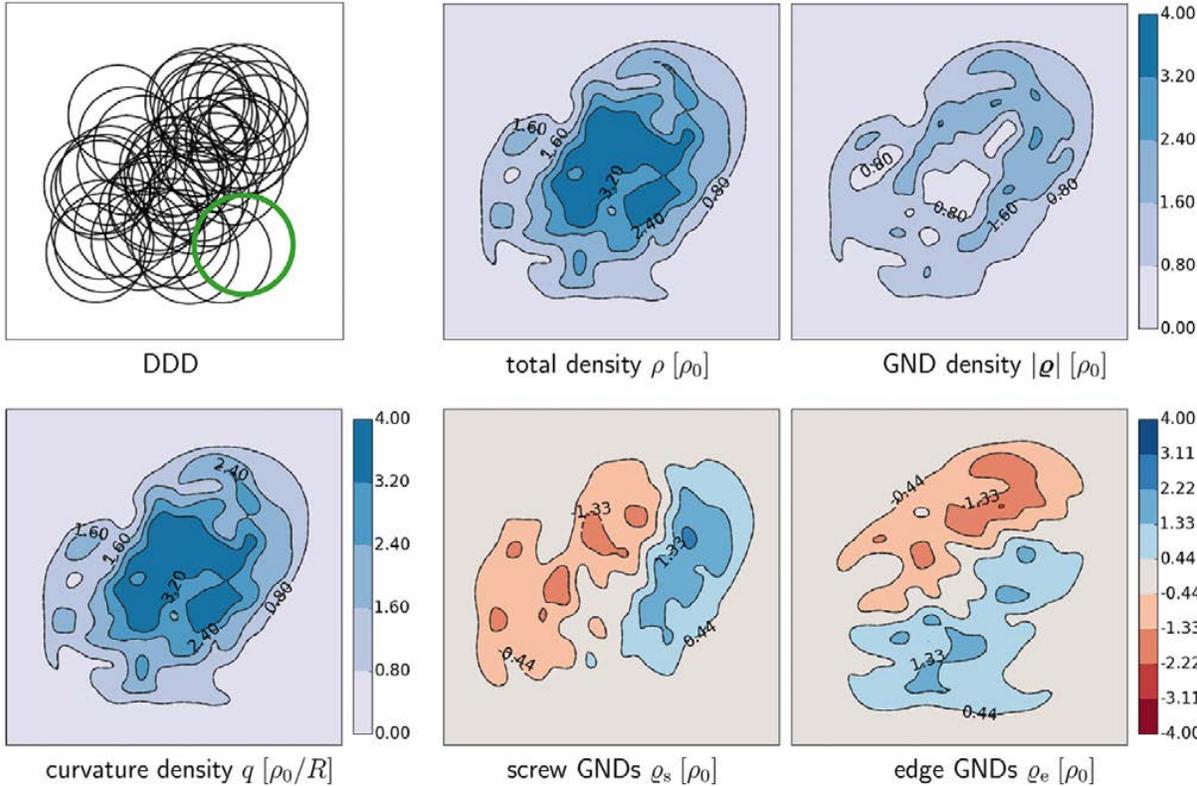


FIGURE 1.27 – Configuration initiale de densités de dislocations obtenue par la dynamique des dislocations discrètes (en haut à gauche) à partir de laquelle les valeurs initiales des variables de champ (ρ , $|\varrho|$, q , ϱ_s , ϱ_e) de la théorie continue de dynamique des dislocations sont obtenues (cf. [198]).

1.5.4.2 La mécanique des champs de dislocations (FDM)

La mécanique des champs de dislocation ("FDM : Field Dislocation Mechanics" en anglais) fait partie des théories continues de dynamique des dislocations. Elle se

base sur l'utilisation du tenseur densité de dislocations de Nye [177, 31, 51, 171, 237, 129, 131] pour la description des structures émergentes de dislocations à une échelle mésoscopique. La théorie de Kröner a été repensée par Acharya [1, 193, 7] et s'appuie sur l'idée selon laquelle les densités de dislocations sont responsables de l'incompatibilité du réseau cristallin et des contraintes internes à longue portée. La FDM permet de calculer ces contraintes internes associées à la présence des dislocations géométriquement nécessaires, ainsi que l'évolution de ces dernières à travers une équation de transport des densités de dislocations [171, 2, 224, 223]. Cette équation de transport est résolue en considérant les spécifications sur les flux de dislocations et sur la déformation plastique aux frontières. L'évolution des champs de dislocations et des contraintes internes dépend du chemin de déformation suivi, et l'anisotropie entre ces deux champs résulte de leur histoire [223]. La FDM autorise en effet le traitement des systèmes sur une large gamme d'échelles de longueur, allant de la nano-structure au spécimen de traction habituel, et permet de réaliser des déformations finies en travaillant sur les échelles de temps réelles [1, 2, 193, 7]. La FDM est plus appropriée pour les problèmes aux conditions aux limites générales et permet un traitement fondamental de la plasticité non-linéaire avec les dislocations géométriquement nécessaires. Elle trouve sa première application dans les systèmes de petites dimensions tels que les films minces, les structures à canaux pour lesquels les effets de tailles sont prépondérants, car les dimensions des systèmes considérées ne sont que faiblement supérieures à celles des structures internes de dislocations [194, 209]. A titre d'exemple, la figure 1.28 rapportée dans [209] montre, pour des conditions initiales prenant en compte des profils d'empilement de dislocations, l'effet de l'épaisseur d'un canal sur les courbes contrainte-déformation macroscopique dans un matériau à canal, avec des comparaisons entre la FDM et le modèle de plasticité conventionnelle. La FDM s'applique aussi au domaine des chargements complexes, car le durcissement du matériau dépend fortement des structures de dislocations formées pour un type de chargement donné [224, 223, 214]. Dans le chapitre 2, les équations fondamentales de la FDM seront rappelées, de même que son extension phénoménologique à l'échelle mésoscopique.

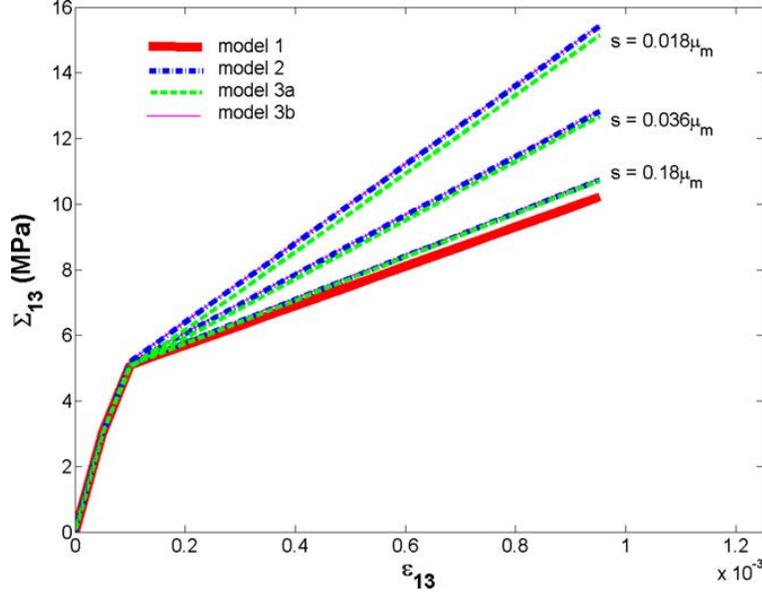


FIGURE 1.28 – Effet de l'épaisseur s d'un canal de fraction volumique constante $f_W = 0.1$ sur la courbe contrainte-déformation macroscopique. model 1 : plasticité conventionnelle, model 2 : plasticité conventionnelle avec les conditions de saut aux interfaces., model 3a et model 3b : mécanique des champs de dislocations avec les conditions de saut aux interfaces et avec la prise en compte de sources de dislocations par des profils initiaux de déformation plastique correspondant à des empilements de dislocations [209].

1.6 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons passé en revue les mécanismes de déformations plastiques basées sur le glissement des dislocations individuelles et collectives. Nous sommes partis de la définition des dislocations individuelles pour aboutir à la formulation classique de la plasticité cristalline pour les monocristaux et pour les agrégats polycristallins. Nous avons également rappelé la cinématique du glissement, les lois d'écroissage, les lois de comportement et les modèles micromécaniques à champs moyens et à champs complets pour l'étude des polycristaux en plasticité cristalline conventionnelle. Pour tenir compte de certains aspects de la plasticité qui échappent à la théorie conventionnelle, nous avons introduit brièvement les théories de plasticité actuelles de natures discrètes et continues qui sont capables de prendre en compte la formation des structures de dislocations géométriquement nécessaires (GNDs), ainsi que les interactions entre ces dernières dans un contexte de plasticité non-locale.

Le présent travail de thèse est exclusivement basé sur une formulation spectrale de la théorie de la mécanique des champs de dislocations et de son extension phéno-

ménologique à l'échelle mésoscopique. Une étude détaillée des équations de champs et d'évolution des densités de dislocations, ainsi que les conditions aux limites associées à leurs résolutions sera présentée dans le chapitre 2. En outre, les différentes hypothèses constitutives et les conditions aux interfaces de type joints de grains ou de phases seront également rapportées dans le prochain chapitre.

Chapitre 2

Mécanique des Champs de Dislocations et extensions

2.1 Objectifs

L'objectif général de ce chapitre est de présenter les fondements de la théorie de la mécanique des champs de dislocations. Dans un premier temps, nous introduirons la notion d'incompatibilité cristalline en présence de dislocations. Nous montrerons notamment que le vecteur de Burgers introduit par les lignes de dislocations génère des distortions élastiques (et plastiques) incompatibles au sein du cristal. En introduisant ensuite le tenseur des densités de dislocations de Nye, nous montrerons que le caractère singulier du vecteur de Burgers (description de Volterra) peut être substitué par une description complètement continue à l'aide de densités de dislocations auxquelles sont associées les distortions incompatibles. Dans un deuxième temps, nous rappellerons la décomposition de Stokes-Helmholtz de la distorsion élastique récemment utilisée par Acharya pour pouvoir déterminer de façon unique les champs de déformation élastique et de contrainte dûs à la présence d'une densité de dislocations au sein du cristal. Ensuite, nous présenterons comment la mécanique des champs de dislocations est capable de rendre compte de la plasticité liée au mouvement des densités de dislocations. Nous introduirons l'équation de transport des densités de dislocations polarisées, puis la loi de mobilité associée à ce transport. Nous pourrons ensuite définir un cadre thermodynamique qui nous permettra d'exprimer des forces motrices pour le transport des densités de dislocations. Finalement, nous présenterons l'extension mésoscopique de la mécanique des champs de dislocations qui permet de modéliser la déformation plastique des matériaux cristallins à une échelle de résolution micrométrique. Nous porterons un accent particulier sur les notions de densités de dislocations statistiques et géométriquement nécessaires. Nous rappellerons également des conditions de continuité interfaciale récemment introduites par Acharya [3]. Au sein de ce chapitre, nous fournirons des formula-

tions variationnelles résolues par la méthode des éléments finis pour la résolution des champs élastiques des densités de dislocations et pour l'approximation de l'équation de transport. Cela nous servira de validation et de comparaison pour les prochains chapitres.

2.2 Représentation continue des dislocations : Cinématique et incompatibilité du réseau cristallin

Soit (R) la configuration de référence (ou configuration initiale) d'un cristal compact, parfait et dénué de toutes contraintes, et (C) sa configuration finale (ou configuration déformée) compacte et continue. La configuration déformée (C) est obtenue en appliquant une transformation $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X})$ de gradient de transformation \mathbf{F} à la configuration de référence (R). Le vecteur \mathbf{X} représente la position dans la configuration de référence (R) d'un point \mathbf{x} dans la configuration finale (C). La transformation \mathbf{x} est supposée bijective, continue, dérivable et à dérivée continue. Elle s'écrit :

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{X} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} \cdot \mathbf{X}. \quad (2.1)$$

Le tenseur \mathbf{F} peut se décomposer multiplicativement en une partie plastique \mathbf{F}^p et une partie élastique \mathbf{F}^e :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^p \cdot \mathbf{F}^e. \quad (2.2)$$

\mathbf{F}^p représente la partie plastique de \mathbf{F} . Lorsqu'elle est appliquée à la configuration de référence (R), elle conduit à une configuration intermédiaire disloquée (I) dans laquelle le vecteur de Burgers \mathbf{b} est introduit comme une discontinuité. En effet deux atomes voisins dans la configuration de référence (R) peuvent se retrouver à une grande distance l'un de l'autre dans la configuration intermédiaire (I). Le champ de déplacement plastique est donc discontinu et \mathbf{F}^p ne peut donc pas être le tenseur gradient d'un champ de vecteur, d'où l'incompatibilité du réseau cristallin.

\mathbf{F}^e représente la partie élastique de \mathbf{F} qui opère sur la configuration intermédiaire (I) pour obtenir la configuration déformée (C) qui est continue et compacte. Appliqué à la configuration (I), \mathbf{F}^e permet de rétablir la continuité du déplacement total dans la configuration (C). Inversement, la transformation élastique inverse \mathbf{F}^{e-1} appliquée à la configuration (C) mène à la configuration (I) où le déplacement plastique est discontinu. \mathbf{F}^e représente donc une incompatibilité d'origine élastique qui compense l'incompatibilité plastique décrite par \mathbf{F}^p . Tout comme \mathbf{F}^p , \mathbf{F}^e n'est pas en général un tenseur gradient, contrairement à \mathbf{F} .

Le champ de déplacement \mathbf{u} est donc défini par :

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}. \quad (2.3)$$

La transformation \mathbf{F} peut donc s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \text{grad } \mathbf{u}, \quad (2.4)$$

où \mathbf{I} est le tenseur unitaire d'ordre deux.

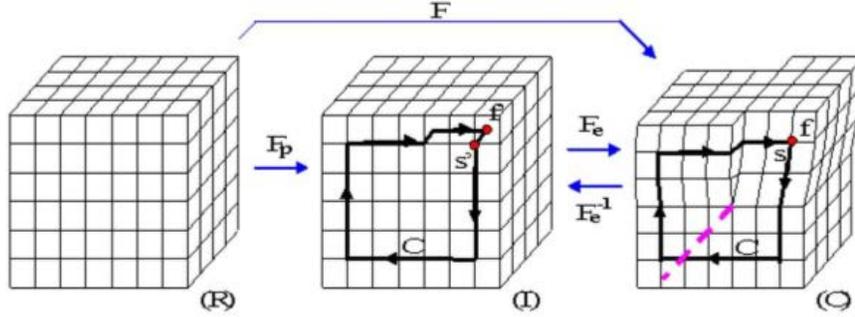


FIGURE 2.1 – Représentation des différentes configurations du cristal contenant une dislocation vis [208].

Soit l'exemple d'un cristal contenant une dislocation vis représenté par la figure 2.1 sur laquelle les différentes configurations du cristal sont rappelées. La courbe fermée C entourant la dislocation (représentée par la ligne de dislocation en pointillés) dans la configuration déformée (C) représente le circuit de Burgers qui a été introduit au chapitre 1. La courbe C est conventionnellement orientée dans le sens fourni par la règle du tire-bouchon de Maxwell (RH ou "Right-Hand" rule en anglais). Dans la configuration déformée (C), S et F sont confondus. En appliquant la distorsion élastique inverse \mathbf{F}^{e-1} à (C), les points F et S deviennent les points distincts F' et S' dans la configuration intermédiaire disloquée (I). Le défaut de fermeture du circuit C noté \mathbf{b} , et défini selon la convention "Finish-Start" (FS), est appelé vecteur de Burgers vrai de la dislocation. En intégrant la distorsion élastique inverse \mathbf{F}^{e-1} le long de la courbe C , en partant de S' vers F' , on définit \mathbf{b} par :

$$F'S' = \mathbf{b} = - \oint \mathbf{F}^{e-1} \cdot d\mathbf{x}. \quad (2.5)$$

Lorsque \mathbf{b} est non nul, \mathbf{F}^{e-1} n'est pas le gradient d'un champ de vecteur d'où l'incompatibilité de réseau au sens où, en un point de la courbe C , le déplacement de réseau prend deux valeurs distinctes. La configuration intermédiaire peut être définie en ce point, mais deux domaines infinitésimaux voisins qui sont compatibles dans la configuration de référence, y sont alors géométriquement incompatibles. Cependant, si \mathbf{b} est nul, \mathbf{F}^{e-1} est le gradient d'un champ de vecteurs, le champ de déplacement est bijectif et il y a compatibilité du réseau :

$$\oint \mathbf{F}^{e-1} \cdot d\mathbf{x} = 0. \quad (2.6)$$

Le théorème de Stokes appliqué à la distorsion élastique inverse \mathbf{F}^{e-1} de l'équation (2.5) donne :

$$\oint_C \mathbf{F}^{e-1} \cdot d\mathbf{x} = \int_S \mathbf{rot}(\mathbf{F}^{e-1}) \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.7)$$

avec S la surface délimitée par la courbe C et \mathbf{n} la normale unitaire à cette surface. D'après cette dernière équation, la condition nécessaire et suffisante pour que \mathbf{F}^{e-1} soit compatible est écrite sous la forme suivante, en se basant sur l'équation (2.6) :

$$\mathbf{rot}(\mathbf{F}^{e-1}) = 0. \quad (2.8)$$

En revanche, lorsque $\mathbf{rot}(\mathbf{F}^{e-1}) \neq 0$, \mathbf{F}_e^{-1} est incompatible. L'équation (2.6) est appelée équation de compatibilité, et $\mathbf{rot}(\mathbf{F}^{e-1})$ constitue une mesure de l'incompatibilité.

2.3 Introduction du tenseur densité de dislocation

L'équation (2.5) donnant le vecteur de Burgers peut s'écrire, grâce à l'équation (2.7), sous la forme :

$$\mathbf{b} = - \oint_C \mathbf{F}^{e-1} \cdot d\mathbf{x} = - \int_S \mathbf{rot}(\mathbf{F}^{e-1}) \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.9)$$

où S représente la surface délimitée par la courbe C et \mathbf{n} la normale unitaire à cette surface. La dislocation continue associée à la transformation élastique \mathbf{F}^{e-1} est le tenseur des densités de dislocations de Nye [177] $\boldsymbol{\alpha}$ encore appelé densité de dislocations en excès ou polarisée ou encore densités de dislocations géométriquement nécessaires ("Geometrically Necessary Dislocations" en anglais ou GNDs). Dans un repère Cartésien ($\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$), la composante $\alpha_{ij} = b_i t_j$ de $\boldsymbol{\alpha}$ fournit pour une surface unitaire S et pour une dislocation (définie par la convention Finish-Start/Right-Hand), le vecteur de Burgers net \mathbf{b}_i dans la direction \mathbf{e}_i et le vecteur unitaire \mathbf{t}_j dans la direction \mathbf{e}_j . D'après cette définition, le vecteur de Burgers net peut être exprimé comme :

$$\mathbf{b} = \int_S \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (2.10)$$

Par analogie à l'équation (2.9), le tenseur $\boldsymbol{\alpha}$ peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{rot}(\mathbf{F}^{e-1}). \quad (2.11)$$

Dans l'hypothèse des petites déformations élastiques, $\mathbf{F}^{e-1} = \mathbf{I} - \mathbf{U}^e$, où \mathbf{U}^e est la distorsion élastique linéarisée, et \mathbf{I} est le tenseur unitaire d'ordre deux. Dans ce cas, le tenseur $\boldsymbol{\alpha}$ s'écrit :

$$\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{rot}(\mathbf{F}^{e-1}) = -\mathbf{rot}(\mathbf{I} - \mathbf{U}^e) = \mathbf{rot}(\mathbf{U}^e). \quad (2.12)$$

En outre, le tenseur $\boldsymbol{\alpha}$ peut encore s'écrire, d'après l'équation (2.10), sous la forme suivante pour un ensemble de dislocations traversant une surface notée ΔS (non nécessairement unitaire) :

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{B} \otimes \mathbf{t}, \quad (2.13)$$

ou encore en notation indicielle :

$$\alpha_{ij} = B_i t_j, \quad (2.14)$$

avec $B_i = B \mathbf{e}_i$ et $B = \frac{nb}{\Delta S}$, n étant le nombre de dislocations de norme b et de vecteur de Burgers \mathbf{b} suivant la direction \mathbf{e}_i , traversant la surface unitaire normale à \mathbf{t} suivant la direction \mathbf{e}_j :

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{nb}{\Delta S} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j. \quad (2.15)$$

Par définition, α_{ij} est un tenseur non symétrique possédant 9 composantes indépendantes. Les termes diagonaux représentent les dislocations vis, puisque le vecteur ligne et le vecteur de Burgers sont parallèles. Les termes non diagonaux représentent les dislocations coins : les deux vecteurs étant orthogonaux. On compte donc six sortes de dislocations coins et trois sortes de dislocations vis. En termes d'unité, les composantes de α_{ij} sont exprimées d'après l'équation (2.15) en m de vecteurs de Burgers par m^2 de surface, c'est-à-dire en m^{-1} .

A partir de l'équation (2.12), il suit une loi de conservation :

$$\mathbf{div} \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{div} \mathbf{rot} \mathbf{U}^e = 0, \quad (2.16)$$

qui traduit la condition de fermeture d'une ligne de dislocation dans le domaine V occupé par un cristal.

2.4 Equations élasto-statiques de la Mécanique des Champs de Dislocations

2.4.1 Equations des champs élasto-statiques

Considérons un cristal continu de volume V et de frontière ∂V contenant une distribution de dislocations en excès représentée par le tenseur des densités de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$. Le but du problème élasto-statique est la détermination des contraintes internes provoquées par l'incompatibilité du réseau associée à la présence de $\boldsymbol{\alpha}$. Un champ de vecteur traction \mathbf{t}^d connu est appliqué en tout point d'une partie ∂V_t de la frontière ∂V du volume V . La partie ∂V_u restante de cette surface est soumise en tout point à un déplacement \mathbf{u}^d imposé (figure 2.2). Le domaine est en équilibre sous l'action de l'ensemble de ces charges.

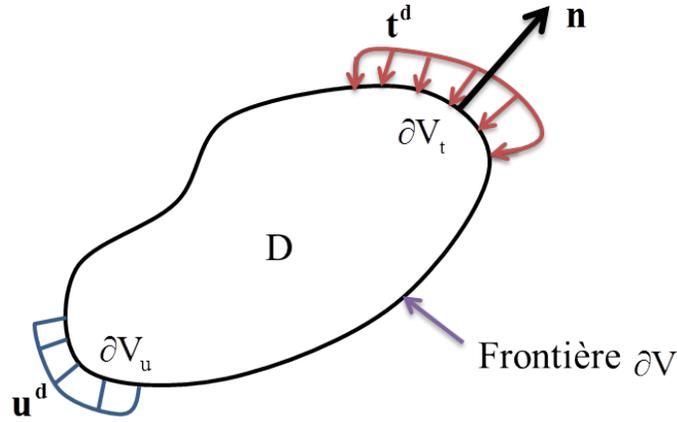


FIGURE 2.2 – Cristal de volume V avec les conditions aux limites mixtes en contrainte $\mathbf{t}^d = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ et en déplacement \mathbf{u}^d sur la frontière ∂V .

Dans l'hypothèse de petites perturbations, la distorsion totale du réseau cristallin $\mathbf{U} = \mathbf{grad} \mathbf{u}$ (\mathbf{u} étant le vecteur déplacement) est donc supposée intégrable (compatible). Elle peut être écrite comme la somme de la distorsion élastique \mathbf{U}^e , et de la distorsion plastique \mathbf{U}^p :

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}^e + \mathbf{U}^p. \quad (2.17)$$

La seule donnée du problème est le tenseur $\boldsymbol{\alpha}$ qui est lié à la distorsion élastique du réseau \mathbf{U}^e par l'équation (2.12). En adoptant la loi constitutive élastique linéaire de Hooke pour le champ de contrainte, il vient :

$$\mathbf{T} = \mathbf{C} : \mathbf{U}^{e, sym} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e, \quad (2.18)$$

où \mathbf{C} est le tenseur d'ordre quatre des modules élastiques hétérogènes, avec les propriétés de symétrie majeur $C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ représente le tenseur des déformations élastiques ou la partie symétrique du tenseur des distorsions élastiques et \mathbf{T} désigne le tenseur des contraintes de Cauchy. L'équation d'équilibre des contraintes s'écrit (sans forces de volume et d'inertie) alors :

$$\mathbf{div} \mathbf{T} = 0 \quad \text{dans } V. \quad (2.19)$$

2.4.2 Décomposition de Stokes-Helmholtz et équations de Poisson

Le tenseur \mathbf{U}^e peut être écrit selon la décomposition orthogonale de Stokes-Helmholtz qui stipule que tout champ tensoriel est susceptible d'être décomposé en une composante "longitudinale" (irrotationnelle) et une composante "transverse"

(solénoïdale), soit la somme du gradient d'un champ vectoriel \mathbf{w} et du rotationnel d'un champ tensoriel $\boldsymbol{\chi}$ [115]. Cette décomposition est unique et s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{U}^e = \mathbf{U}^{e,\perp} + \mathbf{U}^{e,\parallel} = \mathbf{rot} \boldsymbol{\chi} + \mathbf{grad} \mathbf{w}, \quad (2.20)$$

où $\mathbf{U}^{e,\perp} = \mathbf{rot} \boldsymbol{\chi}$ et $\mathbf{U}^{e,\parallel} = \mathbf{grad} \mathbf{w}$ représentent, respectivement, les parties incompatible et compatible de \mathbf{U}^e . En appliquant cette décomposition, le tenseur densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ défini par l'équation (2.12) devient :

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{rot} \mathbf{U}^{e,\perp} \quad (2.21)$$

car $\mathbf{rot} \mathbf{grad} \mathbf{w} = 0$. On déduit de ce qui précède que le calcul de la densité de dislocations ne fait pas intervenir le vecteur \mathbf{w} . De manière complémentaire, $\mathbf{div} \mathbf{U}^{e,\perp} = \mathbf{div} \mathbf{rot} \boldsymbol{\chi} = 0$. Ainsi, pour garantir l'unicité de $\mathbf{U}^{e,\perp}$ et s'assurer qu'il ne contient pas de partie compatible, il faut aussi exiger :

$$\begin{aligned} \mathbf{div} \mathbf{U}^{e,\perp} &= 0 \text{ dans } V \\ \mathbf{U}^{e,\perp} \cdot \mathbf{n} &= 0 \text{ sur } \partial V. \end{aligned} \quad (2.22)$$

En invoquant l'identité $\mathbf{rot} \mathbf{rot} \mathbf{U}^{e,\perp} = \mathbf{grad} \mathbf{div} \mathbf{U}^{e,\perp} - \mathbf{div} \mathbf{grad} \mathbf{U}^{e,\perp}$ et en utilisant la relation (équation (2.22)), la partie incompatible de la distorsion élastique est solution d'une équation de type Poisson :

$$\mathbf{div} \mathbf{grad} \mathbf{U}^{e,\perp} = \Delta \mathbf{U}^{e,\perp} = -\mathbf{rot} \boldsymbol{\alpha} \text{ dans } V, \quad (2.23)$$

avec,

$$\mathbf{U}_e^\perp \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial V. \quad (2.24)$$

En notation indicielle, les équations (2.23) et (2.24) s'écrivent :

$$\begin{aligned} U_{ij,kk}^{e,\perp} &= -e_{jkl} \alpha_{il,k} \\ U_{ij}^{e,\perp} n_j &= 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Complétées par leurs conditions aux limites respectives, les équations élasto-statiques (équation (2.18)), (équation (2.19)), (équation (2.20)) et (équation (2.23)) posent le problème élasto-statique des champs de dislocations.

2.4.3 Détermination de la distorsion plastique

D'après l'équation (2.17), la distorsion totale du réseau cristallin est définie comme la somme de la distorsion élastique \mathbf{U}^e , et plastique \mathbf{U}^p . La décomposition de Stokes-Helmholtz appliquée au tenseur \mathbf{U}^p s'écrit :

$$\mathbf{U}^p = \mathbf{U}^{p,\perp} + \mathbf{U}^{p,\parallel}. \quad (2.26)$$

En fonction des équations (2.20) et (2.26), le vecteur gradient du déplacement devient :

$$\mathbf{U} = \mathbf{grad} \mathbf{u} = \mathbf{U}^{e,\perp} + \mathbf{U}^{p,\perp} + \mathbf{U}^{e,\parallel} + \mathbf{U}^{p,\parallel}. \quad (2.27)$$

Il est trivial de remarquer dans cette relation que les parties incompatibles $\mathbf{U}^{e,\perp}$ et $\mathbf{U}^{p,\perp}$ doivent s'annuler pour que \mathbf{U} soit un tenseur gradient :

$$\mathbf{U}^{e,\perp} + \mathbf{U}^{p,\perp} = 0 \implies \mathbf{U}^{p,\perp} = -\mathbf{U}^{e,\perp}. \quad (2.28)$$

Cette relation vient prouver l'affirmation selon laquelle l'incompatibilité engendrée par la transformation plastique \mathbf{F}^p est compensée par une incompatibilité élastique, de sorte que la configuration déformée (C) soit compacte et continue. On déduit alors que :

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}^{e,\parallel} + \mathbf{U}^{p,\parallel} \implies \mathbf{U}^{p,\parallel} = \mathbf{U} - \mathbf{U}^{e,\parallel}. \quad (2.29)$$

Etant donnée une distribution du tenseur $\boldsymbol{\alpha}$ au sein du cristal, les distorsions élastiques et plastiques incompatibles sont solutions des équations (2.25) et (2.28). Comme montré ci-dessous, la distorsion élastique compatible permet d'assurer l'équilibre des contraintes en présence de distorsions élastiques incompatibles et d'un champ extérieur appliqué. Egalement montré plus tard, la distorsion plastique compatible provient du glissement compatible des dislocations. A l'état initial, ne sachant pas d'où provient la densité de dislocations, on se donne $\mathbf{U}^{p,\parallel} = 0$.

2.4.4 Equations de Navier pour les champs de distorsions élastiques compatibles

Les équations de champs élasto-statiques (2.18), (2.19), (2.20) et (2.23) peuvent être formulées sous forme d'équation aux dérivées partielles de type Navier dans V :

$$\mathbf{div} \mathbf{C} : \mathbf{U}_{sym}^{e,\parallel} + \mathbf{f}^\perp = 0, \quad (2.30)$$

où $\mathbf{U}^{e,\parallel} = \mathbf{grad} \mathbf{w}$ et la densité de force volumique $\mathbf{f}^\perp = \mathbf{div} \mathbf{C} : \mathbf{U}_{sym}^{e,\perp}$ reflète l'incompatibilité qui découle de la présence des dislocations. Les conditions aux limites sur $\mathbf{U}^{e,\parallel}$ sur les frontières ∂V pour la résolution de l'équation de type Navier sont données par :

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= \mathbf{w}^d \quad \text{sur} \quad \partial V_u \\ \mathbf{C} : \mathbf{U}_{sym}^{e,\parallel} \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{t}^d - \mathbf{C} : \mathbf{C} : \mathbf{U}_{sym}^{e,\perp} \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur} \quad \partial V_t. \end{aligned} \quad (2.31)$$

L'équation d'équilibre de type Navier (2.30) ainsi que les conditions aux limites (2.31) forment le problème standard d'élasticité pour le champ inconnu $\mathbf{U}^{e,\parallel}$, qui

peut donc être déterminé de manière unique. La densité de force volumique \mathbf{f}^\perp est déterminée au préalable en résolvant l'équation de type Poisson (2.23), une fois la densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ prescrite.

En considérant un milieu de référence homogène avec un module d'élasticité linéaire \mathbf{C}^0 , tel que $\mathbf{C} = \mathbf{C}^0 + \delta\mathbf{C}$, l'équation (2.30) peut s'écrire sous la forme indicielle suivante :

$$C_{ijkl}^0 w_{k,lj} + \tau_{ij,j} = 0. \quad (2.32)$$

Dans cette équation, $\tau_{ij} = C_{ijkl} U_{kl}^{e,\perp} + \delta C_{ijkl} w_{k,l}$ représente le tenseur des champs de polarisation représentatif de l'incompatibilité de la déformation élastique due à la présence des dislocations, et aux hétérogénéités élastiques dans le matériau [238]. Comme τ contient une déformation compatible inconnue, l'équation (2.32) est une équation implicite dont la résolution fait l'objet du prochain chapitre.

Dans le cas particulier de l'élasticité homogène décrite par le module d'élasticité C_{ijkl}^0 , le tenseur de polarisation s'annule et l'équation (2.32) se réduit à :

$$C_{ijkl}^0 w_{k,lj} + C_{ijkl}^0 U_{kl,j}^{e,\perp} = 0. \quad (2.33)$$

De plus, lorsqu'on considère une élasticité isotrope, avec $C_{ijkl}^0 = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$, l'équation (2.33) se met sous la forme :

$$\mu w_{i,kk} + (\lambda + \mu) w_{k,ki} + \lambda U_{kk,i}^{e,\perp} + \mu (U_{ik,k}^{e,\perp} + U_{ki,k}^{e,\perp}) = 0 \quad (2.34)$$

où μ et λ sont, respectivement, le module de cisaillement et la constante de Lamé du matériau.

La résolution de l'équation (2.32) se fera par une approche spectrale de type FFT en élasticité homogène, puis, hétérogène dans le chapitre 3 de ce document. Dans les exemples ci-après, nous considérons le cas de l'élasticité homogène (équation (2.33)) dans le cas de dislocations vis et coin rectilignes. Nous fournirons également dans ce qui suit une formulation variationnelle qui sera résolue par éléments finis pour approximer les champs élastiques associés aux dislocations.

2.4.5 Cas des dislocations vis et coins en élasticité linéaire et homogène

2.4.5.1 Dislocation vis

Ici, nous considérons un cristal muni d'un repère $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ et supposé infini dans la direction \mathbf{e}_3 (figure 2.3). Ce cristal contient en son centre une dislocation vis de vecteur ligne $\mathbf{t} = \mathbf{e}_3$ et de vecteur de Burgers $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_3$. La seule composante non nulle

du tenseur densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ est $\alpha_{33}(\mathbf{x})$. Pour cette densité de dislocations, les équations (2.23) et (2.24) se réduisent à deux équations aux dérivées partielles de type Poisson :

$$U_{31,11}^{e,\perp} + U_{31,22}^{e,\perp} = -\alpha_{33,2} \quad (2.35)$$

$$U_{32,11}^{e,\perp} + U_{32,22}^{e,\perp} = \alpha_{33,1}, \quad (2.36)$$

avec $U_{31}^{e,\perp}$ et $U_{32}^{e,\perp}$ nulles aux frontières de normales \mathbf{n}_1 et \mathbf{n}_3 pour $U_{31}^{e,\perp}$, et \mathbf{n}_2 et \mathbf{n}_4 pour $U_{32}^{e,\perp}$:

$$U_{32}^{e,\perp} = U_{31}^{e,\perp} = 0 \quad (2.37)$$

Dans le cas d'une dislocation vis dans un milieu homogène linéaire élastique isotrope, les seules contraintes mises en jeu sont T_{31} et T_{32} . Le vecteur $\mathbf{w}(w_1, w_2)$ solution de l'équation (2.34) étant nul, seule la partie incompatible de la déformation élastique satisfait l'équation d'équilibre (2.34). Dans ce cas, les contraintes T_{31} et T_{32} sont données par :

$$T_{23} = T_{32} = \mu U_{32}^{e,\perp} \quad (2.38)$$

$$T_{13} = T_{31} = \mu U_{31}^{e,\perp}. \quad (2.39)$$

D'autres champs élastiques, tels que les rotations élastiques, peuvent aussi être déduites de la manière suivante :

$$\omega_{32}^e = -\omega_{23}^e = \frac{U_{32}^{e,\perp}}{2} \quad (2.40)$$

$$\omega_{31}^e = -\omega_{13}^e = \frac{U_{31}^{e,\perp}}{2} \quad (2.41)$$

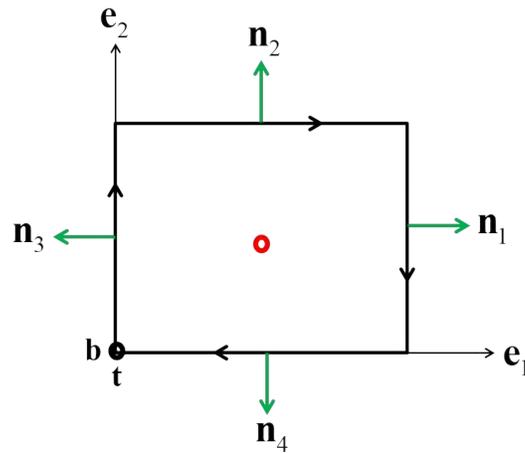


FIGURE 2.3 – Figure illustrant les normales aux frontières d'un cristal contenant une dislocation vis α_{33} .

2.4.5.2 Dislocation coin

Considérons une dislocation coin de vecteur ligne $\mathbf{t} = \mathbf{e}_3$ et de vecteur de Burgers $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_1$ au centre d'un cristal supposé infini dans la direction \mathbf{e}_3 et muni d'un repère $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ (figure 2.4). La seule composante non nulle du tenseur densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ est $\alpha_{13}(\mathbf{x})$. Pour cette densité de dislocations, les équations (2.23) et (2.24) se réduisent aussi à deux équations de type Poisson :

$$U_{11,11}^{e,\perp} + U_{11,22}^{e,\perp} = -\alpha_{13,2} \quad (2.42)$$

$$U_{12,11}^{e,\perp} + U_{12,22}^{e,\perp} = \alpha_{13,1}, \quad (2.43)$$

avec $U_{11}^{e,\perp}$ et $U_{12}^{e,\perp}$ nulles aux frontières de normales \mathbf{n}_1 et \mathbf{n}_3 pour $U_{11}^{e,\perp}$, et \mathbf{n}_2 et \mathbf{n}_4 pour $U_{12}^{e,\perp}$:

$$U_{11}^{e,\perp} = U_{12}^{e,\perp} = 0. \quad (2.44)$$

Les parties incompatibles $U_{11}^{e,\perp}$ et $U_{12}^{e,\perp}$ étant supposées connues, les parties compatibles peuvent, à présent, être calculées dans le cas d'un comportement homogène isotrope en se servant de la relation (2.34). Ainsi, on obtient deux équations aux dérivées partielles permettant de calculer le vecteur inconnu $\mathbf{w}(w_1, w_2)$ (comme dans [1]) :

$$\begin{cases} (\lambda + 2\mu) w_{1,11} + \mu w_{1,22} + (\lambda + \mu) w_{2,12} = -(\lambda + 2\mu) U_{11,1}^{e,\perp} - \mu U_{12,2}^{e,\perp} \\ \mu w_{2,11} + (\lambda + 2\mu) w_{2,22} + (\lambda + \mu) w_{1,12} = -\mu U_{12,1}^{e,\perp} - \lambda U_{11,2}^{e,\perp} \end{cases} \quad (2.45)$$

Les conditions aux limites pour leurs résolutions sont précisées par l'équation (2.31). Une fois w_1 et w_2 obtenues, les quatres distorsions élastiques compatibles $U_{11}^{e,\parallel}$, $U_{12}^{e,\parallel}$, $U_{21}^{e,\parallel}$ et $U_{22}^{e,\parallel}$ sont alors dérivées par les relations suivantes :

$$\begin{cases} U_{11}^{e,\parallel} = \frac{\partial w_1}{\partial x_1} \\ U_{12}^{e,\parallel} = \frac{\partial w_1}{\partial x_2} \\ U_{21}^{e,\parallel} = \frac{\partial w_2}{\partial x_1} \\ U_{22}^{e,\parallel} = \frac{\partial w_2}{\partial x_2} \end{cases} \quad (2.46)$$

Les contraintes internes sont également obtenues par les relations suivantes :

$$\begin{cases} T_{11} = (\lambda + 2\mu) (U_{11}^{e,\parallel} + U_{11}^{e,\perp}) + \lambda U_{22}^{e,\parallel} \\ T_{22} = \lambda (U_{11}^{e,\parallel} + U_{11}^{e,\perp}) + (\lambda + 2\mu) U_{22}^{e,\parallel} \\ T_{12} = \mu (U_{21}^{e,\parallel} + U_{21}^{e,\parallel} + U_{12}^{e,\perp}) \end{cases} \quad (2.47)$$

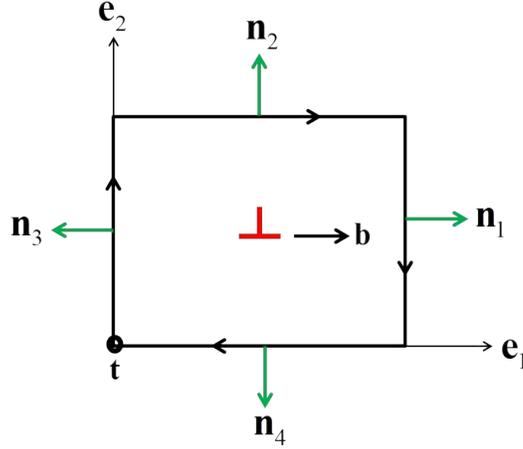


FIGURE 2.4 – Figure illustrant les normales aux frontières d’un cristal contenant une dislocation coin α_{13} .

2.4.6 Résolution des équations élasto-statiques de la FDM par la méthode des éléments finis

La détermination des parties incompatibles de la distorsion élastique a conduit aux équations aux dérivées partielles de type Poisson ((2.35) et (2.36) pour la dislocation vis, et (2.42) et (2.43) pour la dislocation coin). Pour la dislocation vis, les solutions des équations (2.35) et (2.36) suffisent pour résoudre le problème en contraintes. Par contre, pour la dislocation coin, le problème en contraintes nécessite la résolution de l’équation de Navier. Cette section est dédiée à la résolution numérique de ces équations par la méthode EF. Nous nous placerons dans un premier temps dans un cadre général tridimensionnel, avant d’aller aux cas spécifiques. Nous nous limiterons uniquement à l’écriture des formes faibles. Les applications numériques seront présentées dans le chapitre 3.

2.4.6.1 Forme faible des équations aux dérivées partielles de type Poisson

Le problème consiste à résoudre les équations aux dérivées partielles de la forme :

$$u_{,ii} = f, \tag{2.48}$$

avec la condition aux limites $u = u^d$ sur la frontière ∂V de V .

Soit R le résidu ou l'erreur de l'équation (2.48). Il s'écrit :

$$R = u_{,ii} - f = Lu - f \quad \text{avec ici} \quad L = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \quad (2.49)$$

Soit également v une fonction poids. L'orthogonalisation du résidu R par la fonction poids v donne :

$$\langle R, v \rangle = \langle Lu - f, v \rangle = 0, \quad (2.50)$$

où $\langle \cdot \rangle$ représente l'opérateur produit scalaire. La forme intégrale associée s'écrit :

$$\int_V Lu \cdot v \, dV - \int_V f \cdot v \, dV = 0. \quad (2.51)$$

L'équation (2.51) sous forme indicielle donne :

$$\int_V u_{,ii}v \, dV - \int_V fv \, dV = 0. \quad (2.52)$$

D'après le théorème de Green (intégration par parties),

$$\int_V u_{,ii}v \, dV = \int_V (u_{,i}v)_{,i} \, dV - \int_V u_{,i}v_{,i} \, dV. \quad (2.53)$$

D'après le théorème de la divergence,

$$\int_V (u_{,i}v)_{,i} \, dV = \int_{\partial V} u_{,i} v n_i \, dS. \quad (2.54)$$

En fonction des équations (2.53) et (2.54), l'équation (2.52) devient :

$$\int_V u_{,i}v_{,i} \, dV = \int_{\partial V} u_{,i} v n_i \, dS - \int_V fv \, dV. \quad (2.55)$$

L'équation (2.55) est la forme faible de l'équation (2.52). Elle peut également se mettre sous la forme :

$$\int_V u_{,i}v_{,i} \, dV = \int_{\partial V} \frac{\partial u}{\partial n} v \, dS - \int_V fv \, dV. \quad (2.56)$$

L'application des conditions aux limites conduit à l'équation (2.57) :

$$\int_V u_{,i}v_{,i} \, dV = \int_{\partial V} q^d v \, dS - \int_V fv \, dV. \quad (2.57)$$

Maintenant que la forme faible des équations aux dérivées partielles de type Poisson a été établie dans le cas général, elle peut être appliquée aux cas particuliers d'équations aux dérivées partielles permettant la détermination des distorsions élastiques incompatibles dans le cas des dislocations vis et coin individuelles. Ainsi, l'application de la formule (2.57) aux équations (2.35) et (2.36) de la dislocation vis,

tout en remarquant l'absence des conditions aux limites de type Neumann, donne les formes faibles suivantes dans le cas bidimensionnel (2D) :

$$\int_V \left(\frac{\partial U_{31}^{e,\perp}}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial U_{31}^{e,\perp}}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) dV = - \int_V \frac{\partial \alpha_{33}}{\partial y} v dV \quad (2.58)$$

$$\int_V \left(\frac{\partial U_{32}^{e,\perp}}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial U_{32}^{e,\perp}}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) dV = \int_V \frac{\partial \alpha_{33}}{\partial x} v dV. \quad (2.59)$$

Le même raisonnement appliqué aux équations (2.42) et (2.43) de la dislocation coin conduit à :

$$\int_V \left(\frac{\partial U_{11}^{e,\perp}}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial U_{11}^{e,\perp}}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) dV = - \int_V \frac{\partial \alpha_{13}}{\partial y} v dV \quad (2.60)$$

$$\int_V \left(\frac{\partial U_{12}^{e,\perp}}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial U_{12}^{e,\perp}}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) dV = \int_V \frac{\partial \alpha_{13}}{\partial x} v dV. \quad (2.61)$$

2.4.6.2 Forme faible de l'équation aux dérivées partielles de types Navier

La résolution de l'équation d'équilibre des forces par la méthode EF nécessite la mise sous forme faible de l'équation (2.30), grâce à l'utilisation du principe des travaux virtuels.

Ici, nous considérons un domaine de matière de volume V , soumis à une force de composantes f_i en équilibre et auquel on applique un déplacement virtuel $\delta \mathbf{u}$. Les conditions aux limites suivantes liées à la frontière ∂V de V ($\partial V = \partial V_u \cup \partial V_t$) sont considérées :

1. $w = w^d$ sur ∂V_u (conditions aux limites de type Dirichlet),
2. $\frac{\partial T}{\partial x_i} n_i = \frac{\partial T}{\partial n} = t^d$ sur ∂V_t (conditions aux limites de type Neumann), \mathbf{n} étant la normale à la frontière ∂V .

Le principe des travaux virtuels, en formulation déplacements virtuels, établit que le travail virtuel des forces internes est égal au travail virtuel des forces externes :

$$W_{int} = W_{ext}. \quad (2.62)$$

Dans le cas de l'élasto-plasticité, la relation précédente s'écrit :

$$\int_V \delta \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} dV = \int_{\partial V_t} t_i^d \delta w_i dS + \int_V f_i \delta w_i dV, \quad (2.63)$$

où $\delta w_i = 0$ sur ∂V_u et $\delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \delta w_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \delta w_j}{\partial x_i} \right)$. L'équation (2.63) peut encore se mettre sous la forme suivante :

$$\int_V \delta \varepsilon_{ij} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^e dV = \int_{\partial V_t} t_i^d \delta w_i dS + \int_V f_i \delta w_i dV. \quad (2.64)$$

En posant ensuite $\delta w_i = v_i$, l'équation (2.64) devient :

$$\int_V \delta \varepsilon_{ij} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^e dV = \int_{\partial V_i} t_i^d v_i dS + \int_V f_i v_i dV. \quad (2.65)$$

L'équation (2.65) est la forme faible qui est à la base de la plupart des formulations éléments finis utilisées en élasticité. Dans le cas de la dislocation coin, elle s'écrit, en considérant l'équation (2.19) qui montre l'absence des forces volumiques et surfaciques :

$$\int_V \delta \varepsilon_{ij} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^e dV = 0 \quad (2.66)$$

De plus en posant $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p$ et en remarquant que $\varepsilon_{ij}^p = -\varepsilon_{ij}^{e,\perp} + \varepsilon_{ij}^{p,\parallel}$ (avec $\varepsilon_{ij}^{p,\parallel} = 0$ initialement), l'équation (2.66) devient :

$$\int_V \delta \varepsilon_{ij} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} dV = - \int_V \delta \varepsilon_{ij} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{e,\perp} dV, \quad (2.67)$$

avec $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w_i}{\partial x_j} + \frac{\partial w_j}{\partial x_i} \right)$, où les w_i représentent les champs de déplacement solutions de l'équation (2.67). De ces champs de déplacement, on peut déduire les distorsions élastiques compatibles et les contraintes internes qui sont données respectivement par les équations (2.46) et (2.47) dans le cas d'une élasticité homogène linéaire et isotrope.

En conclusion, les formes faibles des équations de types Poisson et Navier définies par les équations (2.58), (2.59), (2.60), (2.61) et (2.67) vont permettre de développer des programmes éléments finis pour la validation des approches FFT qui seront développées dans le troisième chapitre du manuscrit.

2.5 Equations d'évolution de la FDM

2.5.1 Flux de vecteur de Burgers et vitesse de distorsion plastique

Considérons un ensemble de n dislocations de vecteur de ligne \mathbf{t} , de même vecteur de Burgers \mathbf{b} tels qu'on puisse définir le tenseur de densités de dislocations $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{B} \otimes \mathbf{t}$ avec $B = nb/\Delta S$, la norme de \mathbf{B} . Ces dislocations ont une vitesse moyenne (à l'échelle de résolution adoptée) \mathbf{v} par rapport au réseau cristallographique.

Supposons que ces dislocations croisent une courbe fermée C orientée, pour y pénétrer, et traverser ainsi la surface S qu'elle limite (figure 2.5). Il se crée donc un flux \mathbf{f} de vecteur de Burgers au travers d'un élément de surface dS tangent à C ,

défini comme suit :

$$\mathbf{f} \cdot d\mathbf{x} = \mathbf{B}(\mathbf{v} \cdot d\mathbf{S}) = \mathbf{B}(\mathbf{v} \cdot (\mathbf{t} \times d\mathbf{x})). \quad (2.68)$$

Ce flux peut être encore écrit, en faisant une permutation du produit mixte $\mathbf{v} \cdot (\mathbf{t} \times d\mathbf{x})$ sous la forme :

$$\mathbf{f} = -\mathbf{B} \otimes \mathbf{t} \times \mathbf{v} = -\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v} \quad (2.69)$$

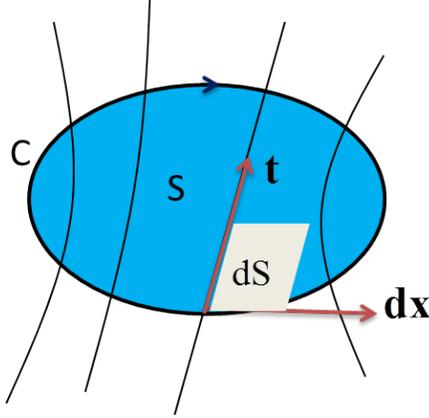


FIGURE 2.5 – Lignes de dislocations traversant la surface S délimitée par une courbe fermée C.

Le flux \mathbf{f} est un tenseur opérant sur la configuration déformée (C) et à valeurs dans la configuration intermédiaire (I). Dans le cadre des petites déformations, le tenseur des vitesses de distorsion plastique lié au flux de dislocations en excès, noté $\dot{\mathbf{U}}^p$ est tel que :

$$\dot{\mathbf{U}}^p = -\mathbf{f} = \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}. \quad (2.70)$$

Le tenseur $\dot{\mathbf{U}}^p$ possède la dimension d'un gradient de vitesse mais n'est pas en général un tenseur gradient, car il contient une partie incompatible. L'équation (2.70) est une généralisation tensorielle de la loi d'Orowan aux dislocations en excès (ou dislocations polarisées).

2.5.2 Equation d'évolution des densités de dislocations en excès

Considérons de nouveau la surface S délimitée par le circuit de Burgers C. L'équation de bilan de vecteurs de Burgers stipule que la variation temporelle du vecteur de Burgers net dans S est égale au flux de vecteurs de Burgers au travers de C :

$$\frac{d}{dt} \int_S \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n} dS = \int_C \mathbf{f} \cdot d\mathbf{x}, \quad (2.71)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal à la surface S . D'après le théorème de Stokes, et en considérant le fait que la surface S est indépendante du temps, il vient :

$$\frac{d}{dt} \int_S \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_S \frac{d\boldsymbol{\alpha}}{dt} \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_S \mathbf{rot} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} \, dS \quad (2.72)$$

d'où

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{rot} \mathbf{f} = -\mathbf{rot} \dot{\bar{\mathbf{U}}}^p = -\mathbf{rot} (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}). \quad (2.73)$$

L'équation (2.73) est appelée équation de transport des dislocations en excès qui exprime l'évolution du défaut de fermeture de C en fonction du flux de dislocations au travers de C . Elle est due à Mura [171] qui l'a attribuée à Kröner [128]. D'après l'identité $\mathbf{rot} \mathbf{grad} \mathbf{w} = 0$, on déduit que seule la partie incompatible de la vitesse de distorsion plastique contrôle l'évolution des dislocations en excès dans l'équation (2.73). Les phénomènes physiques comme l'initiation des sources de Frank-Read (figure 2.6), l'annihilation des dislocations et l'extension d'une boucle polygonale de dislocations peuvent être modélisés à partir de cette équation de transport des densités de dislocations.

Les conditions aux limites pour la résolution de l'équation de transport doivent être précisées. En effet, ces dernières ne doivent pas être arbitrairement restrictives. En particulier, elles doivent autoriser les flux sortant de dislocations. Si \mathbf{n} est la normale extérieure à la frontière ∂V , le flux de dislocations est défini par :

$$\mathbf{f} = \boldsymbol{\alpha} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \quad (2.74)$$

Le flux est sortant si $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$. Le flux est entrant si $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0$ sur ∂V .

2.5.3 Hypothèse constitutive sur la détermination de la distorsion plastique compatible

\mathbf{U}^p reçoit donc une contribution incompatible provenant de la distribution des dislocations en excès. La partie compatible est déterminée au travers d'une hypothèse qui stipule que \mathbf{U}^p reçoit une partie compatible provenant des flux de dislocations en excès [1] :

$$\dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel} = (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})^\parallel. \quad (2.75)$$

Cette hypothèse est de nature constitutive car elle consiste à affirmer d'une part que $\mathbf{U}^{p,\parallel}$ est obtenue par l'intégration de $\dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel}$ due au mouvement des dislocations et d'autre part, qu'à l'échelle de résolution choisie, toutes les dislocations sont en excès. $\dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel}$ est déterminée en utilisant la décomposition de Stokes-Helmholtz de $\dot{\bar{\mathbf{U}}}^p$:

$$\dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel} = \mathbf{grad} \dot{z} + \mathbf{rot} \dot{\boldsymbol{\chi}} = \dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel} + \mathbf{rot} \dot{\boldsymbol{\chi}}. \quad (2.76)$$

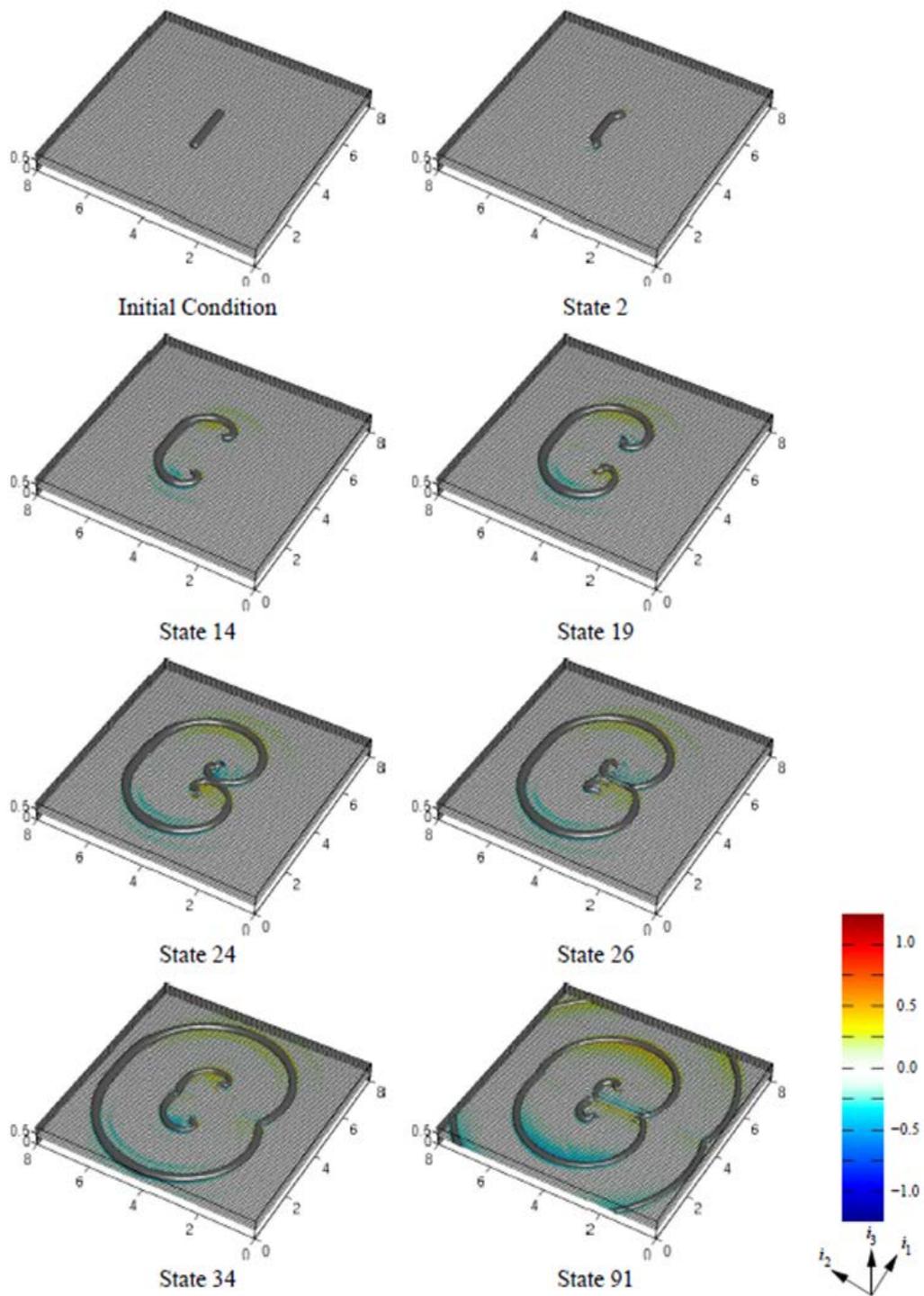


FIGURE 2.6 – Simulation d’une source de Frank-Read obtenue par la résolution de l’équation de transport (2.73) [223].

En tenant compte de la relation $\mathbf{div} \mathbf{rot} = 0$, $\dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel}$ vérifie l'équation :

$$\mathbf{div} \dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel} = \mathbf{div} \dot{\bar{\mathbf{U}}}^p. \quad (2.77)$$

De plus, il faut remarquer, compte tenu de $\mathbf{rot} \mathbf{grad} = 0$ que :

$$\mathbf{rot} \dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel} = 0, \quad (2.78)$$

et d'après l'équation (2.75) il s'ensuit que :

$$\dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\parallel} \cdot \mathbf{n} = (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})^\parallel \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } dV. \quad (2.79)$$

Les équations (2.77), (2.78) et (2.79) permettent de déterminer de manière unique la vitesse de distorsion plastique compatible des dislocations.

2.5.4 Dissipation et vitesse de dislocation en excès

La plasticité des matériaux cristallins est un phénomène irréversible, et les dislocations sont les objets physiques par lesquels l'irréversibilité se manifeste. Si l'on néglige les effets d'inertie, la puissance mécanique dissipée D lors du mouvement des dislocations est considérée comme étant la différence entre la puissance des efforts appliqués et la dérivée de l'énergie de déformation libre ψ :

$$D = \int_S (\mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} dS - \int_V \dot{\psi} dV. \quad (2.80)$$

En utilisant le théorème de la divergence, la dissipation peut encore se mettre sous la forme :

$$D = \int_V \mathbf{T} : \mathbf{grad} \mathbf{v} dV - \int_V \dot{\psi} dV. \quad (2.81)$$

En supposant que la contrainte est dérivée de la densité de l'énergie libre ψ :

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{U}_{sym}^e}, \quad \dot{\psi} = \mathbf{T} : \dot{\mathbf{U}}_{sym}^e, \quad (2.82)$$

on voit que la puissance dissipée dans le mouvement des dislocations doit vérifier l'inégalité de Clausius-Duhem, c'est-à-dire assurer que la dissipation reste constamment positive ou nulle :

$$D = \int_V \mathbf{T} : (\mathbf{grad} \mathbf{v} - \dot{\mathbf{U}}_e) dV = \int_V \mathbf{T} : \dot{\mathbf{U}}^p dV \geq 0. \quad (2.83)$$

En utilisant l'équation (2.75) pour définir $\dot{\mathbf{U}}_p$, il vient [2] :

$$D = \int_V \mathbf{T} : \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v} dV. \quad (2.84)$$

Après réécriture par l'utilisation du tenseur de permutation \mathbf{X} , on obtient :

$$D = \int_V \mathbf{X} (\mathbf{T} \cdot \boldsymbol{\alpha}) \cdot \mathbf{v} dV \geq 0. \quad (2.85)$$

Cette relation permet de formuler la force motrice \mathbf{F}^α associée à la vitesse \mathbf{v} des dislocations en ces termes :

$$\mathbf{F}^\alpha = \mathbf{X} (\mathbf{T} \cdot \boldsymbol{\alpha}). \quad (2.86)$$

Cette force motrice peut également se mettre sous la forme suivante, d'après l'équation (2.13) :

$$\mathbf{F}^\alpha = (\mathbf{T} \cdot \mathbf{B}) \times \mathbf{t}. \quad (2.87)$$

Cette dernière expression de la force motrice est analogue à la force de Peach-Koehler appliquée à une dislocation de vecteur de Burgers $n\mathbf{b}$ et de vecteur de ligne \mathbf{t} . La seule différence est que dans ce cas, elle s'applique à un ensemble de densités continues de dislocations. Pour que l'inégalité de Clausius-Duhem soit vérifiée, il faut que la dissipation intrinsèque soit positive ou nulle :

$$\mathbf{F}^\alpha \cdot \mathbf{v} \geq 0, \quad \forall \text{ point } P \in V \text{ avec } D = \int_V \mathbf{F}^\alpha \cdot \mathbf{v} dV \geq 0. \quad (2.88)$$

Pour vérifier cette condition, la vitesse \mathbf{v} des dislocations peut être définie simplement sous la forme suivante :

$$\mathbf{v} = v \frac{\mathbf{F}^\alpha}{|\mathbf{F}^\alpha|}, \quad v \geq 0. \quad (2.89)$$

Si v ($v \geq 0$) est une constante, alors c'est une loi de vitesse de type visqueuse. Il est néanmoins possible de se donner des lois de vitesses plus compliquées, qui prennent par exemple en compte l'aspect thermiquement activé du glissement des dislocations (voir chapitre 5).

2.5.5 Résolution de l'équation de transport des densités de dislocations par la méthode des éléments finis

L'une des caractéristiques importantes de l'équation de transport des densités de dislocations est sa capacité à modéliser les phénomènes physiques comme l'annihilation de deux dislocations de signes opposés, sans avoir à prescrire des hypothèses supplémentaires. En effet dans le processus d'annihilation, les deux dislocations de signes opposés se rencontrent (choc) et s'annihilent par la suite. L'équation de transport est une équation de nature hyperbolique, sujette à une croissance rapide des instabilités numériques liées aux hautes fréquences qui se développent, en particulier lors de la modélisation des fronts de choc qui surviennent au cours des mécanismes d'annihilation.

La plupart des techniques de résolution des équations de type hyperbolique basées sur les éléments finis sont des schémas implicites conduisant aux systèmes d'équations à coefficients variables. Le plus connu de ces schémas est celui des moindres-carrés implicite [39]. Roy et Acharya [193] avaient introduit un schéma implicite basée sur la méthode de Galerkin/Moindres-carrés ("Galerkin/Least-Squares" en anglais ou GLS), développée par Hughes [109], pour résoudre l'équation de transport. Le coût de calcul associé à la résolution du système d'équation découlant de la méthode GLS implicite est très considérable. Plus tard, Varadhan et al. [224] propose une alternative au schéma implicite. Il s'agit d'un schéma explicite basé sur la méthode GLS, à faible pas de temps qui assure une stabilité conditionnelle et suffisante. Ce schéma aboutit à un système d'équations à coefficients constants, bien conditionné avec un coût de calcul moins considérable que l'on rappelle dans la suite de cette section.

2.5.5.1 Méthode explicite de Galerkin/Moindres-Carrés (GLS)

L'équation de transport des densités de dislocations s'écrit [224] :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot}(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}). \quad (2.90)$$

La dérivée temporelle dans cette équation peut être approximée en linéarisant la solution temporelle par le schéma implicite d'Euler ("backward Euler scheme" en anglais) :

$$\boldsymbol{\alpha}^{t+\Delta t} = \boldsymbol{\alpha}^t - \Delta t \mathbf{rot}(\boldsymbol{\alpha}^{t+\Delta t} \times \mathbf{v}), \quad (2.91)$$

avec $\mathbf{v} = f(\boldsymbol{\alpha}^t, \mathbf{T}^t)$ et Δt le pas de temps. En notation indicielle, l'équation (2.91) devient [224] :

$$\alpha_{ri}^{t+\Delta t} = \alpha_{ri}^t - \Delta t L_{ri}^{t+\Delta t}, \quad (2.92)$$

où

$$L_{ri}^{t+\Delta t} = \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} v_j \right)_{,j} - \left(\alpha_{rj}^{t+\Delta t} v_i \right)_{,i}. \quad (2.93)$$

Le résidu explicite R au sens des moindres carrés (par la suite on utilisera l'abréviation LS pour least squares) s'écrit à partir de l'équation (2.92) :

$$\begin{aligned} R = & \int_V \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} - \alpha_{ri}^t + \Delta t L_{ri}^{t+\Delta t} \right) \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} - \alpha_{ri}^t + \Delta t L_{ri}^{t+\Delta t} \right) dV \\ & + \Delta t \int_{S_i} |v_k n_k| \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} - \bar{\alpha}_{ri} \right) \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} - \bar{\alpha}_{ri} \right) dS. \end{aligned} \quad (2.94)$$

La formulation variationnelle de cette dernière équation est donnée par :

$$\begin{aligned} & \int_V \left(\delta \alpha_{ri} + \Delta t \delta L_{ri}^{t+\Delta t} \right) \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} - \alpha_{ri}^t + \Delta t L_{ri}^{t+\Delta t} \right) dV \\ & + \Delta t \int_{S_i} |v_k n_k| \delta \alpha_{ri} \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} - \bar{\alpha}_{ri} \right) dS = 0, \end{aligned} \quad (2.95)$$

où $\delta\alpha_{ri}$, $\alpha_{ri}^{t+\Delta t}$ et α_{ri}^t sont des éléments d'espaces de fonctions appropriées. En d'autres termes, l'équation (2.95) équivaut à :

$$\begin{aligned} \int_V \delta\alpha_{ri} \alpha_{ri}^{t+\Delta t} dV &= \int_V \delta\alpha_{ri} \alpha_{ri}^t dV - \Delta t \int_V \delta\alpha_{ri} L_{ri}^{t+\Delta t} dV - \Delta t \int_V \delta L_{ri}^{t+\Delta t} \alpha_{ri}^{t+\Delta t} dV \\ &+ \Delta t \int_V \delta L_{ri}^{t+\Delta t} \alpha_{ri}^t dV - \Delta t^2 \int_V \delta L_{ri}^{t+\Delta t} L_{ri}^{t+\Delta t} dV \\ &- \Delta t \int_{S_i} |v_k n_k| \delta\alpha_{ri} \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} - \bar{\alpha}_{ri} \right) dS. \end{aligned} \quad (2.96)$$

L'équation (2.96) est un schéma implicite. Le développement limité en série de Taylor de $\alpha^{t+\Delta t}$ dans les termes de droite donne $\alpha^{t+\Delta t} = \alpha^t + \Delta t \dot{\alpha}^t + 0(\Delta t^2)$. Ainsi, l'approximation au premier ordre de $\alpha^{t+\Delta t}$ donne α^t . La relation (2.96) se met sous la forme explicite suivante :

$$\begin{aligned} \int_V \delta\alpha_{ri} \alpha_{ri}^{t+\Delta t} dV &= \int_V \delta\alpha_{ri} \alpha_{ri}^t dV - \Delta t \int_V \delta\alpha_{ri} L_{ri}^t dV - \Delta t^2 \int_V \delta L_{ri}^t L_{ri}^t dV \\ &- \Delta t \int_{S_i} |v_k n_k| \delta\alpha_{ri} \left(\alpha_{ri}^t - \bar{\alpha}_{ri} \right) dS \end{aligned} \quad (2.97)$$

En remplaçant $\delta\alpha_{ri}$ par la fonction test $N^A \delta\alpha_{ri}^A$ et α_{ri} par la fonction de forme $N^B \alpha_{ri}^B$, où A et B sont les variables nodales, et N^A et N^B sont les fonctions d'interpolation, le schéma explicite LS donne :

$$\begin{aligned} \delta\alpha_{ri}^A \left(\int_V N^A N^B \alpha_{ri}^{Bt+\Delta t} dV - \int_V N^A \alpha_{ri}^t dV + \Delta t \int_V N^A L_{ri}^t dV \right. \\ \left. + \Delta t^2 \int_V (N^A v_j)_{,j} L_{ri}^t - (N^A v_q)_{,i} L_{rq}^t dV + \Delta t \int_{S_i} |v_k n_k| N^A (\alpha_{ri}^t - \bar{\alpha}_{ri}) dS \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.98)$$

D'autre part, le schéma explicite de Galerkin (par la suite on utilisera l'abréviation G pour Galerkin) appliqué à l'équation (2.92) donne la forme variationnelle suivante :

$$\int_V \delta\alpha_{ri} \left(\alpha_{ri}^{t+\Delta t} - \alpha_{ri}^t + \Delta t L_{ri}^t \right) dV = 0. \quad (2.99)$$

En intégrant par parties et en adoptant les fonctions tests et de forme utilisées plus haut, la forme variationnelle (équation (2.99)) peut se mettre sous la forme [224] :

$$\begin{aligned} \delta\alpha_{ri}^A \left(\int_V N^A N^B \alpha_{ri}^{Bt+\Delta t} dV - \int_V N^A \alpha_{ri}^t dV + \Delta t \int_V N_{,j}^A \left(-\alpha_{ri}^t v_j + \alpha_{rj}^t v_i \right) dV \right. \\ \left. + \Delta t \int_S N^A \alpha_{rj}^t v_i n_j dS - \Delta t \int_{S_i} N^A \bar{\alpha}_{ri} v_j n_j dS - \Delta t \int_{S_o} N^A \bar{\alpha}_{ri} v_j n_j dS \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.100)$$

L'équation régissant le schéma explicite GLS est une combinaison linéaire des schémas G et LS, comme la somme : équation (2.98) + κ équation (2.100), où le facteur

κ est le poids des termes Galerkin par rapport aux termes LS. Ainsi, on a un schéma GLS lorsque $\kappa = 1$, et un schéma purement LS lorsque $\kappa = 0$. La stabilité physique de ces schémas explicites GLS (Galerkin/Least Squares) et LS (Least Squares) est maintenue lorsque la condition de Courant est respectée : $c = (\Delta t \times v_{max})/h < 1$, où c est le nombre de Courant, v_{max} est la valeur maximale de la vitesse et h est la taille d'un élément.

Les schémas GLS et LS peuvent être appliqués aux problèmes non-linéaires sans être modifiés. Cependant, les études numériques ont montré le développement de fortes oscillations près des forts gradients spatiaux dans la vitesse, lorsque de faibles nombres de Courant sont utilisés ($c < 0.1$). Dans ces cas, on ajoute au terme de droite des schémas explicites LS et GLS, un terme de diffusion isotropique pour amortir les oscillations [224] :

$$\delta\alpha_{ri}^A \gamma h^2 (1 + \kappa) \int_V N_{,k}^A \alpha_{ri,k}^t dV, \quad (2.101)$$

où γ est un facteur de diffusion (à préciser). Afin d'éviter un amortissement excessif, la valeur de γ est choisie égale à zéro lorsqu'il n'y a pas de discontinuité de la vitesse au travers de l'élément et non nulle dans le cas contraire. Les valeurs de γ allant de 0.01 à 0.02 sont recommandées par Varadhan et al. [224].

2.6 La Mécanique des Champs de Dislocations mésoscopique et phénoménologique (PMFDM)

Le classement des dislocations en dislocations géométriquement nécessaires ("Geometrically Necessary Dislocations" en anglais ou GNDs) et en dislocations statistiquement stockées ("Statistically Stored Dislocations" en anglais ou SSDs) dépend fortement de l'échelle de résolution adoptée. Ainsi, pour une échelle de résolution suffisamment fine, toutes les dislocations sont des GNDs. Cependant à une échelle de résolution assez grande (mésoscopique), la présence des SSDs devient importante. Les SSDs contribuent seulement au flux plastique global et non aux contraintes internes à longue portée, contrairement aux GNDs qui prennent les deux aspects en compte. Ce concept peut être expliqué par la figure 2.7 qui montre la dépendance à l'échelle des densités de dislocations polarisées et de la vitesse de distorsion plastique [211]. En effet, elle montre l'exemple d'un dipôle de dislocations coins considéré à deux échelles de longueurs différentes. A une échelle microscopique représentée par le circuit de Burgers en couleur rouge, chaque dislocation constituant le dipôle peut être considérée comme étant une dislocation polarisée. Dans ce cas, la vitesse de distorsion plastique produite par l'extension du dipôle avec une vitesse \mathbf{v} est obtenue par l'équation (2.70). A une échelle mésoscopique, représentée par le circuit de Burgers en couleur bleue, la valeur moyenne $\bar{\alpha}$ de α est nulle car les deux densités de dislocations de signes opposés et de même nature s'annulent, et il en est de même

pour leur vitesse moyenne $\bar{\mathbf{v}}$. Par contre, la vitesse de distorsion plastique moyenne $\overline{\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}}$ est non nulle et n'est pas égale à $\bar{\boldsymbol{\alpha}} \times \bar{\mathbf{v}}$. Cette vitesse de distorsion plastique non nulle est due à la mobilité des densités de dislocations statistiques, représentée par le terme \mathbf{L}^P qui est alors défini dans la théorie mésoscopique par la différence [7] :

$$\mathbf{L}^P = \overline{(\boldsymbol{\alpha} - \bar{\boldsymbol{\alpha}}) \times \mathbf{v}} = \overline{\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}} - \bar{\boldsymbol{\alpha}} \times \bar{\mathbf{v}}. \quad (2.102)$$

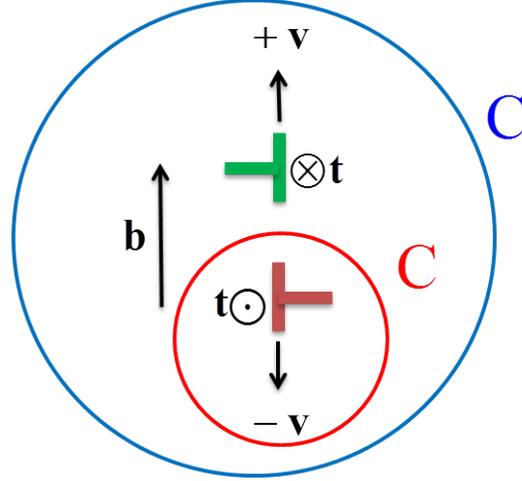


FIGURE 2.7 – Figure montrant la dépendance à l'échelle de longueur des densités de dislocations polarisées et de la vitesse de distorsion plastique [211].

Au regard de toutes ces observations, les variables de champs de la plasticité mésoscopique et phénoménologique ("Phenomenological Mesoscopic Field Dislocations Mechanics" en anglais et notée "PMFDM") introduite par Acharya et Roy [7] doivent alors être interprétées comme des quantités moyennes. Les équations de la PMFDM sont alors obtenues en faisant la moyenne spatiale et temporelle des équations de la FDM. La vitesse de distorsion plastique est à présent exprimée avec les valeurs moyennes de la densité de dislocations et de la vitesse comme suit [7] :

$$\dot{\bar{\mathbf{U}}}^P = \bar{\boldsymbol{\alpha}} \times \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{L}^P. \quad (2.103)$$

\mathbf{L}^P constitue un terme source/puit de GNDs. L'évolution des GNDs à partir de ce terme traduit l'accommodation des incompatibilités de déformation plastique dans les matériaux cristallins [14]. Par ailleurs, \mathbf{L}^P est déterminé de manière phénoménologique et $\bar{\mathbf{v}}$ est définie en se basant sur les considérations thermodynamiques pour que l'équation (2.80) soit vérifiée à l'échelle mésoscopique.

2.7 Version réduite de la mécanique des champs de dislocations

La version réduite de la mécanique des champs de dislocations [195] repose sur l'idée selon laquelle, l'on peut s'affranchir de l'utilisation des équations (2.21) et (2.77) dans la théorie de la FDM, lorsque les variables de champs de la FDM sont considérées comme étant aussi régulières que possible. En effet, en considérant l'équation (2.73) et la dérivée temporelle de l'équation (2.21), on peut établir l'égalité suivante :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{rot} \dot{\mathbf{U}}^{e,\perp} = -\mathbf{rot} \dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\perp}. \quad (2.104)$$

Partant de cette égalité, on déduit les relations suivantes :

$$\dot{\mathbf{U}}^{e,\perp} = -\dot{\bar{\mathbf{U}}}^{p,\perp} \implies \mathbf{U}^{e,\perp} = -\bar{\mathbf{U}}^{p,\perp}. \quad (2.105)$$

La distorsion élastique se détermine alors par :

$$\mathbf{U}^e = \mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}^{p,\perp} - \bar{\mathbf{U}}^{p,\parallel} = \mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}^p. \quad (2.106)$$

Une fois que la valeur initiale de $\bar{\mathbf{U}}^p$ est obtenue à partir de la densité de dislocations initiale, les équations (2.21) et (2.77) ne sont plus utilisées. Finalement, la version réduite de la FDM se résume aux équations d'équilibre (équations (2.18) et (2.19)), d'évolution des densités de dislocations (équation (2.73)), de détermination de la vitesse de distorsion plastique (équation (2.70)) et de la distorsion élastique (équation (2.106)). Cette réduction est aussi applicable à la PMFDM, où l'on doit tenir compte du terme \mathbf{L}^p dans l'écriture des équations (2.73) et (2.70). Les équations de la PMFDM réduite notée RPMFDM seront présentées et résolues par une méthode spectrale de type Transformées de Fourier Rapides (ou FFT : "Fast Fourier Transforms" en anglais) dans le chapitre 5 de ce manuscrit.

2.8 Conditions de continuité aux interfaces de discontinuité supposées fixes

2.8.1 Condition de compatibilité cinématique de Hadamard

Nous considérons une interface plane et fixe I , délimitant deux sous-domaines (H^- , H^+) dans la configuration d'un milieu continu. Le milieu peut être assimilé à un matériau composite biphasé ou à deux grains dans un cristal. L'interface peut être aussi un joint de grain. L'interface I a un vecteur normal \mathbf{n} orienté de H^- vers H^+ (figure 2.8). La discontinuité d'un champ \mathbf{x} à l'interface I est dénotée par

$[\mathbf{x}] = \mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-$, où $[\mathbf{x}]$ dénote le saut de \mathbf{x} à l'interface. Dans la théorie de la mécanique des milieux continus conventionnelle, on exige la continuité du vecteur traction $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n}$ et du vecteur déplacement \mathbf{u} à travers l'interface :

$$[\mathbf{T}] \cdot \mathbf{n} = 0; \quad [\mathbf{u}] = 0. \quad (2.107)$$

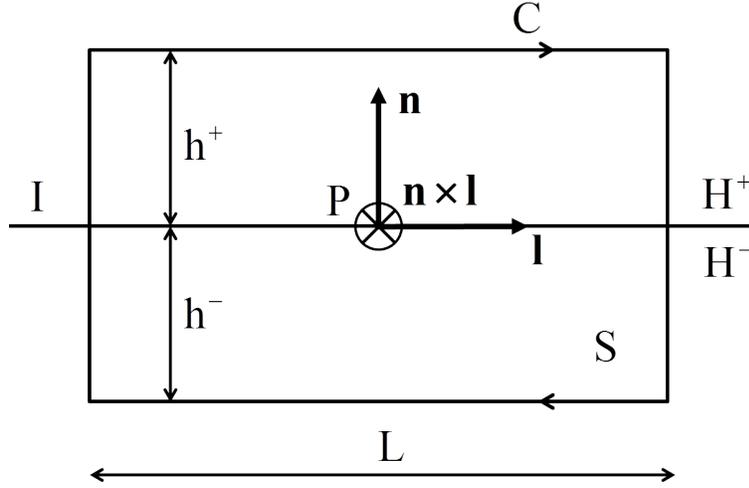


FIGURE 2.8 – Figure montrant l'interface I entre deux sous-domaines H^- vers H^+ , avec un vecteur normal \mathbf{n} . Le vecteur \mathbf{l} est un vecteur appartenant à l'interface. Le circuit de Burgers C délimite la surface S de vecteur normal $\mathbf{n} \times \mathbf{l}$ [189].

La conséquence de la continuité du vecteur déplacement à l'interface de discontinuité est la condition de compatibilité de Hadamard [96], qui stipule que, lorsque l'interface est fixe, le saut d'un gradient de transformation \mathbf{F} satisfait les conditions suivantes [189] :

$$[\mathbf{F}] \times \mathbf{n}_0 = 0 \quad \text{ou} \quad [\mathbf{F}^{-1}] \times \mathbf{n} = 0. \quad (2.108)$$

Ici, \mathbf{n}_0 est le vecteur normal à l'interface I_0 dans la configuration initiale ($\mathbf{n}_0 = \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{n}$). Ainsi, pour tout vecteur \mathbf{l} appartenant à l'interface, la relation (2.108) peut encore s'écrire sous la forme suivante :

$$\forall \mathbf{l} \in I, [\mathbf{F}^{-1}] \cdot \mathbf{l} = 0 \quad \text{ou} \quad \forall \mathbf{l}_0 \in I_0, [\mathbf{F}] \cdot \mathbf{l}_0 = 0. \quad (2.109)$$

Cette relation reflète la continuité tangentielle de \mathbf{F}^{-1} au passage de l'interface. Cependant, la discontinuité normale reste compatible avec la continuité du déplacement au passage de l'interface [189] :

$$[\mathbf{F}^{-1}] \times \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \neq 0 \quad (2.110)$$

La condition de continuité tangentielle de Hadamard (équation (2.108)) contraint alors la partie tangentielle du gradient de transformation au long de l'interface, contrairement à sa partie normale. Ceci a une conséquence directe sur les propriétés mécaniques du matériau. Cet effet dépend de la surface de l'interface sur laquelle la déformation est soumise à cette continuité.

2.8.2 Continuité tangentielle de la distorsion plastique et élastique

Les équations (2.108) et (2.109) garantissent la continuité du déplacement total au passage de l'interface, mais n'imposent aucune condition sur sa composante plastique et élastique, plus particulièrement sur les parties incompatibles élastique et plastique induites par la présence des densités de dislocations polarisées. Dans cette section, nous allons utiliser les approches initiées par Frank [77] et Bilby [30], et revisitées par Acharya [3]. Nous considérons le circuit de Burgers de la figure 2.8, délimitant la surface rectangulaire S de longueur L et contenant l'interface de discontinuité I . Ce circuit est orienté par la normale $\mathbf{n} \times \mathbf{l}$ à S et possède une épaisseur $h = h^- + h^+$ dans la direction transverse (H^- et H^+ ont des épaisseurs respectives h^- et h^+). D'après les équations (2.9) et (2.10), et en utilisant $\mathbf{n} \times \mathbf{l}$ à la place de \mathbf{n} dans l'équation (2.9), on peut écrire :

$$\forall \mathbf{l} \in I, \int_S \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{l}) dS = - \oint_C \mathbf{F}^{e-1} \cdot d\mathbf{x}. \quad (2.111)$$

Nous supposons qu'une distribution continue des GNDs existe dans la majeure partie des deux côtés de l'interface, ainsi que des distributions de densités de dislocations surfaciques $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{l})$ le long de l'interface. Il faut noter que les dislocations surfaciques sont sans dimensions parce qu'elles sont exprimées en longueur de vecteur de Burgers par unité de longueur dans la direction du vecteur unitaire \mathbf{l} , contrairement aux composantes α_{ij} du tenseur $\boldsymbol{\alpha}$ exprimées en longueur de vecteur de Burgers par unité de surface (m^{-1}). Si l'on réduit le circuit de Burgers au point P , en faisant d'abord tendre h^- et h^+ vers zéro, puis en le réduisant suivant la direction de \mathbf{l} , l'équation (2.111) devient :

$$\forall \mathbf{l} \in I, \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{l}) \cdot \mathbf{n} \times \mathbf{l} = -[\mathbf{F}^{e-1}] \cdot \mathbf{l}. \quad (2.112)$$

Cette relation entre la densité surfacique de dislocations à l'interface et le saut de l'inverse du gradient de transformation représente la relation généralisée de Frank-Bilby [77, 30]. Elle indique que le saut de la distorsion élastique entre les deux matériaux peut être accommodé par une distribution de dislocations à la surface. De ce point de vue, l'interface est considérée comme étant sans épaisseur. Cependant, dans une description plus raffinée et non singulière, on propose de supprimer cette densité de dislocations interfaciales. Dans ce cas, la notion de dislocation singulière n'est plus valable, et la relation généralisée de Frank-Bilby (équation (2.112)) devient :

$$\forall \mathbf{l} \in I, -[\mathbf{F}^{e-1}] \cdot \mathbf{l} = 0 \quad \text{ou} \quad [\mathbf{F}^{e-1}] \times \mathbf{n} = 0. \quad (2.113)$$

De la même façon que dans les équations (2.108) et (2.109), l'équation (2.113) reflète la continuité tangentielle de l'inverse du tenseur gradient de transformation élastique. En utilisant la décomposition du gradient de transformation (équation (2.2)),

la condition de Hadamard (équations (2.108) et (2.109)) combinée avec l'équation (2.113) conduit à une condition sur \mathbf{F}^p :

$$\forall \mathbf{l}_0 \in I_0, [\mathbf{F}^p] \cdot \mathbf{l}_0 = 0 \quad \text{ou} \quad [\mathbf{F}^p] \times \mathbf{n}_0 = 0. \quad (2.114)$$

Dans l'hypothèse de petites déformations, les équations (2.113) et (2.114) s'écrivent, respectivement, sous les formes suivantes :

$$[\mathbf{U}^e] \times \mathbf{n} = 0, \quad (2.115)$$

et

$$[\mathbf{U}^p] \times \mathbf{n} = 0 \quad (2.116)$$

Les équations (2.113), (2.114), (2.115) et (2.116) ont été également rapportées par Acharya dans [3] sur $\dot{\mathbf{U}}^p$ (taux de distorsion plastique) en imposant la conservation du vecteur de Burgers au passage d'une interface fixe ou mobile.

2.9 Conclusions

Ce chapitre a permis de passer en revue les principales équations de la théorie de la mécanique des champs de dislocations ("Field Dislocation Mechanics" en anglais) et de son extension phénoménologique mésoscopique (PMFDM : Phenomenological Mesoscopic Field Dislocation Mechanics en anglais) [7, 194], notamment les équations élasto-statiques et d'évolution des densités de dislocations.

En effet, il a été montré que les distorsions élastiques incompatibles sont déterminées par la résolution des équations de type Poisson, alors que la détermination des distorsions élastiques compatibles repose sur la résolution des équations de type Navier. La distorsion plastique incompatible est montrée comme étant l'opposé de la distorsion élastique incompatible, alors que sa partie compatible provient de la mobilité des dislocations au travers du tenseur des vitesses de distorsion plastique.

L'évolution des densités de dislocations est prise en compte au travers d'une équation de transport des densités de dislocations exprimant la conservation du vecteur de Burgers. Cette équation de type hyperbolique permet de simuler les phénomènes physiques comme les sources de Frank-Read, l'annihilation des dislocations et l'extension d'une boucle polygonale de dislocations, d'où la complexité de sa résolution numérique par EF et par FFT.

L'extension phénoménologique mésoscopique de la FDM (PMFDM) est définie par une opération de moyenne spatiale et temporelle des variables de champs de la FDM. Les équations de la PMFDM sont identiques à celles de la FDM à la seule

différence que la vitesse de distorsion plastique ainsi que l'équation de transport doivent inclure une contribution supplémentaire de la distorsion plastique provenant des SSDs (notée \mathbf{L}^p dans ce manuscrit).

Ce chapitre a également permis d'étudier la résolution numérique des équations de champs élasto-statiques par la méthode EF classique et les équations d'évolution des densités de dislocations par le schéma EF explicite Galerkin/Moindres-Carrés (GLS) [224, 223]. Cependant, l'étude des agrégats polycristallins demeure très limitée de nos jours, parce qu'elle exige de très grandes ressources numériques en terme de mémoires et de processeurs pour ce type de simulation.

Les prochains chapitres de ce manuscrit seront consacrés respectivement et exclusivement au développement d'approches spectrales qui utilisent la Transformée de Fourier Rapide ("Fast Fourier Transform" en anglais ou FFT) pour résoudre de façon plus rapide les équations élasto-statiques et les équations d'évolution spatio-temporelle des densités de dislocations. Ces approches seront validées par des comparaisons avec les solutions analytiques existantes et les simulations éléments finis, du point de vue précision et temps de calcul.

Chapitre 3

Méthode spectrale de résolution numérique des équations élasto-statiques de la Mécanique des Champs de Dislocations

3.1 Objectifs

Dans le chapitre précédent, nous avons vu que la mécanique des champs de dislocations (théorie FDM) permet de calculer de façon continue les champs élastiques associés à une distribution de densités de dislocations au sein d'un matériau. Ce calcul passe par la résolution des équations de type Poisson (équation (2.25)) pour la détermination des distorsions élastiques incompatibles, et les équations de type Navier (équation (2.32)) pour la détermination des déformations élastiques compatibles et les contraintes internes dans le cas de l'élasticité linéaire homogène ou hétérogène. Les cas particuliers des dislocations individuelles de type vis et coin, ainsi que les conditions aux limites ont été également rapportés dans le cas de l'élasticité linéaire homogène. Par la suite, la résolution numérique de ces équations par la méthode EF a été également étudiée par l'écriture de leurs formes faibles respectives.

Dans le cas d'un comportement élastique linéaire et hétérogène, l'équation d'équilibre des contraintes (équation (2.32)) se résout au travers d'une équation intégrale (de type Lippmann-Schwinger) avec un terme supplémentaire dû à la présence des densités de dislocations polarisées issue de la théorie FDM. A notre connaissance, la résolution numérique d'une telle équation dans la théorie FDM par un algorithme de type FFT n'a pas encore été reportée jusqu'à présent en élasticité hétérogène, sauf pour des microstructures particulières comme les bicristaux infinis [33] pour lesquels les solutions analytiques uniformes dans chaque cristal peuvent être facilement

obtenues par les équations sur les champs compatibles et incompatibles [87, 188]. En revanche, pour les microstructures plus complexes où les interactions entre dislocations et inhomogénéités élastiques spatiales sont considérées, la difficulté réside dans la résolution numérique de l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger avec des champs élastiques incompatibles (en l'absence d'effets d'inertie et de forces de volume dans l'équation d'équilibre des contraintes). D'autres méthodes alternatives basées sur l'utilisation de la méthode FFT ont été proposées pour quantifier les champs de contraintes résultants de la présence de dislocations. Par exemple, les méthodes de champs de phases [234, 106, 192, 241] ou de dynamique des dislocations discrètes [26, 85], où les champs incompatibles de dislocations sont décrits comme des champs de déformation libres de contraintes ("eigenstrain" ou "stress-free strain" en anglais) [62, 172]. Ces dernières méthodes ont été rappelées dans le chapitre 1. Dans la littérature, l'équation intégrale de Lippmann-Schwinger pour les milieux périodiques élastiques ou élasto-plastiques a été résolue par une approche spectrale de type FFT pour déterminer les propriétés effectives et les champs locaux dans les polycristaux et les matériaux composites, mais en l'absence de défauts cristallins et de dislocations polarisées [166, 169, 167, 65, 54, 137, 161, 228, 141, 206, 58, 11].

Motivé par les capacités prédictives et la précision des schémas itératifs existants pour les matériaux élastiques hétérogènes, nous nous proposons de développer une approche spectrale de type FFT pour la détermination des champs mécaniques locaux découlant de la présence des dislocations et des hétérogénéités élastiques où une attention particulière sera accordée au traitement numérique pour éliminer les oscillations sur les solutions des champs locaux près des discontinuités induites par les hétérogénéités élastiques et les défauts de type dislocations. Cette approche sera donc basée sur l'utilisation de la transformée de Fourier discrète ("Discrete Fourier Transform" ou DFT en anglais) basée sur des formules de différences finies récemment développées pour résoudre à la fois l'équation de type Poisson et l'équation intégrale de Lippmann-Schwinger avec des champs incompatibles. Plutôt que de considérer des composites et des agrégats polycristallins à des échelles de résolutions plus larges (échelle mésoscopique, cf. chapitre 5), ce chapitre est consacré aux densités de dislocations individuelles et considérera des boucles de dislocations dans les matériaux composites (de types matrice/inclusion) avec différentes descriptions des dislocations et différents contrastes mécaniques entre inclusion et matrice. En particulier, nous testerons des cas numériquement difficiles comme des lignes de dislocations concentrées sur des lignes de pixels près d'inclusions de forme cubique.

Le chapitre est organisé comme suit. La section 3.2 est consacrée à une revue bibliographique sur les méthodes spectrales de type FFT appliquées à la mécanique des matériaux et à la détermination des champs mécaniques dans les matériaux hétérogènes. La section 3.3 présente la formulation des champs élasto-statiques en élasticité homogène avec l'écriture des équations de type Poisson et de type Navier dans l'espace de Fourier. Cette partie a été publiée récemment en 2014 pendant ma thèse dans la revue "International Journal of Solids and Structures" [24]. La section 3.4 est consacrée à la formulation des champs élasto-statiques en élasticité hétéro-

gène dans l'espace de Fourier. Nous présenterons l'écriture de l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger dans l'espace de Fourier et le choix de l'algorithme FFT pour sa résolution. Dans la section 3.5, nous présenterons l'algorithme de résolution par FFT, ainsi que les différentes approximations des formules de différenciations dans l'espace de Fourier. Dans la section 3.6, les différents résultats obtenus seront présentés, dans un premier temps en élasticité homogène, puis en élasticité hétérogène. Dans le cas de l'élasticité homogène, l'approche spectrale sera utilisée pour le calcul des champs élastiques compatibles et incompatibles, ainsi que les champs de contraintes, de rotations élastiques associés dans l'espace de Fourier pour les densités de dislocations individuelles vis et coin, avec différentes descriptions des densités de dislocations. La validation de l'approche sera réalisée par des comparaisons avec les solutions analytiques et les simulations éléments finis (EF) pour la même cellule unitaire périodique. Dans le cas de l'élasticité hétérogène, des comparaisons entre les différents schémas de différenciation à base de différences finies combinées à la DFT seront effectuées pour déterminer laquelle conduit à la meilleure précision des champs élastiques près des discontinuités. D'autres comparaisons seront reportées avec les solutions analytiques pour simuler l'interaction entre une dislocation coin et une inhomogénéité circulaire [55, 56]. L'approche numérique choisie sera utilisée pour simuler différents cas physiques tels que des dipôles de dislocations coins contraints à l'interface matrice/inclusion d'un matériau composite ou encore des inclusions cubiques entourées par des boucles de dislocations. Il faut noter que la deuxième partie du chapitre traitant numériquement le cas de l'élasticité hétérogène avec champs de dislocations sans oscillation a été soumis à "Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering" [53] et est en cours de révision lors de la rédaction de ce manuscrit.

3.2 Revue bibliographique sur les méthodes micromécaniques à base de FFT et problématiques actuelles

La méthode spectrale de type FFT a été initialement introduite par Moulinec et Suquet [166, 167] pour résoudre numériquement l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger et pour calculer la réponse micromécanique des matériaux composites élastiques, directement à partir d'une image digitalisée de leur microstructure. La méthode itérative pour résoudre cette équation se base sur un algorithme à point fixe (couramment appelé "schéma basique") et qui est rappelée en Annexe A. La convergence du schéma basique dépend fortement du contraste mécanique entre les phases et également du choix du milieu de référence. Les propriétés de ce milieu de référence sont rappelées en Annexe A. Dans la même période, Müller [169] a aussi utilisé les transformées de Fourier discrètes (DFT) pour résoudre les problèmes d'élasticité linéaire hétérogène, avec des applications aux matériaux

composites à fibres. Afin de réduire la sensibilité au contraste mécanique, Eyre et Milton [65] proposaient le schéma "accélééré" (un algorithme à point fixe basé sur la réécriture de l'équation de Lyppmann-Schwinger) qui converge plus vite que le schéma basique. Le schéma accéléré a été par la suite étendu à l'étude des composites thermoélastiques non-linéaires [228]. Le schéma basique et le schéma accéléré divergent généralement lorsque les matériaux contiennent des vides ou des inclusions très rigides. Pour résoudre ce problème lié aux contrastes infinis, Michel, Moulinec et Suquet [161] ont introduit un schéma itératif de type "Lagrangien augmenté". Ce nouveau schéma est basé sur une nouvelle formulation du problème hétérogène et utilise l'algorithme itératif d'Uzawa. Depuis, l'utilisation de la FFT a été généralisée aux matériaux rigides viscoplastiques [137] et élasto-viscoplastiques [141] et appliquée à l'étude des polycristaux [91, 138, 140, 139, 145, 141]. L'efficacité de la FFT par rapport à la méthode EF a été démontrée dans [183, 149].

Au cours de ces dernières années, des progrès ont été réalisés dans la compréhension des algorithmes FFT, surtout sur la convergence et le choix du milieu de référence. Si toute fois la convergence pour les contrastes mécaniques infinis a été améliorée, la sensibilité de la convergence des algorithmes existants au choix du milieu de référence demeure une contrainte non négligeable. Par ailleurs, ce choix peut dépendre à la fois du comportement mécanique des phases et de leur répartition spatiale. En 2010, Brisard [34] et Zeman [247] proposent simultanément un schéma itératif basé sur le gradient conjugué pour résoudre le problème élastique, linéaire et hétérogène. Cette solution semble améliorer à la fois la sensibilité au contraste mécanique entre phases et la contrainte du choix du milieu de référence. La méthode du gradient conjugué a été, par la suite, étendue aux comportements élastiques non-linéaires avec l'utilisation de l'algorithme de Newton-Raphson par Gélébart et al. [86]. Plus récemment, Monchiet et Bonnet [164] proposent un schéma itératif basé sur le tenseur de polarisation des contraintes. Ce schéma a l'avantage de converger rapidement pour les composites contenant des inclusions rigides ou des vides. Par la suite, des comparaisons ont été réalisées entre le schéma Lagrangien augmenté, le schéma accéléré de Eyre et Milton [65] et celui basé sur la polarisation des contraintes [164] par Moulinec et Silva [165], avec des discussions intéressantes sur les différents critères de convergence à utiliser pour chaque méthode. Dans leur travail, ils ont également montré que les algorithmes "accélééré" et du "Lagrangien augmenté" sont des cas particuliers de l'algorithme de Monchiet et Bonnet. L'application de la FFT à la FDM a été proposée pour la première fois par Brenner et al. [33] et par Berbenni et al. [24]. Les équations de champs mécaniques de la FDM pour les milieux périodiques seront exploitées dans ce chapitre et mis en oeuvre numériquement dans le cas de l'élasticité homogène ou hétérogène. Récemment, la FFT a été appliquée à la théorie DDD pour le calcul des champs de contraintes internes générés par les dislocations [26, 85]. De nos jours, la FFT a été également étendue aux grandes déformations [58, 117, 202, 116].

Une autre problématique importante dans les calculs de type FFT est la prédiction des champs locaux près des discontinuités, telles que les joints de phases

ou de grains, les coins des inclusions ou les défauts (dislocations, désinclinaisons) dans les matériaux, sans développement d'oscillations numériques. Pour contrôler et supprimer ces artefacts numériques inhérents aux méthodes spectrales, différentes méthodes non classiques pour le calcul des dérivées partielles spatiales de premier et second ordres ont été proposées. Par exemple, les approximations par transformées de Fourier discrètes (DFT), avec l'utilisation des formules différences finies centrées à 9 pixels (pour le cas 2D), ont été utilisées pour le calcul des dérivées partielles dans l'espace de Fourier pour la résolution des champs élastiques en élasticité homogène et hétérogène [169, 54] ou dans le cas de milieux généralisés avec élasticité ou plasticité non-locale [25, 142, 221]. En effet, il a été montré depuis 2008 par Willot et Pellegrini [240] que la DFT avec l'utilisation des formules différences finies permet d'éviter les fortes oscillations qui apparaissent avec l'utilisation de l'approximation classique de Moulinec-Suquet [166, 167]. Récemment, un nouveau schéma basé sur les différences finies sur une grille pivotée a été utilisé pour le calcul de l'opérateur de Green modifié dans l'espace de Fourier par Willot [239] pour résoudre l'équation de Lippmann-Schwinger en élasticité hétérogène. Cette méthode appelée "rotated scheme" en anglais s'est montrée très efficace dans la réduction des oscillations observées avec l'approche FFT classique de Moulinec-Suquet pour le calcul des champs locaux d'une inclusion ou d'un vide cubique noyé dans une matrice. D'autre part, l'utilisation des différences finies sur une grille décalée ("staggered grid" en anglais) s'est également montrée efficace dans la réduction des oscillations pour l'étude des propriétés mécaniques de matériaux poreux [200].

3.3 Méthode spectrale pour la résolution des champs élasto-statiques en élasticité linéaire et homogène

En l'absence de forces de volume et d'inertie, nous supposons une contrainte macroscopique appliquée $\bar{\mathbf{T}}$ (conditions limites en contraintes), qui est la contrainte moyenne $\langle \mathbf{T} \rangle$ sur la cellule unitaire périodique de volume V (en appliquant le théorème de la moyenne). En outre, nous considérons une densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ donnée périodique. L'objectif de cette section est de déterminer les champs élastiques générés par la densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ en utilisant les équations élasto-statiques de la FDM dans l'espace de Fourier [33, 24] en élasticité homogène. Les principales équations élasto-statiques de la FDM appliquées au volume V se résument aux équations de type Poisson (équation (2.23)) et de type Navier (équation (2.33)). Ces équations peuvent être résolues avec la méthode des transformées de Fourier. En effet, les champs inconnus et périodiques $\mathbf{w}(\mathbf{x})$, $\mathbf{U}^e(\mathbf{x})$ et $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ peuvent être déterminés dans l'espace de Fourier, puis dans l'espace réel en utilisant les transformées de Fourier inverse.

3.3.1 Solution des équations de type Poisson dans l'espace de Fourier

Dans l'espace de Fourier, notons par $\boldsymbol{\xi}$ le vecteur de Fourier d'amplitude $\xi = \sqrt{\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi}}$ et de composantes ξ_i dans le système de repère Cartésien tridimensionnel. Le nombre complexe imaginaire dénoté i est défini comme $i = \sqrt{-1}$. Soit $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})$ et $\tilde{\mathbf{U}}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})$ les transformées de Fourier respectives de $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{U}^{e,\perp}(\mathbf{x})$. L'équation de type Poisson (équation (2.25)) (en notation indicielle) avec la condition aux limites (équation (2.24)) est résolue grâce à la règle de différenciation dans l'espace de Fourier :

$$\begin{aligned}\tilde{U}_{ij}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{i}{\xi^2} \xi_k (e_{jkl} \tilde{\alpha}_{il}(\boldsymbol{\xi})) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \tilde{U}_{ij}^{e,\perp}(\mathbf{0}) &= \mathbf{0}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

3.3.2 Solution des équations de type Navier élastique homogène dans l'espace de Fourier

Soit $\tilde{\mathbf{w}}(\boldsymbol{\xi})$ et $\tilde{\mathbf{U}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi})$ les transformées de Fourier respectives de $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{U}^{e,\parallel}(\mathbf{x})$. L'équation de type Navier en élasticité homogène (équation (2.33)) s'écrit dans l'espace de Fourier sous la forme :

$$C_{ijkl}^0 \xi_l \xi_j \tilde{w}_k(\boldsymbol{\xi}) = \xi_j \tilde{U}_{kl}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})\tag{3.2}$$

La partie compatible de la distorsion élastique $\tilde{\mathbf{U}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi})$ est obtenue dans l'espace de Fourier par la règle de différenciation suivante :

$$\tilde{U}_{ij}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) = i \xi_j \tilde{w}_i(\boldsymbol{\xi})\tag{3.3}$$

Ainsi, en combinant les équations (3.2) et (3.3), $\tilde{\mathbf{w}}(\boldsymbol{\xi})$ et $\tilde{\mathbf{U}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi})$ sont les solutions respectives des équations algébriques suivantes dans l'espace de Fourier :

$$\tilde{w}_i(\boldsymbol{\xi}) = i C_{klmn}^0 \xi_l \tilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi}) \tilde{U}_{mn}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}).\tag{3.4}$$

$$\tilde{U}_{ij}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) = -C_{klmn}^0 \xi_l \xi_j \tilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi}) \tilde{U}_{mn}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}).\tag{3.5}$$

où $\tilde{\mathbf{G}}(\boldsymbol{\xi})$ est la transformée de Fourier du tenseur de Green \mathbf{G} associé au milieu de référence de module d'élasticité homogène \mathbf{C}^0 . $\tilde{\mathbf{G}}(\boldsymbol{\xi})$ est défini par la relation :

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{N_{ik}(\boldsymbol{\xi})}{D(\boldsymbol{\xi})} \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \tilde{G}_{ik}(\mathbf{0}) &= \mathbf{0},\end{aligned}\tag{3.6}$$

où $N_{ik}(\boldsymbol{\xi})$ et $D(\boldsymbol{\xi})$ représentent respectivement la matrice co-facteur (ou sa transposée car N_{ik} est symétrique) et le déterminant du tenseur acoustique $K_{ik}(\boldsymbol{\xi}) =$

$C_{ijkl}^0 \xi_i \xi_j$ [172]. Dans le cas où le comportement est isotrope ($C_{ijkl}^0 = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$), l'expression de $\tilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi})$ est donnée dans [172] comme suit :

$$\tilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(\lambda + 2\mu) \delta_{ik} \xi^2 - (\lambda + \mu) \xi_i \xi_k}{\mu (\lambda + 2\mu) \xi^4} \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}. \quad (3.7)$$

En remplaçant les expressions de \mathbf{C}^0 et de $\tilde{\mathbf{G}}$ dans les équations (3.4) et (3.5), on obtient [24] :

$$\begin{aligned} \tilde{w}_i(\boldsymbol{\xi}) = i (\lambda + 2\mu)^{-1} \xi^{-4} \times & \left[\lambda \xi_i \xi^2 \tilde{U}_{pp}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) + (\lambda + 2\mu) \xi_l \xi^2 \left(\tilde{U}_{il}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) + \tilde{U}_{li}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) \right) \right. \\ & \left. - (\lambda + \mu) \xi_i \xi_k \xi_l \left(\tilde{U}_{kl}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) + \tilde{U}_{lk}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) \right) \right], \end{aligned} \quad (3.8)$$

pour $\tilde{\mathbf{w}}$ et :

$$\begin{aligned} \tilde{U}_{ij}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) = - (\lambda + 2\mu)^{-1} \xi^{-4} \times & \left[\lambda \xi_i \xi_j \xi^2 \tilde{U}_{pp}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) + (\lambda + 2\mu) \xi_l \xi_j \xi^2 \left(\tilde{U}_{il}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) + \tilde{U}_{li}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) \right) \right. \\ & \left. - (\lambda + \mu) \xi_i \xi_j \xi_k \xi_l \left(\tilde{U}_{kl}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) + \tilde{U}_{lk}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) \right) \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

pour $\tilde{\mathbf{U}}^{e,\parallel}$.

3.3.3 Détermination des contraintes

A partir de la loi de Hooke, nous pouvons calculer le tenseur des contraintes de Cauchy dans l'espace de Fourier noté $\tilde{\mathbf{T}}(\boldsymbol{\xi})$ à partir de la déformation élastique $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^e(\boldsymbol{\xi})$ comme suit :

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{ij}(\boldsymbol{\xi}) &= C_{ijkl}^0 \tilde{\varepsilon}_{kl}^e(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \tilde{T}_{ij}(\mathbf{0}) &= \bar{T}_{ij} \end{aligned} \quad (3.10)$$

où $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^e = \tilde{\mathbf{U}}_{sym}^e$ et $\bar{\mathbf{T}}$ représente la contrainte macroscopique appliquée à la cellule unitaire périodique. En utilisant l'équation (3.5) conjointement avec l'équation (3.10), nous obtenons l'expression finale de $\tilde{\mathbf{T}}(\boldsymbol{\xi})$:

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{ij}(\boldsymbol{\xi}) &= \left(I_{ijmn} - C_{ijkl}^0 \tilde{\Gamma}_{klmn}(\boldsymbol{\xi}) \right) C_{mnpq}^0 \tilde{U}_{pq}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \tilde{T}_{ij}(\mathbf{0}) &= \bar{T}_{ij}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

où $\tilde{\Gamma}(\boldsymbol{\xi})$ est la transformée de Fourier de l'opérateur de Green modifié [131] et défini en élasticité isotrope dans l'espace de Fourier par [167] :

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{klmn}(\boldsymbol{\xi}) &= (4\mu)^{-1} \xi^{-2} (\delta_{km} \xi_n \xi_l + \delta_{kn} \xi_m \xi_l + \delta_{lm} \xi_k \xi_n + \delta_{ln} \xi_k \xi_m) \\ &\quad - \frac{(\lambda + \mu)}{\mu (\lambda + 2\mu)} \frac{\xi_k \xi_l \xi_m \xi_n}{\xi^4}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Ensuite, le champ de contraintes $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ est obtenu sur la cellule unitaire discrétisée dans l'espace réel par la transformée de Fourier inverse de $\tilde{\mathbf{T}}(\boldsymbol{\xi})$. D'autres champs élastiques tels que les rotations et les déformations élastiques peuvent également être obtenus de la même manière.

3.4 Méthode spectrale pour la résolution des champs élasto-statiques en élasticité linéaire et hétérogène

3.4.1 Equations de champs de la FDM en élasticité hétérogène et tenseur de polarisation

Nous supposons à nouveau une contrainte macroscopique appliquée $\bar{\mathbf{T}}$ (conditions limites en contraintes), qui est la contrainte moyenne $\langle \mathbf{T} \rangle$ sur la cellule unitaire périodique de volume V (en appliquant le théorème de la moyenne) et une densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ donnée périodique. L'objectif de cette section est de déterminer les champs élastiques générés par la densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ en utilisant les équations élasto-statiques de la FDM dans l'espace de Fourier [33, 24, 53] en élasticité hétérogène. Les principales équations élasto-statiques de la FDM appliquées au volume V se résument aux équations de type Poisson (équation (2.23)) pour la détermination des distorsions élastiques incompatibles dues à la présence de densité de dislocations, et l'équilibre des contraintes traduit ici sous la forme de l'équation de type Navier (2.32) pour la détermination de la déformation élastique compatible $\mathbf{U}^{e,\parallel}(\mathbf{x})$ et du champ solution $\mathbf{w}(\mathbf{x})$. Cette dernière s'exprime en élasticité hétérogène par :

$$C_{ijkl}^0 w_{k,lj} + \tau_{ij,j} = 0. \quad (3.13)$$

Dans l'équation (3.13), le tenseur $\boldsymbol{\tau}$ est le "tenseur de polarisation des contraintes" défini en notation indicielle comme suit :

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{e,\perp} + \delta C_{ijkl} w_{k,l}. \quad (3.14)$$

Ce champ est dû à l'incompatibilité de la déformation élastique résultant de la présence des dislocations à travers le terme $\mathbf{T}^\perp = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\perp}$, et des hétérogénéités élastiques à travers le terme $\delta \mathbf{C} : \mathbf{grad} \mathbf{w}$. L'expression de $\boldsymbol{\tau}$ contient le champ inconnu du problème $\mathbf{U}^{e,\parallel}$ au travers du terme $\delta \mathbf{C} : \mathbf{grad} \mathbf{w}$. Ainsi, l'équation (3.13) doit être résolue au travers d'une équation intégrale de type Lippmann-Schwinger avec champs incompatibles \mathbf{T}^\perp .

3.4.2 Equation intégrale de type Lippmann-Schwinger

En utilisant la technique des fonctions de Green d'un milieu élastique homogène, l'équation (3.13) peut être résolue sous la forme d'une équation intégrale de type Lippmann-Schwinger dont le champ inconnu est la distorsion élastique compatible $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}$, avec un terme supplémentaire \mathbf{T}^\perp dû à la présence des densités de dislocations polarisées :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}(\mathbf{x}) = \langle \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel} \rangle - \left(\boldsymbol{\Gamma}^0 \star \boldsymbol{\tau} \right) (\mathbf{x}), \quad (3.15)$$

où \star dénote la convolution spatiale, $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel} \rangle$ est la valeur moyenne de $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}$ dans V et $\boldsymbol{\Gamma}^0$ représente le tenseur de Green modifié associé au milieu de référence homogène élastique de module \mathbf{C}^0 . La solution générale formelle de cette équation est donnée sous la forme de la série suivante [228, 33] :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left[\left(-\boldsymbol{\Gamma}^0 \star \delta \mathbf{C} \right) (\mathbf{x}) \right]^n : \left[\langle \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel} \rangle - \left(\boldsymbol{\Gamma}^0 \star \mathbf{T}^\perp \right) (\mathbf{x}) \right]. \quad (3.16)$$

L'équation intégrale (3.15) avec les conditions aux limites périodiques constituent un problème d'élasticité dont le champ inconnu est $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel} = (\mathbf{grad} \mathbf{w})_{sym}$. Cette équation est semblable à l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger classique utilisée dans l'étude des polycristaux et des matériaux composites [166, 167]. Généralement, l'équation classique est résolue par des méthodes de calculs numériques basées sur les schémas itératifs de type FFT. Dans ce chapitre, nous utiliserons l'algorithme à point fixe ("schéma basique") développé par Moulinec et Suquet [166] pour résoudre l'équation (3.15), mais avec des conditions aux limites en contraintes dans le calcul de la moyenne des déformations élastiques compatibles. L'algorithme classique de Moulinec et Suquet [166] est rappelé pour des conditions aux limites en déformation imposées en Annexe A. Il faut remarquer que l'équation (3.15) contient deux principales nouveautés à souligner. Tout d'abord, l'équation de type Poisson (2.25) doit être résolue pour obtenir \mathbf{U}_e^\perp , une fois la densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ prescrite au sein de V . Ceci rend le présent schéma numérique différent de celui utilisé pour résoudre les problèmes thermoélastiques [228] ou d'eigenstrain (déformation libre de contraintes) [11]. En second lieu, la série (3.16) contient un terme supplémentaire qui est un produit de convolution entre $\boldsymbol{\Gamma}^0$ et \mathbf{T}^\perp . Par conséquent, l'algorithme de résolution proposé dans la prochaine section nécessite deux différentes procédures telles que le calcul précis de $\mathbf{U}^{e,\perp}$ et donc \mathbf{T}^\perp puis la résolution itérative de la solution $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}$. Les contraintes pourront alors être déterminées comme dans la section 3.3.3.

3.4.3 Transformation dans l'espace de Fourier de l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger avec champs incompatibles

La transformée de Fourier de l'équation de type Lippmann-Schwinger avec champs incompatibles (3.15) s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) &= -\tilde{\boldsymbol{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \tilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e,\parallel}(\mathbf{0}) &= \langle \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel} \rangle = \mathbf{C}^{0-1} : (\overline{\mathbf{T}} - \langle \boldsymbol{\tau} \rangle)\end{aligned}\tag{3.17}$$

où $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi})$ et $\tilde{\boldsymbol{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi})$ sont les transformées de Fourier continues respectives de $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}(\mathbf{x})$ et $\boldsymbol{\Gamma}^0(\mathbf{x})$.

3.5 Implémentation numérique

3.5.1 Transformation de Fourier discrètes (DFT)

Les équations de champs continus obtenues dans l'espace de Fourier dans les sections 3.3 et 3.4 sont maintenant résolues par transformées de Fourier discrètes. Les transformées de Fourier directe (FFT) et inverse (FFT⁻¹) sont calculées en utilisant l'algorithme FFT décrit ci-dessous.

Nous considérons une cellule unitaire périodique avec les périodes spatiales T_1 , T_2 et T_3 dans les directions x_1 , x_2 et x_3 , respectivement. Le VER est discrétisé en une grille parallélépipédique régulière de $N_1 \times N_2 \times N_3$ voxels avec un vecteur position $\mathbf{x} = ((i_1 - 1)\delta_1, (i_2 - 1)\delta_2, (i_3 - 1)\delta_3)$, où $i_1 = 1 \rightarrow N_1$, $i_2 = 1 \rightarrow N_2$, $i_3 = 1 \rightarrow N_3$, δ_1 , δ_2 et δ_3 sont les tailles des pixels dans les directions x_1 , x_2 et x_3 . Ici, nous prenons $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = \delta$. Le nombre total de points sur la grille FFT est donné par $N_{tot} = N_1 \times N_2 \times N_3$. La FFT d'une fonction f est $\hat{f} = \text{FFT}(f)$. Sa transformée de Fourier inverse est $f = \text{FFT}^{-1}(\hat{f})$. Pour les cas simples 2D traités en élasticité homogène, un programme Matlab a été développé alors que pour les cas 3D en élasticité hétérogène, un programme Fortran a été développé dans la thèse. D'après la convention Matlab-FFTW [66, 83, 159], la FFT et la FFT⁻¹ s'écrivent :

$$\begin{aligned}\hat{f}(m_1, m_2, m_3) &= \sum_{i_1=1}^{N_1} \sum_{i_2=1}^{N_2} \sum_{i_3=1}^{N_3} f(i_1, i_2, i_3) \times \\ &\exp\left(-2\pi i \left(\frac{(i_1 - 1)(m_1 - 1)}{N_1} + \frac{(i_2 - 1)(m_2 - 1)}{N_2} + \frac{(i_3 - 1)(m_3 - 1)}{N_3} \right)\right)\end{aligned}\tag{3.18}$$

et

$$f(i_1, i_2, i_3) = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{\xi_1=1}^{N_1} \sum_{\xi_2=1}^{N_2} \sum_{\xi_3=1}^{N_3} \hat{f}(m_1, m_2, m_3) \times \exp\left(+2\pi i \left(\frac{(i_1 - 1)(m_1 - 1)}{N_1} + \frac{(i_2 - 1)(m_2 - 1)}{N_2} + \frac{(i_3 - 1)(m_3 - 1)}{N_3} \right)\right), \quad (3.19)$$

où les m_j ($j = 1 \rightarrow 3$) sont arrangés dans l'espace de Fourier comme suit :

$$m_j = \left(\left(-\frac{N_j}{2} + 1 \right), \left(-\frac{N_j}{2} + 2 \right), \dots, -1, 0, 1, \dots, \left(\frac{N_j}{2} - 1 \right), \left(\frac{N_j}{2} \right) \right) \quad (3.20)$$

si N_j est pair, et

$$m_j = \left(\left(-\frac{N_j - 1}{2} \right), \dots, -1, 0, 1, \dots, \left(\frac{N_j - 1}{2} \right) \right) \quad (3.21)$$

si N_j est impair.

Il est important de mentionner que les équations (3.18) et (3.19) sont des sommes finies qui peuvent être déterminées exactement par la FFT sur les cellules périodiques.

3.5.2 Algorithme de résolution dans le cas hétérogène

L'algorithme numérique utilisé pour la résolution des champs élastiques associés à une distribution de densités de dislocations et aux hétérogénéités élastiques présentes dans un milieu périodique donné est présenté ci-dessous. Cet algorithme est constitué de deux procédures majeures : (i) la procédure d'initialisation du schéma itératif qui correspond à l'initialisation de $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}$ pour une contrainte macroscopique appliquée $\bar{\mathbf{T}}$ (conditions aux limites en contraintes) et le calcul de la distorsion élastique incompatible $\mathbf{U}^{e,\perp}(\mathbf{x})$ à travers la résolution de l'équation de type Poisson (3.1) dans l'espace de Fourier, et, (ii) la procédure itérative globale basée sur le schéma basique pour la résolution de l'équation (3.15), où $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}(\mathbf{x})$ est obtenue après convergence.

L'algorithme est décrit comme suit :

Une fois la densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x})$ prescrite dans l'espace réel, la procédure d'initialisation commence avec le calcul de $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})$ dans l'espace de Fourier par transformée de Fourier directe obtenue par FFT (étape 1). L'équation (3.1) est utilisée pour obtenir $\tilde{\mathbf{U}}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})$ dans l'espace de Fourier (étape 2) et $\mathbf{U}^{e,\perp}(\mathbf{x})$ dans l'espace réel par transformée de Fourier inverse FFT⁻¹ (étape 3). La déformation élastique compatible initiale $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_0^{e,\parallel}$ est prise comme la solution élastique homogène $\mathbf{C}^{0-1} : \bar{\mathbf{T}}$ (étape

4). La procédure d'initialisation se termine par le calcul du champ de contrainte initial $\mathbf{T}_0(\mathbf{x}) = \mathbf{C}(\mathbf{x}) : (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_0^{e,\parallel} + \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\perp}(\mathbf{x}))$ (étape 5) où $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\perp} = \mathbf{U}_{sym}^{e,\perp}$.

Dans la boucle itérative globale à l'itération (n+1), la FFT directe $\tilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi})$ de $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ connue à l'itération (n) est calculée à l'étape 6. $\tilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi})$ est utilisée pour calculer le critère de convergence basé sur l'équilibre des contraintes dans l'espace de Fourier (étape 7). Si la convergence est atteinte, la procédure itérative s'arrête, dans le cas contraire le tenseur de polarisation des contraintes $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi})$ est calculé dans l'espace de Fourier en soustrayant la FFT de $\mathbf{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon}_n^{e,\parallel}$ de $\tilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi})$ (étape 8). La déformation élastique compatible est mise à jour dans l'espace de Fourier à l'étape 9 en utilisant l'équation (3.18), puis dans l'espace réel grâce à la FFT⁻¹ (étape 10) pour obtenir $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{e,\parallel}(\mathbf{x})$, qui est par la suite utilisée pour mettre à jour le champ de contrainte dans l'espace réel (étape 11). La boucle itérative recommence avec les champs de contraintes et de déformations compatibles mis à jour jusqu'à l'obtention de la convergence. Le critère de convergence utilisé à l'étape 7 basé sur l'équilibre des contraintes locales dans l'espace de Fourier est donné par :

$$e_n = \frac{\|\mathbf{div}(\mathbf{T}_n)\|_2}{|\langle \mathbf{T}_n \rangle|} = \frac{\|\boldsymbol{\xi} \cdot \tilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi})\|_2}{|\tilde{\mathbf{T}}_n(\mathbf{0})|} \leq \epsilon, \quad (3.22)$$

où $\|\cdot\|_2$ dénote la norme L^2 , $|\cdot|$ dénote la norme Euclidienne d'un tenseur d'ordre deux et e_n représente l'erreur à l'itération (n). La convergence est atteinte lorsque l'erreur est inférieure à une précision ϵ donnée qui est de l'ordre de $10^{-6} - 10^{-8}$ dans nos simulations. Il faut préciser que dans le cas de l'élasticité homogène, les champs de contrainte et de déformation sont obtenus à la première itération de cet algorithme.

Algorithm 1 Algorithme basique pour la théorie de la FDM dans un milieu élastique, hétérogène et périodique

Initialisation : $(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}))$ donné

1: $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}(\boldsymbol{\alpha})$

2: Résolution de $\widetilde{\mathbf{U}}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})$:

$$\tilde{U}_{ij}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) = i \frac{\xi_k}{\xi^2} e_{jkl} \tilde{\alpha}_{il}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad \text{et}$$

$$\tilde{U}_{ij}^{e,\perp}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$$

3: $\mathbf{U}^{e,\perp}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{FFT}^{-1}(\widetilde{\mathbf{U}}^{e,\perp})$

4: $\boldsymbol{\varepsilon}_0^{e,\parallel} \leftarrow \langle \boldsymbol{\varepsilon}_0^{e,\parallel} \rangle = \mathbf{C}^{0^{-1}} : \overline{\mathbf{T}}$

5: $\mathbf{T}_0(\mathbf{x}) \leftarrow \mathbf{C}(\mathbf{x}) : (\boldsymbol{\varepsilon}_0^{e,\parallel} + \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\perp}(\mathbf{x}))$

Itération : $n + 1$ ($\boldsymbol{\varepsilon}_n^{e,\parallel}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{T}_n(\mathbf{x})$ connus)

6: $\tilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi}) = \text{FFT}(\mathbf{T}_n)$

7: Test de convergence basé sur l'équation (3.23)

8: $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \tilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}_n^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi})$

9: $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow -\tilde{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) : \tilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad \text{et} \quad \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{e,\parallel}(\mathbf{0}) \leftarrow \langle \boldsymbol{\varepsilon}_n^{e,\parallel} \rangle$

10: $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{e,\parallel}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{FFT}^{-1}(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}))$

11: $\mathbf{T}_{n+1}(\mathbf{x}) \leftarrow \mathbf{C}(\mathbf{x}) : (\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{e,\parallel}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\perp}(\mathbf{x}))$

3.5.3 Différentes approximations pour les formules de différenciation dans l'espace de Fourier

3.5.3.1 Approximation classique

D'après Moulinec et Suquet [166, 167], l'approximation classique des dérivées partielles de premier ordre introduite dans les sections 3.3 et 3.4 est définie par :

$$i\xi_j = i \frac{2\pi m_j}{T_j}, \quad (3.23)$$

où, les m_j sont définis avec les équations (3.20) et (3.21), avec $j = 1 \rightarrow 3$. Dans la suite du chapitre, la formule (3.23) sera utilisée pour le calcul des dérivées partielles du premier et du second ordre. L'utilisation de cette approximation classique pour le calcul des dérivées partielles de premier ordre sera notée par P et LS dans la résolution respective de l'équation de type Poisson et de l'équation de type Lippmann-Schwinger dans le cas de l'élasticité hétérogène avec incompatibilités.

3.5.3.2 Approximation différences finies centrées

Les formules de différenciation pour le calcul des dérivées partielles de premier et de second ordre basées sur des schémas à différences finies centrées avec l'approximation 9 pixels sont rappelées dans l'Annexe B. En utilisant ces formules, les équivalences entre les multiplicateurs continus et discrets des dérivées partielles dans l'espace de Fourier sont données par :

$$i\xi_j^C = \frac{i}{\delta} \sin\left(\frac{2\pi m_j}{N_j}\right) \quad (3.24)$$

$$-(\xi_j^C)^2 = \frac{2}{\delta^2} \left(\cos\left(\frac{2\pi m_j}{N_j}\right) - 1 \right) \quad (3.25)$$

$$-\xi_j^C \xi_l^C = \frac{1}{2\delta^2} \left[\cos\left(2\pi \left(\frac{m_j}{N_j} + \frac{m_l}{N_l}\right)\right) - \cos\left(2\pi \left(\frac{m_j}{N_j} - \frac{m_l}{N_l}\right)\right) \right], \quad (3.26)$$

où, les m_j et m_l sont définis avec les équations (3.20) et (3.21), $j = 1 \rightarrow 3$ et $l = 1 \rightarrow 3$. La méthodologie intrinsèque des transformées de Fourier discrètes (DFT) a été décrite pour la première fois dans [169, 170, 54]. L'approximation classique (équation (3.23)) récemment adaptée aux équations de la FDM dans [33] est basée sur les séries de Taylor linéaires encore appelées "limite acoustique" de la présente formulation. Il est à noter que des approximations d'ordre supérieur peuvent également être utilisées [176] pour encore raffiner d'avantage les résultats FFT. Dans le cas de l'élasticité hétérogène, l'utilisation des équations (3.24) à (3.26) pour la résolution de l'équation de type Poisson sera dénotée par P_C .

3.5.3.3 Approximation différences finies centrées sur une grille pivotée : schéma "rotated"

L'opérateur de dérivée partielle de premier ordre dans l'espace de Fourier du schéma "rotated" est obtenu comme suit. Tout d'abord, le champ de déplacement est évalué dans l'espace de Fourier dans les huit coins d'un voxel et dans une base pivotée de 45° par rapport au repère Cartésien initial. Les champs de contrainte et de déformation correspondants sont calculés au centre du voxel, dans la même base pivotée de 45° grâce au schéma à différences finies centrées. Ces champs de contrainte et de déformation sont en retour exprimés dans la base Cartésienne initiale, puis, dans l'espace réel par FFT^{-1} . Les détails de cette méthode sont rapportés dans l'annexe C et dans la contribution récente de Willot [239]. L'équivalence entre le multiplicateur continu et discret des dérivées partielles de premier ordre dans l'espace

de Fourier s'écrit :

$$i\xi_j^R = \frac{i}{4\delta} \tan\left(\frac{\pi m_j}{N_j}\right) \left(1 + \exp\left(i\frac{2\pi m_1}{N_1}\right)\right) \left(1 + \exp\left(i\frac{2\pi m_2}{N_2}\right)\right) \left(1 + \exp\left(i\frac{2\pi m_3}{N_3}\right)\right), \quad (3.27)$$

où, les m_j et m_l sont définis avec les équations (3.20) et (3.21), $j = 1 \rightarrow 3$ et $l = 1 \rightarrow 3$. Dans le cas de l'élasticité hétérogène, l'utilisation du schéma "rotated" pour la résolution de l'équation de type Lippmann-Schwinger avec incompatibilités sera dénotée par LS_R . Ce schéma sera également comparé à l'approximation classique (équation (3.23)) en terme de précision.

3.6 Résultats numériques

L'ensemble des résultats numériques sera présenté comme suit. Dans le cas de l'élasticité homogène et isotrope, l'approximation basée sur le schéma à différences finies centrées 9 pixels sera utilisée pour le calcul des champs incompatibles ($\mathbf{U}^{e,\perp}$) et compatibles ($\mathbf{U}^{e,\parallel}$) (cf. équation (3.9)) pour des dislocations individuelles coin et vis. Les résultats obtenus seront validés par des comparaisons avec les solutions analytiques et les simulations EF. Dans le cas de l'élasticité hétérogène, trois différentes procédures seront étudiées et comparées pour la résolution de l'équation de type Poisson avec les approximations P ou P_C , et l'équation de type Lippmann-Schwinger avec incompatibilités avec les approximations LS et LS_R . Dans un premier temps, les trois procédures : $P - LS$, $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$ seront comparées aux solutions analytiques [55, 56] dans le cas d'une dislocation coin individuelle définie par une densité de dislocations prescrite sur un seul pixel, et interagissant avec une inclusion circulaire noyée dans la matrice d'un matériau composite 2D. Dans un deuxième temps, la procédure $P_C - LS_R$ sera appliquée aux cas physiques tels qu'un dipôle de dislocations contraint à l'interface matrice/inclusion d'un matériau composite, ou des inclusions cubiques entourées de boucles de dislocations dans un matériau composite avec des cellules unitaires 3D.

3.6.1 Résultats en élasticité homogène

3.6.1.1 Données matériaux et données numériques

Dans les applications ci-dessous, les cœurs de dislocations sont définis par différentes fonctions spatiales pour le tenseur de Nye : des fonctions singulières utilisant l'opérateur intégral de Riemann-Graves [1], des fonctions Gaussiennes régulières [107], ou des valeurs constantes localisées sur un seul pixel [24]. Il faut noter que d'autres approches ont été adoptées comme des distributions triangulaires étalant

la densité de dislocations sur 9 pixels [33]. Ici, nous adoptons une grille FFT 2D discrétisée en 1024×1024 pixels de taille $\delta_1 = \delta_2 = \delta = 0.05b$, où b est la norme du vecteur de Burgers fixée à 4.05×10^{-10} m. Les constantes élastiques isotropes de l'Aluminium (Al) seront utilisées dans les simulations : $E=62780$ MPa, $\nu=0.3647$. Ces constantes étaient déjà utilisées par Roy et Acharya [193] dans les simulations EF. Le rayon de cœur de la dislocation est défini par $r_0 = 0.6b$.

Dans la suite de cette section, nous allons procéder au calcul numérique des contraintes internes générées par les dislocations individuelles vis et coin par la présente approche FFT. Comme indiqué dans [33], le cas de dislocations individuelles correspond à $\langle \boldsymbol{\alpha} \rangle \neq 0$ du fait que la partie non périodique du champ \mathbf{U}^e ne peut être obtenue (même sur une cellule unitaire de taille assez large). C'est la raison pour laquelle la précision de l'approche spectrale en termes de champs élastiques locaux sera appréciée à des distances finies du cœur en fonction de la résolution spatiale dictée par la taille de pixel. Par ailleurs, les rotations élastiques occasionnées par les dislocations seront également reportées. Les résultats numériques FFT seront ensuite comparés aux solutions analytiques [101, 1] pour les dislocations dans un milieu infini et aux résultats par la méthode EF (qui a été rappelée dans le chapitre 2), pour les mêmes cellules unitaires périodiques et des éléments de même taille que la taille de pixels.

3.6.1.2 Dislocation vis

Nous considérons une densité de dislocations vis $\alpha_{33}(\mathbf{x})$ telle que son vecteur ligne et son vecteur de Burgers soient alignés avec la direction (x_3) . La dislocation individuelle est centrée dans la cellule unitaire. Les distorsions élastiques incompatibles $U_{31}^{e,\perp}$ et $U_{32}^{e,\perp}$ associées à la présence de $\alpha_{33}(\mathbf{x})$ sont obtenues par la résolution de l'équation (3.1) avec la présente approche spectrale DFT basée sur des schémas différences finies centrées (cf. équations (3.24) à (3.26)) pour le calcul des dérivées partielles de premier et de second ordre.

La validation de la présente approche FFT est effectuée dans un premier temps par des comparaisons avec la solution analytique obtenue par la technique de l'opérateur intégral de Riemann-Graves [1], où la distribution spatiale de $\alpha_{33}(\mathbf{x})$ est donnée par :

$$\begin{aligned} \alpha_{33}(\mathbf{x}) &= \frac{b}{\pi r_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right) & \text{si } r \leq r_0 \\ \alpha_{33}(\mathbf{x}) &= 0 & \text{si } r > r_0, \end{aligned} \quad (3.28)$$

avec $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$. Les expressions analytiques de T_{13} et T_{23} étaient directement déduites à partir des distorsions élastiques incompatibles. Elles sont données par

[1] :

$$T_{23} = \mu \frac{b}{2\pi} \left(\frac{x_1}{r^2} \right) \quad (3.29)$$

$$T_{13} = -\mu \frac{b}{2\pi} \left(\frac{x_2}{r^2} \right), \quad \text{si } r > r_0, \quad (3.30)$$

$$T_{23} = \mu \frac{b}{\pi r_0} \left(\frac{x_1}{r^2} \right) \left(r - \frac{r^2}{2r_0} \right) \quad (3.31)$$

$$T_{13} = -\mu \frac{b}{\pi r_0} \left(\frac{x_2}{r^2} \right) \left(r - \frac{r^2}{2r_0} \right), \quad \text{si } r \leq r_0 \quad (3.32)$$

Les profils des contraintes T_{13} et T_{23} normalisées par le module de cisaillement μ , sont comparés avec la solution analytique sur la figure 3.1, où on observe une bonne correspondance entre les deux solutions. Bien que l'expression de $\alpha_{33}(\mathbf{x})$ soit singulière en $\mathbf{x} = 0$ (équation (3.28)), l'équation intégrale d'incompatibilité (2.10) réécrite comme suit est vérifiée avec cette régularisation :

$$b = \int_S \alpha_{33} dS \quad (3.33)$$

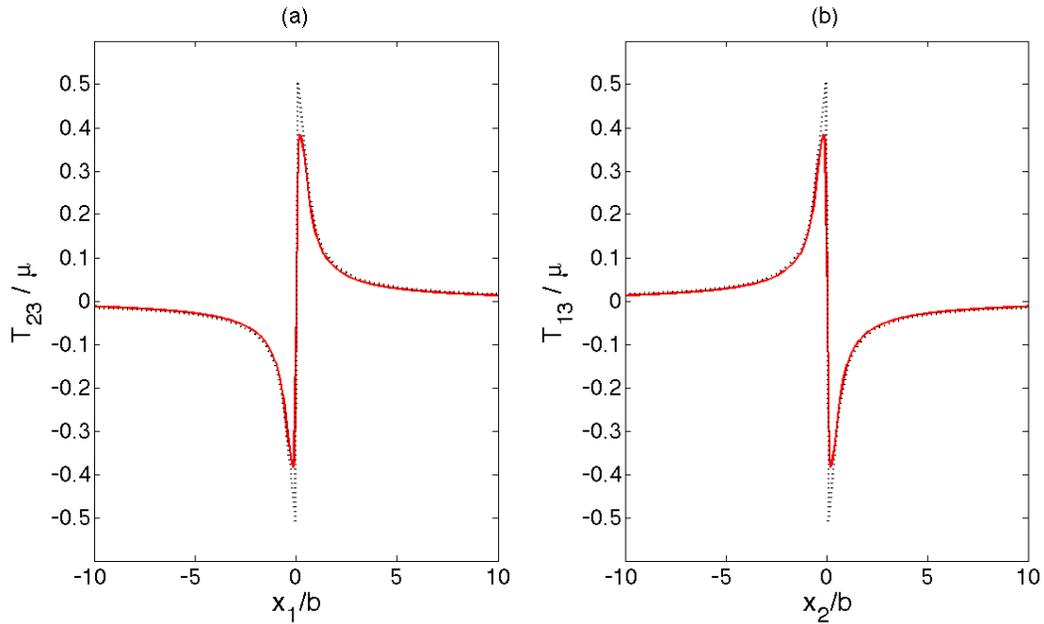


FIGURE 3.1 – Composantes des contraintes de cisaillement T_{13} et T_{23} normalisées par μ pour une dislocation vis : FFT avec $\alpha_{33}(\mathbf{x})$ donnée par l'équation (3.28) (ligne continue rouge) vs. Solution analytique obtenue par la technique de l'opérateur de Riemann-Graves (ligne en pointillés [1]).

Une autre validation de la présente approche DFT est effectuée avec l'utilisation de la fonction Gaussienne pour régulariser le cœur de la dislocation vis. Cette fonction est définie par :

$$\begin{aligned} \alpha_{33}(\mathbf{x}) &= \frac{b}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) & \text{si } r \leq r_0 \\ \alpha_{33}(\mathbf{x}) &= 0 & \text{si } r > r_0, \end{aligned} \quad (3.34)$$

avec $\sigma = 0.1r_0$. En partant de cette fonction, les solutions FFT obtenues sur une grille de 1024×1024 pixels sont comparées aux solutions analytiques données par exemple dans Hirth et Lothe [101]. La figure 3.2 montre une bonne correspondance entre le résultat de notre approche FFT et les solutions analytiques. Le champ de contrainte à l'intérieur et dans la région du cœur de la dislocation est prédit avec une très bonne précision. De plus, l'équation (3.33) est exactement vérifiée dans le cas de la régularisation Gaussienne de la densité de dislocations.

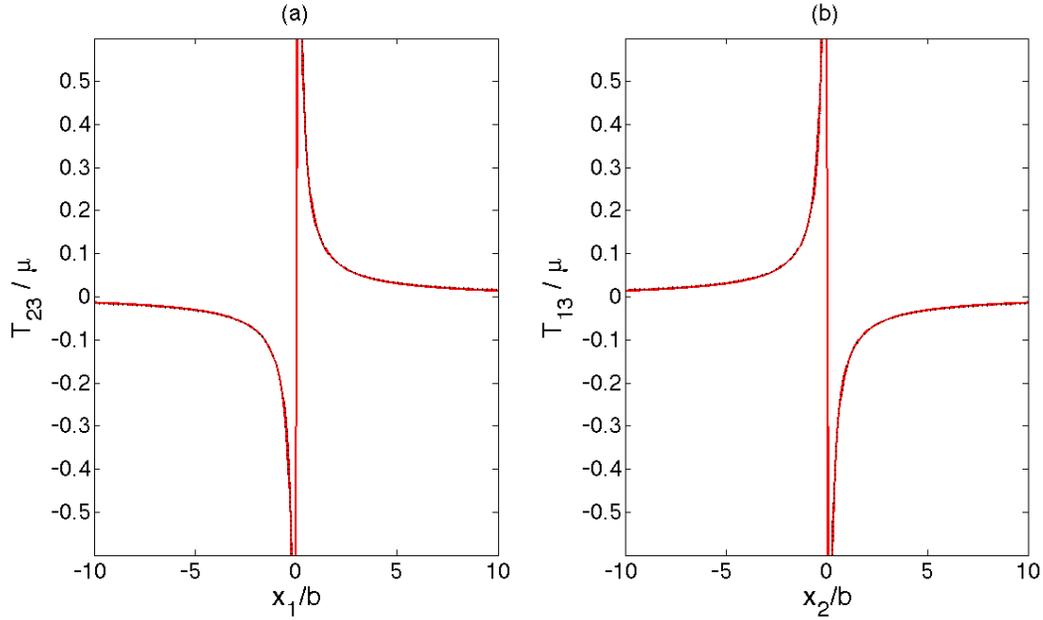


FIGURE 3.2 – Composantes des contraintes de cisaillement T_{13} et T_{23} normalisées par μ pour une densité de dislocations vis régularisée avec une fonction Gaussienne : FFT (ligne continue rouge) vs. Solution analytique obtenue par la technique de l'opérateur de Riemann-Graves (ligne en pointillés) [101].

3.6.1.3 Comparaisons avec les résultats obtenus par la méthode EF dans le cas d'une dislocation vis individuelle

La présente approche spectrale basée sur le schéma différences finies centrées est comparée aux résultats obtenus par la méthode EF qui résout les mêmes équations de type Poisson (équations (2.35) et (2.36)) avec les conditions aux limites périodiques. La méthode EF utilise des éléments finis bidimensionnels triangulaires linéaires continus de type P1 et le solveur GMRES (Gradient Minimal Residual). Ce solveur permet d'utiliser de grands maillages avec le code EF FreeFEM++ [97].

La figure 3.3 compare les cartes de contraintes T_{13} et T_{23} (normalisées par μ) obtenues par la présente approche FFT (Figure 3.3(a)(c)) et par EF (Figure 3.3(b)(d)), dans le cas d'une distribution Gaussienne de la dislocation avec $\sigma = 0.1r_0$, avec 1024×1024 pixels. Pour la même densité de dislocations, les contours des champs de rotation ω_{31}^e et ω_{32}^e obtenus par FFT et par EF, grâce aux équations (2.40) et (2.41), sont également comparés dans la figure 3.4. Dans les deux cas, une bonne correspondance entre les méthodes FFT et EF a été observée. Les deux méthodes se révèlent très précises dans le calcul des champs élastiques des dislocations. Cependant, la présente approche spectrale se montre plus attractive en terme de temps de calculs. En effet, en considérant un seul processeur 2.97GHz Intel i7 (8Go, 1600MHz DDR3), le temps de calcul nécessaire pour la simulation FFT est de 6.3 secondes alors qu'il avoisine 20 minutes dans les simulations EF. Ce gain en temps de calcul sera plus considérable dans le cas des problèmes tridimensionnels (nombre plus important de degrés de liberté).

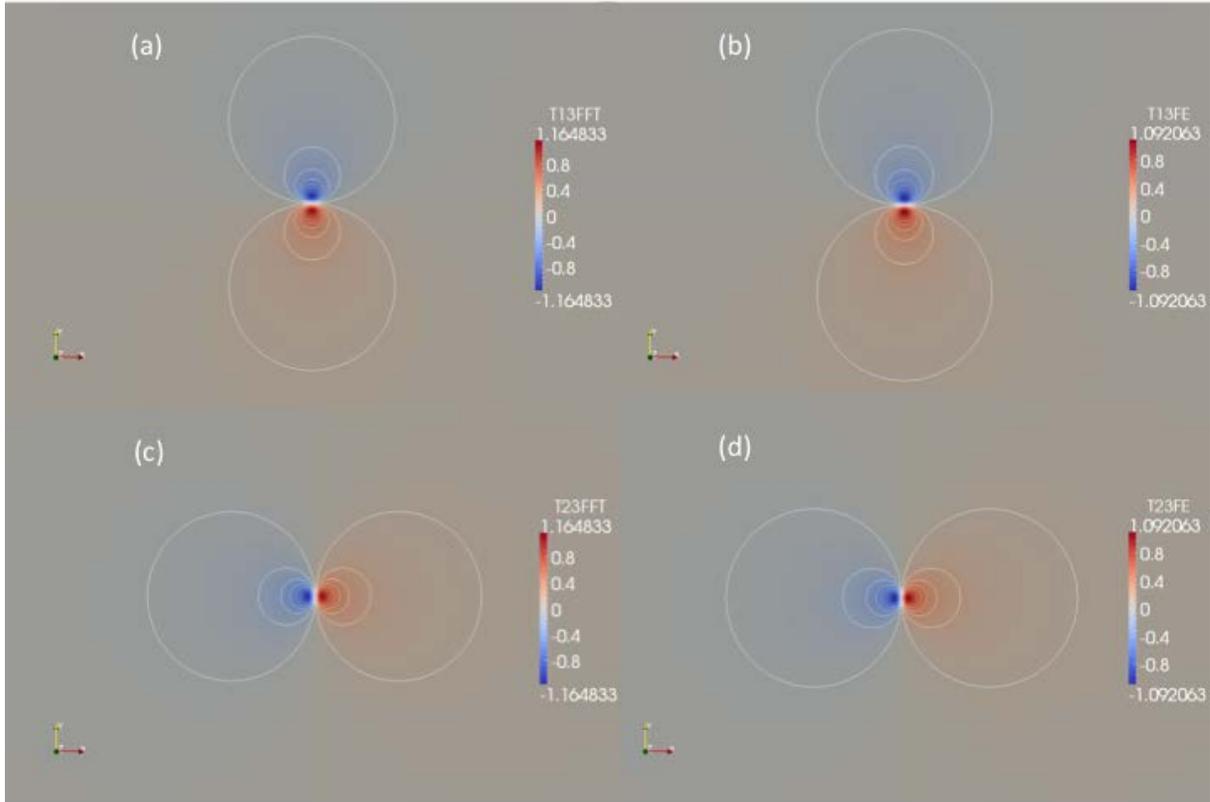


FIGURE 3.3 – Comparaison des cartes de contraintes de cisaillement T_{13} (a, b) et T_{23} (c, d) (normalisées par μ) pour une distribution Gaussienne de densité de dislocations vis ($\sigma = 0.1r_0$), obtenues par FFT avec 1024×1024 pixels (a, c) et par EF avec 1024×1024 pixels (b, d), avec deux éléments triangulaires linéaires par pixel.

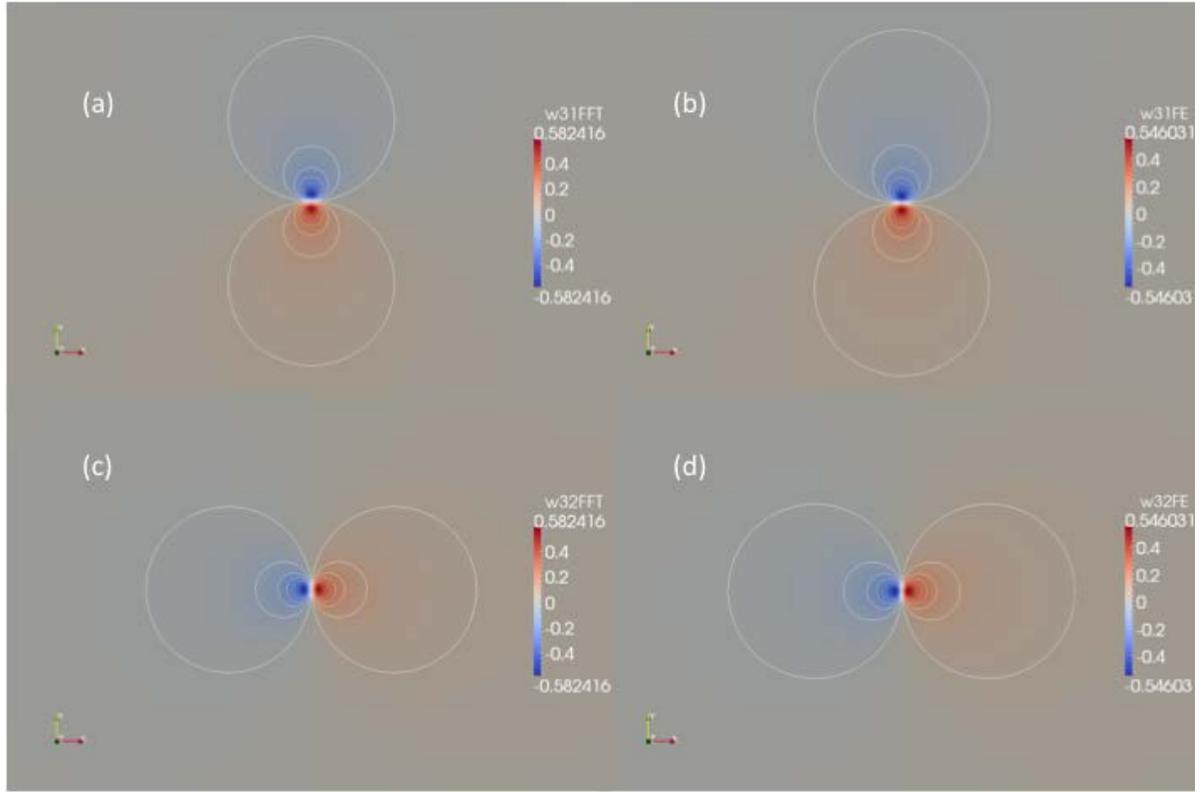


FIGURE 3.4 – Comparaison des cartes de rotations élastiques ω_{31}^e (a, b) et ω_{32}^e (c, d) (en radians) pour une distribution Gaussienne de densité de dislocations vis ($\sigma = 0.1r_0$), obtenues par FFT avec 1024×1024 pixels (a, c) et par EF avec 1024×1024 pixels (b, d), avec deux éléments triangulaires linéaires par pixel.

3.6.1.4 Dislocation coin

Nous considérons maintenant une densité de dislocations coin $\alpha_{13}(\mathbf{x})$ telle que le vecteur de Burgers est orienté selon la direction (x_1) et la ligne de dislocation est selon (x_3). Les distorsions élastiques incompatibles $U_{11}^{e,\perp}$ et $U_{12}^{e,\perp}$, et compatibles $U_{11}^{e,\parallel}$, $U_{12}^{e,\parallel}$, $U_{21}^{e,\parallel}$ et $U_{22}^{e,\parallel}$ sont déterminées par la résolution, respective, de l'équation de type Poisson (équation (3.1)) et l'équation de type Navier (équation (3.8)), par la présente approche spectrale (équations (3.24) à (3.26)). La densité de dislocations

$\alpha_{13}(\mathbf{x})$ est définie uniquement par la fonction Gaussienne :

$$\begin{aligned} \alpha_{13}(\mathbf{x}) &= \frac{b}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) & \text{si } r \leq r_0 \\ \alpha_{13}(\mathbf{x}) &= 0 & \text{si } r > r_0, \end{aligned} \quad (3.35)$$

avec $\sigma = 0.1r_0$. Les cartes des contraintes normale T_{11} et de cisaillement T_{12} (normalisées par μ) obtenues avec la distribution Gaussienne de densité de dislocations coin ($\sigma = 0.1r_0$), sont reportées sur la figure 3.5. Les profils résultant des contraintes T_{11} , T_{22} et T_{12} (normalisées par μ) sont comparés aux solutions analytiques données par Hirth et Lothe [101] sur la figure 3.6. Nous observons donc une bonne correspondance avec les solutions analytiques. De plus, l'équation d'incompatibilité intégrale suivante est bien vérifiée :

$$b = \int_S \alpha_{13} dS. \quad (3.36)$$



FIGURE 3.5 – Contours des contraintes : (a) T_{11} et (b) T_{12} normalisées par μ pour une dislocation coin obtenue par la présente méthode FFT avec 1024×1024 pixels.

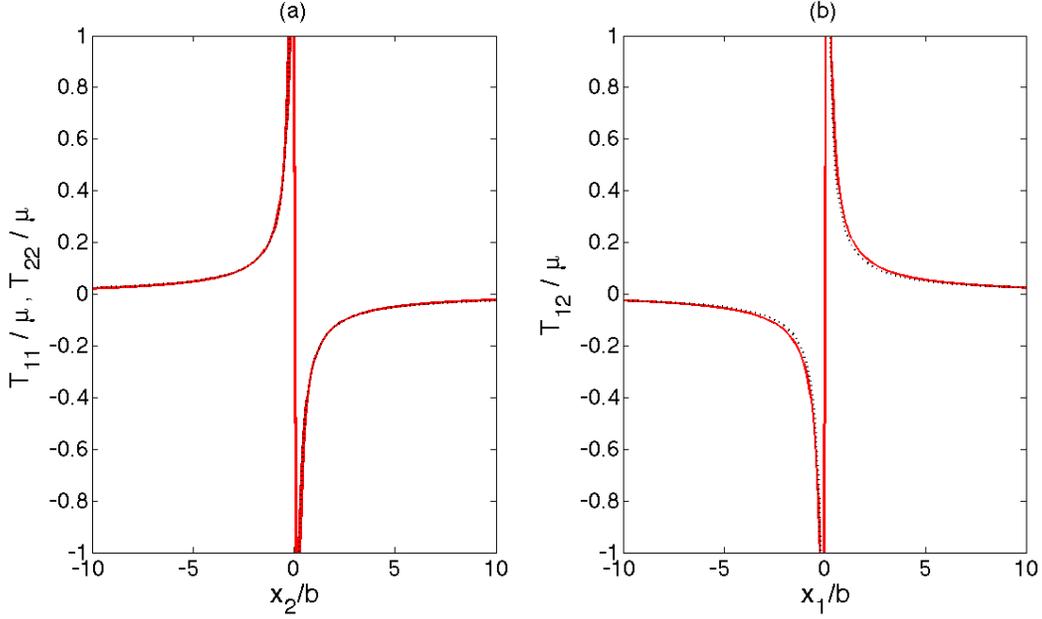


FIGURE 3.6 – Profils des contraintes : (a) T_{11} , T_{22} et (b) T_{12} normalisées par μ pour une dislocation coin : FFT (ligne continue) vs. Solution analytique (ligne en pointillés) [101].

3.6.1.5 Discussion

Il a été rapporté dans [33] que, lorsque la densité de dislocations est définie sur un seul pixel au centre de la cellule unitaire, de fortes oscillations numériques apparaissent sur les solutions numériques des champs élastiques obtenues par la méthode FFT classique. Tout comme dans les travaux de Moulinec et Suquet [167], la méthode utilisée par Brenner et al. [33] est basée sur la méthode FFT classique (équation (3.23)). Cette méthode est différente de la présente approche spectrale de type DFT basée sur une approximation par différences finies centrées à 9 pixels pour le calcul des dérivées partielles dans l'espace de Fourier (équations (3.24) à (3.26)).

En effet, en considérant une cellule élémentaire de $450b \times 450b$ discretisée par 1024×1024 pixels et en utilisant les mêmes paramètres matériau de la sous-section 3.6.1.1, les résultats de [33] sont reproduits sur la figure 3.7 pour une dislocation vis $\alpha_{33} = b/\delta^2$ définie sur un seul pixel au centre de la cellule de sorte que la relation (3.33) soit vérifiée. Dans cette configuration, de fortes oscillations ont été observées avec la FFT classique, par comparaison aux solutions analytiques pour T_{13} et T_{23} (figure 3.7). Cependant, l'application de la méthode spectrale développée dans cette thèse à la même densité de dislocations ($\alpha_{33} = b/\delta^2$) ne donne pas lieu

à ces oscillations et conduit à une solution précise, par comparaison aux solutions analytiques (figure 3.8). La présente méthode FFT se montre efficace par rapport à l'approximation classique car il n'y a plus besoin d'étaler le cœur de la densité de dislocations à l'aide d'une distribution triangulaire sur 9 pixels pour éviter ces oscillations comme dans [33]. La triangularisation a été alors réalisée avec différents poids de densités de dislocations pour respecter l'équation (3.33).

Dans la présente approche utilisant les règles de différenciation basées sur la DFT et les différences finies centrées, aucune oscillation n'a été observée, non seulement pour des distributions de densités de dislocations de type Gaussienne, mais aussi pour des densités de dislocations définies sur un seul pixel. Par conséquent, notre approche spectrale se montre très efficace pour le problème élastique homogène avec dislocations et fut récemment étendue aux défauts de type désinclinaisons généralisées [24, 25].

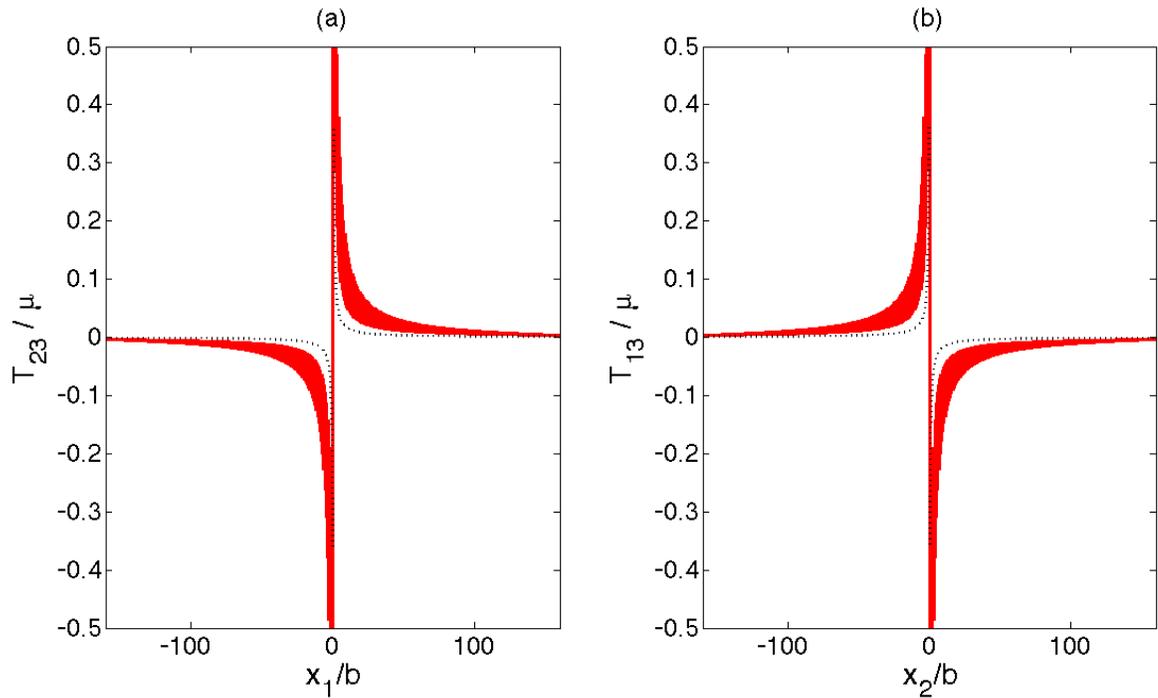


FIGURE 3.7 – Solutions T_{13} et T_{23} présentant des oscillations numériques obtenues avec la méthode FFT classique, pour une densité de dislocations vis α_{33} définie sur un seul pixel au centre de la cellule unitaire. La solution analytique est représentée par les lignes en pointillés.

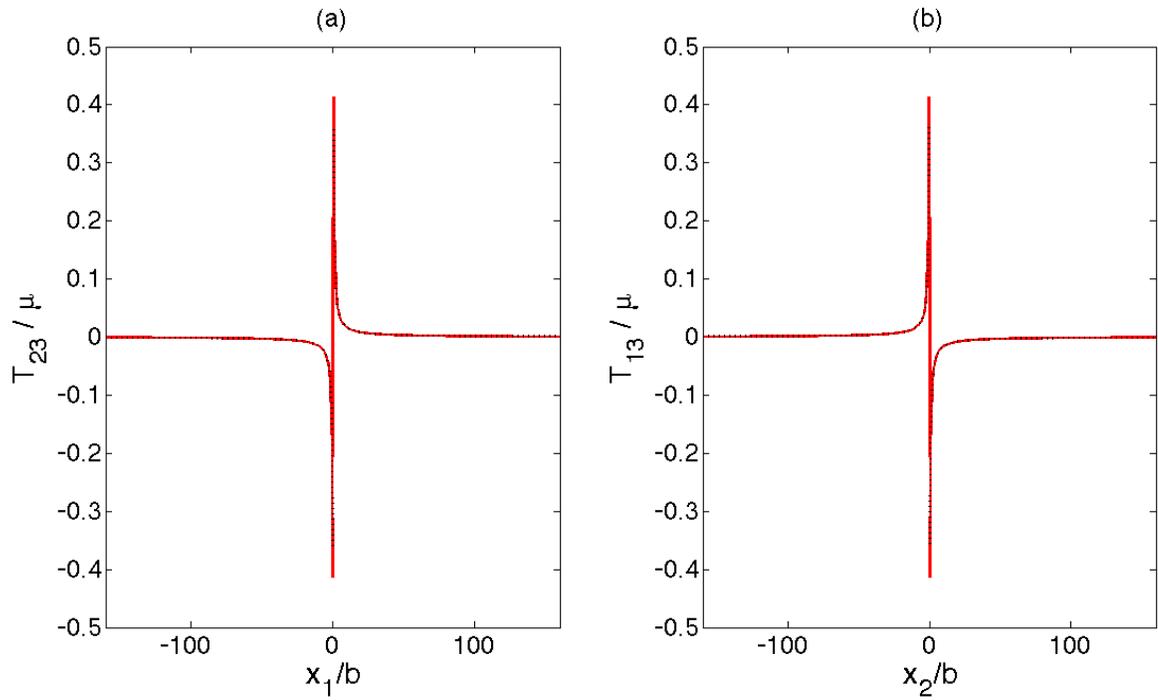


FIGURE 3.8 – Solutions T_{13} et T_{23} dénuées d’oscillations numériques obtenues avec la présente approche FFT, pour une densité de dislocations vis α_{33} définie sur un seul pixel au centre de la cellule unitaire. La solution analytique est représentée par les lignes en pointillés.

3.6.2 Résultats en élasticité hétérogène

3.6.2.1 Densité de dislocations et données matériaux

Dans ces applications 2D et 3D en élasticité hétérogène, nous considérons des matériaux composites à deux phases, constitués d'inclusion (dénnotée I) et de matrice (dénnotée par M), et contenant différentes distributions spatiales de densités de dislocations polarisées. Nous considérerons des cas où la densité de dislocations est définie soit dans l'inclusion ou dans la matrice du matériau composite. Nous étudierons également des cas avec des dipôles de dislocations (pour lesquels $\langle \boldsymbol{\alpha} \rangle = 0$) ou encore des boucles de dislocations tridimensionnelles contraintes aux interfaces inclusion/matrice. Pour les simulations numériques, la norme b du vecteur de Burgers de la densité de dislocations est toujours fixée à 4.05×10^{-10} m comme dans le cas homogène. La matrice a un comportement élastique, linéaire et isotrope avec un module d'Young $E_M = 62780$ MPa et un coefficient de Poisson $\nu_M = 0.3647$. Le module d'Young E_I et le coefficient de Poisson ν_I de l'inclusion sont déduits de la définition du contraste mécanique $k = E_I/E_M = \mu_I/\mu_M$ (en supposant $\nu_I = \nu_M$), où μ_I et μ_M sont les modules de cisaillement respectifs de l'inclusion et de la matrice. D'après [161] et [165], le module d'Young du milieu de référence pour le schéma basique doit être choisi égal à $E_0 = \beta(E_M + E_I)$ avec $\beta = 1/2$. Dans ce présent travail, nous avons constaté numériquement que $\beta = 0.505$ permet d'assurer une meilleure convergence de l'algorithme décrit dans la section 3.5 avec la procédure $P_C - LS_R$ pour des contrastes mécaniques variant de $k = 10^{-10}$ à $k = 10^3$. Ce choix est cohérent avec l'étude de convergence réalisée dans [239], où les valeurs optimisées de β fut comprises entre 0.5003 et 0.509.

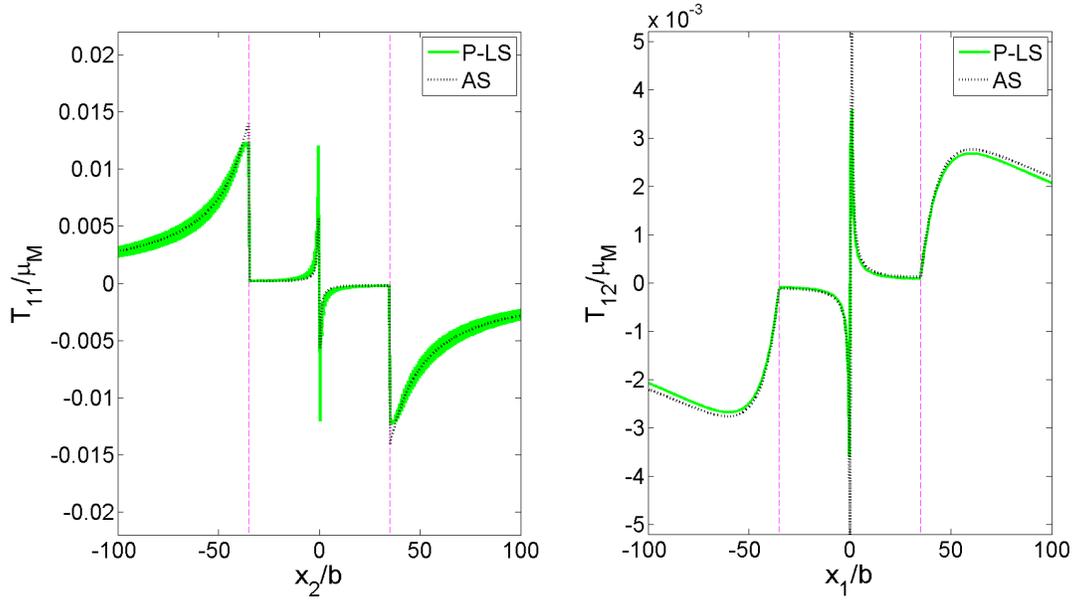
3.6.2.2 Contraintes internes générées par une dislocation coin interagissant avec une inclusion circulaire (Cas 2D)

Pour les simulations, la cellule unitaire de dimensions $900b \times 900b$ est discrétisée en une grille 2D constituée de 2048×2048 pixels de taille $\delta \simeq 0.44b$. La cellule contient en son centre une inclusion circulaire I de rayon $R = 80\delta$. Dans un premier temps, on suppose que le matériau composite contient une densité de dislocations coin individuelle représentée par un vecteur de Burgers $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_1$ et un vecteur ligne $\mathbf{t} = \mathbf{e}_3$. La densité de dislocations correspondante, de norme $\alpha_{13} = b/\delta^2$, est restreinte à un seul pixel et définie de sorte que la relation (3.36) soit vérifiée. Nous considérerons les cas où α_{13} est située soit au centre de l'inclusion ou dans matrice. Ces cas correspondent à $\langle \boldsymbol{\alpha} \rangle \neq 0$. Les contraintes internes dues aux interactions mécaniques entre l'inclusion circulaire et la densité de dislocations coin individuelle seront calculées, respectivement, avec les procédures $P - LS$, $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$. Les profils de contraintes internes obtenus seront comparés aux solutions analytiques rapportées dans [55] et [56]. Afin d'éviter que le dénominateur du critère de conver-

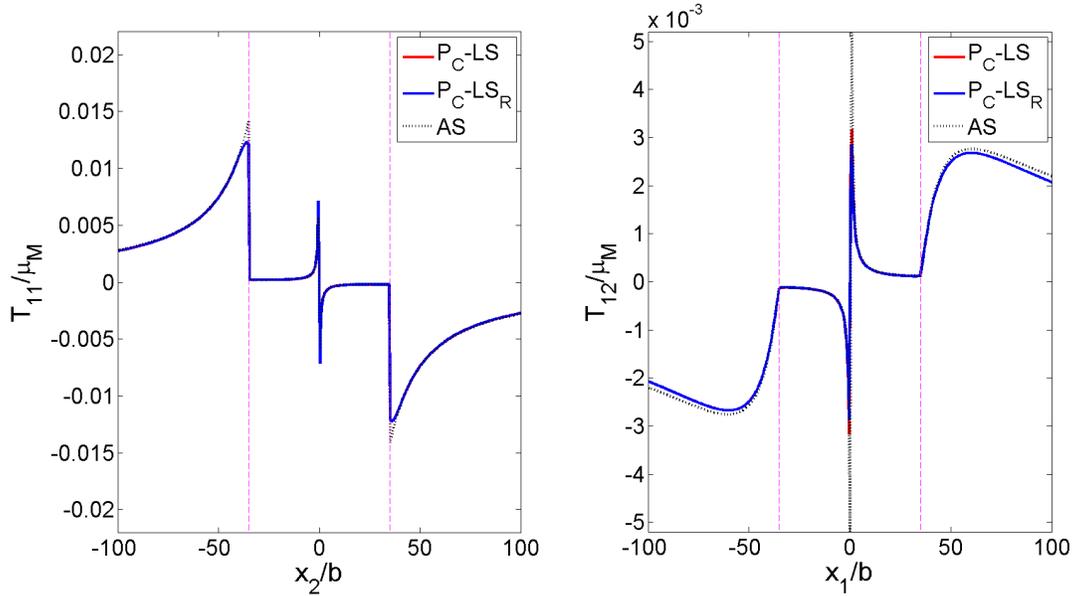
gence soit nul, le matériau composite sera soumis à une seule contrainte macroscopique non nulle de valeur faible par rapport aux contraintes internes : $\bar{T}_{11} = 1MPa$. Une erreur admissible $\epsilon = 10^{-6}$ est suffisante pour avoir une bonne correspondance avec les solutions analytiques.

Densité de dislocations coin au centre de l'inclusion : Comparaisons entre les procédures $P - LS$, $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$

Nous considérons une densité de dislocations α_{13} restreinte à un seul pixel au centre de l'inclusion I . Les profils des contraintes T_{11} et T_{12} normalisées par μ_M et obtenus avec le schéma basique sont comparés aux solutions analytiques rapportées par Dundurs and Sendekyj [56]. Les résultats obtenus pour un contraste mécanique $k = 0.01$ sont reportés sur la figure 3.9. En effet, la figure 3.9(a) montre le développement de fortes oscillations dans les résultats de la procédure $P - LS$, surtout pour la composante T_{11} . Ces résultats montrent que cette procédure n'est pas capable d'appréhender de manière précise les fortes variations du champ de contrainte à l'interface de discontinuité matrice/inclusion et proche des régions du cœur de la dislocation. En revanche, les résultats obtenus avec les procédures $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$ (figure 3.9(b)) sont dénués d'oscillations et approximent parfaitement la solution analytique à la même échelle de résolution.

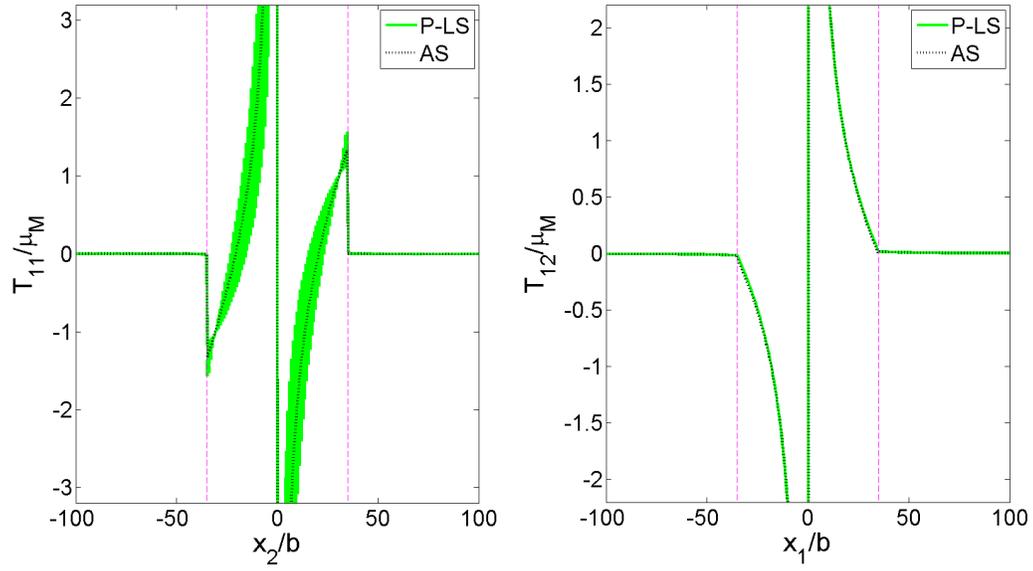


(a)

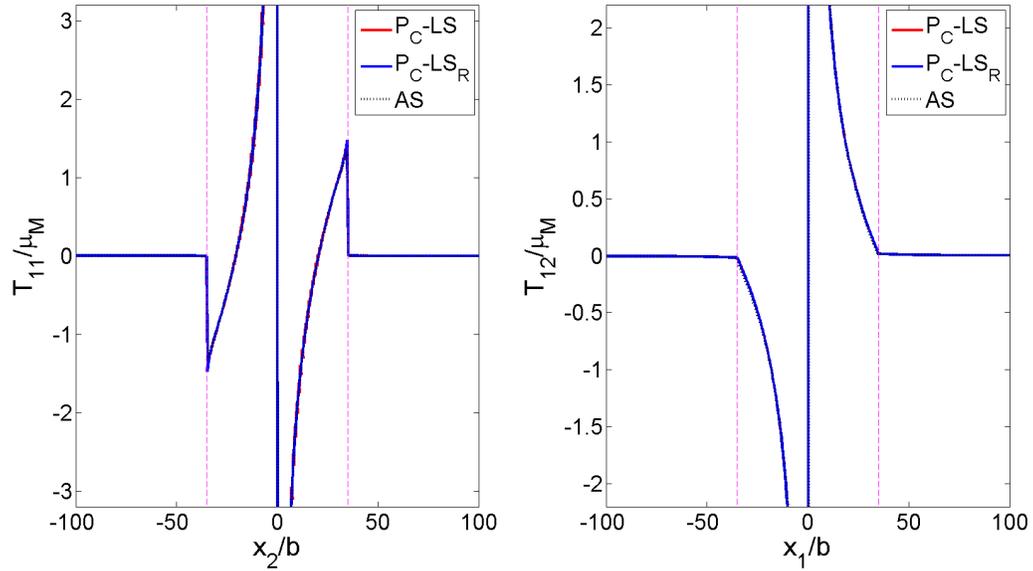


(b)

FIGURE 3.9 – Profils des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel au centre d'une inclusion circulaire de rayon $R = 80\delta$. Pour les simulations, une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels a été adoptée. Les constantes élastiques des phases sont définies par $\mu_I = 2.3001 \times 10^2$ MPa, $\nu_I = 0.3647$ avec $\mu_I/\mu_M = 0.01$, $\nu_M = \nu_I$. L'erreur admissible pour le critère de convergence $\epsilon = 10^{-6}$. (a) : Solution $P - LS$ (lignes continues vertes) avec de fortes oscillations numériques vs. solutions analytiques AS (lignes pointillées). (b) : Solution $P_C - LS_R$ (lignes continues bleues) et solution $P_C - LS$ (lignes continues rouges) vs. solutions analytiques AS (lignes pointillées).



(a)



(b)

FIGURE 3.10 – Profils des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel au centre d'une inclusion circulaire de rayon $R = 80\delta$. Pour les simulations, une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels a été adoptée. Les constantes élastiques des phases sont définies $\mu_I = 2.3001 \times 10^6$ MPa, $\nu_I = 0.3647$ avec $\mu_I/\mu_M = 100$, $\nu_M = \nu_I$. L'erreur admissible pour le critère de convergence $\epsilon = 10^{-6}$. (a) : Solution $P - LS$ (lignes continues vertes) avec de fortes oscillations numériques vs. solutions analytiques AS (lignes pointillées). (b) : Solution $P_C - LS_R$ (lignes continues bleues) et solution $P_C - LS$ (lignes continues rouges) vs. solutions analytiques AS (lignes pointillées).

Les résultats obtenus pour un contraste mécanique $k = 100$ sont montrés sur la figure 3.10. Comme dans le cas précédent (figure 3.9(a)), les résultats obtenus avec la procédure $P - LS$ montrent toujours l'apparition de fortes oscillations (3.10(a)) dues à la forte discontinuité matérielle à l'intérieur de l'inclusion et à l'interface matrice/inclusion. Les résultats de la figure 3.10(b) obtenus avec les procédures $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$ se montrent toujours aussi précis par comparaisons avec la solution analytique.

De ces résultats, il apparaît que la procédure $P - LS$ donne des résultats présentant de fortes oscillations pour le profil de contrainte T_{11} . Par conséquent, cette procédure n'est pas efficace et ne sera plus considérée dans la suite de ce chapitre. En revanche, les procédures $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$ donnent des résultats précis même à l'intérieur de l'inclusion et proche de la région de cœur de la dislocation. Cependant, le zoom du profil de la contrainte T_{11} révèle l'apparition de petites oscillations dans les résultats obtenus par la procédure $P_C - LS$ pour les deux cas de contrastes mécaniques (figure 3.11(a) et figure 3.11(c)). La procédure $P_C - LS_R$ est la seule capable de reproduire la solution analytique sans aucune oscillation (figure 3.11(b) et figure 3.11(d)). Ces observations renforcent les discussions de la sous-section 3.6.1.5 reportées dans [24], où les transformées de Fourier discrètes basées sur le schéma à différences finies centrées à 9 pixels sont efficaces dans la détermination des distorsions élastiques incompatibles (procédure P_C) sans aucune oscillation, et surtout lorsque la densité de dislocations est restreinte à un seul pixel. En outre, l'utilisation du schéma "rotated" pour le calcul du tenseur de Green modifié dans la résolution de l'équation de Lippmann-Schwinger (LS_R) permet également d'éviter le développement des fortes oscillations, ce qui est cohérent avec les résultats numériques rapportés dans [239] pour des composites élastiques seuls.

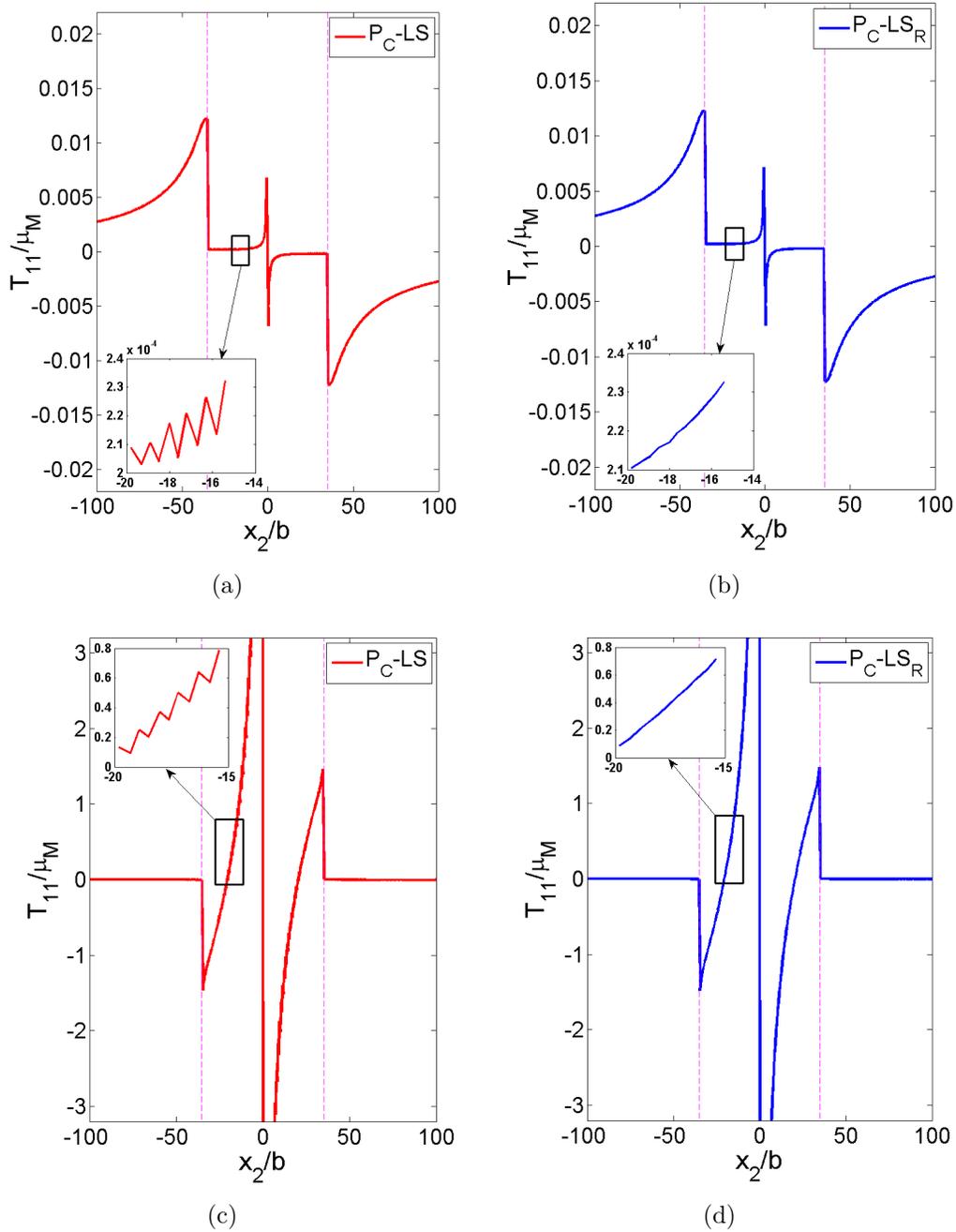


FIGURE 3.11 – Zooms des profils T_{11} (normalisés par μ_M) dans l'inclusion reflétant l'apparition de petites oscillations avec la procédure $P_C - LS$ (lignes rouges continues) contrairement à la procédure $P_C - LS_R$ (lignes bleues continues). (a) : Solution $P_C - LS$ avec $\mu_I/\mu_M = 0.01$, (b) : Solution $P_C - LS_R$ avec $\mu_I/\mu_M = 0.01$, (c) : Solution $P_C - LS$ avec $\mu_I/\mu_M = 100$ et (d) : Solution $P_C - LS_R$ avec $\mu_I/\mu_M = 100$.

La figure 3.12 montre un exemple de cartes 2D des champs de contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) résultant de l'interaction entre une dislocation coin et

une inclusion circulaire. La densité de dislocations est restreinte à un seul pixel au centre de l'inclusion. Les résultats sont obtenus avec la procédure $P_C - LS_R$ pour trois contrastes mécaniques différents : $k = 0.1$ (figures 3.12(a) et (b)), $k = 10$ (figures 3.12(c) et (d)) et $k = 1$ (figures 3.12(e) et (f), matrice homogène sans inclusion). Ces figures montrent l'influence de la rigidité de l'inclusion (pour $k = 0.1$ et $k = 10$ comparé au cas homogène $k = 1$) sur le champ de contrainte qui décrit différentes contraintes images dans le matériau composite. De plus, la continuité et la discontinuité du vecteur traction à l'interface matrice/inclusion du matériau composite est bien reproduite.

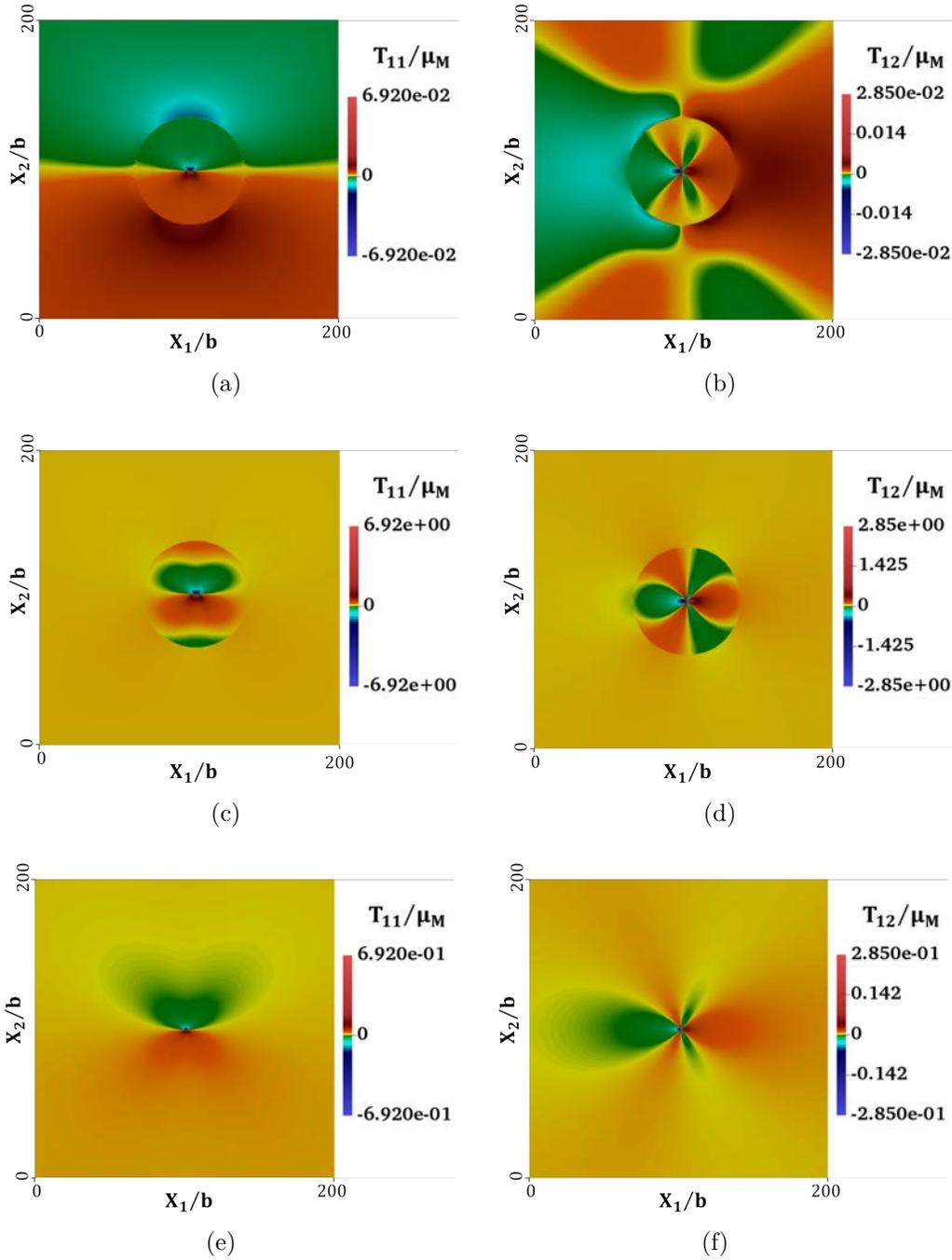


FIGURE 3.12 – Cartes 2D des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues avec la procédure $P_C - LS_R$ dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel au centre d'une inclusion circulaire de rayon $R = 80\delta$, noyée dans une phase matrice discrétisée avec une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels. L'erreur admissible pour le critère de convergence $\epsilon = 10^{-6}$. Les résultats sont obtenus avec la procédure $P_C - LS_R$. (a) et (b) : $\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\mu_I/\mu_M = 0.1$. (c) et (d) : $\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\mu_I/\mu_M = 10$. (e) et (f) : $\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\mu_I/\mu_M = 1$.

Densité de dislocations coin située dans la matrice : Comparaisons des convergences des procédures $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$

Ici, nous comparons l'efficacité de convergence des procédures $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$ en terme de nombre d'itérations nécessaires à l'algorithme numérique pour converger avec différents contrastes mécaniques. Nous considérons donc le cas d'une densité de dislocations coin définie dans la matrice sur un seul pixel situé à une distance de 120δ du centre de l'inclusion le long de l'axe x_1 . Les contrastes mécaniques explorés sont compris entre $k = 10^{-10}$ et $k = 10^3$ et une précision $\epsilon = 10^{-6}$ est adoptée. Le même milieu de référence homogène élastique (i.e. $\beta = 0.505$) est considéré et une contrainte macroscopique très faible $\bar{T}_{11} = 1MPa$ est appliquée de manière à avoir aucun effet sur les profils de contraintes internes. Sur la figure 3.13, on remarque qu'en plus de prédire avec précision les champs de contraintes en présence de discontinuités matérielles, la procédure $P_C - LS_R$ converge beaucoup mieux que la procédure $P_C - LS$ pour les contrastes mécaniques $k < 1$. De plus, elle est capable de converger dans le cas d'une inclusion assimilée à un trou circulaire ou un vide (i.e. $k = 10^{-10}$) après 404 itérations seulement. Ceci n'est pas le cas de la procédure $P_C - LS$ pour lequel l'étude de convergence donne à $k = 10^{-3}$ un nombre d'itérations de 788. En revanche, pour les contrastes mécaniques $k > 1$, les deux procédures $P_C - LS$ et $P_C - LS_R$ donnent pratiquement le même nombre d'itérations (de l'ordre de 5000 itérations pour $k = 10^3$, respectivement, 4729 pour $P_C - LS_R$ et 5710 pour $P_C - LS$).

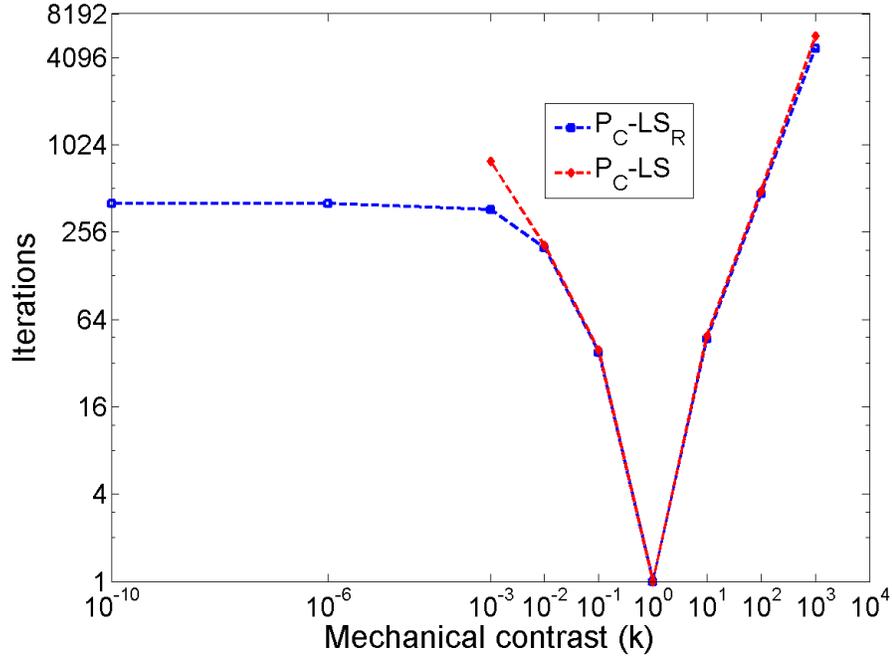


FIGURE 3.13 – Etude comparative des nombres d’itérations nécessaires aux procédures $P_C - LS_R$ et $P_C - LS$ pour converger, selon différents contrastes mécaniques k , dans le cas de l’interaction entre une inclusion circulaire et une densité de dislocations coin située dans la matrice d’un matériau composite. Les simulations ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-6}$ et une contrainte macroscopique imposée non nulle $\bar{T}_{11} = 1MPa$ [53].

Ces variations du nombre d’itérations en fonction des valeurs de k ont été aussi observées dans [239] dans l’étude des matériaux composites hétérogènes, en l’absence des dislocations polarisées. L’avantage de la présente procédure $P_C - LS_R$ est le possible traitement de l’interaction entre un trou (dans le cas de matériaux poreux) et des dislocations avec un nombre d’itération raisonnable, sans toutefois utiliser un schéma itératif plus raffiné que l’algorithme à point fixe (gradient conjugué, schéma accéléré etc). Comme exemple, les contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues avec la procédure $P_C - LS_R$ dans le cas d’une dislocation coin interagissant avec un trou circulaire ($k = 10^{-10}$) sont montrées sur les figures 3.14 et 3.15. Ces deux figures mettent en évidence l’interaction mécanique entre la densité de dislocations et le trou, avec une grande variation de la contrainte entre le trou (contrainte nulle) et la dislocation. En outre, les profils T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenus avec la procédure $P_C - LS_R$ approchent très bien les résultats analytiques issus des formules données par Dundurs et Mura [55].

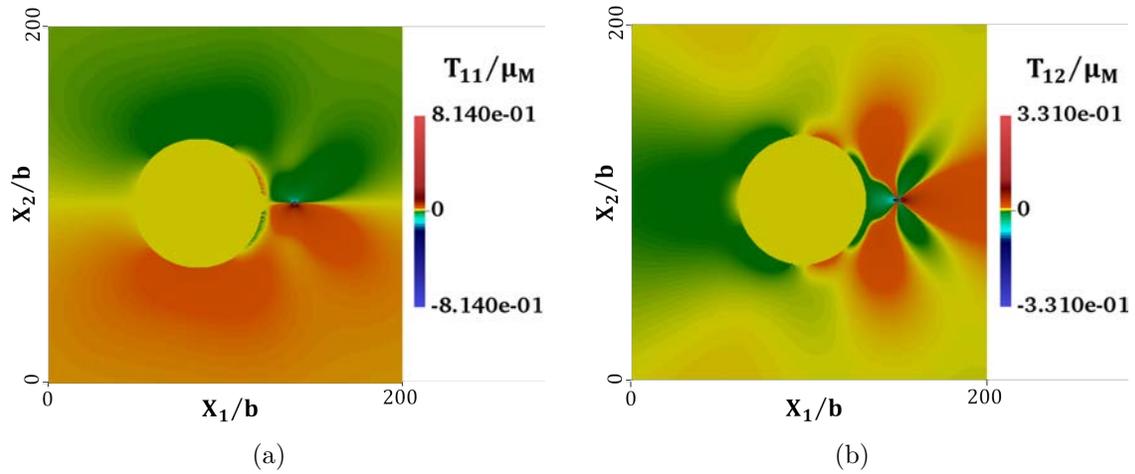


FIGURE 3.14 – Cartes 2D des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues avec la procédure $P_C - LS_R$ dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel situé à une distance de 120δ du centre d'un trou circulaire de rayon $R = 80\delta$, dans une phase matrice ($\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\nu_M = 0.3647$) discrétisée avec une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels. Les simulations ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-6}$ et une contrainte macroscopique imposée non nulle $\bar{T}_{11} = 1MPa$.

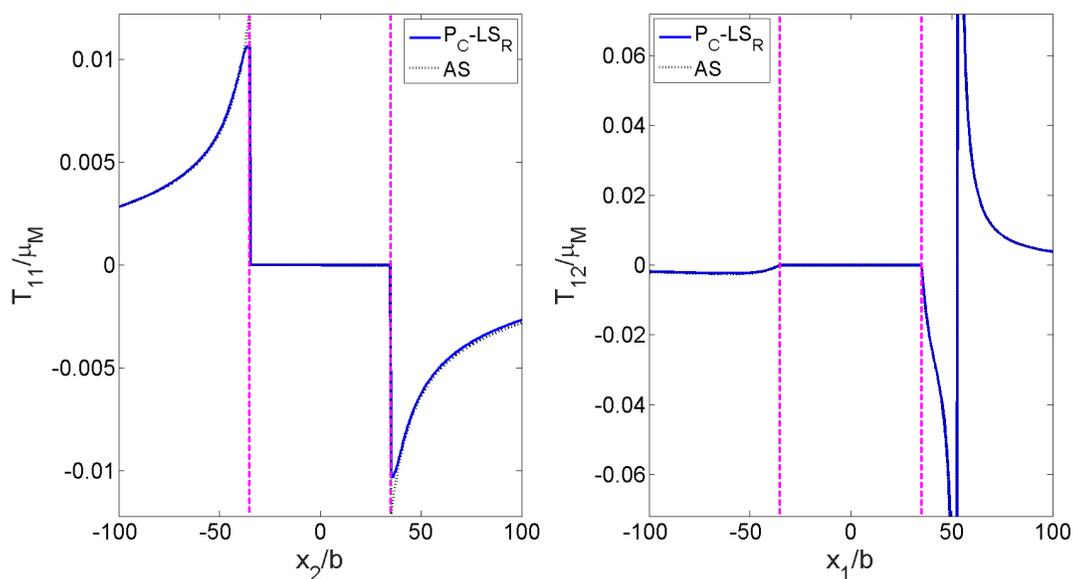


FIGURE 3.15 – Profils des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues avec la procédure $P_C - LS_R$ dans le cas d'une densité de dislocations coin α_{13} définie sur un seul pixel situé à une distance de 120δ du centre d'un trou circulaire de rayon $R = 80\delta$, dans une matrice ($\mu_M = 2.3001 \times 10^4$ MPa, $\nu_M = 0.3647$). La cellule est discrétisée avec une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels. Les simulations ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-6}$ et une contrainte macroscopique imposée non nulle $\bar{T}_{11} = 1\text{MPa}$. Solution $P_C - LS_R$ (lignes continues bleues) vs. solutions analytiques AS (lignes en pointillés).

3.6.2.3 Dipôle de dislocations coins situé dans l'inclusion près de l'interface matrice/inclusion (Cas 2D)

La présente approche FFT avec la procédure $P_C - LS_R$ est maintenant appliquée à un cas physique rencontré dans les matériaux cristallins. Nous considérons donc un dipôle de densités de dislocations coins situé dans l'inclusion circulaire et contraint à l'interface de discontinuité entre l'inclusion et la matrice d'un matériau composite 2D. Dans ce cas, nous avons $\langle \boldsymbol{\alpha} \rangle = 0$. Les densités de dislocations coins α_{13} qui composent le dipôle sont de signes opposés et sont localisées sur un seul pixel. Pour ce cas physique, nous considérons un contraste mécanique $k = 0.1$ entre l'inclusion et la matrice. La précision du critère de convergence est fixée à 10^{-8} . La figure 3.16 compare les profils de contraintes obtenus avec la procédure $P_C - LS_R$ (lignes continues bleues) à ceux obtenus dans le même cas avec la procédure LS_R (lignes continues rouges) à l'absence de dipôle de dislocations comme dans un problème d'élasticité hétérogène pur. La figure 3.16(a) montre le profil de la contrainte T_{11} (normalisée par μ_M) obtenu en imposant une seule contrainte macroscopique non nulle $\bar{T}_{11} = 0.01E_M$. La figure 3.16(b) montre le profil de la contrainte T_{12} (normalisée par μ_M) obtenu avec des contraintes macroscopiques non nulles $\bar{T}_{12} = \bar{T}_{21} = 0.01E_M$. Ces comparaisons révèlent que dans les deux cas, la présence du dipôle modifie remarquablement les champs de contraintes à l'interface matrice/inclusion et à l'intérieur de l'inclusion, avec de fortes variations de contrainte du centre de l'inclusion à l'interface. La solution obtenue avec la procédure LS_R montre l'uniformité des contraintes à l'intérieur de l'inclusion, ce qui est cohérent avec les résultats de la méthode de l'inclusion équivalente d'Eshelby [62, 172]. Dans les deux cas de figures (avec ou sans dipôle), les champs de contraintes sont similaires à longues distances de l'inclusion. En effet, les contraintes dues aux dislocations de signes opposés s'annulent sur des distances à longue portée qui séparent les dislocations, de sorte que seules les contraintes induites par l'hétérogénéité élastique demeurent.

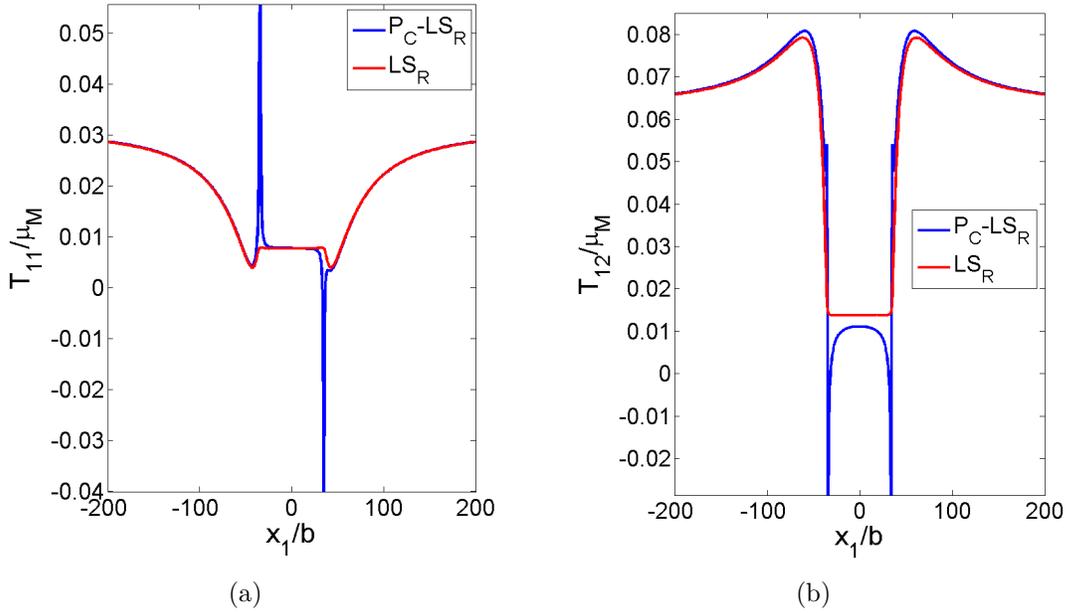


FIGURE 3.16 – Profils des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenus dans le cas d'un dipôle de dislocations coins α_{13} défini sur un seul pixel et contraint à l'interface de discontinuité entre l'inclusion circulaire de rayon $R = 80\delta$ et la matrice. Une grille FFT 2D de 2048×2048 pixels a été adoptée. Les constantes élastiques sont $\mu_I = 2.3001 \times 10^6$ MPa, $\nu_I = 0.3647$ avec $\mu_I/\mu_M = 0.1$, $\nu_M = \nu_I$. Les simulations ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-8}$. (a) : Composante de contrainte T_{11} obtenue avec une contrainte de traction macroscopique $\bar{T}_{11} = 0.01E_M$. (b) : Composante de contrainte T_{12} obtenue avec une contrainte de cisaillement macroscopique $\bar{T}_{12} = \bar{T}_{21} = 0.01E_M$. Solution $P_C - LS_R$ (lignes continues bleues) vs. solution dans le cas hétérogène pur sans dipôle de dislocation obtenue avec la procédure LS_R (lignes continues rouges) [53].

3.6.2.4 Boucle de dislocations autour d'une inclusion cubique (Cas tridimensionnel)

La procédure $P_C - LS_R$ est maintenant appliquée à une configuration 3D, telle qu'une boucle de dislocation autour d'une inclusion cubique noyée dans une phase matrice. L'inclusion cubique de côté $C = 20\delta$ est dix fois plus rigide que la phase matrice ($k = 10$). La cellule unitaire de dimension $900b \times 900b \times 900b$ est discrétisée avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128$ voxels. La boucle polygonale est définie par les vecteurs ligne et de Burgers représentés, respectivement, par \mathbf{t} et \mathbf{b} . La boucle polygonale est composée successivement d'un segment vis positif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_1 , d'un segment coin positif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_2 , d'un segment vis négatif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_1 et d'un segment coin négatif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_2 (figure 3.17). Les segments vis et coin α_{11} et α_{12} ont chacun une valeur de $\pm b/\delta^2$. Chaque coin de la boucle se compose à la fois de densités vis et coin de valeur $\pm\sqrt{2}b/2\delta^2$ afin d'avoir une amplitude uniforme des densités de dislocations en tout point de la boucle.

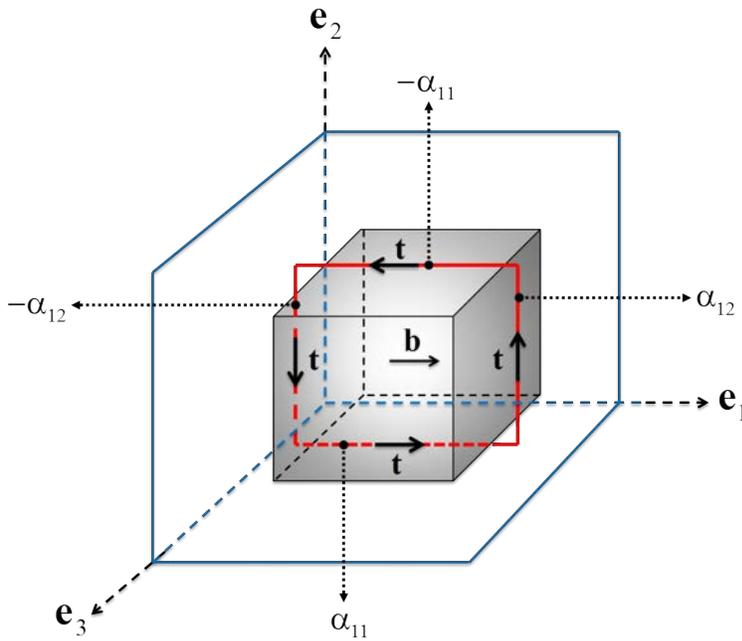


FIGURE 3.17 – Illustration schématique de la boucle rectangulaire de dislocations autour d'une inclusion cubique de côté $C = 20\delta$ noyée dans la phase matrice d'un matériau composite 3D. La boucle rectangulaire de dislocations est définie par les vecteurs ligne et de Burgers représentés respectivement par \mathbf{t} et \mathbf{b} . La boucle est composée successivement d'un segment vis positif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_1 , d'un segment coin positif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_2 , d'un segment vis négatif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_1 et d'un segment coin négatif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_2 .

Le matériau composite 3D ainsi défini est soumis à des contraintes macroscopiques non nulles $\bar{T}_{12} = \bar{T}_{21} = 0.01E_M$. La convergence est atteinte après 60 itérations pour une précision $\epsilon = 10^{-8}$. Les résultats obtenus avec la procédure $P_C - LS_R$ sont exempts d'oscillations et les composantes T_{11} , T_{12} et T_{13} (normalisées par μ_M) sont rapportées dans la figure 3.18. Les contraintes générées par les segments coins peuvent être observées dans le plan $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3)$ au travers de la composante T_{11} (3.18(a)). Les contraintes générées par les segments vis sont montrées dans le plan $(\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ au travers des contraintes T_{12} et T_{13} , respectivement, sur les figures 3.18(b) et (c).

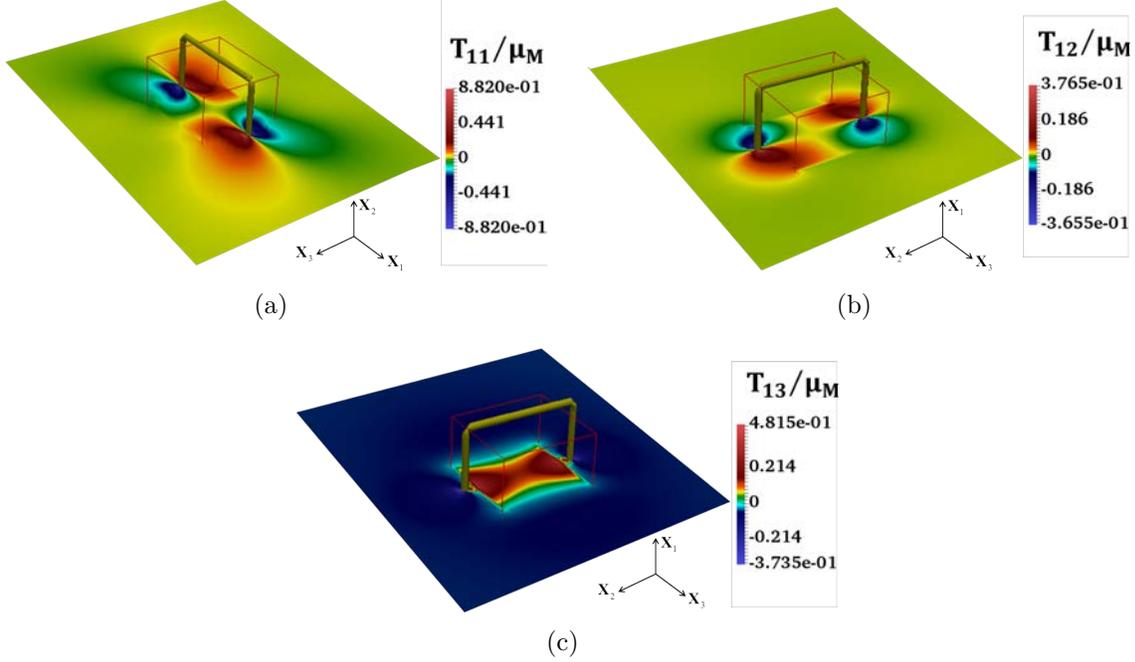


FIGURE 3.18 – Cartes des contraintes T_{11} , T_{33} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues dans le cas d'une boucle rectangulaire de dislocations contraint par une inclusion cubique de côté $C = 20\delta$ noyée dans la phase matrice (figure 3.17) d'un matériau composite 3D discrétisé avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128$ voxels. Les propriétés élastiques de l'inclusion cubique et de la matrice sont données par $\mu_I = 2.3001 \times 10^5$ MPa, $\nu_I = 0.3647$ avec $\mu_I/\mu_M = 10$, $\nu_M = \nu_I$. Les simulations numériques ont été effectuées avec une précision $\epsilon = 10^{-8}$ et une contrainte de cisaillement macroscopique imposée $\bar{T}_{12} = \bar{T}_{21} = 0.01E_M$. (a) : Composante T_{11} dans le plan $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3)$. (b) et (c) : Composantes T_{12} et T_{13} dans le plan $(\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$.

3.6.2.5 Distributions de boucles de dislocations autour des inclusions cubiques dans un matériau composite biphasé : Etude de différents contrastes mécaniques (Cas tridimensionnels)

Dans ces dernières simulations tridimensionnelles, le schéma numérique est appliqué à une microstructure biphasée plus réaliste constituée des boucles de dislocations

autour des précipités cubiques noyés dans une phase matrice. La cellule unitaire est discrétisée avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128 = 2097152$ voxels avec une taille de voxel de 10^{-9} m. La cellule unitaire contient $8 \times 8 \times 8 = 512$ inclusions cubiques. Les constantes élastiques de la phase matrice sont $\mu_M = 124.2$ GPa et $\nu_M = 0.3$. Les constantes élastiques des inclusions (précipités) sont paramétrées comme dans les simulations précédentes avec le contraste mécanique k entre les deux phases, avec $\nu_I = \nu_M$. La taille des inclusions cubiques est de $8 \pm 3 \times 10^{-9}$ m et la fraction volumique des précipités dans la cellule unitaire V est $f_I = V_I/V = 0.15$. Chaque inclusion est entourée de 3 ± 1 boucles prismatiques de dislocations constituées des densités α_{31} (ligne de dislocation suivant la direction \mathbf{e}_1) et α_{32} (ligne de dislocation suivant la direction \mathbf{e}_2), avec un vecteur de Burgers dans la direction \mathbf{e}_3 et de norme $b = 4.05 \times 10^{-10}$ m. La cellule unitaire est soumise à une contrainte macroscopique non nulle de valeur faible par rapport aux contraintes internes : $\bar{T}_{33} = 1$ MPa. Cinq différents contrastes ont été utilisés dans les simulations, notamment $k = 0.9$, $k = 0.1$, $k = 10$, $k = 0.01$ et $k = 100$. Une précision de $\epsilon = 10^{-6}$ est adoptée pour le critère de convergence sur la contrainte, et les nombres d'itérations à la convergence sont, respectivement, 5, 30, 35, 156 et 283 pour les cinq contrastes. Les figures 3.19 (b),(c), (d), (e) et (f) montrent les champs de contraintes internes T_{33} normalisés par μ_M obtenus, respectivement, pour les cinq contrastes mécaniques. Les résultats obtenus sont exempts d'oscillations, malgré la présence des forts gradients spatiaux dans le cas du contraste mécanique $k = 100$. En raison de la polarité des boucles prismatiques de dislocations, les précipités cubiques sont soumis à une contrainte de compression. Comme on peut l'observer sur la figure 3.19, le schéma numérique permet également d'appréhender la dépendance des profils de contraintes internes au contraste mécanique dans le cas des distributions plus complexes de dislocations avec de faibles coûts de calcul en termes d'itérations.

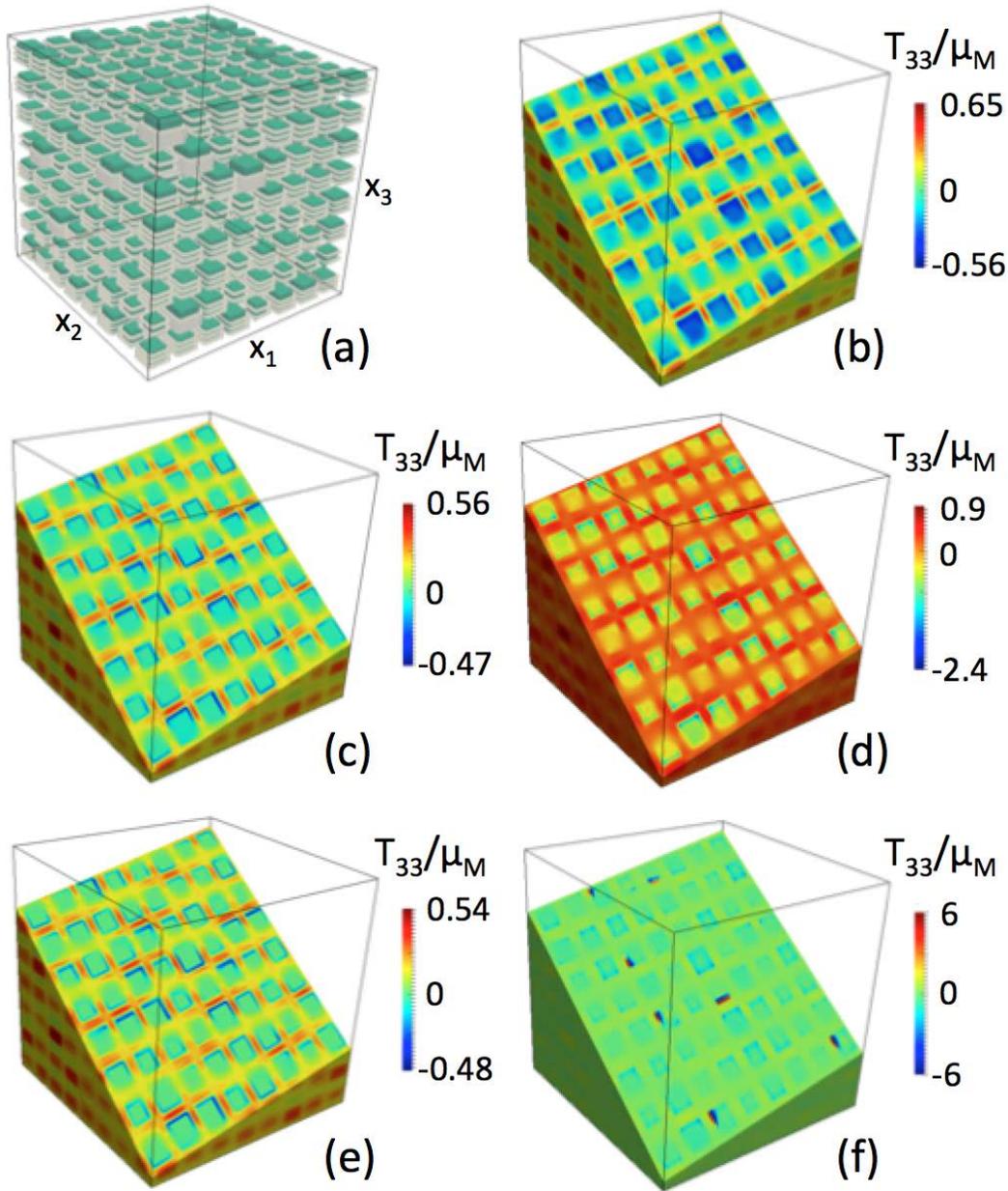


FIGURE 3.19 – Calcul des contraintes internes dans une matrice contenant des inclusions cubiques entourées de boucles polygonales de dislocations. (a) : La cellule unitaire est discrétisée avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128 = 2097152$ voxels avec une taille de voxel de 10^{-9} m et contient $8 \times 8 \times 8 = 512$ inclusions cubiques (couleur verte). La fraction volumique des inclusions est de 0.15. Les inclusions cubiques de taille $8 \pm 3 \times 10^{-9}$ m sont entourées de 3 ± 1 boucles de dislocations (couleur grise) chacune. Les boucles prismatiques de dislocations ont un vecteur de Burgers suivant la direction \mathbf{e}_3 , de norme $b=4.05 \times 10^{-10}$ m. Champs de contraintes internes T_{33} normalisées par μ_M , respectivement, pour cinq contrastes mécaniques différents k : 0.9 (b), 0.1 (c), 10 (d), 0.01 (e) et 100 (f).

3.7 Conclusions

Dans ce chapitre, une approche spectrale basée sur l'algorithme FFT est développée pour résoudre de façon précise et rapide les équations élasto-statiques de la Mécanique des Champs de Dislocations (FDM) dans les milieux périodiques, élastiques, linéaires, homogènes ou hétérogènes. Les champs élastiques dus aux hétérogénéités élastiques et à la présence des densités de dislocations sont obtenus grâce à la résolution des équations de type Poisson et de type Lippmann-Schwinger avec incompatibilités à l'aide d'un algorithme à point fixe (algorithme de base pour la résolution de la déformation élastique compatible).

Trois procédures différentes ont été utilisées pour le calcul des dérivées partielles spatiales de premier et de second ordre. Tout d'abord, la procédure $P-LS$ résultant de l'utilisation de l'approximation classique a été appliquée à la résolution des équations de type Poisson et de type Lippmann-Schwinger. Ensuite, la procédure P_C-LS résultant de l'utilisation de la DFT avec les différences finies centrées à 9 pixels pour la résolution de l'équation de type Poisson, et l'approximation FFT classique pour la résolution de l'équation de type Lippmann-Schwinger. Enfin la procédure P_C-LS_R résultant de l'utilisation de la DFT avec les différences finies centrées à 9 pixels pour la résolution de l'équation de type Poisson, et le schéma "rotated" (basée sur les différences finies sur une grille pivotée de 45°) pour la résolution de l'équation de type Lippmann-Schwinger.

Dans le cas de l'élasticité homogène, la précision de la méthode a été vérifiée dans le cas des dislocations individuelles vis et coin définies sur un seul pixel et par différentes distributions (Gaussienne par exemple). Les résultats FFT ont été donc comparés de manière satisfaisante aux solutions analytiques et aux résultats éléments finis avec des conditions aux limites périodiques. Les simulations ont également montré l'efficacité de la présente approche FFT en terme de temps de calcul par comparaison à la méthode EF.

Dans le cas de l'élasticité hétérogène, des comparaisons ont été effectuées avec les solutions analytiques, dans le cas d'une densité de dislocations coin définie sur un seul pixel au centre d'une inclusion circulaire noyée dans une phase matrice. Ces comparaisons ont montré que la procédure P_C-LS_R est plus précise et plus rapide que les procédures $P-LS$ et P_C-LS . L'efficacité de la procédure P_C-LS_R s'est confirmée par des comparaisons satisfaisantes avec les solutions analytiques dans le cas extrême (contraste infini) d'une dislocation coin interagissant avec un trou circulaire 2D. D'autre part, la comparaison des nombres d'itérations entre les procédures P_C-LS et P_C-LS_R pour des contrastes mécaniques inférieurs à un, a montré la rapidité de convergence de la procédure P_C-LS_R (notamment par rapport à la procédure classique de Moulinec et Suquet).

La procédure P_C-LS_R permet de calculer de manière précise les champs de

contraintes dans les cas physiques rencontrés dans les matériaux cristallins tels qu'un dipôle de dislocation coin localisé autour de l'inclusion et contraint à l'interface de discontinuité matrice/inclusion d'un matériau composite 2D. Par ailleurs, l'approche a été étendue aux simulations 3D, telle qu'une distribution d'inclusions cubiques rigides entourées de boucles de dislocations constituées de segments vis ou de segments coins.

La suite de ce mémoire est organisée comme suit. Dans le chapitre 4, il sera question de résoudre l'équation de transport des densités de dislocations par une approche spectrale de type FFT basée sur l'utilisation des filtres spectraux de type exponentiel. Le chapitre 5 sera consacré au développement d'un modèle complet de type FFT pour la résolution de la FDM phénoménologique et mésoscopique en élasto-viscoplasticité pour la simulation de la plasticité cristalline d'agrégats polycristallins, en y intégrant l'approche FFT sur le transport des densités de dislocations et les schémas centrés et "rotated" pour la résolution des équations d'incompatibilité et d'équilibre, respectivement.

Chapitre 4

Résolution de l'équation de transport des densités de dislocations par une approche spectrale de type Transformée de Fourier Rapide

4.1 Objectifs

Dans le chapitre 3, nous avons développé une approche spectrale de type Transformée de Fourier Rapide (FFT : "Fast Fourier Transform" en anglais) en utilisant la Transformée de Fourier Discrète (DFT : "Discret Fourier Transform" en anglais) pour le calcul des champs élasto-statiques de la Mécanique des Champs de Dislocations (FDM : "Field Dislocations Mechanics" en anglais) en élasticités homogène et hétérogène. Les résultats obtenus ont montré que cette approche spectrale est aussi efficace que les approximations éléments finis en terme de précision mais plus intéressante en terme de temps de calculs.

Motivé par les capacités prédictives et surtout par la rapidité de calcul de cette approche spectrale pour les champs élasto-statiques, nous nous proposons dans ce chapitre de développer une approche spectrale pour résoudre de façon précise et rapide l'équation de transport des densités de dislocations (équation (2.73)). Le développement d'une telle approche pour la résolution de l'équation de transport permettra d'implémenter la théorie de la Mécanique des Champs de Dislocations (FDM : "Field Dislocations Mechanics" en anglais) et la théorie Phénoménologique et Mésoscopique de la Mécanique des Champs de Dislocations (PMFDM : "Phenomenological Mesoscopic Field Dislocations Mechanics" en anglais) par FFT, avec

comme objectif principal, une importante réduction du temps de calcul, comparativement aux techniques éléments finis (sous-sections 2.4.6.1, 2.4.6.2 et 2.5.5.1) [7]. Ainsi, la modélisation de la plasticité des agrégats polycristallins deviendra mieux accessible avec la théorie PMFDM comme on le verra dans le dernier chapitre de ce manuscrit (chapitre 5).

La nature hyperbolique de l'équation de transport des dislocations constitue une source d'instabilités numériques croissantes dues au développement des hautes fréquences comme décrites dans la sous-section 2.5.5.1 dans le cas des approximations éléments finis. Dans les méthodes spectrales, ces instabilités sont renforcées par l'apparition de fortes oscillations qui sont inhérentes aux approximations FFT surtout dans les régions de discontinuités (phénomène de Gibbs). Dans la littérature, des filtres spectraux ont été utilisés pour dissiper ces hautes fréquences qui se développent dans la résolution des équations de type hyperbolique, afin d'obtenir des solutions numériques stables [154, 124, 152, 225, 90, 37, 89, 88, 202]. Ces filtres ont pour principe d'enlever les hautes fréquences, sources d'instabilités, aux points de discontinuités. Dans ce chapitre, nous allons analyser l'influence de deux filtres spectraux passe-bas sur la stabilité numérique et la précision de la solution de l'équation de transport des densités de dislocations à vitesses de dislocations imposées constantes. Notamment, le filtre cosinus [154, 124, 225, 89, 202] et le filtre exponentiel [154, 124, 152, 225, 90, 37, 89, 88] seront analysés.

Le chapitre est organisé comme suit. Dans la section 4.2, l'équation de transport des densités de dislocations sera brièvement rappelée. Cette équation sera résolue dans la section 4.3 par une approche spectrale FFT couplée à l'utilisation des filtres spectraux. L'implémentation numérique de l'approche spectrale filtrée sera également présentée. Dans la section 4.4, l'approche spectrale filtrée est comparée avec la solution exacte et l'approximation éléments finis basée sur le schéma Galerkin/Moindres-Carrés (cf. sous-section 2.5.5.1) [224, 52] dans le cas des problèmes de transport et d'annihilation en 1D. Dans la section 4.5, l'approche spectrale utilisant le filtre exponentiel sera finalement choisie et appliquée à la simulation de l'extension et de l'annihilation des boucles de dislocations en deux et trois dimensions (2D et 3D). Les résultats obtenus seront discutés dans la section 4.6. Il faut noter que ce chapitre a été récemment publié dans le journal "Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering" [52].

4.2 Equation de transport de densités de dislocations

4.2.1 Rappel de l'équation de transport de densités de dislocations

La description continue la plus commode des dislocations est le tenseur densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ de Nye [177], qui opère sur un vecteur unitaire \mathbf{n} pour donner le vecteur de Burgers vrai $\mathbf{b} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n}$ pour toutes les lignes de dislocations présentes dans la surface unitaire perpendiculaire à \mathbf{n} . L'évolution de $\boldsymbol{\alpha}$ est donc déduite de l'équilibre des flux de dislocations aux travers de la surface élémentaire. Dans le cadre d'une déformation infinitésimale, l'équation de transport des densités de dislocations a été donnée par l'équation (2.73) :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot}(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}). \quad (4.1)$$

De plus, $\boldsymbol{\alpha}$ doit satisfaire l'équation de conservation

$$\mathbf{div} \boldsymbol{\alpha} = 0. \quad (4.2)$$

Les équations de types (4.1) et (4.2) sont souvent utilisées dans divers domaines de la physique. En effet, elles sont utilisées dans l'étude des tourbillons dans les fluides non visqueux et dans les matériaux superconducteurs de type II [42, 57]. Complétée par les conditions aux limites, l'équation (4.1) devient une équation de type hyperbolique gouvernant l'évolution des densités de dislocations [80]. La provision de relations constitutives sur la vitesse \mathbf{v} des dislocations en termes de forces motrices complète la description des interactions entre les densités de dislocations dans la théorie de la FDM. Dans ce chapitre, les vitesses des dislocations seront supposées constantes et ne dépendront que du signe des densités de dislocations. Par conséquent l'équation (4.1) est réduite à une équation purement cinématique ne dépendant pas des contraintes non résolues. D'après les équations (4) et (6) des notations, l'équation (4.1) peut encore s'écrire sous la forme suivante :

$$\dot{\alpha}_{ij} = -(\alpha_{ij}v_k)_{,k} + (\alpha_{ik}v_j)_{,k} \quad (4.3)$$

4.2.2 Problème à deux dimensions (2D)

Nous considérons un tenseur densité de dislocations mobile $\boldsymbol{\alpha}$ défini par

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha_{11}\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \alpha_{12}\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2, \quad (4.4)$$

où \otimes représente le produit dyadique. $\boldsymbol{\alpha}$ est constitué d'une composante vis α_{11} et d'une composante coin α_{12} . Les dislocations coins ont leur ligne suivant \mathbf{e}_2 et les dislocations vis suivant \mathbf{e}_1 . Les vitesses des densités de dislocations vis et coin sont, respectivement, v_2 et v_1 , définies normales aux lignes de dislocations. L'équation (4.3) devient :

$$\begin{aligned}\dot{\alpha}_{11} &= -(\alpha_{11}v_2 - \alpha_{12}v_1)_{,2} \\ \dot{\alpha}_{12} &= (\alpha_{11}v_2 - \alpha_{12}v_1)_{,1}.\end{aligned}\tag{4.5}$$

Ces vitesses (de norme constante v_0) sont définies comme suit :

$$\begin{aligned}v_1 &= v_0 \frac{\alpha_{12}}{|\boldsymbol{\alpha}|} \\ v_2 &= -v_0 \frac{\alpha_{11}}{|\boldsymbol{\alpha}|},\end{aligned}\tag{4.6}$$

avec $|\boldsymbol{\alpha}| = \sqrt{\alpha_{11}^2 + \alpha_{12}^2}$. Nous allons utiliser ce cadre bidimensionnel pour simuler l'extension et l'annihilation d'une boucle carrée de dislocations dans son plan de glissement (figure 4.1). La boucle polygonale est définie par les vecteurs ligne et de Burgers représentés respectivement par \mathbf{t} et \mathbf{b} . La boucle polygonale est composée successivement d'un segment vis positif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_1 , d'un segment coin positif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_2 , d'un segment vis négatif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_1 et d'un segment coin négatif avec un vecteur ligne suivant \mathbf{e}_2 . Les densités de dislocations ont chacune une valeur de ± 1.0 sur chaque segment. Chaque coin de la boucle se compose à la fois de densités vis et coin de valeur $\pm\sqrt{2}/2$ afin d'avoir une valeur uniforme de $|\boldsymbol{\alpha}|$ en tout point de la boucle, et aussi satisfaire la condition de conservation $\mathbf{div} \boldsymbol{\alpha} = 0$. Les vitesses des densités vis et coin sont définies, respectivement, par

$$\begin{aligned}\mathbf{v}^s &= (0, v_2, 0) \\ \mathbf{v}^e &= (v_1, 0, 0).\end{aligned}\tag{4.7}$$

Ainsi, la vitesse à chaque coin de la boucle a une direction oblique de 45° . Cette orientation intermédiaire permet une régularisation des flux de dislocations.

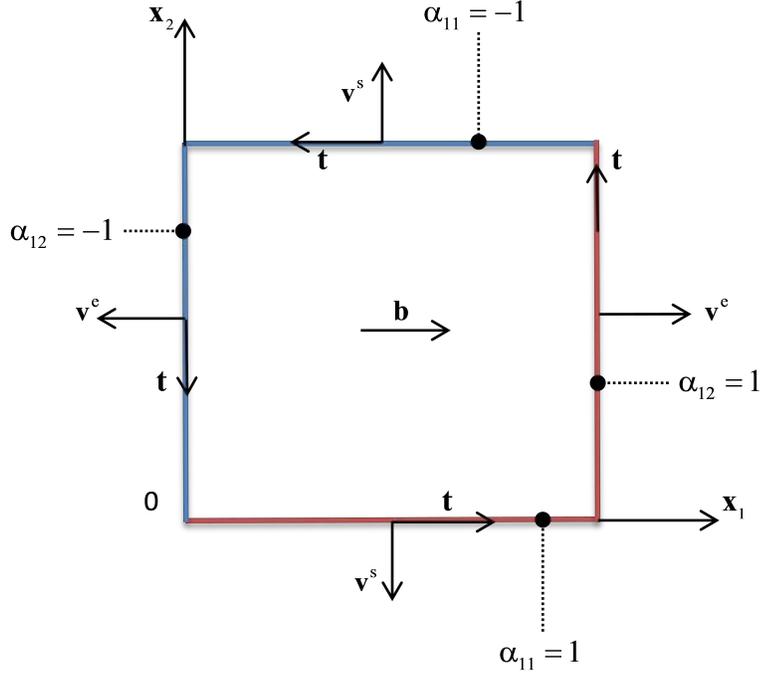


FIGURE 4.1 – Boucle polygonale initiale de dislocation composée successivement d’un segment vis positif en bas, d’un segment coin positif à droite, d’un segment vis négatif en haut et d’un segment coin négatif à gauche. Les vecteurs ligne et de Burgers de la dislocation sont représentés respectivement par \mathbf{t} et \mathbf{b} . Les vitesses des segments coin et vis sont spécifiées respectivement par \mathbf{v}^e et \mathbf{v}^s . Cette configuration suggère une extension équiaxiale de la boucle polygonale.

4.2.3 Problème à une dimension (1D)

La version unidimensionnelle (1D) de l’équation de transport peut être déduite de l’équation (4.5) en ne considérant que des dislocations coins dans le plan de glissement [224, 52]. Ainsi on a :

$$\dot{\alpha}_{12} = -(\alpha_{12}v_1)_{,1} = -v_0 \frac{\alpha_{12}}{|\alpha_{12}|} (\alpha_{12})_{,1}. \quad (4.8)$$

Cette équation peut encore être écrite sous la forme simplifiée suivante :

$$\dot{\alpha} = -v_0 \frac{\alpha}{|\alpha|} (\alpha)_{,x} = -v_0 \operatorname{sgn}(\alpha) \alpha_{,x}, \quad (4.9)$$

avec $\alpha_{12} = \alpha$ et la fonction signe $sgn(\alpha)$ définie par :

$$sgn(\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha > 0 \\ 0 & \text{si } \alpha = 0 \\ -1 & \text{si } \alpha < 0. \end{cases} \quad (4.10)$$

Les phénomènes physiques tels que la propagation des dislocations et l'annihilation de deux dislocations de signes opposés, notamment, deux densités de dislocations définies par deux demi-sinusoides de signes opposés (figure 4.2), peuvent être simulés avec l'équation de transport 1D (équation (4.9)). Dans le processus d'annihilation, les deux dislocations polarisées sont alors comme des ondes qui forment un choc lorsqu'elles se rencontrent, avant de s'annihiler comme montré dans [224, 52].

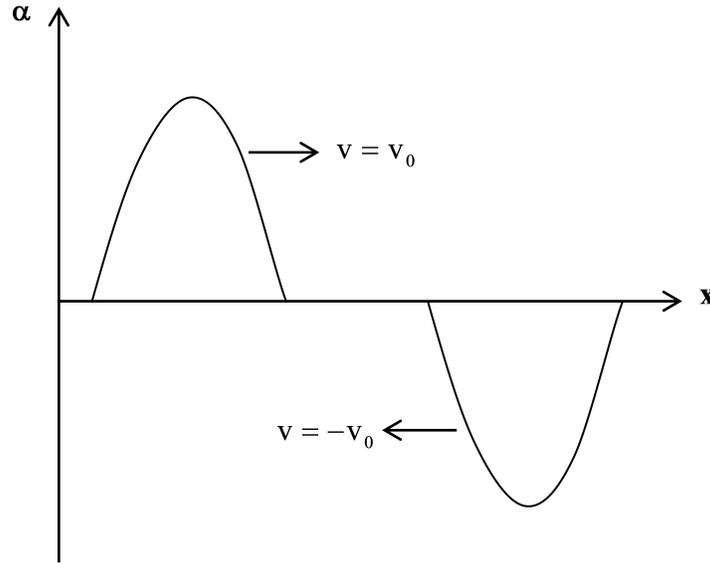


FIGURE 4.2 – Distribution d'une densité de dislocations coin α pour la simulation du mécanisme d'annihilation d'un dipôle de dislocations. La densité est composée de deux demi-sinusoides de signes opposés avec des vitesses de normes constantes v_0 et de signes opposés selon l'équation (4.6).

4.2.4 Formulation explicite de l'équation de transport

La dérivée temporelle dans l'équation (4.9) peut être approximée en utilisant le schéma implicite d'Euler comme dans la sous-section 2.5.5.1. Ainsi, on a :

$$\frac{\alpha^{t+\Delta t} - \alpha^t}{\Delta t} = -v_0 \operatorname{sgn}(\alpha) \frac{\partial \alpha^{t+\Delta t}}{\partial x}, \quad (4.11)$$

avec Δt le pas de temps. Cette équation est un schéma implicite. Cependant, le développement limité en série de Taylor de $\alpha^{t+\Delta t}$ dans les termes de droite de cette équation donne $\alpha^{t+\Delta t} = \alpha^t + \Delta t \dot{\alpha}^t + 0(\Delta t^2)$. L'approximation au premier ordre de $\alpha^{t+\Delta t}$ donne α^t . Ainsi, l'équation (4.11) peut encore se mettre sous la forme explicite suivante d'après [224, 52] :

$$\alpha^{t+\Delta t} = \alpha^t - \Delta t v_0 \operatorname{sgn}(\alpha) \left(\alpha^t \right)_{,x}. \quad (4.12)$$

Le même raisonnement permet de réécrire explicitement l'équation (4.3) comme :

$$\alpha_{ij}^{t+\Delta t} = \alpha_{ij}^t - \Delta t \left[(\alpha_{ij} v_k)^t - (\alpha_{ik} v_j)^t \right]_{,k}, \quad (4.13)$$

ainsi que l'équation (4.5) :

$$\begin{aligned} \alpha_{11}^{t+\Delta t} &= \alpha_{11}^t - \Delta t \left[(\alpha_{11} v_2)^t - (\alpha_{12} v_1)^t \right]_{,2} \\ \alpha_{12}^{t+\Delta t} &= \alpha_{12}^t + \Delta t \left[(\alpha_{11} v_2)^t - (\alpha_{12} v_1)^t \right]_{,1}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

L'équation (4.13) a été résolue numériquement par la méthode EF basée sur le schéma explicite Galerkin/Moindres-Carrés (GLS) développé dans la sous-section 2.5.5.1. La méthode GLS s'est montrée très stable par comparaison avec le schéma Galerkin pure par Varadhan et al. [224]. Cependant, ces techniques EF exigent des ressources considérables de calculs numériques pour les simulations 3D. C'est la raison pour laquelle nous proposons une approche spectrale de type FFT qui doit se montrer aussi stable et précise que les méthodes élément finis, mais plus efficace en terme de temps de calcul et de mémoire.

4.3 Méthode spectrale

4.3.1 Approche spectrale classique pour l'équation de transport

Dans un milieu périodique, l'évolution spatio-temporelle de la transformée de Fourier du tenseur de Nye peut être obtenue par l'équation de transport dans l'espace de Fourier. Ensuite, la distribution du tenseur de Nye dans l'espace réel est

simplement obtenue (à un instant donné) grâce à la transformée de Fourier inverse. Ces calculs peuvent être effectués numériquement avec l’algorithme FFT.

Soit $\tilde{\alpha}(\boldsymbol{\xi})$ la transformée de Fourier continue de $\alpha(\boldsymbol{x})$. Ainsi, la transformée de Fourier de l’équation (4.13) est donnée par :

$$\tilde{\alpha}_{ij}^{t+\Delta t} = \tilde{\alpha}_{ij}^t - \Delta t \, i \, \xi_k \left[\widetilde{(\alpha_{ij} v_k)}^t - \widetilde{(\alpha_{ik} v_j)}^t \right]. \quad (4.15)$$

En partant des équations (4.15) et (4.14), nous déduisons la transformée de Fourier du problème 2D [52] :

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{11}^{t+\Delta t} &= \tilde{\alpha}_{11}^t - \Delta t \, i \, \xi_2 \left[\widetilde{(\alpha_{11} v_2)}^t - \widetilde{(\alpha_{12} v_1)}^t \right] \\ \tilde{\alpha}_{12}^{t+\Delta t} &= \tilde{\alpha}_{12}^t + \Delta t \, i \, \xi_1 \left[\widetilde{(\alpha_{11} v_2)}^t - \widetilde{(\alpha_{12} v_1)}^t \right], \end{aligned} \quad (4.16)$$

et à partir de l’équation (4.12), la transformée de Fourier du problème 1D explicite est :

$$\tilde{\alpha}^{t+\Delta t} = \tilde{\alpha}^t - \Delta t \, i \, \xi \, v_0 \, \text{sgn}(\alpha) \tilde{\alpha}^t. \quad (4.17)$$

Dans la section 4.4, nous montrerons que la résolution de l’équation (4.17) avec l’algorithme FFT classique donne des résultats très instables dûs à l’apparition des oscillations liées au phénomène de Gibbs et aux instabilités de type hyperbolique. Comme rappelé dans l’annexe D, le phénomène de Gibbs provient de l’impossibilité de recouvrir une fonction discontinue à partir de ses coefficients de Fourier. Pour éliminer ces instabilités dues aux hautes fréquences, des filtres spectraux passe-bas seront introduits dans la suite de ce chapitre.

4.3.2 Approche spectrale avec filtres pour la résolution de l’équation de transport des densités de dislocations

Le filtrage est largement utilisé dans les méthodes spectrales pour éliminer les instabilités dans les problèmes hyperboliques [88]. En présence des fonctions discontinues, le filtrage passe-bas stabilise l’approximation numérique en éliminant les hautes fréquences près des régions de discontinuités. L’erreur ponctuelle découlant de l’approximation filtrée est rappelée dans l’annexe E. Le taux de convergence de l’approximation filtrée est uniquement déterminé par l’ordre du filtre qui est à définir et la régularité de la fonction initiale. En particulier, si l’ordre de filtrage augmente avec N (i.e. le nombre de points de Fourier), une précision exponentielle (cf. annexe E) est obtenue en tout point sauf très proche de la discontinuité [225, 89, 88].

Il existe plusieurs types de filtre spectraux, mais les plus efficaces et les plus utilisés sont le filtre cosinus d’ordre 2 et le filtre exponentiel d’ordre $2p$ (p étant un

entier naturel) [225, 89, 88]. Ces deux filtres sont définis respectivement par :

$$\sigma(\eta) = \frac{1}{2} (1 + \cos(\pi\eta)) \quad (4.18)$$

$$\sigma(\eta) = \exp(-\beta(\eta)^{2p}), \quad (4.19)$$

où β et $2p$ représentent respectivement le paramètre d'amortissement des hautes fréquences et l'ordre du filtre exponentiel. Le paramètre η sera défini dans la prochaine sous-section 4.3.3. La comparaison de ces filtres et l'influence des paramètres du filtre exponentiel sur la solution de l'équation de transport seront discutées plus tard. L'application de ces filtres spectraux à l'équation (4.15) nous donne [52] :

$$\tilde{\alpha}_{ij}^{t+\Delta t} = \sigma(\eta) \left[\tilde{\alpha}_{ij}^t - \Delta t i \xi_k \left(\widetilde{(\alpha_{ij} v_k)}^t - \widetilde{(\alpha_{ik} v_j)}^t \right) \right]. \quad (4.20)$$

A partir de l'équation (4.20), les versions filtrées des équations (4.16) et (4.17) sont respectivement données par [52] :

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{11}^{t+\Delta t} &= \sigma(\eta) \left[\tilde{\alpha}_{11}^t - \Delta t i \xi_2 \left(\widetilde{(\alpha_{11} v_2)}^t - \widetilde{(\alpha_{12} v_1)}^t \right) \right] \\ \tilde{\alpha}_{12}^{t+\Delta t} &= \sigma(\eta) \left[\tilde{\alpha}_{12}^t + \Delta t i \xi_1 \left(\widetilde{(\alpha_{11} v_2)}^t - \widetilde{(\alpha_{12} v_1)}^t \right) \right] \end{aligned} \quad (4.21)$$

et

$$\tilde{\alpha}^{t+\Delta t} = \sigma(\eta) \left[\tilde{\alpha}^t - \Delta t i \xi v_0 \operatorname{sgn}(\alpha) \tilde{\alpha}^t \right]. \quad (4.22)$$

Dans la prochaine sous-section, un schéma numérique basé sur la méthode FFT sera développé pour calculer $\tilde{\alpha}^{t+\Delta t}$ dans l'espace de Fourier, puis $\alpha^{t+\Delta t}$ dans l'espace réel par la FFT inverse.

4.3.3 Implémentation numérique

Les équations d'évolution obtenues dans l'espace de Fourier sont maintenant résolues par l'algorithme FFT. Ici, l'algorithme FFTW implémenté dans Matlab[®] a été utilisé [83]. Nous considérons un VER périodique avec les périodes spatiales T_1 , T_2 et T_3 dans les directions x_1 , x_2 et x_3 respectives.

La représentation discrète du vecteur de Fourier ξ_j (introduit dans la sous-section 4.3.3) est donnée par m_j (j est l'ordre de la dimension spatiale, i.e. $j = 1, 2$ ou 3) définie par les équations (3.20) et (3.21) dans le chapitre 3.

Dans les expressions des filtres cosinus et exponentiel, la représentation discrète de η_j est donnée par m_j/N_j [88]. Utilisée plus tard dans ce chapitre, la forme discrète

du filtre exponentiel (paramétré par p et β) dans un problème 3D dans l'espace de Fourier est d'ores et déjà donnée par :

$$\sigma\left(\frac{m_1}{N_1}, \frac{m_2}{N_2}, \frac{m_3}{N_3}\right) = \exp\left(-\beta\left(\left(\frac{m_1}{N_1}\right)^{2p} + \left(\frac{m_2}{N_2}\right)^{2p} + \left(\frac{m_3}{N_3}\right)^{2p}\right)\right). \quad (4.23)$$

Le paramètre d'amortissement est $\beta = -\ln \varepsilon_M$, où ε_M est une petite valeur à déterminer [88]. Dans les sections suivantes, la dimension j est égale à 1 (section 4.4), 2 et 3 (section 4.5) pour les exemples 1-, 2-, 3D, respectivement.

4.4 Validation de la méthode spectrale pour l'équation de transport à une dimension

4.4.1 Configuration à une dimension

L'implémentation numérique développée dans la section précédente est maintenant appliquée à la résolution du problème de transport et d'annihilation d'un dipôle de dislocations dans un milieu périodique 1D. La solution exacte de ce problème a été rapportée dans [224]. La distribution de la densité de dislocations initiale est définie par deux demi-sinusoïdes de même amplitude et de signes opposés, séparées par une distance non dimensionnelle de $7\pi/16$ (figure 4.2). Les deux demi-sinusoïdes se déplacent l'une vers l'autre et forment un choc lorsqu'elles se rencontrent au centre du domaine [224]. Ce choc grandit jusqu'à atteindre deux fois l'amplitude des densités initiales, avant de s'annihiler. Le milieu périodique est discrétisé avec une grille 1D de N points distants de $\delta = 2\pi/N$. La stabilité physique est maintenue lorsque le nombre de Courant $c = \Delta t v_0/\delta$ est inférieur à 1, avec $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ [224, 52]. Cette valeur de la vitesse v_0 a été utilisée dans [224]. Quand bien même qu'elle est irréaliste, elle ne change rien au problème du transport mais seulement le pas de temps. Cette configuration initiale et son évolution seront simulées en résolvant l'équation (4.22). Trois différentes expressions de $\sigma(\eta)$, avec $\eta = m/N$, seront considérées :

1. Cas 1 (approche spectrale classique sans filtre)

$$\sigma\left(\frac{m}{N}\right) = 1 \quad \implies \quad \tilde{\alpha}^{t+\Delta t} = \tilde{\alpha}^t - \Delta t i m v_0 \operatorname{sgn}(\alpha) \tilde{\alpha}^t, \quad (4.24)$$

2. Cas 2 (approche spectrale avec filtre exponentiel)

$$\begin{aligned} \sigma\left(\frac{m}{N}\right) &= \exp\left(-\beta\left(\frac{m}{N}\right)^{2p}\right) \\ \implies \quad \tilde{\alpha}^{t+\Delta t} &= \exp\left(-\beta\left(\frac{m}{N}\right)^{2p}\right) (\tilde{\alpha}^t - \Delta t i m v_0 \operatorname{sgn}(\alpha) \tilde{\alpha}^t), \end{aligned} \quad (4.25)$$

3. Cas 3 (approche spectrale avec filtre cosinus)

$$\begin{aligned} \sigma\left(\frac{m}{N}\right) &= \frac{1}{2} \left(1 + \cos\left(\pi \frac{m}{N}\right)\right) \\ \implies \tilde{\alpha}^{t+\Delta t} &= \frac{1}{2} \left(1 + \cos\left(\pi \frac{m}{N}\right)\right) (\tilde{\alpha}^t - \Delta t i m v_0 \operatorname{sgn}(\alpha) \tilde{\alpha}^t). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Des comparaisons entre ces trois approches seront effectuées afin de montrer l'aptitude des filtres à éliminer les oscillations de Gibbs et les instabilités hyperboliques qui apparaissent dans les solutions obtenues avec l'approche classique (cas 1). La validation de l'approche spectrale avec filtre se fera par comparaison avec la solution exacte et les simulations EF [224, 52].

4.4.2 Approche FFT classique (cas 1)

Tout d'abord, l'approche classique FFT (cas 1) est appliquée à la configuration 1D. La cellule unitaire périodique est discrétisée en $N = 1024$ points avec $c = 0.25$. La figure 4.3 [52] montre l'apparition très tôt des oscillations de Gibbs aux points de discontinuité de la dérivée spatiale, et bien avant l'apparition des instabilités de nature hyperbolique.

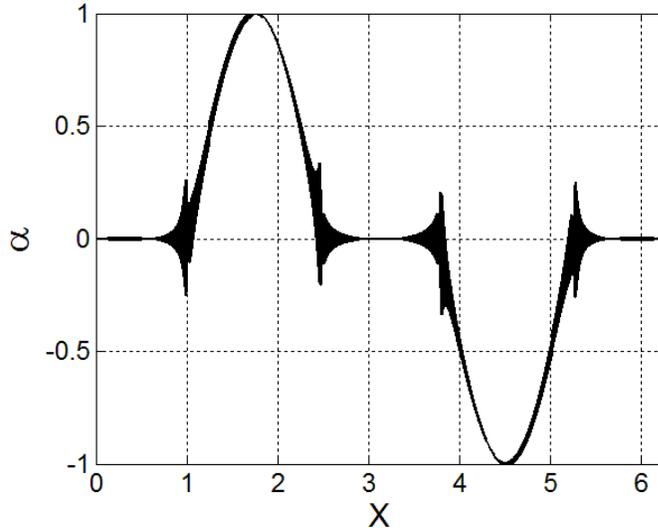


FIGURE 4.3 – Distribution spatiale de la densité de dislocations α obtenue avec l'approche FFT classique sans filtre (cas 1) à un temps $t = 9.203 \times 10^{-11} s$. Apparition des oscillations de Gibbs bien avant l'annihilation des densités de dislocations α de signes opposés. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $c = 0.25$ [52].

4.4.3 Approche spectrale avec le filtre exponentiel (cas 2)

La configuration 1D est maintenant résolue avec l'approche FFT avec le filtre exponentiel. Comme dans le cas classique, la cellule unitaire périodique est discrétisée en $N = 1024$ points avec $c = 0.25$. Pour ces paramètres de simulation et suite à plusieurs essais numériques, dont certains sont reportés ci-dessous, nous réussissons à obtenir une approximation stable et très proche de la solution exacte avec un filtre d'ordre $p = 1$ et $\varepsilon_M = 0.2$. Les évolutions de la densité de dislocations α sont comparées à la solution exacte [224] dans la figure 4.4 [52] à divers instants, jusqu'à la complète annihilation. Cette figure montre que l'approximation FFT utilisant le filtre exponentiel est stable et précise par comparaison avec la solution exacte.

L'influence des paramètres du filtre exponentiel (p et ε_M) sur l'évolution de la densité de dislocations α sera étudiée dans cette configuration.

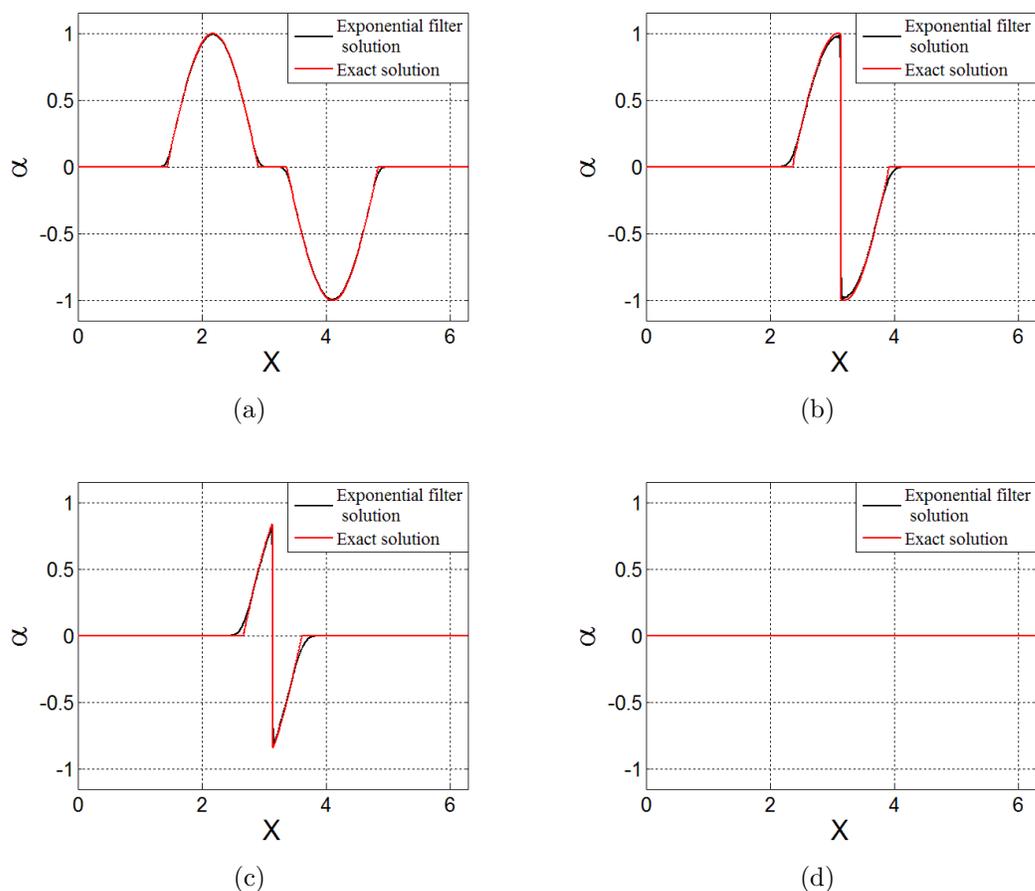


FIGURE 4.4 – Distribution spatiale de la densité de dislocations α dans la configuration 1D à quatre étapes différentes jusqu'à l'annihilation complète : (a) : $t = 9.2 \times 10^{-10} s$, (b) : $t = 2.76 \times 10^{-9} s$, (c) : $t = 3.37 \times 10^{-9} s$ et (d) : $t = 4.93 \times 10^{-9} s$. Comparaisons entre l'approche spectrale avec le filtre exponentiel et la solution exacte. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$, $c = 0.25$ et $\varepsilon_M = 0.2$ [52].

4.4.3.1 Influence de p

La précision du filtre exponentiel dépend de son ordre représenté par le nombre entier $2p$. Pour montrer l'influence de p sur l'évolution de α , nous considérons l'exemple de la figure 4.4, mais cette fois-ci avec p choisi égal à 2 et 3.

D'après les figures 4.5(a) et 4.5(c), ces valeurs donnent des résultats instables, bien avant annihilation. Les expériences numériques ont montré que les instabilités sont plus prononcées lorsque p augmente. Par ailleurs, bien que des études numériques ont montré que $p = 2$ donne des meilleurs résultats pour différentes conditions initiales [154, 124], nous trouvons dans notre cas que $p = 1$ est la valeur la plus ap-

propriété et correspond à un filtre de second ordre.

4.4.3.2 Influence de ε_M

L'influence de ε_M sur la solution au moment du choc est montrée dans les figures 4.5(b) et 4.5(d) [52]. Partant des paramètres de référence de la figure 4.4, deux valeurs $\varepsilon_M = 0.5$ et $\varepsilon_M = 10^{-2}$ ont été essayées. Nous remarquons que ε_M influence significativement l'amplitude et la stabilité de la solution. Pour des grandes valeurs telle que $\varepsilon_M = 0.5$, la figure 4.5(b) montre l'apparition des instabilités. Au contraire, on assiste à un suramortissement lorsque la valeur de ε_M est inférieure à $\varepsilon_M = 0.2$ (valeur optimale, voir figure 4.4(b)) comme dans le cas de $\varepsilon_M = 10^{-2}$ (figure 4.5(d)). Nous concluons que plus ε_M est petite, plus la solution est stable, mais au prix d'un suramortissement progressif de la solution sur le long terme. D'où la nécessité de trouver des valeurs optimales qui permettent d'obtenir une solution stable tout en la lissant le moins possible. Pour le cas du problème d'annihilation 1D, une liste des valeurs optimales de ε_M que nous avons obtenues, en fonction des nombres de points et de Courant (N, c) est rapportée dans l'annexe F (cf. [52]).

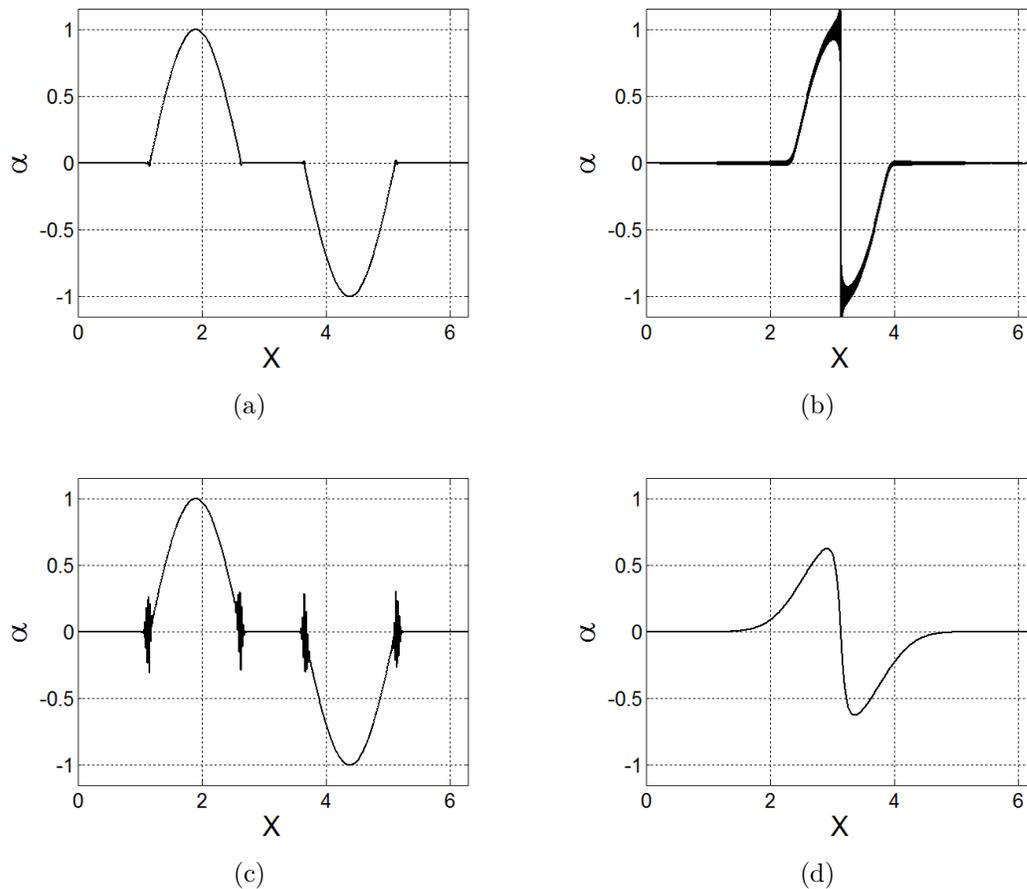


FIGURE 4.5 – A gauche : influence de p sur la stabilité numérique du problème d’annihilation 1D avec $\varepsilon_M = 0.2$ à $t = 3.68 \times 10^{-10} s$ bien avant annihilation : (a) : $p = 2$ et (c) : $p = 3$. A droite : influence de ε_M avec $p = 1$, dès l’apparition du choc à $t = 2.76 \times 10^{-9} s$: (b) : $\varepsilon_M = 0.5$ et (d) : $\varepsilon_M = 10^{-2}$. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $c = 0.25$ [52].

4.4.4 Approche spectrale FFT avec le filtre cosinus (cas 3)

Le filtre cosinus est un filtre passe-bas de second ordre utilisé pour amortir les hautes fréquences associées aux oscillations de Gibbs et aux instabilités de nature hyperbolique [154, 124, 89, 202]. Contrairement au filtre exponentiel, le filtre cosinus ne possède pas de paramètre spécifique. Les expériences numériques ont montré la stabilité et la précision de ce filtre lorsqu’on résout le problème de la configuration 1D. Il est intéressant de noter qu’il y a une équivalence entre le filtre cosinus et le filtre exponentiel comme montré sur la figure 4.6. En effet, le développement limité en série de Taylor au second ordre des expressions du filtre cosinus et du filtre

exponentiel du second ordre donne, respectivement :

$$\frac{1}{2}(1 + \cos(\pi\eta)) \simeq \frac{1}{2} \left(1 + 1 - \frac{(\pi\eta)^2}{2} \right) + 0 \left(\frac{(\pi\eta)^4}{4!} \right) = 1 - \frac{(\pi\eta)^2}{4} + 0 \left(\frac{(\pi\eta)^4}{4!} \right) \quad (4.27)$$

et

$$\exp(-\beta(\eta)^2) \simeq 1 + (-\beta\eta^2) + 0 \left(\frac{(-\beta(\eta)^2)^2}{2!} \right) = 1 - (\beta\eta^2) + 0 \left(\frac{(-\beta(\eta)^2)^2}{2!} \right). \quad (4.28)$$

Lorsque $\beta = \frac{\pi^2}{4}$, les équations (4.27) et (4.28) deviennent équivalentes. Dans ce cas, on a :

$$\varepsilon_M = \exp(-\beta) = \exp\left(\frac{\pi^2}{4}\right) \simeq 0.08. \quad (4.29)$$

D'après les mêmes expériences numériques, l'amortissement de la solution α est plus prononcée avec le filtre cosinus pour des faibles nombres de points de Fourier ($N < 512$). D'autre part, des instabilités apparaissent aussi pour les grands nombres de Courant ($c > 0.75$). Cependant, il est possible, avec le filtre exponentiel d'ordre deux, de réduire l'amortissement et avoir une stabilité, en ajustant la valeur du paramètre ε_M (cf. annexe F) pour les grands nombres de Courant. Pour ces raisons, seul le filtre exponentiel du second ordre sera utilisé dans les comparaisons de l'approche spectrale filtrée avec les approximations éléments finis.

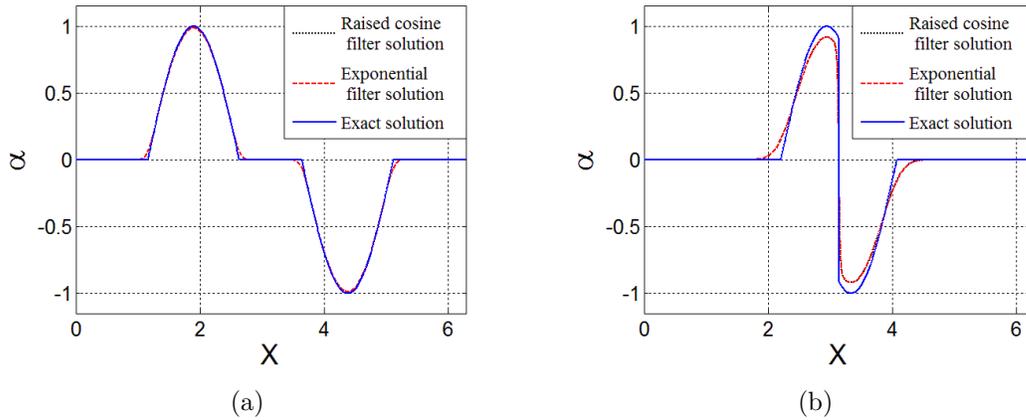


FIGURE 4.6 – Distribution spatiale de la densité de dislocations lors du problème d'annihilation 1D à deux étapes différentes : (a) : $t = 3.68 \times 10^{-10}s$, (b) : $t = 9.81 \times 10^{-9}s$. Equivalence entre le filtre cosinus et le filtre exponentiel. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$, $c = 0.25$ et $\varepsilon_M \simeq 0.08$ [52].

4.4.5 Comparaison avec les résultats éléments finis (cas de l’annihilation)

Ici, nous comparons l’approche spectrale avec le filtre exponentiel avec les méthodes éléments finis Moindres-Carrés (LS) et Galerkin/Moindres-Carrés (GLS) développées par Varadhan et al. [224] et qui ont déjà été présentées dans le chapitre 2 (cf. sous-section 2.5.5.1), dans le cas du problème de transport et d’annihilation des dislocations en 1D. Dans ces schémas éléments finis, la formulation LS introduit naturellement un terme de diffusion proportionnelle au pas de temps au carré. Ce terme permet d’amortir les instabilités oscillatoires et stabilise la solution (cf. sous-section 2.5.5.1). Si cet amortissement est insuffisant dans les régions de forts gradients spatiaux, une diffusion artificielle peut être ajoutée au travers du facteur de diffusion γ (cf. équation (2.101)).

Dans une première série de calculs, le problème précédent sur le transport et l’annihilation en 1D des dislocations est toujours considéré avec $N = 1024$, $c = 0.25$ et $\varepsilon_M = 0.2$. Les deux méthodes éléments finis (LS et GLS) utilisent les éléments linéaires continus. Pour l’implémentation éléments finis, le logiciel Matlab[®] a été utilisé avec un facteur de diffusion $\gamma = 0.1$. D’après la figure 4.7 [52], on note une bonne approximation entre l’approche spectrale FFT avec le filtre exponentiel et les méthodes éléments finis LS ($\kappa = 0$) et GLS ($\kappa = 1$), à chaque instant jusqu’à l’annihilation complète de la densité de dislocations.

Dans une seconde série de calculs, nous considérons toujours le problème de la configuration 1D, mais cette fois-ci avec une densité de dislocations initiale α définie seulement avec une seule demi-sinusoïde. Le but est de tester et comparer la capacité des méthodes spectrales et EF à conserver cette sinusoïde durant une longue distance de transport, sans trop la lisser. Pour cela, nous devons mesurer et comparer l’écart par rapport à la solution exacte lors d’un long mouvement. La comparaison des erreurs quadratiques a été effectuée entre la solution exacte et l’approche spectrale filtrée d’une part, et les méthodes éléments finis de l’autre, lorsque la densité de dislocations se déplace sur une distance de 1.5π .

Une évolution monotone de l’erreur quadratique a été observée pour les trois méthodes. Dans chaque cas, la méthode LS est moins précise. Une étude comparative entre l’approche spectrale et la méthode GLS a été résumée sur la figure 4.8 [52]. Nous pouvons donc observer les évolutions de la valeur des erreurs quadratiques (figures 4.8(a) et (b)) et du temps de calcul (figures 4.8(c) et (d)) en fonction des nombres de Courant c et de pixel/élément N , à la fin de la simulation du transport, et pour chaque méthode (FFT et GLS).

La caractéristique commune à ces deux approches est l’amélioration de la précision pour les grandes valeurs de N . Pour les petites valeurs de N , la précision de l’approche spectrale FFT est meilleure que celle de la méthode des éléments finis

GLS lorsque de faibles valeurs de c ($c < 0.25$) sont considérées. Inversement, la méthode EF-GLS est plus précise que l'approche spectrale FFT pour les grandes valeurs de c ($0.25 \leq c < 0.55$). En termes de temps de calcul, l'approche spectrale filtrée est plus efficace que la méthode éléments finis GLS. En effet, sur un single core Intel(R), core (TM), i7 (4800 MQ, 2.7 GHz, 8 Go), le temps de calcul pour la simulation de l'annihilation des dislocations en 1D avec la méthode FFT avec le filtre exponentiel est de 4.5 s alors qu'il atteint 165 s pour les méthodes EF avec 1024 éléments. Cette différence entre les temps de calculs sera encore plus considérable dans les calculs 2D et 3D, comme rapporté dans la suite du chapitre.

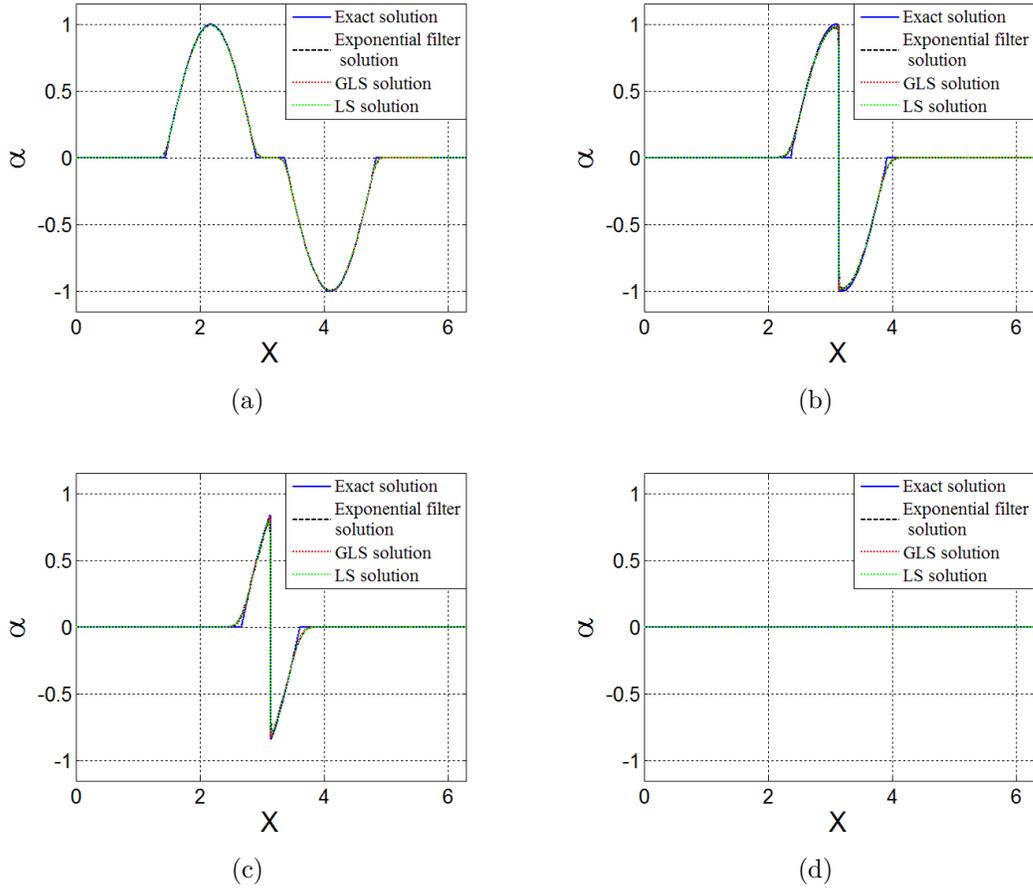


FIGURE 4.7 – Distribution spatiale de la densité de dislocations α dans la configuration 1D à quatre étapes différentes jusqu'à l'annihilation complète : (a) : $t = 9.2 \times 10^{-10} s$, (b) : $t = 2.76 \times 10^{-9} s$, (c) : $t = 3.37 \times 10^{-9} s$ et (d) : $t = 4.93 \times 10^{-9} s$. Comparaisons entre l'approche spectrale avec le filtre exponentiel et les simulations LS et GLS. Les paramètres de la simulation sont $N = 1024$, $\delta = 2\pi/N$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$, $c = 0.25$, $\varepsilon_M = 0.2$ et $\gamma = 0.1$ [52].

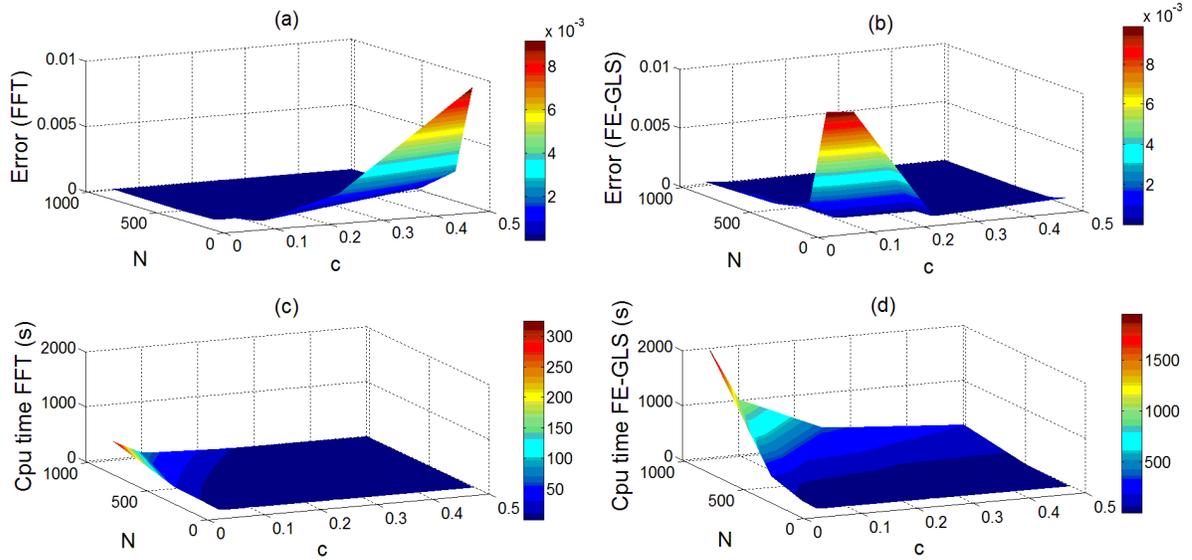


FIGURE 4.8 – Evolution du temps CPU et de l’erreur quadratique (par comparaison avec la solution exacte) en fonction du nombre de Courant c et du nombre de pixel/élément N , obtenue avec l’approche FFT avec le filtre exponentiel (à gauche) et la méthode élément fini GLS (à droite) pour la simulation 1D du transport d’une sinusoïde sur un long trajet [52].

4.5 Application aux boucles de dislocations bidimensionnelles et tridimensionnelles

4.5.1 Extension et annihilation d’une boucle polygonale en deux dimensions

Dans cette section, nous considérons la boucle polygonale de la figure 4.1, dans un domaine $2\pi \times 2\pi$ périodique discrétisé par 512×512 pixels. Les vitesses v_1 et v_2 sont définies par l’équation (4.6) avec $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$. Afin d’optimiser la stabilité de la méthode EF-GLS, le nombre de Courant est choisi petit i.e. $c = 0.05$. Pour le filtre exponentiel, la valeur optimale de ε_M utilisée pour ce problème 2D est 0.6. La différence avec la valeur utilisée dans le problème d’annihilation 1D ($\varepsilon_M = 0.2$) est due au fait que les deux problèmes sont différents de par le nombre de Courant, le maillage et le profil initial de la densité de dislocations. L’approximation par éléments finis utilise des éléments triangulaires avec interpolation linéaire, deux triangles emboîtés formant un élément carré équivalent à un pixel dans l’approximation FFT. Les

simulations GLS sont effectuées avec le solveur GMRES (Gradient Minimal Residual en anglais) dans le code FreeFem++ [97]. Le paramètre de diffusion est choisi égal à 0.05. L'évolution de la norme de la densité de dislocations $|\boldsymbol{\alpha}| = \sqrt{\alpha_{11}^2 + \alpha_{12}^2}$ est reportée sur la figure 4.9 [52]. On peut donc observer l'extension de la boucle jusqu'à sa complète annihilation dans le domaine spatial, due aux conditions aux limites périodiques. Ainsi, les segments coin et vis s'annihilent complètement, même dans les coins du domaine sans laisser de débris résiduels. L'approche filtrée FFT et la méthode EF-GLS donnent toutes les deux des résultats très similaires jusqu'à l'annihilation complète de la boucle de dislocation. Il est aussi important de souligner un étalement et un amortissement identique du cœur de dislocation avec les deux techniques.

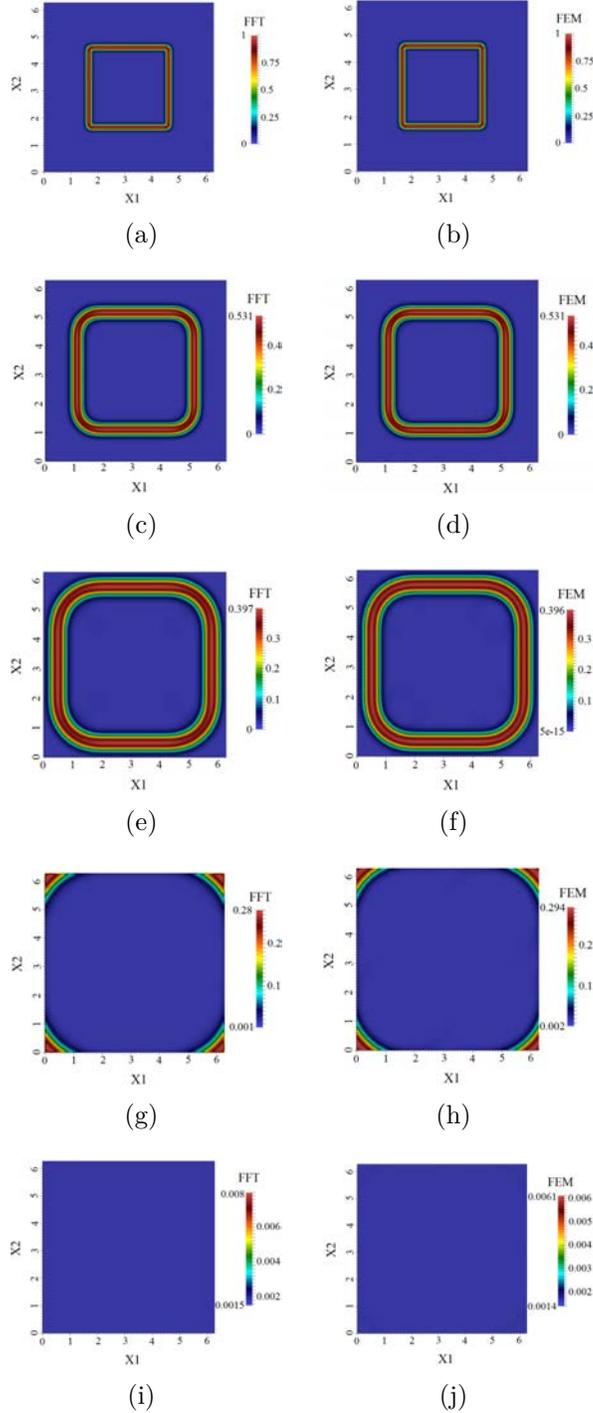


FIGURE 4.9 – Extension de la boucle polygonale décrite dans la figure 4.1 à cinq étapes différentes jusqu’à la complète annihilation due aux conditions aux limites périodiques, avec l’approche spectrale FFT avec le filtre exponentiel et la méthode élément fini GLS : Les résultats FFT sont à gauche et les résultats EF-GLS sont à droite. (a, b) : $t = 0s$, (c, d) : $t = 1.104 \times 10^{-9}s$, (e, f) : $t = 2.33 \times 10^{-9}s$, (g, h) : $t = 4.54 \times 10^{-9}s$ et (i, j) : $t = 7.363 \times 10^{-9}s$. Les paramètres de la simulation sont $N_{tot} = 512 \times 512$ pixels, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $c = 0.05$. La distribution spatiale de $|\alpha|$ est obtenue avec $\varepsilon_M = 0.6$ pour l’approche FFT et $\gamma = 0.05$ pour la méthode EF-GLS [52].

4.5.2 Rétrécissement d'une boucle polygonale en trois dimensions

Pour une dernière validation de l'approche spectrale FFT, nous considérons une boucle de dislocations plus complexe en 3D. Le but est de montrer que (i), la solution demeure stable dans les situations non triviales d'extension et d'annihilation de dislocations et (ii), le temps de calcul est beaucoup plus faible que celui obtenu avec la méthode EF-GLS. La configuration initiale de la boucle de dislocations est montrée sur la figure 4.10 [52]. La boucle est donc constituée de deux demi-boucles rectangulaires, respectivement dans les plans de normales \mathbf{e}_2 et \mathbf{e}_3 . La demi-boucle rectangulaire de normale \mathbf{e}_3 , en commençant par la gauche, est successivement constituée d'un segment coin négatif le long de \mathbf{e}_2 , d'un segment vis positif le long de \mathbf{e}_1 et d'un segment coin positif le long de \mathbf{e}_2 . La seconde demi-boucle rectangulaire de normale \mathbf{e}_2 , en commençant par la droite, est successivement constituée d'un segment coin positif le long de \mathbf{e}_3 , d'un segment vis négatif le long de \mathbf{e}_1 et d'un segment coin négatif le long de \mathbf{e}_3 . Tout comme dans le cas de la boucle polygonale 2D, les composantes de la densité de dislocations ont chacune une valeur de ± 1.0 sur chaque segment. Chaque coin de la boucle se compose à la fois de densités vis et coin de valeur $\pm\sqrt{2}/2$, afin d'avoir une valeur uniforme de $|\boldsymbol{\alpha}|$ en tout point de la boucle et régulariser le flux de dislocations dans les coins. Les vitesses sont définies par l'équation (4.6) et spécifiées sur la figure 4.10 de telle sorte que les segments coins étendent la boucle suivant \mathbf{e}_1 et les segments vis la rétrécissent suivant \mathbf{e}_2 et \mathbf{e}_3 .

Pour cette simulation, nous considérons un domaine de $2\pi \times 2\pi \times 2\pi$ périodique, discrétisé avec $128 \times 128 \times 128$ voxels. Les paramètres de la simulation sont $c = 0.25$, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $\varepsilon_M = 0.2$. L'évolution de la norme de la densité de dislocations $|\boldsymbol{\alpha}| = \sqrt{\alpha_{11}^2 + \alpha_{12}^2 + \alpha_{13}^2}$ est reportée dans la figure 4.11 à divers instants [52]. Nous observons le rétrécissement progressif de la boucle jusqu'à sa complète annihilation. Les segments coins étendent la boucle le long de \mathbf{e}_1 jusqu'à leur complète annihilation due aux conditions aux limites périodiques. Les deux segments vis rétrécissent la boucle lorsqu'ils se déplacent l'un vers l'autre, se rencontrent au centre du domaine et s'annihilent sans laisser de débris résiduels, ce qui montre la fiabilité de la méthode spectrale à décrire le phénomène d'annihilation de dislocations polarisées et de signes opposés.

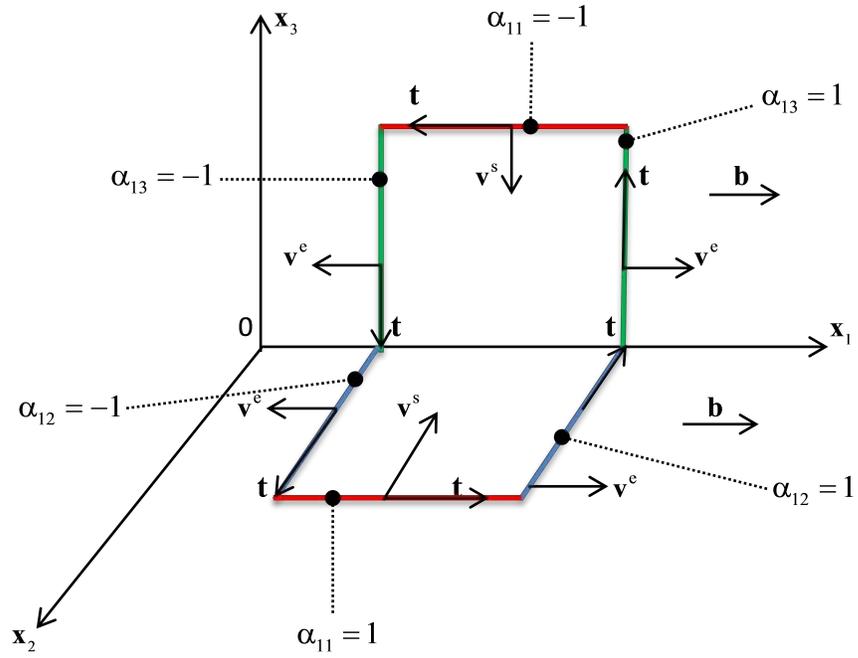


FIGURE 4.10 – Boucle initiale de dislocation composée de deux demi-boucles rectangulaires respectivement dans les plans de normales \mathbf{x}_2 et \mathbf{x}_3 . Les vecteurs ligne et de Burgers sont représentés respectivement par \mathbf{t} et \mathbf{b} . Les vitesses de chaque segment sont spécifiées par \mathbf{v}^s pour les segments vis et par \mathbf{v}^e pour les segments coins [52].

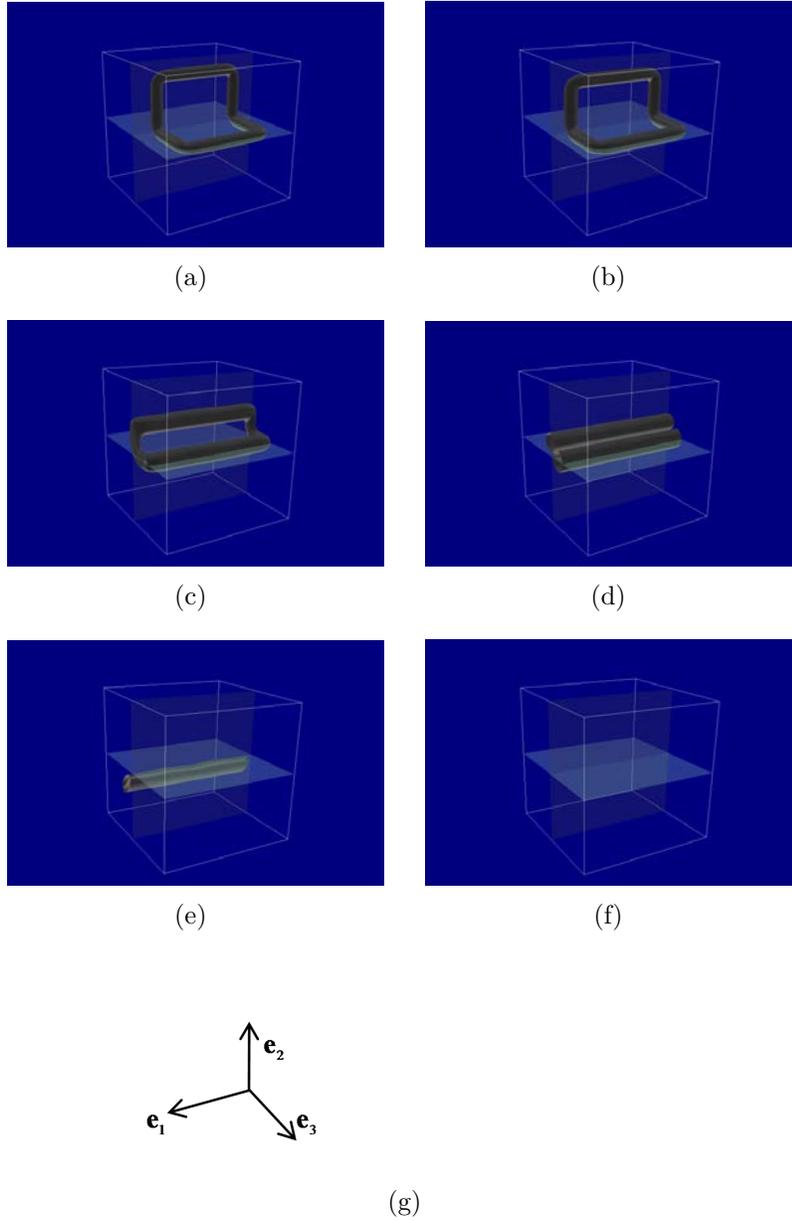


FIGURE 4.11 – Rétrécissement d’une boucle polygonale 3D (comme définie dans la figure 4.10) obtenue avec l’approche spectrale FFT filtrée. Les résultats numériques sont montrés à six différentes étapes jusqu’à la complète annihilation de la boucle : (a) : $t = 0s$, (b) : $t = 4.9087 \times 10^{-10}s$, (c) : $t = 2.4543 \times 10^{-9}s$, (d) : $t = 3.6815 \times 10^{-9}s$, (e) : $t = 7.3631 \times 10^{-9}s$ et (f) : $t = 1.2271 \times 10^{-8}s$. Les paramètres de la simulation sont $N_{tot} = 128 \times 128 \times 128$ voxels, $v_0 = 5 \times 10^8 s^{-1}$ et $c = 0.25$. La distribution spatiale de $|\alpha|$ est obtenue avec $\varepsilon_M = 0.2$ [52].

4.6 Discussion

La validation de l’approche spectrale FFT avec le filtre exponentiel dans la configuration 1D a révélé sa capacité à résoudre l’équation de transport des dislocations. Une augmentation du nombre de point de Fourier N conduit généralement à une meilleure précision. Cette tendance est expliquée par l’équation (D.3) de l’annexe D. L’influence des paramètres du filtre exponentiel a été étudiée dans la section 4.4 au travers des expériences numériques. Il a été montré que p et ε_M influencent significativement la précision et la stabilité de l’approximation numérique. La valeur $p = 1$ est retenue comme valeur optimale. Pour un nombre de point de Fourier N donné, il est donc important de trouver la valeur optimale de ε_M , de telle sorte que les instabilités disparaissent tout en assurant en même temps un amortissement et un étalement aussi minimales que possible de la solution. Quand ε_M est choisi plus grand que la valeur optimale, des instabilités apparaissent dans la solution, et lorsqu’il est choisi plus petit, la solution est suramortie. Le choix de la valeur de ε_M se voit très dépendant de N , mais aussi du nombre de Courant c (i.e. le pas de temps) et du profil initial de la densité de dislocations (voir Annexe F). La valeur optimale de ε_M décroît lorsque c croît jusqu’à 1. Il est à noter que le paramètre ε_M peut varier d’un problème physique à l’autre et en fonction des conditions initiales. En effet, les paramètres optimisés numériquement étaient par exemple $\varepsilon_M = 10^{-4}$ et $p = 2$ dans le cas des problèmes hyperboliques linéaires de Cauchy à coefficients constants avec une condition initiale discontinue [124].

Dans le cas 1D, la comparaison entre le filtre exponentiel du second ordre et le filtre cosinus a révélé que malgré le fait que le filtre cosinus soit performant pour l’élimination des instabilités, il ne garantit pas une précision suffisante pour les petits nombres de points de Fourier et les grands nombres de Courant, contrairement au filtre exponentiel du second ordre qui est très bien adapté à ces cas ($p = 1$). L’approche explicite spectrale exponentiellement filtrée et les techniques explicites éléments finis LS et GLS [224] se sont révélées stables et précises pour la résolution de l’équation de transport des densités de dislocations. Une étude approfondie sur la précision a montré la sensibilité des trois méthodes au nombre de Courant c et au nombre de points/éléments N . Cette étude a aussi révélé que la méthode EF-GLS est moins précise que l’approche spectrale FFT avec le filtre exponentiel pour des faibles nombres de Courant ($c \leq 0.25$). Par contre, elle est plus précise que l’approche spectrale filtrée pour des grandes valeurs de c ($0.25 \leq c < 0.55$). Par ailleurs nos expériences numériques ont révélé une instabilité de la méthode GLS pour $c > 0.55$, contrairement à l’approche spectrale qui s’est montrée stable dans ces cas de figure.

Dans le cas de l’extension et l’annihilation d’une boucle polygonale 2D, on a observé des résultats stables et proches avec l’approche spectrale FFT et la méthode GLS (figure 4.9). Cette comparaison indique que pour un petit nombre de Courant ($c = 0.05$), il n’y a pas de différence de précision entre l’approche FFT filtrée et la

méthode EF-GLS. Ce résultat est différent des conclusions provenant des simulations 1D (voir figure 4.8). Cette différence provient du caractère singulier de la densité de dislocations initiale utilisée dans le problème 2D. En effet, l'utilisation des valeurs discrètes de ± 1.0 sur chaque pixel pour définir la boucle de dislocations initiale 2D nécessite pour des raisons de stabilité l'étalement du cœur de la dislocation pour les deux approches, contrairement aux simulations 1D où la dislocation est distribuée sur plusieurs points au niveau des profils sinusoïdaux. Comme déjà mentionné dans [224], de faibles nombres de Courant doivent être utilisés afin d'assurer la stabilité de la méthode EF-GLS.

En dernier lieu, la présente approche spectrale est très intéressante en terme de temps de calcul, particulièrement pour les grands nombres de pixels et dans les simulations 3D, ce qui est intéressant pour les calculs à grands nombres de degré de liberté. En effet, en considérant un single core Intel(R), core (TM), i7 (4800 MQ, 2.7 GHz, 8 Go), le temps de calcul pour la simulation de l'annihilation des dislocations en 1D avec la méthode FFT filtrée est de 4.5 s alors qu'il atteint 165 s pour les méthodes EF avec 1024 éléments. Les temps de calculs en 2D et 3D mettent bien en évidence l'attractivité de l'approche FFT. Pour le même ordinateur, le temps de calcul pour la simulation de l'extension de la boucle 2D est de 819.30s ($\simeq 13$ min) alors qu'il atteint 49062 s ($\simeq 13$ h38 min) avec la méthode EF. Le tableau 4.1 présente le temps de calcul pour un seul pas de temps dans le cas de la simulation de la boucle polygonale 3D avec la présente approche spectrale et la méthode EF-GLS utilisant les éléments linéaires tétraédriques et le solveur GMRES (Gradient Minimal Residual en anglais) dans le code FreeFEM++ [97]. Nous pouvons remarquer que l'approche spectrale FFT est au moins 1300 fois plus rapide que la méthode EF pour $N_{tot} = 128^3$. Dans ce même tableau, les temps de calcul pour $N_{tot} = 256^3$ et $N_{tot} = 512^3$ ne sont pas donnés pour la méthode EF-GLS à cause de l'insuffisance de mémoire de l'ordinateur.

N_{tot}	CPU times	
	FFT	EF-GLS
32^3	0.032	20.110
64^3	0.081	164.82
128^3	0.590	1354.3
256^3	5.310	-
512^3	56.00	-

TABLE 4.1 – Comparaison des temps de calcul (en secondes) entre l'approche FFT et la méthode EF-GLS, en fonction du nombre de voxels (N_{tot}) et pour un seul pas de temps, dans le cas de l'annihilation et du rétrécissement de la boucle polygonale 3D [52].

4.7 Conclusions

Une approche spectrale numérique basée sur l'algorithme FFT est développée pour résoudre de façon rapide, stable et précise, l'équation de transport de type hyperbolique régissant l'évolution spatio-temporelle du tenseur densité de dislocations dans la théorie FDM.

Deux filtres passe-bas, en l'occurrence, le filtre cosinus et le filtre exponentiel ont été utilisés pour contrôler les oscillations inhérentes aux méthodes de Fourier et les instabilités numériques de nature hyperbolique.

La comparaison des filtres spectraux a révélé que, bien que, le filtre cosinus soit efficace pour éliminer les instabilités, il n'offre pas la possibilité de recouvrir la précision avec les faibles nombres de points de Fourier et les grands nombres de Courant, tandis que le filtre exponentiel de second ordre est plus flexible et plus adapté à ces cas. En effet, il contient deux paramètres à ajuster.

La convergence et la stabilité de ces approches spectrales ont été étudiées au travers d'expériences numériques. Pour le filtre exponentiel, une étude de paramètres a été effectuée sur la précision et la stabilité de la solution. Cette étude a porté sur le paramètre d'amortissement ε_M , l'ordre du filtre $2p$ donné par p , le nombre N de points de Fourier et le nombre de Courant c . Ainsi, des valeurs optimales de ε_M , en fonction de p , N et c , sont rapportées dans le cas de l'annihilation d'un dipôle de dislocations.

La stabilité et la précision de l'approche spectrale filtrée ont été confirmées par de fructueuses comparaisons avec la solution exacte et les approximations EF-LS et EF-GLS dans le cas des problèmes 1D de propagation et d'annihilation des dislocations, et avec les résultats GLS dans le cas de l'extension de la boucle polygonale 2D. En outre, la présente approche FFT peut s'étendre très facilement aux simulations 3D, comme dans le cas de l'extension et du rétrécissement de la boucle polygonale 3D. Ces simulations ont également montré que la présente approche FFT est plus efficace que les techniques éléments finis en terme de temps de calcul.

Le prochain chapitre est consacré à l'implémentation des équations complètes de la PMFDM élasto-visco-plastique dans un cadre spectral, en couplant la présente approche FFT sur le transport des dislocations à celle développée dans le chapitre 3 sur la résolution des champs élasto-statiques. L'objectif poursuivi est la simulation de la plasticité non-locale à base de GNDs à l'échelle mésoscopique dans les composites et les polycristaux par la théorie PMFDM avec des temps de calculs raisonnables.

Chapitre 5

Implémentation numérique de la mécanique des champs de dislocations dans un cadre Elasto-Visco-Plastique FFT à l'échelle mésoscopique

5.1 Objectifs

Ce chapitre s'intéresse au développement d'une technique numérique de type transformée de Fourier rapide ("Fast Fourier Transform" en anglais ou FFT) pour la résolution des équations de la version réduite de la mécanique des champs de dislocation à l'échelle mésoscopique (RPMFDM : Reduced Phenomenological Field Dislocation Mechanics en anglais) dans le cadre d'une formulation Elasto-Visco-Plastique (EVP). Cette théorie réduite reprend les équations de la PMFDM mais sans la décomposition de Stokes-Helmholtz (cf. section 2.7).

La technique numérique sera basée sur la formulation EVP-FFT à champ complet développée par Lebensohn et al. [141] pour la prédiction des champs micromécaniques dans les polycristaux. Cette formulation EVP-FFT est basée sur la plasticité cristalline conventionnelle et la résolution de l'équation d'équilibre des contraintes repose sur l'utilisation du schéma itératif FFT de type Lagrangien augmenté développé par Michel, Moulinec et Suquet [161].

Notre développement consiste donc à étendre la formulation EVP-FFT de Lebensohn et al. [141] à la théorie RPMFDM par l'implémentation de l'équation de transport des densités de GNDs et des conditions de continuité tangentielle de la

vitesse de distorsion plastique aux interfaces de discontinuité de type joint de phase (dans le présent chapitre) ou joint de grains (en perspective). Nous pourrions utiliser ce modèle pour étudier les effets de la formation et l'évolution des structures de dislocations, ainsi que de la prise en compte des conditions interfaciales sur l'activité plastique dans les matériaux à structure Cubique à Faces Centrées (CFC) à l'échelle mésoscopique. A cette échelle, l'équation de transport des densités de dislocations inclut la contribution des dislocations statistiquement stockées au travers du terme \mathbf{L}^P (équation (2.103)) et dont le rotationnel donne un terme de source/puit de densités de GNDs pour accommoder l'incompatibilité de la déformation plastique. La vitesse des GNDs n'est plus considérée constante comme dans le chapitre 4, mais dépend maintenant de l'état de contrainte et des densités de GNDs.

Le chapitre sera organisé comme suit : La section 5.2 sera consacrée au rappel des équations de la formulation EVP-FFT de Lebensohn et al. [141] et de l'algorithme de résolution basé sur le schéma du Lagrangien augmenté. La section 5.3 sera consacrée à l'extension du modèle EVP-FFT à la RPMFDM. Les lois adoptées pour la vitesse des GNDs seront présentées, de même que la résolution de l'équation de transport et le nouvel algorithme numérique. Cette section se termine par l'implémentation des conditions de continuité tangentielle aux interfaces d'un matériau composite biphasé. Dans la section 5.4, la nouvelle formulation EVP-RPMFDM-FFT sera appliquée aux microstructures à canaux/précipités pour les métaux à structure cubique à faces centrées (CFC) où on étudiera par exemple la formation des structures de GNDs et les effets d'écroutissage cinématique. Le modèle sera également appliqué aux polycristaux à structure CFC. La section 5.5 sera dédiée à la conclusion et aux perspectives.

5.2 Rappel des équations du modèle EVP-FFT

5.2.1 Relations constitutives et vitesse de déformation plastique

Dans l'algorithme numérique EVP-FFT, Lebensohn et al. [141] ont adopté un schéma implicite d'Euler pour l'intégration temporelle d'une loi constitutive élasto-visco-plastique. Le but du schéma implicite de Lebensohn et al. [141] est d'obtenir l'équilibre des contraintes avec une vitesse de déformation plastique qui est constitutivement reliée au tenseur des contraintes au même instant, et d'avoir aussi des résultats numériques plus stables, avec des pas de temps plus grands qu'avec un schéma explicite. L'expression, en petites déformations, du tenseur des contraintes et du tenseur des déformations totales à l'instant $t + \Delta t$ (avec Δt le pas temps) est

donnée par les relations constitutives suivantes [141] :

$$\begin{aligned}\mathbf{T}^{t+\Delta t} &= \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{e,t+\Delta t} = \mathbf{C} : \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{t+\Delta t} - \boldsymbol{\varepsilon}^{p,t} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p,t+\Delta t}(\mathbf{T}^{t+\Delta t})\Delta t \right) \\ \boldsymbol{\varepsilon}^{t+\Delta t} &= \mathbf{C}^{-1} : \mathbf{T}^{t+\Delta t} + \boldsymbol{\varepsilon}^{p,t} + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p,t+\Delta t}(\mathbf{T}^{t+\Delta t})\Delta t,\end{aligned}\quad (5.1)$$

où \mathbf{T} est le tenseur des contraintes de Cauchy, \mathbf{C} est le tenseur des modules élastiques. $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^e$, $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ et $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ représentent, respectivement, la déformation totale, élastique et plastique, et la vitesse de déformation plastique. Par soucis de simplicité, les indices supérieurs $t + \Delta t$ seront omis dans la suite de ce chapitre, et seuls les champs correspondant à l'instant t seront explicitement indiqués.

Dans la formulation EVP-FFT, la vitesse de déformation plastique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ prend la forme de l'équation (1.24) [141] :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \frac{1}{2} \left(L_{ij}^p + L_{ji}^p \right). \quad (5.2)$$

où

$$\mathbf{L}^p = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s \mathbf{m}^s \otimes \mathbf{n}^s, \quad (5.3)$$

avec N le nombre de système de glissement, $\dot{\gamma}^s$ est le taux de glissement plastique sur le système de glissement s , défini par la direction de glissement \mathbf{m}^s et la normale au plan de glissement \mathbf{n}^s . Le taux de glissement est défini par la relation (1.33) :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}^0 \left(\frac{|\tau^s|}{\tau_c^s} \right)^n \text{sgn}(\tau^s). \quad (5.4)$$

où $\dot{\gamma}^0$ est la vitesse de glissement de référence, τ_c^s est la cission critique et τ^s représente la cission résolue définie par :

$$\tau^s = \mathbf{R}^s : \mathbf{T}, \quad (5.5)$$

où $R_{ij}^s = \frac{1}{2} \left(m_i^s n_j^s + m_j^s n_i^s \right)$ représente le tenseur de Schmid défini par l'équation (1.26). La cission critique τ_c^s est actualisée au travers de la loi d'érouissage de type Voce ([218]) définie par l'équation (1.41) :

$$\dot{\tau}_c^s = \frac{d\hat{\tau}_c^s}{d\Gamma} \sum_{s'} a^{ss'} \dot{\gamma}^{s'}. \quad (5.6)$$

$\hat{\tau}_c^s$ et Γ sont respectivement définis par les équations (1.39) et (1.40).

En l'absence de forces de volume et d'effets d'inertie, l'équation d'équilibre des contraintes dans une cellule unitaire périodique V est donnée par la relation (2.19) :

$$\mathbf{div} \mathbf{T} = 0 \quad \text{dans } V. \quad (5.7)$$

Cette équation est résolue au travers de l'équation intégrale de Lippmann-Schwinger écrite en terme de champ de déformation totale inconnue $\boldsymbol{\varepsilon}$ sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{E} - \left(\boldsymbol{\Gamma}^0 \star \boldsymbol{\tau} \right) (\mathbf{x}), \quad (5.8)$$

où $\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ est la valeur moyenne de $\boldsymbol{\varepsilon}$ dans V et $\boldsymbol{\tau}$ représente le tenseur de polarisation des contraintes défini de manière indicielle par :

$$\tau_{ij} = \delta C_{ijkl} \varepsilon_{kl}. \quad (5.9)$$

A la place du schéma basique comme dans l'annexe A, l'équation (5.9) sera résolue par un schéma itératif de type "Lagrangien augmenté" [161] qui est plus rapide à converger que le schéma basique [166, 167]. Les détails liés à cette résolution sont présentés dans la section suivante.

5.2.2 Résolution de l'équation d'équilibre dans l'espace de Fourier par le schéma Lagrangien augmenté

La transformée de Fourier de l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger (équation (5.8)) s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) &= -\tilde{\boldsymbol{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \tilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{0}) &= \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Dans la résolution de l'équation (5.10) par le schéma itératif de type Lagrangien augmenté, les champs de contrainte et de déformation à une itération (n) donnée sont approximés, respectivement, par les champs auxiliaires $\lambda_{ij}^{(n)}$ et $e_{ij}^{(n)}$. Dans ce cas, le tenseur de polarisation des contraintes s'écrit sous la forme suivante :

$$\tau_{ij}^{(n)} = \lambda_{ij}^{(n)} - C_{ijkl}^0 e_{kl}^{(n)}. \quad (5.11)$$

Le champ de déformation auxiliaire à l'itération (n + 1) s'écrit :

$$\begin{aligned} \tilde{e}_{ij}^{(n+1)}(\boldsymbol{\xi}) &= -\tilde{\boldsymbol{\Gamma}}_{ijkl}^0(\boldsymbol{\xi}) \tilde{\tau}_{kl}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \tilde{e}_{ij}^{(n+1)}(\mathbf{0}) &= E_{ij}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Une expression alternative (en utilisant la compatibilité du champ $\mathbf{e}^{(n)}$), permet d'utiliser la transformée de Fourier du champ de contrainte à la place du champ de polarisation sous la forme suivante [161] :

$$\begin{aligned} \tilde{e}_{ij}^{(n+1)}(\boldsymbol{\xi}) &= \tilde{e}_{ij}^{(n)} - \tilde{\boldsymbol{\Gamma}}_{ijkl}^0(\boldsymbol{\xi}) \tilde{\lambda}_{kl}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \tilde{e}_{ij}^{(n+1)}(\mathbf{0}) &= E_{ij} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Une fois que $e_{ij}^{(n+1)} = \text{FFT}^{-1}(\tilde{e}_{ij}^{(n+1)}(\boldsymbol{\xi}))$ est obtenu dans l'espace réel par la transformée de Fourier inverse FFT^{-1} , le schéma Lagrangien augmenté exige la minimisation du résidu \mathbf{R}^{es} , qui est fonction du champ des contraintes $\mathbf{T}^{(n+1)}$ et des déformations $\boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1)}$ [141] :

$$R_{ij}^{es}(\mathbf{T}^{(n+1)}) = T_{ij}^{(n+1)} + C_{ijmn}^0 \varepsilon_{mn}^{(n+1)}(\mathbf{T}^{(n+1)}) - \lambda_{ij}^{(n)} - C_{ijmn}^0 e_{mn}^{(n+1)} = 0. \quad (5.14)$$

L'équation (5.14) est une équation non-linéaire résolue par le schéma itératif de type Newton-Raphson. Le champ de contrainte à l'itération $(p + 1)$ est obtenu par :

$$T_{ij}^{(n+1,p+1)} = T_{ij}^{(n+1,p)} - \left(\left(\frac{\partial R_{ij}^{es}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} \right)^{-1} R_{mn}^{es}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}). \quad (5.15)$$

En considérant l'équation constitutive (5.1) et l'équation (5.14), le Jacobien dans l'équation précédente s'écrit :

$$\left(\frac{\partial R_{ij}^{es}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} = \delta_{im} \delta_{jn} + C_{ijkl}^0 C_{klmn}^{-1} + \Delta t C_{ijkl}^0 \left(\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{kl}^p}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}}. \quad (5.16)$$

La dérivée dans le terme de droite de l'équation (5.16) représente le tenseur de complaisance tangente de la relation viscoplastique (5.2). Comme $\dot{\varepsilon}^p$ dépend de la contrainte, la cission critique l'est aussi : $\tau_c^s(\boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{T})) = \tau_c^s(\mathbf{T})$. Une approximation du tenseur de complaisance tangente est donnée sous la forme :

$$\left(\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{kl}^p}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} \simeq n \dot{\gamma}^0 \sum_{s=1}^N R_{kl}^s \frac{R_{mn}^s}{\tau_c^s} \left(\frac{|R_{mn}^s \sigma_{mn}|}{\tau_c^s} \right)^{n-1}. \quad (5.17)$$

où la dérivée $\partial \tau_c^s / \partial \mathbf{T}$ qui dépend de la loi d'érouissage adoptée (loi de Voce, équation (1.39)) a été négligée. En combinant les équations (5.16) et (5.17), on obtient la relation suivante pour le Jacobien :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial R_{ij}^{es}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} &\simeq \delta_{im} \delta_{jn} + C_{ijkl}^0 C_{klmn}^{-1} + \\ &\Delta t n \dot{\gamma}^0 C_{ijkl}^0 \sum_{s=1}^N R_{kl}^s \frac{R_{mn}^s}{\tau_c^s} \left(\frac{|R_{mn}^s T_{mn}|}{\tau_c^s} \right)^{n-1}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Il faut noter que les équations (5.14) et (5.18) ont été résolues vectoriellement dans le code EVP-FFT (notations de Voigt) en utilisant la symétrie des tenseurs \mathbf{T} et $\dot{\varepsilon}^p$. Une fois la convergence atteinte sur $\mathbf{T}^{(n+1)}$ et donc sur $\boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1)}$, la nouvelle valeur du champ de contrainte auxiliaire $\boldsymbol{\lambda}$ est calculée à partir de l'expression suivante :

$$\boldsymbol{\lambda}^{(n+1)} = \boldsymbol{\lambda}^{(n)} + \mathbf{C}^0 : (\mathbf{e}^{(n+1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1)}), \quad (5.19)$$

et l'algorithme recommence jusqu'à ce que les différences entre les valeurs moyennes normalisées des champs de contraintes \mathbf{T} et $\boldsymbol{\lambda}$, et des champs de déformations $\boldsymbol{\varepsilon}$ et \mathbf{e} , soient inférieures à une précision ϵ donnée. Ce critère de convergence implique

le respect de la condition de compatibilité de la déformation et la réalisation de l'équilibre des contraintes.

Dans la procédure décrite ci-dessus, la cellule unitaire périodique V est soumise à une déformation macroscopique appliquée \mathbf{E} sous la forme

$$E_{ij} = E_{ij}^t + \dot{E}_{ij} \Delta t. \quad (5.20)$$

Les conditions aux limites peuvent être aussi mixtes avec l'application des composantes de la vitesse de déformation macroscopique \dot{E}_{ij} et de la contrainte macroscopique Σ_{ij} . Dans ce cas, pour une contrainte macroscopique Σ_{pq} appliquée, le présent algorithme doit inclure une étape supplémentaire sur la détermination de la composante de la déformation à l'itération $(n + 1)$ [161, 141] :

$$E_{pq}^{(n+1)} = E_{pq}^{(n)} + C_{pqkl}^{0-1} \omega^{[kl]} \left(\Sigma_{kl} - \langle \lambda_{kl}^{(n+1)} \rangle \right), \quad (5.21)$$

où $\langle \lambda^{(n+1)} \rangle$ représente la valeur moyenne de $\lambda^{(n+1)}$, $\omega^{[kl]} = 1$ si la composante Σ_{kl} est imposée, et zéro dans le cas contraire.

L'algorithme de résolution basé sur cette formulation EVP-FFT est présenté ci-dessous.

5.2.3 Algorithme de résolution

L'algorithme EVP-FFT (algorithme 2) présenté ci-dessous requiert des informations sur la microstructure telles que les dimensions du Volume Élémentaire Représentatif, les angles d'Euler, les propriétés élastiques et plastiques, les conditions aux limites. En sortie de l'algorithme, les champs locaux et macroscopiques de contraintes et de déformations, les champs de déplacement et les orientations cristallographiques sont obtenus. Les différentes notations utilisées sont décrites dans le tableau 5.1. L'algorithme est constitué d'une procédure d'initialisation (étape 2) et d'une procédure itérative globale (étape 3 à 33).

La procédure d'initialisation permet de calculer les valeurs initiales de la déformation macroscopique \mathbf{E}^0 à partir du taux de déformation macroscopique $\dot{\mathbf{E}}$, de la déformation totale $\boldsymbol{\epsilon}^0$, de la déformation plastique $(\boldsymbol{\epsilon}^p)^0$, de la vitesse de déformation plastique $(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p)^0$ et de la contrainte auxiliaire $\boldsymbol{\lambda}^0 = \mathbf{C}^0 : \mathbf{E}^0$.

La procédure itérative globale est constituée d'une boucle d'itération sur le pas de temps Δt . Cette boucle est constituée d'une boucle itérative (étapes 5 à 25) pour la résolution de l'équation d'équilibre basée sur le schéma du Lagrangien augmenté, et d'une procédure de mise à jour (étapes 26 à 32).

La boucle itérative (étapes 5 à 25) sur la résolution de l'équation d'équilibre des contraintes avec le schéma du Lagrangien augmenté commence avec le calcul

du tenseur de polarisation $\boldsymbol{\tau}^{(n)}(\mathbf{x})$ à partir de la contrainte auxiliaire $\boldsymbol{\lambda}^{(n)}(\mathbf{x})$ (étape 6), et de sa transformée de Fourier $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi})$ à l'étape 7. Cette dernière est utilisée pour mettre à jour la déformation totale $\mathbf{e}^{(n+1)}$ aux étapes 8 et 9. Il faut noter ici que l'opérateur $\boldsymbol{\Gamma}$ dans l'équation de Lippmann-Schwinger (5.10) est calculée par FFT classique (cf. équation 3.23). L'algorithme continue par la boucle itérative de Newton-Raphson (étapes 11 à 18) pour le calcul du champ de contrainte à l'itération $(n + 1)$.

Dans cette boucle, la vitesse de déformation plastique, la dérivée de la vitesse de déformation plastique par rapport à la contrainte, ainsi que la déformation totale sont évaluées à l'étape 12, respectivement à partir des équations (5.2), (5.17) et (5.1). Ces dernières sont utilisées pour le calcul du résidu \mathbf{R}^{es} à partir de l'équation (5.14) (étape 13) et du Jacobien à partir de l'équation (5.18) à l'étape 14. Finalement, le champ de contrainte à l'itération $(n + 1)$ est obtenu à l'étape 15 d'après l'équation (5.15). Les étapes 12 à 15 recommencent jusqu'à ce que l'erreur normalisée A sur la contrainte calculée à l'étape 16 soit inférieure à une précision T^{err} donnée. Une fois $\mathbf{T}^{(n+1)}(\mathbf{x})$ obtenue à partir du schéma Newton-Raphson, la contrainte auxiliaire ($\boldsymbol{\lambda}^{(n+1)}$) est mise à jour à l'étape 19. Si la condition aux limites imposée est mixte, l'algorithme inclut donc le calcul de la déformation macroscopique à partir de l'équation (5.21) (étape 21). La boucle itérative sur la résolution de l'équation d'équilibre par le schéma du Lagrangien augmenté s'arrête lorsque l'erreur normalisée sur les champs de contraintes et de déformations calculée à l'étape 23 est inférieure à la précision ϵ . Dans le cas contraire, les étapes 5 à 25 recommencent avec la nouvelle valeur de $\boldsymbol{\lambda}^{(n+1)}$ jusqu'à l'obtention de la convergence.

La procédure de mise à jour (étapes 26 à 32) commence avec la mise à jour de la cission critique τ_c^s , des champs de déformation plastique $(\boldsymbol{\epsilon}^p)^{(t+\Delta t)}$ et élastique $(\boldsymbol{\epsilon}^e)^{(t+\Delta t)}$, des angles d'Euler pour une nouvelle itération sur le pas de temps.

La boucle sur le temps de 0 à $t_{max} = \Delta t N_{step}$ avec le pas de temps Δt (étape 3 à 33) recommence avec les champs mis à jour jusqu'à ce que les états de contrainte et de déformation souhaités soient atteints.

Notation	Description
E	Déformation macroscopique
ϵ	Précision sur la contrainte et la déformation
t	Temps précédent
$t + \Delta t$	Temps courant
N_{tot}	Nombre total de points
N_{step}	Nombre total de pas de temps
N_{iter}	Nombre maximum d'itérations sur la boucle FFT
N_{iter2}	Nombre maximum d'itérations sur la boucle de Newton-Raphson
Err	Erreur normalisée
A	Erreur normalisée sur la contrainte
$\dot{\mathbf{E}}$	Vitesse de déformation macroscopique
T^{err}	Précision sur la contrainte

TABLE 5.1 – Légende des algorithmes 2 et 3.

Algorithm 2 EVP-FFT

```

1: Input :  $N_{\text{tot}} \leftarrow N_1 \times N_2 \times N_3, \dot{\mathbf{E}}, T^{\text{err}}, \epsilon, n, \gamma^0, \tau_c^s, \mathbf{C}^0, \text{wgt} \leftarrow 1/N_{\text{tot}}, t_{\text{max}} \leftarrow \Delta t N_{\text{step}}$ 
2: Initialisation :  $\mathbf{E}^0 \leftarrow \Delta t \dot{\mathbf{E}}, \boldsymbol{\varepsilon}^0 \leftarrow 0, (\boldsymbol{\varepsilon}^p)^0 \leftarrow 0, (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p)^0 \leftarrow 0, \boldsymbol{\lambda}^0 \leftarrow \mathbf{C}^0 : \mathbf{E}^0$ 
3: for  $t = 0, t_{\text{max}}$  do
4:    $n \leftarrow 1, Err(\mathbf{T}, \boldsymbol{\varepsilon}) \leftarrow 2\epsilon$ 
5:   while  $(n < N_{\text{iter}}; Err(\mathbf{T}, \boldsymbol{\varepsilon}) > \epsilon)$  do
6:      $\boldsymbol{\tau}^{(n)}(\mathbf{x}) \leftarrow \boldsymbol{\lambda}^{(n)}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}^0 : \mathbf{e}^{(n)}(\mathbf{x})$ 
7:      $\tilde{\boldsymbol{\tau}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}(\boldsymbol{\tau}^{(n)}(\mathbf{x}))$ 
8:      $\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow -\tilde{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) : \tilde{\boldsymbol{\tau}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}$  et  $\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}(\mathbf{0}) \leftarrow \mathbf{E}^{(n)}$ 
9:      $\mathbf{e}^{(n+1)}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{FFT}^{-1}(\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}(\boldsymbol{\xi}))$ 
10:     $\mathbf{T}^{(n+1)} \leftarrow \boldsymbol{\lambda}^{(n)}, A \leftarrow 2T^{\text{err}}, p \leftarrow 1$ 
11:    while  $(p < N_{\text{iter}2}; A > T^{\text{err}})$  do
12:      Evaluate  $(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p)^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}), (\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p / \partial \mathbf{T})^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}),$ 
 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)})$ 
13:       $\mathbf{R}^{es}(\mathbf{T}^{(n+1)}) \leftarrow T_{ij}^{(n+1)} + C_{ijmn}^0 \varepsilon_{mn}^{(n+1)}(\mathbf{T}^{(n+1)}) - \lambda_{ij}^{(n)} - C_{ijmn}^0 e_{mn}^{(n+1)}$ 
14:       $(\partial R_{ij}^{es} / \partial T_{mn})_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} \leftarrow \Delta t C_{ijkl}^0 (\partial \dot{\varepsilon}_{kl}^p / \partial T_{mn})_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} + \delta_{im} \delta_{jn} + C_{ijkl}^0 C_{klmn}^{-1}$ 
15:       $T_{ij}^{(n+1,p+1)} \leftarrow T_{ij}^{(n+1,p)} - \left( \left( \frac{\partial R_{ij}^{es}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} \right)^{-1} R_{mn}^{es}(\mathbf{T}^{(n+1,p)})$ 
16:       $A \leftarrow \frac{\|\mathbf{T}^{(n+1,p+1)} - \mathbf{T}^{(n+1,p)}\|}{\|\mathbf{T}^{(n+1,p)}\|}$ 
17:       $p \leftarrow p + 1$ 
18:    end while
19:     $\boldsymbol{\lambda}^{(n+1)} \leftarrow \boldsymbol{\lambda}^{(n)} + \mathbf{C}^0 : (\mathbf{e}^{(n+1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1)})$ 
20:    if Mixed boundary conditions then
21:       $E_{pq}^{(n+1)} = E_{pq}^{(n)} + C_{pqkl}^{0-1} \omega^{[kl]} (\Sigma_{kl} - \langle \lambda_{kl}^{(n+1)}(\mathbf{x}) \rangle)$ 
22:    end if
23:     $Err(\mathbf{T}, \boldsymbol{\varepsilon}) \leftarrow (\|\mathbf{T}^{(n+1)} - \boldsymbol{\lambda}^{(n+1)}\|, \|\boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1)} - \mathbf{e}^{(n+1)}\|) \times \text{wgt}$ 
24:     $n \leftarrow n + 1$ 
25:  end while
26:  if  $t > \Delta t$  then
27:     $\tau_c^s \leftarrow \tau_c^s + \Delta t \dot{\tau}_c^s$ 
28:  end if
29:   $\mathbf{E}^{(t+\Delta t)} \leftarrow \mathbf{E}^{(t)} + \Delta t \dot{\mathbf{E}}$ 
30:   $(\boldsymbol{\varepsilon}^p)^{(t+\Delta t)} \leftarrow (\boldsymbol{\varepsilon}^p)^{(t)} + \Delta t (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p)^{(t+\Delta t)}$ 
31:  Update Euler angles
32:   $(\boldsymbol{\varepsilon}^e)^{(t+\Delta t)} \leftarrow (\boldsymbol{\varepsilon}^e)^{(t+\Delta t)} - (\boldsymbol{\varepsilon}^p)^{(t+\Delta t)}$ 
33: end for

```

5.3 Extension du modèle EVP-FFT à la mécanique des champs de dislocations à l'échelle mésoscopique avec la théorie RPMFDM

Dans le cadre de la version réduite de la théorie phénoménologique et mésoscopique de la mécanique des champs de dislocations (RPMFDM : "Reduced Phenomenological Mesoscopic Field Dislocation Mechanics" en anglais), nous sommes en présence à la fois des dislocations géométriquement nécessaires (GNDs : "Geometrically Necessary Dislocations" en anglais) et des dislocations statistiquement distribuées (SSDs : "Statistically Stored Dislocations" en anglais). Dans ce cas, les variables de champs de la mécanique des champs de dislocations sont interprétées comme des quantités moyennes. La vitesse de distorsion plastique doit inclure à la fois la contribution des GNDs et des SSDs au travers du terme \mathbf{L}^p défini dans l'équation (5.3) :

$$\dot{\bar{\mathbf{U}}}^p = \bar{\boldsymbol{\alpha}} \times \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{L}^p. \quad (5.22)$$

Par conséquent, l'équation d'évolution spatio-temporelle de la valeur moyenne $\bar{\boldsymbol{\alpha}}$ du tenseur densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ est donnée par :

$$\dot{\bar{\boldsymbol{\alpha}}} = -\mathbf{rot} \dot{\bar{\mathbf{U}}}^p = -\mathbf{rot} (\bar{\boldsymbol{\alpha}} \times \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{L}^p). \quad (5.23)$$

Dans cette dernière équation, le terme $-\mathbf{rot} \mathbf{L}^p$ est un terme de source/puits de GNDs dû à l'incompatibilité de la déformation plastique par les SSDs. Il reflète à l'échelle de résolution spatiale choisie la polarisation des structures de dislocations au cours de la déformation plastique (accumulation de dislocations près des joints de grains, murs de dislocations ou des interfaces d'inclusions dures). Le terme $-\mathbf{rot} (\bar{\boldsymbol{\alpha}} \times \bar{\mathbf{v}})$ décrit le transport des GNDs. A ces équations s'ajoutent l'équation constitutive (5.1) et l'équation d'équilibre (5.7) résolue par le schéma du Lagrangien augmenté comme présenté dans la section précédente. Ici, nous utiliserons le schéma à différences finies centrées tournées à 45° ("rotated scheme") pour la résolution de l'équation de Lippmann-Schwinger (LS_R) et le schéma à différences finies centrées (I_C) pour le calcul de $-\mathbf{rot} \mathbf{U}^p$ dans la résolution de l'équation d'incompatibilité. Les équations (5.22), (5.23), (5.1) et (5.7) constituent les équations de base de la RPMFDM. Par souci de simplicité, la barre supérieure indiquant la quantité moyenne d'un champ de tenseur ou d'un champ de vecteur donné sera omise dans la suite de ce chapitre.

5.3.1 Définition de la vitesse des dislocations géométriquement nécessaires

La définition de la vitesse \mathbf{v} des GNDs est basée sur les considérations thermodynamiques sur la dissipation intrinsèque D qui est positive (équation (2.88)) :

$$\mathbf{F}^\alpha \cdot \mathbf{v} \geq 0, \quad \forall \text{ point } P \in V \text{ avec } D = \int_V \mathbf{F}^\alpha \cdot \mathbf{v} dV \geq 0, \quad (5.24)$$

où \mathbf{F}^α est la force thermodynamique conjuguée à \mathbf{v} sur $\boldsymbol{\alpha}$, et sur l'incompressibilité de l'écoulement plastique [7] :

$$\dot{U}_{ii}^p = e_{ikl}\alpha_{ik}v_l = 0 \implies d_l v_l = 0 \text{ avec } d_l = e_{mnl}\alpha_{mn}. \quad (5.25)$$

Pour remplir de manière satisfaisante ces conditions, la vitesse \mathbf{v} peut être définie sous la forme suivante :

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \bar{v} \quad \bar{v} \geq 0, \quad (5.26)$$

où \mathbf{g} et \bar{v} représentent, respectivement, la force de glissement parallèle à \mathbf{v} et l'amplitude moyenne de la vitesse \mathbf{v} des GNDs. La force de glissement \mathbf{g} est prescrite par [7] comme suit :

$$\mathbf{g} = \mathbf{F}^\alpha - \left(\mathbf{F}^\alpha \cdot \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|} \right) \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|}, \quad (5.27)$$

avec \mathbf{d} la direction dilatante ($\mathbf{d} \perp \mathbf{v}$) (cf. (figure 5.1)). \mathbf{g} est alors défini par :

$$g_r = e_{ikr}\alpha_{jk}S_{ij} - e_{ikr}\alpha_{ik} \frac{S_{mn}\alpha_{np}(\alpha_{mp} - \alpha_{pm})}{\alpha_{ij}(\alpha_{ij} - \alpha_{ji})}, \quad (5.28)$$

où $S_{ij} = T_{ij} - \frac{1}{3}T_{mm}\delta_{ij}$ est la partie déviatorique du tenseur des contraintes \mathbf{T} . \bar{v} est défini par la relation suivante [186, 185] :

$$\bar{v} = \frac{\eta^2 b}{N} \sum_{s=1}^N \left(\frac{\mu}{\hat{\tau}_c^s} \right)^2 |\dot{\gamma}^s|, \quad (5.29)$$

où μ est le module de cisaillement du matériau, b est la norme du vecteur de Burgers et η est un paramètre du matériau (égal 1/3 dans nos simulations) et $\hat{\tau}_c^s$ est défini par l'équation (1.39). Le taux de glissement cumulé $\dot{\Gamma}$ prend maintenant en compte la contribution des GNDs :

$$\dot{\Gamma} = |\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}| + \sum_{s=1}^N |\dot{\gamma}^s|. \quad (5.30)$$

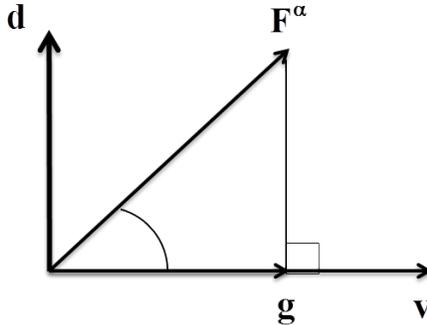


FIGURE 5.1 – Représentation vectorielle de la force thermodynamique \mathbf{F}^α , de la force de glissement \mathbf{g} ($\mathbf{g} \parallel \mathbf{v}$), de la direction dilatante \mathbf{d} et de la vitesse des dislocations \mathbf{v} ($\mathbf{d} \perp \mathbf{v}$).

5.3.2 Nouveau calcul de la dérivée de la vitesse de déformation plastique prenant en compte le terme $\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}$

Dans la résolution de l'équation d'équilibre des contraintes dans le cadre de la RPMFDM avec la formulation Lagrangien augmenté de la sous-section 1.2.2, les expressions de la vitesse de déformation plastique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^p$ et de sa dérivée par rapport à la contrainte $(\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^p / \partial T_{mn})_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}}$ dans le calcul du Jacobien (équation (5.16)) doivent être modifiées compte tenu de l'équation (5.22) qui inclut un terme supplémentaire $\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}$ provenant de la mobilité des GNDs.

Dans le cadre de la mécanique des champs de dislocations mésoscopique et phénoménologique, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^p$ peut s'écrire à partir de l'équation (5.22) sous la forme :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^p = \frac{1}{2} (\dot{U}_{kl}^p + \dot{U}_{lk}^p) = \frac{1}{2} (L_{kl}^p + L_{lk}^p) + \frac{1}{2} ((\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})_{kl} + (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})_{lk}). \quad (5.31)$$

La dérivée $\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p / \partial \mathbf{T}$ s'écrit maintenant sous la forme suivante :

$$\left(\frac{\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^p}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial L_{kl}^p}{\partial T_{mn}} + \frac{\partial L_{lk}^p}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})_{kl}}{\partial T_{mn}} + \frac{\partial (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})_{lk}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}}. \quad (5.32)$$

Le premier terme $\frac{1}{2} \left(\frac{\partial L_{kl}^p}{\partial T_{mn}} + \frac{\partial L_{lk}^p}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}}$ est déjà donné par l'équation (5.17).

Pour le calcul du second terme, on peut réécrire $(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})_{kl}$ sous la forme indicielle suivante :

$$(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})_{kl} = e_{lqr} \alpha_{kq} v_r. \quad (5.33)$$

La dérivée de cette dernière équation par rapport à la contrainte s'écrit :

$$\left(\frac{\partial (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})_{kl}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} = e_{lqr} \alpha_{kq} \left(\frac{\partial v_r}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}}. \quad (5.34)$$

La forme explicite de l'équation (5.34) est obtenue sous la forme suivante en considérant les équations (5.26) et (5.29) :

$$\left(\frac{\partial (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v})_{kl}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} = e_{lqr} \alpha_{kq} \left(\frac{\partial (g_r / |\mathbf{g}|)}{\partial T_{mn}} \bar{v} + \frac{g_r}{|\mathbf{g}|} \frac{\partial \bar{v}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}}, \quad (5.35)$$

où

$$\begin{aligned} \frac{\partial (g_r / |\mathbf{g}|)}{\partial T_{mn}} &= \left(\frac{\partial (g_r / |\mathbf{g}|)}{\partial g_s} \right) \left(\frac{\partial g_s}{\partial S_{oq}} \right) \left(\frac{\partial S_{oq}}{\partial T_{mn}} \right) \\ &= \left(\frac{\delta_{rs} |\mathbf{g}|^2 - g_r g_s}{|\mathbf{g}|^3} \right) \left(e_{oks} \alpha_{qk} - e_{iks} \alpha_{ik} \frac{\alpha_{qp} (\alpha_{op} - \alpha_{po})}{\alpha_{ij} (\alpha_{ij} - \alpha_{ji})} \right) \\ &\quad \left(\delta_{om} \delta_{qn} - \frac{1}{3} \delta_{mn} \delta_{oq} \right), \end{aligned} \quad (5.36)$$

et

$$\left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} \simeq n \dot{\gamma}^0 \frac{\eta^2 b}{N} \sum_{s=1}^N \left(\frac{\mu}{\hat{\tau}_c^s} \right)^2 R_{mn}^s \frac{|R_{mn}^s T_{mn}|^{n-1}}{(\tau_c^s)^n}, \quad (5.37)$$

en négligeant la dérivée $\partial \tau_c^s / \partial \mathbf{T}$ et la dérivée $\partial \mathbf{R}^s / \partial \mathbf{T}$.

5.3.3 Résolution de l'équation de transport dans l'espace de Fourier

En se référant aux développements de la sous-section 4.2.4 du chapitre 4 et l'approximation au premier ordre au temps $t + \Delta t$ du terme source \mathbf{L}^p à partir de son développement limité en série de Taylor $(L^p)^{t+\Delta t} = (L^p)^t + \Delta t (\dot{L}^p)^t + 0(\Delta t^2)$, la forme explicite de l'équation de transport (5.23) s'écrit sous la forme indicielle suivante :

$$\alpha_{ij}^{t+\Delta t} = \alpha_{ij}^t - \Delta t \left((\alpha_{ij} v_k)^t - (\alpha_{ik} v_j)^t + e_{jkl} (L_{il}^p)^t \right)_{,k}, \quad (5.38)$$

avec Δt le pas de temps. Cette nouvelle équation explicite est différente de celle utilisée dans le chapitre 4 (équation (4.13)) à cause du terme additionnel \mathbf{L}^p provenant de la présence des SSDs, et de la vitesse des GNDs qui est maintenant fonction de la densité de dislocations $\boldsymbol{\alpha}$ et du tenseur des contraintes \mathbf{T} .

En se référant à l'équation (4.15), la transformée de Fourier de l'équation de transport (équation (5.38)) s'écrit sous la forme suivante :

$$\tilde{\alpha}_{ij}^{t+\Delta t} = \tilde{\alpha}_{ij}^t - \Delta t i \xi_k \left(\widetilde{(\alpha_{ij} v_k)^t} - \widetilde{(\alpha_{ik} v_j)^t} \right) - \Delta t i \xi_k e_{jkl} \widetilde{(L_{il}^p)^t}. \quad (5.39)$$

Comme souligné dans le chapitre 4, la résolution de l'équation 5.39 sans le terme $\Delta t i \xi_k e_{jkl} \widetilde{(L_{il}^p)^t}$ par (FFT) conduit à une solution instable due à sa nature hyperbolique et aussi au développement de fortes oscillations inhérentes au phénomène de Gibbs. Pour éliminer ces oscillations, un filtre exponentiel (équation (4.19)) a été utilisé et sera également appliqué ici. L'application de ce filtre spectral à l'équation de transport de densité de GNDs donne :

$$\tilde{\alpha}_{ij}^{t+\Delta t} = \sigma(\eta) \left(\tilde{\alpha}_{ij}^t - \Delta t i \xi_k \left(\widetilde{(\alpha_{ij} v_k)^t} - \widetilde{(\alpha_{ik} v_j)^t} \right) \right) - \Delta t i \xi_k e_{jkl} \widetilde{(L_{il}^p)^t}. \quad (5.40)$$

Dans cette équation, le filtre est uniquement appliqué au premier membre de l'équation (5.40). Pour le second membre dû à $-\mathbf{rot} \mathbf{L}^p$, les différences finies centrées couplées à la transformée de Fourier discrète (équations (3.24) à (3.26)) seront utilisées pour le calcul des dérivées partielles de premier ordre induites par l'opérateur rotationnel.

5.3.4 Nouvel algorithme de résolution EVP-RPMFDM-FFT

Le nouvel algorithme EVP-RPMFDM-FFT (algorithme 3) est présenté ci-dessous. Les modifications par rapport à l'algorithme 2 sont reportées en couleur bleue. Ces modifications portent sur le choix du pas de temps, qui à présent, dépend également de la condition de Courant afin de garantir la stabilité de la solution de l'équation de transport. Ainsi, à chaque itération, le pas de temps $\Delta t = \min(\Delta t_{CFL}, \Delta t_\varepsilon)$ (étape 5), où Δt_{CFL} est le pas de temps obtenu à partir de la condition de Courant (étape 4) et Δt_ε est celui obtenu à partir de l'incrément maximal de déformation ($\Delta t_\varepsilon = \varepsilon_{max}/\dot{\varepsilon}_{max}$). Les modifications portent également sur l'implémentation de la résolution par FFT de l'équation de transport des densités de dislocations au début de la boucle sur le pas de temps à partir de l'équation (5.40) (étapes 6 à 11). La densité de dislocation actualisée $\boldsymbol{\alpha}^{(t+\Delta t)}$ est donc utilisée pour le calcul de la vitesse \mathbf{v} des dislocations à partir de l'équation (5.26), et donc de la vitesse de déformation plastique $(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p)^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}, \boldsymbol{\alpha}^{(t+\Delta t)})$, de sa dérivée par rapport à la contrainte $(\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p / \partial \mathbf{T})^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}, \boldsymbol{\alpha}^{(t+\Delta t)})$ et de la déformation totale $(\boldsymbol{\varepsilon})^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}, \boldsymbol{\alpha}^{(t+\Delta t)})$ à partir des équations (5.17), (5.36), (5.37) et (5.1) à chaque itération de la boucle de Newton Raphson à l'étape 20. Une étape de mise à jour de $\hat{\tau}_c^s$ entrant dans le calcul de \bar{v} (équation 5.29) a été ajoutée à l'étape 36 dans la procédure de mise à jour. Il faut aussi noter que la résolution par DFT de l'équation de Lippmann-Schwinger (étape 16) utilise le schéma LS_R (schéma "Rotated") introduit dans le chapitre 3.

Algorithm 3 EVP-RPMFDM-FFT

- 1: Input : $N_1, N_2, N_3, \delta_1, \delta_2, \delta_3, \dot{\mathbf{E}}, T^{err}, \epsilon, n, \gamma^0, \tau_c^s, c, \boldsymbol{\varepsilon}_M, (\mathbf{L}^p)^0, N_{tot} \leftarrow N_1 \times N_2 \times N_3, \text{wgt} \leftarrow 1/N_{tot}, \mathbf{C}^0, t_{max} \leftarrow \Delta t N_{step}, \Delta t_\epsilon, \mu, \eta, b$
 - 2: Initialisation : $\mathbf{E}^0 \leftarrow \Delta t \dot{\mathbf{E}}, \boldsymbol{\varepsilon} \leftarrow 0, \boldsymbol{\varepsilon}^p \leftarrow 0, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \leftarrow 0, \boldsymbol{\lambda} \leftarrow \mathbf{C}^0 : \mathbf{E}^0, \delta \leftarrow \max(\delta_1, \delta_2, \delta_3), \boldsymbol{\alpha}^0 \leftarrow 0, \mathbf{v}^0 \leftarrow 0$
 - 3: **for** $t = 0, t_{max}$ **do**
 - 4: $\Delta t_{CFL} \leftarrow c\delta/v_{max}$
 - 5: $\Delta t \leftarrow \min(\Delta t_{CFL}, \Delta t_\epsilon)$
 - 6: $\widetilde{\alpha}_{ij}^{(t)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}(\alpha_{ij}^{(t)}(\mathbf{x}))$
 - 7: $\widetilde{(\alpha_{ij}v_k)}^{(t)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}((\alpha_{ij}v_k)^{(t)}(\mathbf{x}))$
 - 8: $\widetilde{(\alpha_{ik}v_j)}^{(t)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}((\alpha_{ik}v_j)^{(t)}(\mathbf{x}))$
 - 9: $\widetilde{(L_{il}^p)}^{(t)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}((L_{il}^p)^{(t)}(\mathbf{x}))$
 - 10: $\widetilde{\alpha}_{ij}^{(t+\Delta t)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \sigma(\eta) \left(\widetilde{\alpha}_{ij}^{(t)}(\boldsymbol{\xi}) - \Delta t i \xi_k \left(\widetilde{(\alpha_{ij}v_k)}^{(t)}(\boldsymbol{\xi}) - \widetilde{(\alpha_{ik}v_j)}^{(t)}(\boldsymbol{\xi}) \right) \right) -$
 $\Delta t i \xi_k e_{jkl} \widetilde{(L_{il}^p)}^{(t)}(\boldsymbol{\xi})$
 - 11: $\alpha_{ij}^{(t+\Delta t)}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{FFT}^{-1}(\widetilde{\alpha}_{ij}^{(t+\Delta t)}(\boldsymbol{\xi}))$
 - 12: $n \leftarrow 1, Err(\mathbf{T}, \boldsymbol{\varepsilon}) \leftarrow 2\epsilon$
 - 13: **while** $(n < N_{iter}; Err(\mathbf{T}, \boldsymbol{\varepsilon}) > \epsilon)$ **do**
 - 14: $\boldsymbol{\tau}^{(n)}(\mathbf{x}) \leftarrow \boldsymbol{\lambda}^{(n)}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}^0 : \mathbf{e}^{(n)}(\mathbf{x})$
 - 15: $\widetilde{\boldsymbol{\tau}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}(\boldsymbol{\tau}^{(n)}(\mathbf{x}))$
 - 16: $\widetilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow -\widetilde{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) : \widetilde{\boldsymbol{\tau}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}$ et $\widetilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}(\mathbf{0}) \leftarrow \mathbf{E}^{(n)}$
 - 17: $\mathbf{e}^{(n+1)}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{FFT}^{-1}(\widetilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}(\boldsymbol{\xi}))$
 - 18: $\mathbf{T}^{(n+1)} \leftarrow \boldsymbol{\lambda}^{(n)}, A \leftarrow 2T^{err}, p \leftarrow 1$
 - 19: **while** $(p < N_{iter2}; A > T^{err})$ **do**
 - 20: Evaluate $\mathbf{v}^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}, \boldsymbol{\alpha}^{(t+\Delta t)}), (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p)^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}, \boldsymbol{\alpha}^{(t+\Delta t)}),$
 $(\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p / \partial \mathbf{T})^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}, \boldsymbol{\alpha}^{(t+\Delta t)}), \boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1,p)}(\mathbf{T}^{(n+1,p)}, \boldsymbol{\alpha}^{(t+\Delta t)})$
 - 21: $R_{ij}^{es}(\mathbf{T}^{(n+1)}) \leftarrow T_{ij}^{(n+1,p)} + C_{ijmn}^0 \varepsilon_{mn}^{(n+1)} - \lambda_{ij}^{(n)} - C_{ijmn}^0 e_{mn}^{(n+1)}$
 - 22: $\left(\partial R_{ij}^{es} / \partial T_{mn} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} \leftarrow \Delta t C_{ijkl}^0 (\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^p / \partial T_{mn})_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} + \delta_{im} \delta_{jn} +$
 $C_{ijkl}^0 C_{klmn}^{-1}$
 - 23: $T_{ij}^{(n+1,p+1)} \leftarrow T_{ij}^{(n+1,p)} - \left(\left(\frac{\partial R_{ij}^{es}}{\partial T_{mn}} \right)_{\mathbf{T}^{(n+1,p)}} \right)^{-1} R_{mn}^{es}(\mathbf{T}^{(n+1,p)})$
 - 24: $A \leftarrow \frac{\|\mathbf{T}^{(n+1,p+1)} - \mathbf{T}^{(n+1,p)}\|}{\|\mathbf{T}^{(n+1,p)}\|}$
 - 25: $p \leftarrow p + 1$
 - 26: **end while**
-

```

27:    $\boldsymbol{\lambda}^{(n+1)} \leftarrow \boldsymbol{\lambda}^{(n)} + \mathbf{C}^0 : (\mathbf{e}^{(n+1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1)})$ 
28:   if Mixed boundary conditions then
29:      $E_{pq}^{(n+1)} = E_{pq}^{(n)} + C_{pqkl}^{0-1} \omega^{[kl]} (\Sigma_{kl} - \langle \lambda_{kl}^{(n+1)}(\mathbf{x}) \rangle)$ 
30:   end if
31:    $Err(\mathbf{T}, \boldsymbol{\varepsilon}) \leftarrow (\|\mathbf{T}^{(n+1)} - \boldsymbol{\lambda}^{(n+1)}\|, \|\boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1)} - \mathbf{e}^{(n+1)}\|) \times \text{wgt}$ 
32:    $n \leftarrow n + 1$ 
33: end while
34: if  $t > \Delta t$  then
35:    $\tau_c^s \leftarrow \tau_c^s + \Delta t \dot{\tau}_c^s$ 
36:    $\hat{\tau}_c^s \leftarrow \hat{\tau}_c^s + \Delta t \dot{\hat{\tau}}_c^s$ 
37: end if
38:  $\mathbf{E}^{(t+\Delta t)} \leftarrow \mathbf{E}^{(t)} + \Delta t \dot{\mathbf{E}}$ 
39:  $(\boldsymbol{\varepsilon}^p)^{(t+\Delta t)} \leftarrow (\boldsymbol{\varepsilon}^p)^{(t)} + \Delta t (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p)^{(t+\Delta t)}$ 
40: Update Euler angles
41:  $(\boldsymbol{\varepsilon}^e)^{(t+\Delta t)} \leftarrow (\boldsymbol{\varepsilon}^e)^{(t+\Delta t)} - (\boldsymbol{\varepsilon}^p)^{(t+\Delta t)}$ 
42: end for

```

5.3.5 Implémentation de la condition de continuité tangentielle aux interfaces d'un matériau composite biphasé

Dans l'hypothèse de petites déformations, la condition de continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique donnée par l'équation (2.116) peut encore s'écrire sous la forme suivante :

$$[\dot{\mathbf{U}}^p] \times \mathbf{n} = [\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v} + \mathbf{L}^p] \times \mathbf{n} = \mathbf{0}. \quad (5.41)$$

Cette condition est satisfaite lorsque $[\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}] \times \mathbf{n} = \mathbf{0}$ et $[\mathbf{L}^p] \times \mathbf{n} = \mathbf{0}$.

Pour implémenter cette condition de continuité, nous considérons un matériau composite avec une microstructure à canaux, constituée d'une phase plastique (canal) et d'une phase purement élastique (précipités) comme montré sur la figure 5.2. L'interface canal/précipité entre les deux phases est assimilable à l'interface I de la figure 2.8 du chapitre 2, de telle sorte que $\mathbf{e}_2 = \mathbf{n}$, $\mathbf{e}_3 = \mathbf{l}$ et $\mathbf{e}_1 = \mathbf{n} \times \mathbf{l}$. Dans ce cas, la condition de saut à l'interface I s'écrit [189] :

$$\dot{\mathbf{U}}_+^p \times \mathbf{e}_2 = \mathbf{0}. \quad (5.42)$$

Si de plus, on considère l'incompressibilité de la vitesse de distorsion plastique ($\dot{U}_{ii}^p = 0$), le tenseur de distorsion plastique à l'interface I dans le sous-domaine H^+ à la forme suivante :

$$\dot{\mathbf{U}}_+^p = \begin{pmatrix} 0 & \dot{U}_{12}^p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dot{U}_{32}^p & 0 \end{pmatrix} \quad (5.43)$$

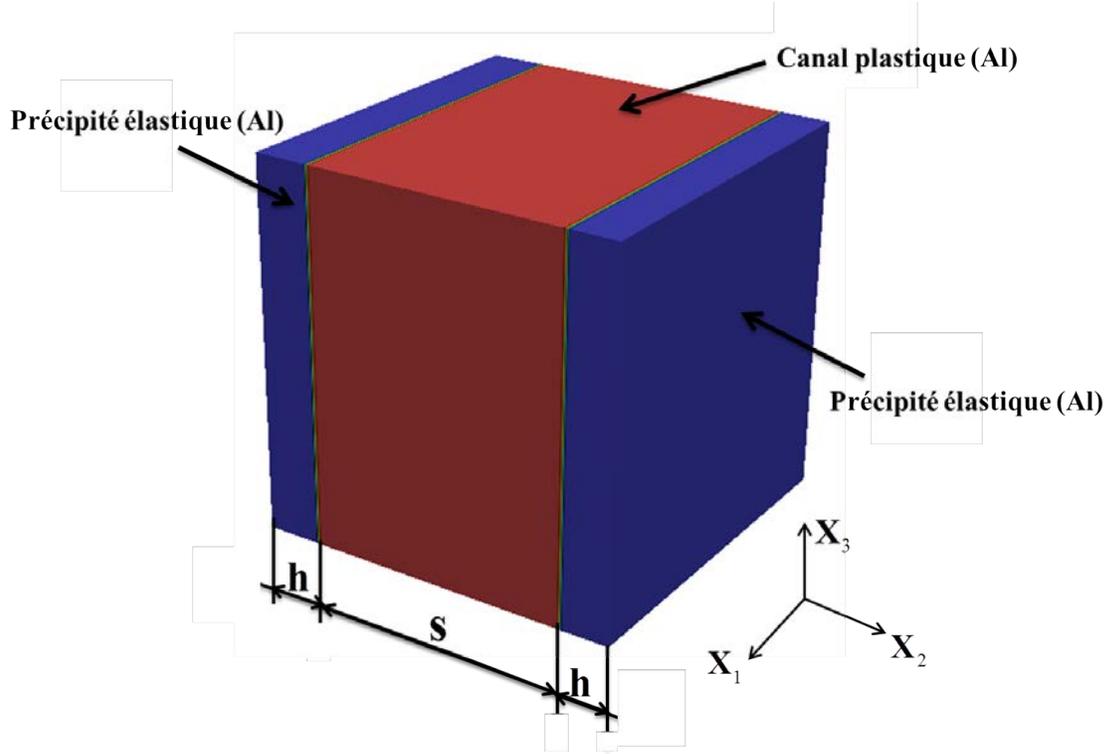


FIGURE 5.2 – Figure illustrant la cellule unitaire de la microstructure à canaux (laminés) en Aluminium constituée d'un canal (en couleur rouge) au milieu des précipités (lamellaires) purement élastiques (en couleur bleue).

5.3.5.1 Condition de continuité tangentielle sur $\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}$

D'après l'équation 5.43, la continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique ($\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}$) due à la contribution des dislocations polarisées permet d'écrire les relations suivantes :

$$\alpha_{i1}v_2 - \alpha_{i2}v_1 = 0 \quad (5.44)$$

$$\alpha_{i2}v_3 - \alpha_{i3}v_2 = 0 \quad (5.45)$$

$$\alpha_{23}v_1 - \alpha_{21}v_3 = 0 \quad (5.46)$$

$$\alpha_{13}v_1 - \alpha_{11}v_3 \neq 0 \quad (5.47)$$

$$\alpha_{33}v_1 - \alpha_{31}v_3 \neq 0 \quad (5.48)$$

Pour des raisons de simplicité, nous supposons que les dislocations de types vis et coins ont une même vitesse. Dans ce cas, lorsqu'on multiplie l'équation (5.44) par α_{i3} et l'équation (5.45) par α_{i1} , on obtient :

$$\alpha_{i2}(\alpha_{i1}v_3 - \alpha_{i3}v_1) = 0. \quad (5.49)$$

Ensuite, en considérant les équations (5.47) et (5.48) où le terme $(\alpha_{i1}v_3 - \alpha_{i3}v_1) \neq 0$, l'équation (5.49) donne $\alpha_{12} = \alpha_{32} = 0$. Le saut normal de la vitesse de distorsion plastique à l'interface (équations (5.47) et (5.48)) est possible lorsque $v_3 \neq 0$ et $v_1 \neq 0$. Etant donné que tous les types de dislocations ont une même vitesse, l'équation (5.46) implique donc $\alpha_{23} = \alpha_{21} = 0$. A partir des équations (5.44) et (5.45), on obtient $\alpha_{22} = 0$. Pour résumer, la relation (équations 5.43) est satisfaite lorsque, à l'interface :

$$\begin{cases} \alpha_{12} = \alpha_{32} = \alpha_{23} = \alpha_{21} = \alpha_{22} = 0 \\ \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix} \end{cases} \quad . \quad (5.50)$$

D'après l'équation (5.50), on déduit donc que les dislocations polarisées doivent avoir leur ligne dans l'interface et doivent glisser le long de l'interface pour respecter la conservation de leur vecteur de Burgers.

5.3.5.2 Condition de continuité tangentielle sur \mathbf{L}^P

La condition de saut sur \mathbf{L}^P ($[\mathbf{L}^P] \times \mathbf{n} = \mathbf{0}$) est satisfaite lorsqu'on autorise seulement le glissement plastique dans le plan de l'interface, et en considérant que le seul plan de glissement disponible est celui de l'interface lui-même. Cette condition est satisfaite en faisant une projection du vecteur normal au plan de glissement \mathbf{n}^s et du vecteur direction de glissement \mathbf{m}^s des différents systèmes de glissement sur le plan de l'interface de normale \mathbf{n} [189]. On appelle \mathbf{n}_I^s et \mathbf{m}_I^s les projections de la normale et de la direction de glissement dans l'interface. Elles sont données par :

$$\begin{cases} \mathbf{n}_I^s = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^s)\mathbf{n} \\ \mathbf{m}_I^s = \mathbf{m}^s - (\mathbf{m}^s \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \end{cases} \quad . \quad (5.51)$$

5.4 Applications numériques

Dans les applications présentées ci-après, les transformées de Fourier directe (FFT) et inverse (FFT⁻¹) sont calculées en utilisant l'algorithme FFT (équations (3.18) et (3.19)). Dans tous les modèles suivants, la procédure LS_R (équation (3.27)) a été utilisée pour le calcul des dérivées partielles de premier ordre dans la résolution de l'équation de type Lippmann-Schwinger. De plus, le schéma des différences finies centrées couplées à la transformée de Fourier discrète (équations (3.24) à (3.26)) est utilisé pour le calcul des dérivées partielles de premier ordre dans la résolution de l'équation d'incompatibilité $\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{rot} \mathbf{U}^p$ pour le calcul de $\boldsymbol{\alpha}$ avec précision et sans oscillation numérique. Cette procédure sera dénotée par I_C dans la suite du chapitre.

Trois différents modèles seront considérés dans la suite :

- **Le modèle 1** basé sur la formulation EVP-FFT classique et l'algorithme 2 de la section 5.2, où les densités de dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) $\boldsymbol{\alpha}$ sont seulement calculées en post-traitement à partir de la relation d'incompatibilité $\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{rot} \mathbf{U}^p$. Le transport des GNDs, ainsi que les conditions de continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique aux interfaces de type joints de phases ou de grains ne sont pas pris en compte.
- **Le modèle 2a** basé sur la formulation EVP-RPMFDM-FFT et l'algorithme 3 de la section 5.3, mais sans la prise en compte des conditions de continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique aux interfaces de type joints de phases ou de grains.
- **Le modèle 2b** basé sur la formulation EVP-RPMFDM-FFT et l'algorithme 3 de la section 5.3 avec la prise en compte des conditions de continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique aux interfaces de type joints de phases ou de grains.

Ces trois modèles seront comparés dans l'étude d'un matériau composite périodique avec une microstructure à canaux en Aluminium (Al). La microstructure à canaux est constituée d'une phase plastique (canal) en Aluminium entourée de part et d'autre de précipités lamellaires en Aluminium purement élastiques (cf. figure 5.2). Nous étudierons notamment la formation des structures de GNDs et les effets de la prise en compte des conditions de continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique aux interfaces canal/précipités sur l'écroutissage cinématique du matériau composite. Pour finir, les modèles 1 et 2a seront également appliqués et comparés dans l'étude de la réponse mécanique d'un agrégat polycristallin d'Aluminium. Le modèle 2b sera étudié comme perspective dans le cas du polycristal car il faut pouvoir déterminer les normales aux joints de grains dans le code EVP-RPMFDM-FFT (cf. [147]), ce qui n'est pas encore accompli.

Avant d'aborder ces applications, une étude sur le choix et l'influence des pa-

ramètres de la loi d'érouissage de Voce est effectuée dans le cas d'un monocristal d'Aluminium avec le modèle 1.

5.4.1 Détermination des paramètres de la loi d'érouissage de Voce et effet de l'érouissage latent pour un monocristal d'Aluminium

Nous considérons un monocristal d'Aluminium soumis à une traction uniaxiale avec des conditions aux limites mixtes en contraintes et en déformations avec une vitesse de déformation imposée $\dot{E}_{33} = 0.001s^{-1}$. Nous considérons également trois différentes orientations cristallographiques dont les angles d'Euler (convention de Bunge) sont reportés dans le tableau 5.2. Les paramètres du matériau et de simulation avec le modèle 1 sont regroupés dans le tableau 5.3. Les paramètres de la loi d'érouissage de Voce qui calent au mieux les résultats expérimentaux pour ce même monocristal rapportés dans [105] sont reportés dans le tableau 5.4, où les deux seuls coefficients d'érouissage a_{auto} et a_{latent} représentent, respectivement, les paramètres d'auto-érouissage (composantes diagonales de la matrice d'érouissage) et d'érouissage latent (composantes non-diagonales de la matrice d'érouissage) (cf. équation (5.6)). On peut donc observer sur la figure 5.3 que la simulation numérique avec le modèle 1 reproduit les effets d'orientation du réseau cristallographique sur l'érouissage du monocristal d'Aluminium, ce qui est en accord raisonnable avec les résultats expérimentaux reportés dans [105]. On dénote en tout 8 systèmes de glissement activés pour l'orientation $\langle 100 \rangle$, 6 systèmes de glissement activés pour l'orientation $\langle 111 \rangle$ et 1 système de glissement activé pour l'orientation $\langle 123 \rangle$, ce qui est conforme à la loi de Schmid.

Une étude de l'influence du paramètre d'érouissage latent a_{latent} sur les courbes d'érouissage est montrée sur la figure 5.4. En effet a_{latent} influence significativement les courbes d'érouissage. Plus sa valeur est supérieure à 1, plus on accentue les effets d'orientation du réseau cristallographique et plus on se rapproche des résultats expérimentaux.

Les paramètres optimaux des tableaux 5.3 et 5.4 seront utilisés dans les applications à venir.

Orientations	$\varphi_1(^{\circ})$	$\phi(^{\circ})$	$\varphi_2(^{\circ})$
$\langle 111 \rangle$	90	54.74	45
$\langle 100 \rangle$	180	0	0
$\langle 123 \rangle$	284.96	36.69	26.56

TABLE 5.2 – Angles d'Euler (convention de Bunge) en degré pour trois différentes orientations cristallographiques correspondant à une traction suivant l'axe x_3 dans le repère de l'échantillon pour un monocristal d'Aluminium.

E	ν	b	$\dot{\gamma}_0$	n	Δt	τ_c	ϵ
69.0 GPa	0.33	2.83 Å	1.0 s ⁻¹	20	0.01 s	3.0 MPa	10 ⁻⁵

TABLE 5.3 – Paramètres matériau et de simulation de la traction uniaxiale du monocristal d’Aluminium.

τ_1^s (MPa)	θ_0^s (MPa)	θ_1^s (MPa)	a_{auto}	a_{latent}
12.0	150.0	0.0	1.0	2.0

TABLE 5.4 – Paramètres identifiés et utilisés pour la suite en ce qui concerne la loi d’écroutissage de Voce pour la simulation de la traction uniaxiale du monocristal d’Aluminium.

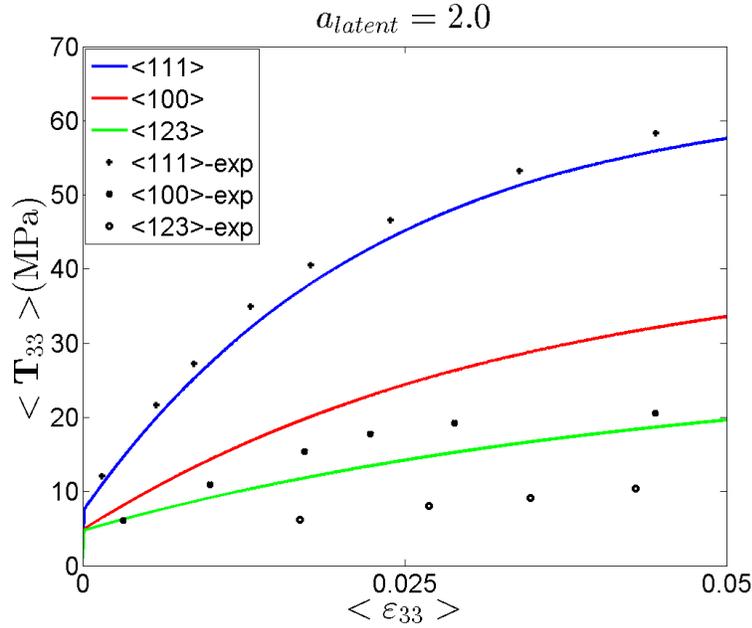


FIGURE 5.3 – Courbes macroscopiques $\langle T_{33} \rangle$ vs. $\langle \epsilon_{33} \rangle$ obtenues avec le modèle 1 lors de la traction uniaxiale d’un monocristal d’Aluminium pour trois différentes orientations cristallographiques ($\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ et $\langle 123 \rangle$). Comparaisons avec les résultats expérimentaux reportés dans [105].

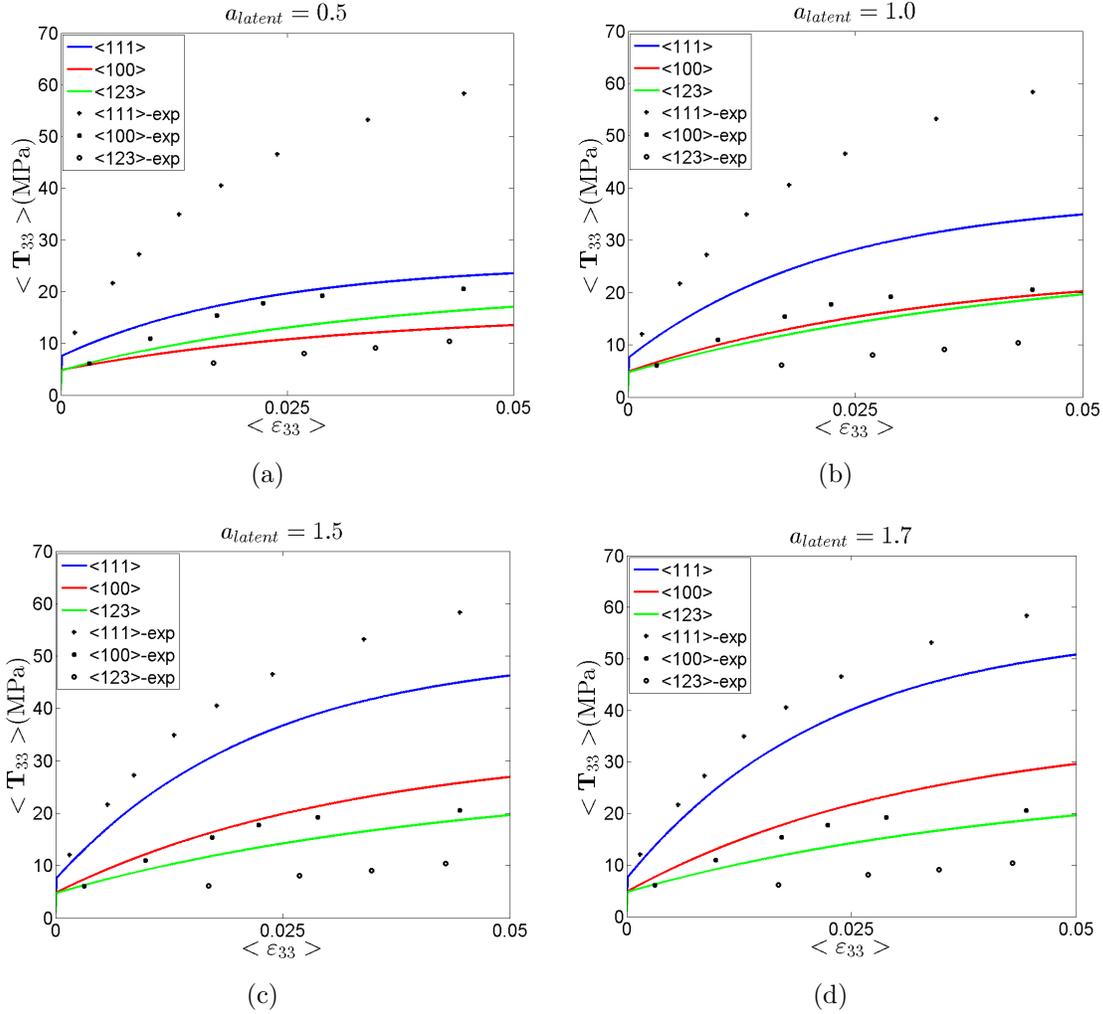


FIGURE 5.4 – Effet de l'écroissage latent a_{latent} sur l'écroissage d'un monocristal d'Aluminium en traction uniaxiale. (a) : $a_{latent} = 0.5$. (b) : $a_{latent} = 1.0$. (c) : $a_{latent} = 1.5$. (d) : $a_{latent} = 1.7$

5.4.2 Etude de la réponse d'un matériau composite modèle : une microstructure périodique à canaux

La cellule unitaire est un matériau composite constitué d'une phase plastique (canal) d'épaisseur s entourée de part et d'autre de précipités purement élastiques d'épaisseur h . Les deux phases sont en Aluminium. Les interfaces entre le canal et les précipités ont une normale suivant la direction x_2 du repère de la cellule et sont supposées parfaites et impénétrables (cf. figure 5.2). La fraction volumique du canal est $f_c = s/(s + 2h)$ et celle des précipités est $f = 2h/(s + 2h)$. Le canal a une orientation cristallographique caractérisée par les angles d'Euler $\varphi_1 = 300^\circ$, $\phi = 54.7358^\circ$, $\varphi_2 = 45^\circ$ (convention de Bunge) dans le repère de l'échantillon.

Le matériau composite ainsi défini est discrétisé avec une grille voxélisée 3D de $64 \times 64 \times 64$ voxels de taille $\delta \simeq 0.7813 \mu m$. Les paramètres matériau et de simulation sont les mêmes que ceux reportés dans le tableau 5.3. Les paramètres d'écrouissage de Voce sont également identiques à ceux du tableau 5.4. Les valeurs du nombre de Courant, du paramètre d'amortissement et de l'ordre du filtre exponentiel utilisées dans ces simulations sont spécifiées dans le tableau 5.5. Ils sont conformes à l'étude paramétrique menée dans le chapitre 4. Les conditions de continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique $\dot{\mathbf{U}}^p$ représentées par les équations (5.50) et (5.52) sont appliquées aux interfaces canal/précipités dans le cas du modèle 2b. La cellule unitaire est soumise à un cisaillement avec des conditions aux limites mixtes en déformations et en contraintes avec une vitesse de déformation imposée $\dot{E}_{13} = \dot{E}_{31} = 0.001 s^{-1}$.

p	c	ε_M
1	0.25	0.2

TABLE 5.5 – Paramètres du filtre exponentiel et nombre de Courant (cf. chapitre 4).

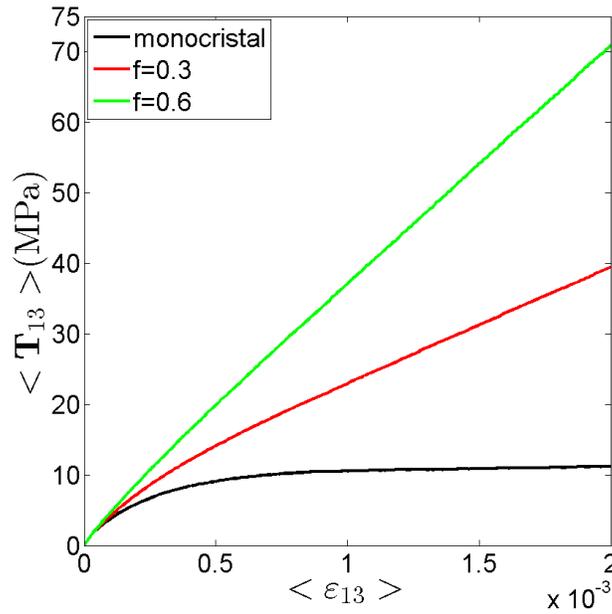


FIGURE 5.5 – Effet de la fraction volumique des précipités sur les courbes macroscopiques $\langle T_{13} \rangle$ vs $\langle \varepsilon_{13} \rangle$ obtenues avec le modèle 1 pour trois différentes fractions de précipités : $f = 0$ (cas du monocristal), $f = 0.3$ et $f = 0.6$.

La figure 5.5 montre les prédictions du modèle 1 sur les effets de fraction volumique de la phase élastique sur les courbes d'écrouissage du matériau composite.

Après la transition élastoplastique, on observe un écrouissage linéaire caractéristique de l'écrouissage cinématique dû à l'effet composite classique. Le modèle 1 permet donc d'appréhender l'augmentation du taux d'écrouissage lorsque la fraction volumique des phases élastiques (précipités) augmente. Les mêmes tendances sur l'effet de la fraction volumique des précipités sur le taux d'écrouissage ont été observées avec les modèles *2a* et *2b*. De plus, Les prédictions du modèle 1 sont en parfait accord avec le modèle analytique rapporté dans [23] :

$$T_{13}^I = \langle T_{13} \rangle + 2\mu(1 - f)\varepsilon_{13}^{p,M}, \quad (5.52)$$

où $\varepsilon_{13}^{p,M}$ est la valeur de ε_{13}^p dans le canal (matrice plastique) et T_{13}^I représente la valeur de T_{13} dans les précipités. En effet, en prenant par exemple le cas de la fraction volumique $f = 0.3$, et en se référant aux figures 5.6(a) et (c) qui présentent les profils de la contrainte T_{13} et de la distorsion plastique U_{13}^p obtenues par le modèle 1, on trouve $\varepsilon_{13}^{p,M} = 0.00176$ et $T_{13}^I = 104$ MPa après 0.2% de déformation. D'après la figure 5.5, la valeur de $\langle T_{13} \rangle$ vaut 39.45 MPa à 0.2% de déformation. Le calcul de la contrainte T_{13}^I dans les précipités à partir du modèle analytique (équation (5.52)) donne 103.36 MPa. La valeur de $T_{13}^I = 104$ MPa relevée sur la figure 5.6 est donc très proche de la valeur théorique, ce qui confirme la validité du modèle numérique par rapport au modèle analytique statique (équation (5.52)) dans le cas de l'élasticité isotrope homogène.

Les profils de U_{13}^p , \dot{U}_{13}^p et L_{13}^p obtenus au milieu de la cellule unitaire le long de l'axe x_2 sont comparés dans les figures 5.6(c), (d) et (e) pour les trois modèles. Les valeurs de U_{13}^p , \dot{U}_{13}^p et L_{13}^p sont uniformes et positives dans le canal et nulles dans les précipités. Cette comparaison révèle également la similarité des profils obtenus avec les modèles 1 et *2a*, contrairement à ceux obtenus par le modèle *2b* qui sont continus au niveau des interfaces canal/précipités grâce à l'implémentation des conditions de continuité tangentielle. Cette similarité s'explique par les figures 5.6(d) et (e), où les valeurs de \dot{U}_{13}^p et L_{13}^p sont quasiment identiques. Cela montre que la valeur de la vitesse de distorsion plastique $\alpha \times \mathbf{v}$ due au transport des GNDs est faible par rapport à celle des SSDs (\mathbf{L}^p). Pour une fraction volumique f donnée, on constate une augmentation de la contrainte macroscopique du matériau composite dans le cas du modèle *2b* (figure 5.7). Ce durcissement est la signature de la différence de contraintes internes $T_{13} - \langle T_{13} \rangle$ (figure 5.6(b)) entre les modèles 1 et *2a* d'une part et le modèle *2b* d'autre part, provoquée par la condition sur le glissement aux interfaces qui sont considérées comme des murs élastiques et impénétrables (condition de continuité tangentielle de la distorsion plastique émanant de la conservation du vecteur de Burgers à l'interface). L'amplitude de la contrainte interne obtenue par le modèle *2b* augmente dans le canal et diminue dans les précipités, par rapport aux profils des modèles 1 et *2a*. Dans les trois cas, les prédictions sont en accord avec celles reportées dans [209] où les équations de la RMPFDM ont été résolues par différences finies et également appliquées au même type de microstructure mais en une dimension (1D).

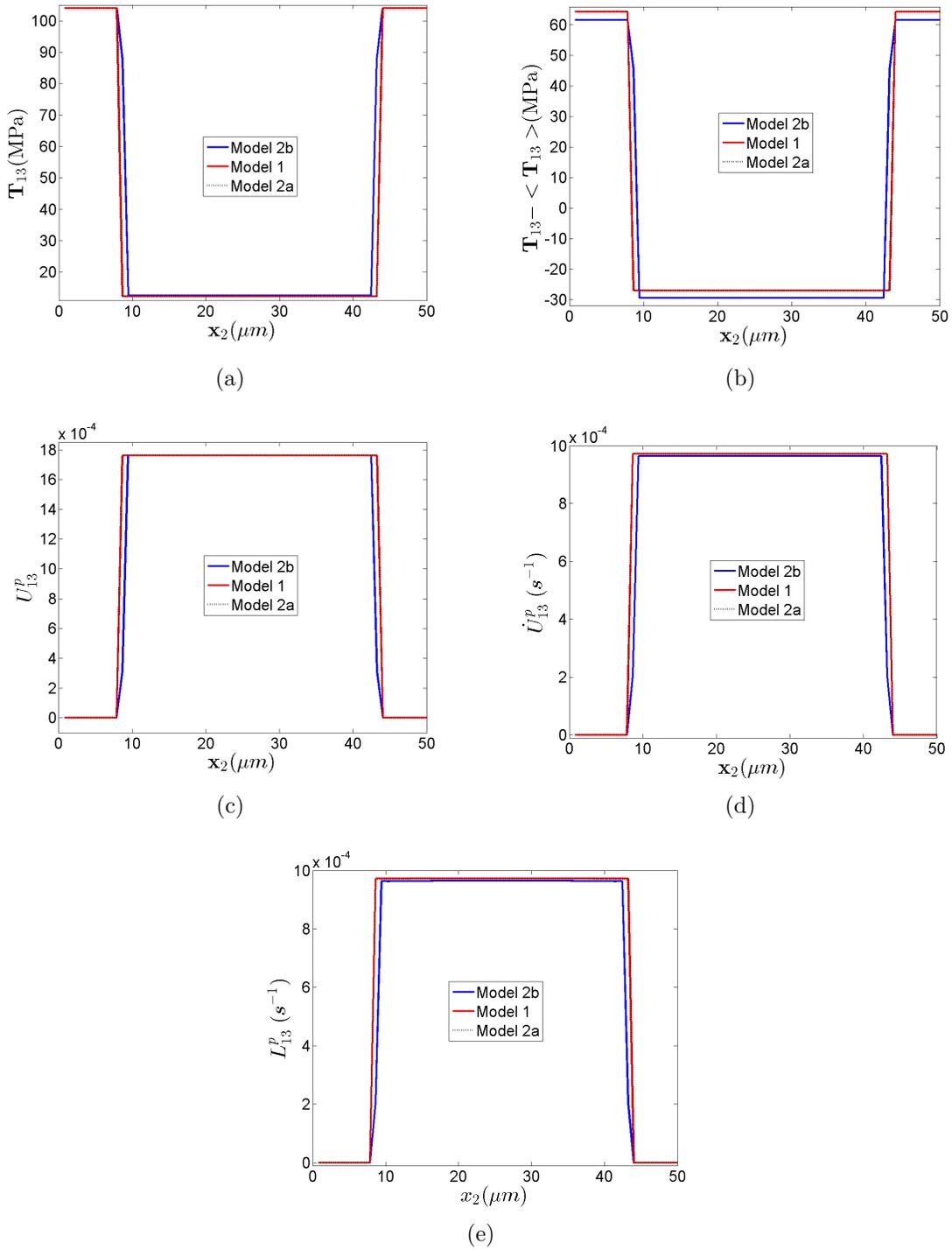


FIGURE 5.6 – Comparaisons des profils de contrainte T_{13} , de contrainte interne $T_{13} - \langle T_{13} \rangle$, de distorsion plastique U_{13}^p , de la vitesse de distorsion plastique \dot{U}_{13}^p et de la vitesse de distorsion plastique due aux SSDs L_{13}^p obtenus par les modèles 1, 2a, et 2b avec une fraction volumique $f = 0.3$ et après 0.2% de déformation.

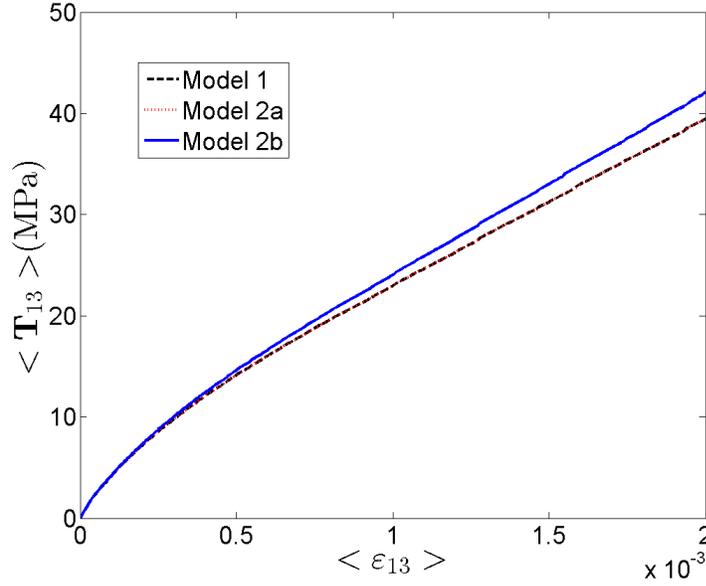


FIGURE 5.7 – Comparaisons des courbes macroscopiques $\langle T_{13} \rangle$ vs. $\langle \varepsilon_{13} \rangle$ obtenues avec les modèles 1, 2a, et 2b dans le cas d’une fraction volumique $f = 0.3$. Le modèle 2b donne un durcissement plus important du fait de la condition d’interface sur la vitesse de distorsion plastique associée aux SSDs et aux GNDs.

Par ailleurs, la figure 5.8 compare les profils des densités de dislocations non nulles obtenues au milieu de la cellule unitaire le long de l’axe x_2 avec les modèles 1 (lignes continues noires), 2a (lignes continues rouges) et 2b (lignes continues bleues) après 0.06% de déformation macroscopique, pour une fraction volumique $f = 0.3$. A partir de l’équation de transport, on obtient une forte activation des densités de dislocations de type vis (α_{11} , α_{33}) et coins (α_{21} , α_{23} , α_{31} , α_{13}) près des interfaces pour accommoder l’incompatibilité de la déformation plastique due à la forte variation spatiale de \mathbf{L}^p dans cette région (discontinuité au passage de l’interface). Les densités de dislocations (α_{11} , α_{33} , α_{31} et α_{13}) présentent une structure polarisée : les densités de dislocations qui composent le dipôle sont bien de signes opposés. Elles ont également des vitesses de signes opposés et orientées vers les précipités. Dans le cas des composantes (α_{21} , α_{23}), on dénote une structure bipolarisée. Dans un premier temps, un dipôle est généré aux interfaces dû à la discontinuité de \mathbf{L}^p . Les densités de dislocations qui constituent ce dipôle tentent de pénétrer les précipités. Elles s’accumulent aux interfaces et font accroître la distorsion plastique dans cette zone. Dans un deuxième temps, on dénote également la formation d’un second dipôle qui se déplace vers le centre du canal. L’implémentation de la condition de continuité tangentielle aux interfaces dans le modèle 2b fait accroître d’avantage les densités de dislocations (α_{21} , α_{23}) dans cette zone. Ces résultats sont similaires à ceux rapportés dans [209] et [189] (dans le cas d’un matériau composite à matrice métallique en 3D avec des lois d’écrouissage plus raffinées et où les équations de la

RPMFDM ont été résolues par la méthode des éléments finis sous Abaqus).

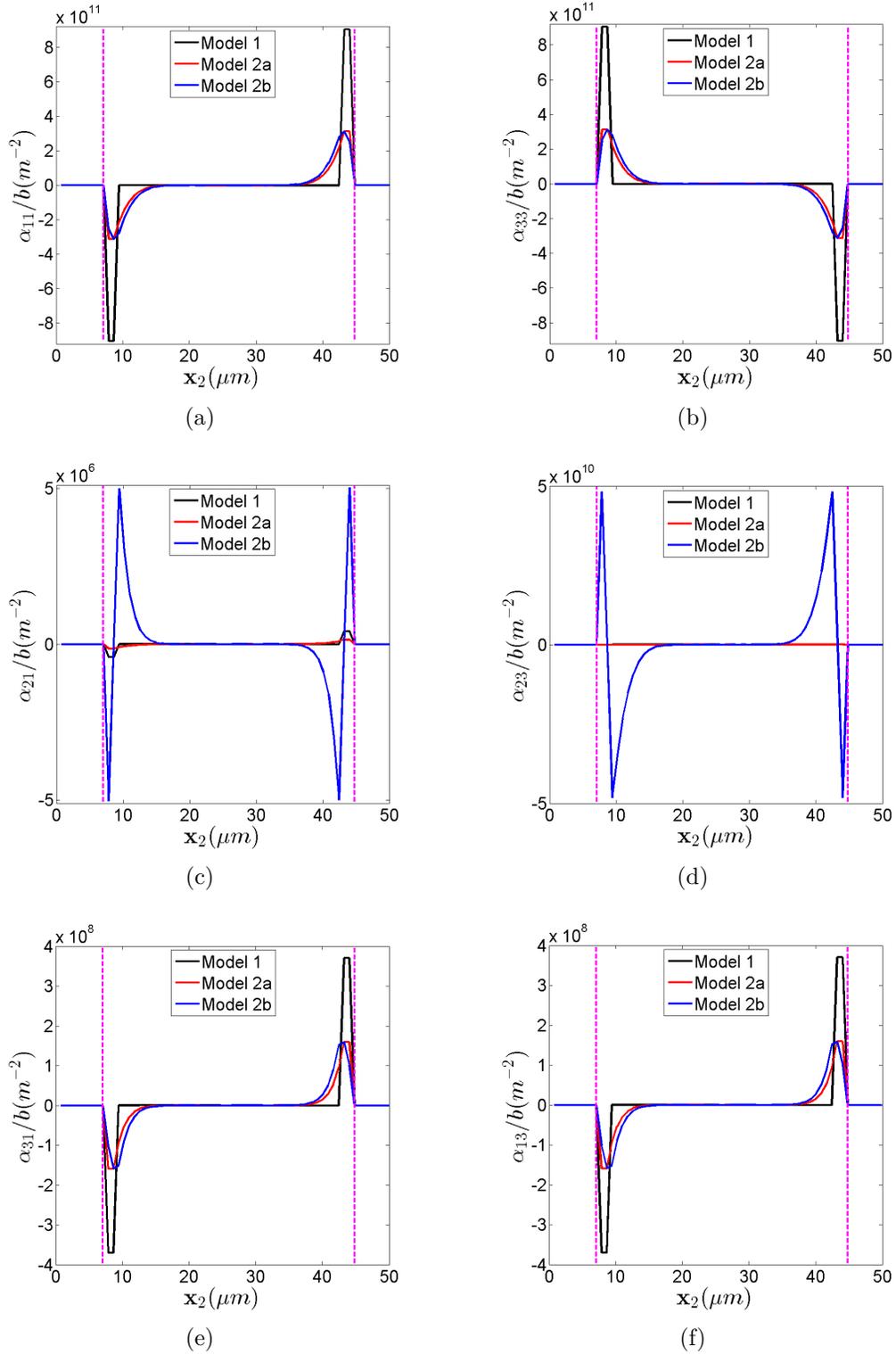


FIGURE 5.8 – Comparaison des distributions des densités de dislocations obtenues avec le modèle 1 (à partir de l'équation d'incompatibilité) et les modèles 2a et 2b (à partir de l'équation de transport des densités de dislocations et de l'équation d'incompatibilité) après 0.06% de déformation macroscopique, pour une fraction volumique $f = 0.3$. Les interfaces canal/précipités sont délimitées par des lignes pointillées en couleur magenta.

5.4.3 Application à un polycristal d'Aluminium

Nous appliquons ici les modèles 1 et 2a à un agrégat polycristallin d'Aluminium périodique constitué de 100 grains équiaxes et avec une texture initiale aléatoire (figure 5.9). La cellule unitaire est discrétisée avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128$ voxels de taille $\delta \simeq 0.7813 \mu m$. Les paramètres du matériau, de simulation et de la loi de Voce utilisés dans cette section sont identiques à ceux des tableaux 5.3, 5.4 et 5.5. La cellule unitaire est sollicitée en traction uniaxiale avec des conditions aux limites mixtes en déformations et en contraintes avec une vitesse de déformation imposée $\dot{E}_{33} = 0.001 s^{-1}$.

La figure 5.10 montre la norme $\|\boldsymbol{\alpha}\|/b = \sqrt{\alpha_{ij}\alpha_{ij}}/b$, ($i = 1, 3$ et $j = 1, 3$) des densités de dislocations obtenues après 0.1% de déformation macroscopique. La figure 5.10(a) montre la norme des densités de dislocations géométriquement nécessaires obtenues avec le modèle 1 à partir de la relation d'incompatibilité $\boldsymbol{\alpha} = -\text{rot } \mathbf{U}^p$. Cette relation d'incompatibilité implique seulement l'activation des densités de GNDs à partir de l'incompatibilité dans la mobilité des SSDs, mais ne prend pas en compte leur transport. On peut constater logiquement une importante concentration des densités de dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) aux joints de grains pour accommoder l'incompatibilité de la déformation plastique. Il faut noter que la procédure I_C (différences finies centrées) évite des oscillations numériques sur les profils de α . La figure 5.10(b) montre la norme des densités de dislocations géométriquement nécessaires obtenues à partir du modèle 2a basé sur l'équation de transport des densités de dislocations. Tout comme dans le cas de la figure 5.10(a), on dénote dans un premier temps la prédominance des densités de GNDs aux joints de grains grâce à la présence des SSDs à travers le terme source $-\text{rot } \mathbf{L}^p$. Contrairement au cas de la figure 5.10(a) où les densités de dislocations restent localisées aux joints de grains, on assiste désormais au transport des densités de GNDs créées aux joints de grains vers l'intérieur des grains. L'évolution de la norme $\|\boldsymbol{\alpha}\|/b$ le long de l'axe x_3 à 0.02% et 0.1% de déformation macroscopique avec le modèle 1 et le modèle 2a est montrée sur la figure 5.11. On observe l'effet des densités de GNDs concentrées aux interfaces dans le cas du modèle 1 alors que ces densités sont également présentes à l'intérieur des grains et moins concentrées aux interfaces dans le cas du modèle 2a. Cette figure montre un étalement plus important des densités de GNDs pour le modèle 2a.

Les cartes de champs locaux de contrainte T_{33} , de contrainte interne T_{33}^{int} et de déformation plastique U_{33}^p obtenues avec les modèles 1 et 2a après 0.1% de déformation macroscopique sont comparées sur la figure 5.12. On observe une forte hétérogénéité de ces champs locaux d'un grain à l'autre. Cette comparaison révèle que ces champs locaux sont quasiment identiques pour les deux modèles, de même que les courbes de contrainte macroscopique ($\langle T_{33} \rangle$ vs $\langle \varepsilon_{33} \rangle$) reportées sur la figure 5.13. Comme dans le cas de la microstructure à canaux, cela est dû à la faible mobilité des GNDs implémentée dans le modèle RPMFDM au travers de l'équation (5.29).

La figure 5.14 montre l'évolution des champs \dot{U}_{33}^p , U_{33}^p , T_{33} et T_{33}^{int} le long de l'axe x_3 au milieu de la cellule unitaire à 0.02% et 0.1% de déformation macroscopique pour le modèle 2a. On peut constater une forte augmentation de la contrainte T_{33} et de la distorsion plastique U_{33}^p , ainsi que l'accentuation des hétérogénéités spatiales.

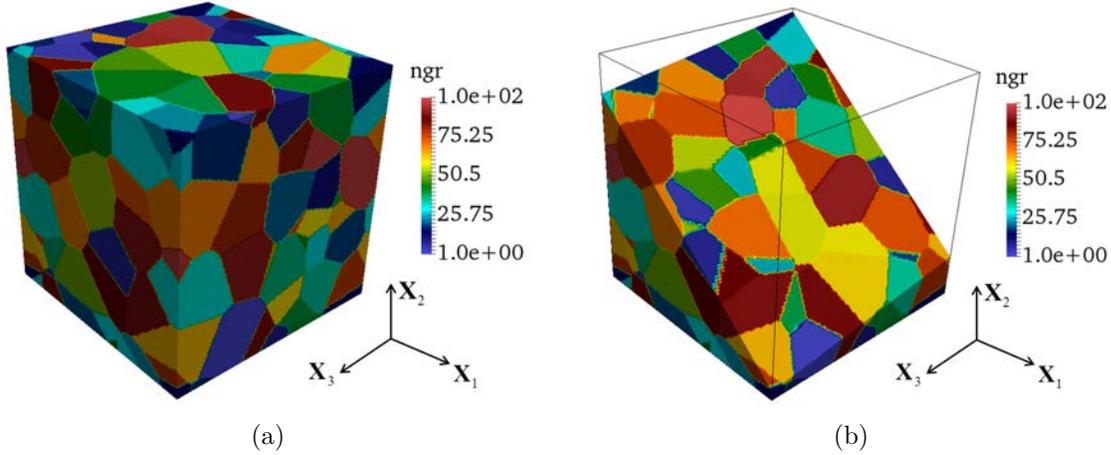


FIGURE 5.9 – (a) : Polycristal d'Aluminium périodique constitué de 100 grains équiaxes (Voronoi périodique) et avec une texture initiale aléatoire. (b) : Coupe oblique du polycristal défini en (a).

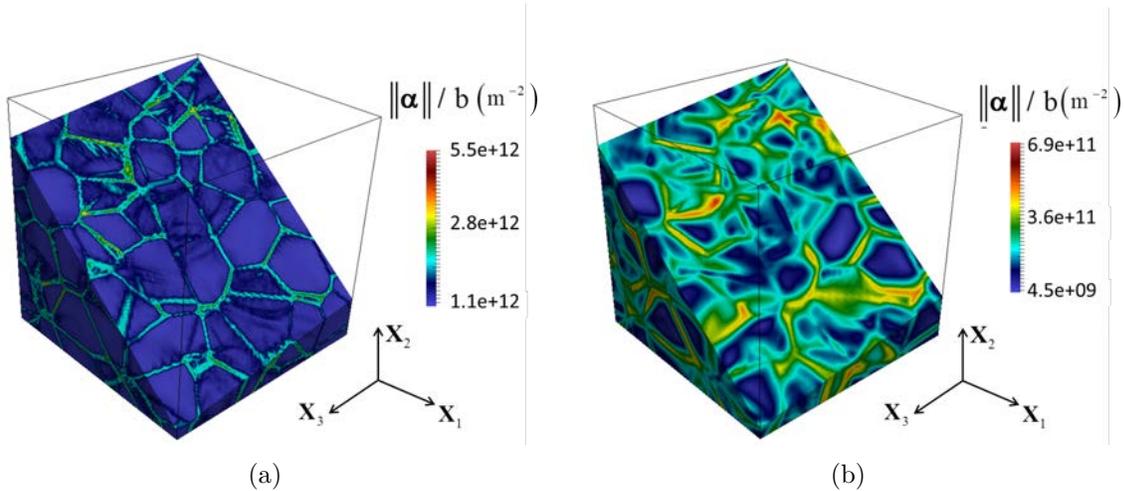


FIGURE 5.10 – Distributions de GNDs après 0.1% de déformation macroscopique. (a) : Distributions de GNDs localisées aux joints de grains avec la relation d'incompatibilité $\alpha = -\text{rot } \mathbf{U}^p$ à partir du modèle 1. (b) : Distribution de GNDs obtenues à partir de l'équation de transport $\dot{\alpha} = -\text{rot } (\alpha \times \mathbf{v} + \mathbf{L}^p)$ à partir du modèle 2a.

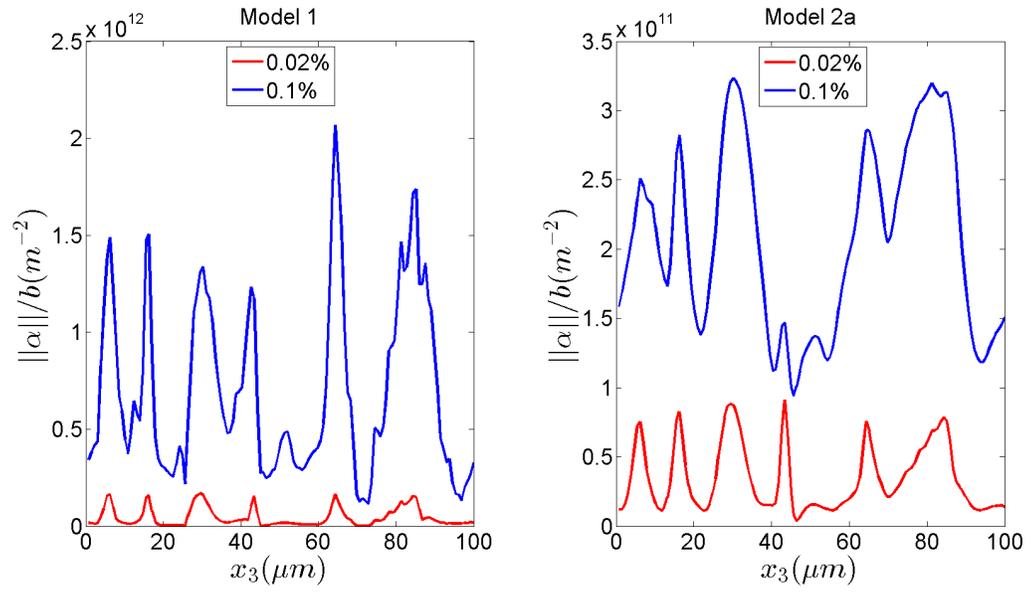


FIGURE 5.11 – Evolution de $\|\alpha\|/b$ au milieu de la cellule unitaire, le long de l'axe x_3 à 0.02% et 0.1% de déformation macroscopique pour les modèles 1 et 2a.

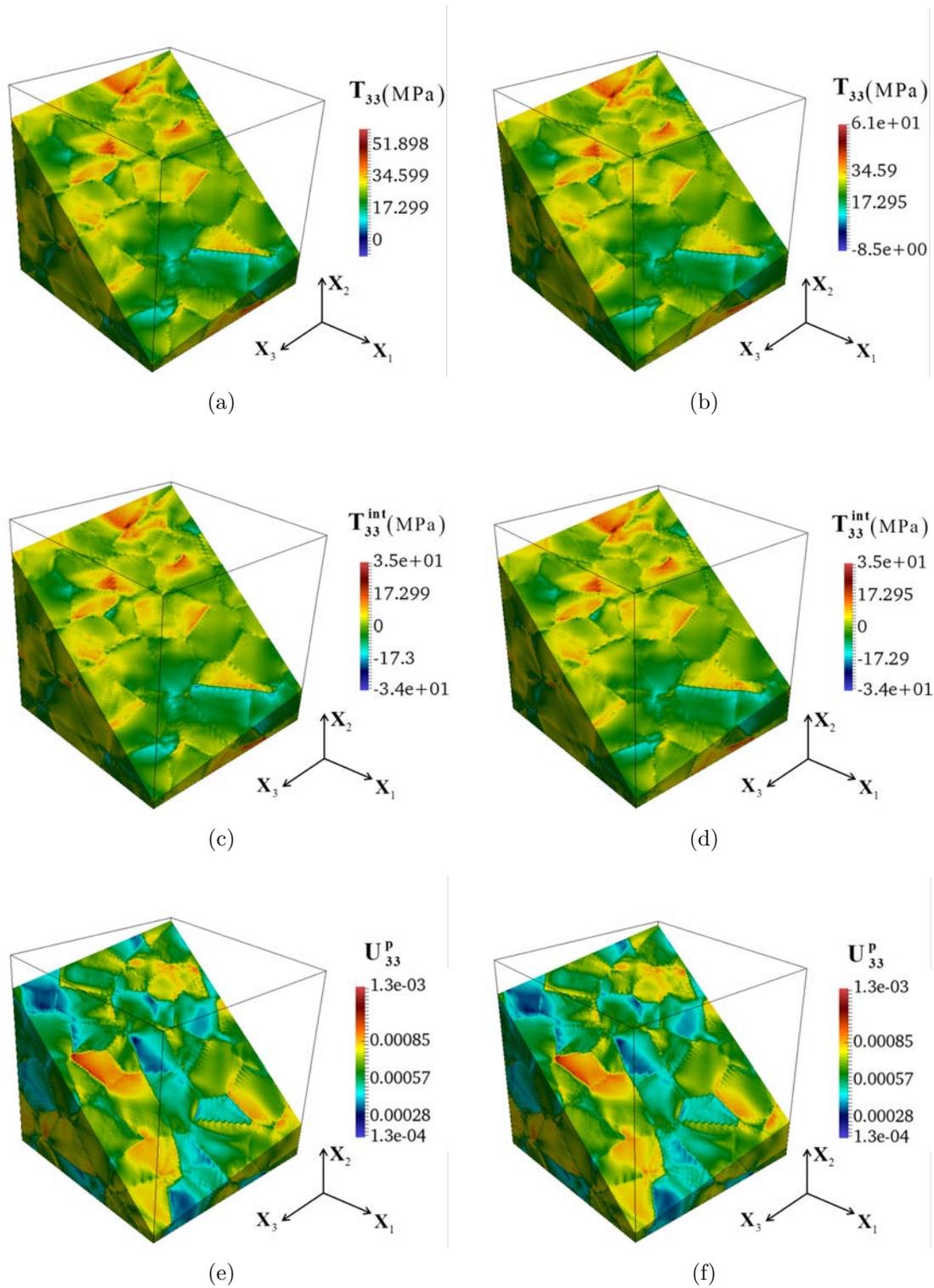


FIGURE 5.12 – Cartes des champs locaux de contraintes T_{33} , de contraintes internes T_{33}^{int} et de déformations plastiques U_{33}^p à 0.1% de déformation macroscopique. A gauche : Résultats obtenus avec le modèle 1. A droite : résultats obtenus avec le modèle 2a.

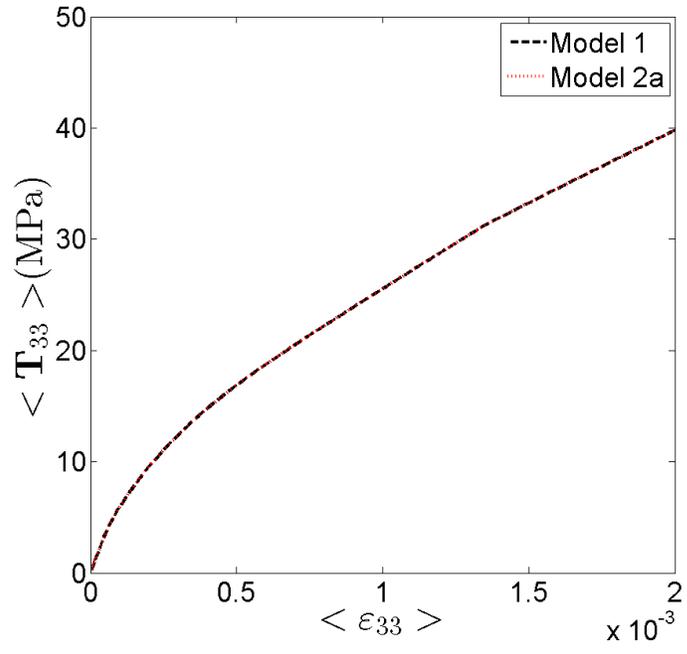


FIGURE 5.13 – Comparaisons des réponses macroscopiques en traction $\langle T_{33} \rangle$ vs $\langle \epsilon_{33} \rangle$ obtenues avec le modèle 1 et le modèle 2a.

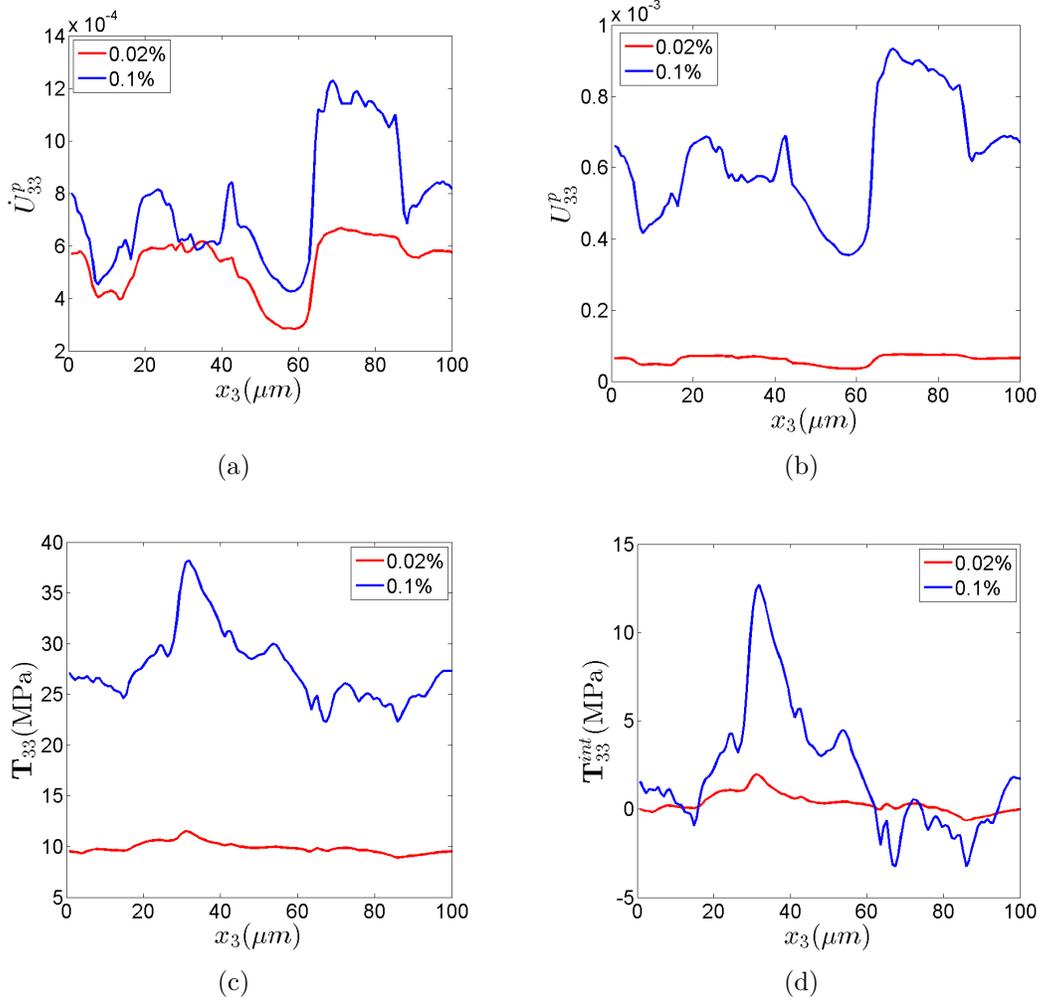


FIGURE 5.14 – Evolution des champs locaux (a) : \dot{U}_{33}^p , (b) : U_{33}^p , (c) : T_{33} et (d) : T_{33}^{int} le long d'une ligne passant par le milieu de la cellule unitaire le long de l'axe x_3 , à 0.02% et 0.1% de déformation macroscopique.

5.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons développé une technique numérique basée sur la FFT pour la résolution des équations de la version réduite de la mécanique des champs de dislocations à l'échelle mésoscopique ("RPMFDM : Reduced Phenomenological Field Dislocation Mechanics" en anglais) pour un comportement élasto-viscoplastique cristallin. La technique prend en compte la contribution des dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) et statistiquement stockées (SSDs), ainsi que les conditions de continuité tangentielle aux interfaces de type joints de phase, avec une phase impénétrable (précipités).

Pour assurer la stabilité de cette technique numérique, différentes techniques de différenciations dans l'espace de Fourier ont été utilisées pour le calcul des dérivées partielles de premier et de second ordres (opérateurs $\mathbf{\Gamma}$, \mathbf{div} et \mathbf{rot}). Notamment les procédures LS_R et I_C ont été utilisées dans la résolution respective des équations de type Lippmann-Schwinger et d'incompatibilité. Le filtre exponentiel développé au chapitre 4 a été utilisé dans la résolution de l'équation de transport.

Trois différents modèles dérivés des formulations EVP-FFT et EVP-RPMFDM-FFT ont été comparés. Il s'agit des modèles 1 (basé sur la formulation EVP-FFT classique sans la prise en compte des dislocations géométriquement nécessaires), $2a$ (basée sur la présente formulation EVP-RPMFDM-FFT sans la prise en compte des conditions de continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique aux interfaces de type joints de phases ou de grains) et $2b$ (basée sur la présente formulation EVP-RPMFDM-FFT avec la prise en compte des conditions de continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique aux interfaces de type joints de phases ou de grains).

Ces trois modèles ont été appliqués et comparés dans l'étude de deux types de microstructures. La première est un matériau composite périodique constitué d'une microstructure à canaux. La deuxième est un polycristal d'Aluminium périodique constitué de 100 grains équiaxes et avec une texture initiale aléatoire (i.e. isotrope). Dans le cas de la microstructure à canaux, les modèles 1, $2a$ et $2b$ ont permis d'appréhender l'effet de la fraction volumique des précipités (phase élastique) sur le taux d'érouissage. Les résultats ont également révélé l'influence de la continuité tangentielle aux interfaces canal/précipités de la vitesse de distorsion plastique sur le durcissement du matériau et sur les structures de dislocations de types vis et coins qui se forment près des interfaces pour accommoder l'incompatibilité de la déformation plastique due à la forte variation spatiale de \mathbf{L}^p dans cette zone. Ces structures de dislocations présentent des structures pôlaires (pour les densités de dislocations de type vis) et dipôlaires (pour les densités de dislocations de type coins). Le durcissement du matériau est la conséquence de la différence de contraintes internes entre les modèles 1 et $2a$ d'une part et le modèle $2b$ d'autre part, provoquée par la condition de continuité sur le glissement plastique à l'interface. Ces résultats sont similaires à ceux rapportés dans [209] et [189] où les équations de la RMPFDM ont été résolues par différences finies et par éléments finis, respectivement. Dans le cas du polycristal, les résultats obtenus portent sur la comparaison des champs locaux et macroscopiques obtenus avec les modèles 1 et $2a$, et sur la formation et le transport des densités de GNDs. Les comparaisons entre les différents modèles dans les deux cas de microstructures ont révélé que les résultats obtenus avec les modèles 1 et $2a$ sont quasiment identiques. Cela est dû à la faible mobilité des GNDs ($\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}$) par rapport à celle des SSDs au travers du terme \mathbf{L}^p , qui elle est quasiment identique à la vitesse de distorsion plastique totale $\dot{\mathbf{U}}^p$.

Les travaux actuels portent sur l'étude du polycristal avec la prise en compte des conditions de continuité tangentielle aux interfaces de type joints de grains

dans la cas du modèle *2b* avec des lois cinétiques et d'écrouissage raffinées. Une technique récemment développée par Lieberman et al. [147] basée sur les moments Cartésiens de premier ordre des fonctions indicatrices binaires pourra être utilisée pour déterminer les normales aux joints de grains directement à partir de l'image voxélisée de la microstructure. Ces normales seront exploitées pour implémenter la condition de saut pour la vitesse de distorsion plastique aux joints de grains de l'agrégat. Cela modifiera l'interaction des GNDs et des SSDs par rapport aux modèles 1 et *2a*. Nous allons pouvoir étudier l'effet des conditions de continuité sur le développement des contraintes internes et sur l'écrouissage cinématique, ainsi que les effets de taille de grains. Par ailleurs, des études sur les effets de taille seront aussi réalisées dans le cas de la microstructure à canaux.

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale

Dans cette thèse, des méthodes spectrales basées sur la transformée de Fourier rapide ("fast Fourier transform" en anglais ou "FFT") ont été développées pour résoudre les équations de champs et d'évolution des densités de dislocations polarisées ou géométriquement nécessaires dans la théorie de la mécanique des champs de dislocations ("Field Dislocations Mechanics" en anglais et notée "FDM") et de son extension phénoménologique et mésoscopique ("Phenomenological Mesoscopic Field Dislocations Mechanics" en anglais et notée "PMFDM").

Ce mémoire a commencé par une revue bibliographique sur les mécanismes de déformations plastiques basés sur le glissement des dislocations individuelles et collectives dans les matériaux à structure cubique à faces centrées (CFC). Nous avons également présenté la formulation classique de la plasticité cristalline pour les monocristaux et pour les agrégats polycristallins. Pour tenir compte de certains aspects de la plasticité qui échappent à la théorie conventionnelle comme par exemple la formation des structures de dislocations et la prise en compte des effets de tailles et de longueurs internes, nous avons introduit brièvement les théories de plasticité actuelles de natures discrètes et continues qui sont capables de prendre en compte la formation des structures de dislocations géométriquement nécessaires, ainsi que les interactions entre ces dernières dans un contexte de plasticité non-locale.

Dans le deuxième chapitre, les principales équations de la théorie de la mécanique des champs de dislocations (Field Dislocation Mechanics en anglais) et de son extension phénoménologique mésoscopique (PMFDM : Phenomenological Mesoscopic Field Dislocations Mechanics en anglais), notamment les équations élasto-statiques et d'évolution des densités de dislocations, et leurs résolutions respectives par la méthode des éléments finis ont été présentées. Nous avons montré que les distorsions élastiques incompatibles sont déterminées par la résolution des équations de type Poisson, alors que la détermination des distorsions élastiques compatibles repose sur la résolution des équations de type Navier. L'évolution des densités de dislocations

a été prise en compte au travers d’une équation de transport des densités de dislocations de type hyperbolique. Nous avons également rappelé les équations de la RPMFDM qui sont définies par une opération de moyenne spatiale et temporelle des variables de champs de la FDM. Ces équations sont identiques à celles de la FDM à la seule différence que la vitesse de distorsion plastique ainsi que l’équation de transport doivent inclure une contribution supplémentaire de la distorsion plastique provenant des dislocations statistiquement stockées. La RPMFDM s’affranchit de la décomposition de Stokes-Helmholtz et simplifie la théorie PMFDM.

Dans le troisième chapitre, une approche spectrale a été développée pour résoudre les équations statiques de la FDM pour la détermination des champs mécaniques locaux provenant des densités de dislocations polarisées et des hétérogénéités élastiques présentes dans les matériaux de microstructure supposée périodique et au comportement élastique linéaire. Les champs élastiques ont été calculés de façon précise et sans oscillation numérique même lorsque les densités de dislocations sont concentrées sur un seul pixel (pour les problèmes à deux dimensions) ou sur un seul voxel (pour les problèmes à trois dimensions). Ces résultats ont été obtenus grâce à la résolution des équations de type Poisson et de type Lippmann-Schwinger avec incompatibilités avec un algorithme itératif à point fixe (schéma basique), avec l’application de formules de différenciation spatiale pour les dérivées premières et secondes dans l’espace de Fourier basées sur des schémas à différences finies combinées à la transformée de Fourier discrète. Les résultats obtenus portent sur la détermination précise des champs élastiques des dislocations individuelles de types vis et coin, et des champs élastiques d’interaction entre des inclusions de géométries variées et différentes distributions de densités de dislocations telles que les dipôles ou les boucles de dislocations dans un matériau composite biphasé et des microstructures tridimensionnelles. La validation de cette approche a été effectuée par des comparaisons avec les solutions analytiques et les simulations éléments finis. Les résultats ont également montré l’efficacité de la présente approche FFT en terme de temps de calcul par comparaison à la méthode des éléments finis dans le cas de l’élasticité linéaire et homogène.

Dans le quatrième chapitre, une approche spectrale numérique, basée sur la FFT, a été développée pour résoudre de façon rapide, stable et précise, l’équation de transport de type hyperbolique régissant l’évolution spatio-temporelle du tenseur densité de dislocations dans la théorie de la FDM. Cette approche est basée sur l’utilisation des filtres spectraux passe-bas pour contrôler les oscillations inhérentes aux méthodes de Fourier (phénomène de Gibbs) et les instabilités numériques de nature hyperbolique. La stabilité et la précision de cette approche spectrale ont été confirmées par des comparaisons satisfaisantes avec la solution exacte et les approximations éléments finis dans le cas des problèmes unidimensionnels (1D) de propagation et d’annihilation des dislocations et dans le cas de l’extension d’une boucle polygonale bidimensionnelle (2D). La présente approche FFT a été également appliquée aux simulations 3D telle que l’extension et l’annihilation complète sans débris résiduels d’une boucle polygonale tridimensionnelle (3D). Ces simulations ont

également montré que la présente approche FFT est plus efficace que les techniques éléments finis en terme de temps de calcul.

Dans le cinquième chapitre, une technique numérique a été développée pour la résolution des équations de la version réduite de la mécanique des champs de dislocations phénoménologique et mésoscopique (RPMFDM) dans le cadre d'une formulation FFT avec un comportement élasto-visco-plastique. La méthode EVP-FFT, basée sur l'utilisation du schéma itératif de type Lagrangien augmenté pour la résolution de l'équation d'équilibre dans l'espace de Fourier, a été étendue pour prendre en compte les contributions des dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) et statistiquement stockées (SSDs), ainsi que les conditions de continuité tangentielle de la distorsion plastique aux interfaces de type joints de phases dans le cas d'une microstructure à canaux. La stabilité des solutions a été obtenue grâce à l'utilisation de formules de différenciation spatiales pour les dérivées partielles de premier et de second ordre dans l'espace de Fourier basées sur des schémas à différences finies combinées à la transformée de Fourier discrète. La nouvelle méthode baptisée EVP-RPMFDM-FFT a été appliquée à l'étude des microstructures à canaux/précipités et les polycristaux pour les métaux à structure cubique à faces centrées (CFC). Nous avons étudié notamment, les effets de la fraction volumique des précipités sur le durcissement du matériau, ainsi que les effets de la prise en compte de la continuité tangentielle de la vitesse de distorsion plastique aux interfaces canal/précipités sur le durcissement du matériau et sur la formation et le transport des structures de dislocations. Dans le cas du polycristal, les conditions de continuité aux joints de grains n'ont pas été encore implémentées. Les résultats obtenus ont porté sur la détermination des champs locaux et macroscopiques, ainsi que la formation des densités de GNDs et leur distribution.

Perspectives

Les techniques développées dans cette thèse ouvrent la voie aux perspectives suivantes :

La première perspective concerne l'extension des travaux du chapitre 5 à la prise en compte des conditions de continuité tangentielles aux joints de grains pour compléter l'étude sur les polycristaux, afin d'étudier les effets des joints de grains sur le durcissement du matériau. D'autre part, des études sur les effets de tailles dans le cas de la microstructure à canaux peuvent être réalisées par l'introduction d'échelles de longueurs internes intra-canal qui vont modifier la mobilité des densités de dislocations et l'écroissage de nature cinématique [186, 185].

La deuxième perspective porte sur l'extension des approches spectrales développées dans cette thèse aux microstructures plus complexes élastiques anisotropes et à

d'autres types de défauts cristallins tels que les densités de désinclinaisons pour obtenir les rotations élastiques incompatibles occasionnées aux joints de grains [82, 210], les densités de désinclinaisons généralisées qui sont introduites pour rendre compte de façon continue, des discontinuités de la distorsion élastique qui peuvent survenir aux niveaux des hétéro-interfaces et des pointes de macles [6, 24].

A plus long terme, une extension de la présente méthode FDM-FFT (et RPMFDM-FFT) en grandes transformations est également envisageable.

Bibliographie

- [1] A. Acharya. A model of crystal plasticity based on the theory of continuously distributed dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 :761 – 784, 2001.
- [2] A. Acharya. Driving forces and boundary conditions in continuum dislocation mechanics. *Proc. R. Soc. Lond. A*, (June), 2003.
- [3] A. Acharya. Jump condition for GND evolution as a constraint on slip transmission at grain boundaries. *Philosophical Magazine*, 87 :1349–1359, 2007.
- [4] A. Acharya and J. L. Bassani. Lattice incompatibility and a gradient theory of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(8) :1565–1595, 2000.
- [5] A. Acharya and A. J. Beaudoin. Grain size effect in viscoplastic polycrystals at moderate strains. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :2213 – 2230, 2000.
- [6] A. Acharya and C. Fressengeas. Coupled phase transformations and plasticity as a field theory of deformation incompatibility. *International Journal of fracture*, (174) :87–94, 2012.
- [7] A. Acharya and A. Roy. Size effects and idealized dislocation microstructure at small scales : Predictions of a Phenomenological model of Mesoscopic Field Dislocation Mechanics : Part I. *J. Mech. Phys. Solids*, 54 :1687–1710, 2006.
- [8] E. C. Aifantis. Mesoscopic simulations of plastic deformation. *Material Science and Engineering*, 81 :563–574, 1986.
- [9] R. J. Amodeo and N. M. Ghoneim. Dislocation dynamics .1. A proposed methodology for deformation micromechanics. *Physical Review B*, 41(10) :6958–6967, 1990.
- [10] R. J. Amodeo and N. M. Ghoneim. Dislocation dynamics .2. Applications to the formation of persistent slip bands, planar arrays and dislocation cells. *Physical Review B*, 61(18) :11956–11966, 1990.

- [11] B. S. Anglin, R. A. Lebensohn, and A. D. Rollett. Validation of a numerical method based on Fast Fourier Transforms for heterogeneous thermoelastic materials by comparison with analytical solutions. *Comp. Mater. Sci.*, 87 :209–217, 2014.
- [12] A. Arsenlis, W. Cai, M. Tang, M. Rhee, T. Opperstrup, G. Hommes, T. G. Pierce, and V. V. Bulatov. Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15 :553, 2007.
- [13] R.J. Asaro. Crystal plasticity. *ASME Journal of Applied Mechanics*, 50 :921–934, 1983.
- [14] M. F. Ashby. Deformation of plastically non-homogeneous materials. *Philosophical Magazine*, 21 :399–424, 1970.
- [15] M. Avlonitis, M. Zaiser, and E. C. Aifantis. Some exactly solvable models for the statistical evolution of internal variables during plastic deformation. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 15 :131–138, 2000.
- [16] D. S. Balint, V. S. Deshpande, A. Needleman, and E. Van der Giessen. Discrete dislocation plasticity analysis of the grain size dependence of the flow strength of polycrystals. *International Journal of Plasticity*, 24 :2149–2172, 2008.
- [17] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin, and G. Cailletaud. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : F.E. model. *International Journal of Plasticity*, 17 :513–536, 2001.
- [18] F. Barbe, S. Forest, and G. Cailletaud. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part II. Results. *International Journal of Plasticity*, 17 :537–563, 2001.
- [19] S. Berbenni. *élastoplasticité des matériaux polycristallins : Modélisation micromécanique et physique. Application au comportement dynamique et à l’effet bake hardening*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure d’Arts et Métiers, 2002.
- [20] S. Berbenni, M. Berveiller, and T. Richeton. Intra-granular plastic slip heterogeneities : Discrete vs. Mean Field approaches. *International Journal of Solids and Structures*, 45 :4147–4172, 2008.
- [21] S. Berbenni and L. Capolungo. A Mori-Tanaka homogenization scheme for non-linear elasto-viscoplastic heterogeneous materials based on translated fields : An affine extension. *C. R. Mécanique*, 343 :95–106, 2015.
- [22] S. Berbenni, V. Favier, X. Lemoine, and M. Berveiller. Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures. *Materials Science and Engineering*, A 372 :128–136, 2004.

- [23] S. Berbenni, B. Paliwal, and M. Cherkaoui. A micromechanics-based model for shear-coupled grain boundary migration in bicrystals. *International Journal of Plasticity*, 44 :68–94, 2013.
- [24] S. Berbenni, V. Taupin, K. S. Djaka, and C. Fressengeas. A numerical spectral approach for solving elasto-static field dislocation and g-disclination mechanics. *International Journal of Solids and Structures*, 51 :4157–4175, 2014.
- [25] S. Berbenni, V. Taupin, C. Fressengeas, and L. Capolungo. A Fast Fourier Transform-based approach for generalized disclination mechanics within a couple stress theory. In *Generalized Continua as Models for Classical and Advanced Materials, Advanced Structured Materials 42*. H. Altenbach and S. Forest (eds.), Springer International Publishing, 2016.
- [26] N. Bertin, M. V. Upadhyay, C. Pradelier, and L. Capolungo. A FFT-based formulation for efficient mechanical fields computation in isotropic and anisotropic periodic discrete dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23 :065009 (31pp), 2015.
- [27] M. Berveiller, T. Bretheau, R. Fougères, E. Gautier, and E. Maire. Rappels sur les mécanismes de plasticité et d’endommagement (chap. 6). In *Homogénéisation en mécanique des matériaux (Vol. 2)*, M. Bornert et al. (eds), pages 203–249. Hermes, France, 2001.
- [28] M. Berveiller and A. Zaoui. An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 26 :325–344, 1979.
- [29] M. Berveiller and A. Zaoui. Modélisation de la déformation plastique des polycristaux. *Techniques Ingénieur*, M48 :1–12, 2000.
- [30] B. A. Bilby. In :proceedings of the bristol conference report on defects in crystalline solids. *The Physical Society, London*, page 123, 1955.
- [31] B. A. Bilby, R. Bullough, and E. Smith. Continuous distributions of dislocations : a new application of the methods of non-riemannian geometry. *Proceedings of Roy. Soc. London A*, 231 :263–273, 1955.
- [32] W. J. Boettinger and J. A. Warren. Simulation of cell to plane front during directional solidification at high velocity. *J. Cryst. Growth*, 200 :583–581, 1999.
- [33] R. Brenner, A. J. Beaudoin, P. Suquet, and A. Acharya. Numerical implementation of static Field Dislocation Mechanics theory for periodic media. *Philosophical Magazine*, 94(16) :1764–1787, 2014.
- [34] S. Brisard and L. Dormieux. FFT-based methods for the mechanics of composites : A general variational framework. *Comp. Mater. Sci.*, 49 :663–671, 2010.

- [35] V. V. Bulatov and W. Cai. *Computer simulations of dislocations*. Oxford series on materials modelling, 2013.
- [36] H.J. Bunge. *Mathematische Methoden Texturanalyse*. English Edition : Butterworth, 1982.
- [37] W. Cai, D. Gottlieb, and C. W. Shu. On one-sided filters for spectral Fourier approximation of discontinuous functions. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 29 :905–916, 1992.
- [38] G. Canova and L. P. Kubin. *Continuum Models and Discrete Systems 6*, volume 2. Longman (Harlow, U.K.), 1991.
- [39] G. F. Carey and B. N. Jiang. Least-squares finite element method for first-order hyperbolic systems. *International Journal of Numerical Methods Engineering*, 26 :81–93, 1988.
- [40] H-J. Chang, A. Gaubert, M. Fivel, S. Berbenni, O. Bouaziz, and S. Forest. Analysis of particle induced dislocation structures using three-dimensional dislocation dynamics and strain gradient plasticity. *Computational Materials Science*, 52 :33–39, 2015.
- [41] J. P. Chang, W. Cai, V. V. Bulatov, and S. Yip. Molecular dynamics simulations of motion of edge and screw dislocations in a metal. *Computation Materials Science*, 23(1-4) :111–115, 2001.
- [42] S. J. Chapman. A mean-field model of superconducting vortices in three dimensions. *SIAM Journal of Applied Mathematics*, 55(5) :1259–1274, 1995.
- [43] J. Chaussidon, M. Fivel, and Rodney D. The glide of screw dislocations in bcc Fe : Atomistic static and dynamic simulations. *Acta Materialia*, 54 :3407–3416, 2006.
- [44] L-Q. Chen and W. Yang. Computer simulation of the domain dynamics of a quenched system with a large number of nonconserved order parameters : the grain-growth kinetics. *Phys. Rev. B*, 50 :15752, 1994.
- [45] J. Chevy, C. Fressengeas, M. Lebyodkin, V. Taupin, P. Bastie, and P. Duval. Characterizing short-range vs. long-range spatial distributions in dislocation distributions. *Acta Materialia*, 58 :1837–1849.
- [46] N. M. Cordero, S. Forest, E. P. Busso, S. Berbenni, and M. Cherkaoui. Grain size effects on plastic strain and dislocation density tensor fields in metal polycrystals. *Computational Materials Science*, 52 :7–13, 2012.
- [47] N. M. Cordero, A. Gaubert, S. Forest, E. P. Busso, F. Gallerneau, and S. Kruch. Size effects in generalised continuum crystal plasticity for two-phase laminates. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58 :1963–1994, 2010.

- [48] F. F. Csikor, C. Motz, D. Weygand, M. Zaiser, and S. Zapperi. Dislocation avalanches, strain bursts, and the problem of plastic forming at the micrometer scale. *Science*, 318 :251, 2007.
- [49] W.C. Dash. Copper precipitation on dislocations in silicon. *Journal of applied physics*, 27 :1193–1195, 1956.
- [50] B. Devincre, L. P. Kubin, C. Lemarchand, and R. Madec. Mesoscopic simulations of plastic deformation. *Materials Science and Engineering A*, 309-310 :211–219, 2001.
- [51] R. DeWit. The continuum theory of stationary dislocations. *Solid State Physics*, 10 :269–292, 1960.
- [52] K. S. Djaka, V. Taupin, S. Berbenni, and C. Fressengeas. A numerical spectral approach to solve the dislocation density transport equation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23 :065008(27pp), 2015.
- [53] K. S. Djaka, A. Villani, V. Taupin, L. Capolungo, and S. Berbenni. Field Dislocation Mechanics for heterogeneous elastic materials : A numerical spectral approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Submitted, 2016.
- [54] W. Dreyer, W. H. Müller, and J. Olshewski. An approximate analytical 2D-solution for the stresses and strains in eigenstrained cubic materials. 192 :171 – 192, 1999.
- [55] J. Dundurs and T. Mura. Interaction between an edge dislocation and circular inclusion. *J. Mech. Phys. Solid*, 12 :177–189, 1964.
- [56] J. Dundurs and G. P. Sendeckyj. Edge dislocation inside a circular inclusion. *J. Mech. Phys. Solid*, 13 :141–147, 1965.
- [57] D. R. Durran. *Numerical methods for wave equations in Geophysical fluid dynamics*. New-York, 1999.
- [58] P. Eisenlohr, M. Diehl, R. A. Lebensohn, and F. Roters. A spectral method solution to crystal elasto-viscoplasticity at finite strains. *Int. J. Plast.*, 46 :37–53, 2013.
- [59] A. El-Azab. Statistical mechanics treatment of the evolution of dislocation distributions in single crystals. *Physical Review B*, 61 :11956, 2000.
- [60] K. R. Elder and M. Grant. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals. *Phys. Rev. E*, 70 :051605, 2004.
- [61] K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, and M. Grant. Modeling elasticity in crystal growth. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :245701, 2002.

- [62] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proceedings of the Royal Society London A*, 241 :376–396, 1957.
- [63] H. D. Espinosa, M. Panico, S. Berbenni, and K. W. Schwarz. Discrete dislocation dynamics simulations to interpret plasticity size and surface effects in freestanding FCC thin films. *International Journal of Plasticity*, 22 :2091–2117, 2006.
- [64] U. Essmann and H. Mughrabi. Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities. *Philosophical Magazine*, 40A :731–756, 1979.
- [65] D. J. Eyre and G. W. Milton. A fast numerical scheme for computing the response of composite using grid refinement. *European Physical Journal - Applied Physics*, 6 :41–47, 1999.
- [66] FFTW. <http://www.fftw.org>. 1998.
- [67] M. Fivel. *Simulations de la plasticité cristalline et transitions d'échelles*. Habilitation à diriger des recherches, Université Joseph Fourier de Grenoble, 2008.
- [68] M. Fivel and S. Forest. Plasticité cristalline et transition d'échelle. In *Traité métallique*, pages M4016–M4017. Techniques de l'Ingénieur, France, 2004.
- [69] N. A. Fleck and J. W. Hutchinson. A phenomenological theory of strain gradient plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 41 :1825–1857, 1993.
- [70] N. A. Fleck and J. W. Hutchinson. *Strain gradient plasticity*, volume 33. Advances in Applied Mechanics, 1997.
- [71] N. A. Fleck and J. W. Hutchinson. Reformulation of strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :2245–2271, 2001.
- [72] S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw. Embedded-atom-method-functions for the fcc metal Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical review B*, 33(12) :7983–7991, 1986.
- [73] S. Forest. Some links between cosserat, strain gradient crystal plasticity and the statistical theory of dislocations. *Philosophical Magazine*, 88(30-32) :3549–3563, 2008.
- [74] S. Forest, G. Cailletaud, and R. Sievert. *Archives of Mechanics*, 49(4) :705, 1997.
- [75] P. Franciosi. The concepts of latent hardening and strain hardening. *Acta Metallurgica*, 33 :1601–1612, 1985.
- [76] P. Franciosi, M. Berveiller, and A. Zaoui. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 28 :273–283, 1980.

- [77] F. C. Frank. *Proceedings of the Symposium on the Plastic Deformation of Crystalline Solids*. Mellon Institute, Pittsburgh, NAVEXOS-P-834, 1950.
- [78] F.C. Frank and W.T. Read. Multiplication processes for slow moving dislocation. *Physical Review*, 79 :722–723, 1950.
- [79] S. Frechard, F. Martin, C. Clement, and J. Cousty. AFM and EBSD combined studies of plastic deformation in a duplex stainless steel. *Materials Science and Engineering A*, 418 :312–319, 2006.
- [80] C. Fressengeas, A. J. Beaudoin, D. Entemeyer, T. Lebedkina, M. Lebyodkin, and V. Taupin. Dislocation transport and intermittency in the plasticity of crystalline solids. *Physical Review B*, 79 :014108, 2009.
- [81] C. Fressengeas and V. Taupin. A field theory of distortion incompatibility for coupled fracture and plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 68 :45–65, 2014.
- [82] C. Fressengeas, V. Taupin, and L. Capolungo. An elasto-plastic theory of dislocation and disclination field. *International Journal of Solids and Structures*, 48 :3499–3509, 2011.
- [83] M. Frigo and S. G. Johnson. An adaptive software architecture for the FFT. *Processing of the International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, 3 :1381 – 1384, 1998.
- [84] H. Gao, Y. Huang, W.D. Nix, and J.W Hutchinson. Mechanism-based strain gradient plasticity-I. theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47 :1239–1263, 1999.
- [85] S. Gao, M. Fivel, A. Ma, and A. Hartmaier. Influence of misfit stresses on dislocation glide in single crystal superalloys : A three-dimensional discrete dislocation dynamics study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 76 :276–290, 2015.
- [86] L. Gélébart and R. Mondon-Cancel. Non-linear extension of FFT-based methods accelerated by conjugate gradients to evaluate the mechanical behavior of composite materials. *Computational Materials Science*, 77 :430–439, 2013.
- [87] J. Gemperlova, V. Paidar, and F. Kroupa. Compatibility stresses in deformed bicrystals. *Czech. Journal Physics B*, 39 :427–446, 1989.
- [88] D. Gottlieb and J. S. Hesthaven. Spectral methods for hyperbolic problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 128 :83–131, 2001.
- [89] D. Gottlieb and C. W. Shu. On the Gibbs phenomenon and its resolution. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 39(4) :644–668, 1997.

- [90] D. Gottlieb, C. W. Shu, A. Solomonoff, and H. Vandeven. On Gibbs phenomenon I. Recovering exponential accuracy from the Fourier partial sum of nonperiodic analytic function. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 43 :81–98, 1992.
- [91] F. Grennerat, M. Montagnat, O. Castelnau, P. Vacher, H. Moulinec, P. Suquet, and P. Duval. Experimental characterization of the intragranular strain field in columnar ice during transient creep. *Acta Mater.*, 60 :3655–3666, 2012.
- [92] I. Groma, , and B. Bakò. Probability distribution of internal stresses in parallel straight dislocation systems. *Physical Review B*, 58(6) :2969, 1998.
- [93] M. E. Gurtin and A. Needleman. Boundary conditions in small-deformation, single-crystal plasticity that account for the burgers vector. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53 :1–31, 2005.
- [94] M.E. Gurtin. On the plasticity of single crystals : free energy, microforces, plastic-strain gradients. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :989–1036, 2000.
- [95] K. Gururaja, C. Robertson, and M. Fivel. Channel formation and multiplication in irradiated FCC metals : a 3D dislocation dynamics investigation. *Philosophical Magazine*, 12 :1368–1389, 2015.
- [96] J. Hadamard. *Leçons sur la propagation des ondes et les équations de l'hydrodynamique*. Herman, Paris, 1903.
- [97] F. Hecht. New development in freefem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20(3-4) :251–265, 2012.
- [98] K. Herrmann, W. Müller, and S. Neumann. Linear and elastic-plastic fracture mechanics revisited by use of fourier transforms : theory and application. *Composite Materials Science*, 6 :186–196, 1999.
- [99] A. V. Hershey. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *Trans. ASME J. Appl. Mech.*, 21 :236–240, 1954.
- [100] R. Hill. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13 :89, 1965.
- [101] J. P. Hirth and J. Lothe. *Theory of dislocations (2nd ed.)*. New-York, wiley edition, 1982.
- [102] T. Hochrainer. Multipole expansion of continuum dislocations dynamics in terms of alignment tensors. *Philosophical Magazine*, 95(12) :1321–1367, 2015.
- [103] T. Hochrainer, M. Zaiser, and P. Gumbsch. A three-dimensional continuum theory of dislocation systems : Kinematics and mean-field formulation. *Philosophical Magazine*, 87(8-9) :1261–1282, 2007.

- [104] L. Holt. Dislocation cell formation in metals. *J. Appl. Phys.*, 41 :3197–3201, 1970.
- [105] W. F. J. Hosford, R. L. Fleischer, and W. A. Backofen. Tensile deformation of aluminum single crystals at low temperatures. *Acta Metall.*, 8 :187–199, 1960.
- [106] S. Y. Hu and L. Q. Chen. Solute segregation and coherent nucleation and growth near a dislocation : a Phase-Field Model integrating defect and phase microstructure. *Acta Materialia*, 49 :463–472, 2001.
- [107] S. Y. Hu and L. Q. Chen. Solution segregation and coherent nucleation and growth near a dislocation : a phase-field model integrating defect and phase microstructure. *Acta Materialia*, 49 :463–472, 2001.
- [108] Y. Huang, H. Gao, and K.C. Hwang. *Strain-gradient plasticity at the micro scale*. In : Ellyin, F. and Provan, J. W., 1999.
- [109] T. J. R. Hughes, L. P. Franca, and G. M. Hulbert. A new finite element formulation for computational fluid dynamics : VIII. The Galerkin/least squares method for advection diffusion equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 73 :173–189, 1989.
- [110] D. Hull and D. J. Bacon. *Introduction to Dislocations, 4th ed.* Butterworth-Heinemann, 2001.
- [111] F. J. Humphreys. Grain and subgrain characterisation by electron backscatter diffraction. *Journal of Materials Science*, 36 :3833–3854, 2001.
- [112] J. W. Hutchinson. Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 319(1537) :247–272, 1970.
- [113] J. W. Hutchinson. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 348 :101–127, 1976.
- [114] B. Jaoul. *Etude de la plasticité et application aux métaux*. Dunod, 1965.
- [115] B. Jiang. *The least-squares finite element method, in Theory and Computation in Fluid Dynamics and Electromagnetics*. Springer Series in Scientific Computation, Springer, Berlin, 1998.
- [116] M. Kabel, S. Fliegner, and M. Schneider. Mixed boundary conditions for FFT-based homogenization at finite strains. *Comp. Mech.*, 57(2) :193–210, 2016.
- [117] M. Kabel, Böhlke T., and Schneider M. Efficient fixed point and Newton-Krylov solvers for FFT-based homogenization of elasticity at large deformations. *Comp. Mech.*, 54(6) :1497–1514, 2014.
- [118] C. L. Kelchner, S. J. Plimpton, and J. C. Hamilton. Dislocation nucleation during surface indentation. *Physical review B*, 58(17) :11085–11088, 1998.

- [119] S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim, and Y. B. Park. Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth. *Phys. Rev. E*, 74 :061605, 2006.
- [120] R. Kobayashi. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth. *Physica D*, 63 :410–423, 1993.
- [121] R. Kobayashi. Numerical approach to three-dimensional dendritic solidification. *Exp. Math.*, 3 :59–81, 1994.
- [122] R. Kobayashi, J. A. Warren, and W. C. Carter. A simple continuum model of grain boundaries. *Physica D*, 140 :141–150, 2000.
- [123] U. F. Kocks. Laws for work-hardening and low-temperature creep. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 98 :76–85, 1976.
- [124] D. A. Kopriva. Practical assessment of spectral accuracy for hyperbolic problems with discontinuities. *Journal of Scientific Computing*, 2(249-262), 1987.
- [125] A. M. Kosevich. Crystal dislocations and the theory of elasticity (chap. 1). In *Dislocations in Solids (vol. 1)*, F.R.N. Nabarro, ed., pages 33–141. Amsterdam, North-Holland, 1979.
- [126] M. Koslowski, R. Le Sar, and R. Thomson. Dislocation structures and the deformation of materials. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :265503, 2004.
- [127] E. Kröner. Berechnung der elastischen konstanten des vielkristalls aus den konstanten des einkristalls. *Zeitschrift für Physik*, 151 :504–518, 1958.
- [128] E. Kröner. *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*. Col-latz L and Loesch F (eds.). Ergebnisse der Angewandte Mathematik 5, Springer Verlag, Berlin, 1958.
- [129] E. Kröner. Continuum theory of defects. In : *Balian R et al (Eds) Physics of defects Les Houches Session 35 North Holland, New York*, pages 215–315, 1981.
- [130] E. Kröner. Continuum theory of defects. In *Physics of defects*, pages 215–315. R. Balian et al. (Eds.), Les Houches, Session 35, North Holland, New York, 1981.
- [131] E. Kröner. *Modified Green functions in the theory of heterogeneous and/or anisotropic linearly elastic media*. Springer, Berlin, verlag edition, 1989.
- [132] L. Kubin and Y. Estrain. Strain nonuniformities and plastic instabilities. *Rev. Phys. Appl.*, 23 :573, 1988.
- [133] L. P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, and Y. Bréchet. Dislocation microstructure and plastic flow : a 3-D simulation. *Solid state Phenomena*, 23-24 :455–472, 1992.

- [134] L. P Kubin, C. Fressengeas, and G. Ananthakrishna. *Collective behavior of dislocations in plasticity*. North Holland Publishing Company, 2004.
- [135] D. Kuhlmann-Wilsdorf and J. H. Van Der Merwe. *Mater. Sci. Eng.*, 55 :79, 1982.
- [136] E. M. Lauridsen, S. R. Dey, R. W. Fonda, and D. Juul-Jensen. Nondestructive approaches for 3-D materials characterization. *Journal of the Minerals, Metals and Materials Society*, 58 :40–44, 2006.
- [137] R. Lebensohn. N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using Fast Fourier Transform. *Acta Materialia*, 49 :2723–2737, 2001.
- [138] R. Lebensohn, R. Brenner, O. Castelnau, and A. Rollett. Orientation image-based micromechanical modelling of subgrain texture evolution in polycrystalline copper. *Acta Mater.*, 56 :3914–3926, 2008.
- [139] R. Lebensohn, J. Escobedo, E. Cerreta, D. Dennis-Koller, C. Bronkhorst, and J. Bingert. Modeling void growth in polycrystalline materials. *Acta Mater.*, 61 :6918–6932, 2013.
- [140] R. Lebensohn, M. Montagnat, P. Mansuy, P. Duval, J. Meysonnier, and A. Philip. Modeling viscoplastic behavior and heterogeneous intracrystalline deformation of columnar ice polycrystals. *Acta Mater.*, 57 :1405–1415, 2009.
- [141] R. A. Lebensohn, A. K. Kanjarla, and P. Eisenlohr. An elasto-viscoplastic formulation based on Fast Fourier Transforms for the prediction of micromechanical fields in polycrystalline materials. *International Journal of Plasticity*, 32-33 :59–69, 2012.
- [142] R. A. Lebensohn and A. Needleman. Numerical implementation of non-local polycrystal plasticity using fast Fourier transforms. *J. Mech. Phys. Solids*, page In Press : doi.org/10.1016/j.jmps.2016.03.023, 2016.
- [143] R. A. Lebensohn and C. N. Tomé. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : Application to zirconium alloys. *Acta Metallurgica and Materialia*, 26(1) :43–62, 1993.
- [144] R. A. Lebensohn, C. N. Tomé, and P. Ponte Castañeda. Improving the self-consistent predictions of texture development of polycrystals incorporating intragranular field fluctuations. *Materials Science Forum*, 495-497 :955–964, 2005.
- [145] G. Lefebvre, C. Sinclair, R. Lebensohn, and J.D. Mithieux. Accounting for local interactions in the prediction of roping of ferritic stainless steel sheets. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 20 :024008, 2012.

- [146] M. Legros, A. Jacques, and A. George. Cyclic deformation of silicon single crystals : mechanical behaviour and dislocation arrangements. *Mat. Sci. Eng. A*, 495 :387–389, 2004.
- [147] E. J. Lieberman, A. D. Rollett, R. A. Lebensohn, and Kober E. M. Calculation of grain boundary normals directly from 3D microstructure images. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23 :035005 (18pp), 2015.
- [148] P. Lipinski, J. Krier, and M. Berveiller. Elastoplasticite des métaux en grandes deformations : comportement global et evolution de la structure interne. *Revue de Physique Appliquée*, 25 :361–388, 1990.
- [149] B. Liu, D. Raabe, F. Roters, P. Eisenlohr, and R. Lebensohn. Comparison of finite element and fast Fourier transform crystal plasticity solvers for texture prediction. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 18 :085005, 2009.
- [150] O. Lohne and J. Lothe. Image forces and dislocation configurations as seen by the lang X-ray technique. *Scripta Metallurgica*, 11 :23–27, 1977.
- [151] J. Lothe, V. L. Indenbom, and V. A. Chamrov. Elastic field and self-force of dislocation emerging at the free surfaces of an anisotropic halfspace. *Physica Status Solidi B*, 111 :671–677, 1982.
- [152] Y. Maday and E. Tadmor. Analysis of the spectral vanishing method for periodic conservative laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 26 :854–870, 1989.
- [153] R. Madec, B. Devincere, L. Kubin, T. Hoc, and D. Rodney. The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening. *Science*, 301 :1879–1882, 2003.
- [154] A. Majda, J. McDonough, and S. Osher. The Fourier Method for nonsmooth initial data. *Mathematics of Computation*, 32 :1041–1081, 1978.
- [155] J.M. Marchin and G. Wyon. Observation de spirales sur des surfaces d’aluminium polies électrolytiquement. *Acta Metallurgica*, 10 :915–924, 1962.
- [156] C. Mareau and S. Berbenni. An affine formulation for the self-consistent modeling of elasto-viscoplastic heterogeneous materials based on the translated field method. *International Journal of Plasticity*, 64 :134–150, 2015.
- [157] H. Margolin and M.S. Stanescu. Polycrystalline strengthening. *Acta Metallurgica*, 23 :1411–1418, 1975.
- [158] R. Masson, M. Bornert, P. Suquet, and A. Zaoui. An affine formulation for the prediction of the effective properties of non linear composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(6-7) :1203–1227, 2000.
- [159] Matlab. Fast Fourier Transform, 2012.

- [160] H. Mecking and U. F. Kocks. Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metallurgica*, 29 :1865–1875, 1981.
- [161] J. C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *International Journal of Numerical Methods Engineering*, 52 :139–160, 2001.
- [162] D. P. Mika and P. R. Dawson. Effects of grain interaction on deformation in polycrystals. *Mater Sci Eng A*, 257 :62–76, 1998.
- [163] A. Molinari, G. Canova, and S. Ahzi. A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metallurgica*, 35 :2983–2994, 1987.
- [164] V. Monchiet and G. Bonnet. Numerical homogenization of nonlinear composites with a polarization-based FFT iterative scheme. *Comp. Mater. Sci.*, 79 :276–283, 2013.
- [165] H. Moulinec and F. Silva. Comparison of three accelerated FFT-based schemes for computing the mechanical responses of composite materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 97 :960–985, 2014.
- [166] H. Moulinec and P. Suquet. A fast numerical method for computing the linear and non linear properties of composites. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences de Paris II*, 318 :1417–1423, 1994.
- [167] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 157 :69–94, 1998.
- [168] H. B. Mühlhaus and E. C. Aifantis. The physics of plastic deformation. *International Journal of Plasticity*, 3 :211–247, 1987.
- [169] W. Müller. Mathematical vs. experimental stress analysis of inhomogeneities in solids. *Journal of Physics IV*, 6(C1) :139–148, 1996.
- [170] W Müller. *Fourier transforms and their application to the formation of texture and changes of morphology in solids*. Kluwer Academic Publishers, in : iutam edition, 1998.
- [171] T. Mura. Continuous distribution of moving dislocations. *Philosophical Magazine*, 89 :843–857, 1963.
- [172] T. Mura. *Micromechanics of defects in solids*. Kluwer Academic Publishers, dordrecht, edition, 1987.
- [173] F. R. N. Nabarro. Synthesis of elastic dislocation fields. *Philosophical Magazine*, 42 :1224, 1951.

- [174] M. Neubert and P. Rudolph. Growth of semi-insulating GaAs crystals in low temperature gradients by using the vapour pressure controlled czochralski method (vcz). *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 43 :119–185, 2001.
- [175] H. Neuhäuser. *Slip-line formation and collective dislocation motion*. 6. ed. F. R.N. Nabarro, Holland Publishing Company, 1983.
- [176] S. Neumann, K. Herrmann, and W. Müller. Stress/strain computation in the heterogeneous bodies with discrete fourier transforms-different approaches. *Composite Materials Science*, 25 :151–158, 2002.
- [177] J. F. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Materialia*, 1 :153–162, 1953.
- [178] J. Oddershede, S. Schmidt, H. F. Poulsen, H. O. Sorensen, J. Wright, and W. Reimers. Determining grain resolved stresses in polycrystalline materials using three-dimensional X-ray diffraction. *Journal of Applied Crystallography*, 43 :539–549, 2010.
- [179] M. Peach and J.S. Koehler. The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them. *Physical Review*, 80 :436–439, 1950.
- [180] C. Perrin, S. Berbenni, H. Vehoff, and M. Berveiller. Role of discrete intra-granular slip on lattice rotations in polycrystalline Ni : Experimental and micromechanical studies. *Acta Materialia*, 58 :4639–4649, 2010.
- [181] M. Plapp. Three-dimensional phase-field simulations of directional solidification. *J. Cryst. Growth*, 303 :49–57, 2007.
- [182] P. Ponte Castañeda. Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(6) :827–862, 1996.
- [183] A. Prakash and R. Lebensohn. Simulation of micromechanical behavior of polycrystals : finite elements versus fast fourier transforms. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 17 :64010–64016, 2009.
- [184] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W T. Vetterling, and B P. Flannery. *Numerical recipes in C++*. *The art of scientific computing (2nd ed.)*. Cambridge University Press, USA, 2002.
- [185] S. Puri, A Das, and A. Acharya. Mechanical response of multicrystalline thin films in mesoscale field dislocation mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59 :2400–2417, 2011.
- [186] S. Puri, A. Roy, A. Acharya, and D. Dimiduk. Modeling dislocation sources and size effects at initial yield in continuum plasticity. *Journal of the Mechanics of materials and structures*, 4(9), 2009.

- [187] J. R. Rice. Continuum mechanics and thermodynamics plasticity in relation to microscale deformation mechanisms. In *Constitutive equations in plasticity*, pages 23–75. A.S. Argon (ed.), MIT Press, Cambridge, 1975.
- [188] T. Richeton and S. Berbenni. Effects of heterogeneous elasticity coupled to plasticity on stresses and lattice rotations in bicrystals : a Field Dislocation Mechanics viewpoint. *European Journal of Mechanics A. Solids*, 37 :231–247, 2013.
- [189] T. Richeton, G. F. Wang, and C. Fressengeas. Continuity constraints at the interfaces and their consequences on the work hardening of metal-matrix composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59 :2023–2043, 2011.
- [190] D. Rodney, Y. Le Bouar, and A. Finel. Phase field methods and dislocations. *Acta Materialia*, 51 :17–30, 2003.
- [191] D. Rodney, Y. Le Bouar, and A. Finel. Phase field methods and dislocations. *Acta Materialia*, 51 :17–30, 2003.
- [192] D. Rodney, Y. LeBouar, and A. Finel. Phase field methods and dislocations. *Acta Materialia*, 51 :17–30, 2003.
- [193] A. Roy and A. Acharya. Finite element approximation of field dislocation mechanics. *J. Mech. Phys. Solids*, 53 :143–170, 2005.
- [194] A. Roy and A. Acharya. Size effects and idealized dislocation microstructure at small scales : Predictions of a Phenomenological model of Mesoscopic Field Dislocation Mechanics : Part II. *October*, 54 :1711–1743, 2006.
- [195] A. Roy, S. Puri, and A. Acharya. Phenomenological mesoscopic field dislocation mechanics, lower-order gradient plasticity, and transport of mean excess dislocation density. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 15 :167–180, 2007.
- [196] H. Sabar, M. Berveiller, V. Favier, and S. Berbenni. A new class of micro-macro models for elastic-viscoplastic heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, 39 :3257–3276, 2002.
- [197] S. Sandfeld, T. Hochrainer, P. Gumbsch, and M. Zaiser. Numerical implementation of 3D continuum theory of dislocation dynamics and application to micro-bending. *Philosophical Magazine*, 90(27-28) :3697–3728, 2010.
- [198] S. Sandfeld and G. Po. Microstructural comparison of the kinematics of discrete and continuum dislocations models. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 23 :085003 (27pp), 2015.
- [199] E. Schmid and W. Boas. *Kristallplastizität mit Besonderer Berücksichtigung der Metalle*. Springer, New York, 1935.

- [200] M. Schneider, F. Ospald, and M. Kabel. Computational homogenization of elasticity on a staggered grid. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 105 :693–720, 2015.
- [201] A.L. Schwab and J.P. Meijaard. How to draw euler angles and utilize euler parameters. In *Proc. of IDETC/CIE, ASME 2006*, pages 1–7, Philadelphia, Pennsylvania, USA, September 10-13 2006.
- [202] P. Shanthraj, P. Eisenlohr, M. Diehl, and F. Roters. Numerically robust spectral methods for crystal plasticity simulations of heterogeneous materials. *International Journal of Plasticity*, 66 :31–45, 2015.
- [203] L. E. Shilkrota, E. M. Ronald, and W. A. Curtin. Multiscale plasticity modeling : coupled atomistics and discrete dislocation mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 :755–787, 2004.
- [204] I. Singer-Loginova and H. M. Singer. The phase field technique for modeling multiphase materials. *Rep. Prog. Phys.*, 71 :106501 (32pp), 2008.
- [205] I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. Sesselberg, R. Prieler, G. J. Schmitz, and Rezende J. L. L. A phase field concept for multiphase systems. *Physica D*, 94 :135–147, 1996.
- [206] P. Suquet, H. Moulinec, O. Castelnau, M. Montagnat, N. Lahellec, F. Grennerat, P. Duval, and R. Brenner. Multi-scale modeling of the mechanical behavior of polycrystalline ice under transient creep. *UTAM*, 3 :76–90, 2012.
- [207] L. Tabourot, M. Fivel, and E. Rauch. Generalized constitutive laws for FCC single crystals. *Materials Science and Engineering A*, 234-236 :639–642, 1997.
- [208] V. Taupin. *Incompatibilité de réseau et organisation collective des dislocations*. PhD thesis, Université Paul Verlaine-Metz, 2007.
- [209] V. Taupin, S. Berbenni, and C. Fressengeas. Size effects on the hardening of channel-type microstructures : a field dislocation mechanics-based approach. *Acta Materialia*, 60 :664–673, 2012.
- [210] V. Taupin, L. Capolungo, C. Fressengeas, A. Das, and M. Upadhyay. Grain boundary modeling using elasto-plastic theory of dislocation and disclination fields. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 61 :370–384, 2013.
- [211] V. Taupin, L. Capolungo, C. Fressengeas, M. Upadhyay, and B. Beausir. A mesoscopic theory of dislocation and disclination fields for grain boundary-mediated crystal plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 71 :277–290, 2015.
- [212] V. Taupin, T. Richeton, J. Chevy, C. Fressengeas, J. Weiss, F. Louchet, and M. C. Miguel. Rearrangement of dislocation structures in aging of ice single crystals. *Acta Materialia*, 56 :1555–1563, 2008.

- [213] V. Taupin, S. Varadhan, J. Chevy, C. Fressengeas, A. J. Beaudoin, M. Montagnat, and P. Duval. Effects of size on the dynamics of dislocations in ice single crystals. *Physical Review Letters*, 99 :155507, 2007.
- [214] V. Taupin, S. Varadhan, C. Fressengeas, and A. J. Beaudoin. Directionality of yield point in strain-aged steels : the role of polar dislocations. *Acta Materialia*, 56 :3002–3010, 2008.
- [215] G. I. Taylor. Plastic strain in metals. *J. of the Inst. of Metals*, 32 :307–324, 1938.
- [216] N. Thompson. Dislocation nodes in face-centred cubic lattices. *Proceedings of the Physical Society of London*, 66 :481–492, 1953.
- [217] J. Tiaden, B. Nestler, H. J. Diepers, and I. Steinbach. The multiphase-field model with an integrated concept for modelling solute diffusion. *Physica D*, 115 :73–86, 1998.
- [218] C. Tome, G. R. Canova, U. F. Kocks, N. Christodoulou, and J. J. Jonas. The relation between macroscopic and microscopic strain hardening in fcc polycrystals. *Acta Metallurgica*, 32 :1637–1653, 1984.
- [219] C. N. Tomé and R. A. Lebensohn. *Manual for Code Visco-Plastic Self-Consistent version 7c*. 2009.
- [220] M. D. Uchic, M. A. Groeber, D. M. Dimiduk, and J. P. Simmons. 3-D microstructural characterization of nickel superalloys via serial-sectioning using a dual beam fib-sem. *Scripta Materialia*, 55 :23–28, 2006.
- [221] M. V. Upadhyay, L. Capolungo, V. Taupin, C. Fressengeas, and R. A. Lebensohn. A higher order elasto-viscoplastic model using fast fourier transforms : Effects of lattice curvatures on mechanical response of nanocrystalline metals. *Int. J. Plast.*, 83 :126–152, 2016.
- [222] E. Van der Giessen and A. Needleman. Discrete dislocation plasticity : A simple planar approach. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 3 :689–735, 1995.
- [223] S. Varadhan. *Modelling collective behavior of dislocations in crystalline*. PhD thesis, University of Illinois, 2007.
- [224] S. Varadhan, A. J. Baudoin, A. Acharya, and C. Fressengeas. Dislocation transport using Galerkin/least squares formulation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 14 :1245–1270, 2006.
- [225] H. Vendeven. Family of Spectral Filters for. 6(2) :159–192, 1991.
- [226] M. Verdier, M. Fivel, and I Groma. Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals : Principles and applications. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 6 :755–770, 1998.

- [227] P. Villechaise, L. Sabatier, and J. Girard. On slip bands features and crack initiation in fatigued 316L austenitic stainless steel : Part 1 : Analysis by electron back-scattered diffraction and atomic force microscopy. *Materials Science and Engineering A*, 323 :377–385, 2002.
- [228] V. Vinogradov and G. W. Milton. An accelerated FFT algorithm for thermoelastic and non-linear composites. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 76 :1678–1695, 2008.
- [229] E. Voce. The relationship between stress and strain for homogeneous deformation. *J. of the Inst. of Metals*, 74 :537–562, 1948.
- [230] S Volterra. Sur l'équilibre des corps élastiques multiplément connexes. *Annales Scientifiques de l'Ecole Normale Supérieure III*, 24 :401–517, 1907.
- [231] M. Wallin, W. A. Curtin, M. Ristinmaa, and A. Needleman. Multiscale plasticity modeling : coupled atomistics and discrete dislocation mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56 :3167–3180, 2008.
- [232] H. Y. Wang and R. Lesar. O(N) algorithm for dislocation dynamics. *Philosophical Magazine A*, 71(1) :149–164, 1995.
- [233] Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitiño, and A. G. Khachaturyan. Application of phase field microelasticity theory of phase transformations to dislocation dynamics : model and three dimensional simulations in a single crystal. *Philosophical Magazine Letters*, 81 :385–393, 2001.
- [234] Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitiño, and A. G. Khachaturyan. Nanoscale phase field microelasticity theory of dislocations : Model and 3D simulations. *Acta Materialia*, 49 :1847–1857, 2001.
- [235] Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitiño, and A. G. Khachaturyan. Phase field microelastic theory and modeling of multiple dislocation dynamics. *Applied Physics Letters*, 78 :2324–2326, 2001.
- [236] J. A. Warren and W. J. Boettinger. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method. *Acta Metall. Mater.*, 43 :689–703, 1995.
- [237] J. R. Willis. Second-order effects of dislocations in anisotropic crystals. *International Journal of Engineering Sciences*, 5 :171–190, 1967.
- [238] J. R. Willis. Variational and related methods for the overall properties of composites. *Adv. Appl. Mech.*, 21 :1–78, 1981.
- [239] F. Willot. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus Mécanique*, 343 :232–245, 2015.

- [240] F. Willot and Y. P. Pellegrini. Fast Fourier Transform computations and build-up of plastic deformation in 2D, elastic-perfectly plastic, pixelwise disordered porous media. In *Continuum Models and Discrete Systems*, pages 443–449. D. Jeulin and S. Forest (eds.), CMDS11, Ecole des Mines Paris, 2008.
- [241] P. Yu, S. Y. Hu, L. Q. Chen, and Q. Du. An iterative-perturbation scheme for treating inhomogeneous elasticity in phase-field models. *Journal of Computational Physics*, 208 :34–50, 2005.
- [242] M. Zaiser. Statistical modelling of dislocation systems. *Materials Science and Engineering A*, 309-310 :304–315, 2001.
- [243] M. Zaiser. Scale invariance in plastic flow of crystalline solids. *Advances in physics*, 55 :185–245, 2006.
- [244] M. Zaiser, N. Nikitas, T. Hochrainer, and E. C. Aifantis. Modelling size effects using 3D density-based dislocation dynamics. *Philosophical Magazine*, 87(8-9) :1283–1306, 2007.
- [245] A. Zaoui. Plasticité : approches en champs moyens (chap. 1). In *Homogénéisation en mécanique des matériaux (Vol. 2)*, M. Bornert et al. (eds), pages 17–44. Hermes, France, 2001.
- [246] A. Zaoui. Continuum Micromechanics : Survey. *Journal of Engineering Mechanics*, 128(2) :808–816, 2002.
- [247] J. Zeman, J. Vondrejč, J. Novak, and I. Marek. Accelerating a FFT-based solver for numerical homogenization of periodic media by conjugate gradients. *Journal of Computational Physics*, 229 :8065–8071, 2010.

Annexe A

Algorithme basique FFT de Moulinec-Suquet en élasticité linéaire

La méthode spectrale de type FFT a été initialement introduite par Moulinec et Suquet [166, 167] pour résoudre numériquement l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger et pour calculer la réponse micromécanique des matériaux composites. Cette méthode spectrale initiale est rappelée dans cette annexe.

En l'absence de forces de volume et d'effets d'inerties, le problème d'élasticité hétérogène pour un matériau composite défini dans une cellule unitaire de volume V , de modules élastiques linéaires $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ et soumis à une déformation macroscopique \mathbf{E} s'écrit [166, 167] :

$$\begin{aligned}\mathbf{T}(\mathbf{x}) &= \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{div} \mathbf{T} &= 0 \text{ dans } V,\end{aligned}\tag{A.1}$$

où \mathbf{T} et $\boldsymbol{\varepsilon}$ représentent, respectivement, les champs de contrainte et de déformation purement élastique. En considérant un milieu de référence homogène de modules élastiques constants \mathbf{C}^0 , le tenseur de polarisation des contraintes $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})$ est défini par :

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) = \delta\mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \quad \text{avec} \quad \delta\mathbf{C}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}^0.\tag{A.2}$$

L'équation d'équilibre (A.1) peut s'écrire sous la forme d'une équation périodique de type Lippmann-Schwinger qui s'écrit dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier, respectivement, sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) &= -\left(\Gamma^0 \star \boldsymbol{\tau}\right)(\mathbf{x}) + \mathbf{E} \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) &= -\tilde{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) : \tilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad \text{et} \quad \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{0}) = \mathbf{E}.\end{aligned}\tag{A.3}$$

L'équation (A.3) est résolue par l'algorithme 4 à point fixe appelée "schéma basique" initié par Moulinec et Suquet [166, 167] pour déterminer le champ de déformation

$\boldsymbol{\varepsilon}$ solution du problème A.1.

L'algorithme basique itératif de Moulinec et Suquet [166, 167] pour la résolution des champs élastiques en élasticité linéaire et hétérogène est présenté ci-dessous (algorithme 4). Il est constitué de deux procédures : l'initialisation du schéma itératif qui correspond à l'initialisation de $\boldsymbol{\varepsilon}$ et \mathbf{T} pour une déformation macroscopique prescrite \mathbf{E} , et la procédure itérative globale pour la résolution de l'équation (A.3), où $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ est obtenue après convergence. Dans la procédure d'initialisation, le champ de déformation initiale $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ est prise comme étant égale à la déformation macroscopique imposée \mathbf{E} (étape 1). La procédure d'initialisation se termine par le calcul du champ de contrainte initial $\mathbf{T}_0(\mathbf{x}) = \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_0$.

Dans la boucle itérative globale à l'itération (n+1), le tenseur de polarisation des contraintes $\boldsymbol{\tau}_n(\mathbf{x})$ est calculé à l'étape 3 à partir des champs de contraintes et de déformations $\mathbf{T}_n(\mathbf{x})$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_n(\mathbf{x})$ à l'itération (n). La FFT directe $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi})$ de $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})$ connue à l'itération (n) est calculée à l'étape 4. Le test de convergence basé sur l'équilibre des contraintes dans l'espace de Fourier est effectué à l'étape 5. Si la convergence est atteinte, la procédure itérative s'arrête, dans le cas contraire la déformation élastique est mise à jour dans l'espace de Fourier à l'étape 6 en utilisant l'équation (A.3), puis dans l'espace réel grâce à la FFT⁻¹ (étape 7) pour obtenir $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}(\mathbf{x})$, qui est par la suite utilisée pour mettre à jour le champ de contrainte dans l'espace réel (étape 8). La boucle itérative recommence avec les champs de contrainte et de déformation mis à jour jusqu'à l'obtention de la convergence. Le critère de convergence utilisé à l'étape 5 est donné par :

$$e_n = \frac{\|\mathbf{div}(\mathbf{T}_n)\|_2}{|\langle \mathbf{T}_n \rangle|} = \frac{\|\boldsymbol{\xi} \cdot \tilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi})\|_2}{|\tilde{\mathbf{T}}_n(\mathbf{0})|} \leq \epsilon, \quad (\text{A.4})$$

où $\|\cdot\|_2$ denote la norme L^2 , $|\cdot|$ dénote la norme Euclidienne d'un tenseur d'ordre deux et e_n représente l'erreur à l'itération (n). La convergence est atteinte lorsque l'erreur est inférieure à une précision ϵ donnée.

Algorithm 4

Initialisation : (\mathbf{E} donné)

- 1: $\boldsymbol{\varepsilon}_0 \leftarrow \mathbf{E}$
- 2: $\mathbf{T}_0(\mathbf{x}) \leftarrow \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_0$

Iteration : $n + 1$ ($\boldsymbol{\varepsilon}_n(\mathbf{x})$ et $\mathbf{T}_n(\mathbf{x})$ connues)

- 3: $\boldsymbol{\tau}_n(\mathbf{x}) \leftarrow \mathbf{T}_n(\mathbf{x}) - \mathbf{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}_n(\mathbf{x})$
 - 4: $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}(\boldsymbol{\tau}_n(\mathbf{x}))$
 - 5: Test de convergence basé sur l'équation ((A.4))
 - 6: $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow -\tilde{\mathbf{T}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \tilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}$ et $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}(\mathbf{0}) \leftarrow \mathbf{E}$
 - 7: $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{FFT}^{-1}(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}(\boldsymbol{\xi}))$
 - 8: $\mathbf{T}_{n+1}(\mathbf{x}) \leftarrow \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}(\mathbf{x})$
-

Annexe B

Schémas différences finies centrées pour des dérivées partielles

Les formules de différenciations suivantes sont utilisées pour le calcul des dérivées partielles de premier et de second ordre sur la grille voxélisée. Ces formules sont basées sur des schémas différences finies centrées avec l'approximation des dérivées partielles suivantes [184] :

$$\frac{\partial f(i, j, k)}{\partial x_1} = \frac{f(i+1, j, k) - f(i-1, j, k)}{2\delta_1} \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial f(i, j, k)}{\partial x_2} = \frac{f(i, j+1, k) - f(i, j-1, k)}{2\delta_2} \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\partial f(i, j, k)}{\partial x_3} = \frac{f(i, j, k+1) - f(i, j, k-1)}{2\delta_3} \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{\partial^2 f(i, j, k)}{\partial x_1^2} = \frac{f(i+1, j, k) - 2f(i, j, k) + f(i-1, j, k)}{\delta_1^2} \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{\partial^2 f(i, j, k)}{\partial x_2^2} = \frac{f(i, j+1, k) - 2f(i, j, k) + f(i, j-1, k)}{\delta_2^2} \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{\partial^2 f(i, j, k)}{\partial x_3^2} = \frac{f(i, j, k+1) - 2f(i, j, k) + f(i, j, k-1)}{\delta_3^2} \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{\partial^2 f(i, j, k)}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{f(i+1, j+1, k) - f(i+1, j-1, k) - f(i-1, j+1, k) + f(i-1, j-1, k)}{4\delta_1 \delta_2} \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\partial^2 f(i, j, k)}{\partial x_1 \partial x_3} = \frac{f(i+1, j, k+1) - f(i+1, j, k-1) - f(i-1, j, k+1) + f(i-1, j, k-1)}{4\delta_1 \delta_3} \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{\partial^2 f(i, j, k)}{\partial x_2 \partial x_3} = \frac{f(i, j+1, k+1) - f(i, j+1, k-1) - f(i, j-1, k+1) + f(i, j-1, k-1)}{4\delta_2 \delta_3} \quad (\text{B.9})$$

Annexe C

Schéma différence finie centrée tournée "Rotated scheme"

Ici, nous considérons un matériau élastique, linéaire et hétérogène sans dislocations comme dans [239]. Les principales équations sont écrites sous la forme indicelle suivante :

$$\begin{aligned} T_{ij,j}(\mathbf{x}) &= 0 \quad \text{dans } V \\ T_{ij}(\mathbf{x}) &= C_{ijkl}(\mathbf{x}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{x}) \\ \varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} (u_{i,j}(\mathbf{x}) + u_{j,i}(\mathbf{x})), \end{aligned} \tag{C.1}$$

où ε est le champ de déformation, \mathbf{T} le champ de contrainte, \mathbf{u} le vecteur déplacement et \mathbf{C} le tenseur des modules élastiques locales.

En supposant que les champs de contraintes et de déformations sont définis sur une grille bidimensionnelle (2D) de points, les expressions d'équilibre des contraintes et d'incompatibilité de l'équation C.1 sont écrites dans l'espace de Fourier en utilisant la FFT en ces termes :

$$\begin{aligned} i\xi_j^d \tilde{T}_{ij}(\boldsymbol{\xi}^d) &= 0 \quad \text{dans } V \\ \tilde{\varepsilon}_{ij}(\boldsymbol{\xi}^d) &= \frac{1}{2} (i\xi_j^d \tilde{u}_i(\boldsymbol{\xi}^d) + i\xi_i^d \tilde{u}_j(\boldsymbol{\xi}^d)), \end{aligned} \tag{C.2}$$

Les dérivées partielles dans l'équation C.1 peuvent être exprimées en utilisant

les différences finies centrées sur la grille 2D avec une taille de pixel δ :

$$\begin{aligned} T_{ij,j}(\mathbf{x}) &\approx \frac{T_{ij}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j) - T_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_j)}{2\delta} \\ u_{i,j}(\mathbf{x}) &\approx \frac{u_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j) - u_i(\mathbf{x} - \mathbf{e}_j)}{2\delta}. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Dans le "rotated scheme", le champ de déplacement est exprimé aux quatres coins des pixels et les champs de contraintes et de déformations résultants sont évalués aux centres des pixels. Nous exprimons premièrement ces champs dans un repère pivoté de 45° ($\mathbf{f}_1; \mathbf{f}_2$) par rapport au repère Cartésien initial ($\mathbf{e}_1; \mathbf{e}_2$) :

$$\mathbf{f}_1 = \frac{\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{f}_2 = \frac{\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.4})$$

par :

$$u_i = R_{iI}u_I, \quad \varepsilon_{ij} = R_{iI}\varepsilon_{IJ}R'_{Jj}, \quad T_{ij} = R_{iI}T_{IJ}R'_{Jj}, \quad R_{iJ} = \frac{1 - 2\delta_{i1}\delta_{J2}}{\sqrt{2}}, \quad (\text{C.5})$$

où les indices en majuscules désignent les composantes dans la base ($\mathbf{f}_1; \mathbf{f}_2$). L'équation C.1 est discrétisée sur la grille pivotée par différences finies centrées (voir figure C.1) en ces termes :

$$\begin{aligned} T_{IJ}(\mathbf{x}) &= C_{IJKL}(\mathbf{x})\varepsilon_{KL}(\mathbf{x}) \\ T_{I1}(\mathbf{x}) - T_{I1}(\mathbf{x} - \sqrt{2}\mathbf{f}_1\delta) + T_{I2}(\mathbf{x} + \frac{(\mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_1)\delta}{\sqrt{2}}) - T_{I2}(\mathbf{x} + \frac{(\mathbf{f}_2 + \mathbf{f}_1)\delta}{\sqrt{2}}) &= 0 \\ \varepsilon_{IJ}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2\sqrt{2}\delta} \left(u_K(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{f}_L\delta}{\sqrt{2}}) - u_K(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{f}_L\delta}{\sqrt{2}}) + u_L(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{f}_K\delta}{\sqrt{2}}) - u_L(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{f}_K\delta}{\sqrt{2}}) \right), \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

où \mathbf{x} se situe au centre et les $\mathbf{x} \pm \frac{\mathbf{f}_j}{\sqrt{2}}$ sont affectés aux coins du pixel. En exprimant l'équation C.6 dans la base Cartésienne initiale ($\mathbf{e}_1; \mathbf{e}_2$), puis, en appliquant la transformée de Fourier inverse, nous obtenons de nouveau l'équation C.2 où $i\xi_j^d$ est exprimée sous la forme suivante dans le cas du "rotated scheme" :

$$i\xi_j^R = \frac{i}{2\delta} \tan \left(\left(\frac{\pi m_j}{N_j} \right) \right) \left(1 + \exp \left(i \frac{2\pi m_1}{N_1} \right) \right) \left(1 + \exp \left(i \frac{2\pi m_2}{N_2} \right) \right), \quad (\text{C.7})$$

où, les m_j sont définis avec les équations (3.20) et (3.21), $j = 1 \rightarrow 2$.

Dans le cas 3D, les champs de contraintes et de déformations sont évalués au centre des voxels et le champ de déplacement dans leurs coins. Les dérivées spatiales des champs de déplacements sont estimées par des différences finies centrées dans les

coins opposés. En suivant la même méthodologie comme dans le cas 2D, $i\xi_j^R$ devient [239] :

$$i\xi_j^R = \frac{i}{4\delta} \tan\left(\left(\frac{\pi m_j}{N_j}\right)\right) \left(1 + \exp\left(i\frac{2\pi m_1}{N_1}\right)\right) \left(1 + \exp\left(i\frac{2\pi m_2}{N_2}\right)\right) \left(1 + \exp\left(i\frac{2\pi m_3}{N_3}\right)\right), \quad (\text{C.8})$$

où, les m_j sont définis avec les équations (3.20) et (3.21), $j = 1 \rightarrow 3$.

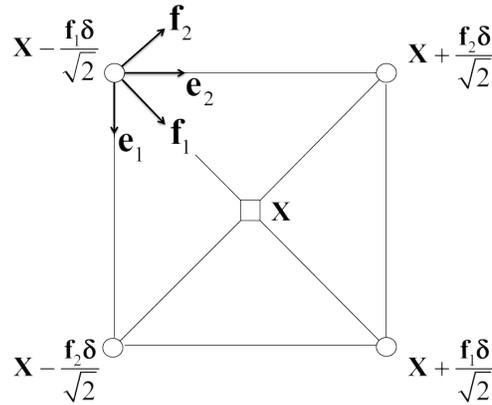


FIGURE C.1 – Pixel avec les cotés parallèles aux axes du repère Cartésien $(\mathbf{e}_1 ; \mathbf{e}_2)$. Superposition d'une base $(\mathbf{f}_1 ; \mathbf{f}_2)$ pivotée de 45° par rapport à $(\mathbf{e}_1 ; \mathbf{e}_2)$. Les champs de contraintes et de déformations sont évalués au centre \mathbf{x} du pixel. Le champ de déplacement est exprimé dans les coins du pixel.

Annexe D

Phénomène de Gibbs

Les phénomènes de Gibbs comme étudiés dans [225, 89] traitent de la question du recouvrement d'une fonction à partir de ses coefficients de Fourier. Lorsqu'on considère les $2N + 1$ coefficients de Fourier \hat{f}_k , pour $-N \leq k \leq N$, d'une fonction inconnue $f(x)$ définie sur l'intervalle $0 \leq x \leq 2\pi$, la méthode directe pour construire la somme classique de Fourier est :

$$f_N(x) = \sum_{k=-N}^N \hat{f}_k \exp(ik\pi x) \quad (\text{D.1})$$

avec

$$\hat{f}_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \exp(-ik\pi) dx \quad (\text{D.2})$$

Les équations (D.1) et (D.2) constituent un bon moyen de reconstruire $f(x)$, si cette dernière est continue et périodique. Lorsque $f(x)$ est analytique et périodique, les séries de Fourier convergent très vite :

$$\max_{0 \leq x \leq 2\pi} |f(x) - f_N(x)| \leq \exp(-\rho N) \quad \rho > 0 \quad (\text{D.3})$$

Par contre, si $f(x)$ est discontinue, $f_N(x)$ n'est pas une bonne approximation de $f(x)$. Cela peut s'expliquer comme suit :

- Loin de la discontinuité, le taux de convergence est lent. Si x_0 est un point fixe contenu dans le domaine $0 \leq x \leq 2\pi$,

$$|f(x_0) - f_N(x_0)| \sim 0 \left(\frac{1}{N} \right) \quad (\text{D.4})$$

- Il existe d'un dépassement à proximité de la frontière, qui ne diminue pas avec N ; ainsi, $\max_{0 \leq x \leq 2\pi} |f(x) - f_N(x)|$ ne tend pas vers zero.

La raison de la lenteur de la convergence de $f_N(x)$ vers $f(x)$ est double :

- La faible décroissance des coefficients de Fourier \hat{f}_k ,
- La nature globale des séries de Fourier, où les coefficients de Fourier sont déterminés par une intégration sur tout l'intervalle (équation [D.2](#)), même à travers les discontinuités.

Le phénomène de Gibbs est défini comme étant l'incapacité de recouvrir les valeurs d'une fonction à partir de ses coefficients de Fourier.

Annexe E

Stabilité des filtres spectraux

Considérons les $2N + 1$ premiers coefficients de Fourier \hat{f}_k d'une fonction $f(x)$ continue par morceaux (C^q ou analytique) avec un point de discontinuité à $x = \zeta$. Nous aimerions donc retrouver la valeur de $f(x)$ sur un intervalle $0 \leq x \leq 2\pi$, en multipliant les coefficients de Fourier par un facteur $\sigma\left(\frac{k}{N}\right)$ de telle sorte que la somme modifiée

$$f_N^\sigma(x) = \sum_{k=-N}^N \hat{f}_k \sigma\left(\frac{k}{N}\right) \exp(ikx) \quad (\text{E.1})$$

converge rapidement que la somme originale

$$f_N(x) = \sum_{k=-N}^N \hat{f}_k \exp(ikx). \quad (\text{E.2})$$

La relation [E.1](#) peut encore s'écrire comme une convolution dans l'espace réel :

$$f_N^\sigma(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} S(x-t) f_N(t) dt \quad (\text{E.3})$$

où $S(x)$ est l'équivalent du filtre $\sigma\left(\frac{k}{N}\right)$ dans l'espace réel. Elle est définie comme

$$S(x) = \sum_{k=-N}^N \sigma\left(\frac{k}{N}\right) \exp(ikx) \quad (\text{E.4})$$

D'après [\[225\]](#), une fonction réelle et paire $\sigma(\eta)$ est un filtre d'ordre $2p$ si :

$$\begin{aligned} \sigma(0) &= 1, \quad \sigma^{(l)}(0), \quad 1 \leq l \leq 2p-1 & (\text{a}) \\ \sigma(\eta) &= 0, \quad |\eta| \geq 1 & (\text{b}) \\ \sigma(\eta) &\in C^{2p-1}, \quad \eta \in (-\infty, +\infty) & (\text{c}) \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

où $\sigma^{(l)}$ est la dérivée d'ordre l de σ . Le filtre ne modifie pas les basses fréquences mais seulement les hautes fréquences. D'après les équations [E.5\(b\)](#) et [E.5\(c\)](#), $\sigma^{(1)} = 0$

pour $1 \leq l \leq 2p - 1$. Si $f(x)$ est C^{2p-1} et périodique, la multiplication de ses coefficients de Fourier par un filtre qui satisfait la condition E.5(a) ne change pas l'ordre de précision. Ce sont les deux autres conditions E.5(b) et E.5(c) qui deviennent importantes lorsque $f(x)$ est continue par morceaux.

La condition E.5(b) assure l'extension de la somme E.1 en des séries infinies :

$$f^\sigma(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}_k \sigma\left(\frac{k}{N}\right) \exp(ikx) \quad (\text{E.6})$$

et, par conséquent, au lieu de l'équation E.3, nous avons la convolution de $f(t)$ par elle-même :

$$f^\sigma(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} S(x-t) f(t) dt \quad (\text{E.7})$$

La fonction $f(x)$ apparaît dans le membre de droite de l'équation E.7, plutôt que sa somme finie de Fourier $f_N(x)$ comme dans l'équation E.3. L'effet de troncature de la somme finie de Fourier de $f(x)$ est éliminée. L'erreur de troncature est définie comme

$$E_N = |f^\sigma(x) - f_N^\sigma(x)| = \left| \sum_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}_k \sigma\left(\frac{k}{N}\right) \exp(ikx) - \sum_{k=-N}^{+N} \hat{f}_k \sigma\left(\frac{k}{N}\right) \exp(ikx) \right| \quad (\text{E.8})$$

E_N est évaluée dans [225, 89, 88] comme :

$$E_N = |f^\sigma(x) - f_N^\sigma(x)| \leq \frac{C}{N^{2p-1} d(x, \zeta)^{2p-1}} K(f) + \frac{C}{N^{2p-\frac{1}{2}}} \|f^{(p)}\|_{L^2} \quad (\text{E.9})$$

où C est une constante indépendante de N . $d(x, \zeta)$ mesure la distance de x au point de discontinuité ζ , $K(f)$ est uniformément bornée loin de la discontinuité et fonction seulement de $f(x)$. $\|\cdot\|_{L^2}$ désigne la norme $L^2[0, 2\pi]$. Les détails sur les preuves de ce résultat sont techniques et peuvent être trouvés dans [225, 89, 88]. Cependant, l'interprétation de ce résultat est simple. Elle sous-entend que le taux de convergence de l'approximation filtrée est déterminé uniquement par l'ordre $2p$ du filtre $\sigma(\eta)$ et la régularité de la fonction $f(x)$ loin de la discontinuité. En particulier, si la fonction $f(x)$ est continue par morceaux et que l'ordre du filtre augmente avec N , l'on peut recouvrir une approximation de précision exponentielle de la fonction initiale, partout sauf près de la discontinuité.

Annexe F

Temps de calculs et valeurs optimales de ε_M pour l'approche spectrale avec le filtre exponentiel

N	c	FFT($p = 1$)	
		ε_M	CPU Times (s)
128	0.05	0.5	0.264
	0.1	0.28	0.06
	0.25	0.04	0.0254
	0.5	0.008	0.014
256	0.05	0.55	2.5
	0.1	0.3	0.47
	0.25	0.13	0.085
	0.5	0.05	0.023
512	0.05	0.4	17.26
	0.1	0.3	4.2
	0.25	0.1	0.53
	0.5	0.01	0.13
1024	0.05	0.62	124.44
	0.1	0.36	29.48
	0.25	0.2	4.5
	0.5	0.03	1.5
2048	0.05	0.4	860.1
	0.1	0.32	206.19
	0.25	0.15	33
	0.5	0.028	7.84

TABLE F.1 – Temps CPU et valeurs optimales de ε_M (méthode FFT avec le filtre exponentiel) en fonction du nombre de points de Fourier et du nombre de Courant, dans le cas de l'annihilation de dislocation dans la configuration 1D