UNIVERSITÉ CÔTE D'AZUR

ÉCOLE DOCTORALE
SCIENCES FONDAMENTALES ET APPLIQUÉES



THÈSE DE DOCTORAT

Approche numérique de l'évolution microstructurale des péridotites

Jean Furstoss

Géoazur/CEMEF

Présentée en vue de l'obtention
du grade de docteur en
Sciences de la Terre et de l'Univers
d'Université Côte d'Azur
et de *Géoazur/CEMEF*
Dirigée par :
Carole Petit
Co-encadrée par :
Clément Ganino
Soutenue le :
10 novembre 2020

Devant le jury, composé de :
Sylvie Demouchy
Pr, Université de Montpellier, Rapporteur
Patrick Cordier
Pr, Université de Lille, Rapporteur
Nathalie Bozzolo
Pr, CEMEF Mines Paris, Examinateur
Thibault Duretz
CR, Université de Rennes, Examinateur
Marc Bernacki
Pr, CEMEF Mines Paris, Invité
Daniel Pino-Muñoz
CR, CEMEF Mines Paris, Invité
Andrea Tommasi
Pr, Université de Montpellier, Invité

GeoAzur

Cemef
CENTRE DE MISE EN FORME DES MATERIAUX

MINES ParisTech

REMERCIEMENTS

Dans un premier temps je souhaiterais remercier mes encadrants de thèse, Carole pour ton implication, ta disponibilité et pour avoir suivi et participé à ce travail du début à la fin, Daniel pour m'avoir guidé et appris une grande partie des connaissances que j'ai pu développer pendant cette thèse, Clément pour ton ouverture scientifique, ton énergie et ton optimisme à toute épreuve, Marc pour tes conseils toujours avisés et pour ton expertise sur les évolutions microstructurales sans laquelle ce travail n'aurait pas été possible. Merci à vous 4, vous avez largement contribué à faire de moi un jeune chercheur. J'ai beaucoup apprécié travailler avec vous, j'espère sincèrement que la fin de cette thèse ne signifie pas la fin de nos échanges et collaborations.

Je voudrais ensuite remercier les membres du jury Sylvie Demouchy, Patrick Cordier, Nathalie Bozollo, Thibault Duretz et Andrea Tommasi avec lesquels j'ai pu échanger et passer des moments enrichissants humainement et scientifiquement durant cette thèse, c'est aussi grâce à des rencontres comme celles-ci que le monde de la recherche me donne envie aujourd'hui, encore merci d'y avoir contribué.

J'aimerais également remercier tous ceux qui ont contribué à cette thèse de près ou de loin :
Sélim, Jean-Baptiste et Caroline pour m'avoir dépatouillé à de nombreuses reprises de problèmes informatiques,
Marie-Odile pour m'avoir initié à la déformation des roches et à l'observation des lames minces,
Guillaume pour ses regards critiques, ses discussions, son expertise en Paraview qui m'a permis de faire des figures de moins en moins moches (il y a encore du boulot mais on partait de loin..)
David, Ludo et Julien pour les sessions de travail qui m'ont bien fait avancer,
L'équipe de gestionnaires de Géoazur et particulièrement Valérie, Véronique, Jenny et Sandrine qui ont toujours été d'une efficacité, d'une gentillesse et d'une bienveillance formidable,
Riad pour ces discussions scientifiques et techniques qui m'ont toujours intéressées,
Toutes les personnes avec qui j'ai pu échanger dans les GdR recristallisation et en particulier Maurine pour son énergie et sa bienveillance,
Mes professeurs de licence et de master à Poitiers qui ont su, au cours de mon parcours universitaire, m'insuffler la passion pour la science et la recherche,
Ceux qui m'ont nourris le midi depuis trois ans, le chef du RU et Carole et sa bande du café de Sophia.

Un gros merci à mes colocataires de bureau qui ont égayés mes journées depuis 3 ans, d'abord Milton et Clément (les branlos du 3ème) pour les délires et les parties de ping-pong puis Laurie et Carlo (et Théa la squateuse régulière - et Pavlos avec un s puisqu'il est pas là) avec qui nous avons transformé le bureau en vrai collocation, je suis heureux d'avoir partagé ces quelques années avec vous dans le bureau le plus chouette du monde !

Je voudrais aussi remercier toutes ces personnes que j'ai aimé croiser dans les couloirs, aux pauses café, aux vinoazurs ou à la bière du soir : Gueorguy (alias Junior alias maître Ratzov alias Guiguich alias l'honorable immigré du 2ème), Jean-Xavier, Laure, Yvonne, Cédric, Marianne, Boris, Marc, Mireille, Bernard, François, Davide, Magalie, Jelena, Sylvain, Corinne, Yann, Charbel et tous les autres. Vous avez tous contribué à mon bien être dans le labo !

Merci aux doctorants de Géoazur et du CEMEF pour ces trois années passées à vos côtés : Sebastian, Karen, Juhy, Brayan, Malik, Florian, Albanne, Alex, Emmanuelle, Zoé, Lionel, Nico, Caroline, Josselin, Pierre, Titziano, Ophélie, Sarah, Serge, Daniel, Yoan, Paul, Oubaida, Luc, Sébastien, Marco, Maria-José et les autres.

Un gros merci aux copains de Biot qui ont rendu ma vie belle en dehors du labo et permis de faire des breaks ressourçants dans ma thèse : la famille VdW (Nina, Vanou, Murielle et Laurens), Guy, les Bouyons, Georges, Yves, les Operto (Jean-Mi, Mary et les filles), Jenny, Jean-Luc, Momone, Kiki, Philou, Jacques et les autres.

Spéciale dédicace aux copains Juju, Vince, Valou, Lita, Yvan, Quentin, GC, BTP, Mika, Ben, PJ,

Guigui, Kam, Rambo, à mes parents ainsi que Juju et Dan(n)y !

Enfin un gros merci à Stella d'avoir partagé ma vie ces trois dernières années.

A vous tous, cette thèse est dédiée !

ABSTRACT

This thesis aims at simulating the microstructural evolutions of upper mantle rocks under thermomechanical conditions representative of the Earth's lithosphere. Indeed, the mechanical behavior of these rocks controls, at first order, the rheology of the lithosphere and thus of the tectonic plates.

The tools used and developed in this work are based on the level-set (LS) formalism allowing an implicit description of the grain boundaries and the modelling of grain boundary migration (GBM) at the polycrystal scale. Thus, the microstructural evolutions are simulated in a robust and efficient finite element (FE) framework allowing a coupling with crystal plasticity (CP) calculations which allows to describe the mechanical behavior of the rock.

A first large part of this thesis is devoted to the deformation-free grain growth (GG) in peridotites. Firstly we show that the GG kinetics of olivine (major phase of peridotites), considering only capillarity force, is not in agreement with the natural constraints on the GG kinetics of peridotites. Secondly, it is shown that the introduction of secondary phases such as pyroxenes and spinels can slow GG but is not sufficient to reach kinetics compatible with natural constraints. Finally, it is proposed that impurities play an important role in the GG kinetics of mantel rocks and that taking them into account allows reconciling the constraints coming from laboratory experiments and natural observations.

In a second part of the thesis, the constitutive model used to describe the mechanical behavior of olivine in a CP framework is presented. The manipulation of the different tensors in this numerical framework is based on the construction of particular tensor bases considering the symmetries of the crystal and allowing the use of anisotropic elasticity in a strainghtforward and natural way. The mixed FE velocity-pressure formulation is also modified to take into account the elastic anisotropy. This way of describing the deformation is then enriched with a relaxation mechanism supposed to represent the various processes, other than dislocation glide, accommodating deformation in olivine polycrystals. This description is then coupled with the LS formalism to simulate the microstructural evolutions of an olivine aggregate during deformation. This numerical framework is finally used to study the strain localization in olivine polycrystals along different types of pre-existing shear zones.

Finally, the limits and perspectives of the development of numerical formalism to arrive at a faithful description of the microstructural evolutions of a mantle rocks within the lithospheric thermomechanical conditions are discussed.

RÉSUMÉ

Cette thèse a pour but de simuler les évolutions microstructurales des roches du manteau supérieur dans des conditions thermomécaniques représentatives de la lithosphère terrestre. En effet, c'est le comportement mécanique de ces roches qui contrôle, au premier ordre la rhéologie de la lithosphère et donc des plaques tectoniques.

Les outils utilisés et développés dans ce travail sont basés sur le formalisme level-set (LS) permettant une description implicite de la microstructure et la modélisation de la migration de joint de grains à l'échelle du polycristal. Les évolutions microstructurales sont simulées dans un cadre élément fini (EF) robuste et efficace permettant un couplage avec des calculs de plasticité cristalline décrivant le comportement mécanique de la roche.

Une première grande partie de cette thèse est consacrée à la croissance de grain en absence de déformation dans les péridotites. Il est montré, dans un premier temps que la cinétique de croissance d'un agrégat d'olivine (minéral principal des péridotites) n'est pas en accord avec les contraintes naturelles sur la cinétique de croissance de grain des péridotites. Il est ensuite montré que l'introduction de phases secondaires telles que les pyroxènes et le spinelle permet de ralentir la croissance mais ne suffit pas à obtenir des cinétiques cohérentes avec les contraintes naturelles. Finalement il est proposé que les impuretés jouent un rôle important dans la cinétique de croissance des roches mantelliques et que leur prise en compte permet de concilier les contraintes venant des expériences de laboratoire et des observations naturelles.

Dans une deuxième grande partie, le modèle constitutif utilisé pour décrire le comportement mécanique de l'olivine dans un cadre de plasticité cristalline est présenté. La manipulation des différents tenseurs dans ce cadre numérique repose sur la construction de bases tensorielles particulières tenant compte des symétries du cristal et permettant l'utilisation d'une élasticité anisotrope de manière transparente et naturelle. La formulation mixte EF vitesse-pression est également modifiée pour tenir compte de l'anisotropie élastique. Cette manière de décrire la déformation est ensuite enrichie d'un mécanisme de relaxation sensé représenter les mécanismes, autres que le glissement de dislocation, accommodant la déformation dans les polycristaux d'olivine. Cette description est alors couplée avec le formalisme LS pour simuler les évolutions microstructurales d'un agrégat d'olivine durant la déformation. Ce cadre numérique est enfin utilisé pour étudier la localisation de la déformation, dans les polycristaux d'olivine, par différents types de zone de faiblesse pré-existantes.

Finalement, les limites et les perspectives de développement du formalisme numérique pour aboutir à une description fidèle des évolutions microstructurales d'une roche mantellique dans des conditions thermomécaniques de la lithosphère sont discutées.

Table des matières

Table des matières iii

Introduction générale 1

1 Évolutions microstructurales dans les roches et modélisations numériques 3
- 1.1 Rappels sur la tectonique . . . 4
- 1.2 Évolutions microstructurales : forces motrices et mécanismes physiques . . . 8
- 1.3 L'intérêt géologique pour les évolutions microstructurales . . . 23
- 1.4 Modéliser les évolutions microstructurales . . . 30
- 1.5 Références . . . 53

2 Simulation de la croissance de grains pour un agrégat d'olivine pure 61
- 2.1 Introduction . . . 62
- 2.2 2D and 3D simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method . . . 62
- 2.3 Compléments et limites sur cette partie . . . 81
- 2.4 Références . . . 84

3 Croissance de grains dans les matériaux multiphasés : simulation et application aux roches du manteau 89
- 3.1 Introduction . . . 90
- 3.2 Full field and mean field modeling of grain growth in a multiphase material under dry conditions : application to peridotites . . . 90
- 3.3 Discussion et limites . . . 109
- 3.4 Références . . . 112

4 Prise en compte de l'ancrage des joints de grains par les impuretés 117
- 4.1 Introduction . . . 118
- 4.2 On the role of solute drag in reconciling laboratory and natural constraints on olivine grain growth kinetics . . . 118
- 4.3 Impurities slow down the growth rate of mantle crystals . . . 135
- 4.4 Discussion et limites . . . 139
- 4.5 Références . . . 140

5 Simuler la déformation de l'olivine par CPFEM 147
- 5.1 Plasticité cristalline appliquée à l'olivine . . . 148
- 5.2 Handling tensors using tensorial Kelvin bases : application to olivine polycrystal deformation modeling using elastically anistropic CPFEM . . . 154
- 5.3 Compléments et limites . . . 169
- 5.4 Références . . . 170

6 Plasticité cristalline réduite et évolutions microstructurales **175**
6.1 Plasticité cristalline réduite . . . 176
6.2 A new finite element approach to model microscale strain localization within olivine aggregates . . . 177
6.3 Limites et discussion . . . 194
6.4 Références . . . 195

7 Discussion et perspectives **201**
7.1 Perspectives . . . 202
7.2 Discussion et conclusion . . . 210
7.3 Références . . . 211

A Analyse quantitative des textures cristallographiques **I**
A.1 Références . . . II

B La méthode de Saltykov **III**
B.1 Références . . . IV

C Volume conservation enforcement **V**
C.1 Références . . . VI

D Orthorhombic Kelvin base **VII**
D.1 Références . . . VIII

Introduction générale

Depuis les preuves apportées au milieu du XX^{ème} siècle par des données paléomagnétiques [Vine and Matthews, 1963], la tectonique des plaques fait maintenant l'unanimité dans la communauté scientifique. Cette théorie permet à l'heure actuelle de comprendre la formation et l'évolution de grandes structures géologiques depuis les premiers stades de formation des océans (rifts) jusqu'aux collisions continentales dont résultent les chaînes de montagnes (orogènes).

Les marqueurs du mouvement des plaques tectoniques sont visibles depuis l'échelle kilométrique, où des marqueurs structuraux tels que des failles ou des plis témoignent des déformations passées [Ghosh and Sengupta, 1987], jusqu'à l'échelle millimétrique (voir submicrométrique), où les microstructures des roches présentent des caractéristiques telles que la taille, la géométrie et l'orientation des grains [Platt and Behr, 2011] qui renseignent sur l'histoire thermomécanique subie par la roche. L'étude de la formation de tels marqueurs permet alors de mieux comprendre les mécanismes microstructuraux à l'origine de la tectonique des plaques et d'apporter des contraintes à certains contextes géodynamiques.

Les caractéristiques microstructurales d'une roche et leurs évolutions peuvent être étudiées de différentes manières depuis les observations naturelles [Herwegh et al., 2016], jusqu'aux expériences de laboratoire [Hansen et al., 2012] en passant par des simulations numériques [Bons et al., 2007]. Les comparaisons entre les résultats obtenus par des expériences de laboratoire et des observations naturelles sont souvent réalisées et permettent, lorsque certaines caractéristiques microstructurales sont communes, d'associer les conditions expérimentales aux conditions naturelles vues par la roche [Nicolas et al., 1973]. Cependant, les conditions thermomécaniques de laboratoire nécessitent presque systématiquement une forte extrapolation (de plusieurs à une dizaine d'ordres de grandeur) pour être applicables à un contexte géodynamique réel [Paterson, 1987]. L'augmentation croissante des puissances de calcul et le développement de méthodes numériques efficaces permet également à l'heure actuelle de simuler les évolutions microstructurales de différents matériaux dont les roches. Ces techniques utilisent généralement des résultats expérimentaux et/ou des résultats de simulations numériques à l'échelle atomique et/ou des observations naturelles pour la calibration de certains paramètres. Les résultats de ces simulations quant à eux peuvent permettre de, mieux comprendre les mécanismes physiques impactant fortement les évolutions microstructurales [Kelka et al., 2015], mieux comprendre quelles sont les caractéristiques d'une microstructure qui contrôlent les propriétés du matériau [Jessell et al., 2005], faire le lien entre les conditions de laboratoire et les conditions naturelles [Jessell et al., 2003] où encore alimenter des modèles géodynamiques prenant en compte des informations sur les microstructures [Tommasi et al., 2009].

Une des principales difficultés de ce type de modélisation numérique réside dans la diversité et la complexité des processus à considérer. En effet, la migration des joints de grains, la déformation plastique et la nucléation qui sont des mécanismes centraux dans ce type de modèles, dépendent des conditions thermomécaniques, du type de matériau ainsi que des caractéristiques mêmes de la microstructure. De plus ces différents processus sont interconnectés entre eux et peuvent interagir fortement. Ainsi, la construction d'un formalisme numérique global, capable de prendre

en compte ces différents mécanismes à l'échelle du réseau de joint de grains n'est chose ni aisée ni répandue dans l'état de l'art. C'est l'objectif de ce travail de thèse en prenant comme matériau d'étude les roches principales du manteau lithosphérique terrestre appelées péridotites.
Dans une première partie on présentera les principaux mécanismes physiques responsables des évolutions microstructurales dans les matériaux polycristallins, l'intérêt de mieux les comprendre en sciences de la Terre ainsi que les méthodes numériques utilisées dans ce cadre. On se penchera ensuite sur la modélisation des évolutions microstructurales des péridotites en adoptant une approche incrémentale représentant le déroulement temporel de ce travail de thèse. On assemblera ainsi étape par étape les briques nécessaires à la construction d'un formalisme numérique global permettant de modéliser les évolutions microstructurales dans les roches du manteau. Une première grande partie s'attachera à la migration de joint de grains (GBM) due à la pression capillaire, tout d'abord en assimilant une roche mantellique à un matériau monophasé constitué seulement d'olivine, puis en prenant en compte la présence de phases secondaires telles que les pyroxènes et les phases alumineuses, et enfin en prenant en compte les impuretés présentes dans ces roches. Dans un second temps on présentera le formalisme numérique développé pour modéliser les évolutions microstructurales d'un agrégat d'olivine soumis à une déformation. On se concentrera d'abord sur la description de la déformation de l'olivine par glissement de dislocations, puis on présentera une méthode permettant de prendre en compte d'autres types de mécanismes de déformation pour enfin aborder les évolutions microstructurales pendant la déformation. Ces approches permettront d'étudier la localisation de la déformation par différents types de zones de faiblesses pré-existantes dans un polycristal d'olivine. Finalement on présentera les perspectives pour faire évoluer le cadre numérique développé vers une description plus précise des différents mécanismes.

Chapitre 1

Évolutions microstructurales dans les roches et modélisations numériques

Sommaire

1.1 Rappels sur la tectonique 4
1.1.1 La structure profonde de la Terre 4
1.1.2 Le mouvement des plaques 5
1.1.3 Les roches de la lithosphere 7
1.2 Évolutions microstructurales : forces motrices et mécanismes physiques 8
1.2.1 Migration de joint de grains 8
1.2.2 Déformation plastique 14
1.2.3 Evolutions microstructurales pendant la déformation 19
1.3 L'intérêt géologique pour les évolutions microstructurales 23
1.3.1 Formation des zones de cisaillement et cicatrisation 23
1.3.2 Analyse des microstructures 26
1.3.3 Implication pour la rhéologie et les modèles géodynamiques de grande échelle 29
1.4 Modéliser les évolutions microstructurales 30
1.4.1 Champ moyen 31
1.4.2 Champ complet 32
1.5 Références 53

1.1 Rappels sur la tectonique

Dans cette section, un résumé de la structure profonde de la Terre et de la théorie de la tectonique des plaques est présenté afin de mettre en avant les problématiques de grande échelle qui sous-tendent cette étude. Comme le travail réalisé durant cette thèse peut intéresser un public plus vaste que celui des géosciences, les points qui y seront abordés pourront paraître évidents et élémentaires pour un lectorat familier de la géologie.

C'est au début du XX ème siècle que Wegener [1912] expose sa théorie de la dérive des continents, théorie surtout basée sur des observations géographiques et géologiques (concordance des côtes et formations géologiques qui se poursuivent d'un continent à l'autre) ainsi que sur des données paléontologiques (espèces communes entre plusieurs continents). Alors que cette théorie est rejetée dans un premier temps, c'est au milieu du XX ème siècle que des études paléomagnétiques apportent une nouvelle preuve des translations continentales et permettent de reconstituer ces mouvements pendant les 200 derniers millions d'années. La découverte de l'expansion des fonds océaniques par Hess [1959] et Vine and Matthews [1963] acheva de convaincre la communauté scientifique ce qui aboutira à une théorie nouvelle appelée tectonique des plaques. Cette théorie largement admise et étudiée aujourd'hui stipule que l'écorce terrestre est composée de plaques rigides qui bougent les unes par rapport aux autres et que le moteur de ce mouvement est la convection du manteau terrestre. Cette théorie suppose implicitement que les limites de plaques sont rhéologiquement faibles sur des grandes échelles de temps.

1.1.1 La structure profonde de la Terre

Cette écorce supérieure rigide et mobile appelée lithosphère est constituée de la croûte et d'une partie du manteau supérieur (voir figure 1.1).

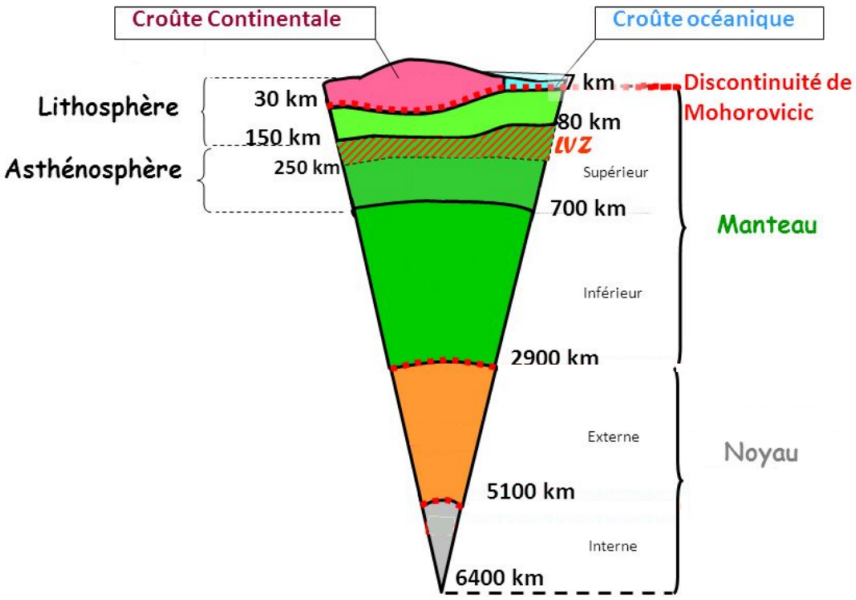


FIGURE 1.1 – Représentation de la structure interne de la terre d'après svt.ac-dijon.fr, l'échelle varie verticalement.

Son épaisseur varie suivant son âge et sa nature (océanique ou continentale) mais est généralement comprise entre 70 et 150 km (plus fine pour une lithosphère océanique et plus épaisse pour

une lithosphère continentale). La limite entre croûte et manteau supérieur est appelée Moho, en référence au géologue Mohorovičić qui la mit en évidence en 1909 [Mohorovicic, 1910] en étudiant la propagation d'ondes sismiques.
C'est la lithosphère rigide qui constitue les plaques tectoniques dont les limites latérales correspondent aux zones en convergence (subduction/collision), en divergence (dorsale/rift) ou en coulissage (failles transformantes et grands décrochements). C'est au niveau de ces zones que sont localisés l'essentiel des foyers des séismes.
Sous la lithosphère on trouve l'asthénosphère constituée du manteau supérieur jusqu'à 670km de profondeur, ensuite vient le manteau inférieur puis le noyau externe (phase liquide) et enfin le noyau interne (phase solide).
La limite entre lithosphère et asthénosphère peut être définie de plusieurs manières. La première est une définition thermique : dans l'asthénosphère la chaleur se propage par conduction et convection alors que dans la lithosphère elle se propage essentiellement par conduction. Cette définition est souvent associée à l'isotherme 1300°C située entre 80 et 150km de profondeur. La limite lithosphère/asthénosphère (figure 1.1) peut aussi être définie comme le sommet de la Low Velocity Zone (LVZ), nom qui fait référence à un changement net de vitesse de propagation des ondes sismiques dans cette région.

1.1.2 Le mouvement des plaques

Sur Terre, la lithosphère est donc décomposée en de nombreuses plaques qui se déplacent les unes par rapport aux autres sous l'effet des mouvements convectifs du manteau (voir figure 1.2). Les mouvements récents peuvent être mesurés par GPS ou par les anomalies magnétiques des fonds océaniques [DeMets et al., 1990].

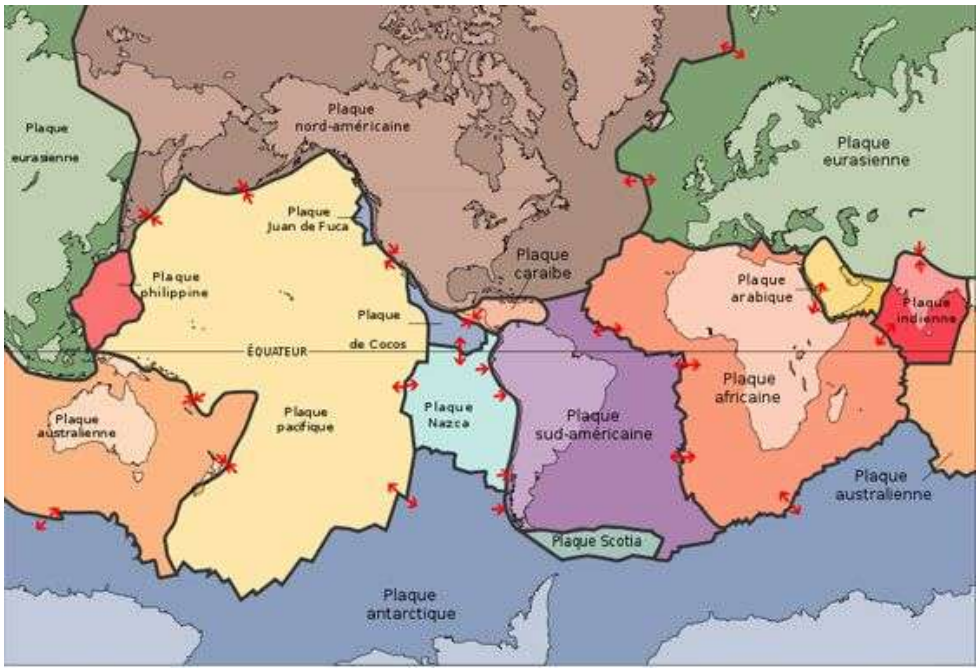


FIGURE 1.2 – Configuration actuelle des plaques tectoniques principales de la Terre (historiquement imaginée par le Pichon en 1968 [Le Pichon and Heirtzler, 1968]). Les flèches rouges indiquent le mouvement relatif des plaques (source : futura-science.com).

L'étude géologique de différentes zones tectoniques actives et fossiles permet d'observer des phé-

nomènes récurrents qui sont la conséquence du mouvement relatif des plaques : la subduction (plaque plongeant sous une autre plaque), l'ouverture d'un océan (accrétion) ou encore la collision entre deux continents. En plaçant ces mécanismes dans un cadre global, le géologue et géophysicien Tuzo Wilson proposa dans les années 1960 [Wilson, 1963] un cycle qui porte aujourd'hui son nom et qui décrit les différentes étapes qui mènent de l'ouverture d'un océan à sa fermeture et sa disparition. La durée de ce cycle est de l'ordre de 500 millions d'années et il a dû s'en produire une dizaine sur Terre au cours des temps géologiques. Les différentes étapes de ce cycle sont représentées sur la figure 1.3 et placées aux endroits où on peut les observer aujourd'hui sur la planète.

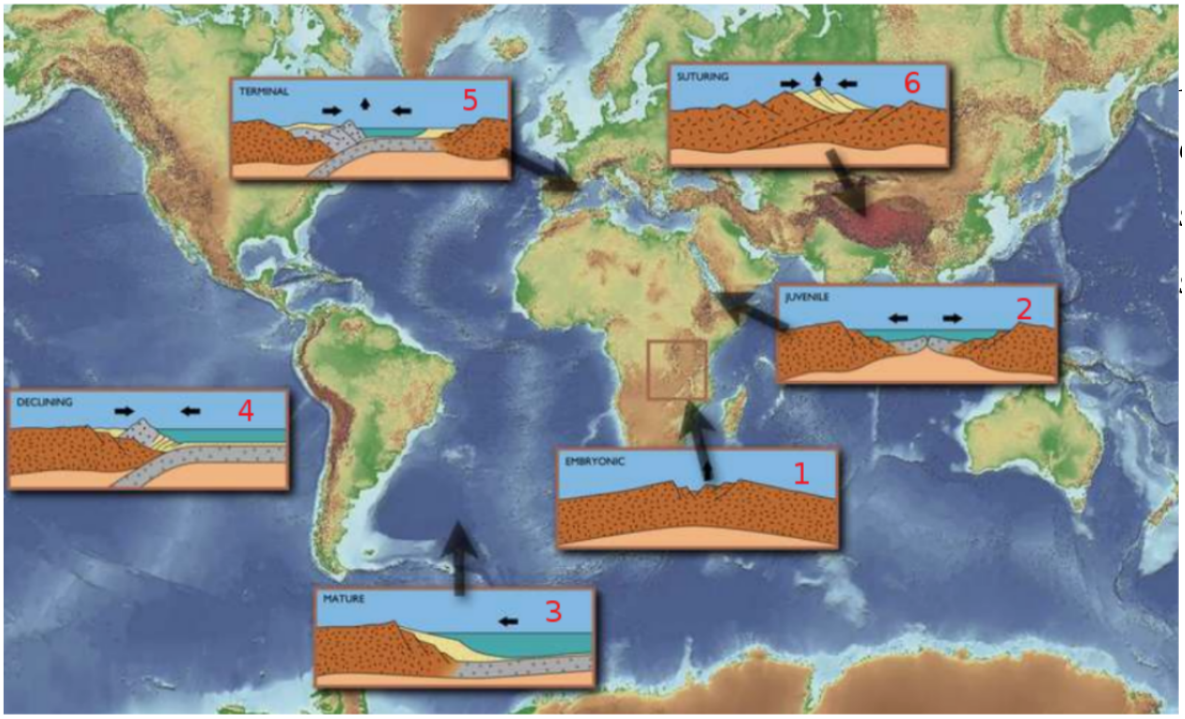


FIGURE 1.3 – Les différentes étapes du cycle de Wilson observables sur la planète (source : futura-science.com)

Le déroulement d'un cycle comprend :

- La déchirure d'un continent comme on peut l'observer au niveau du rift Est-Africain.
- La formation d'un domaine océanique avec la création d'une jeune lithosphère océanique au niveau de la dorsale dont la mer Rouge en est un bon exemple.
- L'agrandissement du domaine océanique grâce au fonctionnement continu de la dorsale, c'est ce qui se passe dans l'Atlantique.
- La subduction de lithosphère océanique sous la lithosphère continentale comme c'est le cas dans les Andes.
- Le rapprochement des domaines continentaux dû à la traction exercée par la plaque plongeante subduite (froide) qui s'enfonce dans le manteau (chaud) : c'est ce qui se passe en Méditerranée orientale.
- La collision des continents au niveau de la zone de suture continentale où on peut observer la formation d'une chaîne de montagnes telle que l'Himalaya.

L'idée de Wilson venait de l'observation de phases de déformations successives ayant conduit à l'ouverture océanique à des endroits très proches (l'Atlantique) ce qui suggère que les roches gardent une mémoire de leur déformation passée.

1.1.3 Les roches de la lithosphere

D'un point de vue pétrologique, la croûte continentale est majoritairement composée de granites, la croûte océanique principalement de gabbros et le manteau est composé de péridotites. Les roches qui nous intéressent ici sont les péridotites car ce sont les propriétés de ces roches qui contrôlent la rhéologie du manteau et in fine celle de la lithosphère (voir section 1.3.1). Les péridotites sont des roches composées de trois minéraux principaux : l'olivine, l'orthopyroxène et le clinopyroxène. Les proportions de ces différentes phases dans la roche permettent de classer les péridotites (ou pyroxénites si l'olivine n'est plus le minéral majoritaire) en différentes catégories (voir figure 1.4).

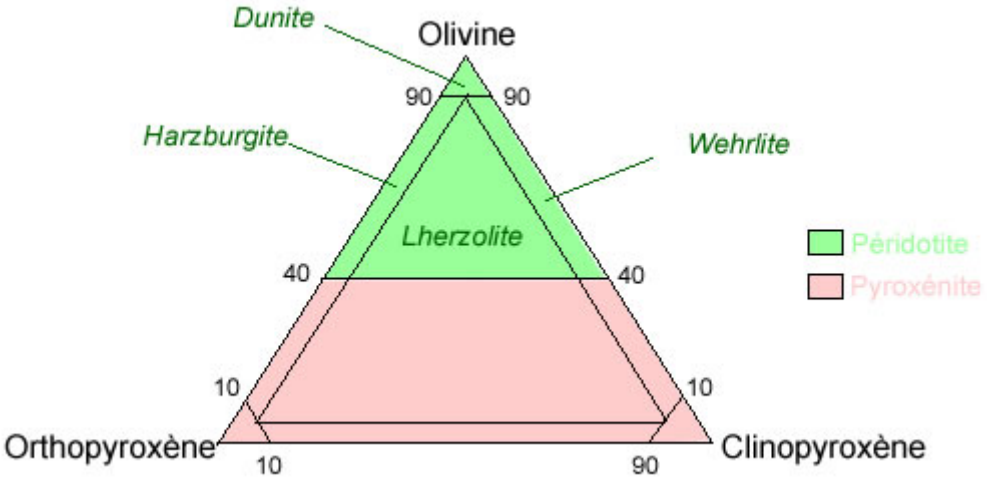


FIGURE 1.4 – Diagramme de classification des péridotites et des pyroxénites. Les sommets du triangle correspondent à une roche contenant 100% du minéral correspondant, d'après [Lameyre, 1975].

Les péridotites contiennent également en faible proportion un ou des minéraux contenant de l'aluminium pouvant être du plagioclase, du spinelle ou du grenat suivant les conditions de pression et de température et teneur en eau. Le minéral qui va le plus retenir notre attention dans ce travail est l'olivine car c'est la phase majoritaire dans les roches mantelliques. L'olivine $((Mg,Fe)_2SiO_4)$ est une solution solide composée de deux pôles, la forstérite (Mg_2SiO_4) et la fayalite (Fe_2SiO_4) dont les proportions respectives dans la nature sont très généralement 92/8. L'olivine a une structure cristallographique orthorhombique dont les paramètres de maille a, b et c valent respectivement 4.76, 10.2 et 5.99Å.

1.2 Évolutions microstructurales : forces motrices et mécanismes physiques

La majorité des roches sont des matériaux granulaires (ou encore polycristallins) ce qui signifie qu'ils sont constitués de grains séparés entre eux par des joints de grains (figure 1.5). Un grain est en réalité un cristal dans lequel les atomes sont rangés suivant une orientation cristallographique homogène et différente des grains voisins (figure 1.5).

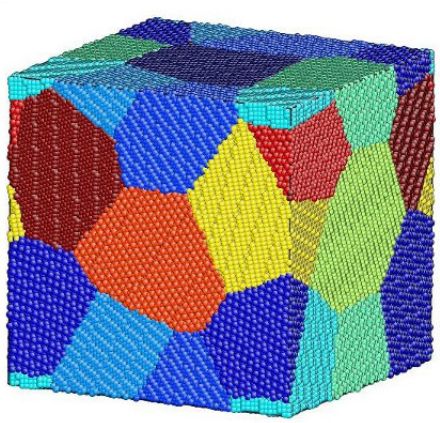


FIGURE 1.5 – Représentation d'un polycristal (d'après $https://atomsk.univ-lille.fr/$), les grains correspondent aux zones de couleur unie dans lesquelles l'orientation cristallographique est la même, les joints de grains correspondent aux frontières entre les grains et dont l'épaisseur caractéristique fait qu'ils sont considérés discret à l'échelle du polycristal.

Dans la suite, on appellera microstructure l'ensemble des caractéristiques relatives à un polycristal ce qui comprend la taille de grain, l'orientation cristallographique préférentielle (CPO, i.e. si une ou des orientations particulières sont privilégiées dans le polycristal) ou encore la forme des grains (allongés ou non, joints de grains tortueux, etc.). Cette microstructure n'est pas figée : en fonction des conditions thermomécaniques, les joints de grains peuvent être mobiles et se déplacer sous l'action de certaines forces cherchant à minimiser l'énergie interne liée aux défauts du polycristal. On va détailler dans un premier temps ces différentes forces, puis on décrira comment un polycristal se déforme de manière irréversible (plastiquement) en faisant migrer des défauts tels que les dislocations (défaut 1D) et les lacunes (défaut 0D). Enfin on abordera les éventuels effets qu'une déformation d'un polycristal peut induire sur sa microstructure par le biais des mécanismes de recristallisation dynamique.

1.2.1 Migration de joint de grains

1.2.1.1 Energie interfaciale

Les joints de grains sont des défauts surfaciques (2D) séparant deux domaines d'orientations cristallographiques différentes, on peut donc leur attribuer une énergie par unité de surface, appelée énergie interfaciale γ(J.mm^{-2}). Lorsque la différence d'orientation entre les deux grains est faible on parle de joint de grains faiblement désorienté (LAGB). Dans ce cas le joint de grains peut être décrit comme un empilement de dislocations et son énergie peut être approximée à partir de l'énergie des dislocations à partir d'équations du type Read-Shockley [Read and Shockley, 1950]. A partir d'une certaine valeur de désorientation ($\approx 10°$) le joint de grains est dit fortement désorienté (HAGB) et son énergie ne peut plus être calculée comme un empilement de dislocations. Pour cer-

taines valeurs de désorientations l'énergie interfaciale peut être plus faible (figure 1.6) lorsque la désorientation correspond à une symétrie ou à un arrangement du joint de grains particulier.

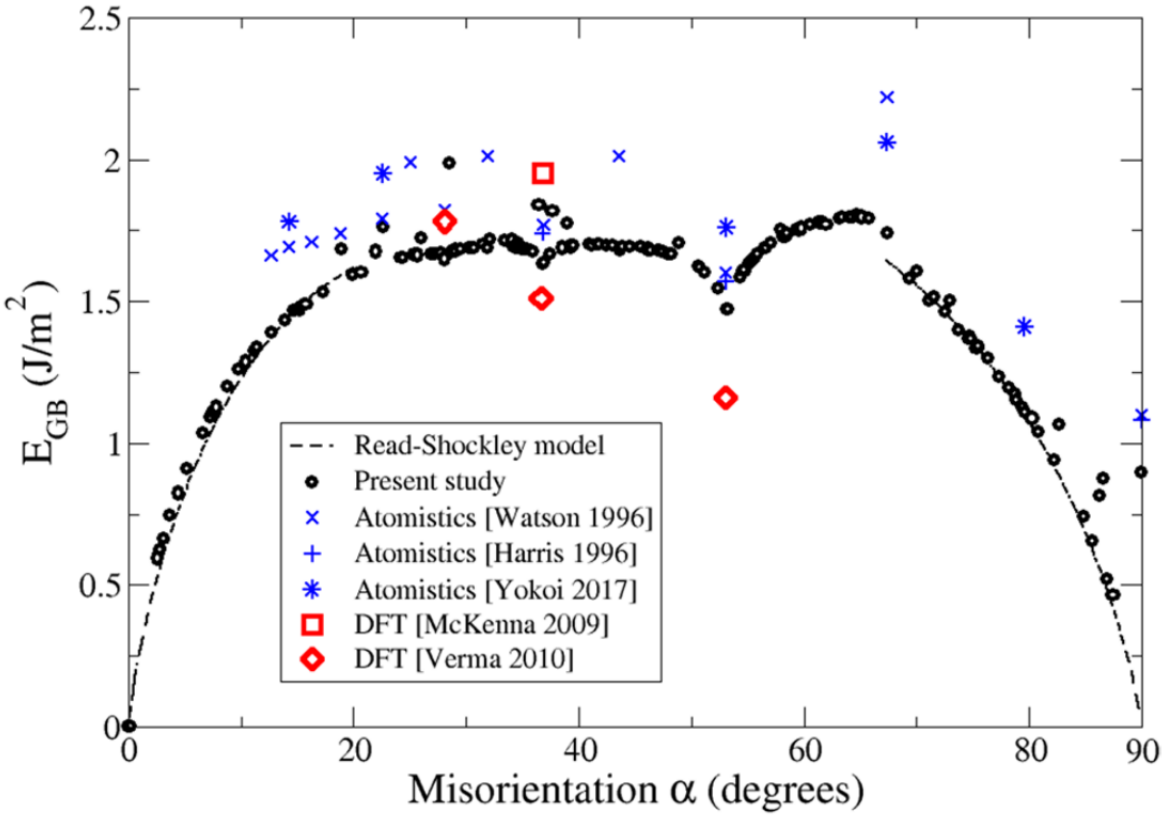


FIGURE 1.6 – Energie interfaciale en fonction de la désorientation dans MgO, d'après [Hirel et al., 2019]. Les traits pointillés représentent le modèle de Read-Shockley modélisant le joint de grains comme un empilement de dislocations, les différents points sont issus de simulations à l'échelle atomique.

L'énergie interfaciale d'un joint de grains dépend également du plan cristallographique du joint de grains, certaines surfaces pouvant être énergétiquement plus favorables que d'autres dans un cristal ce qui se répercute sur l'énergie du joint de grains [Rohrer, 2011].

Bien que difficiles à mettre en place, les méthodes de simulation à l'échelle atomique sont des outils appropriés pour déterminer des énergies interfaciales [Hirel et al., 2019]. Cependant il existe des moyen expérimentaux pour approcher les valeurs de γ. Ces méthodes reposent sur la relation d'Herring [Herring, 1951] qui, lorsque l'on néglige la dépendance de l'énergie interfaciale au plan du joint de grains, se simplifie sous la forme de l'équation d'Young :

$$\frac{\gamma_1}{\theta_{2,3}} = \frac{\gamma_2}{\theta_{1,3}} = \frac{\gamma_3}{\theta_{2,1}}, \tag{1.1}$$

où $\theta_{i,j}$ représente l'angle dièdre entre les joints de grains i et j. Cette équation représente l'état d'équilibre d'une jonction triple. On peut alors repérer dans la microstructure des sites où un LAGB rencontre deux HAGB et remonter à l'énergie interfaciale d'un HAGB en mesurant les angles dièdres et en calculant l'énergie du LAGB grâce à la relation de Read-Shockley [Cooper and Kohlstedt, 1982; Duyster and Stöckhert, 2001]. Il est à noter que ce domaine (discussions autour de la forme de la fonction γ et de ses approximations) est ouvert dans l'état de l'art et sujet à de nombreuses études.

1.2.1.2 Mobilité

Le déplacement des joints de grains met en jeu de la diffusion atomique et est largement favorisé par l'agitation thermique. L'étude de ces déplacements en fonction de la température permet de quantifier, à travers un paramètre appelé la mobilité M($m^4.J^{-1}.s^{-1}$), la « facilité » qu'a un joint de grains à se mouvoir dans la microstructure en réponse à certaines forces. La signification physique d'un tel paramètre peut être largement discutée car elle moyenne de nombreux mécanismes ayant lieu à l'échelle atomique [Rollett et al., 2004] et est aujourd'hui largement revisité sous forme tensorielle [Han et al., 2018] en lien avec la théorie des disconnections [Chen et al., 2020]. Malgré tout, une description scalaire et phénoménologique reste largement répandue dans la communauté scientifique car elle permet de rendre compte de nombreuses évolutions microstructurales à l'échelle mésoscopique. Comme le phénomène de migration de joint de grains implique des mécanismes thermiquement activés, la mobilité est ainsi généralement exprimée par une loi d'Arrhenius :

$$M = M_0 e^{-\frac{Q}{RT}}, \tag{1.2}$$

avec M_0($m^4.J^{-1}.s^{-1}$) un terme pré-exponentiel, Q($J.mol^{-1}$) l'énergie d'activation, R la constante des gaz parfaits et T(K) la température.
Comme pour l'énergie interfaciale, la mobilité peut être enrichie de dépendances cristallographiques, cependant les méthodes de détermination de la mobilité ne permettent que rarement cet enrichissement. Un point notable cependant concerne la différence de mobilité entre les LAGB, peu mobiles, et les HAGB, mobiles (figure 1.7).

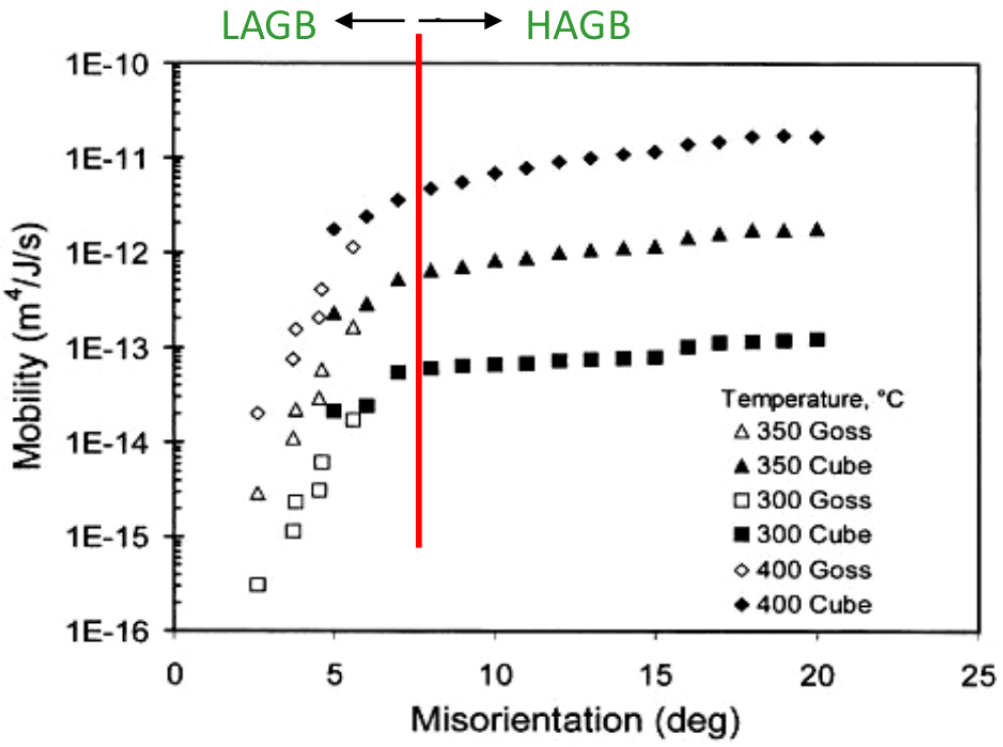


FIGURE 1.7 – Mobilité d'un joint de grains dans l'aluminium en fonction de la désorientation d'après [Humphreys and Hatherly, 2012], la ligne rouge correspond à la différence entre un joint de grains faiblement désorienté (LAGB) et un joint de grains fortement désorienté (HAGB).

Cette différence de plusieurs ordres de grandeur entre la mobilité d'un LAGB et celle d'un

HAGB a été mise en évidence pour de nombreux matériaux dont les métaux [Humphreys and Hatherly, 2012] et les roches [Stöckhert and Duyster, 1999]. On peut noter que le seuil de désorientation à partir duquel un joint de grains peut être considéré comme fortement désorienté est propre à chaque matériau.

1.2.1.3 Forces motrices

Si la température est suffisamment élevée pour que les joints de grains d'une microstructure soient mobiles, l'action de certaines forces entraîne une migration des joints de grains. La vitesse de migration v d'un joint de grains soumis à une force P s'écrit de manière communément admise à l'échelle mésoscopique sous la forme [Humphreys and Hatherly, 2012] :

$$\vec{v} = \mathrm{MP}\vec{n} \tag{1.3}$$

où $\vec{n}$ est un vecteur normal unitaire sortant au joint de grains.
Les forces motrices pour la migration de joints de grains sont de trois types (figure 1.8) :

- une force liée à la différence d'énergie stockée sous forme de défauts pendant la déformation. Dans toute cette thèse on ne considérera que l'énergie des dislocations (voir prochaine section) mais d'autres types de défauts pourraient être pris en compte,
- une force capillaire,
- une ou des forces d'ancrage exercées par des phases secondaires ou des impuretés.

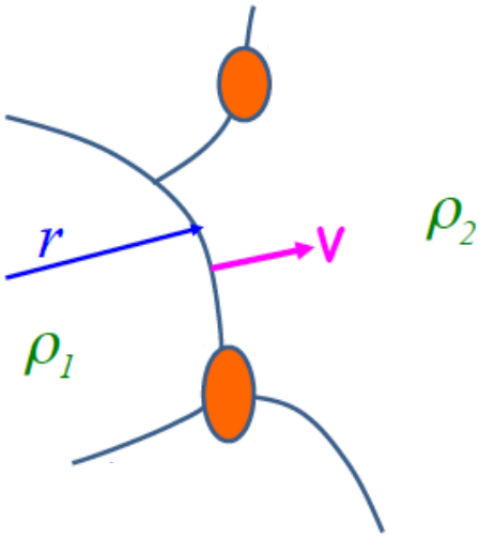


FIGURE 1.8 – Représentation schématique d'une microstructure contenant des densités de dislocations ρ_1 et ρ_2, des joints de grains migrant à la vitesse v. r représente le rayon de courbure principal du joint de grains et les particules oranges représentent des phases secondaires.

Les deux premières forces sont les conséquences d'une minimisation d'énergie du système, en particulier, minimisation de l'énergie stockée sous forme de défauts pour la première. En effet, les joints de grains auront tendance à se déplacer vers les zones de plus forte densité d'énergie laissant derrière eux une zone beaucoup moins riche en défauts (ce qui aura pour conséquence de diminuer l'énergie stockée dans la microstructure). La force capillaire quant à elle correspond à une minimisation de l'énergie interfaciale, un joint de grains fortement courbé ou tortueux évoluera vers un état de moindre surface ce qui diminuera l'énergie du système.

De manière générale et simplifiée P peut s'écrire :

$$P = \tau(\rho_2 - \rho_1) - \gamma\kappa - \sum P_d, \tag{1.4}$$

où, τ(J.m^{-1}) représente l'énergie de ligne d'une dislocation, $\rho(m^{-2})$ la densité de dislocations (voir figure 1.8), $\kappa(m^{-1})$ la courbure principale du joint de grains et P_d les forces d'ancrage.

1.2.1.4 Forces d'ancrage

L'ancrage de Smith-Zener

L'ancrage de Smith-Zener [Smith, 1948] (souvent appelé Zener pinning) est un mécanisme qui traduit le fait que des particules de seconde phase (PSP) présentes dans une microstructure peuvent constituer des obstacles à la migration des joints de grains : elles peuvent en quelque sorte « épingler » (pin en anglais) les joints de grains ce qui constitue un frein à la croissance. Ce mécanisme est souvent mis à profit dans l'industrie métallurgique où le processus de fabrication de certains alliages introduit des PSP par précipitation [Seret et al., 2018] dans le but de limiter la croissance de grains et ainsi conserver de bonnes propriétés mécaniques (dans les métaux les propriétés mécaniques sont généralement bien meilleures lorsque les grains sont petits et de taille homogène).

La force d'ancrage exercée par une particule sphérique statique de rayon r peut être écrite sous la forme :

$$P_d = 2\pi r\gamma cos(\theta) sin(\theta + \alpha), \tag{1.5}$$

où θ et α sont les angles définis sur la figure 1.9.

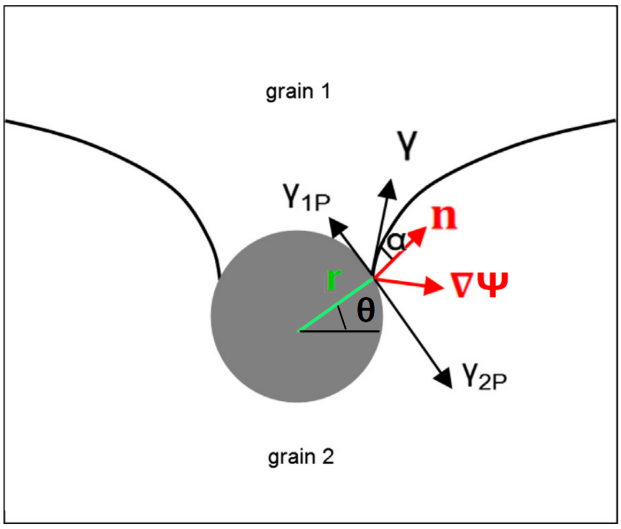


FIGURE 1.9 – Représentation de l'interaction entre un joint de grains et une particule de seconde phase (d'après [Agnoli et al., 2012]), les vecteurs γ et n représentent les énergies interfaciales des joints de grains mises en jeu et la normale à la surface de la particule, respectivement. Le vecteur $\nabla\psi$ correspond au gradient de la fonction level-set représentant le joint de grains (voir section 1.4.2.2.b).

En utilisant la relation d'Young (équation 1.1) on peut exprimer l'angle α en fonction des différentes énergies interfaciales mises en jeu :

$$sin(\alpha) = \frac{\gamma_{2P} - \gamma_{1P}}{\gamma}. \tag{1.6}$$

Lorsque les énergies interfaciales γ_{2P} et γ_{1P} sont du même ordre de grandeur (précipité cohérent), l'angle α est proche de 0.
On peut remarquer que lorsque le joint de grains arrive sur la particule, l'angle $\theta + \alpha$ et donc la force d'ancrage sont négatifs, ainsi l'ancrage est toujours favorable énergétiquement et le fait de se désancrer est très coûteux en énergie.

Ancrage des impuretés

Les éléments incompatibles ou impuretés présents dans le réseau cristallin et ségrégés autour des joints de grains peuvent avoir un fort impact sur la cinétique de migration. Cet effet peut être décrit, dans les métaux en tout cas, comme un effet d'ancrage dépendant de la vitesse de migration du joint de grains, de la nature et de la concentration des impuretés considérées. La pression d'ancrage exercée par les impuretés est souvent décrite suivant différents régimes, haute/basse concentration et haute/basse vitesse de migration [Lücke and Detert, 1957]. Une expression mathématique pour la pression d'ancrage P_d qui réunit ces différents régimes a été dérivée par [Cahn, 1962] et peut s'écrire :

$$P_d = \frac{\alpha V c_0}{1 + \beta^2 V^2}, \tag{1.7}$$

où c_0 est la concentration en impuretés dans la matrice, v est la vitesse de migration du joint de grains et α et β sont deux paramètres. $\alpha(J.s.m^{-5})$ et $\beta(s.m^{-1})$ décrivent l'intensité de la pression d'ancrage, et β contraint la vitesse la plus impactée ($V_{MostImpacted} = \frac{1}{\beta}$) par la présence des impuretés (voir figure1.10).

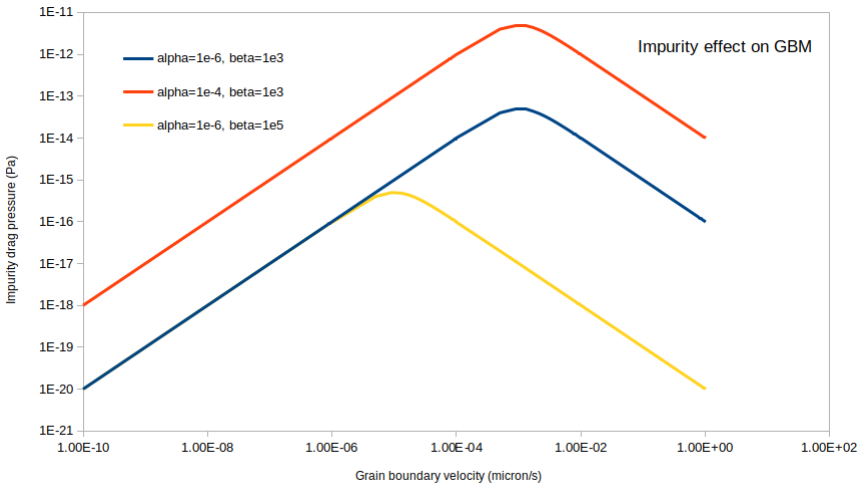


FIGURE 1.10 – Impact des valeurs de α et β sur la pression d'ancrage (équation 1.7) en fonction de la vitesse de migration.

Ces deux paramètres peuvent être exprimés par des intégrales des fonctions $D(x)$ et $E(x)$ qui représentent respectivement la variation du coefficient de diffusion et de l'énergie d'interaction de l'impureté le long de la direction normale au joint de grains (x). Comme ces fonctions sont très difficilement accessibles expérimentalement, des hypothèses sur leurs formes entre leurs valeurs au centre du joint de grains et dans la matrice sont généralement considérées, ce qui permet d'obtenir des expressions analytiques du type [Cahn, 1962] :

$$\alpha = \frac{N_\nu (kT)^2}{E_0 D}(sinh(\frac{E_0}{kT}) - \frac{E_0}{kT}), \tag{1.8}$$

et,

$$\beta^2 = \frac{\alpha kT\delta}{2N_\nu E_0^2 D}, \tag{1.9}$$

où, $N_\nu(m^{-3})$ est le nombre d'atomes par unité de volume, k est la constante de Boltzmann, E_0(J) est l'énergie d'interaction au centre du joint de grains, $D(m^2.s^{-1})$ est le coefficient de diffusion de l'impureté dans la matrice et $\delta(m)$ est la longueur caractéristique de ségrégation autour de l'interface. D'autres expressions de α et β sont reportées dans la littérature métallurgique [Gordon and Vandermeer, 1966]. Cependant il faut prendre garde à l'utilisation de celles ci pour un matériau céramique, où les interactions électrostatiques et dipolaires devraient être prises en compte dans le calcul de l'énergie d'interaction [Yan et al., 1983]. L'idéal pour avoir accès à ces paramètres est d'envisager des calculs ab-initio et atomistiques pour étudier les interactions précises des interstitiels avec les joints de grains.

1.2.2 Déformation plastique

Une déformation plastique est par définition une déformation irréversible d'un matériau. A la différence d'une déformation élastique, le relâchement des contraintes exercées sur le matériau déformé de manière plastique n'est pas suivi par un retour à l'état initial de l'échantillon avant la déformation. Dans ce travail, on utilisera le terme "déformation plastique" comme l'équivalent de la déformation ductile en géologie. La déformation des matériaux géologiques s'effectue à des vitesses de déformation très lentes, pour lesquelles le comportement mécanique de la roche est assimilable à celui d'un fluide, on parle donc de fluage.
D'un point de vue général, la déformation plastique fait intervenir la migration et/ou la création de défauts dans le réseau cristallin. Lorsqu'une roche se déforme par création et migration de dislocations on parle de fluage dislocation, et c'est ce régime de déformation qui va le plus nous intéresser ici car les dislocations sont en grande partie responsables des évolutions microstructurales d'un matériau. On parlera également de la déformation plastique par fluage diffusion qui correspond à un régime de déformation contrôlé par la migration de lacunes et d'interstitiels. Enfin on abordera les types de fluage contrôlés par des processus ayant lieu au niveau des joints de grains comme le glissement aux joints de grains (GBS pour Grain Boundary Sliding).

1.2.2.1 Fluage dislocation

Les dislocations

Une dislocation est un défaut linéique (1D) caractérisé par un vecteur de Burgers $\vec{b}$ qui correspond à la translation nécessaire à appliquer au réseau cristallin pour retrouver un cristal parfait (ou le vecteur nécessaire pour fermer le circuit de Burgers, voir figure 1.11). On note généralement les vecteurs de Burgers sous la forme $[hkl]$ avec h, k et l les indices de Miller.

Lorsque le vecteur de Burgers est colinéaire à la ligne de dislocation on parle de dislocation vis, à l'inverse lorsque le vecteur de Burgers est orthogonal à la ligne de dislocation on parle de dislocation coin (figure 1.11), enfin lorsque le vecteur de Burgers n'est ni colinéaire ni orthogonal à la ligne de dislocation on parle de dislocation mixte. Une ligne de dislocation ne peut pas s'arrêter à l'intérieur du cristal, elle doit obligatoirement arriver à une surface, un joint de grains, une autre dislocation ou se refermer sur elle même pour former une boucle.

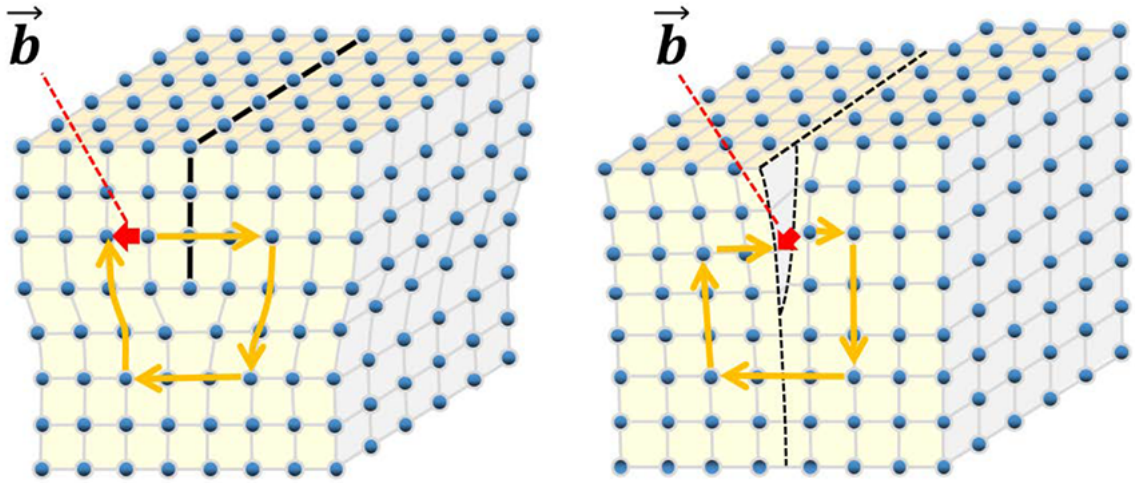


FIGURE 1.11 – Représentation des dislocations coin (à gauche) et vis (à droite) d'après https ://www.jeol.co.jp. Le circuit jaune correspond au circuit de Burger et le vecteur rouge correspond au vecteur de Burgers.

La présence de dislocations a pour conséquence de distordre le réseau cristallin ce qui équivaut à stocker de l'énergie sous la forme de déformation élastique. Plus la norme du vecteur de Burgers est grande plus la distorsion du réseau est importante et plus l'énergie stockée est grande. Ainsi, l'énergie par unité de longueur de ligne de dislocation τ utilisée dans l'équation 1.4 est proportionnelle à la norme du vecteur de Burgers au carré. Par soucis de minimisation d'énergie, les dislocations dont la norme du vecteur de Burgers est élevée ne sont pas favorisées, il est par exemple très rare d'observer des dislocations de vecteur de Burgers [010] dans l'olivine (paramètre de maille b très grand).
Les dislocations peuvent également interagir entre elles via le champ de déformation élastique généré par leur présence. Ainsi deux dislocations de vecteur de Burgers de signes identiques exerceront l'une sur l'autre une force répulsive alors que deux dislocations de vecteur de Burgers se signes opposés s'attireront.
Lorsque l'on se rapproche de la ligne de dislocation, le déplacement des atomes et l'arrangement cristallin ne peut plus être décrit par la théorie élastique : on parle du cœur de la dislocation. La structure géométrique d'un cœur de dislocation peut avoir une influence sur la manière dont va se déplacer la dislocation [Carrez et al., 2008].

Mouvement des dislocations

Mettre en mouvement une dislocation revient à déformer de manière irréversible un matériau car, après le passage d'une ligne de dislocation, les positions relatives des atomes auront changé. D'un point de vue général, on peut dissocier deux types de mouvements de dislocations, le glissement et la montée.

Le glissement de dislocations a lieu dans des plans bien spécifiques, appelés plans de glissement. Ces plans correspondent généralement aux plans les plus denses du réseau cristallin (e.g. plans < 111 > dans les structures CFC) car d'un point de vue énergétique il est plus favorable de déplacer un atome d'un point à un autre quand la distance entre ces deux points est faible. Dans le cas de matériaux céramiques, les plans de glissement doivent également éviter de couper des liaisons fortes (ioniques ou covalentes) ce qui demanderait une énergie importante pour déplacer la

dislocation. La combinaison d'une dislocation et de son plan de glissement est appelée système de glissement, on le note généralement [vecteur de Burgers](normale au plan de glissement). Ainsi la première étape vers la description de la déformation par glissement de dislocation d'un matériau consiste en l'établissement de la liste des systèmes de glissement du cristal.
On décrit généralement le glissement d'une dislocation dans son plan en réponse à une contrainte résolue (ou projetée), τ^α (où α représente le système de glissement), qui est calculée comme la projection de la contrainte déviatorique dans le système de glissement par l'intermédiaire du tenseur de Schmid $\mathbf{P^\alpha} = m^\alpha \otimes n^\alpha$ où m^α représente la direction de glissement et n^α la normale au plan de glissement et où $\otimes$ représente le produit dyadique. Si la contrainte déviatorique est normale au plan de glissement du système, la contrainte résolue est nulle et le système de glissement ne peut pas être activé. De plus, le déplacement des dislocations dans le réseau cristallin nécessite de franchir des barrières énergétiques plus ou moins élevées en fonction de la cristallochimie du cristal. Le franchissement de ces barrières implique une force de friction de réseau qu'il faut vaincre pour pouvoir faire glisser les dislocations. La température peut alors favoriser le franchissement de ces barrières d'énergie et ainsi faciliter le glissement des dislocations. On définit de manière plus générique une contrainte critique résolue, τ_c^α, à dépasser pour pouvoir activer le système de glissement considéré. Si aucun système de glissement ne peut être activé, la déformation plastique par glissement de dislocation n'est pas possible et d'autres mécanismes doivent être activés pour relaxer la contrainte.

La montée de dislocations correspond à un mouvement de la dislocation hors de son plan de glissement. A la différence du glissement, ce type de mouvement fait intervenir la diffusion de lacunes ce qui est un mécanisme thermiquement activé, ainsi la montée n'a généralement lieu que pour des températures assez importantes. Lors de leurs mouvements, les dislocations peuvent être épinglées par d'autres défauts (e.g. interstitiels, autres dislocations), le phénomène de montée peut alors permettre aux dislocations de se libérer de l'ancrage et ainsi continuer à glisser dans leurs plans de glissement [Gouriet et al., 2019].

Création de dislocations

Au cours de la déformation, la densité de dislocations dans le matériau évolue, elle peut diminuer via des processus de restauration qui seront abordés dans la section 1.2.3.2, mais généralement, dans les premiers stades de déformation elle augmente. Le principal processus de création de dislocations a été décrit par Franck et Read [Frank and Read Jr, 1950] et consiste en la création d'une boucle de dislocation (figure 1.12).

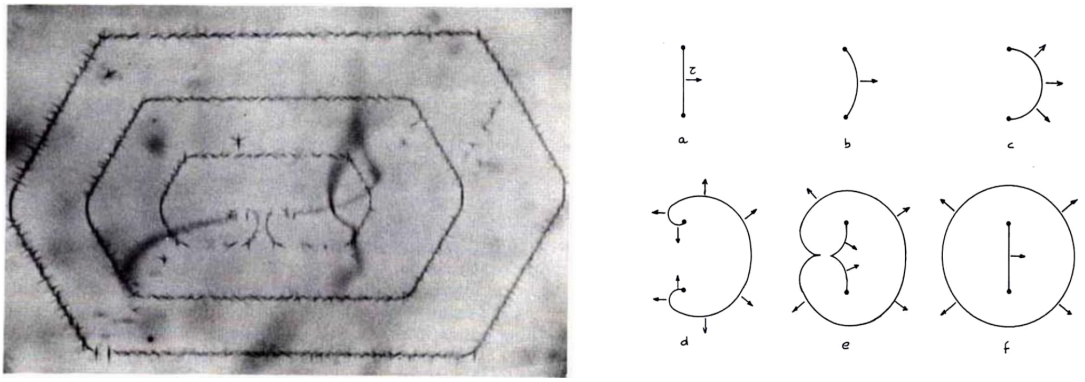


FIGURE 1.12 – Source de Franck et Read dans le silicium d'après [Dash, 1957] (gauche). Illustration schématique du mécanisme de Frank et Read (droite).

Si une dislocation rectiligne initialement épinglée à ses extrémités (par d'autres défauts) ne peut se défaire de l'ancrage, sa seule possibilité pour se déplacer est de se courber (figure 1.12). Lorsque deux parties de la dislocation se rejoignent, la dislocation se sépare en deux : une boucle qui va pouvoir se propager dans le cristal pour accommoder la déformation plastique, et un segment rectiligne ancré qui va permettre au mécanisme de recommencer (figure 1.12). Par ce processus, des boucles de dislocation peuvent être générées dans le cristal.

Orientation cristallographique préférentielle

La déformation plastique par mouvement de dislocations induit généralement le développement d'une texture cristallographique qui correspond à une ou des orientations préférentielles plus ou moins marquées des cristaux composant le polycristal. En effet, la déformation par glissement de dislocations est équivalent à un cisaillement simple qui est un type de déformation ayant une composante de rotation. Le décalage entre les composantes rotationnelles microscopiques (i.e. liées aux plans de glissement) et macroscopiques a pour conséquence une rotation du réseau ce qui peut conduire au développement d'une texture cristallographique. En géologie, le mot fabrique est généralement utilisé pour décrire une texture cristallographique là où le mot texture désigne plutôt d'autres caractéristiques de la microstructure comme la forme des grains. Dans la suite on utilisera les acronymes LPO ou CPO (pour Lattice ou Crystal Prefered Orientation) pour désigner la texture cristallographique d'une microstructure. La formation et le développement de LPO peut avoir une forte influence sur les déformations ultérieures car les propriétés mécaniques des matériaux, et en particulier des roches, sont anisotropes.
L'analyse quantitative des CPO est généralement réalisée en définissant une fonction de distribution des orientations (ODF). Le calcul de l'ODF permet alors de calculer des indices de texture [Bunge, 1981] comme le J-index, variant entre 1 pour un polycristal comprenant des orientations aléatoires et l'infini pour un monocristal, ou encore le M-index variant entre 0 pour des orientations distribuées aléatoirement et 1 pour une orientation unique. L'avantage du M-index par rapport au J-index est sa sensibilité moindre au nombre de cristallites entrant en compte dans le calcul. Quelques précisions sur le calcul de l'ODF et des deux index évoqués sont présentés dans l'annexe A. Le calcul de l'ODF peut ensuite être utilisé pour représenter, par projection stéréographique, la répartition de certaines orientations particulières dans le polycristal, on parle de figure de pôle (figure 1.13).

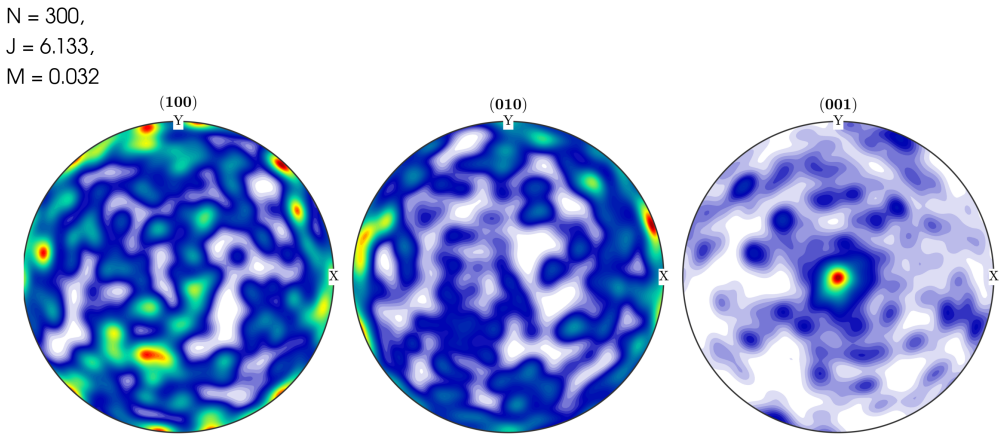


FIGURE 1.13 – Exemple de figures de pôle, on a représenté ici la distribution des orientations [100], [010] et [001] d'un polycristal comprenant 300 grains.

Un code gratuit, appelé MTEX [Mainprice et al., 2015], et fonctionnant sous Matlab est très pratique pour effectuer ce genre d'analyses. Toutes les figures de pôles et les indices de texture présents dans cette thèse ont été calculés grâce à cet outil.

1.2.2.2 Fluage diffusion

La déformation par fluage diffusion fait intervenir la migration de lacunes et d'atomes sous l'action d'un gradient de contrainte. En effet, l'application d'une déformation sur un grain peut impliquer un état de contrainte hétérogène dans le grain et entraîner des gradients de contrainte (on parle d'ombre de pression). Ces gradients de contrainte peuvent être reliés à un gradient de potentiel chimique qui va constituer une force motrice pour la migration des atomes et des lacunes. Ainsi, les atomes auront tendance à migrer depuis les zones de plus forte contrainte compressive vers les zones de plus faible contrainte compressive (ou bien en tension), et inversement pour les lacunes (figure 1.14).

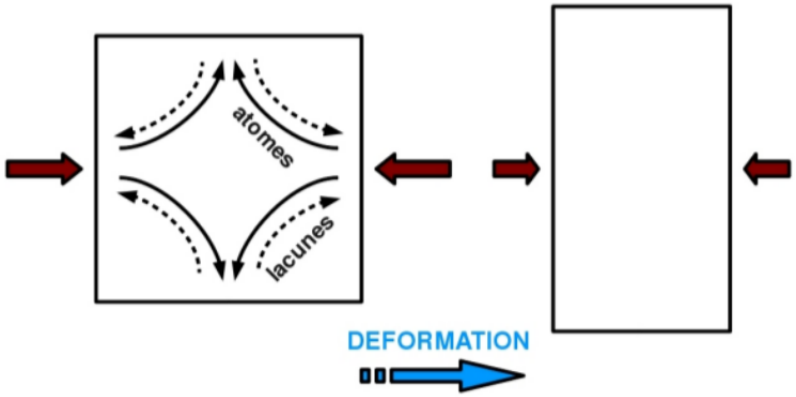


FIGURE 1.14 – Illustration du fluage diffusion d'après Rozel [2010], les flèches marrons représentent la contrainte exercée sur deux des faces du grain et les flèches noires les diffusions d'atomes et de lacunes.

Ce type de fluage faisant intervenir la diffusion est bien entendu thermiquement activé, la diffusion des atomes et des lacunes étant plus efficace à hautes températures. L'efficacité d'un tel mécanisme de déformation dépend également de la longueur des chemins de diffusion. Deux cas peuvent être distingués, les atomes/lacunes migrent à travers les grains (fluage de Nabarro-Herring [Herring, 1950]) ou bien le long des joints de grains (fluage de Coble [Coble, 1963]). Dans les deux cas, la longueur des chemins de diffusion est reliée à la taille de grains du polycristal. Plus la taille de grains est faible plus les chemins de diffusion seront courts et plus le fluage diffusion sera efficace : on parle de fluage dépendant de la taille de grains (grain size sensitive - GSS - creep).

1.2.2.3 Glissement aux joints de grains, superplasticité

Le terme de superplasticité, décrivant généralement la capacité d'un matériau à se déformer de manière plastique jusqu'à plus de 100% de déformation sans casser, est souvent assimilé dans les Science de la Terre à des mécanismes de glissement aux joints de grains (grain boundary sliding - GBS -) [Hiraga et al., 2010]. Ce type de mécanisme, à la frontière entre le fluage diffusion et dislocation, n'est pas encore totalement bien compris pour les matériaux géologiques. Le fait est que dans les conditions pour lesquelles ce mécanisme participe à la déformation, une part

non négligeable de la déformation est accommodée par les joints de grains [Gasc et al., 2019]. Plusieurs processus physiques peuvent potentiellement entrer en jeu dans ce mécanisme comme une interaction des dislocation avec les joints de grains pour permettre d'accommoder la contrainte (dislocation accommodated GBS) [Wang et al., 2010]. Une amorphisation du matériau autour des joints de grains, liée à l'application d'une contrainte [Andrault et al., 1995; Santamaria-Perez et al., 2016], pourrait aussi être responsable d'une partie du GBS, le fluage de la zone amorphe pouvant potentiellement accommoder une bonne partie de la déformation.

Même s'il est d'usage en géologie de construire des cartes de déformation (voir section 1.3.3) représentant les domaines thermomécaniques (e.g. contrainte, vitesse de déformation) bien distincts pour lesquels tel ou tel type de fluage est prépondérant, les trois régimes de déformation présentés précédemment peuvent coexister comme on peut le voir sur l'image de la figure 1.15, dans laquelle on observe la présence de dislocations accommodant la déformation intracristalline et des joints de grains ayant accommodé une partie de la déformation.

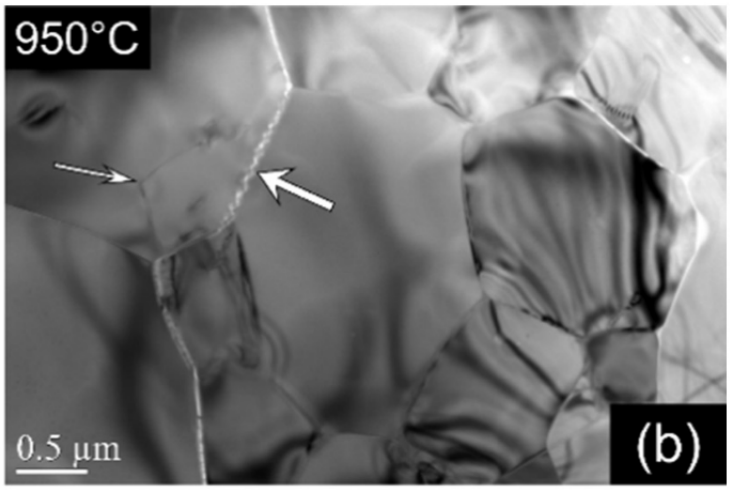


FIGURE 1.15 – Image en microscopie électronique à transmission (MET) d'une microstructure d'olivine déformée en laboratoire d'après [Gasc et al., 2019]. On peut voir que la déformation par mouvement de dislocations a été active à l'intérieur des grains (franges irisées) mais que des mécanismes accommodant la déformation au niveau des joints de grains ont également été actifs.

1.2.3 Evolutions microstructurales pendant la déformation

La déformation d'un matériau polycristallin dans le régime de fluage dislocation a de nombreuses implications en terme d'évolutions microstructurales. En plus de constituer une force motrice pour la migration des joint de grains (voir section 1.2.1.3), la présence de dislocations, leur accumulation et leurs mouvements sont à l'origine d'autres mécanismes dits de restauration puis de recristallisation. On parle de recristallisation dynamique (DRX) lorsque ces mécanismes ont lieu pendant la déformation, et de recristallisation post-dynamique (PDRX) dans laquelle on distingue recristallisation statique (SRX) lorsque les germes apparaissent après la déformation et recristallisation métadynamique (MDRX) lorsque les germes apparaissent avant la déformation. En géologie, la gamme des vitesses de déformations est très basse comparée aux vitesses de déformation de l'industrie métallurgique, ce qui implique que les mécanismes de recristallisation ont presque toujours lieu pendant la déformation, ainsi on ne parlera ici que de DRX.

1.2.3.1 Durcissement

Dans le régime de fluage dislocation, la déformation est majoritairement accommodée par création et glissement (ou montée) de dislocations (voir section 1.2.2.1). Avec l'augmentation de la densité de dislocations dans la microstructure, la probabilité pour les dislocations d'entrer en contact avec d'autres défauts (e.g. joints de grains, interstitiels, dislocations) augmente. Les dislocations sont ainsi bloquées dans leurs mouvements et la contrainte nécessaire pour continuer à déformer le matériau augmente : c'est le durcissement encore appelé écrouissage.
Parmi les mécanismes de durcissement les plus communs on peut mentionner le durcissement de la forêt pour lequel des dislocations immobiles (sessiles) constituent les arbres d'une forêt qui vient couper les plans de glissement et ainsi épingler les dislocations mobiles dans leurs mouvements. Ce type de durcissement est généralement décrit par une loi de Taylor, reliant la contrainte nécessaire pour déformer plastiquement le matériau (i.e. que les dislocations épinglées franchissent la foret), σ^k et la densité de dislocations ρ :

$$\sigma^k = \sigma_0^k + \alpha\mu b\sqrt{\rho}, \tag{1.10}$$

où σ_0^k est la contrainte nécessaire pour déformer plastiquement le matériau vierge de dislocations (limite d'élasticité théorique), μ est le module de cisaillement, b la norme du vecteur de Burgers et α est un coefficient dépendant du matériau et du type d'interaction entre les dislocations mobiles et les dislocations de la foret.
Sans pour autant parler de durcissement de la forêt, la formation de jonctions, d'enchevêtrements, de pincements entre dislocations ou encore de boucles de dislocations sessiles (voir figure 1.16) constituent des mécanismes de durcissement.

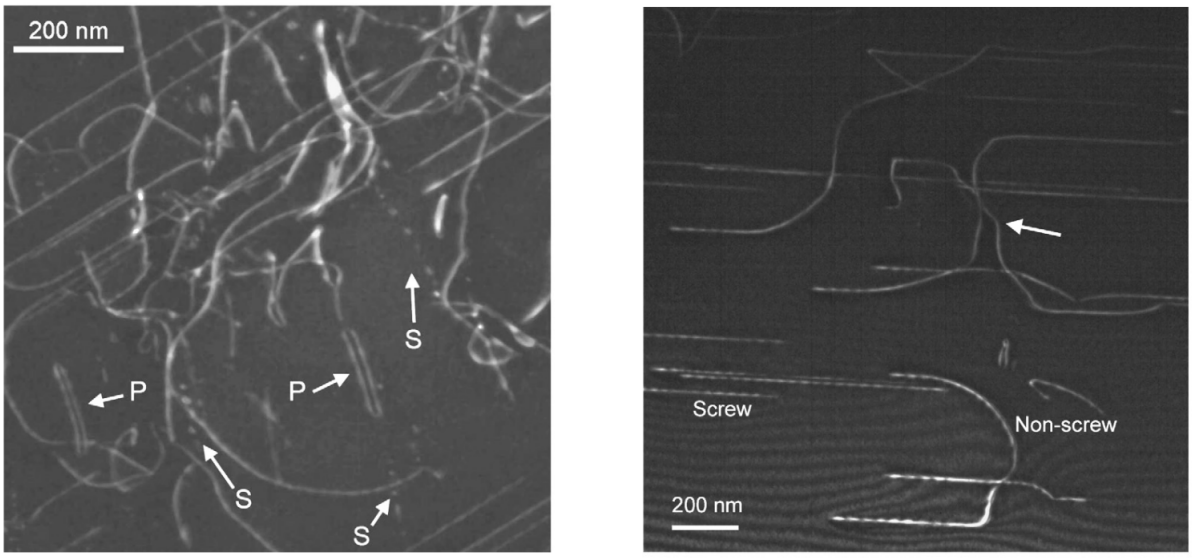


FIGURE 1.16 – Image MET d'un cristal d'olivine déformé d'après [Boioli et al., 2015]. On peut observer des interactions entre dislocations, responsables du durcissement, comme par exemple des pincements (P), des boucles sessiles (S) ou des interactions élastiques (flèche, image de droite).

Les interactions à longue distance entre les dislocations peuvent également être responsables d'un durcissement du matériau. En effet, les interactions répulsives liées à la présence de dislocations de vecteur de Burgers identiques ou colinéaires (voir section 1.2.2.1) auront pour effet de rendre plus difficile le glissement ce qui impliquera le durcissement [Madec et al., 2003].

1.2.3.2 Restauration

La restauration regroupe un ensemble de mécanismes dont l'action entraîne la diminution de l'énergie élastique stockée dans le matériau sous forme de densité de dislocations (ou autres défauts).
Parmi ces mécanismes on trouve l'annihilation de dislocations ; lorsque deux dislocations de vecteurs de Burgers opposés se rencontrent les dislocations s'annihilent. Cette situation est largement favorisée par l'interaction attractive qu'exercent ce type de dislocations l'une sur l'autre (section 1.2.2.1).
Pour réduire l'énergie interne des cristaux les dislocations peuvent également se réorganiser en sous structures de moindre énergie (voir figure 1.17), depuis les parois de flexion (composées de peu de dislocations), en passant par des parois de torsion (encore appelées kinks) jusqu'aux sous joints de grains (ou joint de grains faiblement désorienté, LAGB) qui peuvent eux être décrits comme un empilement de dislocations.

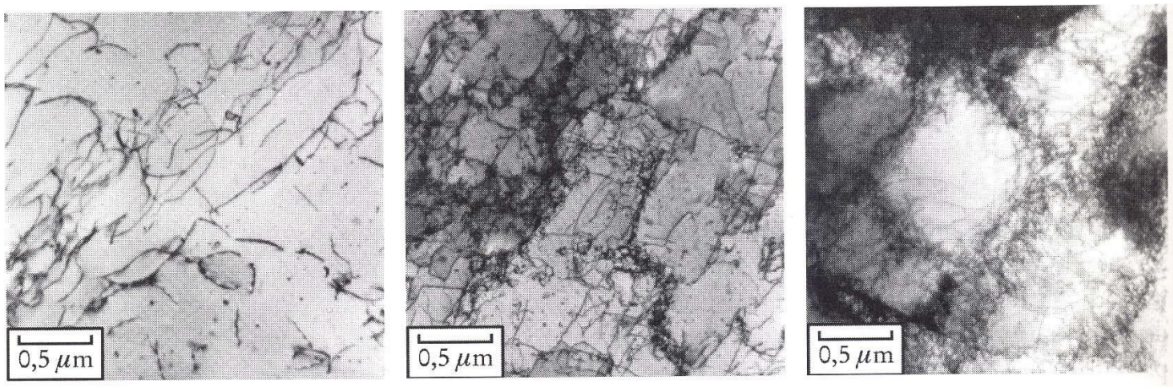


FIGURE 1.17 – Exemple de mécanisme de restauration dans le fer, de gauche à droite, en augmentant le taux de déformation la densité de dislocations commence par croître puis ces dislocations se réorganisent en structures plus favorables énergétiquement (sous joint de grains).

La formation de sous structures et l'annihilation de dislocations sont fortement facilitées par la température. En effet la mobilité des dislocations augmentant avec la température, la probabilité d'annihilation est également augmentée et la formation des sous structures est plus rapide. La température a également pour effet de favoriser la diffusion atomique et donc la montée : les dislocations épinglées dans la microstructure auront alors une probabilité plus importante de se libérer et de se déplacer pour former des sous structures ou encore s'annihiler.

Comme la restauration a pour conséquence de diminuer la densité de dislocations dans le matériau, elle implique également la diminution de la contrainte nécessaire pour le déformer plastiquement (équation 1.10), c'est l'adoucissement.
Ainsi, au cours de la déformation, il y a une compétition entre les mécanismes d'écrouissage et de restauration, les uns ayant tendance à augmenter la densité de dislocations et à durcir le matériau et les autres ayant un effet adoucissant en diminuant la densité de dislocations.

1.2.3.3 Recristallisation dynamique

En fonction des conditions thermomécaniques (e.g. vitesse de déformation, quantité de déformation, température), les sous-grains créés par les mécanismes de restauration peuvent devenir des grains à part entière. De plus, si les mécanismes de restauration n'ont pas permis la formation de sous structures et que la densité de dislocations est importante, de nouveaux grains appelés germes (ou neoblastes) peuvent apparaître dans la microstructure. Ce sont les phénomènes de recristallisation dynamique (DRX), continue pour le premier cas (à partir des sous structures), ou discontinue dans le deuxième cas (nucléation).
Lors de la DRX continue, les sous grains se désorientent petit à petit des grains parents. Lorsque les interfaces entre sous grains et grains parents deviennent des joints de grains fortement désorientés, la mobilité réduite (produit $M\gamma$) de ces interfaces augmente (voir figure 1.7) permettant leurs migrations, on a alors la création de nouveaux grains.
Lors de la DRX discontinue, on a généralement la nucléation d'un nouveau grain dans une zone fortement déformée de la microstructure. Les premiers stades de la nucléation sont encore mal compris, cependant les germes semblent apparaître dans des zones présentant une forte densité de dislocations ainsi que des forts gradients d'orientations cristallines et de densité de dislocations. Les germes présentent des densités d'énergie stockée assez faibles ce qui leur permet de croître aux dépens du grain parent malgré leurs faibles tailles impliquant une force capillaire importante s'opposant à leur croissance.
On peut ajouter à la DRX discontinue un mécanisme appelé bourgeonnement (bulging). Dans ce cas, une hétérogénéité d'énergie stockée le long d'un joint de grains peut conduire à une migration très locale de celui ci formant une sorte d'excroissance du joint de grains. Si la migration se poursuit, cette excroissance peut se refermer sur elle même et alors créer un nouveau grain.
A ces deux types de DRX on peut en ajouter un troisième lié à la géométrie des grains déformés. Lors de la déformation la forme des grains peut être fortement impactée jusqu'à devenir assez allongée pour que les joints de grains des bords opposés se touchent, ce qui a pour conséquence de le scinder en plusieurs grains, on parle de DRX géométrique.

Bien que les mécanismes de DRX présentés précédemment puissent être des indicateurs des conditions thermomécaniques dans lesquelles le matériau s'est déformé, il n'est pas rare d'observer ces différents mécanismes au sein d'une même microstructure (voir figure 1.18).

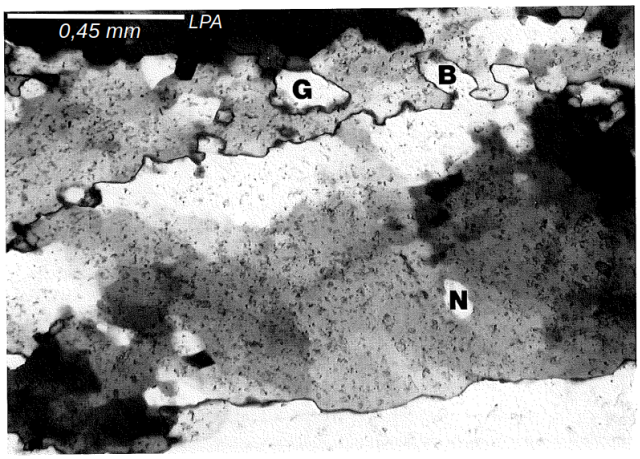


FIGURE 1.18 – Image en microscopie optique d'une lame mince de quartz d'après [Blenkinsop, 2000]. Les néoblastes formés par DRX montrent à la fois des caractéristiques de DRX continue (N), et discontinue (B,G).

1.3 L'intérêt géologique pour les évolutions microstructurales

1.3.1 Formation des zones de cisaillement et cicatrisation

Les cycles de Wilson [Wilson, 1966] ont pour conséquence la formation et l'éclatement périodique de supercontinents (le dernier était la Pangée, formée il y a 300 millions d'années). L'éclatement des supercontinents se traduit par la formation de rifts continentaux qui précèdent l'accrétion océanique, entamant un nouveau cycle. Les études de différents rifts comme celui du Rio Grande [Olsen et al., 1987] et du Baïkal [Petit et al., 1996] ont montré que leurs localisations étaient contrôlées par la présence d'anciennes zones de suture (collision). En d'autres termes, on constate que la déformation extensive se localise là où les plaques se sont rejointes, plusieurs millions d'années auparavant. Ces observations suggèrent donc qu'une structure héritée des événements géologiques antérieurs influencerait la localisation des déformations et la création de nouvelles limites de plaques. Ce phénomène peut se traduire par la notion de limites de plaques dormantes. Il a été montré [Heron et al., 2016] que pour que ces structures héritées puissent localiser une nouvelle déformation à l'échelle de la lithosphère il fallait qu'elles constituent des « cicatrices » ou « zones de faiblesse » (structure héritée dont la rhéologie est à priori plus faible) principalement localisées dans le manteau lithosphérique (voir figure 1.19).

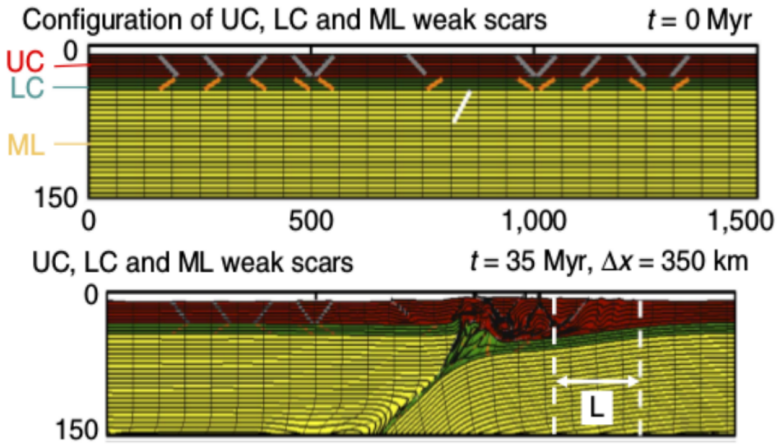


FIGURE 1.19 – Modèle de déformation en compression d'une lithosphère comportant des zones de faiblesses (weak scars) symbolisées par les traits gris, oranges et blancs. UC/LC : supérieure/inférieure, lithosphérique. En croûte ML : haut, manteau configuration initiale, en bas, configuration après une déformation en compression de 350km durant 35 millions d'années ($v_{def} = 2.10^{-16} s^{-1}$) d'après [Heron et al., 2016].

Dans ce modèle thermomécanique (figure 1.19), on remarque que la déformation a été guidée par la zone de faiblesse présente dans la partie supérieure du manteau lithosphérique et que les cicatrices présentes dans la croûte n'ont pas eu d'impact fort sur la localisation de la déformation à l'échelle de la lithosphère. Ce résultat n'est pas réellement surprenant étant donné que le manteau lithosphérique est mécaniquement très résistant (plus que la croûte) et que la présence d'une zone faible va avoir un effet très important pour guider la déformation tectonique [Burov and Diament, 1995].

Certains auteurs [Vauchez et al., 1997] suggèrent que les zones de faiblesses héritées dans le manteau lithosphérique sont liées à l'acquisition par les roches d'une anisotropie mécanique lors des différentes phases de déformation. En effet, la déformation plastique peut engendrer la mise en place d'une LPO importante lorsqu'elle a lieu dans le régime de fluage dislocation (voir section

1.2.2.1). Les minéraux constituant les roches mantelliques, et en particulier l'olivine, possèdent une anisotropie plastique forte (i.e. peu de système de glissement et contraintes critique d'activation des systèmes pouvant être très différentes). Ainsi le développement d'une LPO peut induire un comportement mécanique très anisotrope.
Dans le régime de déformation élastique, cette anisotropie a permis de mettre en évidence les mouvements convectifs dans le manteau. En effet, la propagation par déformation élastique des ondes sismiques est influencée par l'anisotropie du milieu dans lequel elles se propagent. Certaines techniques permettent alors d'imager les zones possédant une forte LPO [Tommasi et al., 1999].
Dans un régime de déformation plastique, ce qui peut être le cas dans les zones de faiblesses précédemment évoquées, l'anisotropie mécanique créée par la LPO de la roche peut induire la réactivation des structures héritées et localiser de la déformation [Tommasi et al., 2009] (voir figure 1.20).

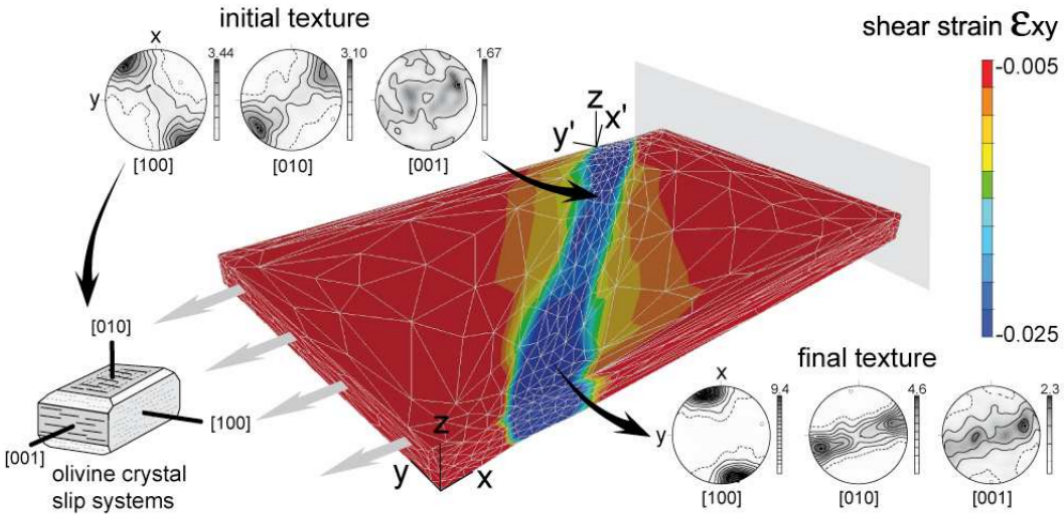


FIGURE 1.20 – Modèle de réactivation d'une structure héritée, d'après [Tommasi et al., 2009]. La seule prise en compte de l'anisotropie mécanique induite par une LPO de la roche permet de localiser la déformation.

D'autres auteurs [Bercovici and Ricard, 2012] suggèrent que ces structures héritées sont liées à la réduction de taille de grains par recristallisation dynamique lors de la déformation (voir section 1.2.3.3). En effet, la réduction de la taille de grains peut avoir pour conséquence un changement de régime de fluage de la roche : si la taille de grains est très faible le régime de fluage contrôlant la déformation sera un régime sensible à la taille de grains (voir section 1.2.2). Dans les conditions thermomécaniques des zones de cisaillement, une zone à taille de grains très faible a une rhéologie plus faible ce qui peut avoir pour conséquence de localiser la déformation. La pérennité de telles zones de faiblesse implique alors que la croissance de grains du matériau soit suffisamment lente pour ne pas quitter le domaine dans lequel la roche se déforme par fluage dépendant de la taille de grain. Ce processus de croissance est appelé la cicatrisation (ou healing). La création des limites de plaques dormantes par recristallisation des roches mantelliques puis la réactivation de ces structures par fluage dépendant de la taille de grains est un processus suggéré pour la mise en place d'un régime de tectonique des plaques (voir figure 1.21).

Si la vitesse de cicatrisation est suffisamment lente pour permettre à des frontières de plaques de se développer, on peut alors individualiser des plaques tectoniques comme on en observe sur Terre (figure 1.21b). Si à l'inverse la cicatrisation est trop rapide comme c'est le cas sur Vénus,

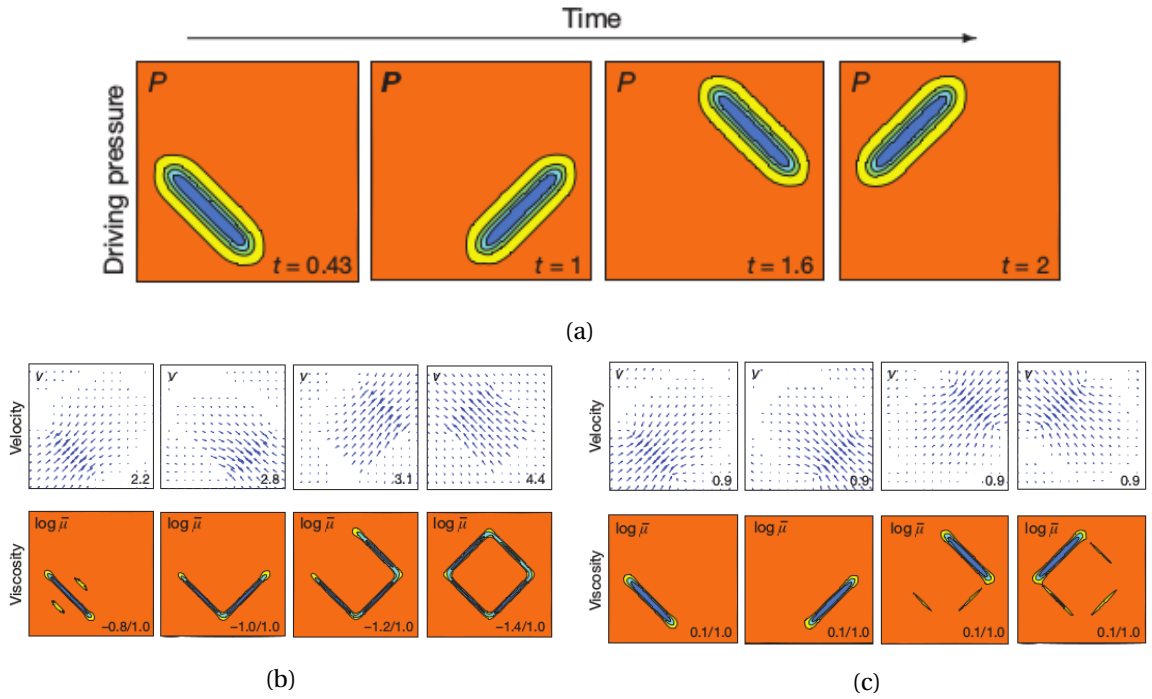


FIGURE 1.21 – Modèle de déformation de lithosphère prenant en compte des régimes de fluage dépendant de la taille de grains et de la cicatrisation d'après [Bercovici and Ricard, 2014]. 1.21a : déformation imposée au cours du temps, évolution de la viscosité au cours du temps sur Terre (température de surface faible) 1.21b et sur Vénus (température de surface élevée) 1.21c.

les zones de faiblesses créées par la déformation ne sont pas pérennes et un régime de plaque tectonique ne peut pas se développer (figure 1.21c).
Il est important de noter que la localisation de la déformation dans les structures héritées peut être liée à la fois à l'anisotropie mécanique induite par la LPO de la roche et au passage d'un régime de déformation par fluage dislocation à un régime de fluage dépendant de la taille des grains. De plus, c'est l'initiation de la localisation qui est vraiment importante car une fois la déformation engagée, la dissipation visqueuse fait augmenter la température dans les zones les plus fortement déformées. Cette augmentation de température exerce alors un retrocontrôle positif sur la localisation de la déformation en abaissant les propriétés mécaniques du matériau chauffé [Duretz et al., 2014; Kiss et al., 2019].

Pour les deux modèles présentés ci dessus, les évolutions microstructurales des roches mantelliques sont primordiales pour comprendre le développement des zones de faiblesse lithosphériques et la réactivation de ces structures. Il faut en effet, pour étudier la mise en place de ces zones de faiblesse, comprendre l'influence de la déformation plastique sur le développement de LPO et la réduction de taille de grains par DRX. Enfin, pour appréhender la capacité de cicatrisation de ces structures, il faut savoir quantifier la cinétique de croissance de grains .

1.3.2 Analyse des microstructures

L'analyse de différentes caractéristiques d'une microstructure peut permettre de remonter à des informations importantes pouvant apporter des contraintes pour une évolution tectonique donnée. Nous ne traiterons pas ici de pétrologie pour laquelle l'analyse de la coexistence de certains minéraux permet de remonter à des conditions thermomécaniques sur la formation et l'évolution de la roche. Nous verrons que des caractéristiques microstructurales telles que la taille des grains recristallisés, le recoupement des bandes de cisaillement ou encore les pôles d'une LPO peuvent permettre de déduire des informations précieuses.

Piézomètres

Des études sur différents matériaux (roches et métaux) déformés dans le régime de fluage dislocation ont montré que la taille des grains formés par DRX pouvait être reliée à la contrainte déviatorique vue par le matériau [Twiss, 1977]. D'un point de vue théorique, cette relation peut être pressentie par la relation de Taylor (équation 1.10) reliant la contrainte nécessaire pour déformer le matériau avec la densité de dislocations. On peut corréler la densité de dislocations avec l'inverse de la taille de grains recristallisée. En effet, plus la différence de densité d'énergie entre le germe et le grain parent est importante, plus la taille du germe peut être petite pour contrer la force capillaire et ne pas disparaître. On peut donc établir des relations piézométriques de la forme :

$$\sigma = \mathrm{K} \mathrm{D}_g^{-n}, \tag{1.11}$$

où, σ est généralement le second invariant de la contrainte déviatorique, D_g est la taille des grains recristallisés et K et n sont les paramètres du piézomètre. Ce type de relation omet la croissance de grains des germes ce qui peut mener à des erreurs d'interprétation si par exemple la roche a subi un recuit important faisant croître les grains recristallisés (la contrainte serait alors sous-estimée). Cependant ce type de relation a été testé en laboratoire pour différentes roches ou minéraux (olivine : [Van der Wal et al., 1993], quartz : [Stipp and Tullis, 2003]) et c'est un outil largement utilisé à l'heure actuelle pour contraindre les contraintes déviatoriques dans des contextes géodynamiques [Chu and Korenaga, 2012].

D'autres piézomètres plus évolués ont tenté de prendre en compte la compétition entre croissance de grains et réduction de taille de grains par DRX [Austin and Evans, 2007] en définissant une vitesse de réduction et de croissance de taille de grain. La solution stationnaire, correspondant à l'équilibre entre les processus de DRX et de croissance de grains, permet alors d'obtenir une taille de grains d'équilibre pour une contrainte donnée. Avec ce type de piézomètres la taille des grains à considérer n'est plus celle des grains recristallisés mais une taille moyenne ce qui pose alors la question de la représentativité des microstructures analysées (surtout pour des microstructures présentant des tailles de grains hétérogènes).

Lames minces

Des raisonnements basés sur des observations en microscopie optique peuvent également permettre de déduire des informations sur l'histoire thermomécanique vécue par une roche. Une des premières étapes de ce type d'approche est de repérer le plan de foliation (plan d'écoulement de la matière) et la linéation (direction d'écoulement de la matière) en utilisant par exemple la forme des grains ou les bandes de cisaillement que l'on peut repérer par des zones (ultra-) mylonitiques (grains très fins). On prélève alors une lame mince sur l'échantillon de roche en veillant à la couper perpendiculairement à la foliation et parallèle à la linéation. La figure 1.22 représente une lame mince de péridotite dans laquelle on peut observer certains critères de déformation

plastique en fluage dislocation comme par exemple une taille de grains hétérogène (liée à la DRX), des kinks dans les gros cristaux d'olivine ou encore une forme très allongée des cristaux d'orthopyroxène.

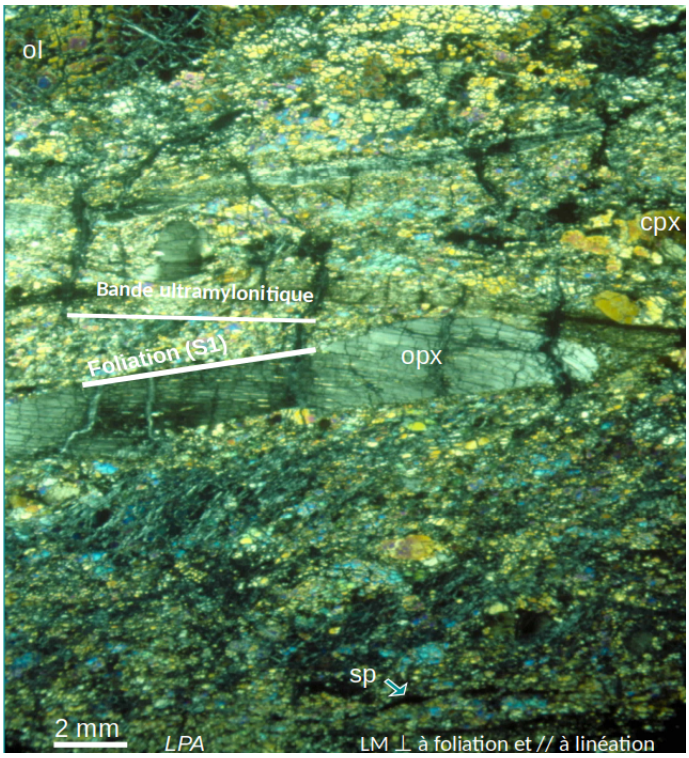


FIGURE 1.22 – Lame mince d'une péridotite de la marge de Galice, d'après [Beslier et al., 1988].

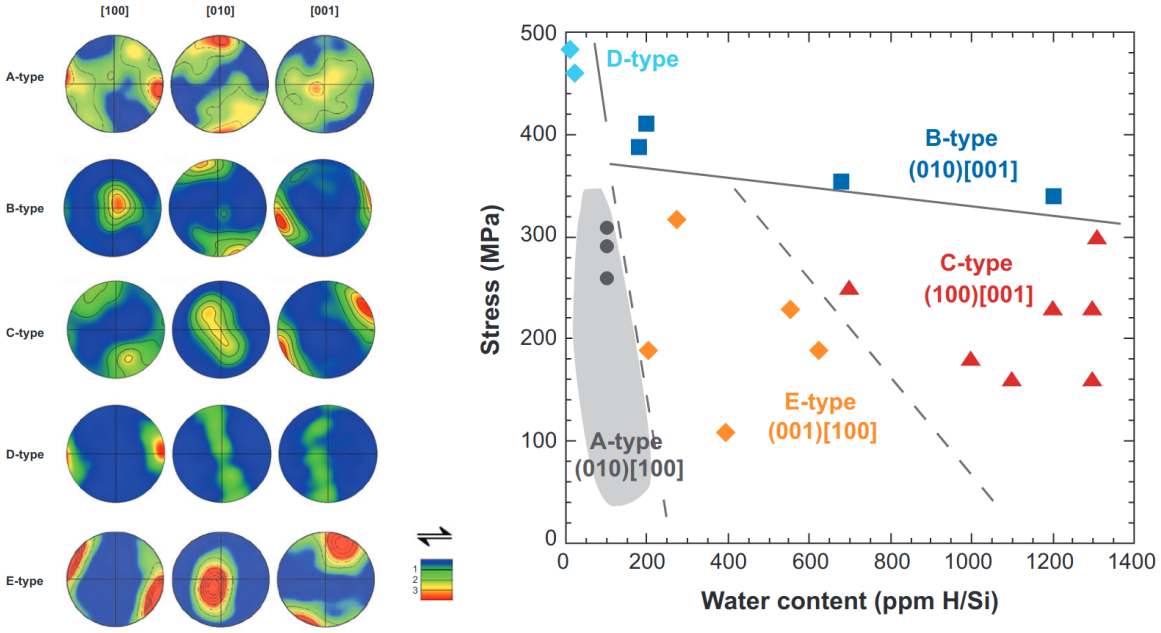
Ces observations amènent à la conclusion que cette roche a subi une déformation, à suffisamment haute température, pour déformer dans le régime de fluage dislocation les minéraux en présence ($\approx 1000°C$ [Beslier et al., 1988]). Le recoupement des bandes ultramylonitiques par des veines de serpentine sur la lame mince de la figure 1.22 montre que la roche a subi une déformation fragile postérieure à la déformation plastique de haute température. Ce type de raisonnement permet ici, en observant les caractéristiques de la microstructure de déduire une histoire thermique rétrograde, potentiellement liée à l'exhumation de la roche [Beslier et al., 1988].

D'autres caractéristiques d'une microstructure peuvent être utilisées pour appréhender son histoire thermomécanique. Les roches sont généralement constituées de minéraux dont les domaines pression-température des déformations plastique et fragile ne coïncident pas forcément. Ainsi, si on observe sur une même lame mince des déformations plastique et fragile synchrones de deux minéraux différents, on peut en déduire un intervalle pression-température dans lequel la déformation a eu lieu. Une roche à gros grain avec des jonctions triples à 120° serait, quant à elle, caractéristique d'une croissance de grains efficace contrôlée uniquement par la capillarité ce qui impliquerait qu'elle soit restée à haute température et sans déformation pendant une longue période.

Dans les différents cas évoqués ci dessus, l'analyse des microstructures et la compréhension des évolutions microstructurales permettent d'aider et d'apporter des contraintes supplémentaires à l'histoire géodynamique de la zone d'où elles proviennent.

Analyse des pôles d'une LPO

Lors de la déformation par fluage dislocation, si de nombreux systèmes de glissement accommodent la déformation, l'interprétation des LPO formées peut être difficile. Cependant, dans la majorité des minéraux il y a peu de systèmes de glissement et en fonction des conditions de déformation, l'activation de certains systèmes de glissements est largement défavorisée (forte anisotropie plastique). De plus, la coexistence des différents régimes de fluage peut permettre, par exemple, d'accommoder une partie de la déformation par diffusion ou GBS si le glissement de dislocation n'est pas favorable. Ainsi, une grande partie des minéraux ne se déforment, dans le régime de fluage dislocation, que par activation de quelques systèmes de glissement (voir un seul). En conséquence, la LPO formée par la déformation plastique reflète l'activation du ou des systèmes de glissement qui ont été actifs durant la déformation. Pour l'olivine, par exemple, on classifie les LPO suivant 5 types [Jung et al., 2006; Katayama et al., 2004] qui reflètent le système de glissement le plus actif durant la déformation. Le système de glissement dominant peut alors être corrélé avec les conditions de la déformation, notamment la température, la contrainte et la teneur en eau [Karato et al., 2008] (voir figure 1.23).



(a) (b)

FIGURE 1.23 – Les différents types de LPO des agrégats d'olivine 1.23a et les domaines contrainte/concentration en eau correspondant à ces différents types 1.23a, d'après [Karato et al., 2008]

Ces études permettent ainsi, après avoir déterminé le type de LPO d'un échantillon de lui attribuer des conditions thermomécaniques lors de sa déformation [Skemer et al., 2009]. Comme la LPO d'un matériau influence également la propagation des ondes sismiques qui le traversent, il est également possible de déduire la ou les orientations préférentielles des roches en profondeur et avoir une idée des conditions de déformation [Kneller et al., 2008].
La DRX peut avoir une influence sur le développement de LPO, en effet il peut exister des relations d'orientation entre grain parent et germe de même que des relations entre la géométrie de la déformation et l'orientation des germes [Zhang et al., 2000]. Ces relations d'orientations peuvent avoir comme effet d'adoucir ou de renforcer la LPO déja présente.

Creep regime	A($MPa^{-(n+r)}.\mu m^p$)	n	p	r	α	E*(kJ/mol)	V*(cm^3/mol)
dry dislocation	$1.1e^5$	3.5	0	-	30 – 45	530	13 – 27
wet dislocation	1600	3.5	0	1.2	30 – 45	480	10 – 20
dry diffusion	$1.5e^9$	1	3	-	30	375	2 – 10
wet diffusion	$2.5e^7$	1	3	0.7	30	375	0 – 20
GBS T > 1250°C	$4.7e^{10}$	3.5	2	-	30 – 45	600	13 – 27
GBS T < 1250°C	6500	3.5	2	-	30 – 45	400	13 – 27

TABLEAU 1.1 – Paramètres de la loi de fluage (équation 1.12) pour différents régimes de fluage d'après [Hirth and Kohlstedt, 2003].

D'une manière générale, pour analyser les microstructures des roches et en déduire des informations exploitables d'un point de vue géologique, il est important de comprendre les mécanismes à l'échelle de la microstructure.

1.3.3 Implication pour la rhéologie et les modèles géodynamiques de grande échelle

La déformation de la lithosphère est généralement étudiée d'un point de vue rhéologique, c'est à dire que sa déformation, dans les différents domaines de fluage, est décrite comme un écoulement visqueux. La physique de la déformation est alors décrite à travers une ou des viscosités que l'on fait dépendre de nombreuses variables telles que la pression, la température, la taille de grain, la contrainte, etc. Ces interdépendances impliquant généralement une forte non-linéarité du problème, des méthodes numériques robustes et efficaces doivent être mises en place pour sa résolution [May et al., 2014].
Les lois rhéologiques généralement utilisées dans ce type d'approches sont de la forme [Hirth and Kohlstedt, 2003] :

$$\dot{\varepsilon} = A\sigma^n d^{-p} f_{H_2O}^r e^{(\alpha\Phi - \frac{E^\star + PV^\star}{RT})}, \tag{1.12}$$

où $\dot{\varepsilon}$ et σ sont les seconds invariants de la vitesse de déformation et de la contrainte respectivement, d la taille moyenne de grain, f_{H_2O} la fugacité de l'eau, Φ la taux de fusion partielle, P la pression, R la constante des gaz parfaits et T la température. Les différents paramètres de la loi rhéologique, A (une constante), p (exposant de la taille de grain), r (exposant de la fugacité de l'eau), α (une constante), $E^\star$ (énergie d'activation) et $V^\star$ (volume d'activation) dépendent du régime de fluage de la roche, ils sont généralement déterminés expérimentalement. Leurs valeurs les plus courantes sont présentées dans le tableau 1.1.
On peut remarquer qu'avec ces paramètres, le régime de fluage dislocation ne dépend pas de la taille de grains contrairement aux régimes de fluage par diffusion et GBS. Peu de modèles géodynamiques de grande échelle considèrent une évolution de la taille de grains car cette évolution dépendrait de la contrainte et/ou de la déformation, ce qui introduirait une non-linéarité supplémentaire au problème. Cependant certaines procédures numériques et lois d'évolutions de taille de grains permettent néanmoins de prendre en compte cette dépendance [Bercovici and Ricard, 2012].
Comme évoqué précédemment, les différents régimes de fluage coexistent, cependant en fonction des conditions thermomécaniques l'un ou l'autre des régimes peut prédominer. On calcule généralement une rhéologie effective par :

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{disl} + \dot{\varepsilon}_{diff} + \dot{\varepsilon}_{GBS} \tag{1.13}$$

où $\dot{\varepsilon}_{disl}$, $\dot{\varepsilon}_{diff}$ et $\dot{\varepsilon}_{GBS}$ sont les vitesses de déformation associées au fluage dislocation, diffusion et GBS respectivement. De cette manière, c'est le régime de fluage dont la viscosité est la plus faible

qui devient le mécanisme dominant de la déformation.
Il est également d'usage de construire des cartes de déformation représentant le régime de fluage dominant en fonction des caractéristiques de la roche et des conditions thermomécaniques (figure 1.24).

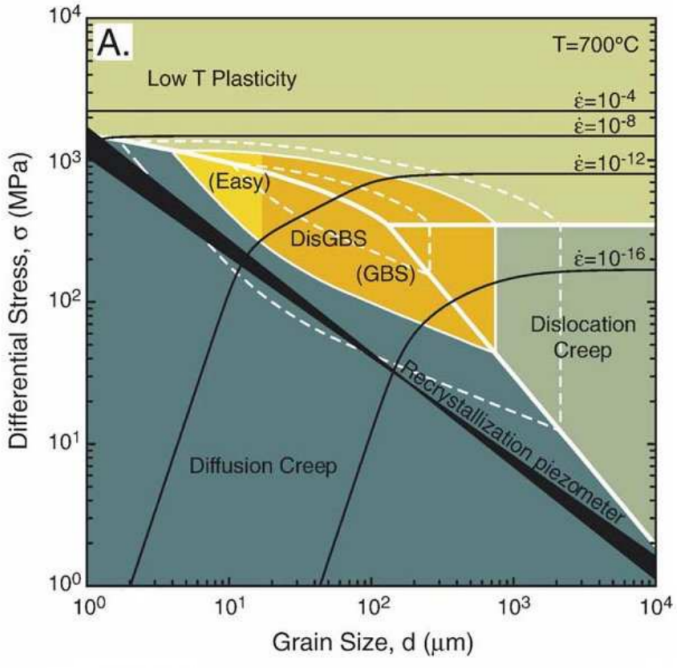


FIGURE 1.24 – Carte de déformation de l'olivine [Warren and Hirth, 2006] en fonction de la contrainte, la taille moyenne de grain et la vitesse de déformation.

Ces cartes de déformation et la rhéologie de la lithosphère, d'une manière générale, sont basées sur des mécanismes physiques ayant lieu à l'échelle de la microstructure. Il est donc important d'étudier les mécanismes à cette échelle pour améliorer notre compréhension à des échelles plus importantes.

1.4 Modéliser les évolutions microstructurales

Quantifier et prédire les évolutions microstructurales d'un matériau polycristallin peut être réalisé de différentes manières, les deux grandes approches pour cela sont dites à champ moyen ou à champ complet. Dans le premier type d'approche, la microstructure est décrite de manière statistique et les évolutions microstructurales sont estimées en calculant l'évolution des grandeurs représentant le polycristal (e.g. taille moyenne de grains, écart type). Les approches champ complet quant à elles proposent de décrire explicitement la microstructure. Un polycristal numérique est généré et les évolutions microstructurales sont calculées à partir des équations décrivant le mouvement des joints de grains ou la nucléation. Les approches champ moyen ont ainsi un coût de calcul bien moindre que les méthodes champ complet qui demandent généralement des ressources numériques importantes. Ces deux approches sont cependant complémentaires, en effet les modèles champ moyen ont parfois besoin d'être calibrés pour être prédictifs et les modèles champ complet sont alors un bon outil pour réaliser cette calibration.

1.4.1 Champ moyen

Il existe de nombreux modèles en champ moyen dans l'état de l'art permettant de prédire les évolutions microstructurales durant la croissance de grains ou la DRX [Maire et al., 2016; Montheillet et al., 2009]. Les modèles en champ moyen sont essentiellement basés sur la formulation d'une relation de transition d'échelle permettant de s'affranchir d'une description topologique complète du système (dans notre cas de la microstructure) comme c'est le cas pour les modèles en champ complet. La majorité d'entre eux décrivent implicitement la microstructure en faisant l'hypothèse de grains sphériques (ce qui permet de ramener la taille de grain à un rayon équivalent) plongés dans un milieu homogène équivalent. Certaines approches, dites topologiques [Maire et al., 2018] ou semi-topologiques enrichissent la description de ce milieu homogène équivalent en le séparant en différentes parties [Bernard et al., 2011] (par exemple les grains recristallisés ou non).
Dans ce travail, aucun modèle en champ moyen de DRX n'a été utilisé ou développé cependant différents modèles traitant de la croissance de grains ont été enrichis. Presque tous utilisent l'approximation suivante :

$$v = \frac{d\bar{R}}{dt}, \tag{1.14}$$

où $\bar{R}$ représente le rayon moyen des grains de la microstructure. Cette approximation permet de relier l'évolution de la taille moyenne de grain aux différentes pressions motrices impactant la microstructure (voir Eq.1.3). Dans le cas d'une croissance de grains par capillarité pure, la seule pression motrice en présence peut être approximée par (en 2D) :

$$P^{capi} = \gamma\kappa = \frac{\gamma}{\bar{R}}. \tag{1.15}$$

Ainsi, l'évolution du rayon moyen en fonction du temps peut être obtenue en combinant les équations 1.3, 1.14 et 1.15 et en intégrant :

$$\bar{R}(t)^2 - \bar{R_0}^2 = \frac{1}{2}M\gamma t. \tag{1.16}$$

Cette équation, bien connue, a été établie par Burke and Turnbull [1952] et peut être généralisée [Cruz-Fabiano et al., 2014] :

$$\bar{R}(t)^2 - \bar{R_0}^2 = \alpha M\gamma t^n, \tag{1.17}$$

avec R_0 la taille de grain moyenne au temps $t = 0$ et α et n des paramètres d'ajustements qu'il convient de calibrer sur des résultats expérimentaux ou des simulations champ complet. Ces paramètres "champ moyen" peuvent être définis comme des fonctions de certaines variables influant sur la croissance de grains comme par exemple l'écart type de la distribution initiale de taille de grain. Cependant, aussi complexes puissent-ils être, les modèles en champ moyen doivent être appréhendés avec précaution (en particulier en dehors des conditions ayant servi à leurs calibrations).
On peut également noter que ce concept de champ moyen est applicable à différentes échelles, en effet dans le modèle champ complet présenté dans la suite, la diffusion atomique, le mouvement individuel des dislocations et d'autres phénomènes microscopiques ne peuvent pas être simulés explicitement. Des relations de transitions d'échelle moyennant les effets de ces processus sont définies pour éviter un temps de calcul trop important. Ainsi, un modèle champ complet d'évolutions microstructurales utilise des modèles en champ moyen venant de l'échelle atomique. Pour résumer, chaque modèle en champ complet peut être vu comme un modèle en champ moyen, tout est une question d'échelle.

1.4.2 Champ complet

Dans cette partie, on se concentrera seulement sur les méthodes numériques utilisées dans ce travail de thèse, il existe bien évidemment de nombreuses approches champ complet différentes pour modéliser les évolutions microstructurales qui ne seront pas abordées ici. Cependant, un travail bibliographique sur les principales méthodes champ complet traitant de la croissance de grains est présentée dans le chapitre suivant. Dans un premier temps on présentera la méthode des éléments finis, puis le formalisme level-set sera abordé et enfin on décrira l'approche de plasticité cristalline utilisée dans ce travail de thèse.

1.4.2.1 Les éléments finis

La méthode des éléments finis (EF) est une méthode numérique permettant d'approcher des solutions à des systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) sur un domaine de calcul bien défini. Cette méthode, s'appuyant sur un fondement mathématique strict, basé sur l'analyse fonctionnelle, n'a été formalisée qu'au milieu du $20^{ème}$ siècle puis largement diffusée dans les milieux universitaires et industriels avec l'augmentation croissante des moyens de calcul. Une description holistique des éléments finis ferait intervenir de nombreux concepts et méthodes dont un certain nombre sont encore en développement à l'heure actuelle. On se contentera ici d'aborder les notions générales nécessaires à la compréhension de la méthode sans rentrer dans les détails. Dans un premier temps on se focalisera sur l'exemple relativement simple de la résolution EF d'une équation de diffusion, utilisée pour simuler la croissance de grains, qui permettra d'appréhender dans le détail les points principaux tels que les conditions aux limites, la formulation faible, l'approximation EF, la discrétisation spatiale de la forme faible et l'assemblage du système matriciel Zienkiewicz et al. [2000]. Dans un deuxième temps on abordera le traitement des équations utilisées dans cette thèse pour traiter la déformation par EF. Il s'agira d'une formulation mixte vitesse/pression ce qui permettra d'introduire la méthode de résolution non-linéaire de Newton-Raphson ainsi qu'une méthode de stabilisation. La librairie EF utilisée dans ce travail est développée au Centre de Mise en Forme des Matériau (CEMEF) et s'appelle CimLib, elle est écrite en langage informatique C++, et la structure du code respecte les principes de la programmation orientée objet. Un méta-langage, appelé MTC, plus spécifique a été créé pour utiliser cette librairie sans avoir à manipuler de code en C++.

Conditions aux limites

L'intérêt principal de la méthode des EF est de traiter des EDP dans un domaine de calcul qui peut être géométriquement complexe. Ce domaine présente des frontières et la méthode EF nécessite des contraintes sur toute la frontière. Ainsi, en EF, les conditions aux limites doivent décrire tout les bords du domaine, dans la libraire CimLib elles peuvent être de deux types :

- conditions de Dirichlet qui imposent une valeur à la solution
- conditions de Neumann qui imposent une valeur à la dérivée de la solution.

Des conditions aux limites de Dirichlet peuvent être indispensables dans certains cas pour assurer l'unicité de la solution. Sur la figure 1.25, une part des contours est décrite par des conditions aux limites de Neumann et une autre part est décrite par celles de Dirichlet.

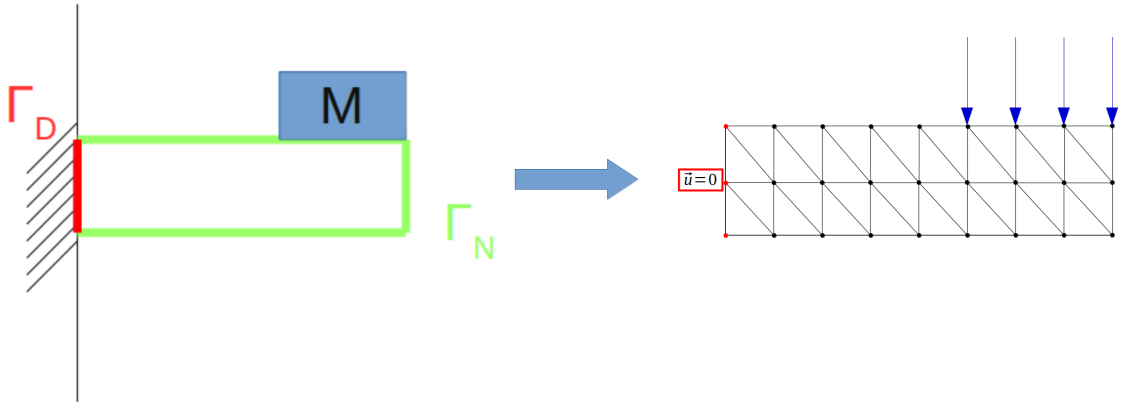


FIGURE 1.25 – Exemple 2D d'une poutre fixée rigidement et d'une masse posée à son extrémité, les conditions aux limites décrivant tous les bords de la poutre. Si la fonction déplacement ($\vec{u}$) est la solution recherchée par EF, la partie fixée au mur est décrite par des conditions aux limites de Dirichlet Γ_D imposant un déplacement nul. Le reste de la poutre est décrit par des conditions de Neumann Γ_N. La masse exerçant un poids sur une surface de la poutre, elle impose donc une contrainte qui est reliée à la dérivée première du déplacement. Il en est de même pour les parties qui ne sont en contact avec rien et qui subissent une contrainte nulle.

1.4.2.1.a Traitement d'une équation de diffusion

Dans cette section on va présenter le traitement par EF d'une équation du type de diffusion de la chaleur en abordant les points principaux à mettre en œuvre pour la résolution.

Formulation faible

Pour bien définir le problème, on écrit l'EDP sous sa forme différentielle (formulation forte) à laquelle on ajoute des conditions aux limites et des conditions initiales. Ainsi, si on considère un domaine (2D) Ω dont les bords sont définis par $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ avec $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \varnothing$, on peut écrire une équation du type de l'équation de la chaleur sous la forme forte suivante :

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u(\mathscr{X},t)}{\partial t} - \lambda \Delta u(\mathscr{X},t) = S(\mathscr{X}) \text{ défini sur } \Omega, \\ u = u_D \text{ pour } \mathscr{X} \in \Gamma_D, \\ f(u') = u_N \text{ pour } \mathscr{X} \in \Gamma_N, \\ u(\mathscr{X}, t=0) = u^0, \end{aligned} \tag{1.18}$$

où $u(\mathscr{X},t)$ est la fonction que l'on va chercher à approcher par EF, ρ est un terme massique, λ un terme diffusif et $S(\mathscr{X})$ une fonction source (qui n'est pas une inconnue). La formulation faible d'une EDP peut être vue comme une reformulation du problème dans laquelle on cherche à pondérer l'erreur commise sur le domaine de calcul en utilisant une fonction test associée à la fonction solution. Ces fonctions tests doivent appartenir à un espace mathématique vectoriel particulier, appelé l'espace de Sobolev (H^1), qui représente des fonctions bornées dont les valeurs sont nulles aux points où on impose des conditions de Dirichlet. Ainsi, on pondère l'erreur commise en multipliant la forme forte par la fonction test $u^\star(\mathscr{X},t)$ et on la répartit sur le domaine de calcul en intégrant sur Ω ce qui nous donne l'équation suivante (la dépendance spatiale et temporelle sera omise dans la suite pour un soucis de lisibilité) :

$$\int_\Omega \rho u^\star \frac{\partial u}{\partial t} d\Omega - \int_\Omega u^\star \lambda \Delta u d\Omega = \int_\Omega u^\star S d\Omega. \tag{1.19}$$

En utilisant une intégration par partie pour réécrire le deuxième terme, on obtient :

$$\int_\Omega \rho u^\star \frac{\partial u}{\partial t} d\Omega + \int_\Omega \lambda \vec{\nabla} u^\star \vec{\nabla} u d\Omega - \int_\Omega \lambda \vec{\nabla} \left(u^\star \vec{\nabla} u\right) d\Omega = \int_\Omega u^\star S d\Omega. \tag{1.20}$$

Si maintenant on utilise le théorème de la divergence pour réécrire le troisième terme on obtient :

$$\int_\Omega \rho u^\star \frac{\partial u}{\partial t} d\Omega + \int_\Omega \lambda \vec{\nabla} u^\star \vec{\nabla} u d\Omega - \int_\Gamma \lambda \left(u^\star \vec{\nabla} u\right).\vec{n} d\Gamma = \int_\Omega u^\star S d\Omega, \tag{1.21}$$

avec $\vec{n}$ la normale sortante aux bords du domaine. L'intégrale sur les bords du domaine peut alors être réduite à une intégrale sur les bords du domaine décrit par des conditions aux limites de Neumann car par définition $u^\star$ est nulle sur les points où on impose des conditions de Dirichlet. Ainsi on peut écrire :

$$\int_\Omega \rho u^\star \frac{\partial u}{\partial t} d\Omega + \int_\Omega \lambda \vec{\nabla} u^\star \vec{\nabla} u d\Omega = \int_\Omega u^\star S d\Omega + \int_{\Gamma_N} \lambda \left(u^\star \vec{\nabla} u_N\right).\vec{n} d\Gamma_N. \tag{1.22}$$

De façon générale, la forme faible ci-dessus contient les conditions aux limites de Neumann, on dit que les conditions sont satisfaites de façon faible. On peut constater que la formulation forte (eq.1.18 nécessitait une fonction u deux fois dérivable alors que la formulation faible obtenue nécessite une fonction u une fois dérivable ce qui constitue un avantage important pour la construction de la solution approchée au problème.

Discrétisation temporelle d'ordre 1

Le but ici est de calculer l'évolution temporelle de la fonction u, on cherche en fait à calculer la fonction $u^{t+\Delta t}$ avec Δt le pas de temps. On doit donc utiliser une discrétisation temporelle pour faire ressortir $u^{t+\Delta t}$ dans $\frac{\partial u}{\partial t}$. Une solution simple consiste à effectuer une discrétisation d'Euler implicite faisant intervenir la fonction u à l'instant t qui n'est pas une inconnue si l'on connaît les conditions initiales du problème. Ainsi, en passant tous les termes inconnus à gauche et tous les termes connus à droite, la formulation faible finale s'écrit :

$$\int_\Omega \rho u^\star \frac{u^{t+\Delta t}}{\Delta t} d\Omega + \int_\Omega \lambda \vec{\nabla} u^\star \vec{\nabla} u^{t+\Delta t} d\Omega = \int_\Omega u^\star \left(S - \frac{u^t}{\Delta t}\right) d\Omega + \int_{\Gamma_N} \lambda \left(u^\star \vec{\nabla} u_N^{t+\Delta t}\right).\vec{n} d\Gamma_N. \tag{1.23}$$

On peut noter que cette discrétisation temporelle implique de considérer une fonction u linéaire entre deux pas de temps ce qui peut aboutir à une source d'erreur si le pas de temps est trop important (approximation en temps d'ordre 1).

Par souci de simplicité, on assumera dans la suite que les conditions aux limites de Neumann imposées sont telles que $\vec{\nabla} u.\vec{n} = 0$ ce qui rend nul le dernier terme de l'équation 1.23. Ce type de conditions aux limites (Neumann vide) revient à imposer que le gradient de la solution soit orthogonal au bords du domaine, on verra dans la suite que ces conditions aux limites sont appliquées dans le cas de la simulation des évolutions microstructurales par la méthode level-set.

L'approximation éléments finis

Trouver une solution analytique à la forme faible d'une EDP (comme l'equation 1.23) n'est pas forcément possible, suivant la géométrie du domaine, les conditions aux limites ou bien encore l'équation elle même. Ce que la méthode EF propose est d'approcher la solution au problème en certains points particuliers du domaine, appelés nœuds, et d'interpoler la solution sur le reste du domaine grâce à une discrétisation en petits sous-domaines de forme simple, appelés éléments. L'interpolation complète de la fonction solution sera donnée par l'ensemble des interpolations de chaque élément.

Il faut alors définir un type d'interpolation pour les fonctions entrant en jeu dans la formulation faible, on notera dans la suite u^h et $u^{\star h}$ les interpolations des fonctions solution u et test $u^\star$, respectivement. On peut noter, que la méthode des EF classique, utilisée ici, applique l'approche de Galerkin dans laquelle les fonctions u^h et $u^{\star h}$ ont la même forme mathématique. Les fonctions d'interpolation utilisent des fonctions de base $\mathrm{N}_i(\mathscr{X}^j)$ (où $\mathscr{X}^j$ sont les coordonnées dans l'espace du nœud j), associées à un nœud i du maillage, orthogonales entre elles et satisfaisant :

$$\mathrm{N}_i\left(\mathscr{X}^j\right) = \begin{cases} 0 \text{ si } i \neq j \\ 1 \text{ si } i = j \end{cases} \tag{1.24}$$

Les fonctions de bases peuvent avoir différentes formes mathématiques, depuis une fonction linéaire (interpolation P1), jusqu'à des polynômes de degré supérieur pour enrichir l'interpolation.
En utilisant les fonctions de base, on peut alors exprimer les fonctions u^h et $u^{\star h}$ à partir de leurs valeurs nodales u_i et $u_i^\star$ en utilisant la relation :

$$u^h(\mathscr{X}) = \sum_{i=1}^{\mathrm{NN}} u_i \mathrm{N}_i(\mathscr{X}) = \begin{pmatrix} \mathrm{N}_1(\mathscr{X}) & . & . & . & \mathrm{N}_j(\mathscr{X}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ . \\ . \\ . \\ u_j \end{pmatrix} \approx u(\mathscr{X}), \tag{1.25}$$

où NN est le nombre de nœuds. Cette méthodologie permet également d'approcher la valeur des dérivées des fonctions sur tout le maillage en utilisant les dérivées des fonctions de bases. On pourra écrire un gradient (en 2D) comme :

$$\vec{\nabla} u^h(\mathscr{X}) = \sum_{i=1}^{\mathrm{N}bNoeuds} u_i \vec{\nabla} \mathrm{N}_i = \sum_{i=1}^{\mathrm{N}bNoeuds} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial \mathscr{X}_1} & \frac{\partial \mathrm{N}_2}{\partial \mathscr{X}_1} & . & . & . & \frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial \mathscr{X}_1} \\ \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial \mathscr{X}_2} & \frac{\partial \mathrm{N}_2}{\partial \mathscr{X}_2} & . & . & . & \frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial \mathscr{X}_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ . \\ . \\ . \\ u_j \end{pmatrix} \approx \vec{\nabla} u(\mathscr{X}) \tag{1.26}$$

L'interpolation de la fonction test $u^{\star h}$ et de son gradient s'obtient exactement de la même manière lorsqu'on utilise l'approche de Galerkin. Ainsi, pour obtenir une solution approchée au problème sur tout le domaine de calcul, il suffit de trouver des valeurs de la fonction aux nœuds du maillage.

Forme faible discrétisée

L'interpolation des fonctions évoquée ci dessus permet de remplacer les fonctions u et $u^\star$ par leurs valeurs approximées u^h et $u^{\star h}$ dans la formulation faible, ce qui permet d'obtenir la forme faible discrétisée :

$$\sum_{i=1}^{\mathrm{NN}}\sum_{i=1}^{\mathrm{NN}}\left(a\left(u_i\mathrm{N}_i,u_j^\star\mathrm{N}_j\right)+b\left(u_i\mathrm{N}_i,u_j^\star\mathrm{N}_j\right)\right)=\sum_{i=1}^{\mathrm{NN}}\sum_{j=1}^{\mathrm{NN}}c\left(u_i^\star\mathrm{N}_i,\left(\mathrm{S}_j-\frac{u_j^t}{\Delta t}\right)\mathrm{N}_j\right), \tag{1.27}$$

où (en omettant l'exposant $t+\Delta t$ et la variable d'espace $\mathscr{X}$) :

$$\begin{aligned} a\left(u_i\mathrm{N}_i,u_j^\star\mathrm{N}_j\right)&=\int_\Omega \rho u_j^\star\mathrm{N}_j\frac{u_i\mathrm{N}_i}{\Delta t}d\Omega,\\ b\left(u_i\mathrm{N}_i,u_j^\star\mathrm{N}_j\right)&=\int_\Omega \lambda u_i\vec{\nabla}\mathrm{N}_i u_j^\star\vec{\nabla}\mathrm{N}_j d\Omega,\\ c\left(u_i^\star\mathrm{N}_i,\left(\mathrm{S}_j-\frac{u_j^t}{\Delta t}\right)\mathrm{N}_j\right)&=\int_\Omega u_i^\star\left(\mathrm{S}_j-\frac{u_j^t}{\Delta t}\right)\mathrm{N}_i\mathrm{N}_j d\Omega. \end{aligned} \tag{1.28}$$

L'expression 1.27 est la forme faible discrétisée, elle permet d'obtenir un système matriciel qu'il faudra résoudre pour obtenir la valeur de la fonction solution aux nœuds du maillage.

Calcul des matrices élémentaires

L'équation 1.27 peut encore être simplifiée, en effet, les fonctions N_i ne sont différentes de zéro que dans les éléments qui contiennent le noeud i, on peut alors ramener la formulation faible discrétisée à une somme de termes élémentaires :

$$\sum_{\mathrm{K}=1}^{\mathrm{NE}}(a_\mathrm{K}+b_\mathrm{K})=\sum_{\mathrm{K}=1}^{\mathrm{NE}}c_\mathrm{K}, \tag{1.29}$$

où NE est le nombre d'éléments et où les termes élémentaires sont :

$$\begin{aligned} a_\mathrm{K}&=\sum_{i=1}^{\mathrm{NK}}\sum_{i=1}^{\mathrm{NK}}a\left({u_i}^\mathrm{K}{\mathrm{N}_i}^\mathrm{K},{u_j}^{\star\mathrm{K}}{\mathrm{N}_j}^\mathrm{K}\right)\\ b_\mathrm{K}&=\sum_{i=1}^{\mathrm{NK}}\sum_{i=1}^{\mathrm{NK}}b\left({u_i}^\mathrm{K}{\mathrm{N}_i}^\mathrm{K},{u_j}^{\star\mathrm{K}}{\mathrm{N}_j}^\mathrm{K}\right)\\ c_\mathrm{K}&=\sum_{i=1}^{\mathrm{NK}}\sum_{j=1}^{\mathrm{NK}}c\left({u_i}^{\star\mathrm{K}}{\mathrm{N}_i}^\mathrm{K},\left({\mathrm{S}_j}^\mathrm{K}-\frac{{u^t}_j{}^\mathrm{K}}{\Delta t}\right){\mathrm{N}_j}^\mathrm{K}\right), \end{aligned} \tag{1.30}$$

où NK est le nombre de nœuds dans l'élément K. Cette simplification facilite grandement l'implémentation car il est alors possible d'effectuer le calcul comme une somme de termes élémentaires, pouvant être calculés indépendamment ce qui rend également plus facile un calcul en parallèle. Dans le cas d'un maillage 2D constitué d'éléments triangulaires, les termes élémentaires sous forme matricielle peuvent être exprimés comme :

$$a_\mathrm{K}=\int_{\Omega_e}\rho\begin{pmatrix}{u_1}^{\star\mathrm{K}} & {u_2}^{\star\mathrm{K}} & {u_3}^{\star\mathrm{K}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathrm{N}_1^\mathrm{K}\mathrm{N}_1^\mathrm{K} & \mathrm{N}_1^\mathrm{K}\mathrm{N}_2^\mathrm{K} & \mathrm{N}_1^\mathrm{K}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}\\ \mathrm{N}_2^\mathrm{K}\mathrm{N}_1^\mathrm{K} & \mathrm{N}_2^\mathrm{K}\mathrm{N}_2^\mathrm{K} & \mathrm{N}_2^\mathrm{K}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}\\ \mathrm{N}_3^\mathrm{K}\mathrm{N}_1^\mathrm{K} & \mathrm{N}_3^\mathrm{K}\mathrm{N}_2^\mathrm{K} & \mathrm{N}_3^\mathrm{K}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1^\mathrm{K}\\ u_2^\mathrm{K}\\ u_3^\mathrm{K}\end{pmatrix}d\Omega_e, \tag{1.31}$$

$$b_\mathrm{K}=\int_{\Omega_e}\lambda\begin{pmatrix}{u_1}^{\star\mathrm{K}} & {u_2}^{\star\mathrm{K}} & {u_3}^{\star\mathrm{K}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\vec{\nabla}\mathrm{N}_1^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_1^\mathrm{K} & \vec{\nabla}\mathrm{N}_1^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_2^\mathrm{K} & \vec{\nabla}\mathrm{N}_1^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}\\ \vec{\nabla}\mathrm{N}_2^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_1^\mathrm{K} & \vec{\nabla}\mathrm{N}_2^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_2^\mathrm{K} & \vec{\nabla}\mathrm{N}_2^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}\\ \vec{\nabla}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_1^\mathrm{K} & \vec{\nabla}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_2^\mathrm{K} & \vec{\nabla}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}.\vec{\nabla}\mathrm{N}_3^\mathrm{K}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1^\mathrm{K}\\ u_2^\mathrm{K}\\ u_3^\mathrm{K}\end{pmatrix}d\Omega_e, \tag{1.32}$$

$$c_{\mathrm{K}} = \int_{\Omega_e} \begin{pmatrix} {u_1}^{\star \mathrm{K}} & {u_2}^{\star \mathrm{K}} & {u_3}^{\star \mathrm{K}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{N}_1^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_1^{\mathrm{K}} & \mathrm{N}_1^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_2^{\mathrm{K}} & \mathrm{N}_1^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_3^{\mathrm{K}} \\ \mathrm{N}_2^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_1^{\mathrm{K}} & \mathrm{N}_2^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_2^{\mathrm{K}} & \mathrm{N}_2^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_3^{\mathrm{K}} \\ \mathrm{N}_3^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_1^{\mathrm{K}} & \mathrm{N}_3^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_2^{\mathrm{K}} & \mathrm{N}_3^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_3^{\mathrm{K}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{S}_1^{\mathrm{K}} - \frac{{u^t}_1{}^{\mathrm{K}}}{\Delta t} \\ \mathrm{S}_2^{\mathrm{K}} - \frac{{u^t}_2{}^{\mathrm{K}}}{\Delta t} \\ \mathrm{S}_3^{\mathrm{K}} - \frac{{u^t}_3{}^{\mathrm{K}}}{\Delta t} \end{pmatrix} d\Omega_e, \tag{1.33}$$

où Ω_e représente la surface (en 2D) de l'élément considéré. Les intégrales sont généralement évaluées en utilisant la méthode de Gauss qui propose de remplacer l'intégrale par une somme finie sur des points particuliers appelés points d'intégration. A chaque point d'intégration, on évalue la fonction à intégrer et on la multiplie à un coefficient appelé poids. Le nombre de points d'intégration dépend évidement du degré de la fonction à intégrer. Par exemple, si on cherche à intégrer une fonction linéaire, un seul point d'intégration par élément sera nécessaire pour évaluer l'intégrale sur un élément.

Assemblage

Comme les calculs sont effectués élément par élément, il faut assembler tous les termes élémentaires dans une matrice globale A_{ij} et un vecteur global L_j. Il est important de noter que dans les expressions ci dessus l'exposant K exprime une numérotation locale, cela signifie que u_1^{K} correspond à la valeur de la fonction u au nœud 1 de l'élément K qui n'est pas forcément le nœud 1 du maillage global. En passant de la numérotation locale à la numérotation globale, on peut écrire les opérations d'assemblage comme (dans les expressions qui vont suivre n représentera le nombre total de nœud du maillage) :

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathrm{K}=1}^{\mathrm{NE}} \sum_{i=1}^{\mathrm{NK}} \sum_{i=1}^{\mathrm{NK}} \left(a\left({u_i}^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_i{}^{\mathrm{K}}, {u_j}^{\star \mathrm{K}}\mathrm{N}_j{}^{\mathrm{K}} \right) + b\left({u_i}^{\mathrm{K}}\mathrm{N}_i{}^{\mathrm{K}}, {u_j}^{\star \mathrm{K}}\mathrm{N}_j{}^{\mathrm{K}} \right) \right) = \\ &\begin{pmatrix} {u_1}^{\star} & . & . & . & {u_n}^{\star} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{A}_{11} & \mathrm{A}_{12} & . & . & . & \mathrm{A}_{1n} \\ \mathrm{A}_{21} & \mathrm{A}_{22} & . & . & . & \mathrm{A}_{2n} \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ \mathrm{A}_{n-11} & \mathrm{A}_{n-12} & . & . & . & \mathrm{A}_{n-1n} \\ \mathrm{A}_{n1} & \mathrm{A}_{n2} & . & . & . & \mathrm{A}_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ . \\ . \\ . \\ u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.34}$$

et :

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathrm{K}=1}^{\mathrm{NE}} \sum_{i=1}^{\mathrm{NK}} \sum_{j=1}^{\mathrm{NK}} c\left({u_i}^{\star \mathrm{K}}\mathrm{N}_i{}^{\mathrm{K}}, \left(\mathrm{S}_j{}^{\mathrm{K}} - \frac{{u^t}_j{}^{\mathrm{K}}}{\Delta t} \right) \mathrm{N}_j{}^{\mathrm{K}} \right) = \\ &\begin{pmatrix} {u_1}^{\star} & . & . & . & {u_n}^{\star} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{L}_1 \\ . \\ . \\ . \\ \mathrm{L}_n \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.35}$$

Suite à ces opérations, il est possible de réécrire l'équation 1.27 sous la forme (l'exposant T indique la transposée) :

$$\mathrm{U}^{\star \mathrm{T}}_i \mathrm{A}_{ij} \mathrm{U}_j = \mathrm{U}^{\star \mathrm{T}}_i \mathrm{L}_i, \tag{1.36}$$

où $U^\star{}_i$ et U_j représentent les vecteurs globaux des fonctions tests et inconnues nodales, respectivement. La solution du problème doit être valable pour n'importe quelle fonction test tant qu'elle respecte les conditions de Dirichlet imposées, ce qui implique que :

$$A_{ij}U_j - L_i = 0. \tag{1.37}$$

La résolution du problème revient alors à la résolution du système linéaire ci dessus ce qui reviendrait à l'inversion d'une matrice. Cette matrice est généralement d'une très grande taille (du nombre de nœuds dans le maillage) mais contient de nombreuses valeurs nulles dans les parties éloignées de la diagonale (matrice creuse, conséquence de l'assemblage), il convient alors pour limiter l'espace mémoire utilisé de ne conserver que la partie de cette matrice qui sera nécessaire à la résolution du problème. Dans la pratique, l'inversion n'est jamais réalisée directement car elle aurait un coût numérique trop important. On peut cependant résoudre le système linéaire par des méthodes itératives ce qui est plus efficace. Les algorithmes pour les opérations d'algèbre linéaire (e.g. produit matrice vecteur) sont également adaptés pour tenir compte de ce type de structure de données. Ce type de méthodes numériques est un domaine d'étude à part entière et il existe des librairies de codes spécialisés (i.e. PETSc [Balay et al., 2019]) auxquelles on peut faire appel dans un code EF au moment de la résolution du système linéaire.

1.4.2.1.b Traitement d'une formulation mixte vitesse/pression

Le formalisme EF présenté ci dessus nous permettra dans la suite de modéliser les évolutions microstructurales en déplaçant les joints de grains. Cependant, lorsque notre microstructure sera soumise à une déformation, il faudra être capable de traiter le comportement mécanique du matériau par EF. Pour cela on va utiliser une formulation mixte en vitesse pression.

Formulation faible du problème mécanique

En pratique, on cherche à trouver le champ de pression ainsi que les vitesses en tous nœuds du maillage en résolvant les équations de la mécanique des milieux continus dans un cadre EF. Une des équations de base est la conservation de la quantité de mouvement. Dans le cas stationnaire, en l'absence de force volumique (gravité) et en adoptant la convention de sommation d'Einstein sur les indices répétés, cette équation s'écrit :

$$\sigma_{ij,j} = 0, (i.e. \sum^{j} \frac{d\sigma_{ij}}{dx_j} = \mathrm{div}\left(\sigma_{ij}\right) = 0). \tag{1.38}$$

A cette équation viennent s'ajouter des conditions aux limites que l'on applique aux frontières du domaine Γ :

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}.n_j = t_i \forall X \in \Gamma_N \\ v_i = \bar{v}_i \forall X \in \Gamma_D, \\ \text{avec } \Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma \text{ et } \Gamma_N \cap \Gamma_D = \varnothing, \end{aligned} \tag{1.39}$$

où t_i est le vecteur contrainte, n_i la normale à la surface, $\bar{v}_i$ est la vitesse imposée et Γ_N et Γ_D représentent les frontières du domaine sur lesquelles on impose des conditions aux limites de Neumann et Dirichlet respectivement. Pour approcher numériquement la solution à ce problème, on utilise un formalisme EF mixte. Le premier résidu ($R_1(v_i, P)$) utilisé par la formulation mixte est obtenu en intégrant sur le domaine Ω l'équation 1.38 multipliée à une fonction test $\psi_i^\star$ (fonction vectorielle comme les vitesses nodales) :

$$\begin{aligned} \int_\Omega \sigma_{ij,j}\psi_i^\star \, dV = 0 \\ \int_\Omega \left(\sigma_{ij}\psi_i^\star\right)_{,j} dV - \int_\Omega \sigma_{ij}\psi_{i,j}^\star dV = 0 \\ \int_\Gamma \left(\sigma_{ij}n_j\right)\psi_i^\star \, dV - \int_\Omega \sigma_{ij}\psi_{i,j}^\star dS = 0. \end{aligned} \tag{1.40}$$

En décomposant le tenseur des contraintes en sa partie déviatorique **S** et isostatique (P) on peut écrire :

$$\int_\Gamma \left(\sigma_{ij}n_j\right)\psi_i^\star \, dS - \int_\Omega S_{ij}\psi_{i,j}^\star dV + \int_\Omega P\psi_{k,k}^\star dV = 0. \tag{1.41}$$

En utilisant les conditions aux limites décrites dans l'équation 1.39 on peut ramener l'intégrale sur $\partial\Omega$ à une intégrale sur Γ_t. De plus, en tenant compte de la symétrie du tenseur σ_{ij} et en posant $\epsilon_{ij}^\star = \frac{1}{2}(\psi_{i,j}^\star + \psi_{j,i}^\star)$, on peut réécrire l'équation 1.40 sous la forme :

$$\int_{\Gamma_N} t_i\psi_i^\star \, dS - \int_\Omega S_{ij}\epsilon_{ij}^\star dV + \int_\Omega P\psi_{k,k}^\star dV = 0 \Leftrightarrow R_1(v_i, P) = 0. \tag{1.42}$$

En écrivant :

$$S_{ij}^{t+\Delta t} = S_{ij}^t + C_{ijkl}\dot{\epsilon_{kl}}\Delta t = S_{ij}^t + C_{ijkl}\Delta\epsilon_{kl}, \tag{1.43}$$

avec C_{ijkl} la matrice tangente calculée par la loi de comportement. Dans notre cas, c'est dans son calcul qu'intervient la résolution de la plasticité cristalline, qui sera présenté dans une prochaine section. Dans le régime de déformation purement élastique la matrice tangente peut être vue comme la matrice des constantes élastiques. Le premier résidu peut être réécrit sous la forme :

$$R_1 = \int_{\Gamma_N} t_i\psi_i^\star \, dS - \int_\Omega S_{ij}^t\epsilon_{ij}^\star dV - \int_\Omega C_{ijkl}\Delta\epsilon_{kl}\epsilon_{ij}^\star dV + \int_\Omega P\psi_{k,k}^\star dV = 0. \tag{1.44}$$

Le second résidu de la formulation mixte est obtenu en considérant :

$$\begin{aligned} P = P^t + \dot{P}\Delta t = P^t - \frac{\dot{\sigma_{kk}}\Delta t}{3} \\ P - P^t + K\dot{\epsilon_{ii}}\Delta t = 0 \\ P - P^t + K v_{i,i}\Delta t = 0, \end{aligned} \tag{1.45}$$

avec K le module de compressibilité $(2\mu + 3\lambda)$. En intégrant comme précédemment l'équation 1.45 multipliée par des fonctions tests $q^\star$ (fonctions scalaires comme la pression) on trouve :

$$R_2 = \int_\Omega \frac{P}{K\Delta t} q^\star dV - \int_\Omega \frac{P^t}{K\Delta t} q^\star dV + \int_\Omega v_{i,i} q^\star dV = 0. \tag{1.46}$$

La formulation matricielle du système formé par ces deux résidus (Eqs.1.44 et 1.46) peut s'écrire :

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_i \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B1 \\ B2 \end{pmatrix}. \tag{1.47}$$

Pour pouvoir calculer l'évolution du système de l'instant t à l'instant $t + \Delta t$ (i.e. trouver les fonctions v_i et P solutions) il faut résoudre ce système d'équations non linéaires (Eqs.1.44 et 1.46). On utilise ici la méthode de Newton-Raphson dont le principe est de partir d'un jeu de pression et de vitesses initiales v_i^0, P^0 (= 0 par exemple) et de chercher de manière itérative des corrections

$\delta v_i, \delta \mathrm{P}$ ($v_i^{n+1} = v_i^n + \delta v_i, \mathrm{P}^{n+1} = \mathrm{P}^n + \delta \mathrm{P}$) jusqu'à ce que les équations 1.44 et 1.46 soient vérifiées à une erreur fixée près (i.e. $|\mathrm{R}| \leq tol$). En pratique, le système 1.44, 1.46 est linéarisé autour des pressions et déplacements initiaux à l'aide d'un développement de Taylor à l'ordre 1 :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathrm{R}_1}{\partial v_i}\Big|_{v_i^0} & \frac{\partial \mathrm{R}_1}{\partial \mathrm{P}}\Big|_{\mathrm{P}^0} \\ \frac{\partial \mathrm{R}_2}{\partial v_i}\Big|_{v_i^0} & \frac{\partial \mathrm{R}_2}{\partial \mathrm{P}}\Big|_{\mathrm{P}^0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta v_i \\ \delta \mathrm{P} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathrm{R}_1(v_i^0, \mathrm{P}^0) \\ \mathrm{R}_2(v_i^0, \mathrm{P}^0) \end{pmatrix}. \tag{1.48}$$

Discrétisation spatiale

La résolution EF d'un problème sous-entend la projection des équations constitutives (e.g. eq1.48) dans un espace discret constitué par le maillage. Les intégrales sur le domaine Ω reviennent alors à des sommes d'intégrales élémentaires pour lesquelles les champs sont interpolés à l'intérieur des éléments par des fonctions d'interpolation $\mathrm{N}(\mathscr{X})$. Ainsi, dans le cas d'un élément tétraédrique (4 nœuds), on peut écrire :

$$\begin{aligned} \mathrm{P}(\mathscr{X}) &= \begin{pmatrix} \mathrm{N}_1 & \mathrm{N}_2 & \mathrm{N}_3 & \mathrm{N}_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{P}_1 \\ \mathrm{P}_2 \\ \mathrm{P}_3 \\ \mathrm{P}_4 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} v^x(\mathscr{X}) \\ v^y(\mathscr{X}) \\ v^z(\mathscr{X}) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathrm{N}_1 & 0 & 0 & . & & \mathrm{N}_4 & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{N}_1 & 0 & & . & 0 & \mathrm{N}_4 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{N}_1 & & & 0 & 0 & \mathrm{N}_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^x \\ v_1^y \\ v_1^z \\ . \\ . \\ . \\ v_4^x \\ v_4^y \\ v_4^z \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{1.49}$$

Lorsque les différents calculs font intervenir des dérivées, on utilise alors la dérivée des fonctions d'interpolations, la calcul d'un gradient de vitesse (en notation de Voigt car ce tenseur est symétrique) devient alors :

$$\begin{pmatrix} \nu_{1,1} \\ \nu_{2,2} \\ \nu_{3,3} \\ \nu_{2,3} \\ \nu_{3,1} \\ \nu_{1,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial x} & 0 & 0 & . & & \frac{\partial \mathrm{N}_4}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial y} & 0 & & . & 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_4}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial z} & & & 0 & 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_4}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial z} & 0 & . & & 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_4}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial z} & & . & 0 & 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_4}{\partial y} \\ \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial z} & 0 & 0 & & . & 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_4}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^x \\ v_1^y \\ v_1^z \\ . \\ . \\ . \\ v_4^x \\ v_4^y \\ v_4^z \end{pmatrix}. \tag{1.50}$$

Le choix des fonctions d'interpolation utilisées est très important car il conditionne la discrétisation spatiale du problème et peut dans certains cas rendre le problème numérique instable. Dans notre cas on utilise des fonctions d'interpolation linéaires pour la vitesse et la pression ce qui est appelé élément P1/P1 (voir figure1.26) :

$$\begin{aligned} N_1(\mathscr{X}) &= 1-\eta-\zeta-\xi, \\ N_2(\mathscr{X}) &= \xi, \\ N_3(\mathscr{X}) &= \eta, \\ N_4(\mathscr{X}) &= \zeta. \end{aligned} \tag{1.51}$$

Stabilisation par la méthode du mini-élément

Il a été montré que la formulation vitesse pression (v,P) décrite ci dessus pouvait devenir instable en utilisant une discrétisation P1/P1 [Arnold et al., 1984] c'est à dire, en utilisant des fonctions d'interpolation linéaires dites P1. Une solution pourrait être d'utiliser des fonctions d'interpolation quadratiques pour la vitesse ce qui allongerait considérablement les temps de calcul. La solution utilisée ici est la solution du mini-élément [Cao et al., 2013] ou élément P1+/P1, qui utilise un nœud supplémentaire situé au barycentre de l'élément (voir figure1.26). Dans cette formulation on ajoute un degré de liberté supplémentaire à la vitesse en décomposant cette dernière comme $v_i = v_i^l + v_i^b$, avec v_i^l la vitesse linéaire (i.e. celle décrite ci dessus) et v_i^b la vitesse "bulle" associée au nœud supplémentaire. La pression quant à elle est toujours décrite par l'intermédiaire des 4 nœuds classiques d'un élément P1.

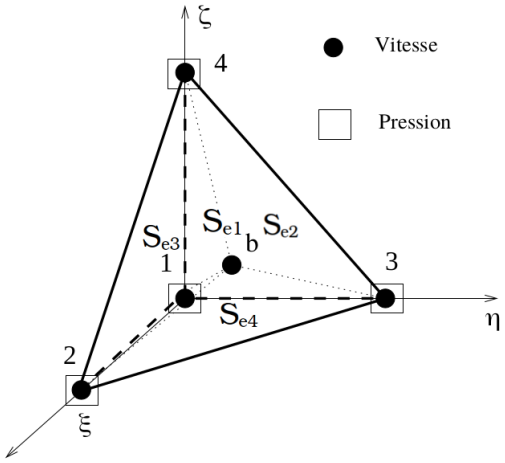


FIGURE 1.26 – Représentation de l'élément utilisé pour la discrétisation P1+/P1.

La fonction d'interpolation associée à la bulle N^b peut prendre différentes formes mais elle vaut 1 sur le nœud bulle et 0 sur les autres nœuds de l'élément. Dans notre cas on prendra la fonction d'interpolation du nœud "classique" sur le sous élément qui lui est associé :

$$N^b(\mathscr{X}) = \begin{cases} N_1(\mathscr{X}) & \text{pour } \mathscr{X} \in S_{e1}, \\ N_2(\mathscr{X}) & \text{pour } \mathscr{X} \in S_{e2}, \\ N_3(\mathscr{X}) & \text{pour } \mathscr{X} \in S_{e3}, \\ N_4(\mathscr{X}) & \text{pour } \mathscr{X} \in S_{e4}. \end{cases} \tag{1.52}$$

L'utilisation de cette méthode vient enrichir le formalisme décrit ci dessus d'un autre résidu R_b (associé à la fonction test bulle ψ_i^b) et modifie la formulation des autres résidus ($v_i = v_i^l + v_i^b$ dans 1.46 et $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\boldsymbol{l}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\boldsymbol{b}}$ dans 1.44) :

$$
\begin{aligned}
\mathrm{R}_1 &= \int_\Omega \mathrm{C}^l_{ijkl}\epsilon^l_{kl}\epsilon^{\star,l}_{ij}\,d\mathrm{V} + \int_\Omega \mathrm{C}^b_{ijkl}\epsilon^b_{kl}\epsilon^{\star,l}_{ij}\,d\mathrm{V} - \int_\Omega \mathrm{P}\psi^{\star,l}_{k,k}\,d\mathrm{V} - \int_{\Gamma_\mathrm{N}} t_i\psi^{\star,l}_i\,d\mathrm{S} + \int_\Omega \mathrm{S}^t_{ij}\epsilon^{\star,l}_{ij}\,d\mathrm{V} = 0,\\
\mathrm{R}_b &= \int_\Omega \mathrm{C}^l_{ijkl}\epsilon^l_{kl}\epsilon^{\star,b}_{ij}\,d\mathrm{V} + \int_\Omega \mathrm{C}^b_{ijkl}\epsilon^b_{kl}\epsilon^{\star,b}_{ij}\,d\mathrm{V} - \int_\Omega \mathrm{P}\psi^{\star,b}_{k,k}\,d\mathrm{V} - \int_{\Gamma_\mathrm{N}} t_i\psi^{\star,b}_i\,d\mathrm{S} + \int_\Omega \mathrm{S}^t_{ij}\epsilon^{\star,b}_{ij}\,d\mathrm{V} = 0,\\
\mathrm{R}_2 &= \int_\Omega b^l_{ij}v^l_{i,j}q^\star\,d\mathrm{V} + \int_\Omega b^b_{ij}v^b_{i,j}q^\star\,d\mathrm{V} + \int_\Omega \frac{\mathrm{P}}{\Delta t}q^\star\,d\mathrm{V} - \int_\Omega \frac{\mathrm{P}^t}{\Delta t}q^\star\,d\mathrm{V} = 0.
\end{aligned}
\tag{1.53}
$$

On peut montrer que les deux derniers termes du résidu R_b (i.e. second membre) sont nuls :

$$
\int_{\Gamma_\mathrm{N}} t_i\psi^{\star,b}_i\,d\mathrm{S} = \sum_{n=1}^{\mathrm{N}bElt}\int_{\Gamma_{e,n}} t_i\psi^{\star,b}_i\,d\mathrm{S} = 0,
\tag{1.54}
$$

car par définition les fonctions $\psi^{\star,b}_i$ sont nulles sur les bords de l'élément Γ_e,

$$
\begin{aligned}
\int_\Omega \mathrm{S}^t_{ij}\epsilon^{\star,b}_{ij}\,d\mathrm{V} &= \sum_{n=1}^{\mathrm{N}bElt}\int_{\Omega_{e,n}} \mathrm{S}^t_{ij}\psi^{\star,b}_{i,j}\,d\mathrm{V}\\
&= \sum_{n=1}^{\mathrm{N}bElt}\left(\int_{\Omega_{e,n}}\left(\mathrm{S}^t_{ij}\psi^{\star,b}_i\right)_{,j}\,d\mathrm{V} - \int_{\Omega_{e,n}}\left(\mathrm{S}^t_{ij}\right)_{,j}\psi^{\star,b}_i\,d\mathrm{V}\right)\\
&\qquad \text{or } \mathrm{S}^t_{ij} \text{ est constant par élément}\\
\int_\Omega \mathrm{S}^t_{ij}\epsilon^{\star,b}_{ij}\,d\mathrm{V} &= \sum_{n=1}^{\mathrm{N}bElt}\int_{\Omega_{e,n}}\left(\mathrm{S}^t_{ij}\psi^{\star,b}_i\right)_{,j}\,d\mathrm{V}\\
&= \sum_{n=1}^{\mathrm{N}bElt}\int_{\Gamma_{e,n}} \mathrm{S}^t_{ij}n_e\psi^{\star,b}_i\,d\mathrm{V} = 0
\end{aligned}
\tag{1.55}
$$

car encore une fois les fonctions $\psi^{\star,b}_i$ sont nulles sur les bords de l'élément.
La forme matricielle du système d'équations 1.53 peut donc s'écrire :

$$
\begin{pmatrix} \mathrm{A}11 & \mathrm{A}1b & \mathrm{A}12\\ \mathrm{A}b1 & \mathrm{A}bb & \mathrm{A}b2\\ \mathrm{A}21 & \mathrm{A}2b & \mathrm{A}22 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v^l_i\\ v^b_i\\ \mathrm{P}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathrm{B}1\\ 0\\ \mathrm{B}2\end{pmatrix},
\tag{1.56}
$$

ainsi :

$$
\begin{aligned}
\mathrm{A}b1\,v^l_i + \mathrm{A}bb\,v^b_i + \mathrm{A}b2\mathrm{P} &= 0\\
v^b_i = \mathrm{A}bb^{-1}\mathrm{A}b1\,v^l_i + \mathrm{A}bb^{-1}\mathrm{A}b2\mathrm{P}&.
\end{aligned}
\tag{1.57}
$$

Ces dernières égalités permettent de condenser le système 1.56 et de le réécrire sous la forme [Cao et al., 2013] :

$$
\begin{pmatrix} \mathrm{A}11 + \mathrm{A}1b\mathrm{A}bb^{-1}\mathrm{A}b1 & \mathrm{A}12 + \mathrm{A}1b\mathrm{A}bb^{-1}\mathrm{A}b2\\ \mathrm{A}21 + \mathrm{A}2b\mathrm{A}bb^{-1}\mathrm{A}b1 & \mathrm{A}22 + \mathrm{A}2b\mathrm{A}bb^{-1}\mathrm{A}b2\end{pmatrix}\begin{pmatrix} v^l_i\\ \mathrm{P}\end{pmatrix} = 0,
\tag{1.58}
$$

Ce qui peut encore être simplifié grâce au raisonnement 1.55, qui montre en fait que pour tout tenseur $\mathbf{C}$ constant par élément, $\int_\Omega \mathbf{C}\epsilon^{\star,b}_{ij}\,d\mathrm{V} = 0$. Ainsi les termes $\mathrm{A}1b$ et $\mathrm{A}b1$ sont nuls car $\boldsymbol{\epsilon}^{\boldsymbol{l}}$ est constant par élément. Le système matriciel final à résoudre est donc [Cao et al., 2013] :

$$
\begin{pmatrix} \mathrm{A}11 & \mathrm{A}12\\ \mathrm{A}21 & \mathrm{A}22 + \mathrm{A}2b\mathrm{A}bb^{-1}\mathrm{A}b2\end{pmatrix}\begin{pmatrix} v^l_i\\ \mathrm{P}\end{pmatrix} = 0,
\tag{1.59}
$$

1.4.2.2 Le formalisme level-set

Le formalisme level-set (LS) [Merriman et al., 1994; Osher and Sethian, 1988; Zhao et al., 1996] utilisé ici est développé dans la CimLib depuis une dizaine d'années [Bernacki et al., 2009] dans le but de modéliser les évolutions microstructurales dans les métaux lors de leur mise en forme. Une partie de la librairie EF utilisée par ce formalisme est, à l'heure actuelle exploitée pour en faire un logiciel (appelé Digimu https ://www.transvalor.com/fr/digimu), à vocation tant universitaire qu'industrielle. Les développements méthodologiques et numériques autour de ce logiciel sont nombreux et bénéficient du soutien d'une Chaire Industrielle ANR (https ://chaire-digimu.cemef.mines-paristech.fr/), dont les partenaires industriels sont impliqués dans le test de nouvelles fonctionnalités, d'études couplées expérience/modélisation, ou encore dans la formalisation de nouveaux besoins. Ce cadre numérique, permettant de simuler de nombreux mécanismes d'évolutions microstructurales telles que la migration de joint de grains [Maire et al., 2016] ou la nucléation [Maire et al., 2017], n'avait jusqu'à présent jamais été utilisé dans le cadre des sciences de la Terre.

1.4.2.2.a Description de la microstructure

La simulation des évolutions microstructurales nécessite dans un premier temps d'être capable de décrire les joints de grains dans un cadre numérique. Deux grands types d'approches sont possibles pour cela : la description explicite des interfaces pour laquelle on vient placer des nœuds du maillage sur les joints de grains (comme les méthodes vertex [Weygand et al., 2001]) ou une description implicite des interfaces en utilisant des fonctions permettant de localiser les joints de grains (comme les méthodes phase field [Chen and Yang, 1994]). C'est à cette dernière catégorie qu'appartiennent les méthodes LS pour lesquelles on définit des fonctions distances (LS) ψ représentant la distance aux joints de grains Γ. Elles sont définies par convention [Bernacki et al., 2009], positives à l'intérieur du grain qu'elles représentent et négatives partout ailleurs. Les joints de grains Γ_i bordants le grain i sont alors repérés par les isovaleurs 0 de la fonction LS ψ_i :

$$\begin{cases} \psi_i(\mathscr{X}) = d_i(\mathscr{X}, \Gamma), x \in \Omega \\ \Gamma_i = \left\{ x \in \Omega, \psi_i(\mathscr{X}) = 0 \right\}, \end{cases} \tag{1.60}$$

où d_i représente la plus courte distance du point $\mathscr{X}$ aux joints de grains bordants le grain i. Le polycristal est ainsi représenté par un ensemble de fonctions LS attribuées à chacun des grains et les joints de grains de la microstructure complète peuvent être visualisés en calculant le maximum de toutes les fonctions LS (voir figure 1.27).

L'utilisation de fonctions distances pour décrire les joints de grains est avantageux car ces fonctions possèdent des propriétés géométriques intéressantes :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}\psi &= -\vec{n} \\ \Delta\psi &= -\kappa, \end{aligned} \tag{1.61}$$

où $\vec{n}$ est la normale unitaire sortante à l'interface et κ est la courbure (et la trace du tenseur de courbure en 3D).
Avec cette description de la microstructure, la migration de joint de grains est alors simulée en déplaçant les fonctions LS et les phénomènes de DRX tels que la nucléation peuvent être modélisés en introduisant de nouvelles fonctions LS représentant les germes.

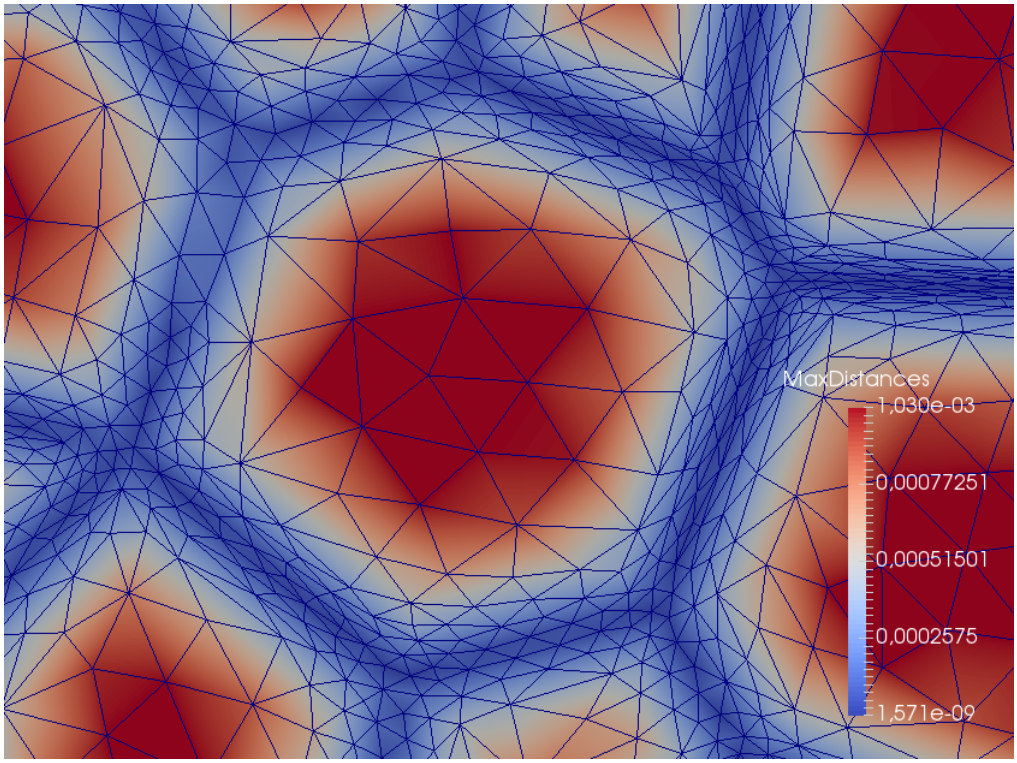


FIGURE 1.27 – Représentation d'un réseau de joint de grains par le maximum des fonctions LS représentant les différents grains.

1.4.2.2.b Migration de joint de grains

La migration de joint de grains est modélisée par déplacement les fonctions LS en utilisant l'équation de convection de la LS [Osher and Sethian, 1988] :

$$\begin{cases} \frac{d\psi_i}{dt} = \frac{\partial \psi_i}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}\psi_i = 0, \\ \psi_i(t=0) = \psi_i^0, \end{cases} \tag{1.62}$$

où ψ_i^0 représente les valeurs initiales des fonctions LS. Toute la physique de la migration de joint de grains doit alors être incluse dans le terme de vitesse $\vec{v}$ à appliquer aux fonctions LS. Cette vitesse est généralement exprimée en utilisant les équations 1.3 et 1.4 (i.e. produit de la mobilité de joints de grains et des pressions motrices).

Croissance de grains sans énergie stockée

Dans le cas d'une croissance de grains sans énergie stockée, la seule force à prendre en compte est la force capillaire ($\gamma\kappa$). Dans ce cas, en utilisant les propriétés géométriques initiales des fonctions LS définies comme des fonctions distances et $\vec{\nabla}\psi_i.\vec{\nabla}\psi_i = 1$, l'équation 1.62 peut se réécrire sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} - M\gamma\Delta\psi_i = 0 \\ \psi_i(t=0) = \psi_i^0. \end{cases} \tag{1.63}$$

Cette équation constitue la formulation forte du problème de croissance de grains par capillarité, elle correspond à une équation de diffusion telle que présentée dans la section 1.4.2.1.a pour

laquelle $\rho = 1$, $\lambda = M\gamma$ et $S = 0$. Ainsi le traitement EF de cette formulation est le même que celui présenté dans la section 1.4.2.1.a.

Croissance de grains avec énergie stockée

Dans le cas d'une croissance de grains avec énergie stockée il faut rajouter à l'expression de la vitesse un terme dépendant de la différence de densité de dislocations $\Delta\rho_i$:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} - M\gamma\Delta\psi_i + \vec{v}^{\rho}{}_i.\vec{\nabla}\psi_i = 0 \\ \vec{v}^{\rho}{}_i = M\tau\Delta\rho_i\vec{n}_i \\ \psi_i(t=0) = \psi_i^0. \end{cases} \tag{1.64}$$

Dans la nature le terme $\tau\Delta\rho$ est une différence d'énergie stockée locale, elle peut varier le long d'un joint de grains c'est d'ailleurs ce qui peut être responsable de la nucléation par bourgeonnement (voir section 1.2.3.3). Cependant, en admettant qu'on dispose d'un champ d'énergie stockée hétérogène, le calcul de la différence d'énergie locale de part et d'autre des joints de grains sur un maillage EF n'est pas trivial. Comme le maillage utilisé n'est pas conforme (i.e. pas de nœuds sur les joints de grains), le champ d'énergie stockée utilisé pour le calcul de la différence d'énergie ne peut être défini que sur les nœuds du maillage. Se pose alors la question de la définition du gradient à l'interface. Ces questions sont d'autant plus compliquées au niveau des jonctions multiples. La solution la plus simple consiste alors à moyenner l'énergie stockée par grain [Maire et al., 2017], ou par interface [Ilin et al., 2018] ce qui rend le calcul de $\vec{v}^{\rho}{}_i$ bien plus accessible.

Conditions aux limites et ancrage de Smith-Zener

Les conditions aux limites appliquées pour simuler la croissance de grains sont des conditions aux limites de Neumann telles que :

$$\vec{\nabla}\psi_i(\mathscr{X}) \cdot \vec{n}_{\partial\Omega} = 0, \text{ pour } \mathscr{X} \in \partial\Omega, \tag{1.65}$$

où $\partial\Omega$ représente les bords du domaine de calcul et $\vec{n}_{\partial\Omega}$ la normale unitaire à ceux ci. Ces conditions aux limites imposent aux fonctions LS d'évoluer vers une position orthogonale aux contours du domaine. Cette évolution qui ne représente pas de mécanisme physique peut avoir des conséquences sur la cinétique de croissance lorsque la proportion de joints de grains en contact avec les bords augmente. Il faut ainsi prendre garde à conserver un nombre de grains suffisamment important dans le domaine de calcul pour que la cinétique de croissance ne soit pas influencée par les conditions aux limites.

L'approche LS est très intéressante pour la modélisation de l'ancrage de Smith-Zener (voir section 1.2.1.4) car elle ne requiert par d'approximations pour décrire la force d'ancrage exercée par la particule de seconde phase (PSP) [Agnoli et al., 2014; Scholtes et al., 2016]. L'angle d'interaction α entre le joint de grains et la PSP résulte d'un équilibre entre les différentes énergies de surface mises en jeu comme exprimé dans l'équation 1.6. On peut facilement imposer cet angle dans la simulation en représentant les PSP par des trous dans le maillage, il suffit alors d'imposer comme conditions aux limites l'angle α entre la normale au joint de grains et la normale à la PSP. En décrivant toutes les conditions aux limites comme évoqué ci dessus, on peut imposer un angle d'interaction entre le joint de grains et la normale à la PSP de 0° ce qui correspond à l'égalité des énergies de surface γ_{p1} , γ_{p2} et est synonyme du caractère incohérent du précipité dans la matrice.

1.4.2.2.c Nucléation

Dans le formalisme LS actuel, le critère de nucléation est un critère basé sur une densité de dislocations critique ρ^{cr} à dépasser pour avoir une probabilité non-nulle de nucléation. Tous les modèles de DRX ont besoin de définir une vitesse de nucléation [Cross and Skemer, 2019]. Dans notre formalisme cette vitesse représente un volume de germe par unité de temps ($\dot{V}$) et est calculée comme [Maire et al., 2017] :

$$\dot{V} = K_g \Phi \Delta t, \tag{1.66}$$

où Φ représente le volume total du matériau vérifiant $\rho_i > \rho^{cr}$ et où $K_g(m.s^{-1})$ est un coefficient de probabilité de nucléation. Le paramètre K_g est un des paramètres (avec ρ^{cr}) qui jouent au premier ordre sur la DRX, comme il dépend de la température et de la vitesse de déformation son identification n'est pas chose aisée.
La taille de germes est généralement fixée en respectant le critère de Bailey and Hirsch [1962] qui donne une taille suffisante au germe pour que la force motrice dérivant de la différence d'énergie stockée puisse contrer la force capillaire et que le germe ne disparaisse pas :

$$R^{Nucl} = w \frac{2\gamma}{\rho^{cr}\tau}, \tag{1.67}$$

où w est un facteur de sécurité généralement supérieur à 1.

1.4.2.2.d Détails méthodologiques

L'écriture d'un code numérique pour modéliser un phénomène physique nécessite la mise en place de nombreux petits ajustements qui permettent de mieux représenter les mécanismes physiques, de limiter le temps de calcul ou la mémoire utilisée. Ces astuces sont nombreuses et parfois complexes, elles ne seront pas toutes présentées, seules les principales sont détaillées dans la suite.

Génération d'une microstructure numérique

La microstructure initiale dont on simule la croissance peut être générée de plusieurs manières, une première méthode est la numérisation d'une image (expérimentale ou non) puis l'immersion de celle-ci par un algorithme qui attribue une zone de l'image possédant un identifiant unique (ou une orientation) à un grain. Une autre méthode est de générer numériquement une microstructure en créant de toutes pièces les grains qui la composent. Cette génération, basée sur l'empilement compact de particules, peut être réalisée à l'aide d'un algorithme de tesselation de Voronoï ou de Laguerre-Voronoï [Hitti and Bernacki, 2013]. La méthode de tesselation de Voronoï consiste à générer aléatoirement des sites (germes) avec une densité donnée puis à tracer les plans médians entre les sites et enfin à arrêter ces plans à l'intersection avec les autres plans. Les cellules de Voronoï sont alors définies par des espaces où chaque point situé dans la cellule est plus proche de son germe que de tout les autres germes. Cette approche permet de générer un empilement compact de polygones en 2D ou de polyèdres en 3D tout en maîtrisant la taille moyenne des particules par l'intermédiaire de la densité de germes.
Cependant cette méthode n'est pas suffisante pour respecter une distribution de taille de grains, pour cela on peut utiliser la méthode de tesselation de Laguerre-Voronoï [Hitti and Bernacki, 2013] ou encore de Voronoï pondéré. Le principe de cette méthode est d'attribuer aux germes un certain « poids » qui peut respecter une distribution donnée. Le plan entre deux germes n'est plus forcément médian mais se trouve plus proche du germe dont le poids est le plus faible. Pour le reste, c'est à dire la génération des cellules, la méthode est similaire à celle de Voronoï exposée ci

dessus. Avec cette approche, il est tout à fait possible de générer une microstructure dont la distribution de taille de grains est normale, log-normale, bimodale ou encore quelconque, respectant un histogramme de distribution donné.
Ce type de méthodologie peut être étendu à la génération de grains respectant également une distribution de forme [Ilin and Bernacki, 2016]. Cependant cette méthode ne permet pas de contrôler la distribution des coordinations dans la microstructure générée.

Fonctions level-set containers

Dans le formalisme développé ci dessus, chaque grain est représenté par une fonction LS ce qui implique de résoudre à chaque incrément temporel autant d'EDP qu'il y a de grains dans la microstructure. Pour limiter le temps de calcul et l'espace de stockage, il a donc été choisi de représenter plusieurs grains par une seule fonction appelée fonction LS container [Scholtes et al., 2015]. Les grains représentés par la même fonction ne doivent pas être trop proches car si lors d'une étape de transport de la fonction ils venaient à être en contact, cela entraînerait un phénomène de coalescence numérique, les deux grains n'en formeraient plus qu'un seul. Pour éviter cette coalescence qui ne représente aucun mécanisme physique, le critère utilisé pour répartir les grains dans les fonctions LS containers est un critère de distance minimum entre deux boîtes contenant chacune un grain (voir figure 1.28) associé à une notion de voisinage dans le graphe de tesselation.

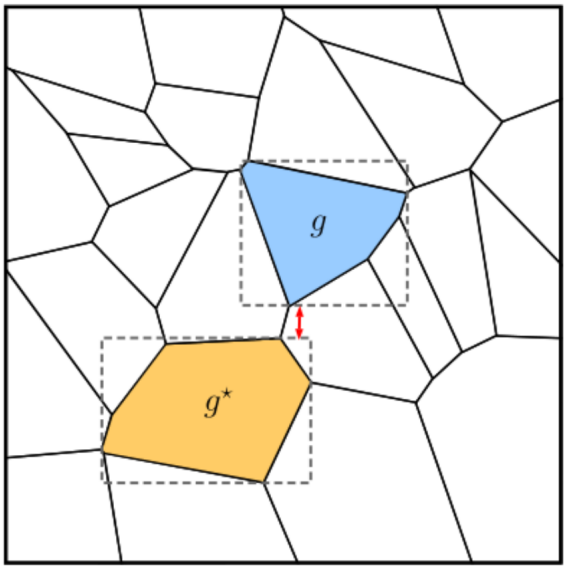


FIGURE 1.28 – Illustration du critère de distance pour l'utilisation de fonctions LS containers. Pour que les deux grains g et $g^\star$ puissent appartenir à la même fonction la distance $d(g, g^\star)$ représentée par la flèche rouge doit être supérieur à une valeur bien définie [Scholtes et al., 2015].

Grâce à cette astuce une microstructure de plusieurs milliers de grains peut être représentée par moins d'une dizaine de fonctions LS containers ce qui réduit considérablement le temps de calcul. Comme la microstructure évolue au cours du calcul, il est nécessaire à chaque pas de temps de vérifier si deux grains appartenant à la même fonction LS container ne sont pas trop proches et ne risquent pas de coalescer. Si c'est le cas il faut redistribuer les grains dans d'autres fonctions LS containers, c'est l'opération de recoloration.
Il faut également vérifier que chaque fonction n'est pas devenue obsolète, c'est à dire qu'elle ne représente plus aucun grain auquel cas il faut la supprimer de la boucle de résolution.

Comme les interfaces sont toujours localisées le long des isovaleurs 0 des fonctions LS, pour localiser tous les joints de grains, il suffit de rechercher l'isovaleur 0 de la fonction $\psi = max(\psi_1, \psi_2, ..)$ avec ψ_i les fonctions LS containers. En pratique, le maximum des fonctions LS containers ne vaut pas 0 mais tend vers 0 aux interfaces (maillages EF non-conformes), on cherche alors $\psi < \varepsilon$ avec ε faible.

Gestion des joints multiples

La résolution du problème de transport des fonctions LS peut entraîner une décohésion du joint ou encore une superposition des grains, ce type de phénomène arrive très souvent au niveau des jonctions triples car localement les rayons de courbure sont très grands et on tend à « ouvrir » la jonction (figure 1.29). Même si la cinétique de la diffusion des joints de grains est décrite correctement, ces phénomènes ne traduisent pas un mécanisme physique, la décohésion peut par exemple entraîner la nucléation numérique d'un grain ce qui serait un artefact de calcul.

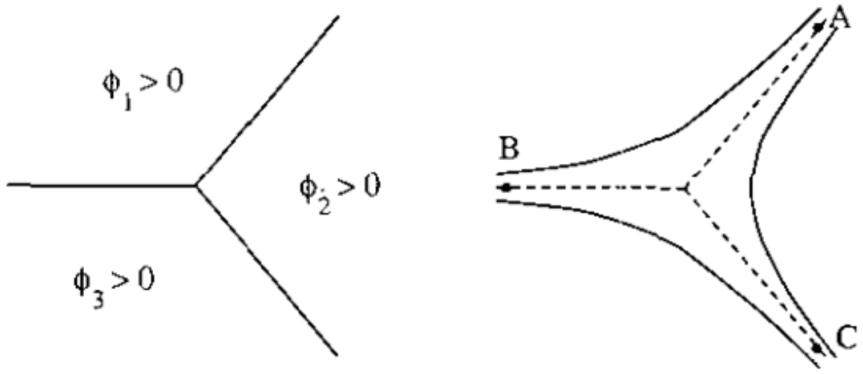


FIGURE 1.29 – A gauche, jonction triple avant le transport des fonctions LS, à droite, la même jonction après le transport [Merriman et al., 1994]. On observe une décohésion de la jonction et le but du traitement exposé ici est de retourner à un état semblable à celui de la figure de gauche.

On a donc recours à un traitement qui permet de refermer la jonction en appliquant la relation suivante aux fonctions LS après le transport de celles-ci [Zhao et al., 1996] :

$$\psi_i = 0.5\left(\psi_i - max_{i \neq j}\left(\psi_j\right)\right). \tag{1.68}$$

Ce traitement permet de fermer les espaces vides créés au niveau des jonctions triples en attribuant la partie du vide la plus proche de chaque joint au grain situé derrière cette interface.

Réinitialisation

Un des principales inconvénients de la méthode LS tient au fait qu'après une phase de transport, les fonctions LS perdent leur propriété métrique (elles ne sont plus des fonctions distances). Ceci peut devenir très rapidement problématique car ses propriétés géométriques ne sont alors plus valables ce qui peut entraîner des erreurs importantes. Pour pallier à ce problème, après chaque phase de transport des fonctions LS, on effectue une opération de réinitialisation qui permet de restaurer les propriétés métriques des fonctions. La procédure de réinitialisation doit être équivalente à résoudre l'équation suivante :

$$\forall t \begin{cases} ||\vec{\nabla}\psi(x,t)|| = 1, x \in \Omega \\ \psi(x,t) = 0, x \in \Gamma \end{cases} \tag{1.69}$$

Il existe différentes approches de réinitialisation depuis la méthode Fast-Marching [Sethian, 1996], pour laquelle on impose un gradient unitaire au niveau des interfaces et les valeurs de la fonction sur tout le maillage sont calculées par propagation à partir de l'interface, jusqu'aux méthodes de convection-réinitialisation pour lesquelles la phase de transport des fonctions LS est couplée à une réinitialisation [Bernacki et al., 2009]. Le formalisme utilisé ici se sert d'une méthode de réinitialisation directe [Sussman et al., 1994] dont le principe général est de reconstruire complètement la fonction LS en discrétisant, dans un premier temps, l'interface en segments rectilignes puis en calculant pour chaque nœud la distance aux segments en ne conservant au final que la distance la plus courte (voir figure 1.30).

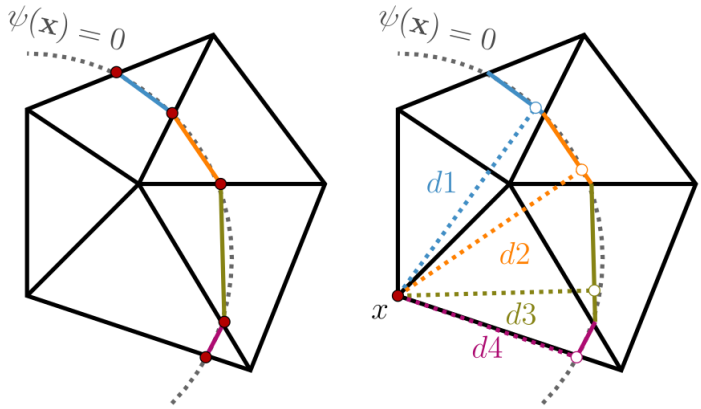


FIGURE 1.30 – Illustration de la méthode de réinitialisation directe pour des éléments P1 d'après [Shakoor et al., 2015], discrétisation de l'interface (gauche), calcul des distances (droite).

Cette méthode de réinitialisation directe, est implémentée dans un cadre permettant une parallélisation efficace [Shakoor et al., 2015] ce qui contrebalance le plus gros inconvénient des méthodes de réinitialisation directes réputées coûteuses en temps de calcul.

1.4.2.3 Plasticité cristalline

La description et la modélisation de la déformation plastique d'un matériau cristallin peut se faire à différentes échelles, depuis la description "champ complet" mise en place dans les calculs ab-initio, dynamique moléculaire ou dynamique des dislocations (DD, [Durinck et al., 2007]) jusqu'à des approches simplifiées comme les modèles de type viscoplastic self consistent (VPSC, [Knoll et al., 2009]) qui traitent le cas des polycristaux, en passant par des approches de plasticité cristalline comme celle utilisée ici [Marin, 2006].
Dans le premier type de modèles les dislocations sont décrites individuellement, leurs mouvements, et donc leurs contributions à la déformation plastique, sont calculés en tenant compte de la cristallochimie du cristal et des interactions qu'elles exercent et subissent entre elles. Ce type d'approche, bien que permettant une description précise de la plasticité du cristal, est coûteuse en terme de ressources numériques et est difficilement applicable à des échelles spatiales plus importantes (i.e. l'échelle du polycristal). Cependant les résultats de DD peuvent permettre de "nourrir" d'autres types de modèles dans lesquels la déformation plastique est décrite de manière plus moyennée par l'intermédiaire de la contribution des différents systèmes de glissement du cristal.

La physique de la déformation dans la plasticité cristalline

Pour modéliser le comportement mécanique d'un cristal en réponse à une sollicitation, un modèle de plasticité cristalline (CP) nécessite une liste des systèmes de glissement existant dans le cristal considéré ainsi qu'un jeu d'équations décrivant : le comportement élastique du cristal (constitutive law), une loi d'écoulement (flow rule) et de durcissement (hardening rule).
Le comportement élastique du cristal peut être décrit par le tenseur d'ordre 4 des constantes élastiques $\mathbf{C}$ qui permet de relier le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ au tenseur des déformations élastiques $\boldsymbol{\epsilon}^{\boldsymbol{e}}$ par :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^{\boldsymbol{e}}\boldsymbol{\epsilon}^{\boldsymbol{e}}. \tag{1.70}$$

La loi d'écoulement permet de décrire la vitesse de déformation associée à un système de glissement $\dot{\gamma}^{\alpha}$ pour une contrainte résolue τ^{α} donnée avec α décrivant les différents systèmes de glissement. La contrainte résolue (ou encore projetée) est obtenue en faisant le produit scalaire entre le tenseur des contraintes déviatoriques $\mathbf{S}$ et le tenseur de Schmid P^{α}_{ij} qui est lui même défini par $m^{\alpha} \otimes n^{\alpha}$ avec m^{α} le vecteur définissant la direction de glissement (i.e. le vecteur de Burgers normalisé) et n^{α} la normale unitaire au plan de glissement :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}^{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{S}m^{\alpha} \otimes n^{\alpha} = \mathbf{S}\mathbf{P}^{\alpha} \\ \tau^{\alpha} = \mathrm{S}_{ij}\mathrm{P}^{\alpha}_{ij}, \end{aligned} \tag{1.71}$$

Les lois d'écoulement sont généralement des fonctions du type :

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = f(\tau^{\alpha}, \tau^{\alpha}_{c}..), \tag{1.72}$$

où τ^{α}_{c} est la contrainte critique résolue (critical resolved shear stress - CRSS -) (i.e. pour $|\tau^{\alpha}| < \tau^{\alpha}_{c}$ le système de glissement α n'est pas activé).
Les lois de durcissement quant à elles, décrivent l'augmentation de la résistance au glissement d'un système de glissement au cours de la déformation. Généralement, elles traduisent ce durcissement par une augmentation du CRSS en fonction de différentes variables comme le taux de glissement total γ ou encore la densité de dislocations ρ :

$$\tau^{\alpha}_{c} = f(\gamma, \dot{\gamma}^{\alpha}, \rho..). \tag{1.73}$$

Dans la perspective de modéliser des évolutions microstructurales telles que la DRX ou la croissance de grains avec énergie stockée, décrire le durcissement comme une fonction de la densité de dislocations présente un fort intérêt. En effet, cela permet justement d'avoir accès à la densité de dislocations (et ce jusqu'à un degré de précision rendant compte des hétérogénéités intragranulaires) et de l'utiliser dans la description des mécanismes de recristallisation à l'échelle mésoscopique (échelle du grain).

Formulation de la CP

Le formalisme de CP utilisé est basé sur la formulation de trois résidus traduisant respectivement l'équilibre des déformations, l'évolution de la rotation élastique et l'évolution des résistances des systèmes de glissement (CRSS). Seul le premier résidu sera présenté en détail ici car il intervient dans le calcul de la matrice tangente, la rotation élastique étant calculée à l'aide d'un schéma de carte exponentielle [Marin and Dawson, 1998] et l'évolution des CRSS étant dictée par une loi de durcissement telle que présentée dans la section 1.2.3.1.
On peut exprimer un équilibre des déformations en écrivant [Marin, 2006] :

$$\Delta \mathrm{dev}\left(\epsilon_{ij}\right) = \Delta \mathrm{dev}\left(\epsilon^{e}_{ij}\right) + \Delta \mathrm{dev}\left(\epsilon^{p}_{ij}\right), \tag{1.74}$$

où dev() représente l'opérateur déviatorique, $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\varepsilon^e}$ et $\boldsymbol{\varepsilon^p}$ représentent les déformations totale, élastique et plastique respectivement. Écrite sous la forme résiduelle et en remplaçant les termes par leurs expressions on obtient :

$$\mathrm{R}_{ij} = \left(\mathrm{C}^{e,d}_{ijkl}\right)^{-1} \mathrm{S}^{t+\Delta t}_{kl} - \mathrm{dev}\left(\epsilon^{e,(t+\Delta t),\star}_{ij}\right) + \Delta t \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(t+\Delta t),\alpha} \mathrm{P}^{\alpha}_{ij} \tag{1.75}$$

où $\mathbf{C^{e,d}}$ est la matrice des constantes élastiques déviatoriques et $\mathrm{dev}\left(\varepsilon^{e,(t+\Delta t),\star}\right)$ est le prédicteur des déformations élastiques déviatoriques calculé comme :

$$\mathrm{dev}\left(\epsilon^{e,(t+\Delta t),\star}_{ij}\right) = \Delta\Omega_{ik}\mathrm{dev}\left(\epsilon^{e,t}_{kl}\right)\Omega\mathrm{R}_{jl} + \Delta t \mathrm{sym}\left(\mathrm{L}_{ij}\right), \tag{1.76}$$

où $\boldsymbol{\Omega}$ est la rotation élastique, $\mathrm{dev}\left(\boldsymbol{\varepsilon^{e,t}}\right)$ est la déformation élastique déviatorique à l'instant t, sym() représente l'opérateur partie symétrique et $\mathbf{L}$ est le tenseur gradient de vitesse.
Cette équation est résolue en utilisant la méthode de Newton-Raphson ce qui implique la linéarisation du résidu tel que :

$$\frac{\partial \mathrm{R}_{ij}}{\partial \mathrm{S}_{mn}} \Delta \mathrm{S}_{mn} = -\mathrm{R}_{ij}\Big|_{\mathrm{S}_{mn}}, \tag{1.77}$$

où :

$$\frac{\partial \mathrm{R}_{ij}}{\partial \mathrm{S}_{mn}} = \left(\mathrm{C}^{e,d}_{ijkl}\right)^{-1} + \Delta t \sum_{\alpha} \frac{\partial \dot{\gamma}^{\alpha}}{\partial \tau^{\alpha}} \frac{\partial \tau^{\alpha}}{\partial \mathrm{S}_{mn}} \mathrm{P}^{\alpha}_{ij}. \tag{1.78}$$

D'après l'équation 1.71, $\frac{\partial \tau^{\alpha}}{\partial \mathrm{S}_{mn}} = \mathrm{P}^{\alpha}_{mn}$

$$\frac{\partial \mathrm{R}_{ij}}{\partial \mathrm{S}_{mn}} = \left(\mathrm{C}^{e,d}_{ijkl}\right)^{-1} + \Delta t \sum_{\alpha} \frac{\partial \dot{\gamma}^{\alpha}}{\partial \tau^{\alpha}} \mathrm{P}^{\alpha}_{mn} \mathrm{P}^{\alpha}_{ij}, \tag{1.79}$$

Cette expression n'est pas seulement utilisée dans la résolution non-linéaire de la CP car elle est une partie de la matrice tangente C_{ijkl} utilisée pour coupler la plasticité cristalline aux EF (voir section 1.4.2.1.b) :

$$\mathrm{C}_{ijkl} = \frac{1}{\mathrm{J}^{e,(t+\Delta t)}} \left(\frac{\partial \mathrm{R}_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\right)^{-1}, \tag{1.80}$$

où $\mathrm{J}^{e,(t+\Delta t)} = \det\left(\mathbf{1} + \boldsymbol{\epsilon}^{e,(t+\Delta t)}\right)$ est le Jacobien élastique.

1.4.2.4 Plasticité cristalline réduite

En utilisant un formalisme de plasticité cristalline classique [Marin, 2006], on considère le glissement de boucles de dislocations dans leur plan de glissement, la montée et les spécificités des dislocations (vis, coin, mixte) ne sont pas prises en compte (tous les types de dislocations peuvent évoluer dans une boucle). D'autres mécanismes de déformation comme le GBS ou le fluage diffusion ne sont pas pris en compte. Pour les matériaux possédant suffisamment de plans de glissement pour satisfaire le critère de Von Mises et fermer la surface d'écoulement cela ne pose généralement pas de problème car on peut accommoder tout type de déformation par glissement de dislocations. Cependant cela peut être problématique dans le cas de cristaux dont la surface d'écoulement n'est pas fermée, ce qui est le cas de l'olivine, qui comporte 3 systèmes de glissement linéairement indépendants et dont la combinaison ne permet pas d'accommoder la déformation par glissement de dislocations dans toutes les directions. Ainsi, en utilisant un formalisme de type

CPFEM (crystal plasticity finite element method) classique, les cristallites "mal" orientées par rapport à la contrainte ne pourront se déformer que de manière élastique ce qui peut ensuite poser problème lors de la résolution EF. Pour pallier à ce problème, on peut utiliser une formulation de type plasticité cristalline réduite [Maresca et al., 2016] qui propose d'accommoder les déformations non couvertes par la liste de systèmes de glissement par un mécanisme de relaxation (figure 1.31).

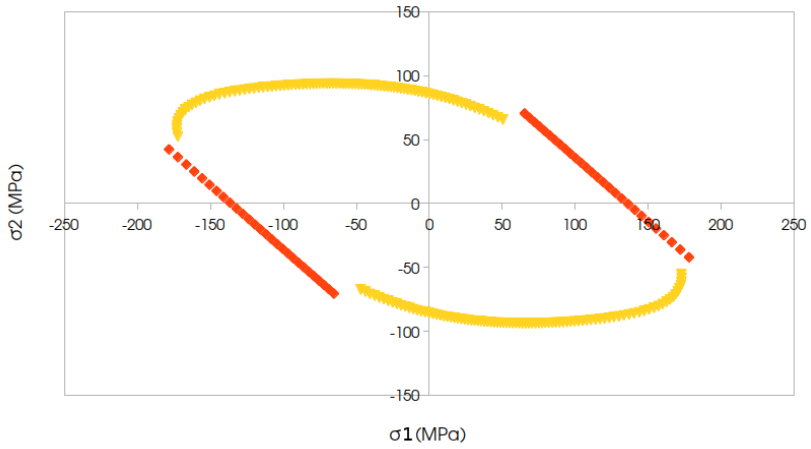


FIGURE 1.31 – Illustration de la coupe de la surface d'écoulement en plasticité cristalline réduite, les parties oranges représentent l'espace des déformations couvert par les systèmes de glissement et pour lequel une formulation de plasticité cristalline standard est utilisée, les parties jaunes correspondent à l'espace des déformations couvert par le mécanisme de relaxation.

La contribution à la déformation de ce mécanisme de relaxation $\boldsymbol{\varepsilon}^{\boldsymbol{rel}}$ peut être directement ajoutée à la déformation plastique [Maresca et al., 2016] :

$$\varepsilon_{ij}^{p} = \varepsilon_{ij}^{rel} + \Delta t \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(t+\Delta t),\alpha} \mathrm{P}_{ij}^{\alpha}. \tag{1.81}$$

Pour pouvoir accommoder n'importe quelle déformation déviatorique, 5 systèmes de glissement linéairement indépendants sont nécessaires, 2 pour les composantes diagonales (la troisième est le complément pour que la trace soit nulle) et 3 pour les composantes cisaillantes (les trois autres sont symétriques). Pour représenter la partie de l'espace des déformations couverte par une liste de systèmes de glissement, il faut chercher une base de tenseurs linéairement indépendants ($\mathbf{M}^{\boldsymbol{\beta}}$) et orthonormale correspondant à la base des ns tenseurs de Schmid $\mathbf{P}^{\boldsymbol{\alpha}}$ telle que :

$$\sum_{\alpha=1}^{ns} \lambda^{\alpha} \mathbf{P}^{\boldsymbol{\alpha}} = \sum_{\beta=1}^{\mathrm{N}} \mu^{\beta} \mathbf{M}^{\boldsymbol{\beta}}, \tag{1.82}$$

où λ^{α} et μ^{β} sont des réels non nuls. Lorsque tous les systèmes de glissement sont linéairement indépendants $ns = \mathrm{N}$, dans un cas plus général, on a $ns > \mathrm{N}$. On peut ainsi définir un tenseur d'ordre 4 ($\mathbb{P}$) qui projette un tenseur d'ordre 2 (comme le tenseur des contraintes) dans l'espace des déformations qui n'est pas couvert par les tenseurs de Schmid :

$$\mathbb{P} = \mathbb{1} - \sum_{\beta=1}^{\mathrm{N}} \left(\mathbf{M}^{\boldsymbol{\beta}}\right)^{\mathbf{T}} \otimes \left(\mathbf{M}^{\boldsymbol{\beta}}\right), \tag{1.83}$$

où $\mathbb{1}$ représente l'identité d'ordre 4. Lorsque la liste de systèmes de glissement couvre tout l'espace des déformations, $\sum_{\beta=1}^{N} \left(\mathbf{M^{\beta}}\right)^{\mathbf{T}} \otimes \left(\mathbf{M^{\beta}}\right) = \mathbb{1}$, le projecteur $\mathbb{P}$ est nul et la formulation de plasticité cristalline reste inchangée.
Dans la suite on écrira les tenseurs d'ordre 2 projetés dans cet espace comme $\mathbf{A}^{\mathbb{P}} = \mathbf{A} : \mathbb{P}$, où : représente la double contraction.

On peut ainsi écrire une nouvelle contribution à la déformation totale découlant de l'activation d'un mécanisme plastique de relaxation ($\boldsymbol{\varepsilon^{iso}}$) pour les parties de l'espace des déformations non couvertes par les systèmes de glissement :

$$\boldsymbol{\varepsilon^{rel}} = \Delta t \dot{\varepsilon}^{rel} \frac{3}{2\mathrm{S}_{eq}} \mathbf{S}^{\mathbb{P}} \tag{1.84}$$

où,

$$\mathrm{S}_{eq} = \left(\frac{3}{2} \mathbf{S}^{\mathbb{P}} : \mathbf{S}^{\mathbb{P}} \right)^{\frac{1}{2}}. \tag{1.85}$$

La contribution de ce mécanisme à la déformation du système doit également être prise en compte dans le calcul de la matrice tangente en y ajoutant $\frac{\partial \varepsilon_{ij}^{rel}}{\partial \mathrm{S}_{kl}}$.

Le contexte de la thèse, les concepts physiques et les méthodes numériques ayant été introduits, on va maintenant rentrer dans le cœur de la thèse et se pencher sur la modélisation des évolutions microstructurales dans les roches du manteau terrestre.

1.5 Références

Agnoli, A., Bernacki, M., Logé, R. E., Franchet, J.-M., Laigo, J., and Bozzolo, N. (2012). Understanding and modeling of gain boundary pinning in inconel718. In *Superalloys 2012 : The 12th International Symposium on Superalloys*, pages p–73. 12

Agnoli, A., Bozzolo, N., Logé, R., Franchet, J.-M., Laigo, J., and Bernacki, M. (2014). Development of a level set methodology to simulate grain growth in the presence of real secondary phase particles and stored energy–application to a nickel-base superalloy. *Computational Materials Science*, 89 :233–241. 45

Andrault, D., Bouhifd, M., Itie, J., and Richet, P. (1995). Compression and amorphization of (mg, fe) 2 sio 4 olivines : an x-ray diffraction study up to 70 gpa. *Physics and Chemistry of Minerals*, 22(2) :99–107. 19

Arnold, D. N., Brezzi, F., and Fortin, M. (1984). A stable finite element for the stokes equations. *Calcolo*, 21(4) :337–344. 41

Austin, N. J. and Evans, B. (2007). Paleowattmeters : A scaling relation for dynamically recrystallized grain size. *Geology*, 35(4) :343–346. 26

Bailey, J. and Hirsch, P. B. (1962). The recrystallization process in some polycrystalline metals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 267(1328) :11–30. 46

Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., Dalcin, L., Dener, A., Eijkhout, V., Gropp, W., et al. (2019). Petsc users manual. 38

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2012). Mechanisms for the generation of plate tectonics by two-phase grain-damage and pinning. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 202 :27–55. 24, 29

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2014). Plate tectonics, damage and inheritance. *Nature*, 508(7497) :513. 25

Bernacki, M., Resk, H., Coupez, T., and Logé, R. E. (2009). Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(6) :064006. 43, 49

Bernard, P., Bag, S., Huang, K., and Logé, R. E. (2011). A two-site mean field model of discontinuous dynamic recrystallization. *Materials Science and Engineering : A*, 528(24) :7357–7367. 31

Beslier, M.-O., Girardeau, J., and Boillot, G. (1988). Lithologie et structure des péridotites à plagioclase bordant la marge continentale passive de la galice (espagne). *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série 2, Mécanique, Physique, Chimie, Sciences de l'univers, Sciences de la Terre*, 306(5) :373–380. 27

Blenkinsop, T. (2000). Intracrystalline plasticity. *Deformation Microstructures and Mechanisms in Minerals and Rocks*, pages 39–51. 22

Boioli, F., Tommasi, A., Cordier, P., Demouchy, S., and Mussi, A. (2015). Low steady-state stresses in the cold lithospheric mantle inferred from dislocation dynamics models of dislocation creep in olivine. *Earth and Planetary Science Letters*, 432 :232–242. 20

Bons, P., Koehn, D., and Jessell, M. W. (2007). *Microdynamics simulation*, volume 106. Springer Science & Business Media. 1

Bunge, H. (1981). Fabric analysis by orientation distribution functions. *Tectonophysics*, 78(1-4) :1–21. 17

Burke, J. and Turnbull, D. (1952). Recrystallization and grain growth. *Progress in metal physics*, 3 :220–292. 31

Burov, E. B. and Diament, M. (1995). The effective elastic thickness (t e) of continental lithosphere : what does it really mean ? *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 100(B3) :3905–3927. 23

Cahn, J. W. (1962). The impurity-drag effect in grain boundary motion. *Acta metallurgica*, 10(9) :789–798. 13

Cao, T.-S., Montmitonnet, P., and Bouchard, P.-O. (2013). A detailed description of the gurson–tvergaard–needleman model within a mixed velocity–pressure finite element formulation. *International journal for numerical methods in engineering*, 96(9) :561–583. 41, 42

Carrez, P., Walker, A. M., Metsue, A., and Cordier, P. (2008). Evidence from numerical modelling for 3d spreading of [001] screw dislocations in mg2sio4 forsterite. *Philosophical Magazine*, 88(16) :2477–2485. 15

Chen, K., Han, J., Pan, X., and Srolovitz, D. J. (2020). The grain boundary mobility tensor. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(9) :4533–4538. 10

Chen, L.-Q. and Yang, W. (1994). Computer simulation of the domain dynamics of a quenched system with a large number of nonconserved order parameters : The grain-growth kinetics. *Physical Review B*, 50(21) :15752. 43

Chu, X. and Korenaga, J. (2012). Olivine rheology, shear stress, and grain growth in the lithospheric mantle : geological constraints from the kaapvaal craton. *Earth and Planetary Science Letters*, 333 :52–62. 26

Coble, R. (1963). A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials. *Journal of applied physics*, 34(6) :1679–1682. 18

Cooper, R. and Kohlstedt, D. (1982). Interfacial energies in the olivine basalt system. *Unknown Journal*, pages 217–228. 9

Cross, A. and Skemer, P. (2019). Rates of dynamic recrystallization in geologic materials. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 124(2) :1324–1342. 46

Cruz-Fabiano, A. L., Logé, R., and Bernacki, M. (2014). Assessment of simplified 2d grain growth models from numerical experiments based on a level set framework. *Computational Materials Science*, 92 :305–312. 31

Dash, W. (1957). The observation of dislocations in silicon. *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*, page 57. 16

DeMets, C., Gordon, R. G., Argus, D., and Stein, S. (1990). Current plate motions. *Geophysical journal international*, 101(2) :425–478. 5

Duretz, T., Schmalholz, S., Podladchikov, Y., and Yuen, D. (2014). Physics-controlled thickness of shear zones caused by viscous heating : Implications for crustal shear localization. *Geophysical Research Letters*, 41(14) :4904–4911. 25

Durinck, J., Devincre, B., Kubin, L., and Cordier, P. (2007). Modeling the plastic deformation of olivine by dislocation dynamics simulations. *American Mineralogist*, 92(8-9) :1346–1357. 49

Duyster, J. and Stöckhert, B. (2001). Grain boundary energies in olivine derived from natural microstructures. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 140(5) :567–576. 9

Frank, F. and Read Jr, W. (1950). Multiplication processes for slow moving dislocations. *Physical Review*, 79(4) :722. 16

Gasc, J., Demouchy, S., Barou, F., Koizumi, S., and Cordier, P. (2019). Creep mechanisms in the lithospheric mantle inferred from deformation of iron-free forsterite aggregates at 900–1200° c. *Tectonophysics*, 761 :16–30. 19

Ghosh, S. and Sengupta, S. (1987). Progressive development of structures in a ductile shear zone. *Journal of Structural Geology*, 9(3) :277–287. 1

Gordon, P. and Vandermeer, R. (1966). Recrystallisation, grain growth and textures, ed. *H. Margolin, ASM, Cleveland, Ohio*, page 251. 14

Gouriet, K., Cordier, P., Garel, F., Thoraval, C., Demouchy, S., Tommasi, A., and Carrez, P. (2019). Dislocation dynamics modelling of the power-law breakdown in olivine single crystals : Toward a unified creep law for the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 506 :282–291. 16

Han, J., Thomas, S. L., and Srolovitz, D. J. (2018). Grain-boundary kinetics : A unified approach. *Progress in Materials Science*, 98 :386 – 476. 10

Hansen, L., Zimmerman, M. E., Dillman, A. M., and Kohlstedt, D. L. (2012). Strain localization in olivine aggregates at high temperature : A laboratory comparison of constant-strain-rate and constant-stress boundary conditions. *Earth and Planetary Science Letters*, 333 :134–145. 1

Heron, P. J., Pysklywec, R. N., and Stephenson, R. (2016). Lasting mantle scars lead to perennial plate tectonics. *Nature communications*, 7 :11834. 23

Herring, C. (1950). Diffusional viscosity of a polycrystalline solid. *Journal of applied physics*, 21(5) :437–445. 18

Herring, C. (1951). Some theorems on the free energies of crystal surfaces. *Physical review*, 82(1) :87. 9

Herwegh, M., Mercolli, I., Linckens, J., and Müntener, O. (2016). Mechanical anisotropy control on strain localization in upper mantle shear zones. *Tectonics*, 35(5) :1177–1204. 1

Hess, H. (1959). Nature of great oceanic ridges. In *International Oceanographic Congress*, pages 33–34. Am. Assoc. Advan. Sci Washington, DC. 4

Hiraga, T., Miyazaki, T., Tasaka, M., and Yoshida, H. (2010). Mantle superplasticity and its self-made demise. *Nature*, 468(7327) :1091. 18

Hirel, P., Moladje, G. F. B., Carrez, P., and Cordier, P. (2019). Systematic theoretical study of [001] symmetric tilt grain boundaries in mgo from 0 to 120 gpa. *Physics and Chemistry of Minerals*, 46(1) :37–49. 9

Hirth, G. and Kohlstedt, D. (2003). Rheology of the upper mantle and the mantle wedge : A view from the experimentalists. *GEOPHYSICAL MONOGRAPH-AMERICAN GEOPHYSICAL UNION*, 138 :83–106. 29

Hitti, K. and Bernacki, M. (2013). Optimized dropping and rolling (odr) method for packing of poly-disperse spheres. *Applied Mathematical Modelling*, 37(8) :5715–5722. 46

Humphreys, F. J. and Hatherly, M. (2012). *Recrystallization and related annealing phenomena*. Elsevier. 10, 11

Ilin, D. N. and Bernacki, M. (2016). A new algorithm for dense ellipse packing and polygonal structures generation in context of fem or dem. 47

Ilin, D. N., Bozzolo, N., Toulorge, T., and Bernacki, M. (2018). Full field modeling of recrystallization : Effect of intragranular strain gradients on grain boundary shape and kinetics. *Computational Materials Science*, 150 :149–161. 45

Jessell, M., Kostenko, O., and Jamtveit, B. (2003). The preservation potential of microstructures during static grain growth. *Journal of Metamorphic Geology*, 21(5) :481–491. 1

Jessell, M. W., Siebert, E., Bons, P. D., Evans, L., and Piazolo, S. (2005). A new type of numerical experiment on the spatial and temporal patterns of localization of deformation in a material with a coupling of grain size and rheology. *Earth and Planetary Science Letters*, 239(3-4) :309–326. 1

Jung, H., Katayama, I., Jiang, Z., Hiraga, T., and Karato, S.-I. (2006). Effect of water and stress on the lattice-preferred orientation of olivine. *Tectonophysics*, 421(1-2) :1–22. 28

Karato, S.-i., Jung, H., Katayama, I., and Skemer, P. (2008). Geodynamic significance of seismic anisotropy of the upper mantle : new insights from laboratory studies. *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, 36 :59–95. 28

Katayama, I., Jung, H., and Karato, S.-i. (2004). New type of olivine fabric from deformation experiments at modest water content and low stress. *Geology*, 32(12) :1045–1048. 28

Kelka, U., Koehn, D., and Beaudoin, N. (2015). Zebra pattern in rocks as a function of grain growth affected by second-phase particles. *Frontiers in Physics*, 3 :74. 1

Kiss, D., Podladchikov, Y., Duretz, T., and Schmalholz, S. M. (2019). Spontaneous generation of ductile shear zones by thermal softening : Localization criterion, 1d to 3d modelling and application to the lithosphere. *Earth and Planetary Science Letters*, 519 :284–296. 25

Kneller, E. A., Long, M. D., and van Keken, P. E. (2008). Olivine fabric transitions and shear wave anisotropy in the ryukyu subduction system. *Earth and Planetary Science Letters*, 268(3-4) :268–282. 28

Knoll, M., Tommasi, A., Logé, R. E., and Signorelli, J. W. (2009). A multiscale approach to model the anisotropic deformation of lithospheric plates. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 10(8). 49

Lameyre, J. (1975). Roches et minéraux. *Doin*, ed(Paris) :135–352. 7

Le Pichon, X. and Heirtzler, J. R. (1968). Magnetic anomalies in the indian ocean and sea-floor spreading. *Journal of Geophysical Research*, 73(6) :2101–2117. 5

Lücke, K. and Detert, K. (1957). A quantitative theory of grain-boundary motion and recrystallization in metals in the presence of impurities. *Acta Metallurgica*, 5(11) :628–637. 13

Madec, R., Devincre, B., Kubin, L., Hoc, T., and Rodney, D. (2003). The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening. *Science*, 301(5641) :1879–1882. 20

Mainprice, D., Bachmann, F., Hielscher, R., and Schaeben, H. (2015). Descriptive tools for the analysis of texture projects with large datasets using mtex : strength, symmetry and components. *Geological Society, London, Special Publications*, 409(1) :251–271. 18

Maire, L., Fausty, J., Bernacki, M., Bozzolo, N., De Micheli, P., and Moussa, C. (2018). A new topological approach for the mean field modeling of dynamic recrystallization. *Materials & Design*, 146 :194–207. 31

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2016). Improvement of 3d mean field models for capillarity-driven grain growth based on full field simulations. *Journal of materials science*, 51(24) :10970–10981. 31, 43

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., Settefrati, A., and Bernacki, M. (2017). Modeling of dynamic and post-dynamic recrystallization by coupling a full field approach to phenomenological laws. *Materials & Design*, 133 :498–519. 43, 45, 46

Maresca, F., Kouznetsova, V., and Geers, M. (2016). Reduced crystal plasticity for materials with constrained slip activity. *Mechanics of Materials*, 92 :198–210. 52

Marin, E. and Dawson, P. (1998). On modelling the elasto-viscoplastic response of metals using polycrystal plasticity. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 165(1-4) :1–21. 50

Marin, E. B. (2006). On the formulation of a crystal plasticity model. Technical report, Sandia National Laboratories. 49, 50, 51

May, D. A., Brown, J., and Le Pourhiet, L. (2014). ptatin3d : High-performance methods for long-term lithospheric dynamics. In *SC'14 : Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, pages 274–284. IEEE. 29

Merriman, B., Bence, J. K., and Osher, S. J. (1994). Motion of multiple junctions : A level set approach. *Journal of Computational Physics*, 112(2) :334–363. 43, 48

Mohorovicic, A. (1910). Das beben vom 8. x. 1909. *Jahrbuch Meterologie Observatorie Zagrab*, 9 :1–63. 5

Montheillet, F., Lurdos, O., and Damamme, G. (2009). A grain scale approach for modeling steady-state discontinuous dynamic recrystallization. *Acta Materialia*, 57(5) :1602–1612. 31

Nicolas, A., Boudier, F., and Boullier, A. (1973). Mechanisms of flow in naturally and experimentally deformed peridotites. *American Journal of Science*, 273(10) :853–876. 1

Olsen, K. H., Baldridge, W. S., and Callender, J. F. (1987). Rio grande rift : an overview. *Tectonophysics*, 143(1-3) :119–139. 23

Osher, S. and Sethian, J. A. (1988). Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 79(1) :12–49. 43, 44

Paterson, M. (1987). Problems in the extrapolation of laboratory rheological data. *Tectonophysics*, 133(1-2) :33–43. 1

Petit, C., Deverchere, J., Houdry, F., Sankov, V. A., Melnikova, V. I., and Delvaux, D. (1996). Present-day stress field changes along the baikal rift and tectonic implications. *Tectonics*, 15(6) :1171–1191. 23

Platt, J. and Behr, W. (2011). Grainsize evolution in ductile shear zones : Implications for strain localization and the strength of the lithosphere. *Journal of Structural Geology*, 33(4) :537–550. 1

Read, W. T. and Shockley, W. (1950). Dislocation models of crystal grain boundaries. *Physical review*, 78(3) :275. 8

Rohrer, G. S. (2011). Grain boundary energy anisotropy : a review. *Journal of materials science*, 46(18) :5881–5895. 9

Rollett, A., Gottstein, G., Shvindlerman, L., and Molodov, D. (2004). Grain boundary mobility–a brief review. *Zeitschrift für Metallkunde*, 95(4) :226–229. 10

Rozel, A. (2010). *Taille des grains et localisation de la déformation dans la lithosphère*. PhD thesis, Universite Claude Bernard - Lyon 1. 18

Santamaria-Perez, D., Thomson, A., Segura, A., Pellicer-Torres, J., Manjon, F. J., Corà, F., McColl, K., Wilson, M., Dobson, D., and McMillan, P. F. (2016). Metastable structural transformations and pressure-induced amorphization in natural (mg, fe) 2sio4 olivine under static compression : A raman spectroscopic study. *American Mineralogist*, 101(7) :1642–1650. 19

Scholtes, B., Ilin, D., Settefrati, A., Bozzolo, N., Agnoli, A., and Bernacki, M. (2016). Full field modeling of the zener pinning phenomenon in a level set framework- discussion of classical limiting mean grain size equation. In *Superalloys 2016*, pages 497–503. John Wiley. 45

Scholtes, B., Shakoor, M., Settefrati, A., Bouchard, P.-O., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2015). New finite element developments for the full field modeling of microstructural evolutions using the level-set method. *Computational Materials Science*, 109 :388–398. 47

Seret, A., Moussa, C., Bernacki, M., and Bozzolo, N. (2018). On the coupling between recrystallization and precipitation following hot deformation in a γ-γ nickel-based superalloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 49(9) :4199–4213. 12

Sethian, J. A. (1996). A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 93(4) :1591–1595. 49

Shakoor, M., Scholtes, B., Bouchard, P.-O., and Bernacki, M. (2015). An efficient and parallel level set reinitialization method–application to micromechanics and microstructural evolutions. *Applied Mathematical Modelling*, 39(23-24) :7291–7302. 49

Skemer, P., Warren, J. M., Kelemen, P. B., and Hirth, G. (2009). Microstructural and rheological evolution of a mantle shear zone. *Journal of Petrology*, 51(1-2) :43–53. 28

Smith, C. (1948). Grains, phases, and interphases : An interpretation of microstructure : Transactions of the american institute of mining and metallurgical engineers, v. 175. 12

Stipp, M. and Tullis, J. (2003). The recrystallized grain size piezometer for quartz. *Geophysical Research Letters*, 30(21). 26

Stöckhert, B. and Duyster, J. (1999). Discontinuous grain growth in recrystallised vein quartz—implications for grain boundary structure, grain boundary mobility, crystallographic preferred orientation, and stress history. *Journal of Structural Geology*, 21(10) :1477–1490. 11

Sussman, M., Smereka, P., Osher, S., et al. (1994). A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. 49

Tommasi, A., Knoll, M., Vauchez, A., Signorelli, J. W., Thoraval, C., and Logé, R. (2009). Structural reactivation in plate tectonics controlled by olivine crystal anisotropy. *Nature Geoscience*, 2(6) :423. 1, 24

Tommasi, A., Tikoff, B., and Vauchez, A. (1999). Upper mantle tectonics : three-dimensional deformation, olivine crystallographic fabrics and seismic properties. *Earth and Planetary Science Letters*, 168(1-2) :173–186. 24

Twiss, R. J. (1977). Theory and applicability of a recrystallized grain size paleopiezometer. In *Stress in the Earth*, pages 227–244. Springer. 26

Van der Wal, D., Chopra, P., Drury, M., and Gerald, J. F. (1993). Relationships between dynamically recrystallized grain size and deformation conditions in experimentally deformed olivine rocks. *Geophysical Research Letters*, 20(14) :1479–1482. 26

Vauchez, A., Barruol, G., and Tommasi, A. (1997). Why do continents break-up parallel to ancient orogenic belts? *Terra Nova*, 9(2) :62–66. 23

Vine, F. J. and Matthews, D. H. (1963). Magnetic anomalies over oceanic ridges. *Nature*, 199(4897) :947–949. 1, 4

Wang, Z., Zhao, Y., and Kohlstedt, D. L. (2010). Dislocation creep accommodated by grain boundary sliding in dunite. *Journal of Earth Science*, 21(5) :541–554. 19

Warren, J. M. and Hirth, G. (2006). Grain size sensitive deformation mechanisms in naturally deformed peridotites. *Earth and Planetary Science Letters*, 248(1-2) :438–450. 30

Wegener, A. (1912). Die entstehung der kontinente, petermanns geog. *Mitt*, 58 :185–195. 4

Weygand, D., Brechet, Y., and Lepinoux, J. (2001). A vertex simulation of grain growth in 2d and 3d. *Advanced Engineering Materials*, 3(1-2) :67–71. 43

Wilson, J. T. (1963). A possible origin of the hawaiian islands. *Canadian Journal of Physics*, 41(6) :863–870. 6

Wilson, J. T. (1966). Did the atlantic close and then re-open? *Nature*, 211(5050) :676–681. 23

Yan, M., Cannon, R., and Bowen, H. (1983). Space charge, elastic field, and dipole contributions to equilibrium solute segregation at interfaces. *Journal of Applied Physics*, 54(2) :764–778. 14

Zhang, S., Karato, S.-i., Gerald, J. F., Faul, U. H., and Zhou, Y. (2000). Simple shear deformation of olivine aggregates. *Tectonophysics*, 316(1-2) :133–152. 28

Zhao, H., Chan, T., Merriman, B., and Osher, S. (1996). A variational level set approach to multiphase motion. *Journal of Computational Physics*, 127 :179–195. 43, 48

Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., Taylor, R. L., and Taylor, R. L. (2000). *The finite element method : solid mechanics*, volume 2. Butterworth-heinemann. 32

Chapitre 2

Simulation de la croissance de grains pour un agrégat d'olivine pure

Sommaire

2.1 Introduction 62
2.2 2D and 3D simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method 62
2.2.1 Introduction 62
2.2.2 The grain growth phenomenon and its numerical modelisation 64
2.2.3 Level set approach for grain growth 68
2.2.4 Methods 71
2.2.5 Results 75
2.2.6 Discussions 78
2.2.7 Conclusion 80
2.2.8 Acknowledgements 81
2.3 Compléments et limites sur cette partie 81
2.3.1 Croissance de grain à partir d'une microstructure réelle 81
2.3.2 Limites 83
2.4 Références 84

2.1 Introduction

La travail présenté dans ce chapitre a été commencé durant mon stage de M2 puis finalisé durant les premiers mois de la thèse. Cette partie représente une première étape, nécessaire à la modélisation des évolutions microstructurales dans les roches mantelliques puisqu'il s'agit de l'étude de la croissance de grain de la phase principale des péridotites, l'olivine. Cette première approche, en couplant la modélisation et l'état de l'art expérimental de croissance de grain d'olivine, permet d'obtenir les paramètres matériaux clefs de la croissance. Il faut cependant se questionner sur différents points relatifs à la dimension d'espace utilisée pour la simulation. En effet comme il va être montré dans la suite, la comparaison entre les résultats des simulations et les résultats expérimentaux n'est pas directe et des méthodes stéréographiques comme la méthode de Saltykov [1958] doivent être employées pour être cohérent dans la comparaison. La méthode de Saltykov ne sera pas présentée en détail dans la suite mais on en exposera le principe de base dans l'annexe B. La dimension d'espace utilisée dans la simulation intervient également dans le calcul de la courbure des joints de grains donc de la force capillaire.
Ainsi, il est important de quantifier l'influence de ce paramètre pour la simulation et de la méthode choisie pour comparer les résultats de simulations aux résultats expérimentaux, c'est ce qu'on se propose de faire dans ce chapitre. Enfin, une fois les paramètres clefs de la croissance obtenus pour un agrégat d'olivine pure, on se questionnera sur la cohérence des cinétiques de croissance des polycristaux d'olivine pure dans un contexte géologique.

2.2 2D and 3D simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method

This work has been published in the journal Physic of the Earth and Planetary Interiors, [Furstoss et al., 2018].

Abstract

In this study, we investigate grain growth within pure olivine systems through numerical simulations. The level set (LS) approach within a finite element (FE) context enables modeling 3D microstructural evolutions such as grain growth. As this phenomenon is inherently a 3D mechanism, the comparison between 2D and 3D models shows differences despite the use of 2D/3D transformation tools. The 2D level set approach is then compared with 2D models of grain growth performed with the ELLE software [1]. Both approaches give consistent results. Our results confirm the rapid annealing of fine grained structures in pure olivine aggregates at temperatures of 1473 and 1573K. Comparison with previously published experimental results yields an estimate of the activation energy at $171-180$ kJ·mol^{-1} for olivine grain boundary mobility.

2.2.1 Introduction

Microstructures are parts of the memory of rocks and the knowledge of thermal and/or mechanical loading that led to their formation can be used to predict their future behaviour.
Indeed, it is well known that rheological properties of rocks (and in general of crystalline materials) are closely related to their microstructures, because the latter influences dominant creep mechanisms. For example, strain localization in ductile mantle shear-zones may be controlled by lithospheric mantle microstructures inherited from prior deformations [Bercovici and Ricard, 2012]. In fact, it has been shown that lithospheric mantle weak zones primarily control tectonic process

1. https ://www.elle.ws

such as strain localization at plate boundaries [Heron et al., 2016]. The microstructure involves a variety of parameters (grain size, distribution of mineral phases, lattice orientations, etc.). As a result, several mechanisms potentially able to weaken mantle rocks have been suggested including grain size reduction [Bercovici and Ricard, 2012], phase transformations [Tingle et al., 1993], and the development of lattice preferred orientation [Tommasi et al., 2009]. Even if the combined role of these mechanisms in the weakening is likely, the well known association of ductile shear zones with grain size reduction suggests this process is one of the most important [Platt and Behr, 2011]. In naturally deformed mantle rocks, a switch from grain size insensitive (GSI) to grain size sensitive (GSS) creep can occur by decreasing grain size below a certain critical size depending on several conditions (e.g. stress, strain rate, temperature) [Platt and Behr, 2011]. Theoretically in GSS creep regimes, the strain rate is related to the inverse of grain size [Kohlstedt, 2007]. Experiments show that olivine rocks weaken considerably with decreasing grain size [Vissers et al., 1995] initiating or enhancing strain localization at zones of low grain size. After localization priming, a positive feedback between strain weakening and strain localization (by the coexistence of grain reduction and GSS creep) permits the development of permanent weak plate boundaries [Bercovici and Ricard, 2012; Gueydan et al., 2014].
Dormant plate boundaries (defined as long lived lithospheric weak zones at geological time scale) are interpreted to be ancient deformation zones (such as suture zones). By considering the decrease of grain size as the most relevant mechanism of rock weakening, the superposition of dormant plates boundaries with zones where deformation has involved dynamic recrystallization (and reduced peridotite grain size) can be explained [Bercovici and Ricard, 2012]. Geological record evidences that over period of about 250 Myr, a full orogenic cycle can take place, reactivating dormant plate boundaries [Wilson, 1966], which means that grain size still remains small enough and enables deformation by GSS creep. Grain growth kinetics in peridotites (and especially in olivine) has already been explored by experimental [Evans et al., 2001; Hiraga et al., 2010; Karato, 1989] and numerical [Jessell et al., 2003; Solomatov et al., 2002] approaches. It has been shown that mantle lithospheric temperatures (i.e. 900-1600 K) may allow efficient grain growth, which would result in a rapid erasing of fine-grained weak zones. In this paper, we study the grain boundary migration (GBM) and its effect for microstructure evolutions within a pure olivine system using numerical simulations.

A large variety of methods can be used to compute numerical microstructure evolution, including grain growth. They can be divided in two main categories :

- mean field models, which describe microstructure evolution through homogenized system characteristics (e.g. mean grain size, grain size distribution, mean stored energy, Smith-Zener limit grain size).
- Full field models, which describe the system topology and simulate its evolution.

Mean field models can be based either on phenomenological observations, or on theoretical (such as thermodynamical) considerations, or both. More recently, in the metallurgy community, some mean field models obtained from full field simulations have been proposed [Maire et al., 2017]. Even if these models enable large scale computations with low computational cost, their predictions are only suitable in the range determined by the corresponding experiments, or in combination with full field models, which will help to calibrate them. Another drawback is related to their limitation to predict local phenomena such as abnormal grain-growth.
Several full field modeling techniques have been developed in order to simulate microstructure evolutions in rocks. Hereafter a simple classification of these methods is proposed.
- Stochastic methods such as Monte Carlo Potts model [Solomatov et al., 2002] consist of voxel-based grain shape description, where each lattice site in a grain is given the same "spin", and

microstructure evolution is computed according to the probability for a site to change its spin. Although these methods have high scalability and low computational costs, a precise calculation of the mean curvature calculation needed to model grain growth is not straightforward with a voxelized microstructure. Another issue inherent to Monte Carlo methods is to perform accurate scaling between the Monte Carlo step and the physical time step. Furthermore, capturing different physical mechanisms through the same numerical scheme tends to be extremely complicated since it is difficult to accurately control the change probability change for each mechanism.
- Front-tracking methods [Becker et al., 2008] are deterministic approaches and are based on the explicit description of interfaces. In 2D, grain boundaries are described by nodes connected by segments and the microstructure evolution is computed by applying evolution equations to either nodes or segments. Advantages of tracking methods are the ease of computing interface properties (such as mean curvature, normal) and reasonable numerical cost. However, topological events such as grain shrinkage are difficult to manage from a numerical point of view, and become really problematic in 3D. Moreover, intragranular fields, such as stored energy gradient, cannot be described without the use of a secondary mesh describing the grain interiors. Nonetheless the front-tracking approach is well suited for modeling grain growth. A front tracking method is implemented within the microstructural modeling platform ELLE [Bons et al., 2007] (https ://www.elle.ws), a now classical tool for modeling rock microstructural evolution in the state of the art.
- Finally, grain growth can also be modelled by using an implicit description of interfaces, which is done either in the phase field method [Chen and Yang, 1994], or in the level set method [Cruz-Fabiano et al., 2014], and permits to avoid the tracking of interfaces and the issue of handling topological events. The latter is the one chosen for this work. The numerical approach presented in [Bernacki et al., 2009; Cruz-Fabiano et al., 2014; Maire et al., 2016; Scholtes et al., 2015] is used to describe microstructural evolutions of materials (essentially metals) during industrial processes. This approach deals with a LS description of interfaces in a FE formulation.

One of the aims of the present work is to give a review of the existing full field modeling techniques developed in order to compute microstructural evolution of rocks at the mesoscale (i.e. grain-scale). In this context, we will focus on the grain growth phenomenon which will be initially analyzed in a physical point of view. Then, different numerical implementation techniques of the GBM mechanism will be presented.
We also test, in 2D and 3D, the adaptability of the LS formulation for non-metal materials such as pure olivine system considering only the grain growth mechanism without deformation. The 2D results will be compared with those obtained within the ELLE's software. Our results also bring reflexion elements in the geological context of perennial weak zones preservation described above.

2.2.2 The grain growth phenomenon and its numerical modelisation

2.2.2.1 Grain boundary migration

Grain growth occurs in polycrystalline materials by grain boundaries migration (GBM) through the microstructure leading to the reduction of Gibbs free energy. Driving forces for GBM can derivate from different factors as capillarity, difference of stored energy (by lattice defects) between grains or solid-solid phase transformations, in the case of multiphase material [Becker et al., 2008]. Generally the velocity ($\vec{v}$) of a boundary can be expressed as [Humphreys and Hatherly, 2012] :

$$\vec{v} = \mathrm{MF}\vec{n}, \tag{2.1}$$

where M is the grain boundary mobility, F the driving force per unit area and $\vec{n}$ the outward unit vector normal to the grain boundary.
By considering a monophasic polycrystal system where only the reduction of interface energy (ca-

pillarity) is taken into account (corresponding to a static or normal grain growth), the grain boundaries move to minimize the surface energy and the driving force is generally approximated as :

$$\mathrm{F}\vec{n} = -\gamma\kappa\vec{n}, \tag{2.2}$$

where γ and κ are respectively the grain boundary energy and the mean curvature of the grain boundary. It is important to notice the dependence of the mean curvature definition with the number of dimensions considered. Indeed, the 3D curvature is a diagonalizable tensor where the non-zero eigenvalues are called the main curvatures. Thus the 3D mean curvature is defined as the trace of this tensor, i.e. the sum of the main curvatures.
When the grain boundary mobility and energy are assumed isotropic and uniform throughout the domain, the developed microstructure can reach a foam-like structure where boundaries are smoothly curved and triple junctions form 120° inter-boundary angles. In this context of ideal grain growth, the kinetics is expected to follow an inverse power-law, describing the increase of the mean grain size as a function of time.

2.2.2.2 Microdynamics simulation for grain growth : a review

Many programs have been developed in Earth Sciences to simulate microdynamic processes (e.g. grain growth, Smith-Zener pinning) by full field modeling [Becker et al., 2008; Jessell et al., 2003; Solomatov et al., 2002] (i.e. by considering topological description of the microstructure). There is presently one general platform called ELLE [Bons et al., 2007] (website : https ://www.elle.ws) that gather the modeling of several mechanisms such as grain growth or crystallisation from a melt. This software, which has the advantage of being open source and subject to ongoing development by a large community of researchers, bonds a variety of physical process simulation methods making it a very multipurpose code. Moreover the software package includes a set of codes for individual processes which can be combined within the same simulation. In this section, we review numerical approaches that can be used in microstructural evolution modeling. We will focus on the Earth Science field, although many of these methods are widely used in other research fields (e.g., metallurgy).

2.2.2.2.a Voxel-based methods

Within the Monte Carlo (MC) and cellular automata (CA) approaches, the microstructure is usually discretized using a regular lattice by a set of volume elements called voxels. Each voxel represents a group of atoms and is characterized for instance by an orientation (or a spin) indicating which voxels belong to a grain (figure 2.1.a).

The microstructure typically evolves by changing the state of the voxels, applying different methods depending on the approach. While MC approaches are stochastic, using probabilistic laws to change the state of a voxel, CA can be based on either stochastic or deterministic rules which modify the state of each CA cell. MC and CA models have benefited from considerable efforts from the research community over the last decades and are actually relevant despite several complications inherent to this group of methods.

The computation of GBM within the MC and CA models needs to express the effective grain boundary energy. This energy is usually given by a sum of pairwise voxel interactions which can be expressed in a monophasic and isotropic case by [Mason, 2015] :

$$\mathrm{E}_{boundtot} = \frac{1}{2}\gamma a \sum_{i=1}^{\mathrm{N}} \sum_{j=1}^{z} \mathrm{K}_{ij}, \tag{2.3}$$

where a is a constant with a unit of length, N is the total number of lattice sites, z the number of nearest neighbors of the voxel i and K_{ij} is the kernel which controls the strength of the pairwise

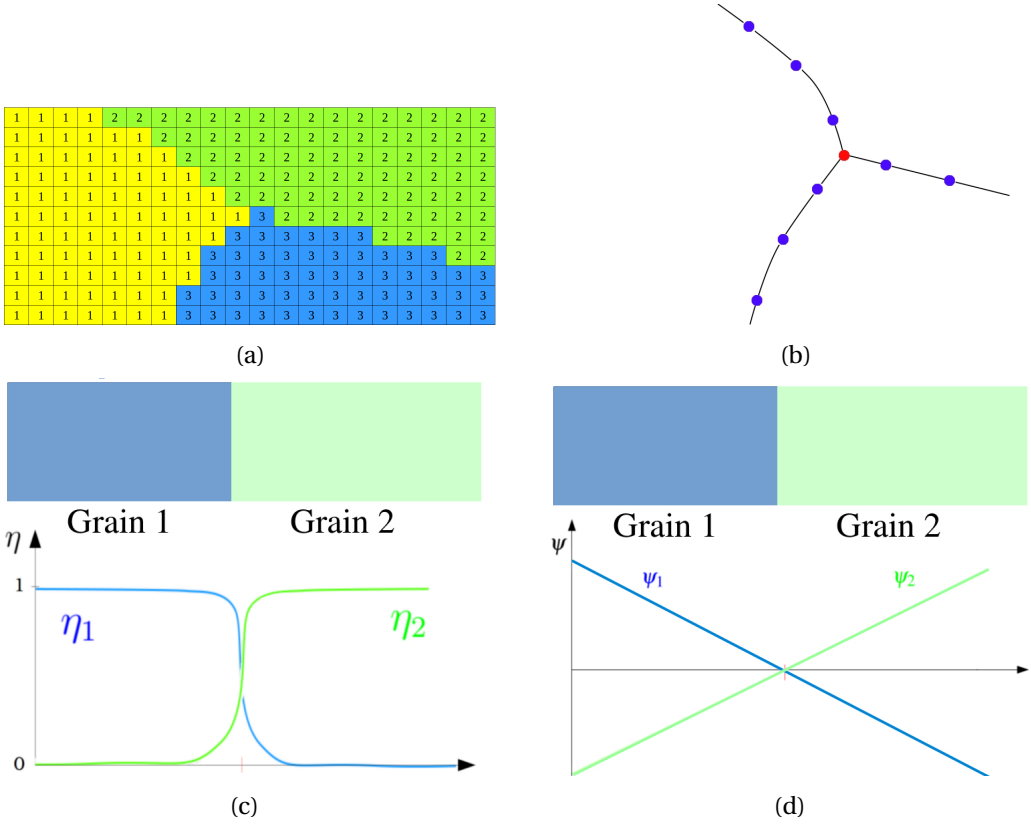


FIGURE 2.1 – (a) example of a voxelized 2D triple junction, a grain is represented by a set of voxel containing the same spin value, (b) a triple junction discretized using vertex (e.g. ELLE approach), (c) an interface between two grains represented by the order parameters of the phase field approach, (d) an interface between two grains represented by level set functions.

interactions. The kernel is usually constant for voxels within a given neighborhood N_i of the ith voxel such as :

$$K_{ij} = \begin{cases} 1 - \delta_{q_i q_j} & \text{if} \quad j \in N_i \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \tag{2.4}$$

where q_i and q_j are the spins of the lattices i and j and δ is the Kroneker delta. However, this kernel can be enriched by functions taking into account, for instance, the distance between the voxels [Mason et al., 2015]. Eq.(2.3) can suffice to compute the microstructure evolution driven by the reduction of total boundary energy, but the grain boundary curvature is not consider here. In order to take into account this driving force, CA and MC models can calculate the mean curvature of a boundary by different methods. The explicit computation (generally used in CA models) is often done by variations of the template method [Bullard et al., 1995] which consists of determining the portion of volume enclosed by a template that lies on one side of the interface. The mean curvature of the opposite side is then approximated by a linear function of the computed volume. Implicit calculation can also be used (rather for MC models) by connecting the energy change accompanying the change of a voxel spin and the mean curvature of the grain boundary. In all cases, the total energy of the system is computed and can be used by transition rules governing the spin change of voxels, stochastic for MC methods (such as the Metropolis function) and generally deterministic for CA models (such as rule arising from the grain boundary motion eq.(2.1)). All the voxels (or a set of voxels around boundaries) are selected (randomly within MC methods)

and may switch to the state of one of all adjacent voxels according to the transition rules. The time increment is then realized after applying the transition rules to a single voxel or to all voxels for respectively MC and CA methods. The determination of the incremented time varies with each methods and guaranteeing a physical meaning is not straightforward.

The voxel-based methods such as MC and CA methods are very flexible and have demonstrated their capabilities to simulate microstructural evolutions [Solomatov et al., 2002]. The use of voxel and regular grids is convenient for parallel computations with low computational costs. Intragranular fields such as stored energy gradient can be easily taken into account but the discretization of a microstructure with regular lattice of voxels can influence the evolution of the system and may be unable to accurately reproduce the curved surfaces. This regular lattice may also be limiting for the modeling of large deformations, which require adaptative remeshing procedures as in many other numerical approaches. Moreover, in MC methods it is difficult to relate model units with physical ones, especially for the time unit (which is usually expressed in monte carlo time steps). MC simulations parameters are then calibrated based on the comparison between numerical and experimental results [Hallberg, 2011; Rollett, 1997]. The CA approaches generally deal with transition rules, which avoid the issue of the units of length physical meaning and permit an easier comparison with experimental systems [Miodownik, 2002].

2.2.2.2.b Front-tracking methods

Front tracking models represent grain boundaries by a network of polyhedral area in 3D, formed by lines and connected nodes (figure 2.1.b). In contrast to vertex methods [Weygand et al., 2001], this network forms a real mesh, defining connectivity between nodes and permitting a FE resolution. Thus the microstructure evolves through the movements of the nodes according to physical laws. This approach permits to describe a 3D polycrystal by a 2D mesh (and a 2D case by a 1D mesh) and therefore limits the computational cost.

There are various approaches to compute the GBM in a front-tracking context depending on the resolution technique used to move the nodes describing the microstructure.
The first consists on the sequential displacement of the nodes (i.e. one node at a time), within these approaches the polyhedral network does not need to be a real mesh (e.g. no connectivity of the nodes needed) and the methods are more relevant to the vertex methods. An expression describing the GBM is applied to the different nodes of the system one by one. These expressions can derivate, for instance, from a driving force of the GBM such as eq.(2.2). The approach implemented in the ELLE software to compute the GBM [Becker et al., 2008], use the free energy gradient as :

$$\frac{d\mathrm{E}_{(r)}}{dr} = -\mathrm{F}, \tag{2.5}$$

where $\mathrm{E}_{(r)}$ is the free energy field over the position r and F is the driving force of GBM. The moving direction of a node is then determined as the direction producing the maximum reduction of free energy. Hereafter the magnitude of the velocity v of the node is computed taking into account the implications of the node sequential displacements and the node is moved with a magnitude of $v\Delta t$ with Δt the time increment.

Another way to compute the evolution of the nodes is the use of a FE resolution scheme [Kuprat et al., 2003]. Within this context, the main aim is to transform the equations governing the motion of a grain boundary (such as eq.(2.2)) in a system of 3N (in 3D) ordinary differential equations (ODEs) with N the number of nodes on the interfaces. The resolution of the linear system leads to the displacement of all the nodes, and to the evolution of the microstructure.

The tracking of boundaries permits to access easily the interface properties such as mean curvature. Moreover, nodes can have a number of attributes (e.g. interfacial energy, grain boundary

mobility) that allow to define the properties of the interface they represent. However, topological events such as shrinkage or nucleation of grain are difficult to manage in terms of remeshing, especially in 3D. Another disadvantage with this approach is that grain interiors are not described by the mesh, which may be problematic to take into account some properties at the grain scale such as intragranular stored energy or intragranular nucleation.

2.2.2.2.c Phase field methods

The phase field methods (PFMs) provide a powerful methodology to describe phase transformations and were initially used to model crystallization or sub-solidus phase transformations. Actually, the PFM are also used in order to simulate microstructural evolutions such as recrystallization and grain growth [Chen and Yang, 1994]. Within the PFMs, the description of the interfaces is implicit, and the microstructure is described by continuous functions of the spatial coordinates and time also called order parameters. Within each grain only one of these parameters take the value of unity and the others have a zero value. Across the grain boundaries the phase field parameter continuously varies from 1 to 0 by usually following an hyperbolic trigonometric function of the Euclidean distance to the interface (figure 2.1.c). The microstructure evolves through the change of order parameters by resolving a given set of coupled partial differential equations.

The phase field approach considers that grains and grain boundaries are related to the free energy F of the system. This free energy can be expressed as an integral of the free energy density over the all domain, taken into account all the order parameters describing the microstructure, and the gradient energy coefficient which controls the boundary thickness. The calculation of the free energy density introduces also phenomenological parameters, as the gradient energy coefficient which has to be calibrated on experimental data or chosen arbitrarily. The microstructure evolution is then a result of the minimization of this free energy F through the resolution of the time-dependent Ginzburg-Landau equations :

$$\frac{\partial \eta_i(r,t)}{\partial t} = -\mathrm{L}\frac{d_i \mathrm{F}}{d\eta_i(r,t)}, \qquad i = 1,...,p, \tag{2.6}$$

where $\frac{d_i}{d}$ denotes a functional derivation, $\eta_i, i = 1,...,p$ are the order parameters, r and t are respectively the spatial and time variables and the kinetic coefficient L is related to the grain boundary mobility. This set of equation can be discretized and then solved for instance by a FE or finite volume method.

Overall, the PFMs are versatile approaches which are able to compute the microstructural evolutions of a polycrystal. Nevertheless, the formalism introduces numerical parameters, such as the gradient energy coefficient (related to the boundary thickness), which are not straightforward to fix and largely impact the simulation results. Finally, PFMs have relatively high computational costs and the parallelization of codes are often needed to compute the evolutions of representative systems, which is quite common for all numerical methods dealing with microstructure evolution in context of a FE strategy.

2.2.3 Level set approach for grain growth

The level set framework used here for the full field modeling of the microstructure supports implicit description of grain boundaries by level set functions in a FE framework. Initially designed for metallurgic considerations, as microstructure evolutions in industrial processes, this model has already been used in 2D or 3D to simulate dynamic [Bernacki et al., 2009] or static [Scholtes et al., 2016a] recrystallization and grain growth [Cruz-Fabiano et al., 2014; Maire et al., 2016] with possible inert second phase particles [Agnoli et al., 2014] in some metallic materials. As for the phase field approach, the main weakness of this procedure is its computational cost, related to

the large number of LS functions needed to describe the microstructure. One of the aims of the present work is to test the adaptability of this formulation to a geological material such as olivine aggregates considering only grain growth.

2.2.3.1 The level set formalism

A LS function ψ is defined over a domain Ω as the signed distance function to the interface Γ of a sub-domain G of Ω [Scholtes et al., 2015] (figure 2.1.d). The formulation adopted here involves that values of ψ are calculated at each node of the mesh and the sign convention states $\psi \geqslant 0$ inside G and $\psi < 0$ elsewhere :

$$\forall t \begin{cases} \psi(\mathscr{x}, t) = \pm d(\mathscr{x}, \Gamma(t)), \mathscr{x} \in \Omega \\ \Gamma(t) = \{\mathscr{x} \in \Omega, \psi(\mathscr{x}, t) = 0\} \end{cases} \tag{2.7}$$

where $\mathscr{X}$ represents space variables. Therefore the outwards normal $\vec{n}_i$ and the mean curvature κ_i of the grain constituting ψ_i are defined by :

$$\vec{n}_i(\mathscr{x}, t) = \frac{-\overrightarrow{\nabla \psi_i}(\mathscr{x}, t)}{\|\psi_i(\mathscr{x}, t)\|}, \tag{2.8}$$

$$\kappa_i(\mathscr{x}, t) = \vec{\nabla}.\vec{n}_i(\mathscr{x}, t). \tag{2.9}$$

κ_i is then equivalent to the opposite of the laplacian of the LS function if ψ_i remains a distance function (i.e. $\|\psi_i(\mathscr{x}, t)\| = 1$) at least in a thin layer around the interface. Restoring the metric property (redistancing) of LS functions is an inherent problem of LS methods and reinitialization algorithms must be used during the simulation in order to keep LS functions as signed distance functions. The reinitialization algorithm implemented in the used formalism is based on a direct method (exact analytic reconstruction of the distance function) enhanced by a *k-d tree* space partitioning technique [Shakoor et al., 2015] for each LS function at each timestep.
The microstructure evolution governed by the velocity field defined in eq.(2.1) can be therefore computed by solving a set of N_G (number of grain within the system) diffusive equations :

$$\forall i \in \{1, .., N_G\} \begin{cases} \frac{\partial \psi_i(\mathscr{x}, t)}{\partial t} - \gamma M \Delta \psi_i(\mathscr{x}, t) = 0 \\ \psi_i(\mathscr{x}, t = 0) = \psi_i^0(\mathscr{x}) \end{cases} \tag{2.10}$$

Nevertheless, the approach described above requires as much LS functions as grains and the numerical cost of the resolution of eq.(2.10) and reinitialization becomes quickly problematic. In order to reduce the computation time, Global level set (GLS) functions are used to achieve steps previously mentioned [Scholtes et al., 2015]. These GLS functions do not represent only one grain but several grains separated from each other by a certain number of grains. In order to avoid numerical coalescence during the evolution of the microstructure, if grains represented by the same GLS function are becoming too close from each other they can be transferred to another GLS function by a grain recoloring algorithm [Scholtes et al., 2015]. Thus the number of functions needed to represent the microstructure is much smaller than the number of grains constituting the system, which significantly reduces the computational cost of the simulation.
Another point must be highlighted considering the LS method : the diffusive formulation (i.e. eq.(2.10)) can lead to vacuums and overlaps apparitions after each time step. To address this issue, a simple treatment is performed on each GLS function after solving diffusive equations presented above [Merriman et al., 1994] :

$$\psi_i(\mathscr{x}, t) = \frac{1}{2}(\psi_i(\mathscr{x}, t) - max_{i \neq j}(\psi_j(\mathscr{x}, t)) \tag{2.11}$$

Applied on a multiple junction this treatment allows to removing the vacuum (or overlap) [Merriman et al., 1994].

2.2.3.2 Initial microstructure & boundary conditions

To simulate microdynamics processes as grain growth, an initial microstructure is needed and can be generated either by an algorithm or by digitalizing experimental data as optical microscope images for example. Here, in order to respect a given grain size distribution, the considered digital microstructures are generated with a Voronoï-Laguerre Dense Sphere Packing (VLDSP) algorithm [Hitti and Bernacki, 2013] based on the dropping and rolling method, which enables to generate a polycrystal in agreement with the required grain size distribution if the domain size is large enough.
Boundary conditions are also needed to solve partial differential equations as eq.(2.10) in a FE scheme. Boundary conditions used here (null Neumann boundary condition) imposed orthogonality between grain boundaries and domain boundaries. This imposed angle does not lie with any physical consideration and may induce some errors due to boundary effects if the number of grain in the domain is not large enough. A convergence study of the mean grain size evolution in terms of domain size was then automatically considered in order to ensure convergence of the results while limiting the calculation domain size and so the numerical cost. It must be highlighted that periodic boundary conditions (optimal for minimizing the calculation domain size) are not considered in our numerical framework in order to be able to consider local remeshing during calculations as described in the following section.

2.2.3.3 Mesh refinement and timestep

A grain growth simulation as described above does not need a fine mesh in grain interiors but the grain boundary surroundings need to be finely described. A mesh refinement around the interfaces is used in 2D in the FE context, and this refinement is adapted during the simulation in order to follow the grain boundary movements [Resk et al., 2009]. Local remeshing during 3D calculations was not performed, as it does not represent any gain in terms of time calculation, oppositely to the 2D context where local adaptive remeshing strategy is interesting in terms of numerical cost [Maire et al., 2017]. Thus in 3D, a initial mesh is chosen fine enough to describe grain boundaries based on a convergence study on the mean grain size evolution as a function of the initial homogeneous finite element size. The FE mesh does not evolve during the simulation.
The choice of the incremental time is another crucial point : it must be large enough to limit the computational time but small enough to describe accurately the grain size evolution, even if an implicit FE resolution is used here. The solution employed here in 2D and 3D use an adaptative timestep Δt which is computed at each step as follows :

$$\Delta t = \frac{c\mathrm{E}_p}{v_m} \tag{2.12}$$

where c is a percentage of the refined mesh thickness E_p (typically 15%) in 2D and v_m is the maximum value of the grain boundary velocity over the all domain computed with eq.(2.1) and (2.2). In 3D the product $c\mathrm{E}_p$ is replaced by percentage of the cell size. This approach enables to have at any time an optimized timestep which can be long if the microstructure evolves slowly, and short if the GBM is fast.

2.2.4 Methods

2.2.4.1 Initial grain size distribution and grain boundary mobility and energy

Physical parameters needed for investigating grain growth are the mobility and the energy of grain boundaries. These parameters are anisotropic in natural rocks [Duyster and Stöckhert, 2001] and this anisotropy can be evaluated experimentally or numerically by various methods [Rohrer, 2011]. However the introduction of an anisotropy of the interfacial energy changes the FE formulation of the problem which is a work in progress. Even if some basic anisotropic laws such as a Read-Shockley can already been treated [Fausty et al., 2018] they will not be presented. In this paper, we made the assumption of isotropic grain boundary properties. Indeed, in pure olivine aggregates, anisotropic grain evolution mainly occurs as a result of uneven distribution of dislocation densities and crystalline preferred orientation due to rock deformation [Boneh et al., 2017], which is not considered here.
The grain boundary energy used here has been established by Duyster & Stöckhert [Duyster and Stöckhert, 2001] for high angle grain boundaries of olivine in natural peridotite and yields a value of 1.4 $J{\cdot}m^{-2}$.
The grain boundary mobility ($m^4{\cdot}J^{-1}{\cdot}s^{-1}$) is a temperature dependent parameter which is usually defined with an Arrhenius law :

$$M = M_0 e^{-Q/RT}, \tag{2.13}$$

where M is the mobility, M_0 the reference mobility, Q the activation energy, R the gas constant and T(K) the absolute temperature. In order to determine M_0 and Q, experimental procedures monitor the mean grain size evolution of a rock sample during an isothermal annealing treatment at different temperatures. In this paper, for the firsts simulations the values of M_0 and Q will be based on those determined by Karato [Karato, 1989] i.e., respectively, 4.10^4 $mm^4{\cdot}J^{-1}{\cdot}s^{-1}$ and 160 to 200 $kJ{\cdot}mol^{-1}$ depending on experimental conditions. Then, the comparison between the simulation and the experimental results enable to adjust the material parameters M_0 and Q (see section 2.2.5.1).
In order to compare experiments and simulations, similar initial grain size distributions must be used. Figure 2.2 represents the experimental initial distribution in volume fraction and the log-normal law used to approximate this distribution.

The experimental initial grain size distribution can be well approximated by a log-normal distribution characterized by a mean grain size $\mu = 2.24$ µm, a standard deviation $\sigma = 0.82$ µm and so a σ/μ ratio of 0.37.

2.2.4.2 Tracking grain growth kinetics

Considering the three main following hypotheses :

- the grain boundary mean curvature κ can be approximated by $\frac{1}{R}$ where R is the equivalent radius of the grain,
- the mobility and the grain boundary energy are isotropic and uniform,
- the temperature is constant,

the Burke and Turnbull (1952) model can be built from eq.(2.1) and allows describing grain growth kinetics only through the average grain size as [Burke and Turnbull, 1952] :

$$< R >^2 - < R_0 >^2 = \frac{1}{2} M \gamma t, \tag{2.14}$$

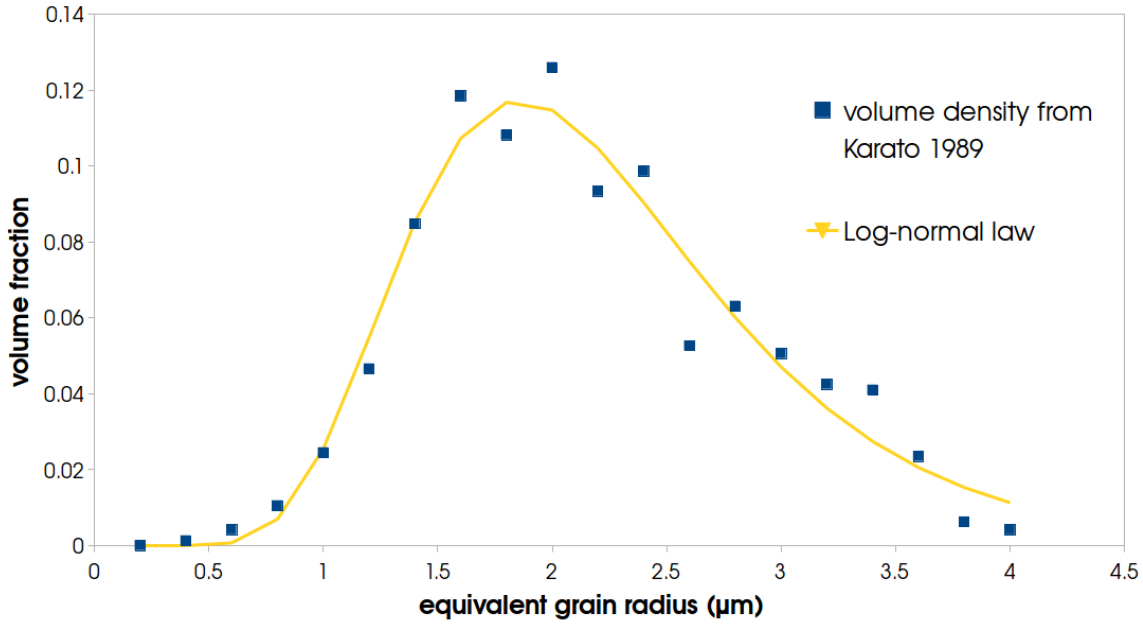


FIGURE 2.2 – Blue squares : initial grain size distribution as volume fraction from Karato 1989 [Karato, 1989], yellow line : best fitting log-normal law imposed in our VLDSP algorithm

where R and R_0 correspond respectively to average grain radii at times t and 0 s.
Even if this model does not take into account neither topological nor neighboring effects, it has been used in some experimental cases, as for example to determine first order mobility knowing the grain boundary energy [Hirth and Kohlstedt, 1995; Karato, 1989]. In these experiments, a sample is annealed at constant pressure and temperature and an average grain size is measured at different times. This process applied at different temperatures allows determining the reference mobility M_0 and the activation energy Q in the Arrhenius law of the mobility (eq.(2.13)).
However, real microstructures do not always satisfy the hypothesis used in this model. Eq.(2.14) is then often generalized according to [Cruz-Fabiano et al., 2014] :

$$< R >^2 - < R_0 >^2 = \alpha M \gamma t^n \tag{2.15}$$

where α and n are dependent on initial grain size distribution [Cruz-Fabiano et al., 2014], grain shape or presence of secondary phases, pores or melt [Evans et al., 2001]. In the case of a monophasic system without pores or melt, values of α and n can be plotted, for log-normal distributions, against the $\frac{\sigma}{\mu}$ ratio [Cruz-Fabiano et al., 2014; Maire et al., 2016]. As an example, α and n are respectively close to $\frac{1}{2}$ and 1 (leading to eq.(2.14)) for initial grain size distributions which are log-normal with a $\frac{\sigma}{\mu}$ ratio equal to 0.45 considering 2D grain growth [Cruz-Fabiano et al., 2014] and may be equal to 0.35 considering 3D grain growth [Maire et al., 2016].

2.2.4.3 Determining grain sizes

The initial grain size distribution of Karato [Karato, 1989] presented in fig.2.2 comes from the olivine powder which served to build the sample. This distribution has been measured by an Elzon Particle Counter which indicates that this distribution is a 3D distribution. However, during the annealing experiment, the mean grain size distribution has been monitored by 2D observations of a thin section of the sample. In the numerical simulations presented here we seek to be

coherent with this experimental procedure (tab.2.1).

	numerical approach	Initial grain size distribution	dimensions use to simulate the grain growth	grain size distributions determination for experimental fitting
LS2	Level set	initial distribution of Karato 1989 transformed by the inverse Saltykov analysis	2	2D distributions
V2	Vertex (ELLE)	initial distribution of Karato 1989 transformed by the inverse Saltykov analysis	2	2D distributions
LS3/3	Level set	initial distribution of Karato 1989	3	2D distributions obtained by the inverse Saltykov analysis of the 3D result
LS3/2	Level set	initial distribution of Karato 1989	3	2D distributions from mean distributions of slices

TABLEAU 2.1 – Characteristics of the different simulations realized within the present work.

For 2D grain growth simulations (LS2 and V2), we use the initial grain size distribution of Karato 1989 [Karato, 1989] transformed by the inverse Salykov analysis [Saltykov, 1958] which gives a volume distribution with a mean grain size of 2.05 µm, a standard deviation of 0.68 µm and so a σ/μ ratio of 0.33. This analysis permits to compute a statistical equivalent 2D distribution from a 3D one. Then we compare computed grain sizes during the annealing treatment with the ones obtained by Karato.
For the 3D grain growth simulations (LS3/3 and LS3/2), the initial grain size distribution used is the one presented in fig.2.2. Then, for the determination of the grain size evolution during the annealing treatment and the comparison with the experimental ones, two cases will be distinguished. First, the computed 3D grain size distributions will be transformed by the inverse Saltykov analysis (LS3/3) in order to get 2D equivalent distribution comparable with experimental observations. Second, we estimate the 2D grain sizes by projecting the LS functions on regularly spaced slices cross cutting the domain volume. We then compare experimental data with average grain sizes computed from these 2D slices. The initial grain size distributions, in number, for all the simulations are presented in fig.2.3.

The LS3/2 grain size distribution has more small grains than the LS3/3 one. This has already been noticed [Tarquini and Armienti, 2003; Weygand et al., 2001] and may be attributed to the effect of the left distribution truncation.

2.2.4.4 Computational domain size and boundary influence

During the annealing simulations, the number of grains decreases and the portion of grain boundaries in contact with the computational domain boundaries increases. The evolution of these grain boundaries is dictated by the imposed boundary conditions (see section 2.2.3.2) and does not have any physical meaning. Thus when the grain number in the domain is not large enough, the grain growth mechanism is polluted by boundary effects and the mean grain size evolution diverges from the Burke and Turnbull model. In order to have a representative number of grains over a duration comparable with the experimental data (few hours), a larger domain must be considered. Square computational domains of increasing sizes have been tested (see fig.2.4) in order to determine the optimal domain size, with the best ratio of grain number versus computational cost.

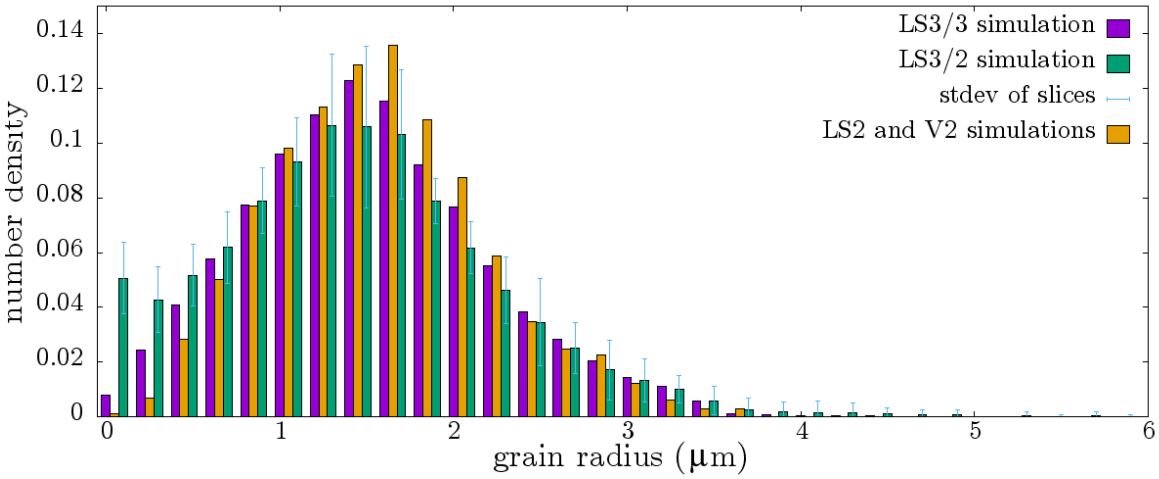


FIGURE 2.3 – Initial grain size distributions for the different simulations (see tab.2.1). As explained in the section the LS3/3 distribution is a 2D Saltykov analysis on 3D grain size distribution and the LS3/2 distribution is obtained by averaging the distributions of the ten 2D sections.

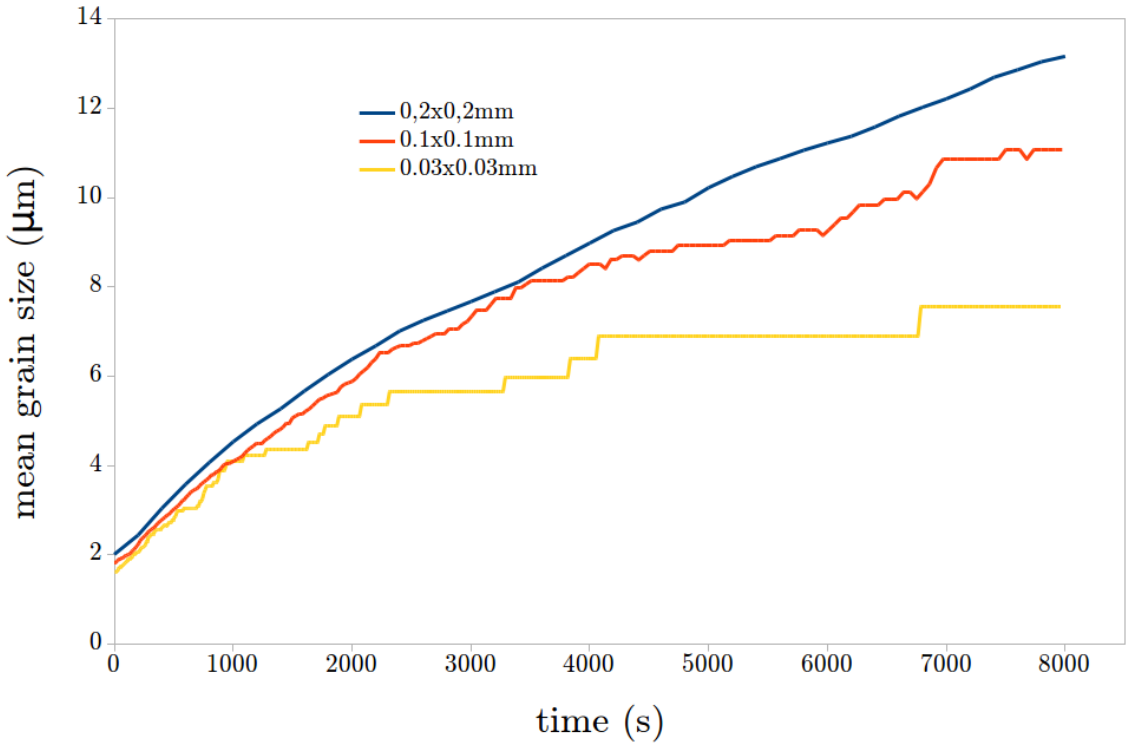


FIGURE 2.4 – Mean grain size evolution during annealing 2D simulation at 1573 K, for a mobility activation energy of 200 kJ and for square computational domains of 0.2x0.2, 0.1x0.1 and 0.03x0.03 mm initially containing respectively 3700, 960 and 110 grains.

The apparition of steps on the evolution curves reflects the fact that the number of grains is no longer representative. Indeed, these steps appear earlier for smaller domains with lower initial grain number. After the convergence study of the mean grain size evolution with the calculation

domaine size, we choose for this study squared or cubic domains with size of 0.2x0.2mm and 0.15x0.15x0.15mm in 2D and 3D, respectively.

Concerning the slices of the LS3/2 simulation (see tab.2.1), in order to get a representative number of grains, we do not consider the results obtained when the number of grains per slice is lower than 200.

2.2.4.5 ELLE grain growth simulations

Within the ELLE software, two algorithms are available to simulate the evolution of a microstructure through grain growth driven by capillarity. These two algorithms are based on the front-tracking method described in the section 2.2.2.2.b.
The first one, called "$growth$" uses normalized material parameters and physical units. In fact, the simulation results of this algorithm are neither dependent on the grain boundary mobility/energy nor on the temperature, timestep or unit of length values. The only parameters which have an impact on the simulation are the numerical parameters such as the switch distance, which controls the maximal displacement of a node during a timestep. Even if the obtained microstructures have similar topological aspect than those obtained from an experimental annealing (such as those obtained by Karato [Karato, 1989] : i.e. foam texture), the grain growth kinetics cannot be considered within a physical point of view.
The second one, called "gbm" takes into account the material parameters and the physical units in the calculation of the node displacements. In this case, grain growth kinetics from ELLE simulation can be compared with those obtained with experimental data. Thus the V2 simulation (see tab.2.1) is performed by using the "gbm" algorithm.

The ELLE's microstructure is initialized by using the "$ppm2elle$" utility which transform a ppm image into a ELLE file. The image used is the one obtained initially by the LS2 (see tab.2.1) 2D level set simulation.

2.2.5 Results

We first present the calibration of the grain boundary mobility activation energy with the experimental data for the different simulations (see tab.2.1). Then, the grain size distributions at different time steps are compared for the different simulations. Finally, one of the computed microstructures is compared with the experiment and we present an annealing simulation of a more complex microstructure with an initially heterogeneous grain size distribution.

2.2.5.1 Material parameters calibration

For all the simulations described in section 2.2.4.3 and in order to determine the best-fitting activation energy we adopt the following approach : the interfacial energy and the reference mobility are fixed respectively at 1.4 $J{\cdot}m^{-2}$ and 4.10^4 $mm^4{\cdot}J^{-1}{\cdot}s^{-1}$, then an activation energy is chosen. Here we select an initial intermediate value of 180 $kJ{\cdot}mol^{-1}$ between those determined experimentally by Karato 1989 [Karato, 1989]. A grain growth simulation is then performed until reaching a $< R >^2 - < R_0 >^2$ value equal to one of those obtained experimentally. Using eq.(2.14) and the Arrhenius law of the mobility, the expression of the optimized activation energy Q can be expressed as :

$$Q(J.mol^{-1}) = 180.10^3 - RT ln(\frac{t_{simu}}{t_{exp}}) \tag{2.16}$$

where t_{simu} and t_{exp} are respectively the simulation time and the experimental time needed to reach the same $< R >^2 - < R_0 >^2$ value. By using the experimental results of Karato 1989 [Karato, 1989] and averaging the obtained values with the different points at 1473K and 1573K, we obtain a best-fitting activation energy value. For both the LS3/3 and LS3/2 simulations, the best fitting activation energy value is 171.5 kJ·mol^{-1} while the LS2 and V2 ones lead to 185 kJ·mol^{-1}. However, the kinetics obtained with those values are quite different between the 3D (LS3/3 and LS3/2) and the 2D simulations (LS2 and V2) in particular at the beginning where the 2D grain growth is slower than the 3D one and at the end where the 2D grain growth is faster than the 3D one. The reference mobility and the activation energy for the LS2 and V2 simulations are then adjusted. The assumed activation energy is lowered (180 kJ·mol^{-1}), and the reference mobility is adjusted to fit the LS3/3 grain growth kinetics. Final mobility parameters (M_0(mm^4·J^{-1}·s^{-1}), Q(kJ·mol^{-1})) for the different simulations are $(4.10^4, 171.5)^{LS3/3,LS3/2}$ and $(6.10^4, 180)^{LS2,V2}$.
Figure 2.5 shows the experimental grain growth kinetics from [Karato, 1989] and the computed and then extrapolated (using the Burke and Turnbull mean field model, eq.(2.15)) grain growth kinetic for the 3D simulations (LS3/3 and LS3/2) and the 2D ones (LS2 and V2). Those results are presented through the plot of $log(< R >^2 - < R_0 >^2)$ against $log(t)$ which allows to determine n and α of the eq.(2.15) mean field model by fitting the obtained results.

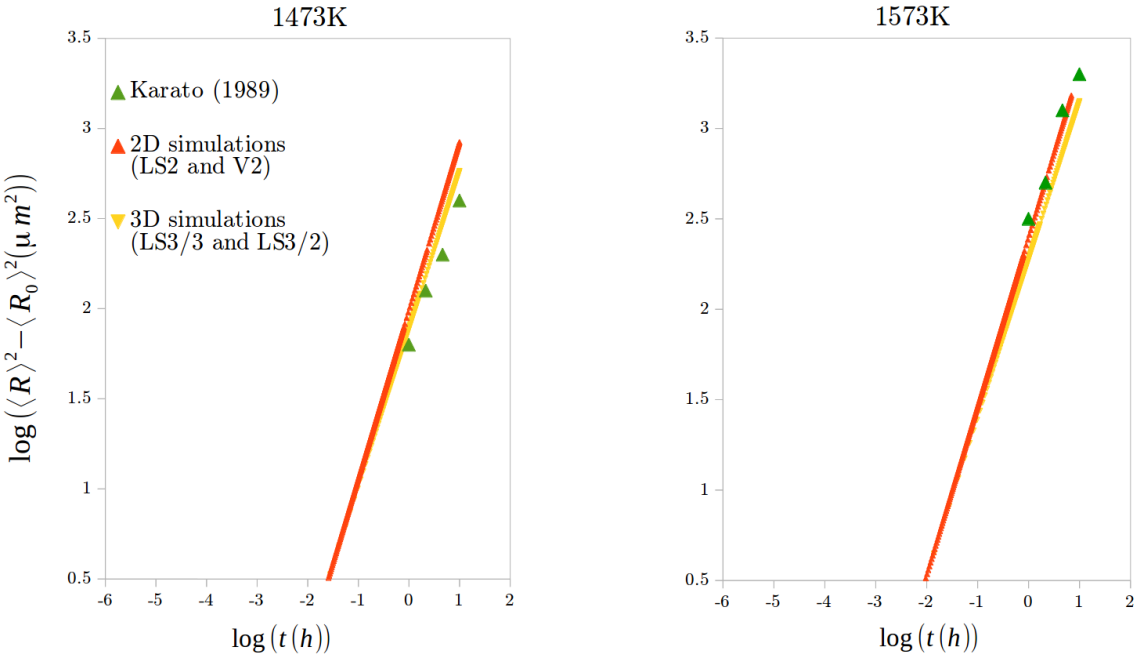


FIGURE 2.5 – Mean grain size time evolution at 1473 K (left) and 1573 K (right), $M_0 = 4.10^4$ mm^4·J^{-1}·s^{-1} and Q = 171.5 kJ·mol^{-1} for the LS3/3 and the LS3/2 simulations and $M_0 = 6.10^4$ mm^4·J^{-1}·s^{-1} and Q = 185 kJ·mol^{-1} for the LS2 and the V2 ones. The experimental results of Karato [Karato, 1989] are plotted in green.

For both the LS3/3 and the LS3/2 simulations the grain growth kinetics are similar (fig.2.5 and fig.2.6) and the n and α values are respectively equal to 0.88 and 1.27. For the LS2 and V2, the grain growth kinetics are also almost the same with $n = 0.93$ and $\alpha = 1.34$. Those adjusted parameters are not far from those obtained for these initial distributions with the mean field models of Cruz-Fabianno et al. [Cruz-Fabiano et al., 2014] for 2D grain growth and Maire et al. [Maire et al., 2016] for 3D grain growth.

All simulation results at 1573K are plotted on fig.2.6, for their own best-fitting mobility parameters. The related distributions are presented in fig.2.7 at different time steps. Within this figures,

the maximum time for the comparison is limited by the LS3/2 simulation in which the number of grains per slice decreases rapidly under 200.

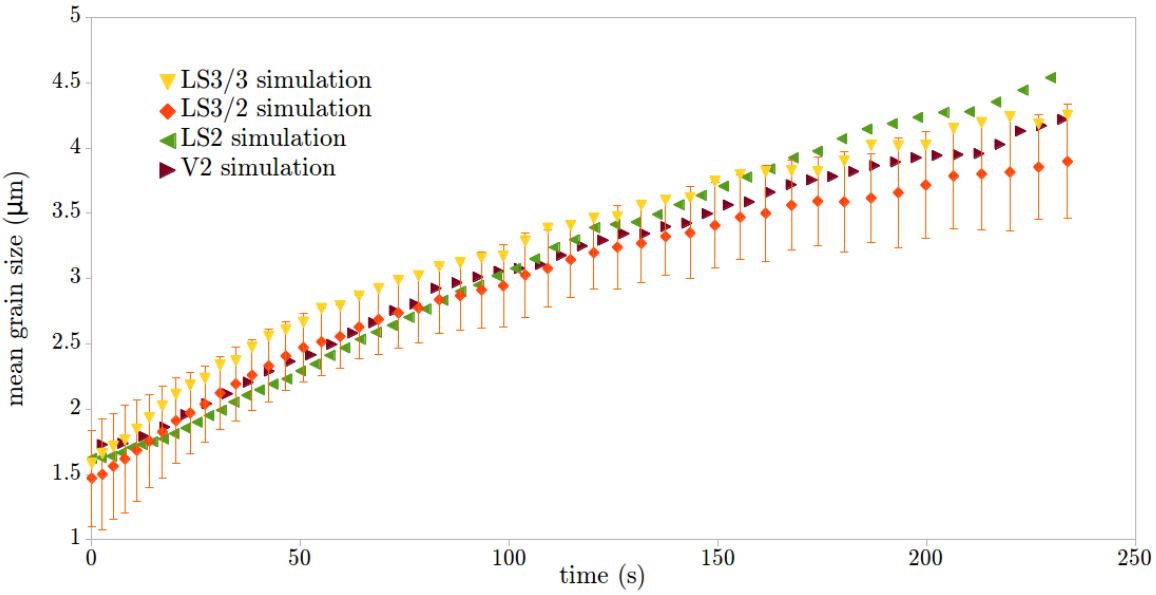


FIGURE 2.6 – Evolution of the mean grain size for each simulations : LS3/3 (yellow), LS3/2 (orange) and standard deviation as error bars, LS2 (green), V2 (brown)

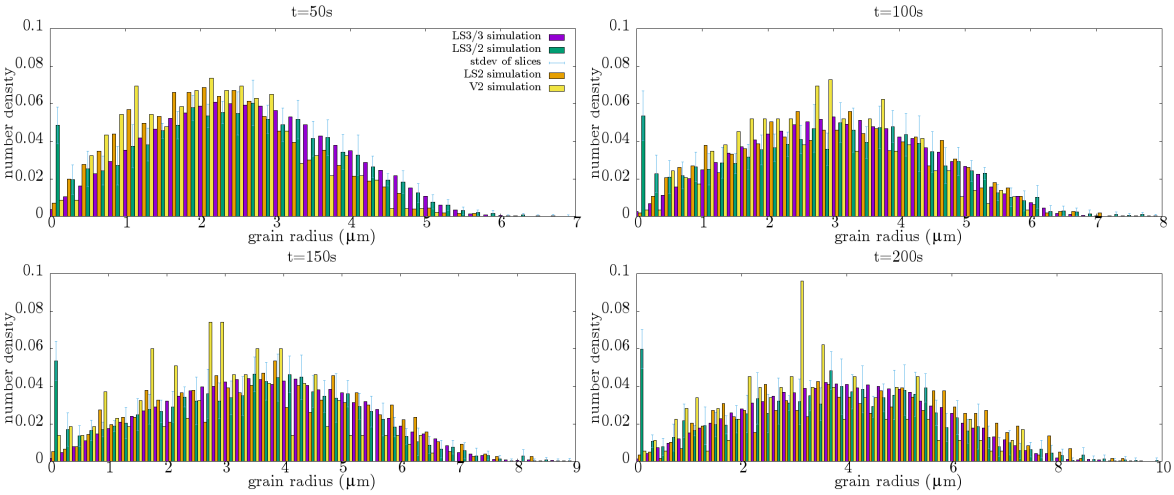


FIGURE 2.7 – Comparison of the grain size distributions for the different simulations during an annealing treatment at 1573K.

Figures 2.6 and 2.7 show that the different simulations (2D or 3D, LS or V) give consistent results. The mean grain size evolutions (fig.2.6) are close to each other. Even if the LS3/2 simulation underestimates the mean grain size in comparison with the LS3/3 one, the mean grain size of the latter is within the standard deviation of the one determined by the slices averaging. The grain size distribution evolutions (fig.2.7) also show consistent results. The LS3/2 still includes more small grains than the other ones, which may be explained by the reasons exposed in section 2.2.4.3.

2.2.5.2 The olivine grain growth kinetics

Once the material parameters are calibrated (through the activation energy in our case), the computed grain growth kinetics is in good agreement with the experimental one (see fig.2.5). Moreover, the grain dimension and geometry obtained from the computed 2D microstructure after 2 hours of annealing is comparable to the one presented by Karato 1989 (fig.2.8) [Karato, 1989].

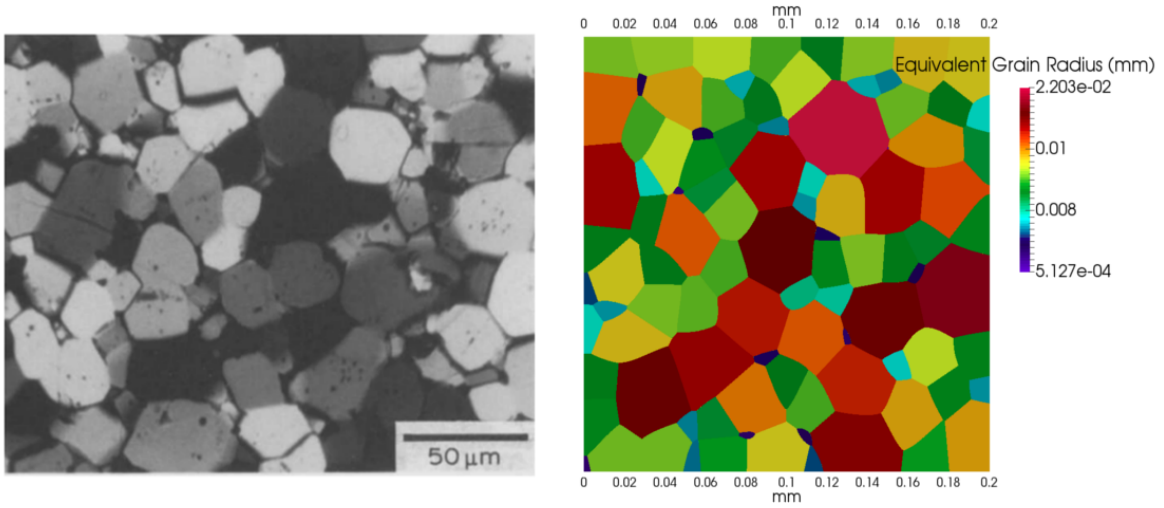


FIGURE 2.8 – Left : experimental microstructure from [Karato, 1989] after 2 hours annealing at 1573K, right : LS2 simulation after 2 hours annealing at 1573K

In order to simulate a system more similar to a natural deformed rock, we consider a fine grained zone (mylonitic or ultramylonitic texture) embedded in a zone of coarser grains (porphyric texture) (fig.2.9), representing a fine-grained shear band.

The microstructure is considered as homogeneous when the mean grain sizes of the inner part and the outer parts, plus or minus the standard deviation, are equal. At 1250K, the time needed to erase the scar does not exceed 200 days (fig.2.9).

2.2.6 Discussions

The capillarity-driven GBM is a 3D physical mechanism controlled at the first order by the boundary curvatures. In fact, the 2-dimensional aspect of the curvature can strongly impact the grain growth kinetics. For instance, a highly curved boundary in one direction may be submitted to a null driving force if the curvature in the other direction is also elevated with an opposite sign. Although X-ray CT scanning is increasingly used to measure 3D fabrics in rocks [Bedford et al., 2017], the technique would be of limited interest for a monomineralic aggregate. Therefore, interpretations of 2D observations have to be taken with caution, keeping in mind the 3D character of the observed mechanism. Thus, numerical simulations are convenient tools to study this 2D/3D paradigm, which is mostly ignored in the state-of-the-art grain growth experiments.

Our results suggests that, as grain growth is inherently a 3D process, it should be modelled also in 3D. However, the numerical costs of a 3D simulation may be quickly prohibitive. The Saltykov method is an interesting alternative to the use of 3D model since it allows determining an equivalent 3D grain size distribution (or inversely). Hereafter, 3D numerical simulations and their 2D equivalent can be realized in order to define some transition laws for instance to adjust a 3D mean field model from a 2D one.

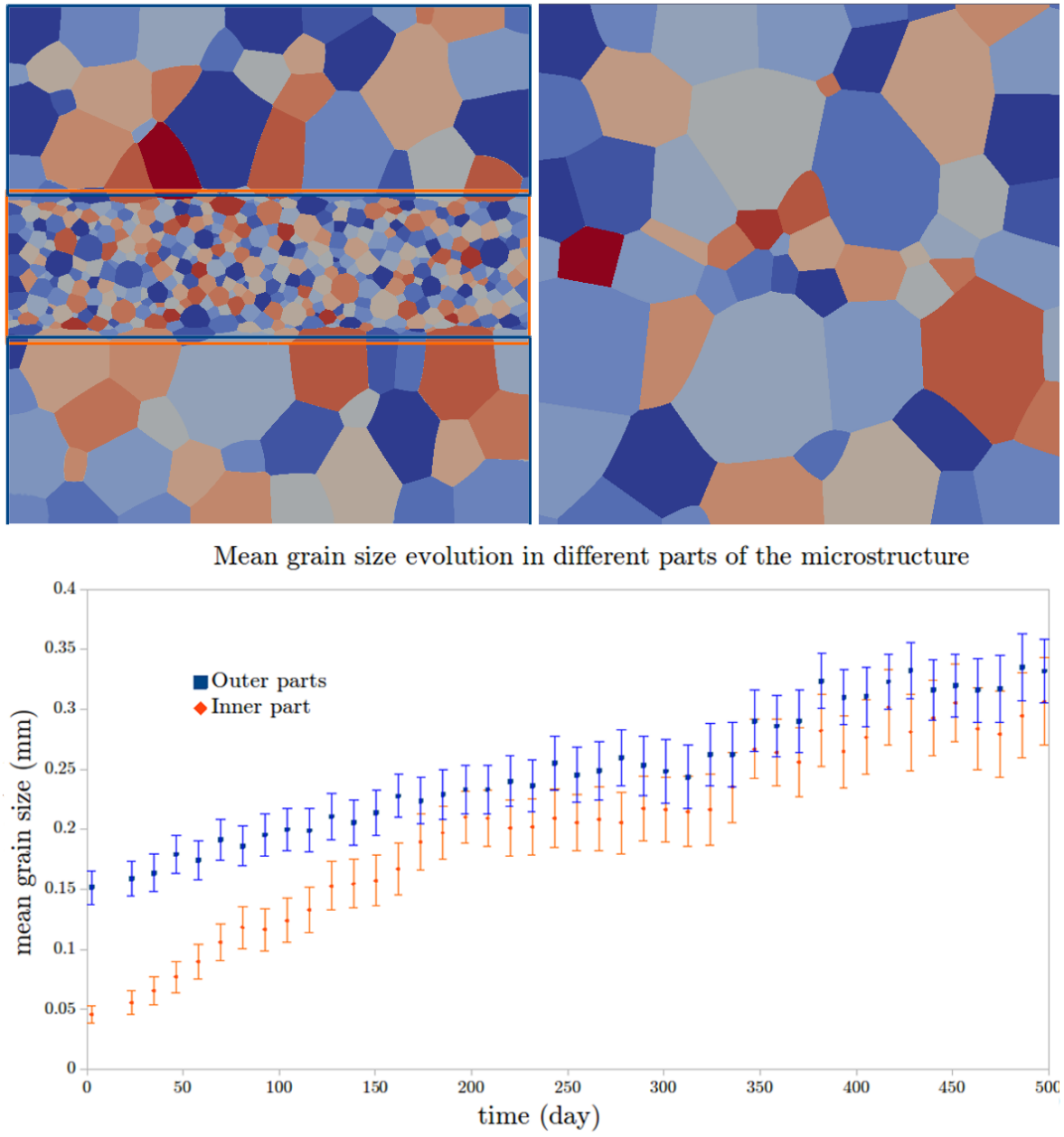


FIGURE 2.9 – Left top : initial microstructure with fine grain zone representative of a shear band, the domain size 3x3mm, right top : microstructure after 185 days annealing at 1250K, bottom : grain size evolutions of the inner part (orange) and the outer parts (blue) of the microstructure, the color are also relative to the colored boxes of the left top picture, the error bars are related to the standard deviation of calculated mean grain size. The grain colors are related to the index of the global level set (GLS) function which describes the considered grain.

The comparison of the 2D LS simulation with the ELLE simulation shows very good agreement. Nevertheless the ELLE grain growth simulation has a much lower computational cost than the LS one : one hour is enough to simulate the evolution of the system in the first case while the same LS computation takes a few dozen hours. Indeed, as mentioned above, the ELLE approach only discretises the interfaces, which is equivalent to deal with a 1D mesh while the LS calcula-

tion needs a 2D mesh. Moreover, within the ELLE simulation, the displacement of the nodes is sequential while the LS approach uses a FE resolution which is more expensive in computational resources. Nevertheless, the ELLE approach can become limited for some applications. First, the non description of grain interiors may limit the simulation of some processes for instance those which depend on intragranular stored energy. The LS approach permits to describe intragranular fields within a same framework which can be useful for instance for dynamic recrystallization modeling. Second, the 3D implementation within a vertex approach is not straightforward and uncommon in the state of the art, due to the difficulty of managing topological events as shrinking or nucleation of grains. As the grain growth process is inherently a 3D mechanism, it can be useful to model it in 3D, that is something the LS approach allows to do.

Considering the GBM in a pure olivine system and based on our results, we conclude that a surface energy of 1.4 $J{\cdot}m^{-2}$ and a mobility of $M_0 = 4.10^4$ $mm^4{\cdot}J^{-1}{\cdot}s^{-1}$, $Q = 171.5$ $kJ{\cdot}mol^{-1}$ for 3D simulation and $M_0 = 6.10^4$ $mm^4{\cdot}J^{-1}{\cdot}s^{-1}$, $Q = 180$ $kJ{\cdot}mol^{-1}$ for 2D ones, are satisfying estimates for olivine/olivine grain boundaries. The distribution evolutions presented in fig.2.7 are close to each other. This shows that 2D simulations can predict equivalent distributions of 3D simulations by adapting the (M_0, Q) couple. In all cases, 2D or 3D observations of a 3D system or 2D computations, the grain growth kinetics is extremely rapid compared to the typical geological timescale, the grain size increasing from a few micrometers to a few tenths of millimeters in a dozen hours. Within the context of the dormant plate boundaries, it signifies the rapid erasing of fine-grained weak zones.

If we consider that the presence of multiple fine-grained bands as in fig.2.9 is responsible for the existence of weak zones, the erasing scar time can be evaluated as the time needed to homogenize the microstructure. Our results show this time which is extremely fast against the hundreds Myr for the persistence of natural weak zones. As mentioned previously, the fast grain growth kinetics and so the rapid scar erasing can be attributed to the purity of the systems considered here. Indeed, both the experimental samples of Karato [Karato, 1989] and the numerical microstructures of the present work are only composed of olivine. The inhibition of grain growth in dormant weak zone conditions (i.e. non-deformed), can be explained by the presence of secondary phases (SP) in mantle rocks.
The presence of SP in peridotites such as pyroxenes, spinels, plagioclase and garnets will influence different physico-chemical processes. Indeed, depending on second phase particles (SPP) size and nature, a drag pressure can act on grain boundaries and counteract grain growth driving pressure [Herwegh et al., 2011] (well known as Smith-Zener pinning mechanism [Smith, 1948]). The presence of free surfaces and pores may also act as SPP and impede the GBM through the Smith-Zener pinning mechanism [Agnoli et al., 2014; Scholtes et al., 2016b]. The movement of interfaces between two phases may also be limited because of the kinetics of chemical elements transfer throughout the interface [Hiraga et al., 2010]. In our simulations, the grain boundaries move to minimize their total surface without be impeded by any SPP or interphase boundaries. As the natural peridotites also contain a certain amount of second phases, it seems obvious that the time needed to erase inherited structures in natural rocks is much larger than in pure olivine aggregates [Bercovici and Ricard, 2012].

2.2.7 Conclusion

The simulations performed within the present work highlight the 3D character of the grain growth mechanism, and the influence of the mode of observation of grain size evolution during a grain growth experiment or simulation. As 3D simulations or experimental observations are not always easy to set up, 2D ones are often used to determine 2D effective material parameters which are different from the physical 3D ones in the presented results. Those effective parameters allow to predict a 2D behavior equivalent to a 3D one. A phenomenological law which evaluates the

physical material parameters Mγ from the ones calibrated with 2D observations may be determined either by the realization of similar simulations with different grain size distributions or by experiments coupling 3D and 2D observations during annealing.

Like in previous papers focusing on grain growth in pure olivine aggregates [Evans et al., 2001; Karato, 1989], we observe that grain growth kinetics is very fast. In fact, this grain growth rate suggests that persistent weak zones should disappear within a few hundred days which is not observed in nature. Thus, pure olivine aggregates are not relevant to study the persistence of weak zones at the geological time scale through the grain growth in mantle rocks. Nevertheless, neither the grain boundary pinning by SPP, nor the influence of interphase boundaries have been considered in this work. In future work, the numerical simulation will be enriched in order to take into account those different mechanisms. The simulations presented in this work have permitted to determine Mγ products for the olivine/olivine grain boundaries which can be used within more complex simulations.

2.2.8 Acknowledgements

We thank all the members of the ELLE development group, in particular Lynn Evans for her help with ELLE grain growth simulations.
This work was supported by CNRS INSU 2018-programme TelluS-SYSTER. The supports of the French Agence Nationale de la Recherche (ANR), ArcelorMittal, AREVA, ASCOMETAL, AUBERT&DUVAL, CEA, SAFRAN through the DIGIMU Industrial Chair and consortium are gratefully acknowledged. The authors thank Editor Key Hirose and two anonymous reviewers for their constructive comments.

2.3 Compléments et limites sur cette partie

2.3.1 Croissance de grain à partir d'une microstructure réelle

La forme des grains et la distribution de taille de grains d'une roche réelle est complexe et il est difficile de générer numériquement une microstructure qui s'apparenterait à une microstructure réelle. Comme la croissance de grains est fortement dépendante des courbures des joints de grains, la question de l'influence de la microstructure utilisée sur la cinétique de croissance se pose.

2.3.1.1 Numérisation de la lame mince utilisée

La microstructure numérique initiale a été obtenue à partir d'une image de lame mince de péridotite déformée de texture mylonitique [Linckens et al., 2011] (voir Fig.2.10). Pour que cette image puisse être intégrée par le code et utilisée comme microstructure initiale, il faut que chaque grain ait une couleur différente et unie. Les contours de chaque grain de cette image ont été vectorisés puis chaque grain a été colorié d'une couleur différente (voir Fig.2.10).

Afin d'avoir des résultats significatifs sur une durée assez longue, l'image a été reproduite quatre fois et mise à bout à bout pour former un rectangle de dimension deux fois plus grande. Le domaine de calcul est alors d'une taille relativement grande ce qui limite l'impact des joints en contact avec les bords sur la cinétique de croissance des grains.

2.3.1.2 Resultats

La cinétique d'évolution de la taille de grains sera étudiée ici à l'aide du modèle de Burke et Turnbull (voir section précédente). Plusieurs simulations ont été réalisées à différentes tempéra-

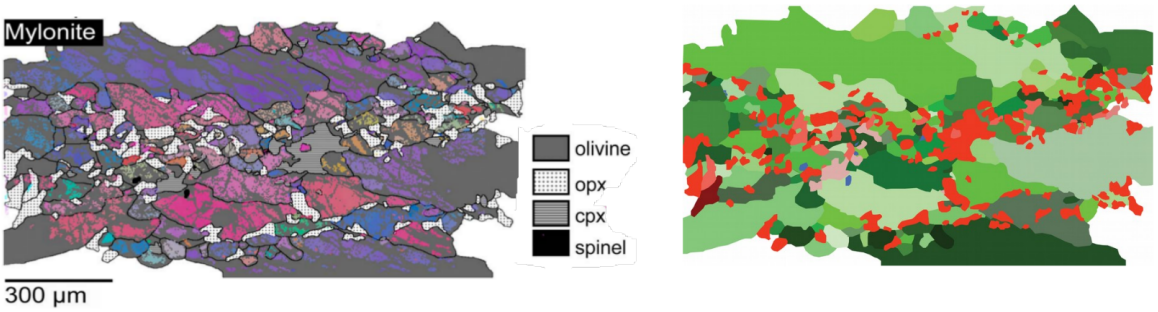


FIGURE 2.10 – A gauche, lame mince d'une péridotite déformée, les couleurs représentent les orientations cristallographiques de l'olivine [Linckens et al., 2011], à droite, image de la lame après traitement numérique, les différentes nuances de vert correspondent à l'olivine, les nuances de rouge aux pyroxènes et de bleu au spinelle.

tures afin de déterminer si les paramètres n et α du modèle y étaient sensibles, les résultats sont présentés en figure 2.11.

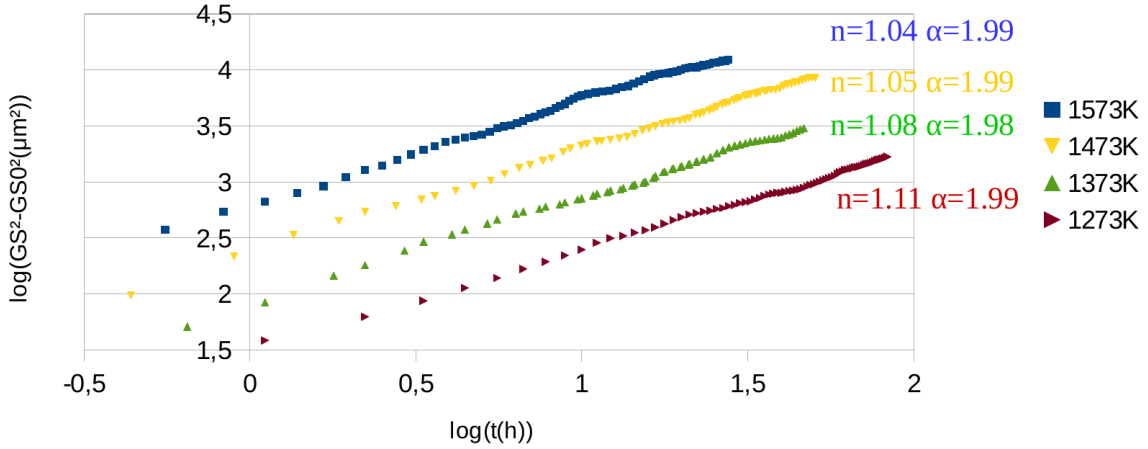


FIGURE 2.11 – Évolution de la taille moyenne des grains présentée sous la forme $log(GS^2 - GS0^2) = f(log(t))$ pour une microstructure initiale du type lame mince [Linckens et al., 2011] et pour différentes températures.

A température égale, la vitesse de croissance de grains est plus élevée avec ce type de microstructure qu'avec une microstructure homogène comme dans la section 2.2. Le paramètre α est éloigné de la valeur 0.5 largement utilisée dans la littérature pour la croissance de grains des péridotites [Karato, 1989], il semble de plus être indépendant de la température. Le paramètre n augmente très légèrement lorsque la température de la simulation diminue. Ces résultats illustrent la fiabilité de la forme généralisée du modèle de Burke et Turnbull avec $p = 2$ dans le cas considéré ici. L'évolution de la microstructure simulée au cours du recuit est présenté en figure 2.12 pour une température de 1573K.

2.3.1.3 Discussion

La croissance de grains simulée d'une microstructure extraite d'une lame mince de péridotite présente, comme pour une microstructure générée numériquement, une cinétique pouvant être modélisée par une loi de Burke et Turnbull. Cette évolution est plus rapide que pour une microstructure générée numériquement ce qui peut s'expliquer par la forme des grains qui, dans le

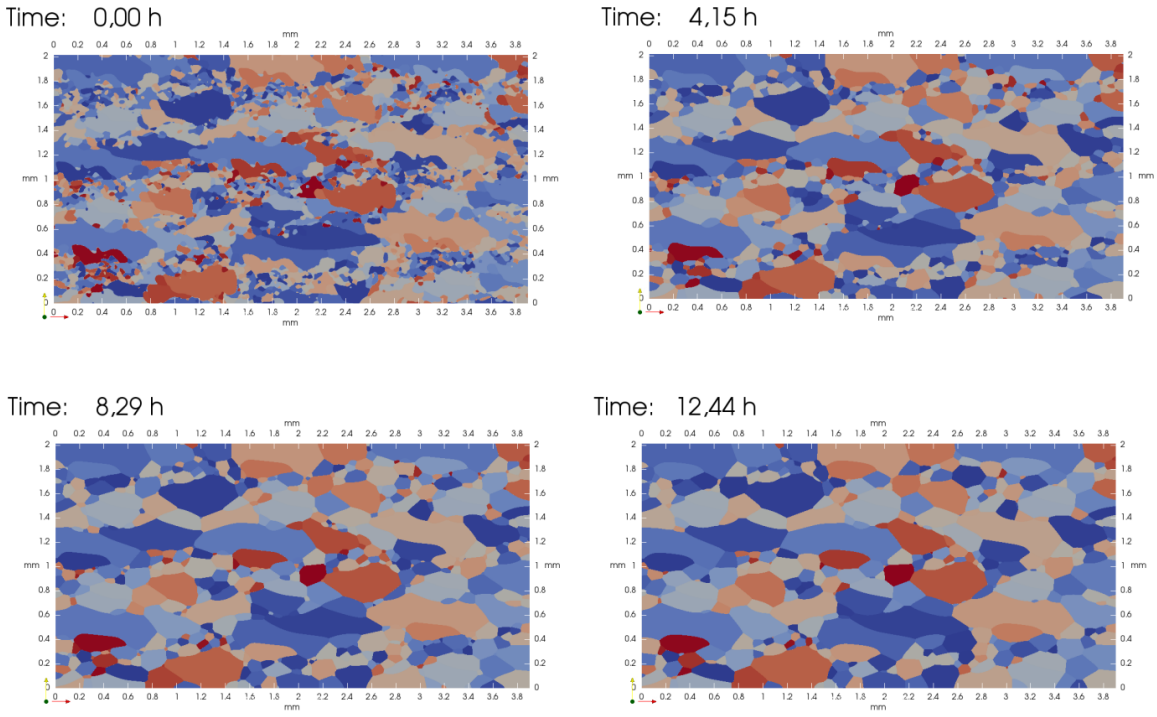


FIGURE 2.12 – Microstructure simulée à différents temps pour une température de recuit de 1573K.

cas de la lame mince possèdent des contours irréguliers avec une tortuosité importante. Comme la force considérée ici est purement capillaire et donc dépendante de la courbure des joints de grains, il paraît normal que la croissance soit plus rapide pour des grains irréguliers (i.e. cas de la lame mince) que pour des grains de forme polyédriques (i.e. cas numérique), en tout cas dans les premiers stades de la croissance. Le fait que le paramètre n du modèle augmente légèrement avec la diminution de la température peut également être expliqué par le fait que les courbures des joints de grains sont plus élevées au début de la simulation et tendent à s'aplanir ce qui a pour conséquence de ralentir l'évolution. Comme les simulations réalisées à plus basses températures couvrent une durée quasiment équivalente à celles à hautes températures, la vitesse de croissance normalisée est alors plus élevée. Cette augmentation de n peut aussi être expliquée par le nombre de grains utilisé qui dans les simulations à hautes températures diminue plus rapidement et pourrait être représentatif moins longtemps que dans les simulations à basses températures.
Dans les deux cas (microstructure numérique et lame mince) la vitesse de croissance de grain est élevée, et les grains d'olivine peuvent croître de quelques micromètres jusqu'à une centaine de micromètres en une dizaine d'heures. Une des raisons de cette croissance rapide est la pureté des échantillons considérés. Les joints de grains ne rencontrent aucun obstacle à leur migration de même qu'aucunes réactions chimiques ne sont susceptibles de limiter la croissance des grains.

2.3.2 Limites

Les cinétiques de croissance obtenues dans le cas de polycristaux d'olivine pure sont très rapides. Si on extrapole les résultats obtenus à des échelles de temps représentatives des processus géologiques, on trouve des tailles de grains de l'ordre de la dizaine de mètres (pour un recuit de 1Ma à 1273K ce qui correspond à des conditions lithosphériques). Cet ordre de grandeur est évidemment irréaliste et amène à se questionner sur la nature des mécanismes pouvant potentiellement ralentir la croissance. Ce questionnement sera à la base des deux chapitres suivants.

2.4 Références

Agnoli, A., Bozzolo, N., Logé, R., Franchet, J.-M., Laigo, J., and Bernacki, M. (2014). Development of a level set methodology to simulate grain growth in the presence of real secondary phase particles and stored energy–application to a nickel-base superalloy. *Computational Materials Science*, 89 :233–241. 68, 80

Becker, J. K., Bons, P. D., and Jessell, M. (2008). A new front-tracking method to model anisotropic grain and phase boundary motion in rocks. *Computers & Geosciences*, 34(3) :201–212. 64, 65, 67

Bedford, J., Fusseis, F., Leclère, H., Wheeler, J., and Faulkner, D. (2017). A 4d view on the evolution of metamorphic dehydration reactions. *Scientific reports*, 7(1) :6881. 78

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2012). Mechanisms for the generation of plate tectonics by two-phase grain-damage and pinning. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 202 :27–55. 62, 63, 80

Bernacki, M., Resk, H., Coupez, T., and Logé, R. E. (2009). Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(6) :064006. 64, 68

Boneh, Y., Wallis, D., Hansen, L. N., Krawczynski, M. J., and Skemer, P. (2017). Oriented grain growth and modification of 'frozen anisotropy'in the lithospheric mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 474 :368–374. 71

Bons, P., Koehn, D., and Jessell, M. W. (2007). *Microdynamics simulation*, volume 106. Springer Science & Business Media. 64, 65

Bullard, J., Garboczi, E., Carter, W., and Fuller Jr, E. (1995). Numerical methods for computing interfacial mean curvature. *Computational materials science*, 4(2) :103–116. 66

Burke, J. and Turnbull, D. (1952). Recrystallization and grain growth. *Progress in metal physics*, 3 :220–292. 71

Chen, L.-Q. and Yang, W. (1994). Computer simulation of the domain dynamics of a quenched system with a large number of nonconserved order parameters : The grain-growth kinetics. *Physical Review B*, 50(21) :15752. 64, 68

Cruz-Fabiano, A. L., Logé, R., and Bernacki, M. (2014). Assessment of simplified 2d grain growth models from numerical experiments based on a level set framework. *Computational Materials Science*, 92 :305–312. 64, 68, 72, 76

Duyster, J. and Stöckhert, B. (2001). Grain boundary energies in olivine derived from natural microstructures. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 140(5) :567–576. 71

Evans, B., Renner, J., and Hirth, G. (2001). A few remarks on the kinetics of static grain growth in rocks. *International Journal of Earth Sciences*, 90(1) :88–103. 63, 72, 81

Fausty, J., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., Franchet, J.-M., and Bernacki, M. (2018). A new level set-finite element formulation for anisotropic grain growth. 71

Furstoss, J., Bernacki, M., Ganino, C., Petit, C., and Pino-Muñoz, D. (2018). 2d and 3d simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 283 :98–109. 62

Gueydan, F., Précigout, J., and Montesi, L. G. (2014). Strain weakening enables continental plate tectonics. *Tectonophysics*, 631 :189–196. 63

Hallberg, H. (2011). Approaches to modeling of recrystallization. *Metals*, 1(1) :16–48. 67

Heron, P. J., Pysklywec, R. N., and Stephenson, R. (2016). Lasting mantle scars lead to perennial plate tectonics. *Nature communications*, 7 :11834. 63

Herwegh, M., Linckens, J., Ebert, A., Berger, A., and Brodhag, S. (2011). The role of second phases for controlling microstructural evolution in polymineralic rocks : A review. *Journal of Structural Geology*, 33(12) :1728–1750. 80

Hiraga, T., Tachibana, C., Ohashi, N., and Sano, S. (2010). Grain growth systematics for forsterite±enstatite aggregates : Effect of lithology on grain size in the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 291(1-4) :10–20. 63, 80

Hirth, G. and Kohlstedt, D. L. (1995). Experimental constraints on the dynamics of the partially molten upper mantle : Deformation in the diffusion creep regime. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 100(B2) :1981–2001. 72

Hitti, K. and Bernacki, M. (2013). Optimized dropping and rolling (odr) method for packing of poly-disperse spheres. *Applied Mathematical Modelling*, 37(8) :5715–5722. 70

Humphreys, F. J. and Hatherly, M. (2012). *Recrystallization and related annealing phenomena*. Elsevier. 64

Jessell, M., Kostenko, O., and Jamtveit, B. (2003). The preservation potential of microstructures during static grain growth. *Journal of Metamorphic Geology*, 21(5) :481–491. 63, 65

Karato, S. (1989). Grain growth kinetics in olivine aggregates. *Tectonophysics*, 168(4) :255–273. 63, 71, 72, 73, 75, 76, 78, 80, 81, 82

Kohlstedt, D. L. (2007). Properties of rocks and minerals-constitutive equations, rheological behavior, and viscosity of rocks. In *Treatise on Geophysics*, pages 389–417. Elsevier. 63

Kuprat, A., George, D., Straub, G., and Demirel, M. C. (2003). Modeling microstructure evolution in three dimensions with grain3d and lagrit. *Computational Materials Science*, 28(2) :199–208. 67

Linckens, J., Herwegh, M., Müntener, O., and Mercolli, I. (2011). Evolution of a polymineralic mantle shear zone and the role of second phases in the localization of deformation. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 116(B6). 81, 82

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2016). Improvement of 3d mean field models for capillarity-driven grain growth based on full field simulations. *Journal of materials science*, 51(24) :10970–10981. 64, 68, 72, 76

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., Settefrati, A., and Bernacki, M. (2017). Modeling of dynamic and post-dynamic recrystallization by coupling a full field approach to phenomenological laws. *Materials & Design*, 133 :498–519. 63, 70

Mason, J. (2015). Grain boundary energy and curvature in monte carlo and cellular automata simulations of grain boundary motion. *Acta Materialia*, 94 :162–171. 65

Mason, J., Lind, J., Li, S., Reed, B., and Kumar, M. (2015). Kinetics and anisotropy of the monte carlo model of grain growth. *Acta Materialia*, 82 :155–166. 66

Merriman, B., Bence, J. K., and Osher, S. J. (1994). Motion of multiple junctions : A level set approach. *Journal of Computational Physics*, 112(2) :334–363. 69, 70

Miodownik, M. A. (2002). A review of microstructural computer models used to simulate grain growth and recrystallisation in aluminium alloys. *Journal of Light Metals*, 2(3) :125–135. 67

Platt, J. and Behr, W. (2011). Grainsize evolution in ductile shear zones : Implications for strain localization and the strength of the lithosphere. *Journal of Structural Geology*, 33(4) :537–550. 63

Resk, H., Delannay, L., Bernacki, M., Coupez, T., and Logé, R. (2009). Adaptive mesh refinement and automatic remeshing in crystal plasticity finite element simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(7) :075012. 70

Rohrer, G. S. (2011). Grain boundary energy anisotropy : a review. *Journal of materials science*, 46(18) :5881–5895. 71

Rollett, A. (1997). Overview of modeling and simulation of recrystallization. *Progress in materials science*, 42(1-4) :79–99. 67

Saltykov, S. A. (1958). Stereometric metallography. *Metallurgizdat, Moscow*, 267. 62, 73

Scholtes, B., Boulais-Sinou, R., Settefrati, A., Muñoz, D. P., Poitrault, I., Montouchet, A., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2016a). 3d level set modeling of static recrystallization considering stored energy fields. *Computational Materials Science*, 122 :57–71. 68

Scholtes, B., Ilin, D., Settefrati, A., Bozzolo, N., Agnoli, A., and Bernacki, M. (2016b). Full field modeling of the zener pinning phenomenon in a level set framework- discussion of classical limiting mean grain size equation. In *Superalloys 2016*, pages 497–503. John Wiley. 80

Scholtes, B., Shakoor, M., Settefrati, A., Bouchard, P.-O., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2015). New finite element developments for the full field modeling of microstructural evolutions using the level-set method. *Computational Materials Science*, 109 :388–398. 64, 69

Shakoor, M., Scholtes, B., Bouchard, P.-O., and Bernacki, M. (2015). An efficient and parallel level set reinitialization method–application to micromechanics and microstructural evolutions. *Applied Mathematical Modelling*, 39(23-24) :7291–7302. 69

Smith, C. (1948). Grains, phases, and interphases : An interpretation of microstructure : Transactions of the american institute of mining and metallurgical engineers, v. 175. 80

Solomatov, V., El-Khozondar, R., and Tikare, V. (2002). Grain size in the lower mantle : constraints from numerical modeling of grain growth in two-phase systems. *Physics of the Earth and planetary interiors*, 129(3-4) :265–282. 63, 65, 67

Tarquini, S. and Armienti, P. (2003). Quick determination of crystal size distributions of rocks by means of a color scanner. *Image Analysis & Stereology*, 22(1) :27–34. 73

Tingle, T. N., Green II, H. W., Scholz, C. H., and Koczynski, T. (1993). The rheology of faults triggered by the olivine-spinel transformation in mg2geo4 and its implications for the mechanism of deep-focus earthquakes. *Journal of Structural Geology*, 15(9-10) :1249–1256. 63

Tommasi, A., Knoll, M., Vauchez, A., Signorelli, J. W., Thoraval, C., and Logé, R. (2009). Structural reactivation in plate tectonics controlled by olivine crystal anisotropy. *Nature Geoscience*, 2(6) :423. 63

Vissers, R., Drury, M., Hoogerduijn, E., Spiers, C., Van der Wal, D., et al. (1995). Mantle shear zones and their effect on lithosphere strength during continental breakup. *Tectonophysics*, 249(3-4) :155–171. 63

Weygand, D., Brechet, Y., and Lepinoux, J. (2001). A vertex simulation of grain growth in 2d and 3d. *Advanced Engineering Materials*, 3(1-2) :67–71. 67, 73

Wilson, J. T. (1966). Did the atlantic close and then re-open? *Nature*, 211(5050) :676–681. 63

Chapitre 3

Croissance de grains dans les matériaux multiphasés : simulation et application aux roches du manteau

Sommaire

3.1 Introduction 90
3.2 Full field and mean field modeling of grain growth in a multiphase material under dry conditions : application to peridotites 90
3.2.1 Introduction 90
3.2.2 Physical processes and methods 91
3.2.3 Full field simulation results 95
3.2.4 Discussion 100
3.2.5 Conclusion 108
3.2.6 Aknowledgments 108
3.3 Discussion et limites 109
3.3.1 Application à des roches réelles 109
3.3.2 Cinétique de croissance des phases secondaires 110
3.3.3 Migration des joints de grain d'olivine 111
3.4 Références 112

3.1 Introduction

Comme on a pu le voir dans le chapitre précédent, la cinétique de croissance de grain des péridotites ne peut être décrite correctement par une croissance par capillarité pure d'un agrégat d'olivine. La piste la plus simple pour trouver des mécanismes susceptibles de ralentir la croissance consiste à regarder du côté des phases secondaires présentes dans les péridotites. En effet, les roches mantelliques ne sont que très rarement des matériaux monophasés et peuvent contenir jusqu'à 40% de phases secondaires (voir section 1.1.3). Dans ce chapitre on va donc se consacrer dans un premier temps, à prendre en compte ces phases secondaires dans le cadre numérique champ complet LS et dans un modèle en champ moyen. Enfin on essaiera d'appliquer ce nouveau formalisme à un contexte géologique réel ce qui permettra de confronter la compréhension actuelle de la croissance de grains dans les roches mantelliques (essentiellement liée aux expériences de laboratoire) avec les contraintes que peuvent apporter les observations naturelles.

3.2 Full field and mean field modeling of grain growth in a multiphase material under dry conditions : application to peridotites

This work has been published in the Journal of Geophysical Research : Solid Earth, [Furstoss et al., 2020].

Abstract

We present a full field framework based on the level-set (LS) approach, which enables to simulate grain growth in a multiphase material. Our formalism permits to take into account different types of second phases, which can be static or dynamic (i.e. evolving also by grain growth) and reproduce both transient (evolving relative grain sizes) and steady-state structures. We use previously published annealing experiments of porous olivine or olivine and enstatite mixtures to constrain the parameters of the full field model, and then analyse the results of a peridotite-like annealing simulation. The experimental grain growth kinetics is very well reproduced while the simulated microstructure morphologies show some differences with experimental ones. We then propose a mean field model calibrated thanks to the full field simulations, which allow us to predict the mean grain size evolution depending on the simplified peridotite composition (e.g. second phase mean grain sizes, fractions).

3.2.1 Introduction

Depending on thermal and mechanical conditions, deformation of rocks may involve grain size sensitive (GSS) creep mechanisms [Boullier and Gueguen, 1975]. In upper mantle rocks for instance, these phenomena are known to contribute non negligibly to the bulk deformation of the lithosphere [Hansen et al., 2014; Hiraga et al., 2010a]. Studying the grain size evolution of peridotites at lithospheric depths can therefore provide important insights into the mechanical behaviour of tectonic plates.

Grain size evolution involves different mechanisms acting at the microscopic scale, from grain boundary migration (GBM) to nucleation and recrystallization (RX). In natural and some experimental conditions, all of these microscopic mechanisms act simultaneously and are often coupled with each other. Their individual effect on the kinetics of microstructures is not completely understood. Hence, it appears important to study these mechanisms separately in order to understand them and their effects on the microdynamics. To this purpose, deciphering the kinetics of grain growth in natural peridotites necessitates understanding GBM first within pure olivine

(the principal mineral in upper mantle rocks) aggregates, then examining how GBM is modified by the presence of second phases (either static or evolving by grain growth).

The full field level-set (LS) approach has demonstrated its capability to model several microstructural evolutions in metallic materials [Bernacki et al., 2009; Maire et al., 2016; Scholtes et al., 2016a] and was recently used to model isotropic grain growth in pure olivine aggregates [Furstoss et al., 2018]. In this paper, we use recent [Fausty et al., 2018] and well established [Agnoli et al., 2012; Scholtes et al., 2016b] techniques of the LS framework to take into account the presence of second phases (SP), in order to simulate, using full-field modeling, the grain size evolution of real mantle rocks under dry conditions.
We then compare the full field results obtained with a mean field model based on the work of [Bercovici and Ricard, 2012] which describes the grain size evolution as a function of the different SP fractions and is calibrated for the temperatures of the upper mantle.

3.2.2 Physical processes and methods

While peridotites are mostly composed of olivine (generally close to forsterite composition with Mg/(Mg+Fe) near 0.9), they display a large variability in terms of mineral composition, which depends on the nature and proportion of second phases. Major second components are pyroxene (clino and orthopyroxenes, for instance pigeonite and enstatite, respectively) which can reach as much as 30% in volume fraction. It has been shown experimentally [Hiraga et al., 2010b] that pyroxene and olivine grains coarsen simultaneously through capillarity-driven olivine/olivine (Ol/Ol) and pyroxene/pyroxene (Px/Px) GBM. In the following, we will designate this type of SP by dynamic second phase (DSP). Other minor SP in mantle rocks are generally alumina phases which can take different forms depending on temperature, pressure and water content (e.g. spinel, garnet, plagioclase). These minor phases are chemically distinct from the olivine and pyroxene, and as we consider dry conditions, their growth can occur only by slow diffusion processes. The aluminium diffusion required for the growth of these second phases has very low diffusion coefficients [Qian et al., 2010; Spandler et al., 2007]. Thereby, these grains of second phases grow so slowly that we will consider them as static and we will call them static second phase (SSP) in the following. Even present as a few volume percent, they can have a strong influence on grain growth of major phases by impeding the GBM through a Smith-Zener pinning mechanism [Smith, 1948] (figure 3.1). In natural conditions, mantle rocks can also contain very minor minerals (e.g. pyrrhotite, rutile, phlogopite) holding marginal chemical species and for which the grain growth seems unlikely (i.e. they are very long timescale SSP). Finally, peridotites can also contain pores which can be formed by fluid circulation [Wark et al., 2003] (e.g. from deserpentinization process, partial melting). From the grain growth point of view, their effect can be similar to the one of second phase grains by impeding grain boundary migration [Agnoli et al., 2014].

3.2.2.1 Smith-Zener drag/pinning

Without stored energy, the interaction between a grain boundary and a SSP can be quantified by the classical mean field Smith-Zener drag formulation [Smith, 1948]. With this approach, a SSP can block or "pin" a surface by imposing a drag pressure (P_{drag}) on the moving grain boundary. By approximating the interaction between grains and SSP thanks to an additional driving pressure, P_{drag}, the grain boundary velocity is classically expressed as follows [Herwegh et al., 2011] :

$$\vec{v} = M(P - P_{drag})\vec{n} = M(-\gamma\kappa - P_{drag})\vec{n}, \tag{3.1}$$

where M is the grain boundary mobility expressed through an Arrhenius law (i.e. $M = M_0 e^{-\frac{Q}{RT}}$, with M_0 the reference mobility, Q the activation energy, R the gas constant and T the temperature in Kelvin), $P = -\gamma\kappa$ is the driving pressure due to capillarity with γ the interface energy and

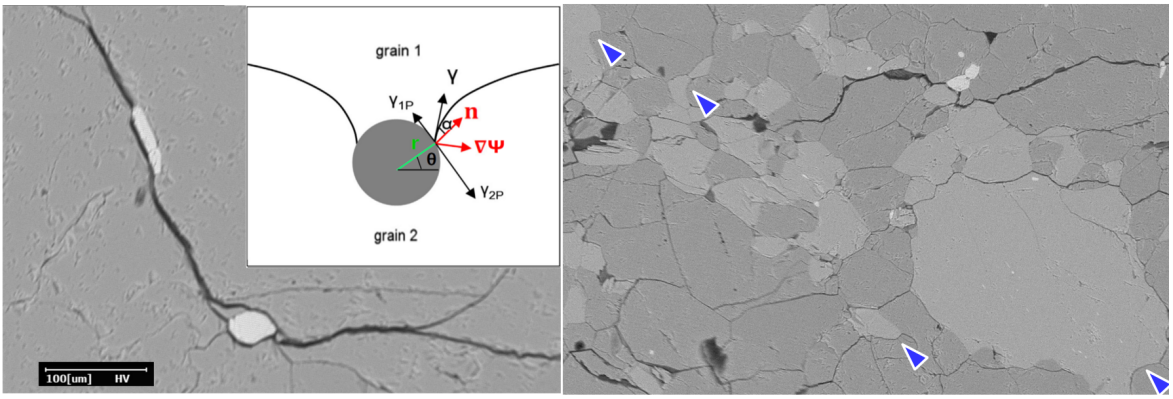


FIGURE 3.1 – Electron Back Scattered (EBS) - Scanning Electron Microscope (SEM) image of a peridotite from the French Massif Central, left : an Ol/Ol grain boundary pinned by spinel particles and the geometrical model of the interaction between a SSP and a grain boundary from [Agnoli et al., 2014], right : the light and dark gray phases are orthopyroxene and olivine respectively, the arrows show some curved interphase boundaries impeded by triple junctions.

κ its mean curvature (curvature in 2D and the sum of the main curvatures in 3D), and $\vec{n}$ is outward unit normal to the boundary. This formulation (with a drag pinning pressure) represents the equilibrium conditions between the particle (γ_{1P}, γ_{2P}) and the grain boundary energy (γ), which corresponds to Herring's law [Herring and Kingston, 1951]. By considering the geometrical model presented in figure 3.1, the drag force exerted by the SSP on the grain boundary can be expressed as :

$$F_{drag} = 2\pi r \gamma cos(\theta) sin(\theta + \alpha), \tag{3.2}$$

which is equivalent to,

$$F_{drag} = \pi r \gamma (sin(2\theta + \alpha) + sin(\alpha)), \tag{3.3}$$

where r is the radius of the SSP. This expression allows for a coherent or incoherent nature of the SSP in the matrix. In fact, a non null angle α allows to consider $\gamma_{1P} \neq \gamma_{2P}$ (meaning generally that the SSP is coherent with one of the grains) while $\alpha = 0$ implies the isotropy of these interfacial energies meaning, except special cases, that the SSP is incoherent with the matrix. By applying to $sin(\alpha)$ Herring's law with the different interfacial energies and substituting in eq.(3.3) we get :

$$sin(\alpha) = \frac{\gamma_{2P} - \gamma_{1P}}{\gamma}, \tag{3.4}$$

$$F_{drag} = \pi r \gamma (sin(2\theta + \alpha) + \frac{\gamma_{2P} - \gamma_{1P}}{\gamma}). \tag{3.5}$$

Thus, the maximum pinning force occurs for θ equal to $(45° - \frac{\alpha}{2})$ which is the effective force considered to compute the P_{drag} effect of a mono-disperse SSP in the Smith-Zener formalism and state-of-the-art mean field models.

The LS framework already presented by [Furstoss et al., 2018] is naturally able to take into account the pinning phenomenon [Agnoli et al., 2012; Scholtes et al., 2016b] without any assumption on the expression of the dragging pressure or material parameters calibration. By imposing

an angle α, verifying Herring's law i.e. the left part of Eq.(3.4), when a grain boundary is passing through a SSP, the local mean curvature of the boundary will be adequately modified, naturally inducing pinning. It is important to highlight that this full field approach enables to avoid the introduction of a fictitious P_{drag} pressure in the kinetics relation as in Eq.(3.1).
In practice, the SSP are described by voids in the FE mesh and an angle α is imposed by applying boundary conditions along the void boundaries. In this work, these conditions are the ones used by [Agnoli et al., 2012], which imposes the orthogonality of grain boundaries with the domain boundaries (and thus SSP boundaries) implying α = 0. As the different interfacial energies of the aluminium-rich phase (or very minor phase)/olivine system are not well constrained it seems reasonable to consider the two surface energies γ_{1P} and γ_{2P} as similar by imposing a null angle α. This approach has shown its efficiency for metallic materials [Agnoli et al., 2015, 2014], in predicting grain growth kinetics and the possible limiting mean grain size [Scholtes et al., 2016b]. Those results and others [Hillert, 1988; Moelans et al., 2006] show a strong influence of the presence of SSP on microstructural evolution even when they only represent a few percent of the rock volume.

3.2.2.2 Beyond Smith-Zener pinning

The classical Smith-Zener pinning mechanism may not be applicable when major and secondary phases have both comparable grain sizes and volume fractions, which can be the case for olivine and pyroxenes in peridotites. Moreover, synthetic peridotites (olivine-like+pyroxene-like) annealing experiments [Hiraga et al., 2010b; Ohuchi and Nakamura, 2007] show that both olivine and pyroxene grains appear to grow simultaneously. The evolution of the mean grain size of each phase with time follows an inverse power-law relationship (i.e. $R \propto t^{\frac{1}{n}}$, with R the mean grain size), with n varying for the two phases with the composition of the sample but are relatively close to each other. It was also shown by [Hiraga et al., 2010b] that the migration of an interphase boundary is much slower than that of a grain boundary. Interphase boundary migration can be explained by driving pressures resulting from phase transformation and capillarity. The capillarity pressure term, $P = -\gamma\kappa$ (the notation σ, rather than γ, being often used for phase evolutions), is identical to the capillarity pressure term acting on grain interfaces with of course different values of interface energies and mobilities. This term, leading to the balancing of multiple junctions, explains also the Gibbs-Thomson effect in context of phase interfaces and so the Ostwald ripening mechanism (i.e. long range diffusion) [Lifshitz and Slyozov, 1961]. In fact, the Ostwald ripening corresponds to a low evolution with competition and equilibrium between small diffusion fluxes at interphase boundaries and capillarity at these interfaces (by keeping constant global phase fractions).
In the considering context and following the state of the art [Bercovici and Ricard, 2012; Hiraga et al., 2010b; Ohuchi and Nakamura, 2007], some hypotheses can be done. First, in the absence of fluid (over or under saturated in Si^{4+} ions) the chemical potential gradient related to phase change in between Px and Ol can be considered as very slight and so volume fraction of the different phases assumed as constant. Thus, migration of the phase interfaces can be considered as driven mainly by the capillarity pressure, i.e. the reduction of interfacial energy, leading to short term migration (multiple junctions balancing) and long term evolution (the interphase energy decreasing being responsible of local composition gradient and volume diffusion affecting the local velocity and leading to the well-known Ostwald ripening mechanism). Thus, under dry conditions, it seems relevant to considerer a low capillarity pressure as the preponderant mechanism in interphase migration as sometimes considered in the literature [Bercovici and Ricard, 2012, 2014].
A statistical measurement of the different triple junctions of annealed microstructures permits, applying Herring's law, the approximation of the different interfacial energies. Knowing the interfacial energy of an Ol/Ol grain boundary ($\gamma_{Ol/Ol} = 1 J.m^{-2}$, [Cooper and Kohlstedt, 1986]), [Tasaka and Hiraga, 2013] found $\gamma_{Px/Px} = 0.8 J.m^{-2}$ and $\gamma_{Ol/Px} = 0.85 J.m^{-2}$. These values, which will be considered as constant by phase (no crystallographic dependence), constrain triple junction

angles between both phases to be nearly 120°. Furthermore, as the local curvature of boundaries close to multiple junctions is very high, the driving pressure due to capillarity is important enough to allow for the migration of interphase boundaries. Since these boundaries have very slow migration velocities, the equilibration of triple junctions will cause interphases to be curved (figure 3.1). This effect has already been noticed by [Linckens et al., 2014] under the name of "surface tension driven phase boundary migration".

Recent developments in the LS framework [Fausty et al., 2018] have permitted to consider a non homogeneous interfacial energy throughout the microstructure. This formalism proposes to describe the simulated microstructure by a certain number of LS functions ψ_i. Each function represents a set of non-neighboring grains by the signed distance (positive and negative respectively inside and outside the grain) to the interfaces of the grains. The different grain boundaries are then located at the 0 isovalue of the LS functions and the microstructure evolves through the transport of the these functions. The classical LS transport equation is modified in order to take into account the spatial variation of the interfacial energy. If the metric properties of the LS functions are respected (i.e. $\|\nabla\psi_i\| = 1$) the strong formulation for a pure grain growth (only driven by capillarity) problem takes the form :

$$\frac{\partial\psi_i}{\partial t} + M\nabla\gamma\nabla\psi_i - \gamma M\Delta\psi_i = 0. \tag{3.6}$$

This formulation ensures that triple junctions respect Young's equilibrium. It has been shown by [Fausty et al., 2018] that only considering the first and third terms of eq.(3.6) (i.e. classical strong formulation) with an heterogeneous γ field leads to triple junctions equilibrated at 120°. Taking into account of the second term of eq.(3.6) permits to respect Young's law at triple junctions according to the different interfacial energies in place but also to respect the local γ values in the boundaries kinetics. Of course, if this formalism allows to consider the capillarity pressure in all its complexity for grain and phase interfaces, resulting slight local composition gradient at interphase boundaries and subsequent volume diffusion of Si^{4+} ions is not modeled in the proposed FE framework. This aspect can be seen as an ambitious perspective of the proposed numerical framework in terms of numerical complexity and necessary experimental data. In the proposed framework, this aspect is treated roughly by ensuring the volume conservation of each phase. At each resolution time step, the DSP volume gained or lost is then redistributed throughout the microstructure (see appendix C). To summarize, in order to model the grain growth within a forsterite (Mg rich end-member of olivine) + enstatite (Mg rich end-member of pyroxene) system, we proceed as follows :

- the heterogeneous fields γ and M are defined at the different types of interfaces (Fo/Fo, En/En, Fo/En boundaries, see table 3.1 and section 3.2.3.1).
- These fields are extended and regularised in order to make them differentiable by using the same method as [Fausty et al., 2018].
- The pre-Laplacian term of eq.(3.6) is calculated using these two heterogeneous fields.
- The pre-convective term of eq.(3.6) is calculated by using the heterogeneous γ field and a homogeneous M field at a value equal to the one used for the of grain boundaries.
- The transport of the LS functions is obtained by solving eq.(3.6) through a FE framework (see [Fausty et al., 2018] for details on FE integration procedure).
- The DSP volume gained or lost is then redistributed throughout the microstructure during a last transport step of the LS functions in order to ensure the volume conservation of each phase (see appendix C).

This methodology takes into account both the very slow displacement of the interphase boundaries through a curvature driven pressure (described by the third term of eq.(3.6)), and its movement in order to respect the equilibrium angles at the multiple junctions (described by the second

term of eq.(3.6)). Moreover, the curvature driven motion of the interphase boundaries involves to the smaller DSP grains to shrink, and this for the benefit of the larger grains through the volume redistribution step. Thus, the Ostwald ripening is in fact taken into account by considering very precisely the capillarity force at each kind of interface and by approximating (by homogenization at the multiphase polycrystal scale) the effect of residual diffusion fluxes.

3.2.3 Full field simulation results

Within this section, after having exposed the material parameters used, we present different full field simulation results. First we present simulations of olivine grain growth with SSP, then forsterite plus DSP (enstatite in this case) and finally the case of a peridotite-like (olivine plus enstatite plus SSP) grain growth. All initial microstructures are generated using a Laguerre-Voronoï Dense Sphere Packing (VLDSP) algorithm [Hitti and Bernacki, 2013] which permits to respect precisely a grain size distribution in context of initial polygonal grain shapes. In the case of second phase growing simultaneously (i.e. DSP) the volume of second phase is randomly distributed among the generated grains in order to respect an imposed DSP mean grain size. Finally, we use numerical conditions (grain size, temperature, time) compatible with existing experimental data, i.e. a large number of very small grains and relatively short annealing times.

3.2.3.1 Material parameters

The different material parameters used for the full field simulations presented in this section are listed in table 3.1. The values of γ are taken from the literature (see section 3.2.2.2). The mobility value of the Fo/Fo grain boundaries is calibrated on the pure forsterite grain growth experiment of [Hiraga et al., 2010b] considering the same activation energy than an Ol/Ol grain boundary [Furstoss et al., 2018]. The En/En grain boundary mobility (reference mobility and activation energy) is the one determined by [Skemer and Karato, 2007]. For the interphase boundary mobility we took the value that best replicates the experimental results of [Hiraga et al., 2010b] assuming the activation energy determined by [Nakakoji and Hiraga, 2018] based on forsterite plus enstatite annealing experiments. For the latter mobility we find a value 3 order of magnitude lower than the one of Fo/Fo grain boundary which is consistent with previous study [Bercovici and Ricard, 2012]. These parameters have to be carefully considered and in particular the temperature dependence of the mobilities (i.e. activation energies). In fact, the temperature range used for their determination is very small (1473-1573K for Q_{Ol} from [Furstoss et al., 2018] and 1533-1673K for $Q_{Fo/En}$ from [Nakakoji and Hiraga, 2018]) or even null (only 1633K for Q_{Fo} from the present study, see section 3.2.3.3).

3.2.3.2 Case of SSP acting as Smith-Zener pinning particles

In this section, the initial grain size distribution and the material parameters used are the ones determined in 2D by [Furstoss et al., 2018] using the experimental data of [Karato, 1989] for pure olivine. The effect of SSP is studied by introducing different volume fractions (0.2, 5 and 10%) of spherical particles with different mean grain sizes (0.25, 0.5, 0.75 and 1 as a fraction of the initial olivine mean grain size) with a small standard deviation (< 0.2µm). The calculation domain size is 0.2x0.2mm, the initial number of grains is approximately 4000 and the temperature is 1573K. The mean grain size evolutions are plotted in figure 3.2 for an SSP mean size of 0.5 times the initial olivine grain size and for the different SSP volume fractions.

The experimental data plotted in figure 3.2 come from annealing of porous olivine aggregates [Nichols and Mackwell, 1991] where pores are impeding the grain growth. The initial volume fraction and the size of pores are not well constrained but may be estimated between 1 and 5%

Material parameter	symbol	unit	value
Ol grain boundary 2D reference mobility [a]	M_{0Ol}	$mm^4.J^{-1}.s^{-1}$	4.10^4
Ol grain boundary 2D activation energy [a]	Q_{Ol}	$kJ.mol^{-1}$	185
Fo grain boundary 2D reference mobility [b]	M_{0Fo}	$mm^4.J^{-1}.s^{-1}$	4.10^2
Fo grain boundary 2D activation energy [b]	Q_{Fo}	$kJ.mol^{-1}$	185
En grain boundary 2D reference mobility [c]	M_{0En}	$mm^4.J^{-1}.s^{-1}$	3.10^{15}
En grain boundary 2D activation energy [c]	Q_{En}	$kJ.mol^{-1}$	577
Fo/En phase boundary 2D reference mobility [b]	$M_{0Fo/En}$	$mm^4.J^{-1}.s^{-1}$	$2.75.10^7$
Fo/En phase boundary 2D activation energy [d]	$Q_{Fo/En}$	$kJ.mol^{-1}$	430
Ol/Ol (= Fo/Fo) grain boundary interfacial energy [e]	$\gamma_{Ol/Ol}$	$J.mm^{-2}$	1.10^{-6}
En/En grain boundary interfacial energy [f]	$\gamma_{En/En}$	$J.mm^{-2}$	$0.8.10^{-6}$
Fo/En phase boundary interfacial energy [f]	$\gamma_{Fo/En}$	$J.mm^{-2}$	$0.85.10^{-6}$

TABLEAU 3.1 – Material parameters used for the full field simulations, from *a* [Furstoss et al., 2018], *b* present study, *c* [Skemer and Karato, 2007], *d* [Cooper and Kohlstedt, 1986] and *e* [Tasaka and Hiraga, 2013].

and close to 0.5 times the initial mean grain size respectively, thus our simulations initial conditions are comparable with this experiment. [Nichols and Mackwell, 1991] noticed an increase of the pore size during annealing, which results in non frozen microstructure, not reaching a limiting mean grain size (see figure 3.2). As the size and number of SSP imposed in the full field simulations do not evolve, the model shows the same trend as in experiments at the beginning of the simulation, then quickly reaches a limiting mean grain size. Figure 3.2 shows a significant decrease of the grain growth kinetics when the volume fraction of the SSP increases, and other simulations with different SSP sizes show the same trends. Usually the presence of homogeneously dispersed SSP also imposes a limiting mean grain size [Scholtes et al., 2016b] which corresponds to a totally pinned microstructure. Figure 3.2 shows that for 5 and 10% of SSP volume fraction, the limiting mean grain size is small and rapidly reached. For 0.2% of SSP volume fraction, higher limiting mean grain size is expected, and takes more time to reach (mean field model from section 3.2.4.2.a predicts a limiting mean grain size near 28µm obtained in 50 hours). The other full field simulations show also that by increasing the SSP volume fraction, the limiting mean grain is lower and is reached faster.

We then try to estimate the effect of the SSP size for a given SSP volume fraction on the grain growth kinetics. In fact, for the same SSP volume fraction the microstructure where the SSP size is the lowest has the lowest limiting mean grain size and the slowest grain growth kinetics (figure 3.3). This is due to the fact that for a similar volume, the cumulated surface of the pores interacting with the crystalline matrix is more important when the pores (or SSP) are small and dispersed.

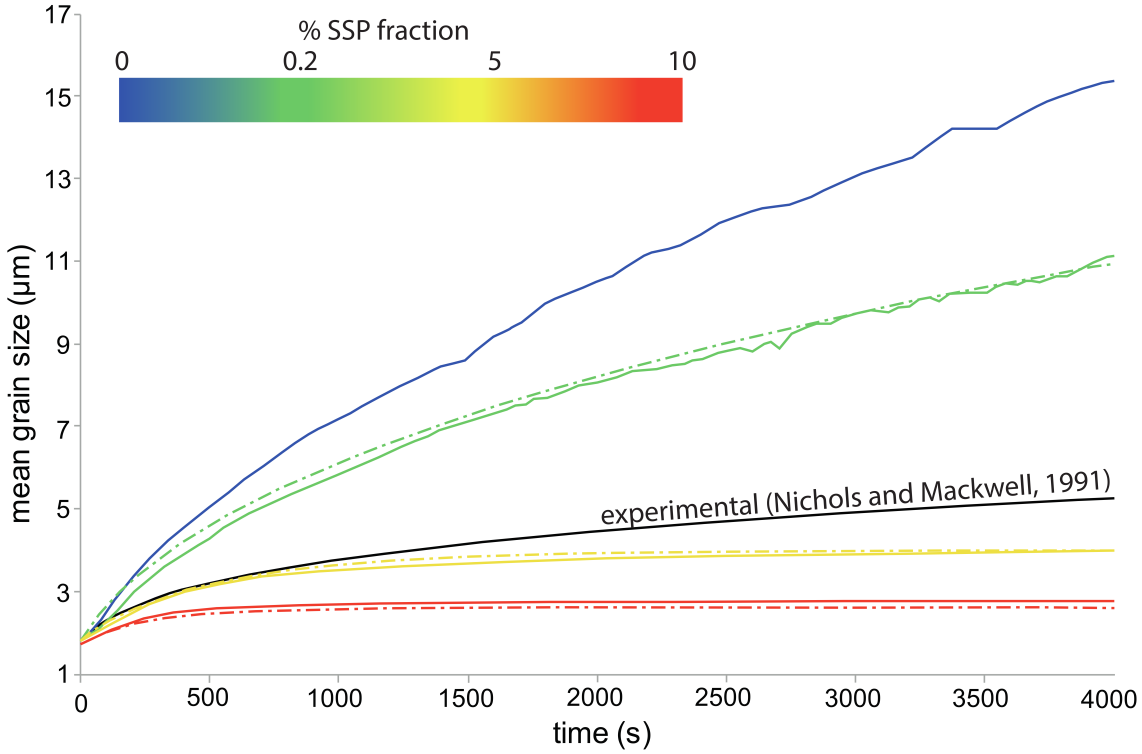


FIGURE 3.2 – Full field predicted mean grain size evolutions are for an initial grain size distribution similar to the one used by [Karato, 1989]. Grain boundary mobility is calibrated on the 0% static second phase (SSP) fraction grain growth experiment as explained in [Furstoss et al., 2018], the SSP and the olivine mean grain size are 0.8 and 1.7µm respectively. The experimental data come from [Nichols and Mackwell, 1991] and the mean field predictions (dotted line) are from section 3.2.4.2.a.

3.2.3.3 Case of primary and secondary phases growing simultaneously

We then performed full field simulation of grain growth in a biphase material where the two phases grow simultaneously, using the method presented in section 3.2.2. We compare the predicted mean grain size evolutions with the ones obtained experimentally by [Hiraga et al., 2010b] during an annealing treatment of different forsterite and enstatite mixtures. As the major phase is forsterite, we cannot use the material parameters of natural olivine as in the previous section. Thus we used the same methodology as in [Furstoss et al., 2018] to obtain, from the pure forsterite annealing experiment, the 2D grain boundary mobility. However, as the data from [Hiraga et al., 2010b] have been obtained only for one annealing temperature, we cannot determine the activation energy, which describes the temperature dependence of the grain boundary mobility. Thus, the activation energy will be considered equal to that of a natural olivine (Fo 92%) grain boundary. Nevertheless, the obtained grain boundary mobility after calibration is $4.9 \cdot 10^{-4} mm^4.\mathrm{J}^{-1}.s^{-1}$, which is valid at 1633K whereas the natural olivine 2D grain boundary mobility at this temperature was $4.9 \cdot 10^{-2} mm^4.\mathrm{J}^{-1}.s^{-1}$. The initial mean grain sizes for each phase are the ones given by [Hiraga et al., 2010b] which permits a direct comparison with the experimental results in terms of total mean grain size (figure 3.4) or mean grain size for both phases (figure 3.5).

The grain size evolutions predicted by the full field LS approach are in very good agreement with experimental data (figures 3.4 and 3.5), excepted for the pure forsterite case for which we calibrated the Fo/Fo grain boundary mobility. The simulated grain size evolution for 0% DSP fraction show a quasi linear trend while the experimental one tends to a limit mean grain size. For this case

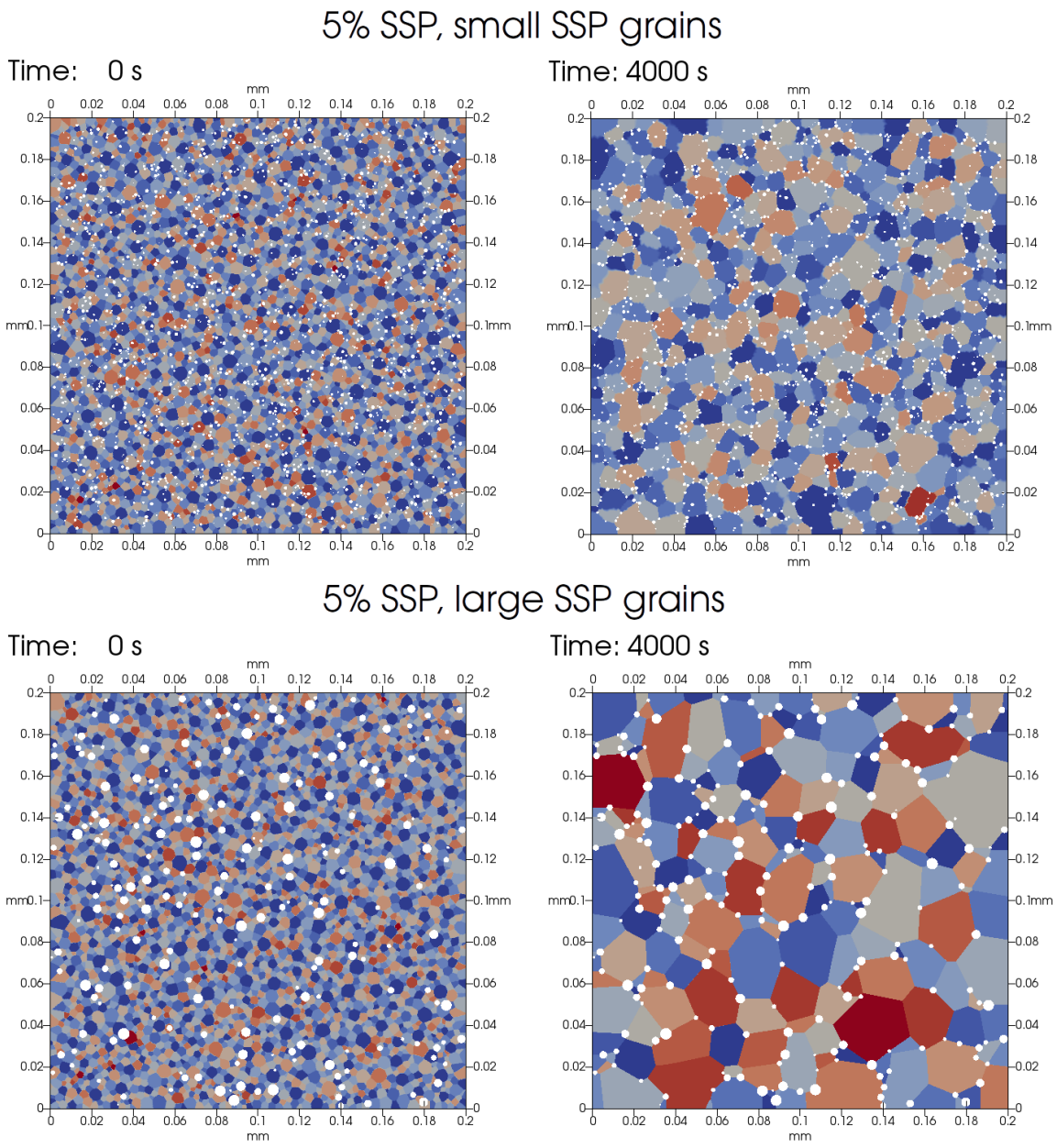


FIGURE 3.3 – Left, initial microstructures with 5% of static second phase (SSP) fraction for SSP mean grain size equal to 0.5 (top) and 1 (bottom) time the initial olivine mean grain size. Right, microstructures after 4000s annealing at 1573K. The grain colors are related to the index of the global level set function which describes the considered grain [Scholtes et al., 2015].

(pure forsterite) we suspect the presence of a small amount of SSP, this point is discussed in the section 3.2.4.3.

The ratio between the major phase (forsterite) mean grain size and the DSP mean grain size is not constant over the simulation durations at least for DSP fractions ≤ 15% (figure 3.6). However for 24% of DSP fraction, this ratio seems to be constant during all the simulation, which suggests that this ratio could be taken into consideration only if a steady-state is reached between the main phase and the DSP particles.

As for the pure olivine case in presence of SSP (see previous section), the DSP fraction has an

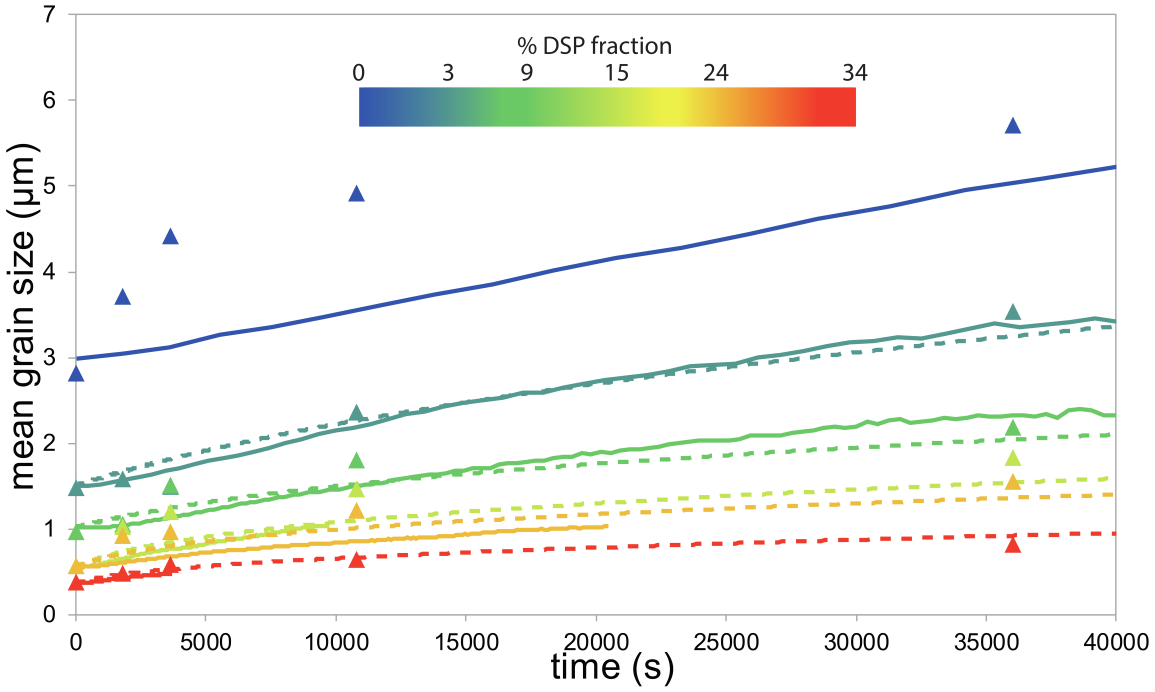


FIGURE 3.4 – Total mean grain size evolution during experimental (dots from [Hiraga et al., 2010b]), simulated (solid lines) and predicted by the mean field model (dashed lines, see section 3.2.4.2.b) annealing treatments at 1633K for different dynamic second phase (DSP) fractions

effect on grain growth kinetics : increasing the DSP fraction decreases the average growth rate. The simulated and experimental microstructure morphology after two hours of annealing for the 9% enstatite sample are presented in figure 3.7.

While the predicted grain sizes are consistent with the experimental ones, the simulated microstructure morphology, and particularly the DSP grain shape, shows some differences : in the experiments, DSP grains are either polygonal, concave or convex while in the simulation they are mostly concave and sometimes polygonal depending on the local configuration (see figure 3.7). These results show that our scheme reproduces experimental results even if the mobility of interphase boundaries is not precisely constrained. Indeed, the main factor that impedes grain growth here is the pinning of grain boundaries by triple junctions which have an interphase boundary.

3.2.3.4 Peridotite-like grain growth

In this section, we seek to model the grain growth within a system which may represent a natural peridotite at least in terms of phase composition. We used phase proportions comparable to those of a Lherzolite [Roden et al., 1988] which could be encountered, for instance, within a peridotite xenolith. The major phase, representing olivine, accounts for 78% volume fraction, the DSP, which may be ortho/clino-pyroxene is taken as 19% volume fraction and the SSP, which could be aluminium phases or pores represent 3% of the volume. The initial grain size distributions for the three phases are identical.

The predicted mean grain size evolution and the microstructure morphology at different stages of the annealing are plotted in figure 3.8. The grain growth rate is slower than the ones predicted in pure olivine + SSP or DSP aggregates (figure 3.3 and 3.4). The DSP grain shapes are, as for the full field simulations presented in section 3.2.3.3, mostly concave or polygonal depending on the

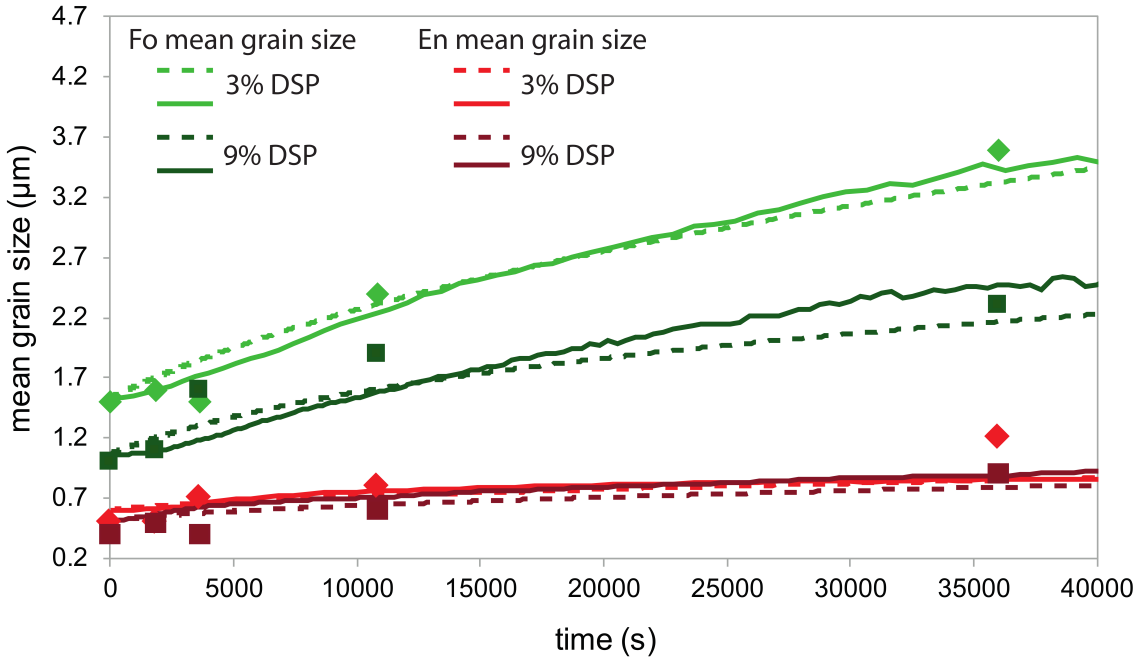


FIGURE 3.5 – Mean grain size evolution for each phase during experimental (dots from [Hiraga et al., 2010b]), simulated (solid lines) and predicted by the mean field model (dashed lines, see section 3.2.4.2.b) annealing treatments at 1633K for the 3% and 9% dynamic second phase (DSP) fraction systems.

local morphology of the microstructure.

3.2.4 Discussion

3.2.4.1 Grain growth kinetics and microstructure morphologies

Our results show that grain growth kinetics in peridotites is strongly impacted by the presence of SSP and DSP. In fact, even few percent of SSP significantly reduces the growth rate and imposes a limiting mean grain size (figure 3.3). The decrease of the SSP size for a same SSP volume fraction decreases both the growth kinetics and the limiting mean grain size (figure 3.4). This may be explained by the reduction of the mean interparticle distance and thus the increase of the number of contact points between grain boundaries and SSP. For the same reasons, the increase of the SSP volume fraction for a same SSP size results in a decrease of the growth rate and the limiting mean grain size. In the same way, increasing the DSP volume fraction decreases the growth rate (figure 3.4). This may be explained by the impeding of the grain boundaries by the slower interphase boundaries whose density increases with increasing DSP volume fraction, at least for the fractions considered in this work. The results of experimental annealing of forsterite and enstatite microstructure are well reproduced by our full field formalism in terms of total mean grain size evolution (figure 3.4) and mean grain size evolution for each phase (figure 3.5). In experimental mixtures and natural mantle rocks, the Zener relationship which fixes the ratio between the major phase and the DSP mean grain size seems to be achieved [Linckens et al., 2011; Tasaka et al., 2014] (see figure 3.6).

The simulated mean grain size evolutions do not show a perfect linear trend and particularly for the smaller DSP fractions (figure 3.6). In fact, the achievement of Zener relationship assumes in addition to the classical Smith-Zener assumptions (see section 3.2.4.2.a) that the microstructure

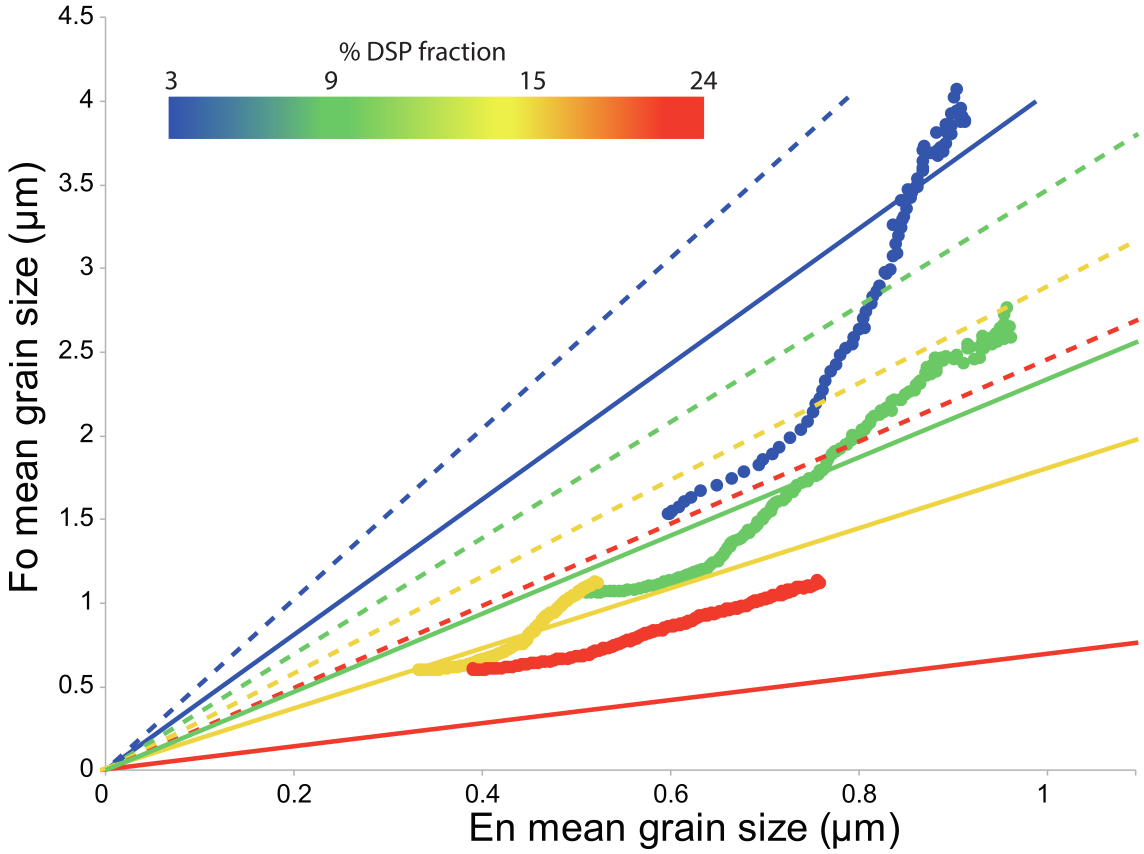


FIGURE 3.6 – Plot of the major phase mean grain size depending on the DSP mean grain size and fraction for : natural mantle rocks (ultramylonites) from [Linckens et al., 2011] (dashed lines), forsterite plus enstatite mixture from [Tasaka et al., 2014] (solid lines) and for the simulation of the present study (dots from section 3.2.3.3).

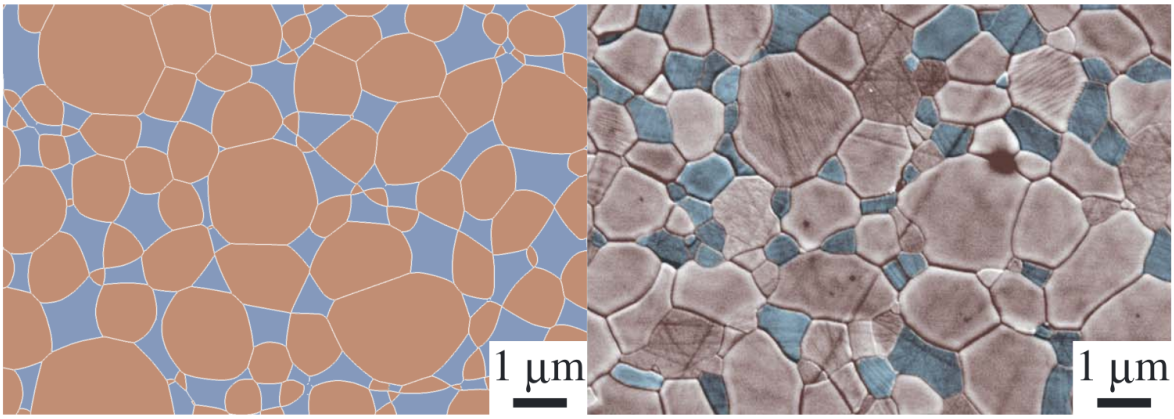


FIGURE 3.7 – Simulated (left) and experimental (right) from [Tasaka and Hiraga, 2013] microstructure, at the same scale, with 24% of dynamic second phase (DSP) fraction after 2h annealing at 1633K. The blue and red colours correspond to enstatite and forsterite respectivelly.

is at equilibrium (i.e. has reached the maximum mean grain size as long as the DSP grains do not grow). However, this equilibrium is not necessarily reached at the first evolution stages and espe-

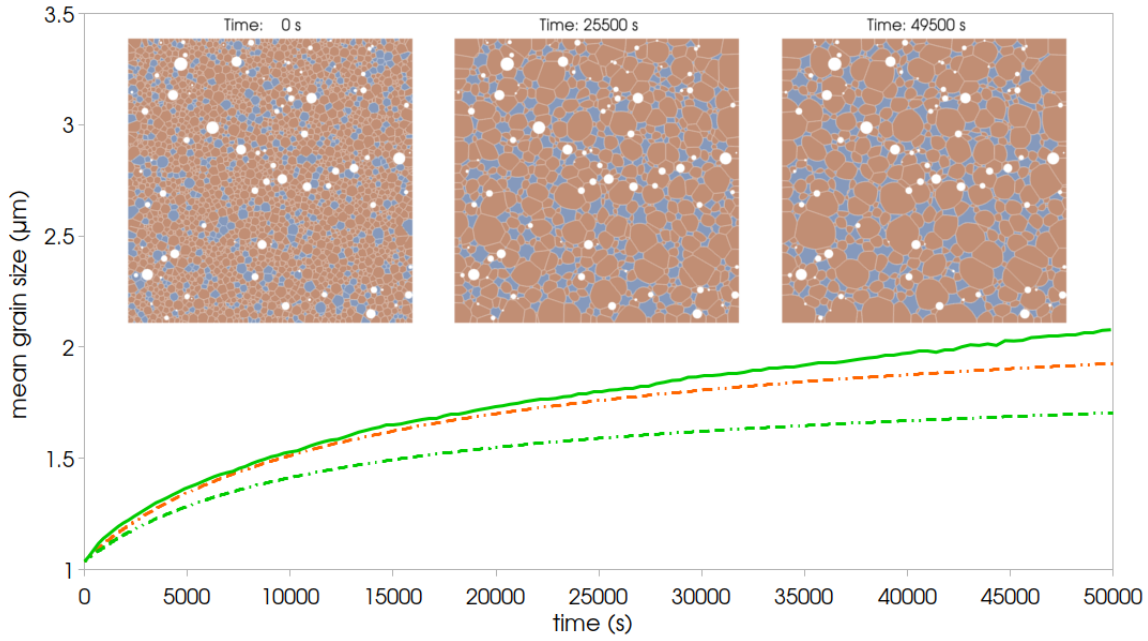


FIGURE 3.8 – Simulation of a peridotite-like annealing at 1633K. The full field predicted mean grain size evolution is represented by the solid line while the dotted lines show the non-corrected (green) and corrected (orange) mean field predictions (see section 3.2.4.2.c). The full field simulated microstructure is represented a the top of the figure at different stages, and the calculation domain size is 10x10µm.

cially for small DSP fractions for which grain growth without pinning can still occur. Nevertheless, for larger grain sizes the numerical results are within the range of ratios defined by experimental and natural rock samples.

The morphology of the simulated microstructures does not change from a monophase system by considering only SSP : grains are polygonal in shape (figure 3.4). By introducing DSP, the microstructure shows significant difference in terms of grain shapes, and in particular some DSP grains do not have straight interphase boundaries. In experimental data, these boundaries can be straight or curved either inward or outward of the DSP grains. However, the full-field simulation reproduces only straight or inward curved interphase boundaries (figure 3.7 and 3.8). This may be due to two numerical aspects : i. the number of dimensions used to simulate the grain growth; indeed the capillarity force should take into account the 3 dimensional nature of the interface curvature, which is naturally done in experimental conditions but not in the considered 2D full field model and ii. our treatment for conserving volume phase fractions which act to phase interfaces and which is, topologically, a rough approximation of the slight diffusion mechanism due to Gibbs-Thomson effect.

3.2.4.2 Mean-field model

A mean field model describing the mean grain size evolution taking into account the presence of SSP, DSP or both can be proposed by describing, statistically, the driving and dragging pressure exerted on the grain boundaries of the microstructure. In fact, considering that the velocity of a grain boundary is equivalent to the evolution of the mean grain size $\bar{R}$, eq.(3.1) can be rewritten as :

$$\frac{d\bar{R}}{dt} = M(P - \sum P_{drag}). \tag{3.7}$$

In order to be consistent with the present full field simulations, the driving pressure will be taken as the capillarity pressure and will be approximated by $\frac{\gamma}{p\bar{R}^{p-1}}$ [Rozel et al., 2011] where γ is the interfacial energy of the major phase and p the growth exponent generally taken to be 2 [Kameyama et al., 1997].

3.2.4.2.a Smith-Zener pinning drag pressure

Using the same strategy than in the classical Smith-Zener framework [Smith, 1948], we make the hypotheses that each SSP exerts the maximal possible force on the grain boundaries. The dragging force from eq.(3.5) becomes $F_{drag_{SSP}} = \pi\bar{R}_{SSP}\gamma$ (for incoherent SSP) with $\bar{R}_{SSP}$ the mean SSP radius. By also considering that the number of SSP at the interfaces (n_{GB}) corresponds to a random distribution of volume fraction f_{SSP} over the domain, this number can be expressed as $n_{GB} = n_v 2\bar{R}_{SSP}$ with $n_v = \frac{3f_{SSP}}{4\pi\bar{R}^3_{SSP}}$ the number density of spherical SSP of mean radius $\bar{R}_{SSP}$. Those two equations give the pressure exerted by the SSP on the grain boundaries as :

$$P_{drag_{SSP}} = F_{drag_{SSP}} \cdot n_{GB} = \frac{3\gamma f_{SSP}}{2\bar{R}_{SSP}}. \tag{3.8}$$

This expression can be modified in order to take into account the possible deviations from the assumptions mentioned above, for instance, due to the variations of SSP radii around the mean radius or to the non-perfectly random distribution of the SSP. Then eq.(3.8) is rewritten as :

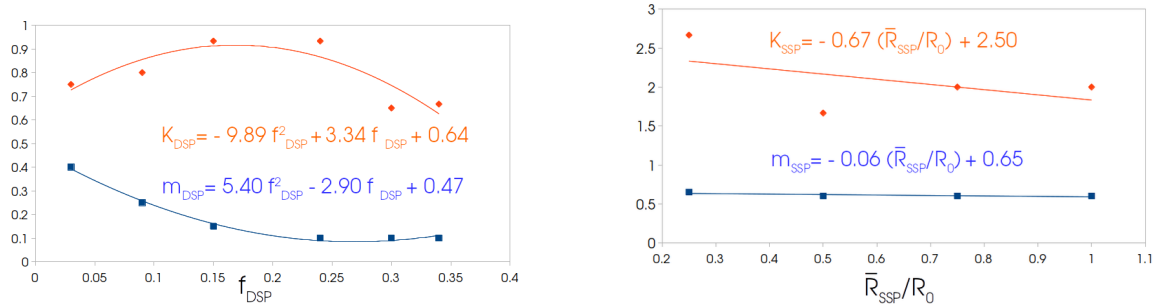
$$P_{drag_{SSP}} = \frac{3\gamma f_{SSP}^{m_{SSP}}}{2K_{SSP}\bar{R}_{SSP}}, \tag{3.9}$$

where K_{SSP} and m_{SSP} are mean-field parameters which have to be calibrated on experimental or full field simulation results.
In all cases, relation (3.9) shows that for a given SSP radius or a given SSP volume fraction, a large volume fraction or respectively a small SSP radius, where the corresponding mean interparticles distance is small (figure 3.3) will result in a large pressure on the moving grain boundaries. By using this expression in eq.(3.7), the mean grain size evolution can be computed knowing the initial mean grain size. The mean field parameters are used to fit the different full field simulation results presented in section 3.2.3.2 (figure 3.2) and are then plotted against the ratio $\frac{\bar{R}_{SSP}}{R_0}$ as illustrated in figure 3.9a.

This mean field model predicts the grain growth kinetics taking into account the presence SSP without the use of full field models except for the initial calibration. However, as the mean field parameters may depend also on other system characteristics (i.e. grain size distribution, shape of the SSP) this calibration should be used with care and considered valid only for the exact conditions used to calibrate it.

3.2.4.2.b Interphase boundary pinning drag pressure

In experimental or simulated annealed biphase microstructures, grains of the minor phase are generally separated from each other, occupying the multiple junctions of the other phase (figure 3.4). Thus the number of multiple junction involving interphase boundaries increases which act as blocking barriers to the grain boundary migration, and so impede grain growth.
At the contact zone between grain boundary and interphase boundary, the formed triple junction exerts a force resisting growth comparable to the pinning force. This force can be expressed by



(a) (b)

FIGURE 3.9 – Best fit mean field parameters K (orange) and m (blue) for static second phase (SSP) (3.9a) : plotted as a function of $\frac{\bar{R}_{SSP}}{R_0}$ where R_0 is the initial mean grain size and for dynamic second phase (DSP) (3.9b) : plotted as a function of f_{DSP}.

considering a single spherical grain of the DSP surrounded by grains of the major phase with triangular ridge at the triple junction (geometrical model already exposed by [Bercovici and Ricard, 2012]) :

$$F_{drag DSP} = (2\gamma_{IB} cos(\theta) - \gamma)\pi \bar{R}_{DSP}, \tag{3.10}$$

where γ_{IB} is the interphase boundary interfacial energy, $\bar{R}_{DSP}$ is the equivalent mean radius of the DSP grain and θ is the half-angle formed by the ridge (i.e. the half of the triple junction angle located inside the DSP grain). This expression is consistent with the Smith-Zener pinning force equation (3.5), and also translates the inhibition of grain growth by the presence of DSP.
By considering a 2D space, the number of ridges developed around a DSP grain surrounded by grains of other phases is the 2D coordinence of the grain. Thus, making the hypothesis that the DSP grains are non agglomerated (consistent if the DSP does not represent a large volume fraction) the number of ridge per unit surface can be expressed as :

$$n_{ridge} = \frac{f_{DSP}\bar{C}_{DSP}}{\pi \bar{R}^2_{DSP}}, \tag{3.11}$$

where f_{DSP} and $\bar{C}_{DSP}$ are respectively the volume fraction and the mean 2D coordinence of the DSP. The latter can be easily extracted from the full field simulations and plotted as shown in figure 3.10.

The driving pressure exerted by the ridge onto the grain boundaries of the principal phase can then be estimated as :

$$P_{drag DSP} = F_{drag DSP} \cdot n_{ridge} = \frac{(2\gamma_{IB} cos(\theta) - \gamma) f_{DSP}\bar{C}_{DSP}}{\bar{R}_{DSP}}. \tag{3.12}$$

As for the dragging pressure of the SSP, the expression of the dragging pressure for the DSP is generalized according to :

$$P_{drag DSP} = \frac{(2\gamma_{IB} cos(\theta) - \gamma) f^{m_{DSP}}_{DSP}\bar{C}_{DSP}}{K_{DSP}\bar{R}_{DSP}}, \tag{3.13}$$

where K_{DSP} and m_{DSP} are the mean field parameters, which able to predict a consistent dragging pressure for cases quite distant from the above mentioned hypotheses (i.e. when the DSP fraction

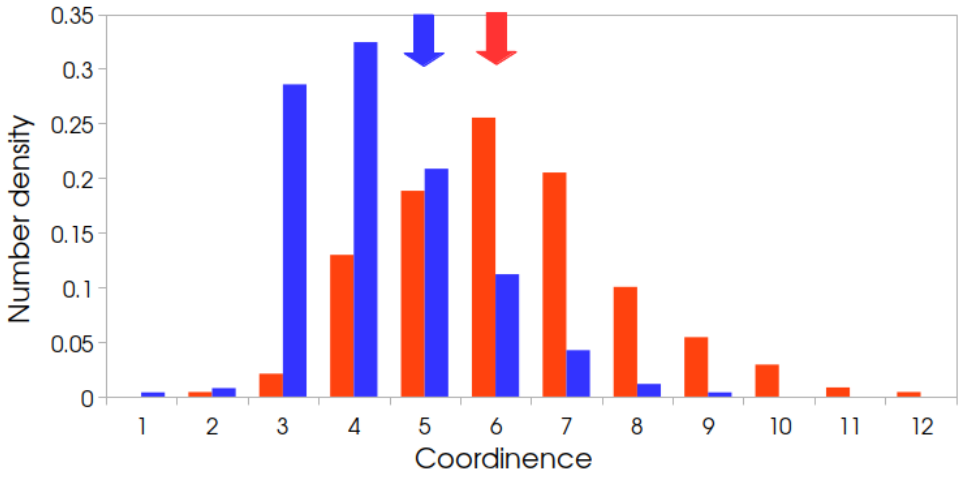


FIGURE 3.10 – Dynamic second phase (DSP) 2D coordinence distribution of, the 9% volume fraction DSP (without static second phase, SSP) simulated microstructure after 10000s annealing at 1633K (red), and the peridotite-like (the SSP grains are not taken into account for the coordinence) simulated microstructure after 45000s annealing at 1633K (blue). The arrows indicate the mean coordinence, $\bar{C}_{DSP} = 6.2$ for simulation without SSP and $\bar{C}_{DSP} = 5.3$ for the simulation with SSP.

is large the number of ridges is not equivalent to the 2D DSP coordinence). Equation (3.13) requires computing the DSP grain size evolution in a mean field way, which can be simulated using a generalized Burke and Turnbull law [Burke and Turnbull, 1952; Cruz-Fabiano et al., 2014] :

$$\bar{R}^2_{DSP} - R^2_{DSP0} = \alpha M_{DSP} \gamma_{DSP} t^n, \tag{3.14}$$

where R_{DSP0} is the initial DSP mean grain size, M_{DSP} and γ_{DSP} are the mobility and interfacial energy between two DSP grains respectively, and α and n are the Burke and Turnbull parameters which, by fitting the DSP grain size evolution, are 0.6 and 0.284 respectively. By using the expression of the dragging pressure in eq.(3.7) and eq.(3.14) to compute the DSP mean grain size, the grain growth kinetics within a biphase material can be predicted. The mean field parameters are used to fit the different full field simulation results presented in section 3.2.3.3 (figure 3.4) and are then plotted as a function of f_{DSP} as shown in figure 3.9b.

As with the SSP dragging pressure mean field model presented in the precedent section, this model should be used with caution, being aware that its validity is limited to the conditions used to calibrate it.

3.2.4.2.c Total mean grain size evolution law

By using the expressions of the dragging pressures developed above with eq.(3.7), we can estimate the mean grain size evolution of a microstructure as a function of DSP and SSP fraction as :

$$\frac{d\bar{R}}{dt} = M\left(\frac{\gamma}{2\bar{R}} - \frac{3\gamma f_{SSP}^{m_{SSP}}}{2K_{SSP}\bar{R}_{SSP}} - \frac{(2\gamma_{IB}cos(\theta) - \gamma) f_{DSP}^{m_{DSP}} \bar{C}_{DSP}}{K_{DSP}\bar{R}_{DSP}}\right). \tag{3.15}$$

By replacing the material parameters with that of forsterite and enstatite, the mean field parameters by their calibrations and the others known values this expression becomes :

$$\frac{d\bar{R}}{dt}(mm.s^{-1}) = 4\cdot 10^{-4} e^{-\frac{1.85\cdot 10^5}{RT}}\left(\frac{1}{2\bar{R}} - \frac{3 f_{SSP}^{-0.06\frac{\bar{R}_{SSP}}{R_0}+0.65}}{(-0.67\frac{\bar{R}_{SSP}}{R_0}+2.5)2\bar{R}_{SSP}} - \frac{0.23 f_{DSP}^{5.40 f_{DSP}^2 - 2.90 f_{DSP}+0.47}}{(-9.89 f_{DSP}^2 + 3.34 f_{DSP} + 0.64)\bar{R}_{DSP}}\right). \tag{3.16}$$

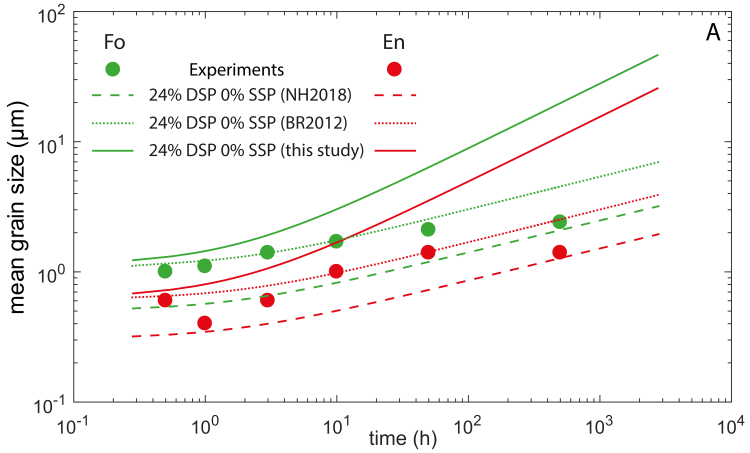
Using this equation and the DSP grain size evolution law (eq.(3.14)), the mean grain size evolution of a peridotite-like sample (see section 3.2.3.4) during an annealing treatment is underestimated but essentially reproduced (figure 3.8) without needing to calibrate other parameters. This underestimation can be explained and corrected by considering that a certain number of SSP grains are in contact with DSP grains which decreases the number of ridges and SSP grains effectively pinning the grain boundaries. The DSP mean coordinence $\bar{C}_{DSP}$ without counting the SSP grains is then lower (figure 3.10), 5.3 instead of 6.2, and a corrective coefficient of $\frac{5.3}{6.2}$ can be applied to the second term of equation (3.15) or (3.17) to account for this configuration. Taking into account these corrections, the predicted mean grain size evolution of a peridotite-like is more consistent with the full field simulation (figure 3.8). In a geodynamical perspective, the remaining underestimation of grain growth kinetics should not be highly problematic despite the timescale involved, because temperatures may be lower ($\frac{d\bar{R}}{dt} \propto e^{-\frac{Q}{RT}}$), and initial grain size higher than the ones used in experiments. For instance, with the activation energy used in this study, the timescale of the peridotite-like annealing (figure 3.8) will be 100 years at 900K instead of 50000s at 1633K. Furthermore, for this type of extrapolation, the activation energy has a first order importance, although estimates from the literature appear to be very different (ranging from 160 to 600kJ/mol, after [Evans et al., 2001]). When using an activation energy of 300kJ/mol, the timescale of the peridotite-like annealing (figure 3.8) will be 100000 years at 900K, compared to 50000s at 1633K.
The conditions used for these mean field modelings are close to the ones which served to their calibrations (e.g. grain size distribution, SSP size, DSP volume fraction, temperature) but have necessitated an interpolation of the mean field parameters. The mean field prediction gives consistent mean grain size evolution even interpolated within the range of calibration. However, far from these conditions, or extrapolated, the mean field model will need to be tested carefully and probably recalibrated. Moreover, particular caution should be taken on the temperature dependance of our models while the activation energy gets a first order influence (see the above paragraph) and because no multi temperature simulations has been performed with experimental comparison.

3.2.4.3 Adequation of mean field models with short and long term annealing experiments

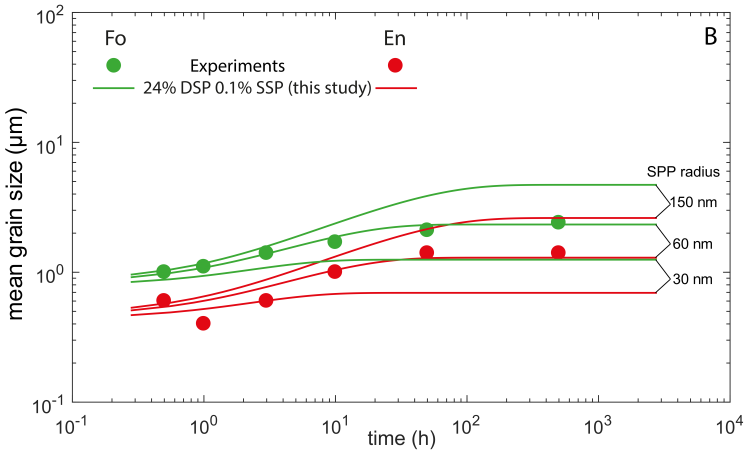
In two recent papers, [Nakakoji and Hiraga, 2018; Nakakoji et al., 2018] (NH2018) published the results of long term ($500h$) experiments for grain growth and deformation in an enstatite-forsterite synthetic aggregate for a DSP proportion of 20%, at different temperatures. Unfortunately, only the results after $500h$ of annealing are available, but these results allow us to evaluate the performance of our mean field model at large time scales. In comparison, the experiment presented in [Hiraga et al., 2010b] (H2010) paper that was used to calibrate our model was conducted for a single temperature of 1360°C (1633K), but with different proportions of DSP and tracked the grain size evolution through time. The description of grain boundary diffusion-controlled grain growth in NH2018 is based on the formulation proposed by Ardell (1972) for the rate of growth of the DSP (e.g., enstatite), such as :

$$d^4_{t_En} - d^4_{0_En} = \frac{8\gamma c\delta D_{GB_growth} V^2_{m_growth} \nu}{3GRT} t, \tag{3.17}$$

where d_{0_En}=0.3 µm and d_{t_En} are the initial and final enstatite sizes respectively, γ is the surface energy (0.85J.m^{-2}), δ is the grain boundary width ($1nm$), D_{GB_growth} is the grain boundary diffusivity for grain growth, V_{m_growth} is the molar volume for grain growth ($3.61 \cdot 10^{-5} m^3.mol^{-1}$), ν depends on the proportion of DSP (ν = 0.47 for f_{DSP} = 24%), G is a geometric factor (0.34) and R is the gas constant.



(a)



(b)

FIGURE 3.11 – Mean grain size evolution for 24% DSP annealing at 1633K, (3.11a) : comparison of mean field models after [Nakakoji et al., 2018] (NH2018), [Bercovici and Ricard, 2012] (BR2012) and this study with experiments of [Hiraga et al., 2010b] and [Nakakoji et al., 2018], (3.11b) : comparison between experiments and mean field model developed in this study taking into account in addition to the 24% DSP, 0.1% of SSP with different SSP size.

We first use the results of NH2018 to estimate the grain boundary diffusivity at 1360°C and find $D_{GB_growth} \approx 1.76 \cdot 10^{-13} m^2.s^{-1}$. Similarly, we estimate the mean sizes of enstatite and forsterite grains at 1360°C after 500h based on NH2018's results at 1.4 and 2.4 µm, respectively. The ratio of forsterite versus enstatite radii is 1.65 according to NH2018. If we draw the growth of enstatite and

forsterite grains with time according to the theoretical curve described in equation (3.17), we find that it explains the grain size of both phases after 500h, but fails to capture the grain size evolution during the first 50h of the experiment, during which grains grow much faster than predicted (figure 3.11a). Conversely, our mean field model (equation (3.17)) performs slightly better during the first 10h (although the predicted grain size is a little too large) but fails to explain the latest stages of the experiment in the absence of SPP. Indeed, after 50-100h grain growth seems to slow down of even stop completely, whereas both mean-field models predict continuous grain growth. This slowing down cannot be explained unless we consider the possible presence of a small fraction of SSP in NH2018 experiments, which could be tiny pores or impurities. If we try to adjust our mean field model taking into account SPP, we find that a very small fraction of SPP (0.1%) of extremely small size ($\approx 60nm$) better explains the long- and short-term experimental results (figure 3.11b). This issue has already been raised by [Bercovici and Ricard, 2012] where these authors suggest the presence of small (< 1%) proportion of SPP in H2010's experiments, based on an analytical solution of two-phase grain growth with SPP. Based on these results, we suggest that short-term ($< 50h$) annealing experiments can help calibrating full-field or mean-field models such as those presented in this study because they have a lower sensitivity to the presence of small SPP than long-term ones. Conversely, our mean-field and/or full-field models could be used to better constrain the initial conditions of long-term experiments and in particular infer the presence of undetectable SPP.

3.2.5 Conclusion

The grain growth of a multiphase material is largely impacted by the presence of secondary phases. In this study, we focused on grain growth kinetics of mantle peridotites at lithospheric depth conditions. Generally, increasing fraction of secondary phases reduces the growth rate. Two aspects of multiphase material evolution were modelled here : the occurrence of static secondary phases that block or pin a surface (for instance spinel or other rare phases which compositions are very different from olivine and even more static than spinel) and the occurrence of evolving secondary phases (pyroxenes versus olivine in peridotites). The interphase boundary migration occurring by Ostwald ripening is taken into consideration in our model by accounting for capillarity force and approximating the effect of residual diffusion fluxes by a homogenized numerical treatment. This assumption could be avoided in a future work by the implementation of small-scale diffusion fluxes in the numerical model. Anyway, the full field LS framework presented here precisely reproduced different grain growth experiments within multiphase peridotite analogues and may allow accessing to geologically relevant time and space scales and especially for natural microstructures for which the grain sizes involve timescales out of reach for laboratory experiments. Based on the full field model, we then propose a mean field model with the aim to calculate the grain size evolution upon the presence of different type of secondary phases using minimal computational resources. We explain how the mean field model proposed here can be recalibrated on experimental or full field data as long as the initial conditions are fixed (e.g. SSP or DSP fraction and size, grain size distribution). Such mean field models might be of peculiar importance within large-scale geodynamic models where grain size sensitive creep has to be considered.

3.2.6 Aknowledgments

We greatly acknowledge the two reviewers whose constructive comments have moved us forward in our understanding.
We wanted to thank Sylvie Demouchy and Andrea Tommasi for the constructive discussions that have advanced this work.

This work was supported by CNRS INSU 2018-programme TelluS-SYSTER.
The supports of the French Agence Nationale de la Recherche (ANR), ArcelorMittal, FRAMATOME, ASCOMETAL, AUBERT&DUVAL, CEA, SAFRAN through the DIGIMU Industrial Chair and consortium are gratefully acknowledged.
Data supporting figures 2 to 8 are available at https ://osf.io/guqyv/

3.3 Discussion et limites

3.3.1 Application à des roches réelles

Si nous avons essayé de reproduire par la simulation les résultats expérimentaux de croissance de grains dans les roches mantelliques, c'est dans l'espoir d'utiliser ensuite ce formalisme numérique pour pouvoir prédire les évolutions microstructurales dans les conditions naturelles. Les différences entre conditions de laboratoire et conditions naturelles pour la croissance de grains tiennent en deux points essentiels, les tailles de grains (beaucoup plus faibles en laboratoire) et l'échelle de temps (bien plus importante dans la nature). Ces deux points sont liés l'un à l'autre car, si l'on ne considère que la capillarité, on voit que la cinétique de croissance est inversement proportionnelle à la taille de grain. Ainsi il faudrait des expériences de recuit très longues pour espérer détecter un changement de taille de grain pour un polycristal dont la taille moyenne de grain est supérieure à $30\mu m$. Une autre limitation des expériences, également liée aux échelles de temps impliquées, est l'influence de la température, en effet pour espérer observer un changement de taille de grains dans les recuits expérimentaux, il faut se placer à des températures correspondant à la base de la lithosphère ($\approx$ 1500K). Ainsi les données expérimentales sur la cinétique de croissance ne couvrent pas toute une partie du manteau supérieur pour laquelle il est nécessaire d'extrapoler les dépendances en température.
Nous avons tenté, en utilisant notre formalisme numérique qui reproduit les résultats expérimentaux, de simuler la croissance de grains de roches réelles dans les conditions naturelles. Nous avons utilisé pour cela des cartographies EBSD, fournies par Andrea Tommasi et Shiran Liu [Liu et al., 2019a] de xénolithes ayant des microstructures différentes, depuis la plus récemment déformée (grains plus fin) vers la plus recuite (gros grain equiaxes). Ces cartographies ont été immergées dans un maillage EF et leurs croissances de grains ont été simulées à une température correspondant à une température ($\approx$ 1000K) contrainte par un thermomètre basé sur la chimie des pyroxènes. Dans ces simulations, toutes les extrapolations ont été faites : les tailles moyennes de grains des roches (plusieurs dizaines de μm), les échelles de temps impliquées et la température sont clairement en dehors du spectre des conditions dans lesquelles le modèle a été calibré. Le but de ces simulations était de déterminer un temps caractéristique pour passer d'une microstructure à l'autre dans des conditions statiques, les résultats de ces modèles sont présentés dans la figure 3.12.

D'après cette figure, il faudrait moins de 10000 ans sans déformation pour passer de la microstructure la plus déformée à la microstructure intermédiaire et 250000 ans pour obtenir la microstructure la plus recuite. Ces temps sont extrêmement courts comparés aux échelles de temps géologiques, ainsi si un tel modèle était réaliste, les géologues auraient très peu de chance d'échantillonner ce type de roche dans la nature. Les microstructures de péridotites échantillonnées sur la surface de Terre montrent une diversité importante mais il n'est pas rare, voire il est même fréquent, d'échantillonner des péridotites à grains très fin ($\approx 10\mu m$). Ainsi, les observations naturelles laissent à penser que les résultats de nos modèles ne sont pas crédibles.
Cela signifie qu'au moins un élément a été négligé dans la compréhension des mécanismes jouant au premier ordre sur la cinétique de croissance et/où que nous avons mal modélisé ce que nous avons compris des mécanismes.

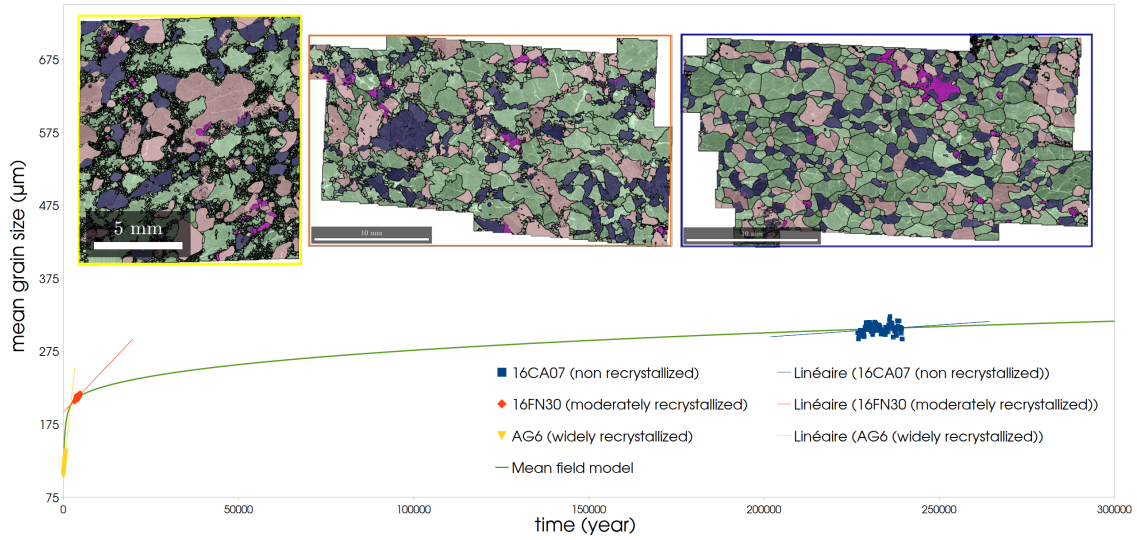


FIGURE 3.12 – Récapitulatif des cinétiques de croissance simulées; les points correspondent aux simulations en champ complet pour les différentes cartographies EBSD depuis la plus récemment déformée (jaune) vers la plus recuite (bleu), la courbe verte correspond à la cinétique de croissance calculée par notre modèle en champ moyen (Eq.3.17) pour une composition de roche moyennée entre les 3 échantillons. Les différentes cinétiques simulées en champ complet ont été décalées dans le temps d'une valeur représentant la meilleure correspondance entre la cinétique déterminée par le modèle en champ complet et celle déterminée par le champ moyen.

3.3.2 Cinétique de croissance des phases secondaires

La cinétique de croissance des phases secondaires joue un rôle crucial dans la cinétique de croissance globale de la roche aux échelles de temps géologiques. En effet, si les grains de phases secondaires sont petits et dispersés de manière homogène dans la microstructure, la migration des joints de grains est rapidement épinglée par les interphases et le seul moyen pour la microstructure d'évoluer est de déplacer ces interphases en faisant croître les phases secondaires. Pour illustrer l'influence de la cinétique de croissance des phases secondaires, le modèle en champ moyen développé dans la section précédente [Furstoss et al., 2020] qui décrit bien l'ancrage des joints de grains de la phase principale par les jonctions triples comportant au moins une interphase a été repris et nous avons utilisé différents modèles en champ moyen de la littérature pour calculer la cinétique de croissance de la phase secondaire (Fig.3.13).

On voit que les résultats sont très différents alors que la croissance de grains de la phase principale a été calculée de la même manière. Le modèle de Bercovici and Ricard [2014] donne des résultats proches des observations naturelles alors que la cinétique calculée par le modèle de Nakakoji and Hiraga [2018] sous-estime les tailles de grain.

Notre modèle en champ moyen est lui quasiment figé car la seconde phase évolue avec une mobilité extrêmement basse qui est la mobilité d'un joint de grains OPx/OPx (énergie d'activation 577kJ/mol). On peut se poser la question de la pertinence d'attribuer la mobilité du joint de grains OPx/OPx à l'évolution de la taille de grains d'OPx car les grains de pyroxène vont rapidement être séparés des autres et leur croissance va se faire par migration des interphases.

Une description fidèle de la cinétique de croissance des phases secondaires est d'autant plus importante que les grains de ces phases sont petits. En effet, à fractions volumiques égales, des petits grains de phases secondaires exerceront une force d'épinglage bien plus importante car ils se-

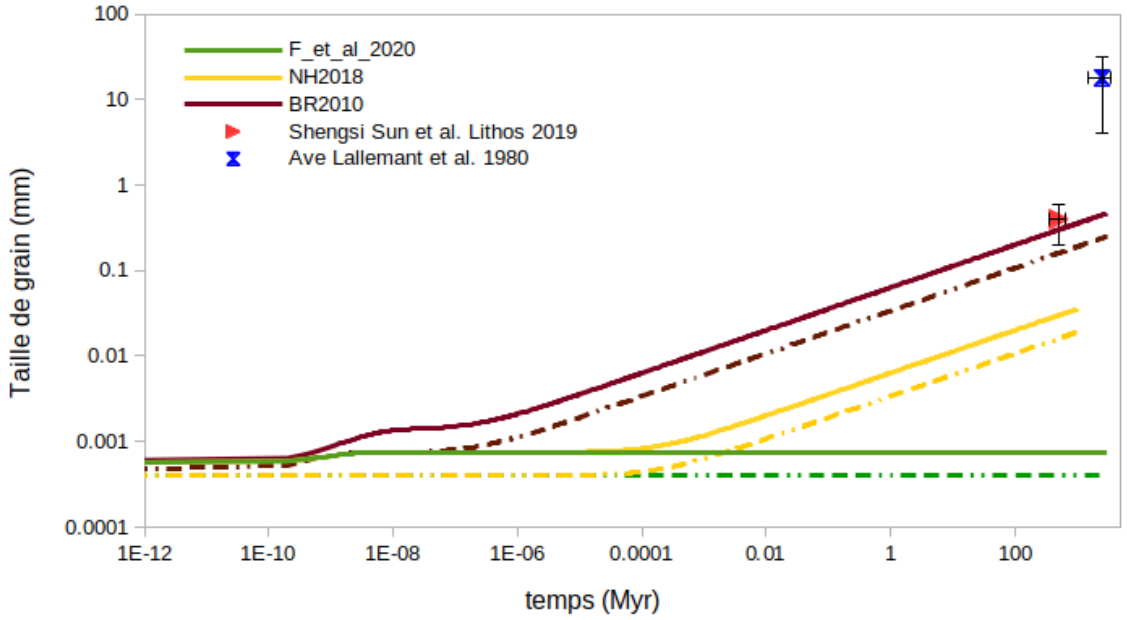


FIGURE 3.13 – Cinétiques de croissance calculées à 1073K pour la phase principale avec le modèle en champ moyen de Furstoss et al. [2020], cinétiques de croissance de la phase secondaire (traits pointillés) calculées à partir des modèles en champ moyen de Furstoss et al. [2020], Nakakoji and Hiraga [2018] et Bercovici and Ricard [2014], les traits pleins correspondent à la taille de grains moyenne (24% de fraction volumique de seconde phase) et les deux points correspondent à des roches qui ont été datées et dont l'évolution microstructurale sans déformation a sans doute eu lieu autour de 800°C [Lallemant et al., 1980; Sun et al., 2019].

ront plus nombreux. C'est pour cette raison que les simulations réalisées à partir de roches réelles (Fig.3.12), dans lesquelles les grains de phases secondaires sont gros, prédisent une évolution de la taille de grains alors que le même modèle appliqué à une roche à grains très fins (Fig.3.13) prédit une cinétique de croissance nulle.
Ainsi pour aller plus loin que la reproduction des résultats expérimentaux et modéliser la croissance de grains dans les conditions naturelles il faut mieux modéliser la migration des interphases. Cette perspective sera développée en détail dans le chapitre 7.

3.3.3 Migration des joints de grain d'olivine

D'après les modèles présentés ci dessus, la migration des joints de grains d'olivine n'est ralentie ou stoppée que par l'ancrage exercé par les phases secondaires. Ainsi, en l'absence de ces minéraux, la migration des joints de grains d'olivine devrait être régie par une croissance par capillarité pure telle que décrite dans le chapitre 2. Comme on a pu le voir, cette croissance est très rapide, bien plus que la croissance des phases secondaires par migration des interphases. Ceci implique que dans une roche multiphasée recuite, la taille moyenne des grains de la phase principale devrait être presque toujours égale à la distance moyenne entre les grains de phases secondaires. Cependant, la grande majorité des microstructures de péridotites naturelles recuites ne présente pas cette caractéristique (Fig.3.14).
De plus, si une croissance par capillarité pure pouvait s'appliquer, les roches monominéraliques telles que les dunites (composées à plus de 90% d'olivine) devraient atteindre en quelques millions

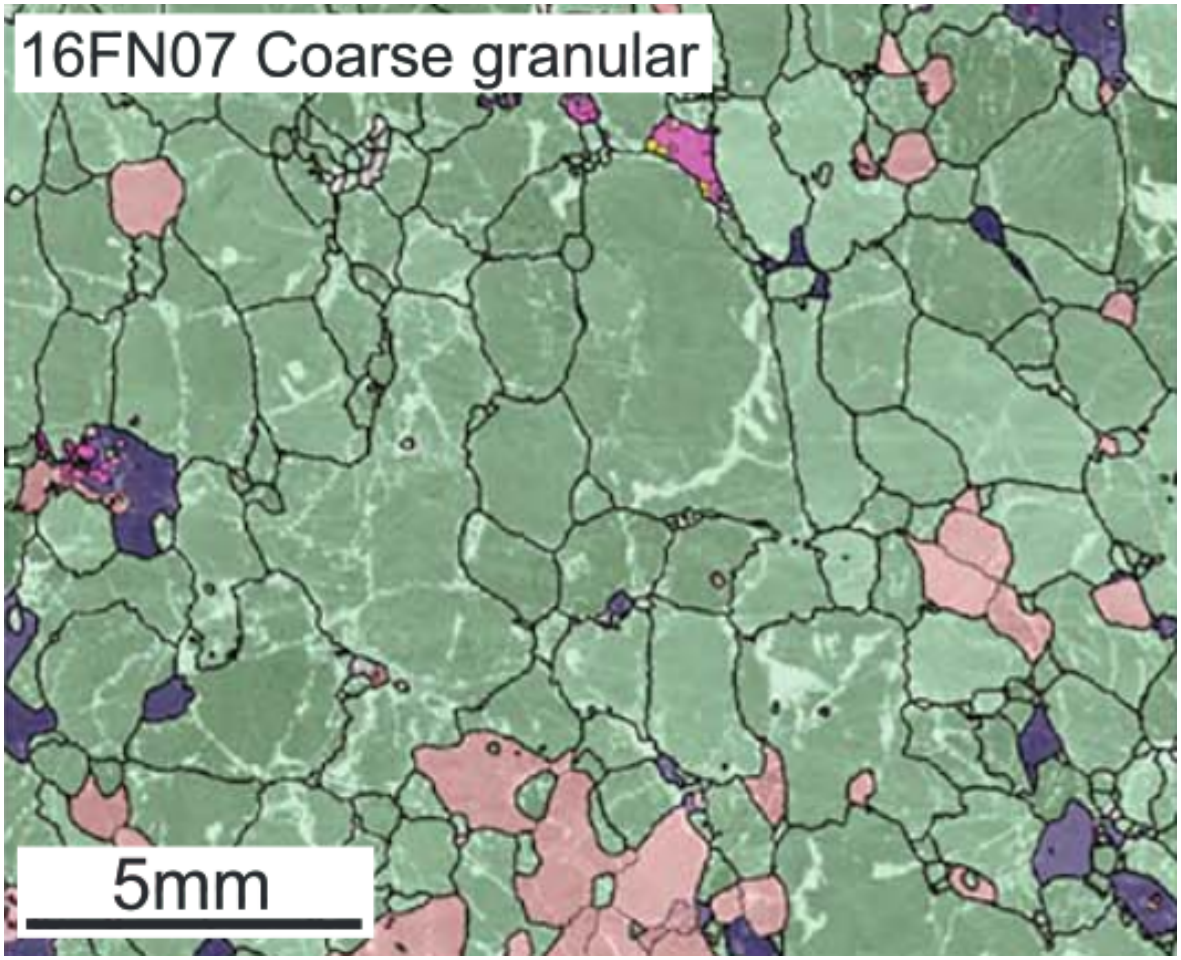


FIGURE 3.14 – Exemple d'une microstructure de péridotite naturelle fortement recuite dans laquelle l'espacement entre les grains de phases secondaires ne correspond pas à la taille de grains de la phase principale (d'après [Liu et al., 2019b]).

d'années de recuit des tailles de grains de l'ordre du mètre (Chap.2) ce qui n'est jamais observé en réalité.

Ces constats amènent à penser que l'extrapolation classique des cinétiques de croissance observées expérimentalement à un contexte géologique par des lois de type Burke et Turnbull n'est pas correcte. Comme les cinétiques de croissance déterminées expérimentalement ne peuvent pas être remises en cause, il faut alors trouver par quel mécanisme physique la croissance de grains d'un agrégat d'olivine pourrait être ralentie tout en conservant une cinétique de croissance concordante avec les résultats expérimentaux. Cette réconciliation des contraintes apportées par les expériences de laboratoire et les observations naturelles sur la cinétique de croissance des agrégats d'olivine est abordée dans le prochain chapitre.

3.4 Références

Agnoli, A., Bernacki, M., Logé, R., Franchet, J.-M., Laigo, J., and Bozzolo, N. (2015). Selective growth of low stored energy grains during δ sub-solvus annealing in the inconel 718 nickel-based superalloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 46(9) :4405–4421. 93

Agnoli, A., Bernacki, M., Logé, R. E., Franchet, J.-M., Laigo, J., and Bozzolo, N. (2012). Understanding and modeling of gain boundary pinning in inconel718. In *Superalloys 2012 : The 12th International Symposium on Superalloys*, pages p–73. 91, 92, 93

Agnoli, A., Bozzolo, N., Logé, R., Franchet, J.-M., Laigo, J., and Bernacki, M. (2014). Development of a level set methodology to simulate grain growth in the presence of real secondary phase particles and stored energy–application to a nickel-base superalloy. *Computational Materials Science*, 89 :233–241. 91, 92, 93

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2012). Mechanisms for the generation of plate tectonics by two-phase grain-damage and pinning. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 202 :27–55. 91, 93, 95, 104, 107, 108

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2014). Plate tectonics, damage and inheritance. *Nature*, 508(7497) :513. 93, 110, 111

Bernacki, M., Resk, H., Coupez, T., and Logé, R. E. (2009). Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(6) :064006. 91

Boullier, A. and Gueguen, Y. (1975). Sp-mylonites : origin of some mylonites by superplastic flow. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 50(2) :93–104. 90

Burke, J. and Turnbull, D. (1952). Recrystallization and grain growth. *Progress in metal physics*, 3 :220–292. 105

Cooper, R. and Kohlstedt, D. (1986). Rheology and structure of olivine-basalt partial melts. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 91(B9) :9315–9323. 93, 96

Cruz-Fabiano, A. L., Logé, R., and Bernacki, M. (2014). Assessment of simplified 2d grain growth models from numerical experiments based on a level set framework. *Computational Materials Science*, 92 :305–312. 105

Evans, B., Renner, J., and Hirth, G. (2001). A few remarks on the kinetics of static grain growth in rocks. *International Journal of Earth Sciences*, 90(1) :88–103. 106

Fausty, J., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2018). A novel level-set finite element formulation for grain growth with heterogeneous grain boundary energies. *Materials & Design*, 160 :578–590. 91, 94

Furstoss, J., Bernacki, M., Ganino, C., Petit, C., and Pino-Muñoz, D. (2018). 2d and 3d simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 283 :98–109. 91, 92, 95, 96, 97

Furstoss, J., Bernacki, M., Petit, C., Fausty, J., Pino-Muñoz, D., and Ganino, C. (2020). Full field and mean field modeling of grain growth in a multiphase material under dry conditions : application to peridotites. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, page e53942. 90, 110, 111

Hansen, L. N., Zhao, Y.-H., Zimmerman, M. E., and Kohlstedt, D. L. (2014). Protracted fabric evolution in olivine : Implications for the relationship among strain, crystallographic fabric, and seismic anisotropy. *Earth and Planetary Science Letters*, 387 :157–168. 90

Herring, C. and Kingston, W. (1951). The physics of powder metallurgy. *WE Kingston, Edition : McGraw Hill, New York*. 92

Herwegh, M., Linckens, J., Ebert, A., Berger, A., and Brodhag, S. (2011). The role of second phases for controlling microstructural evolution in polymineralic rocks : A review. *Journal of Structural Geology*, 33(12) :1728–1750. 91

Hillert, M. (1988). Inhibition of grain growth by second-phase particles. *Acta Metallurgica*, 36(12) :3177–3181. 93

Hiraga, T., Miyazaki, T., Tasaka, M., and Yoshida, H. (2010a). Mantle superplasticity and its self-made demise. *Nature*, 468(7327) :1091. 90

Hiraga, T., Tachibana, C., Ohashi, N., and Sano, S. (2010b). Grain growth systematics for forsterite±enstatite aggregates : Effect of lithology on grain size in the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 291(1-4) :10–20. 91, 93, 95, 97, 99, 100, 106, 107

Hitti, K. and Bernacki, M. (2013). Optimized dropping and rolling (odr) method for packing of poly-disperse spheres. *Applied Mathematical Modelling*, 37(8) :5715–5722. 95

Kameyama, M., Yuen, D. A., and Fujimoto, H. (1997). The interaction of viscous heating with grain-size dependent rheology in the formation of localized slip zones. *Geophysical Research Letters*, 24(20) :2523–2526. 103

Karato, S. (1989). Grain growth kinetics in olivine aggregates. *Tectonophysics*, 168(4) :255–273. 95, 97

Lallemant, H. A., Mercier, J. C., Carter, N., and Ross, J. (1980). Rheology of the upper mantle : inferences from peridotite xenoliths. *Tectonophysics*, 70(1-2) :85–113. 111

Lifshitz, I. and Slyozov, V. (1961). The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 19(1) :35 – 50. 93

Linckens, J., Bruijn, R. H., and Skemer, P. (2014). Dynamic recrystallization and phase mixing in experimentally deformed peridotite. *Earth and Planetary Science Letters*, 388 :134–142. 94

Linckens, J., Herwegh, M., Müntener, O., and Mercolli, I. (2011). Evolution of a polymineralic mantle shear zone and the role of second phases in the localization of deformation. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 116(B6). 100, 101

Liu, S., Tommasi, A., Vauchez, A., and Mazzucchelli, M. (2019a). Crust-mantle coupling during continental convergence and break-up : Constraints from peridotite xenoliths from the borborema province, northeast brazil. *Tectonophysics*, 766 :249–269. 109

Liu, S., Tommasi, A., Vauchez, A., and Mazzucchelli, M. (2019b). Deformation, annealing, melt-rock interaction, and seismic properties of an old domain of the equatorial atlantic lithospheric mantle. *Tectonics*, 38(4) :1164–1188. 112

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2016). Improvement of 3d mean field models for capillarity-driven grain growth based on full field simulations. *Journal of materials science*, 51(24) :10970–10981. 91

Moelans, N., Blanpain, B., and Wollants, P. (2006). Phase field simulations of grain growth in two-dimensional systems containing finely dispersed second-phase particles. *Acta Materialia*, 54(4) :1175–1184. 93

Nakakoji, T. and Hiraga, T. (2018). Diffusion creep and grain growth in forsterite+ 20 vol% enstatite aggregates : 2. their common diffusional mechanism and its consequence for weak-temperature-dependent viscosity. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 123(11) :9513–9527. 95, 106, 110, 111

Nakakoji, T., Hiraga, T., Nagao, H., Ito, S., and Kano, M. (2018). Diffusion creep and grain growth in forsterite+ 20 vol% enstatite aggregates : 1. high-resolution experiments and their data analyses. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 123(11) :9486–9512. 106, 107

Nichols, S. J. and Mackwell, S. J. (1991). Grain growth in porous olivine aggregates. *Physics and Chemistry of Minerals*, 18(4) :269–278. 95, 96, 97

Ohuchi, T. and Nakamura, M. (2007). Grain growth in the forsterite–diopside system. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 160(1) :1–21. 93

Qian, Q., O'Neill, H. S. C., and Hermann, J. (2010). Comparative diffusion coefficients of major and trace elements in olivine at 950° c from a xenocryst included in dioritic magma. *Geology*, 38(4) :331–334. 91

Roden, M. F., Irving, A. J., and Murthy, V. R. (1988). Isotopic and trace element composition of the upper mantle beneath a young continental rift : results from kilbourne hole, new mexico. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 52(2) :461–473. 99

Rozel, A., Ricard, Y., and Bercovici, D. (2011). A thermodynamically self-consistent damage equation for grain size evolution during dynamic recrystallization. *Geophysical Journal International*, 184(2) :719–728. 103

Scholtes, B., Boulais-Sinou, R., Settefrati, A., Muñoz, D. P., Poitrault, I., Montouchet, A., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2016a). 3d level set modeling of static recrystallization considering stored energy fields. *Computational Materials Science*, 122 :57–71. 91

Scholtes, B., Ilin, D., Settefrati, A., Bozzolo, N., Agnoli, A., and Bernacki, M. (2016b). Full field modeling of the zener pinning phenomenon in a level set framework- discussion of classical limiting mean grain size equation. In *Superalloys 2016*, pages 497–503. John Wiley. 91, 92, 93, 96

Scholtes, B., Shakoor, M., Settefrati, A., Bouchard, P.-O., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2015). New finite element developments for the full field modeling of microstructural evolutions using the level-set method. *Computational Materials Science*, 109 :388–398. 98

Skemer, P. and Karato, S.-i. (2007). Effects of solute segregation on the grain-growth kinetics of orthopyroxene with implications for the deformation of the upper mantle. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 164(3-4) :186–196. 95, 96

Smith, C. (1948). Grains, phases, and interphases : An interpretation of microstructure : Transactions of the american institute of mining and metallurgical engineers, v. 175. 91, 103

Spandler, C., O'Neill, H. S. C., and Kamenetsky, V. S. (2007). Survival times of anomalous melt inclusions from element diffusion in olivine and chromite. *Nature*, 447(7142) :303. 91

Sun, S., Dong, Y., Liu, X., He, D., and Cheng, C. (2019). Fabrics, geothermometry, and geochronology of the songshugou ophiolite : Insights into the tectonic evolution of the shangdan suture, qinling orogen, china. *Lithosphere*, 11(6) :784–803. 111

Tasaka, M. and Hiraga, T. (2013). Influence of mineral fraction on the rheological properties of forsterite+ enstatite during grain-size-sensitive creep : 1. grain size and grain growth laws. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 118(8) :3970–3990. 93, 96, 101

Tasaka, M., Hiraga, T., and Michibayashi, K. (2014). Influence of mineral fraction on the rheological properties of forsterite+ enstatite during grain size sensitive creep : 3. application of grain growth and flow laws on peridotite ultramylonite. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 119(2) :840–857. 100, 101

Wark, D. A., Williams, C. A., Watson, E. B., and Price, J. D. (2003). Reassessment of pore shapes in microstructurally equilibrated rocks, with implications for permeability of the upper mantle. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 108(B1). 91

Chapitre 4

Prise en compte de l'ancrage des joints de grains par les impuretés

Sommaire

4.1 Introduction . . . 118
4.2 On the role of solute drag in reconciling laboratory and natural constraints on olivine grain growth kinetics . . . 118
4.2.1 Introduction . . . 118
4.2.2 Modeling solute drag . . . 119
4.2.3 Solute drag in olivine . . . 124
4.2.4 Laboratory and natural constraints on grain sizes in olivine-rich rocks . . . 126
4.2.5 Results . . . 128
4.2.6 Discussion . . . 133
4.2.7 Conclusions . . . 135
4.2.8 Acknowledgments . . . 135
4.2.9 Data availability . . . 135
4.3 Impurities slow down the growth rate of mantle crystals . . . 135
4.4 Discussion et limites . . . 139
4.5 Références . . . 140

4.1 Introduction

La différence majeure entre les expériences de recuit en laboratoire et dans des roches naturelles tient dans la taille moyenne de grains des échantillons. En effet, pour espérer détecter un changement de taille de grains lors d'une expérience de recuit, il faut utiliser un polycristal à grains très fins. La force capillaire étant inversement proportionnelle au rayon de courbure, la force motrice pour la croissance sera bien plus importante pour un polycristal à petits grains plutôt que pour un agrégat composé de gros grains. Ainsi, la plupart des données expérimentales sur la croissance de grains de l'olivine concernent des tailles de grain comprises entre 1 et 20μm. L'idée de base, pour réconcilier les contraintes apportées par les observations naturelles et les expériences de laboratoire, était alors d'identifier un mécanisme physique, ralentissant la cinétique de croissance, dont l'intensité dépendrait de la taille de grains. Ce mécanisme devrait avoir un faible impact sur la croissance pour de faibles tailles de grains puis prendre de l'importance et ralentir la cinétique pour des tailles de grains plus importantes et ainsi permettre d'expliquer les observations naturelles. Comme la force capillaire dépend de la taille de grains, la vitesse de migration des joints de grains en dépend également, le mécanisme sensé ralentir la cinétique de croissance peut donc également dépendre de la vitesse de migration. C'est le cas de la pression d'ancrage exercée par les impuretés ségrégées autour des joints de grains, i.e. le mécanisme de "solute drag".

4.2 On the role of solute drag in reconciling laboratory and natural constraints on olivine grain growth kinetics

This work has been accepted pending minor revisions to the Geophysical Journal International, [Furstoss et al., 2020b].

Abstract

We investigate the effect of solute drag on grain growth (GG) kinetics in olivine-rich rocks through full field and mean field modelling. Considering a drag force exerted by impurities on grain boundary migration allows reconciling laboratory and natural constraints on olivine GG kinetics. Solute drag is implemented in a full field level-set framework and on a mean field model, which explicitly accounts for a grain size distribution. After calibration of the mean field model on full field results, both models are able to both reproduce laboratory GG kinetics and to predict grain sizes consistent with observations in peridotite xenoliths from different geological contexts.

4.2.1 Introduction

Olivine is the major constituent of the Earth upper mantle, and its grain growth (GG) kinetics is of major importance in several geodynamic processes. In fact, a variation in the mean grain size of a mantle rock may drastically change its mechanical behavior through the grain size dependence of the diffusion creep regime [Karato et al., 1986]. In this regime, grain size reduction produces significant weakening, whereas grain growth may lead the rocks into the grain-size independent, but stress-dependent dislocation creep regime. A variation in the mean grain size of olivine rocks may therefore produce marked changes in the upper mantle rheology, which may control strain localization [Braun et al., 1999]. Consistently, preservation of small grain sizes (mylonitic or ultramylonitic microstructures within ductile shear zones [Vissers et al., 1991]) has been proposed as one of the mechanisms allowing to preserve weak plate boundaries over geological times [Bercovici and Ricard, 2014].

However, numerical models [Chu and Korenaga, 2012; Furstoss et al., 2018] based on experimental data on olivine GG [Hiraga et al., 2010; Karato, 1989; Ohuchi and Nakamura, 2007] cannot

explain the persistence of small grain sizes through million years in pure olivine rocks. Although they simulate well the experimental data, these models also fail to predict the commonly observed plurimillimetric grain sizes observed in dunites when run on geologically relevant timescales (i.e., over millions of years), for which they predict meter scale grain sizes [Chu and Korenaga, 2012; Furstoss et al., 2018]. To obtain a GG kinetics compatible with natural observations in upper mantle rocks, the presence of second phases is often considered [Furstoss et al., 2020a; Hiraga et al., 2010]. Nevertheless, to preserve small olivine grain sizes over millions of years, these models have to introduce some questionable features, such as very slow second phase GG [Nakakoji and Hiraga, 2018], an enhanced mixing between phases [Bercovici and Ricard, 2012] or the presence of small fixed particles [Furstoss et al., 2020a] to increase the impediment of olivine grain boundary migration (GBM).

Our understanding of olivine GG in itself is limited by the inconsistency between laboratory and natural time and spatial scales. All GG models are calibrated on experimental data obtained for ultra-fine grains (1 to 30μm), for which the grain size evolution is detectable at the experimental timescale (a few hours to several days), and then extrapolated to natural conditions. As a consequence, if a physical mechanism becomes prominent only for grain sizes larger than 50μm, its effect will not be captured in the experiments. Such a physical mechanism may be the drag force exerted by impurities also called solute drag, which has been very seldom considered in studying GG in rocks (orthopyroxene [Skemer and Karato, 2007], halite [Guillope and Poirier, 1979]) and never accounted for in modeling GG of olivine.

In the present work we tested the effect of solute drag on the GG kinetics of olivine. We performed 2D full field GG simulations using a level-set (LS) framework [Bernacki et al., 2011] in which we implemented the solute drag effect. These models show that considering this mechanism allows for consistent simulation of olivine GG kinetics at both experimental and upper mantle conditions. Finally we adjust a mean-field model on results of the full field simulations to propose an analytical expression allowing to compute efficiently the grain size evolution within geodynamic large scale models accounting for grain size-dependent rheologies.

4.2.2 Modeling solute drag

Impurities present within the crystal lattice and segregated at grain boundaries can have an impact on their migration kinetics through the so called solute drag effect. The grain boundary migration velocity (v) is generally expressed by [Humphreys and Hatherly, 2012] :

$$v = \mathrm{MP}, \tag{4.1}$$

where $\mathrm{M}(m^4.\mathrm{J}^{-1}.s^{-1})$ is the grain boundary mobility and P is the sum of the pressures exerted on the grain boundary. The solute drag effect can be described in terms of dragging pressure exerted on the grain boundary, which is a function of the grain boundary velocity and impurities concentration and nature. The quantification of this drag pressure has been studied theoretically [Lücke and Detert, 1957] . Its intensity follows three main regimes (high, intermediate and low velocity), similarly to well known dislocation impediment by Cottrell atmospheres [Cottrell and Bilby, 1949]. In fact, impurities segregated around grain boundary interact with it and when the grain boundary migrates the impurity cloud tends to accompany it. In the high velocity regime, the grain boundary moves so fast that the segregated impurities cannot follow the interface and the interactions between the impurities and the grain boundary are much reduced. In the low velocity regime, the impurity cloud can stay segregated around the grain boundary, but the intrinsic drag of the grain boundary (due to drag exerted by the intrinsic defects within the interface) is generally higher than the drag exerted by the impurities (Fig.4.1). Between these two velocities, a third regime exists where the impact of solute drag on GBM is the most important.

Even if the drag effect is expected to follow different mathematical relationships depending on velocity regime [Lücke and Detert, 1957], an unified expression for the drag pressure P_i exerted by a c_0 concentration of impurities (within the grain matrix) describing the two velocity regimes has been proposed by [Cahn, 1962] :

$$P_i = \frac{\alpha v c_0}{1+\beta^2 v^2}, \tag{4.2}$$

where v is the grain boundary velocity, c_0 the concentration of impurities within the bulk, $\alpha(J.s.m^{-4})$ and $\beta(s.m^{-1})$ are two parameters modulating the intensity of the drag. α controls the intensity of the solute drag pressure and β constrains the grain boundary velocity which is the most impacted by the presence of the impurities (Fig.4.1). The drag effect is most effective for grain boundary velocities close to of $1/\beta$.

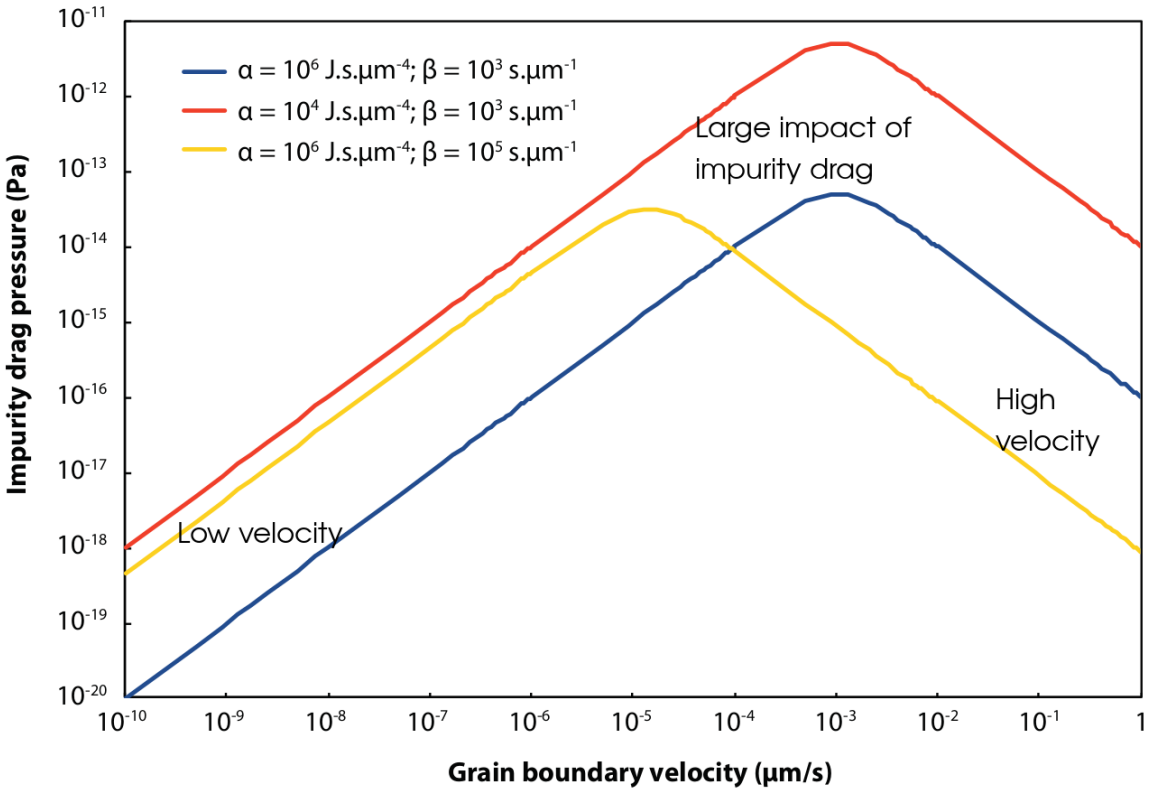


FIGURE 4.1 – Solute drag pressure intensity as a function of the grain boundary velocity calculated using eq.4.2 for c_0 = 100ppm and different values of α and β.

The α and β parameters can be expressed as integrals of functions $D(x)$ and $E(x)$ representing the variation of the impurity diffusion coefficient and interaction energy, respectively, along the grain boundary normal (x). As these two functions are difficult to constrain experimentally, their mathematical expressions are generally hypothesized in an integrable way, which permits to obtain analytical expressions for α and β [Cahn, 1962] :

$$\alpha = \frac{N_v (k_b T)^2}{E_0 D}\left(sinh\left(\frac{E_0}{k_b T}\right) - \frac{E_0}{k_b T}\right), \tag{4.3}$$

and,

$$\beta^2 = \frac{\alpha k_b T \delta}{2 N_v E_0^2 D}, \tag{4.4}$$

where $N_v(m^{-3})$ is the number of atoms per unit volum, k_b the Boltzmann constant, E_0(J) the interaction energy, $D(m^2.s^{-1})$ the diffusion coefficient of the impurity within the grain matrix and $\delta(m)$ is the characteristic segregation length of the impurities around the grain boundary.

4.2.2.1 Semi-explicit implementation of solute drag within the level-set framework

The LS framework [Bernacki et al., 2009], already used to model olivine GG [Furstoss et al., 2018, 2020a], proposes an implicit description of the polycrystal through the use of LS functions representing the signed distance function to the grain boundaries surrounding the grain they represent (positive inside the grain and negative elsewhere) in a finite element (FE) context. The microstructural evolution is simulated by moving LS functions according to physical laws describing GBM [Cruz-Fabiano et al., 2014] or by creating LS functions to represent new grains nucleated during the recrystallization processes [Maire et al., 2017]. Theoretically, each grain of a polycrystal is represented by its own LS function. In order to reduce the computation time and memory storage, several non-neighboring grains in the initial microstructure can be grouped to form Global Level Set (GLS) functions thanks to a graph coloration technique. Re-coloration technique is used to avoid numerical grain coalescence during grain boundary motion [Scholtes et al., 2016, 2015]. The GLS functions displacement is computed within an efficient FE [Scholtes et al., 2015; Shakoor et al., 2015] framework using anisotropic mesh refinement around interfaces [Resk et al., 2009]. The initial microstructure is generated using a Voronoï-Laguerre Dense Sphere Packing algorithm [Hitti et al., 2012] allowing to respect precisely an imposed initial grain size distribution.
If GG is solely controlled by capillarity (reduction in the grain boundary energy) and solute drag, the grain boundary velocity can be expressed as the sum of the capillarity pressure (P_{capi}) and impurity drag pressure (P_i described by Eq.4.2) as :

$$\vec{v} = M(P_{capi} - P_i)\vec{n} = M(-\gamma\kappa - \frac{\alpha c_0 \vec{v}\cdot\vec{n}}{1+\beta^2 v^2})\vec{n}, \tag{4.5}$$

where $v^2 = ||\vec{v}||^2$, $M(m^4.J^{-1}.s^{-1})$ and $\gamma(J.m^{-2})$ are the grain boundary mobility and energy respectively, κ is the grain boundary local curvature (in 2D) or the sum of the main local curvatures (in 3D) and $\vec{n}$ the outward unit normal to the grain boundary.
By introducing the GLS function Φ_i to represent the grains i, we can do the following implicit and explicit first order time discretizations, for the temporal derivative of Φ_i :

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial t} = \frac{\Phi^{t+\Delta t} - \Phi^t}{\Delta t}, \tag{4.6}$$

for the GLS function velocity :

$$\vec{v} = \frac{\Phi^{t+\Delta t} - \Phi^t}{\Delta t}\vec{n} = -\frac{\Phi^{t+\Delta t} - \Phi^t}{\Delta t}\frac{\vec{\nabla}\Phi}{}, \tag{4.7}$$

and for the velocity squared :

$$\vec{v}^2 = (\frac{\Phi^t - \Phi^{t-\Delta t}}{\Delta t})^2 = v_{old}^2. \tag{4.8}$$

The displacement of the GLS functions are then computed using the convective LS equation [Osher and Sethian, 1988] :

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial t} + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}\Phi_i = 0. \tag{4.9}$$

Considering the geometrical properties of LS function $\kappa = -\Delta\Phi$, $\vec{\nabla}\Phi.\vec{\nabla}\Phi = 1$, $\vec{\nabla}\Phi = -\vec{n}$, using the above time discretization and substituting Eq.4.5 within the above convective LS equation, we obtain the FE strong formulation :

$$\mathscr{M}\frac{\Phi^{t+\Delta t}}{\Delta t} - \mathrm{M}\gamma\Delta\Phi^{t+\Delta t} = \mathscr{M}\frac{\Phi^{t}}{\Delta t}, \tag{4.10}$$

where :

$$\mathscr{M} = 1 + \frac{\mathrm{M}\alpha c_0}{1+\beta^2 v_{old}^2}. \tag{4.11}$$

The fact that Eq.4.11 uses v_{old}^2 instead of v^2 is a simplification that reduces the non-linear behaviour of the problem. In practical terms, the time marching scheme uses a small timestep, thus the error of replacing v^2 by v_{old}^2 is small. However it greatly simplify the numerical scheme allowing its implementation on a generic FE code. This formulation is similar to the diffusion formulation classically used for capillarity driven GG in the LS formalism [Cruz-Fabiano et al., 2014]. By analogy with the heat equation, $\mathscr{M}$ is equivalent to a mass term (i.e. the product between the specific heat capacity and density). The main difference with the classic LS approach for capillarity-driven GG when solute drag is modelled is that the mass term differs from one and depends on the velocity of the LS function at time $t-\Delta t$. This heterogeneous mass term is computed on each node of the mesh and linearly interpolated.
A major drawback of the LS approach lies in the fact that during grain boundary migration, the GLS are no longer distance functions $||\vec{\nabla}\phi|| \neq 1$. This is particularly problematic when a remeshing technique depending on the distance property is used at grain interfaces. In addition, the new diffusive formulation proposed in Eq.4.10 requires a distance function as it is based on the respect of $||\vec{\nabla}\phi|| = 1$, at least in a thin layer around the interface. For these reasons, the GLS functions need to be reinitialized at each time step in order to restore their metric property. Numerous approaches exist for this reinitialization procedure. Here we use a new direct fast and accurate approach usable in unstructured FE mesh proposed by Shakoor et al. [Shakoor et al., 2015]. The residual errors inherent to this approach are discussed in [Florez et al., 2020].
The introduction of the solute drag pressure is expected to reduce the GG kinetics. Thus its influence has to be accounted for in the adaptative time stepping scheme in order to allow larger steps when the grain size evolves slowly. The timestep is computed by imposing a maximal incremental displacement corresponding to a given fraction (H) of the LS reinitialized width (E_p) :

$$\Delta t = \frac{\mathrm{H}\mathrm{E}_p}{v_m}, \tag{4.12}$$

where v_m is the grain boundary mean velocity :

$$v_m = \mathrm{M}\left(\frac{\gamma}{\bar{\mathrm{R}}} - \frac{c_0\alpha|\dot{\bar{\mathrm{R}}}|}{1+\beta^2\dot{\bar{\mathrm{R}}}^2}\right), \tag{4.13}$$

where $\bar{\mathrm{R}}$ and $\dot{\bar{\mathrm{R}}}$ are the mean grain radius and its temporal evolution respectively. In order to exclude a negative timestep value, we impose a lower bound for v_m to $\mathrm{M}\gamma/\mathrm{R}_{max}$ where R_{max} is the maximum grain radius.

The explicit time discretization in Eq.4.8 may have an impact on the numerical resolution if the non-linearity of the grain boundary velocity (Eq.4.5) is strong. This has been evaluated by performing computations with different timesteps (Fig.4.2), which show that mean grain size evolution does not depend on H, neither for the reference case without solute drag ($\mathscr{M} = 1$), nor for the case with solute drag.

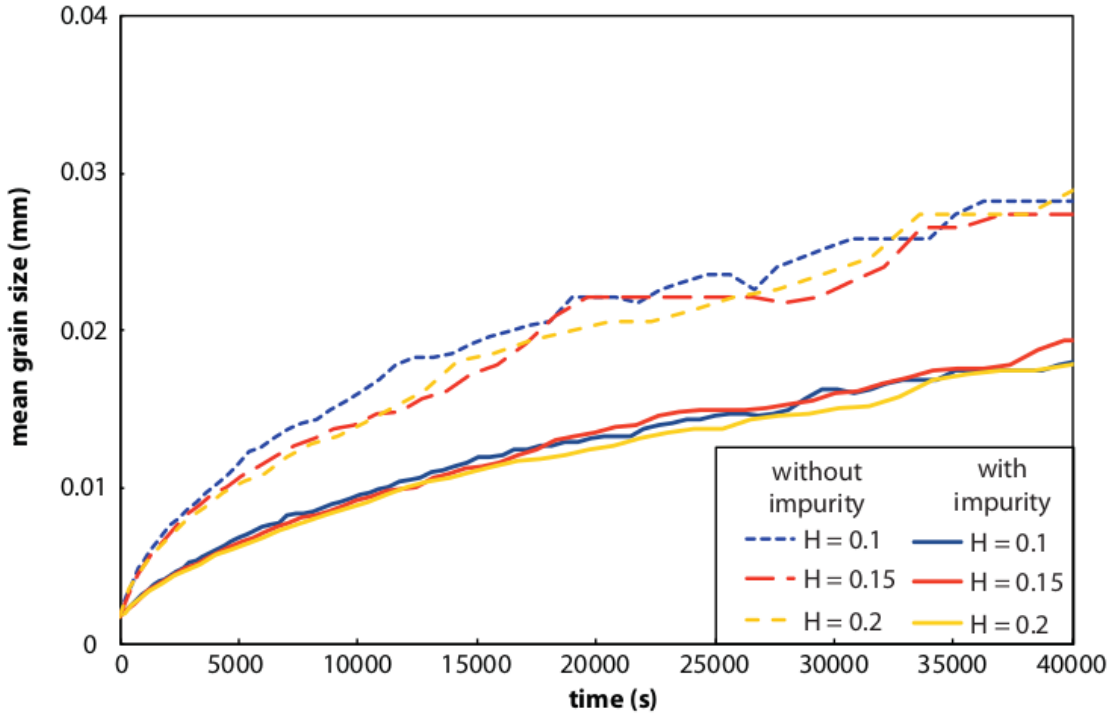


FIGURE 4.2 – Full field model of the mean grain radius evolution using $M = 2.9 \cdot 10^{-2} mm^4.J^{-1}.s^{-1}$, $\gamma = 10^{-6} J.mm^{-2}$ for a case without impurities (dashed lines) and for a case with $c_0 = 1000ppm$, $\alpha = 10^5 J.s.mm^{-4}$ and $\beta = 10^5 s.mm^{-1}$ (solid lines). The H coefficient controls the timestep (Eq.4.12).

The GG kinetics when solute drag accounts for impurities exhibit the expected trend, being slower than in cases without drag (Fig.4.2). Thus, the strong formulation (Eq.4.10) for the displacement of LS functions accounting for solute drag can be validated.

4.2.2.2 Mean field approach for GG with solute drag

To construct a mean field model describing GG kinetics accounting for solute drag, it is important to account for the initial grain size distribution. In fact, computing GG kinetics accounting only for mean grain size evolution will hide the dispersion of the solute drag pressures exerted within the microstructure, due to variations in the capillarity force, which is a function of grain size. This will result in three clear stages of grain size evolution, an initial mean grain size evolution unimpacted by solute drag (high velocity regime), a second phase, the most impacted by solute drag, where mean grain size will be quasi-static and a final phase also unimpacted by solute drag (low velocity regime). To account for the coexistence of these three phases within the microstructure and predict realistic mean grain size evolutions, the initial dispersion of individual grain sizes and their evolution rates have to be considered.
For this purpose, we adapted the Hillert's model [Hillert, 1965], which proposes a discrete representation of the grain size distribution (GSD) in the microstructure. By considering R_i the radius of the i-grain size bin, the Hillert's model allows computing the evolution of each bin by accounting for the capillarity pressure expressed as $M\gamma(\frac{\overline{R}}{R^2} - \frac{1}{R_i})$ multiplied by a coefficient ($= \kappa\frac{\overline{R}^2}{R^2}$ with $\kappa \approx 1.6$, [Maire et al., 2016]), which is adjusted based on experimental and/or full field results. This procedure enables to follow the evolution of each bin of the initial GSD. This mean field approach

is able to reproduce, in terms of GSD, the predictions of full field simulations in context of pure GG (in 2D [Cruz-Fabiano et al., 2014] and in 3D [Maire et al., 2016]) even for complex initial GSD (like bimodal ones).
To account for solute drag, we subtract from the capillarity pressure the solute drag pressure (Eq.4.2) replacing v by $\dot{R}_i$ and v^2 by $\dot{R}^2_{i,old}$ (i.e. the grain size evolution rate at the precedent increment), which gives :

$$\dot{R}_i = \kappa \frac{\overline{R}^2}{\overline{R^2}} M(\gamma(\frac{\overline{R}}{\overline{R^2}} - \frac{1}{R_i}) - \frac{\alpha c_0 \dot{R}_i}{1+\beta^2 \dot{R}^2_{i,old}}), \tag{4.14}$$

which can be reformulated as :

$$\dot{R}_i = \gamma(\frac{\overline{R}}{\overline{R^2}} - \frac{1}{R_i}) / (\frac{\overline{R^2}}{M\kappa\overline{R}^2} + \frac{\alpha c_0}{1+\beta^2 \dot{R}^2_{i,old}}), \tag{4.15}$$

To account for topological effects or non-uniform mass term along grain boundaries, equation 4.14 is generalized through the following expression :

$$\dot{R}_i = \gamma(\frac{\overline{R}}{\overline{R^2}} - \frac{1}{R_i}) / (\frac{\overline{R^2}}{M\kappa\overline{R}^2} + \frac{C_\alpha \alpha c_0 \dot{R}^n_{i,old}}{1+(C_\beta\beta)^2 \dot{R}^2_{i,old}}), \tag{4.16}$$

where C_α, C_β and n are mean field parameters which have to be calibrated on full field simulations. It can be noticed that the equation 4.16 is equivalent to the non-generalized form (Eq.4.15) for $n = 0$ and $C_\alpha = C_\beta = 1$.
In practice, each bin contains an unique grain of radius R_i. We begin with a list of grain radii generated from an imposed initial GSD and compute iteratively their evolutions. If a grain radius becomes lower than $0.1\mu m$ it is considered as consumed by the growth of neighboring grains and removed from the grain list. As this mean field model is intended to be used for long term calculations (Myr), the initial number of bins needed to preserve a representative number of grains after long annealing time is very large and the computational cost becomes prohibitive. Thus, we use a repopulation strategy allowing to do the calculation with a reasonable number of bins all along the simulation. To do so, when the number of bins is less than a minimal number, we repopulate the bin list by adding ten new bins for each existing bin R_i with radii ranging between $0.9R_i$ and $1.1R_i$ with a step of $0.02R_i$. Those range of values have been chosen in order minimize the difference between GSD before and after repopulation step (see an example in Fig.4.3). The minimal number of bins is fixed at 40 based on a convergence study.

4.2.3 Solute drag in olivine

In mantle rocks, several incompatible elements and impurities are present in concentrations ranging from few to hundreds ppm [De Hoog et al., 2010]. Some of them are more or less homogeneously dispersed through the bulk material, but others can be enriched at grain boundaries [Suzuki, 1987]. The elements that can influence grain growth through solute drag are those that exhibit a partitioning between grain interiors and boundaries. In olivine-rich rocks, nickel (Ni), aluminum (Al) and calcium (Ca) [Hiraga et al., 2003, 2004; Suzuki, 1987] display a strong partitioning between olivine grain matrix and boundaries, the latter being often qualified as «incompatible element reservoirs ». The major parameters controlling their effect on GBM are the element concentration, diffusion coefficient and interaction energy with grain boundary. The latter will control at first order the intensity of the drag pressure exerted by the impurity. As interstitials, vacancies and even grain boundaries could have a non-null electrical charge in materials as olivine, the full

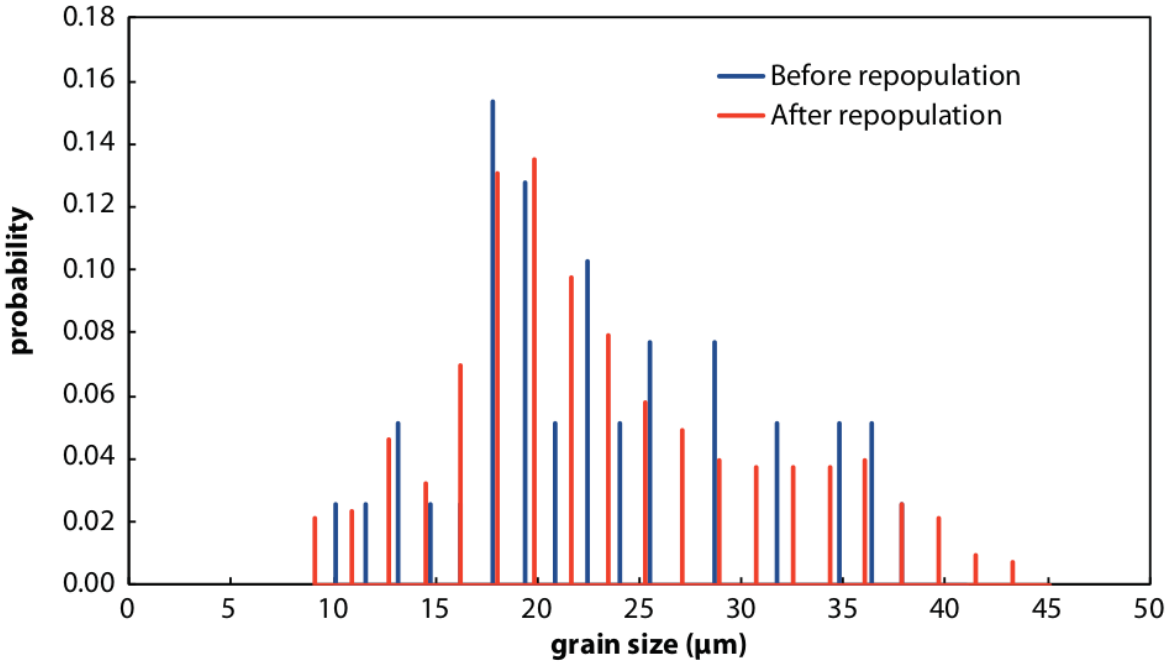


FIGURE 4.3 – Example of GSD (in number) before and after a repopulation step with a minimal bin number of 40. Both histograms are constructed using 20 classes ranging between the radii of the bins with the minimal and maximal grain radius.

formulation of this energy term should include, in addition to an elastic part, an electrostatic component. However for sake of simplicity we will assume a pure elastic interaction corresponding to the lattice distortion due to the misfit between the impurity size and the size of the typical host ion the impurity replaces. Close to and within olivine grain boundaries the impurities may replace Mg or Si ions (a depletion in Mg is observed at grain boundaries) [Hiraga et al., 2004]. Within the grain interiors, Mg ions are located in the octahedral M sites, and the interaction energy between impurity and grain boundary can be computed, as a first order approximation, using the characteristic length r_0 of those sites [Hiraga et al., 2004] :

$$E_0 = 4\pi E_\alpha \left(\frac{r_0}{2}(r_i - r_0)^2 + \frac{1}{3}(r_i - r_0)^3\right), \tag{4.17}$$

with E_α is the Young's modulus of the M lattice site and r_i is ionic radius of the impurity. E_α is close to the bulk Young's modulus and r_0 can be computed from the length of the bonds between M and oxygen sites, and between oxygen and oxygen sites [Hiraga et al., 2004]. The temperature dependency of these parameters is small and we will consider in the following $E_\alpha = 159GPa$ and $r_0 = 0.064nm$ [Hiraga et al., 2004].

Using the above expression and Eqs.4.2, 4.3 and 4.4 one can compute the drag pressure exerted by Ni ($r_i = 0.069nm$), Al ($r_i = 0.054nm$) and Ca ($r_i = 0.1nm$) for different grain boundary velocities and for natural characteristic c_0 concentrations of 2500, 50 and $100ppm$ respectively [De Hoog et al., 2010]. Considering the diffusion coefficients of the three elements at 1573K [Coogan et al., 2005; Spandler et al., 2007], we estimate that the characteristic drag pressure exerted by Ca is at least 1 order of magnitude higher than the ones exerted by Ni and Al. Thus in the following, the only impurity considered for solute drag will be Ca.

The Ca solute drag parameters α_{Ca} and β_{Ca} can be computed using equations 4.3 and 4.4 with a se-

gregation length (δ) of $5nm$ [Hiraga et al., 2004] and a calcium diffusion coefficient (D) taken as Arrhenius's laws where the reference value and activation energy are equal to $D_0 = 3.16.10^{-6} mm^2.s^{-1}$, $Q_D = 200kJ.mol^{-1}$ [Coogan et al., 2005] respectively. We obtain $\alpha_{Ca} = 3.10^7 J.S.mm^{-4}$ and $\beta_{Ca} = 9.6.10^5 s.mm^{-1}$ at 1573K and $\alpha_{Ca} = 3.10^{11} J.S.mm^{-4}$ and $\beta_{Ca} = 2.8.10^9 s.mm^{-1}$ at 1073K.

4.2.4 Laboratory and natural constraints on grain sizes in olivine-rich rocks

The main goal of this study is to show that laboratory experiments and natural observation on olivine GG can be reconciled by accounting for Ca solute drag. In the following section, we define a priori constraints on GG kinetics provided by natural and experimental data.

4.2.4.1 Laboratory constraints

The annealing experiments for ultrafine grained natural San Carlos olivine [Karato, 1989] seem appropriate to define the experimental reference, particularly the dry runs at 1573K. This sample has probably as much impurities as a natural mantle rock (because it was synthesized using crushed grains of natural olivine), so the solute drag model should fit these data. These experiments allow constraining grain growth kinetics for short times ($\leq 10h$) and small grain sizes ($2-25\mu m$).

4.2.4.2 Natural constraints

Natural constraints on GG kinetics have to be considered cautiously because of the large number of uncertainties in the determination of physical conditions of natural systems (initial size distribution, precise thermal history, pure static conditions, etc.). Contraints on thermal history, strain and grain size evolution of peridotite xenoliths can be found in the literature (e.g. [Lallemant et al., 1980; Liu et al., 2019]), but these rocks are a mixture of olivine, pyroxene and other secondary phases and their microstructural evolution may be controlled by their polymineralic nature [Furstoss et al., 2020a] in addition to the impurity effect. However, in natural polymineralic peridotites like harzburgites or lherzolites, the maximum grain size is dictated by the spacing between static, pinning phases like spinels, and is always larger than their actual GS [Herwegh et al., 2011]. An alternative could be to focus on dunites, a coarse-grained rock, which mineral assemblage is greater than 90% olivine with only minor amounts of secondary minerals. However, in such rocks, the initial crystal size distribution is clearly related to the mechanism of their formation, which usually involves extensive interaction with melts percolating the mantle and may be very different from the GS distribution used as initial conditions for our models [Berger and Vannier, 1984], [Kelemen, 1990]. Considering these two limitations, we chose to compare our models results with classical (i.e., polymineralic) peridotites, being aware that our model only captures a part of the processes that limit the maximum grain size of natural rocks.
Considering only rock samples with textures typical of thermal annealing and according to the terminology defined by [Harte, 1977] we selected samples which were described as "coarse", which is equivalent to "protogranular" [Mercier and Nicolas, 1975], and equant (or granular). Porphyroclastic, granuloblastic and tabular textures were not considered because they reflect significant rock deformation that was not subsequently fully annealed by grain growth, or grain growth in presence of melts or fluids. We briefly recall here the geological setting, age and temperature history of the selected samples.

The Udachnaya (Siberia) kimberlite xenoliths

The Udachnaya kimberlite pipe in Siberia is well known due to its diamond mine and because of the occurrence of megacrystalline olivine (≈ 10cm grain size) in harzburgitic and dunitic xenoliths [Pokhilenko et al., 2014]. The age of Udachnaya pipe has been determined between 345 and

385 Ma depending on the dating method [Dehvis et al., 1980; Ilupin et al., 1990]. Temperature estimates for the megacrystalline peridotite xenoliths range between 1173 and 1373K [Griffin et al., 1996; Pokhilenko et al., 1993] for a depth estimated around 150-200 km in the thick lithosphere of the Siberian Craton. While the temperature range and grain size of these peculiar rocks are well constrained, it is barely impossible to determine precisely how much time they have spent at these temperatures before being erupted in Late Devonian – Early Carboniferous times. Re/Os ages in diamond sulfides have provided an age for the formation of the cratonic lithosphere around 1.8 Ga [Ionov et al., 2015], so, if we assume that these rocks represent samples from the oldest part of the cratonic lithosphere, we can estimate the maximum residence time of these rocks at 1173-1373K at 1800-350 = 1450 Ma. A minimum residence time is difficult to estimate, since the cratonic mantle has been modified by metasomatism (interaction with percolating melts) after its stabilization [Ionov et al., 2015].

The Kaapvaal (South Africa) kimberlite xenoliths

The Archean lithosphere of the Kaapvaal craton in South Africa stabilized around 3 Ga ago according to Re-Os isotope studies [Pearson et al., 1995]. Mantle xenoliths have been sampled by magmatism in Late Jurassic to Cretaceous times, i.e. between 180 and 90 Ma [Griffin et al., 2014]. Most peridotite xenoliths consist of coarse (5-8 mm) to cm-size grained harzburgites indicating significant annealing posterior to an early stage of deformation [Baptiste and Tommasi, 2014]. PT estimates range along a low geothermal gradient with temperatures of 873 – 1273K at depths between 80 and 150 km [Baptiste and Tommasi, 2014; Chu and Korenaga, 2012; Saltzer et al., 2001]. In the Jagersfontein pipe, very coarse-grained peridotite xenoliths exhibit grain sizes from 5 to 20 mm with temperature estimates ranging from 973 – 1223K [Winterburn et al., 1990]. Olivine CaO content reaches up to 1200 ppm [Hervig et al., 1986]. For our model, we assume that a mean temperature of 1073K was reached rapidly after the stabilization of the cratonic lithosphere, and we consider that these rocks have spent 2 to 3 Ga at this temperature before being erupted.

The Kerguelen hotspot in the Indian Ocean

The Kerguelen archipelago is part of a Large Igneous Province, the Kerguelen Plateau, formed above the Kerguelen plume [Bascou et al., 2008; Grégoire et al., 1995; Mattielli et al., 1996]. Plume-related volcanism forming the Kerguelen Islands started around 45 Ma ago and lasted until 0.1 Ma ago ([Cottin et al., 2011] and references therein). Ultramafic xenoliths brought at the surface in the Kerguelen Islands by the plume-related volcanism are harzburgites and dunites typical of a depleted mantle which has undergone a large degree of partial melting ([Bascou et al., 2008] and references therein). Equilibrium PT conditions determined on xenoliths close to the crust-mantle boundary are around 1 GPa and 1173-1273K [Grégoire et al., 1995]. Some protogranular harzburgites have mean grain sizes of 2-10 mm while equigranular dunites have a mean grain size between 0.5 and 1 mm [Bascou et al., 2008]. Here again, it is difficult to estimate the annealing time of these xenoliths. Based on geochemical and petrological analyses the Kerguelen harzburgites were interpreted as residues from a partial melting episode linked with the Kerguelen plume, that were subsequently affected by melt percolation forming the dunites [Bascou et al., 2008; Mattielli et al., 1996]. Peridotite xenoliths have been sampled in lavas dated between 28 and 7 Ma ([Bascou et al., 2008] and references therein) so they might have spent up to 38 Ma at temperatures close to 1173-1273K.
The temperature, rock type and mean grain size for different contexts raise above are summarized within table 4.1.

The geological contexts presented above will be used in the following to test the performance of our mean-field solute drag model. In a first step, in order to calibrate the solute drag parameters

Region	Context	Temperature (K)	Rock type	Mean Grain size (mm)	Time (Ga)	References
Kaapvaal	Hot Spot	873 – 1273	Harzburgite	5 – 20	2 – 3	(a, b)
Siberia	Kimberlite	1173 – 1373	Harzburgite	50 – 100	0.1 – 1.5	(c, d, e)
Kerguelen	Hot Spot	1173 – 1273	Harzburgite	2 – 10	0.017 – 0.038	(f, g)
Kerguelen	Hot Spot	1173 – 1273	Dunite	0.5 – 1	0.017 – 0.038	(f, g)

TABLEAU 4.1 – Summary of constraints on temperature, grain size and geodynamic context for the four selected peridotite samples that were used to estimate our model performance. *a* [Baptiste and Tommasi, 2014] ; *b* [Winterburn et al., 1990] ; *c* [Pokhilenko et al., 2014] ; *d* [Goncharov et al., 2012] ; *e* [Yudin et al., 2014] ; *f* [Grégoire et al., 1995] ; *g* [Bascou et al., 2008].

on natural constraints for the full-field model, we will consider that the model should produce grain sizes ranging between 0.5 and 10mm for annealing times ranging between 0.1Ma and 1Ga. For the full field models being supposed to fit those natural constraints, we took a temperature of 1073K because this temperature corresponds to a typical upper mantle temperature. Moreover, it corresponds to the temperature at which diffusion becomes so slow that textural rebalancing under static conditions becomes negligible.

4.2.5 Results

In this section, we present the full field and mean field results concerning the long term annealing of olivine aggregates. The olivine grain boundary energy (γ), calcium concentration within grain matrix (c_0) are taken as $1 J.mm^{-1}$ [Cooper and Kohlstedt, 1986] and $100 ppm$ respectively while the grain boundary mobility (M) is taken as an Arrhenius's law where the reference value and activation energy are equal to $M_0 = 4.10^4 mm^4.J^{-1}.s^{-1}$, $Q_M = 185 kJ.mol^{-1}$ [Furstoss et al., 2020a] respectively.
To perform long term annealing full field simulations, passing from micrometer to millimeter scale grain sizes, we need to define a model chaining strategy. The full field simulations begin with approximately 2000 grains respecting an initial grain size distribution corresponding to the one used in laboratory experiments [Karato, 1989]. When the number of grains within the simulation domain is less than 200, the simulation is stopped and a new set of 2000 grains and a larger domain is generated for the next job following the final grain size distribution of the latest run. The error due to this chained calculation is minimized by sampling very precisely the final GSD and by imposing it as the new initial GSD using the Voronoï-Laguerre Dense Sphere Packing algorithm [Hitti et al., 2012].
In the following, we first propose an adjustment of the solute drag material parameters, based on full field simulations, which permits to reconcile laboratory and natural observations by producing the adequate GG kinetics. Then, the mean field model presented within section 4.2.2.2 is calibrated on full field results. Finally we show an application of this framework within the geological contexts presented in section 4.2.4.2.

4.2.5.1 Full field and mean field simulations : adjustment of solute drag parameters

We begin our full field simulations using the solute drag parameters α_{Ca} and β_{Ca} presented in section 4.2.3. However at 1573K the computed GG kinetics does not match the experimental results [Karato, 1989] (Fig.4.4). The GG curve quickly deviates from the laboratory data and thus we stopped this simulation at the second run.

We tested different values for the solute drag parameters and found that $\alpha = \alpha_{Ca}$ and $\beta = 100\beta_{Ca}$ produce results consistent with laboratory results at 1573K and have GG kinetics compa-

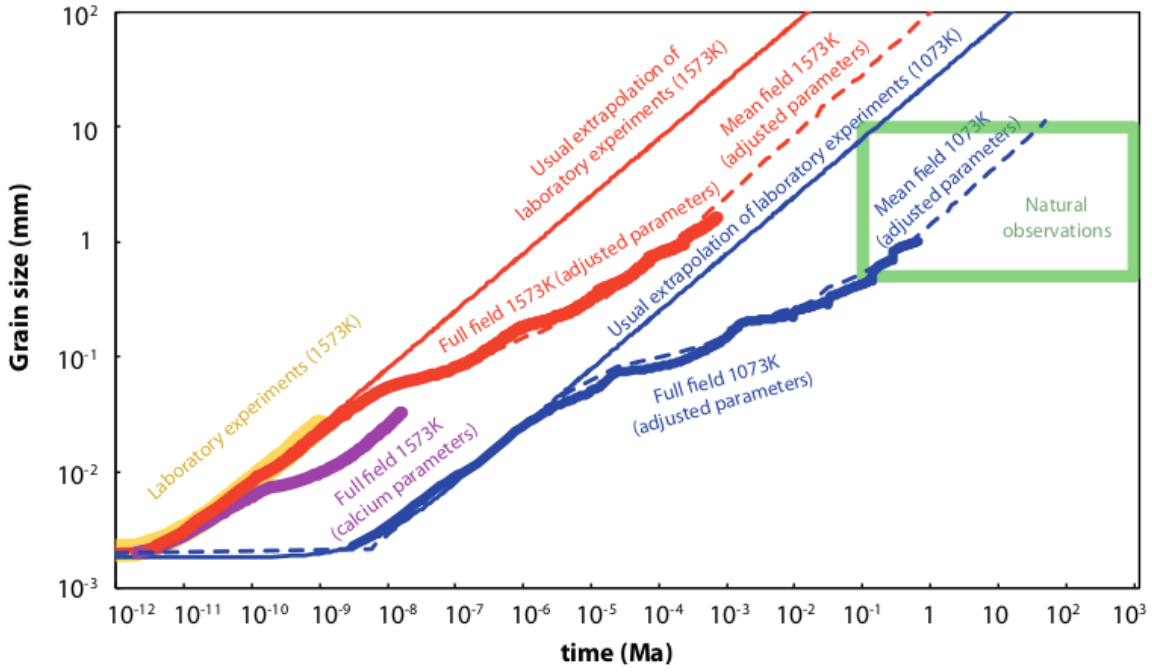


FIGURE 4.4 – Olivine aggregates GG kinetics at 1573K and 1073K. Thin solid lines represent the usual extrapolations (not accounting for solute drag) at 1573K (red) and 1073K (blue) of the laboratory results [Karato, 1989] (yellow). The bold purple line present the predictions from full field simulation using calcium solute drag parameters α_{Ca} and β_{Ca} calculated in section 4.2.3, while the bold red and blue solid lines represent full field simulations with $\alpha = \alpha_{Ca}$ and $\beta = 100\beta_{Ca}$ at 1573K and 1073K, respectively . The dashed lines represent the GG kinetics computed using the mean field model with adjusted parameters based on the full field simulations at 1573K (red) and 1073K (blue). The green rectangle represents olivine mean grain sizes and annealing times typical of lithospheric mantle rocks (see section 4.2.4.2).

tible with natural observations at 1073K (Fig.4.4). Using those values, the mean grain size evolution begins to deviate from the classical extrapolation of laboratory results (which does not account for solute drag) for a mean grain size near $30\mu m$ at 1573K and near $50\mu m$ at 1073K (Fig.4.4). The GG kinetics is slowed down by solute drag for mean grain sizes of up to ca. 1mm. For coarser mean grain sizes, GG is weakly influenced by solute drag (low velocity regime in Fig.4.1). The distribution of the mass term $\mathcal{M}$ (see section 4.2.2.1, Eq.4.11) within the simulated microstructure (Fig.C.1) clearly shows an increase of its value from the small grains to the large ones.

At first, for ultra-fine grained aggregates as the ones used in laboratory experiments, the mass term is nearly equal to 1 within all the microstructure (Fig.C.1). This first phase correspond to the high velocity regime in which the grain growth kinetics is nearly unimpacted by the solute drag (Fig.4.1). Afterwards, as the grain sizes increase the mass term becomes heterogeneously distributed between one and its maximum value depending on the local grain boundary velocities, which are controlled by the local curvature. Within this regime, the long straight grain boundary segments have an higher mass term and their velocities are near the velocity the most impacted by solute drag. Those segments are thus slowed down by solute drag. They also exert a pinning force on other grain boundaries, which enhances the deceleration of the grain growth kinetics. Finally, when grain sizes are sufficiently large, the grain boundary velocities become very small and one enters the low velocity regime in which the grain growth kinetics is again weakly impacted by the solute drag (Fig.4.1). The mass term almost reaches its maximum value in the whole microstruc-

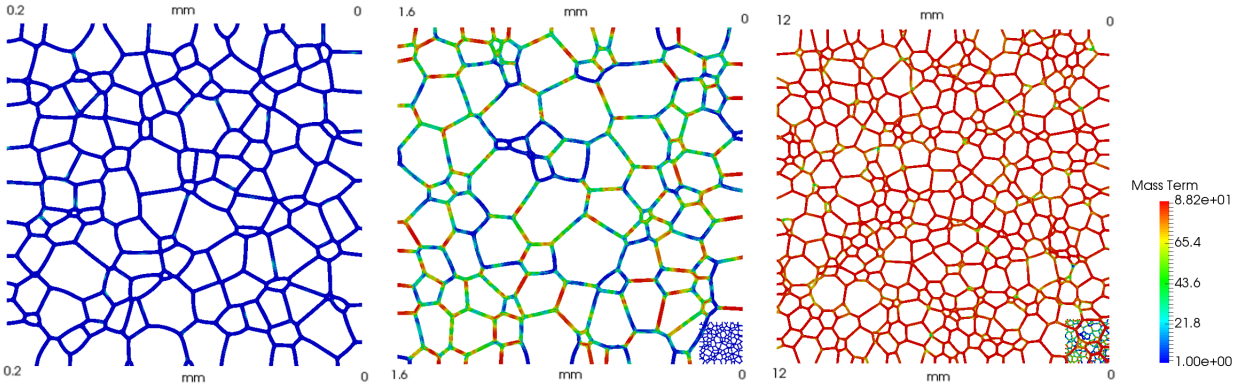


FIGURE 4.5 – Distribution of mass term $\mathscr{M}$ along grain boundaries for the first three runs at 1573K using $\alpha = 10\alpha_{Ca}$ and $\beta = 500\beta_{Ca}$. The first run (left), a $0.2mm$ aside square, is also represented in the right bottom corner of the second run (center), a $1.6mm$ aside square, which is also represented at the right bottom corner of the third run (right), a $12mm$ aside square.

ture (Fig.C.1).
The analysis of the GG kinetics for simulations with different initial mean grain sizes highlights a first phase of very slow or even null mean grain size evolution (Fig.4.6).

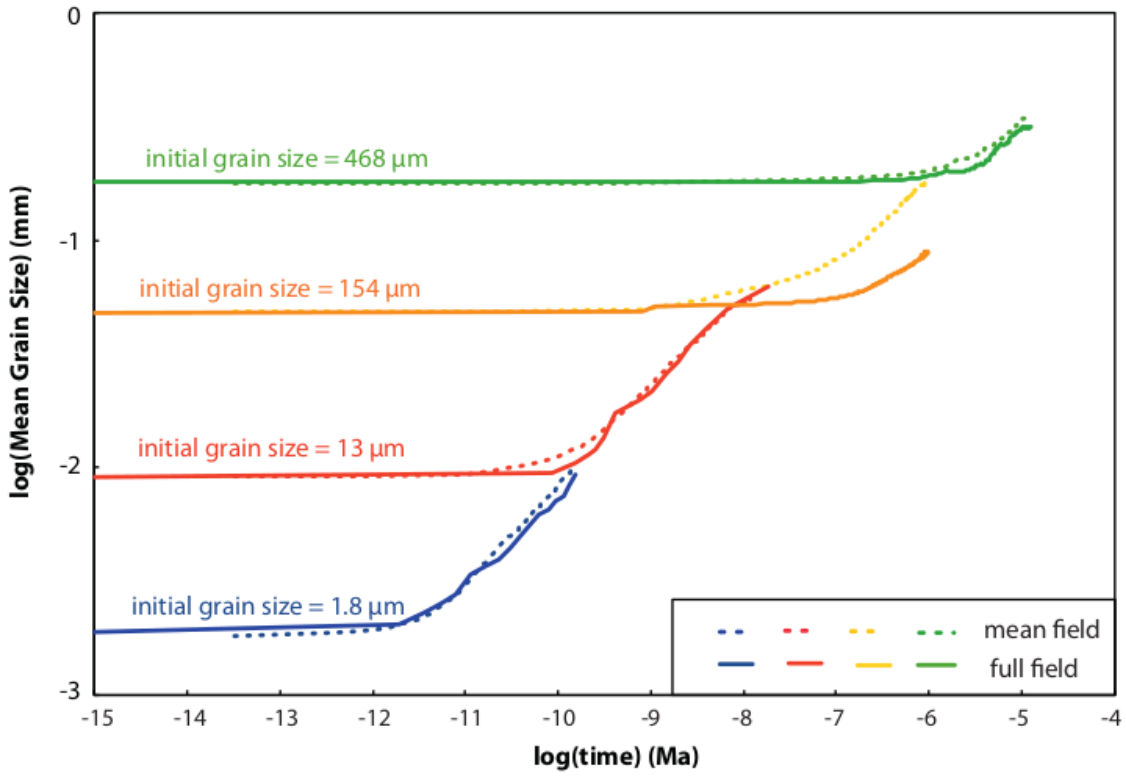
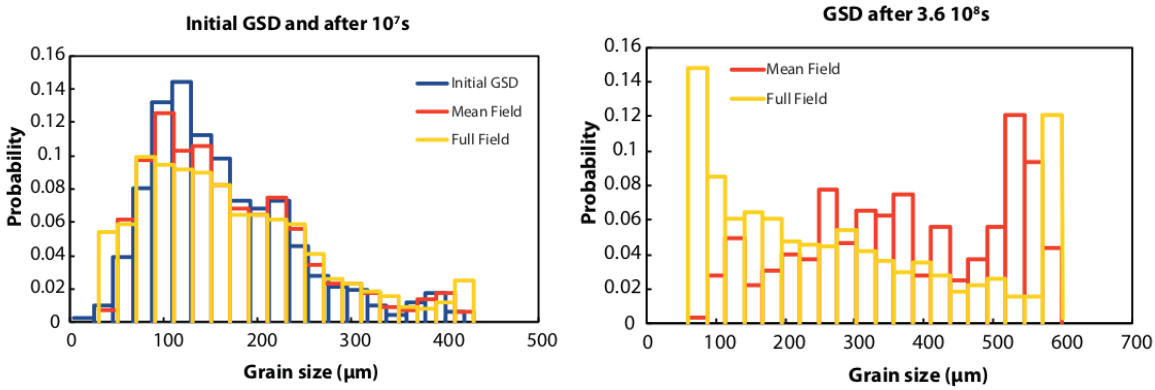


FIGURE 4.6 – Mean grain size evolution at 1573K for $\alpha = 10\alpha_{Ca}$ and $\beta = 500\beta_{Ca}$ for the first four runs (without applying the time offset), the full lines represent the full field model and the dashed lines represent the mean field computations.

The duration of this phase of slow GG is longer when the initial mean grain size is coarse (Fig.4.6). This initial slow GG kinetics can be explained by analyzing the GSD (Fig.4.7). In fact, even when the initial microstructure is composed of coarse grains, some grains have to shrink to let the other ones grow. This can be seen by comparing in Fig.4.7a the GSD of the initial microstructure and at the end of the initial slow GG phase for the experiment with the coarser initial mean grain size in Fig.4.6. This comparison highlights an enrichment in small grains (Fig.4.7a). Before disappearing, the GBM velocities of the shrinking grains will necessarily pass through a velocity regime highly impacted by the presence of impurities. This will affect the grain growth kinetics directly (by slowing down the shrinking) and indirectly by impeding the movements of the other grain boundaries through pinning mechanisms.



(a) (b)

FIGURE 4.7 – GSD (in number) for the fourth run presented in figure 4.6 (at 1573K for $\alpha = 10\alpha_{Ca}$ and $\beta = 500\beta_{Ca}$), 4.7a : initial GSD (blue), mean field (orange) and full field (yellow) modeled GSD after $10^7\,s$, 4.7b : mean field (orange) and full field (yellow) modeled GSD after $3.6.10^8\,s$.

From these observations, we infer that initial grain size does not affect GG kinetics apart from delaying the start of the rapid GG stage.
After calibration, the mean field model (Eq.4.16) reproduces well the full field modeled GG kinetics for both temperatures (Figs.4.4 and 4.6). The best fitting mean field parameters C_α, C_β and n are equal to 0.7, 0.25 and 0.15 respectively. The GSD predicted by the mean field approach is consistent with the full field modeled ones (Fig.4.7) even if some differences can be seen after some annealing time (Fig.4.7b). This mean field approach allows to be predictive on olivine aggregates GG kinetics for a much lower computational cost, which permits to test our formalism on different geological contexts.

4.2.5.2 Implication for the microstructural evolutions in ultramafic rocks

In order to estimate how well our mean field model predicts the average grain size of natural samples with reasonable c_0 (Ca concentration within bulk) values, we test it against different contexts in terms of annealing temperature and measured grain sizes.

4.2.5.2.a Mean field GG models

For the mean field GG model, the temperature is kept constant and grain size grows indefinitely; we compute the GG curve for residence times up to 2 Ga. GG curves are computed from four temperatures of 1073, 1173, 1273 and 1373K and c_0 values of 600, 800, 1000 and 1200 ppm.

All models were run initially with an initial grain size of 20µm and a standard deviation of 2µm; then, isothermal models were run again with an initial grain size of 0.5mm and a standard deviation of 50µm and an intial grain size of 2mm and a standard deviation of 200µm. In fact, the initial grain size has no effect of the grain growth curve or final grain size, apart from shifting the beginning of the beginning of the positive slope on the grain growth curve (Fig.4.8).

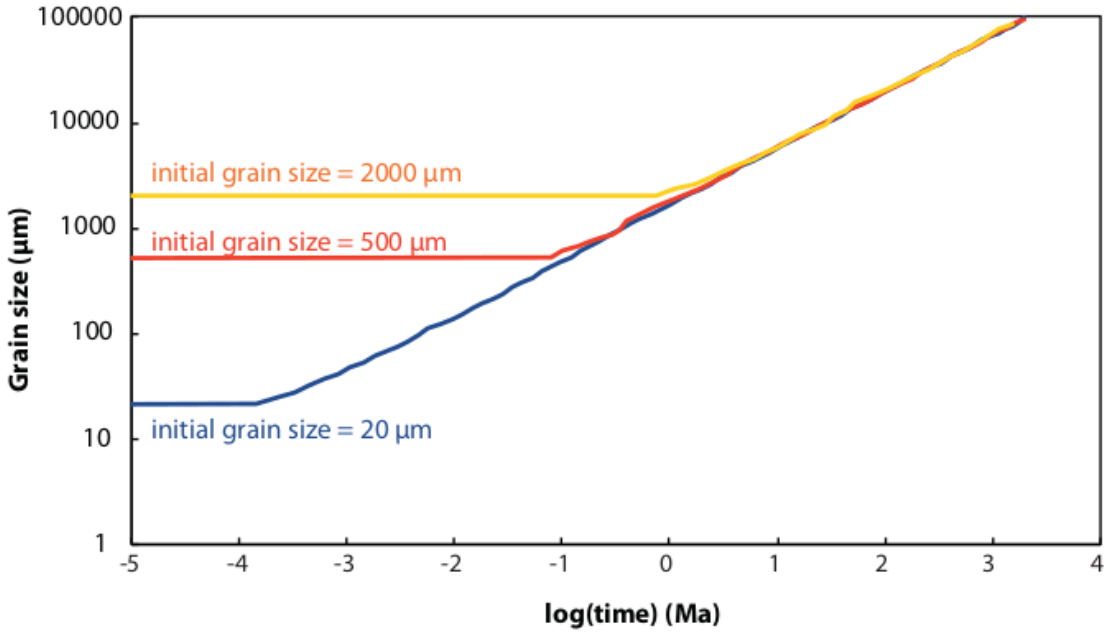


FIGURE 4.8 – Grain size evolution for isothermal model with T = 1173K, c_0 = 800ppm and three initial grain sizes of 20, 500 and 2000µm.

4.2.5.2.b Results

The c_0 parameter, in the range of tested values, has only a moderate effect of the final or intermediate grain sizes (table 4.2 and figure 4.9). However, these grain sizes are considerably smaller than the ones predicted without impurities. Indeed, for isothermal models, grain sizes reach 2 to 8 meters after 1 Ga at temperatures between 1173 and 1373K, respectively, while they do not exceed 47 cm for the scenario with the largest temperature (1373K) and the lowest impurity concentration (600 ppm).

Mean field models predict a GG rate which decreases exponentially with time (Fig.4.9). Extremely large grain sizes of several cm can be reached for conditions (temperature and annealing times) consistent with those inferred for the Udachnaya kimberlite xenoliths (i.e., temperatures of 1173 to 1273K and residence times between 100 and 1450 Ma). The Kaapvaal peridotites, which have smaller grain sizes and potentially larger residence times than the Udachnaya ones, range slightly below the 1073K temperature curve.

For annealing times of 1 to 40 Ma, predicted mean grain sizes range between 2 mm (for 1173K and c_0 = 1200 ppm) and 4 cm (for 1273K and c_0 = 600 ppm). These predictions match the grain sizes of the harzburgites from the Kerguelen Islands. The grain size measured in Kerguelen dunites is smaller than these predictions; it suggests either rapid exhumation (hence very limited grain growth) or a lower residence temperature (≈ 1073K).

Temperature (K)	C0 (ppm)	Grain Size (mm)	
		10Ma	1000Ma
1073	600	2.1	24
1073	800	1.7	21
1073	1000	1.6	18
1073	1200	1.3	17
1173	600	7	74
1173	800	5.9	68
1173	1000	5.1	58
1173	1200	4.9	55
1273	600	17	209
1273	800	14	180
1273	1000	13	161
1273	1200	12	45
1373	600	41	470
1373	800	36	392
1373	1000	31	360
1373	1200	29	343

TABLEAU 4.2 – Temperature and geochemical (c_0) conditions for mean field models and their results in terms of grain sizes at two different steps (10 and 1000 Ma).

4.2.6 Discussion

The GG kinetics simulated using β_{Ca} cannot adequately reproduce both laboratory experiments and natural observations on grain size evolution of olivine aggregates (Fig.4.4). However we find that a value of β two orders of magnitude larger than β_{Ca} allows our models to be consistent with those two constraints. This difference could arise from two main reasons :

First, the two functions $D(x)$ and $E(x)$ needed for the calculation of solute drag parameters α and β (see section 4.2.2) are poorly known even for metallic materials in which the interaction between an impurity ion and a grain boundary is mostly elastic. For ceramics-like materials such as olivine, this interaction should also account for electrostatic interaction between the solute ion and the grain boundary and the interaction between solute-vacancy dipoles and electrical field around grain boundaries [Yan et al., 1983]. The quantification of all of those interactions should be done by atomistic calculations using systematic approaches for describing grain boundaries and their interactions with solute [Hirel et al., 2019].

Secondly, it is well accepted that the impurity concentration at grain boundary evolves with the grain size, increasing when grain size increases [Marquardt and Faul, 2018] which could also be expressed by a grain size dependent partition coefficient [Hiraga et al., 2004]. Even if the solute drag pressure (Eq.4.2) depends on grain matrix impurity concentration, one can find expressions for α and β as functions of the partition coefficient [Cahn, 1962]. The expected effect of indirectly

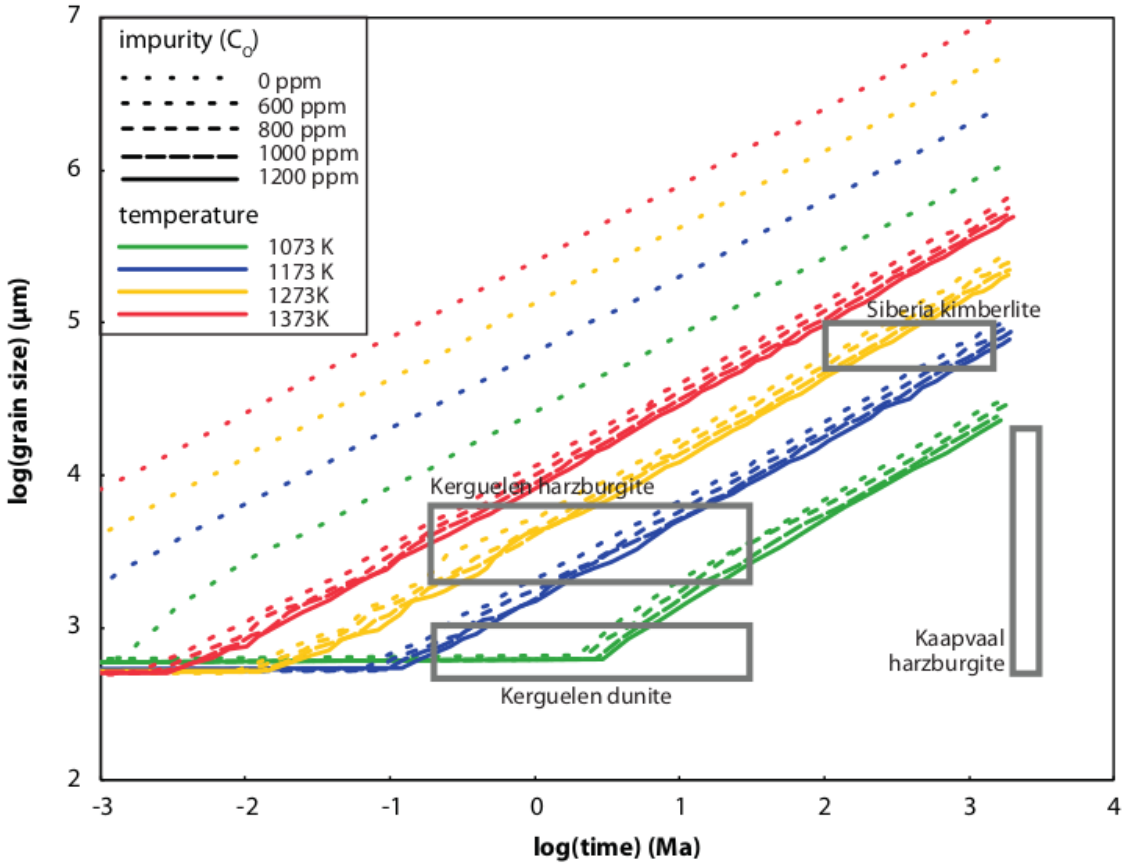


FIGURE 4.9 – Grain size evolution for isothermal models with 4 different temperatures and 4 different impurity (c_0) concentrations. Solid squares indicate the approximate location of Siberia and Kerguelen and Kaapvaal xenoliths on this curve according to the literature (see references in Tab.4.1).

introducing this grain boundary impurity concentration may be similar to an increase of β, as we did here. In fact, increasing the β will increase the space of the high velocity regime for which the grain boundary migration will be poorly affected by impurities. An increase of the impurity concentration with grain size will also result in a lower impact of the solute drag for small grains.

Our full field and mean field simulations show an initial phase of very slow grain size evolution (Figs.4.6 and 4.8) due to the direct slowed down of the grain shrinkage and growth by solute drag, and indirectly by the impediment of GBM by the impurity slowed grain boundaries. This quasi-static phase, which is longer for coarser initial grain sizes, implies a very weak dependency of the grain growth kinetics on initial grain size. This small dependency frees us from the need of precise constrains on the initial grain size, which is very difficult to know in geological contexts. Taking advantage of this, we can apply our solute drag model for different stable geological contexts. For the majority of the geological contexts presented here, our formalism shows consistent grain size / time predictions (Fig.4.9). It is difficult to evaluate precisely the performance of our models with respect to the evolution of natural samples, given the lack of data concerning their temperature and grain size evolution. However, impurity drag due to Ca concentration in olivine, in the range of commonly observed value, explains a grain size reduction of several orders of magnitude at geological timescales, compared to models without impurities.

4.2.7 Conclusions

In this work we have demonstrated that accounting for the presence of impurities within olivine rich-rocks permits to explain GG kinetics of both experimentally and naturally annealed olivine aggregates. The solute drag parameters needed for this approach are however quite different from the ones expected for the calcium, which is the mantle rock impurity expected to be the most impacting on olivine grain boundary migration. Atomistic calculations or a strong experimental framework could be needed to explain this gap.
We have developed a new mean field model accounting for the presence of those impurities and showed this approach could be used to predict grain size of olivine-rich rocks in geological contexts such as oceanic cooling or isothermal evolution. As this approach successfully reproduced natural grain size in annealed peridotite, healing kinetics may be implemented in large scale numerical geodynamic models based on this framework. In order to have a useful grain size evolution law for geodynamic model, a model accounting for the competition between grain size reduction due to deformation and growth should be developed.
In order to be consistent with the real multiphase nature of natural rocks, the influence of second phases, such as pyroxenes and alumina phases, on GG kinetics should also be considered. Such a framework may open the door to a paleo-chronometer based on grain size evolution within geological contexts in which deformation has stopped and GG predominates.

4.2.8 Acknowledgments

This work was supported by CNRS INSU 2018-programme TelluS-SYSTER.
The support of the French Agence Nationale de la Recherche (ANR), ArcelorMittal, FRAMATOME, ASCOMETAL, AUBERT&DUVAL, CEA, SAFRAN through the DIGIMU Industrial Chair and consortium are gratefully acknowledged.

4.2.9 Data availability

The data for supporting all figures of the paper are avalaible upon request to the authors as well as the mean field code used in this work.

4.3 Impurities slow down the growth rate of mantle crystals

Cette section représente un travail en cours ayant vocation à être soumis dans une revue scientifique.

abstract

Olivine-rich rocks which compose the Earth upper mantle play at first order on the lithosphere rheology and therefore influence the tectonic plates dynamic. However, while the grain size of those rocks has a large impact on the mechanical behavior of the lithosphere, the olivine grain growth kinetics at geologically relevant time and space scale is still incompletely understood. The main limitations of the current grain coarsening models come from their extrapolation of annealing experiments they are adjusted on, designed with ultrafine grained materials. Existing grain growth models hence unable to predict olivine grain size within natural contexts without introducing enhanced and questionable grain boundary impediment by secondary phases. Here we show that accounting for solute drag effect permits to estimate olivine grain sizes within the range of the naturally observed values within oceanic lithosphere cooling contexts, without fail to reproduce experimental data. A parameterization of olivine grain size,

as a function of cooling depth and impurity concentration, is thereby calibrated on this grain growth model and could indicate a tectonic quiescence zone.

Understandings about olivine-rich rocks grain growth (GG) kinetics have suffered, for a while, of inconsistencies between experimental and natural constraints. In fact, the high grain coarsening rates of olivine reported by experimental annealing data [Hiraga et al., 2010; Karato, 1989; Tasaka and Hiraga, 2013] were extrapolated to geological contexts using pure capillarity driven GG model [Chu and Korenaga, 2012] in which the only way to reduce the rate of growth is to introduce secondary phases impeding the olivine grain boundary migration (GBM) through pinning mechanisms [Bercovici and Ricard, 2012; Smith, 1948]. The olivine GBM kinetics used in those models is however so fast, compared to phase boundary migration rates, that the microstructure is considered in a pinned state where the only way out for olivine grains to grow is by coarsen secondary phase grains [Tasaka et al., 2014, 2013]. The majority of naturally annealed peridotite does not yet exhibit pinned state microstructures [Liu et al., 2019] and the olivine grains seem could undergo GG without be impeded by secondary phases. That inconsistency between the observed natural objects and model hypothesis hides a misunderstanding of the olivine GBM which leads for model predictions to fail for grain size estimations of olivine-rich rocks such as dunites or patches of peridotites very abundant in olivine. This discrepancy can be highlighted using well studied annealed olivine rich-rocks within oceanic lithosphere cooling contexts such as the Samail Ophiolite nappe in Oman and the ODP 1274A borehole in the Atlantic Ocean.

The Samail ophiolite in Oman is the world's largest obducted oceanic lithosphere [Searle and Cox, 1999]. It is made up of a thick pile of oceanic mantle overlain by a mafic rocks representing the oceanic crust [Nicolas et al., 1988] and was emplaced onto the Arabian continental lithosphere by a south-verging thrust in Maastrichtian times $\approx 85\text{M}a$ ago [Coleman, 1981; Searle and Cox, 1999]. The age of accretion is well constrained to $95 \pm 1\text{M}a$ thanks to the dating of oceanic plagiogranites and overlying deep marine sediments [Tilton et al., 1981; Tippit et al., 1981]. Fossil "diapir-like" structures in the mantle indicate that the ophiolite is an obducted spreading ridge [Ceuleneer et al., 1988; Nicolas et al., 1988]. Among the various types of mantle peridotites observed in the ophiolitic sequence, dunites correspond to the Mantle Transition Zone [Boudier and Nicolas, 1995] ; hence, they were emplaced at relatively shallow depths (a few km) beneath the spreading ridge axis. A part of these dunite samples are devoid of deformation or recrystallization and are coarse-grained, with grain sizes between 3 and 5 mm [Abily and Ceuleneer, 2013; Boudier and Nicolas, 1995]. Some of these dunites are interpreted as resulting from high temperature melt-mantle interactions [Rollinson, 2019], but in the upper part of the MTZ they are described as crystallized cumulates from the magma chamber [Abily and Ceuleneer, 2013; Rospabé et al., 2018]. The thermal history of Oman dunites in terms of GG processes can be modelled by the cooling of an oceanic lithosphere, since at the time of their thrusting over the Arabian plate $\approx 10\text{M}a$ after accretion they were already too cold for GG to continue.

The Ocean Drilling Program Leg 209 Hole 1274A in the Atlantic Ocean has permitted to sample unserpentinized oceanic mantle along a $\approx 155m$ deep hole with a 22% recovery [Achenbach et al., 2011]. It has been drilled on one flank of the oceanic rift axis and corresponds to an accretion age of 700 ka [Bach et al., 2011]. Some peridotites display textures typical of deformation and recrystallization due to mantle flow [Achenbach et al., 2011], while other samples (harzburgites and dunites) are described as characteristic of low-deformation and high temperature conditions and coarse grain sizes [Suhr, 1993; Suhr et al., 2008]. Based on textures described in the literature and associated thin section pictures, we can ascribe a grain size in peridotites (harzburgites and dunites) of the ODP 1274A site a grain size of 2-3 mm and a thermal history typical of a cooling oceanic lithosphere, at shallow depths (a few km) below the surface.

The temperature evolution within the oceanic lithosphere cooling can be computed using an half-space cooling model in which temperature varies with depth and age according to [Parsons and

Sclater, 1977] :

$$T(z,t) = T_0 + (T_m - T_0) erf(\frac{z}{2\sqrt{(\kappa t)}}), \tag{4.18}$$

where T_0 and T_m are surface and asthenosphere temperatures, respectively (273K and 1473K) and κ is the thermal diffusivity of the mantle lithosphere ($1.10^{-6} m^2.s^{-1}$). Using this temperature evolution and pure olivine GG models from the state of the art [Bercovici and Ricard, 2012; Furstoss et al., 2018; Karato, 1989] should lead to estimate grain sizes within the range of the observed values. However, even using fine initial grain sizes ($1\mu m$), all models predict grain sizes two order of magnitude higher than the measured ones (Fig.4.10).

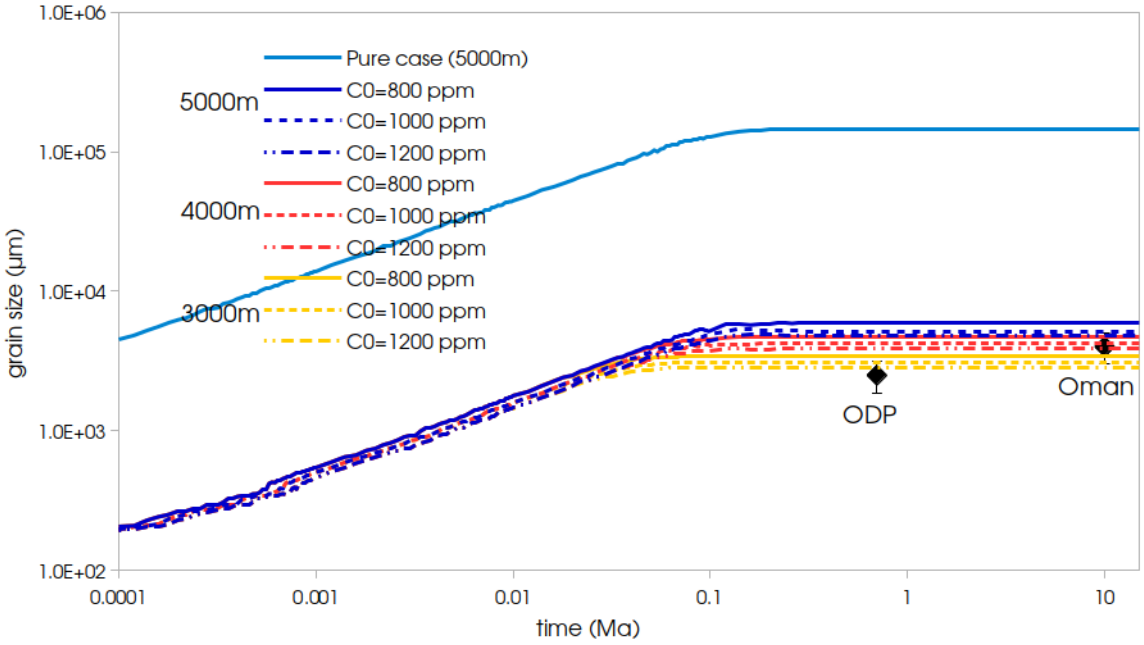


FIGURE 4.10 – Grain size evolution for an oceanic cooling model with 3 different cooling depths and 3 different impurity (c_0) concentrations. Solid squares indicate the approximate location of Oman and ODP peridotites on this curve according to the literature (see references in text).

The main shortcoming of the above cited models lies with the limitations of the laboratory experiments they are calibrated on. Olivine aggregates annealing experiments use indeed micrometric grain size [Hiraga et al., 2010; Karato, 1989; Tasaka and Hiraga, 2013] in the attempt to detect a grain size evolution at the laboratory timescale. Furthermore and for the same reason, the experimental annealing temperatures are generally taken higher than the ones of the upper lithospheric mantle. Classical extrapolations of GG kinetics from laboratory to nature therefore implicitly consider that first order importance physical processes taking place within ultrafine grained olivine rocks are the same than in coarse grain peridotites. Nonetheless, recent work [Furstoss et al., 2020b] proposes to introduce a dependency of the grain coarsening rate on itself through the solute drag phenomenon [Cahn, 1962]. The developed model allows for predicting the evolution of a grain list by computing the variation of each grain radius R_i such as :

$$\dot{R_i} = P^{capi}(R_i) - P^d(\dot{R_i}), \tag{4.19}$$

where P^{capi} is the capillarity pressure and P^d is the drag pressure exerted by impurities. The latter is computed using the solute drag parameters determined by [Furstoss et al., 2020b] allowing

for a consistency between the olivine GG laboratory constraints and natural observations within different geological contexts excepted oceanic lithospheric cooling. The study also demonstrates a very weak influence of the initial grain size on the GG kinetics of the rock [Furstoss et al., 2020b] which permits, in the oceanic lithosphere cooling contexts considered here, to open up from the uncertainties on the crystallized initial grain size due to the melt-rock interaction.
For this model we tested three cooling depths of 3000, 4000 and 5000m, corresponding to the base of a moderately thick oceanic crust, and three impurity concentrations (c_0) of 800, 1000 and 1200 ppm. Besides the c_0 value, the thermal history has a strong control on the grain size evolution. Cooling models applied to peridotites from the oceanic mantle lithosphere predict maximal average grain sizes between 2 and 6 mm, depending on the cooling depth and on the c_0 value (larger grain sizes are obtained for larger depths since the cooling rate is lower). These grain sizes are consistent with observations for the Oman and ODP 1274A oceanic mantle rocks. The Oman ophiolite aligns on a cooling depth of $\approx 4000m$, which is consistent with uppermost mantle conditions inferred for this dunite level [Boudier and Nicolas, 1995]. It therefore corresponds to a steady-state grain size (Fig.4.10) which is mainly due to cooling. The grain size and assumed age of the ODP1274 peridotites are also quite consistent with this model, although they plot on a curve corresponding to a shallower cooling depth ($\leq 3000m$, Fig.4.10), and/or a larger impurity concentration.

In the half space cooling model presented above, the final grain size is related to the GG history which is a function to two independent variables : the cooling depth - that controls the time spent at high temperature when GG is particularly fast - and the concentration of impurities. Using the output data from 5000 random mean field calculations, we tested the relative contribution of these independent parameters on the final grain size. To do this, we used a least squares minimization for functions on the two independent parameters. The resulting function clearly explains a large part of the data, with a coefficient of determination (R^2) of 0.9983 for an expression on the form :

$$log(\bar{R}_{Final}) = 1.27 + 2.14z^{0.1} - 1.11c_0^{0.1}, \tag{4.20}$$

where $\bar{R}_{Final}$ is the final grain size (in mm), z is the cooling depth (in m) and c_0 is the concentration in impurity (in ppm). These results evidence that the fit proposed in equation 4.20 provides a simple first order approximation to predict the mean grain size evolution of pure olivine rocks following the thermal history and the chemical composition. A 3D plot of this parameterization is presented in figure 4.11.

Here we have shown that classical pure capillarity driven GG models fail to capture GG kinetics of olivine-rich rocks within geologically relevant contexts because they extrapolate experimental ultrafine grain coarsening rate to large grain within naturally annealed rocks. Taking into account a grain coarsening rate dependency on the GG kinetics through the solute drag effect allows for predicting both experimental and natural data. As peridotite grain size and its evolution is of first influence within several geodynamic processes, a GG model describing correctly the olivine grain coarsening kinetics is of primary importance.
Using an half space cooling model and the GG model accounting for solute drag, we fall within the range of the typical grain sizes encountered in the Samail ophiolite and the ODP 1274A site. We fit an analytical expression (Eq.4.20) relating the final grain size with the cooling depth and impurity concentration (Fig.4.11). The grain size estimation from this analytical expression represent an upper bound, in fact, it does not consider nor deformation and subsequent grain size reduction due to dynamic recrystallization, neither influence of second phases which can impede GBM and slow down GG. Thus, a rock microstructure following this predicted grain size involves that the microstructure has evolved in stable (without or with very few deformation) region.
To summarized, we claim that the mantle rocks GG kinetics cannot be only extrapolated from the laboratory scale using an only capillarity driven GG model but also by introducing solute drag effect.

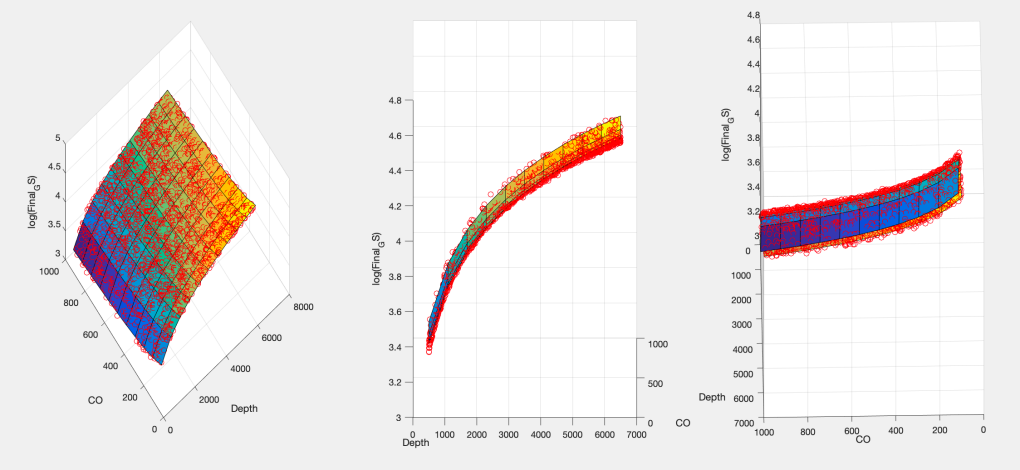


FIGURE 4.11 – Mean grain size as a function of cooling depth and concentration in impurity from a set of 5000 randomly tested c_0 and z values. The surface shows the proposed parameterization and the red circle show the result from the random modeling used for the least square calculation.

4.4 Discussion et limites

En utilisant le nouveau formalisme prenant en compte l'ancrage par les impuretés, nous avons essayé de reproduire les simulations de la section 3.3.1 dans le but de proposer un temps cohérent pour passer d'une microstructure à l'autre si la roche n'était pas déformée. Pour cela, il faut utiliser à la fois les développements du chapitre 3, permettant de prendre en compte les phases secondaires, et les développements de ce chapitre pour tenir compte de la présence des impuretés. Les solveurs EF utilisés pour ces deux chapitres sont différents et il faut donc utiliser un autre solveur permettant de prendre en compte, dans une équation de diffusion (telle que présentée dans la section 1.4.2.1.a), à la fois un terme massique (pour les impuretés) et un terme convectif (pour les phases secondaires). Ce solveur existe et les simulations ont été réalisées cependant, lors de la simulation de la croissance de la microstructure la plus recuite (16CA07 sur la figure 3.12), de nombreux grains très fins apparaissent sur les bords du domaine et en particulier sur les limites des particules statiques (Fig.4.12).

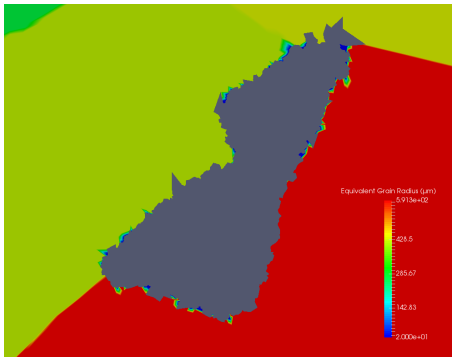


FIGURE 4.12 – Illustration du problème rencontré aux bords du domaine de calcul pour une résolution EF prenant en compte les impuretés et les phases secondaires, des petits grains se forment spontanément sur les bords du domaine de calcul au cours de la simulation.

L'apparition de ces petits grains n'a rien de physique et elle fausse le calcul de la taille moyenne de grains et peut également induire des erreurs dans la résolution EF du transport des fonctions LS. Ce problème reste à ce jour non résolu et il faudrait pouvoir y pallier pour être en mesure d'obtenir des cinétiques de croissance simulées réellement représentatives des équations résolues.
Une piste pour résoudre ce problème serait de définir une taille de grains critique en dessous de laquelle un grain ne peut pas exister et est assimilé au grain avoisinant.

4.5 Références

Abily, B. and Ceuleneer, G. (2013). The dunitic mantle-crust transition zone in the oman ophiolite : Residue of melt-rock interaction, cumulates from high-mgo melts, or both? *Geology*, 41(1) :67–70. 136

Achenbach, K. L., Cheadle, M. J., Faul, U., Kelemen, P., and Swapp, S. (2011). Lattice-preferred orientation and microstructure of peridotites from odp hole 1274a (15 39 n), mid-atlantic ridge : Testing models of mantle upwelling and tectonic exhumation. *Earth and Planetary Science Letters*, 301(1-2) :199–212. 136

Bach, W., Rosner, M., Jöns, N., Rausch, S., Robinson, L. F., Paulick, H., and Erzinger, J. (2011). Carbonate veins trace seawater circulation during exhumation and uplift of mantle rock : results from odp leg 209. *Earth and Planetary Science Letters*, 311(3-4) :242–252. 136

Baptiste, V. and Tommasi, A. (2014). Petrophysical constraints on the seismic properties of the kaapvaal craton mantle root. *Solid Earth*, 5(1) :45. 127, 128

Bascou, J., Delpech, G., Vauchez, A., Moine, B., Cottin, J.-Y., and Barruol, G. (2008). An integrated study of microstructural, geochemical, and seismic properties of the lithospheric mantle above the kerguelen plume (indian ocean). *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 9(4). 127, 128

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2012). Mechanisms for the generation of plate tectonics by two-phase grain-damage and pinning. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 202 :27–55. 119, 136, 137

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2014). Plate tectonics, damage and inheritance. *Nature*, 508(7497) :513. 118

Berger, E. and Vannier, M. (1984). Les dunites en enclaves dans les basaltes alcalins des îles océaniques : approche pétrologique. *Bulletin de minéralogie*, 107(5) :649–663. 126

Bernacki, M., Logé, R. E., and Coupez, T. (2011). Level set framework for the finite-element modelling of recrystallization and grain growth in polycrystalline materials. *Scripta Materialia*, 64(6) :525–528. 119

Bernacki, M., Resk, H., Coupez, T., and Logé, R. E. (2009). Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(6) :064006. 121

Boudier, F. and Nicolas, A. (1995). Nature of the moho transition zone in the oman ophiolite. *Journal of Petrology*, 36(3) :777–796. 136, 138

Braun, J., Chéry, J., Poliakov, A., Mainprice, D., Vauchez, A., Tomassi, A., and Daignières, M. (1999). A simple parameterization of strain localization in the ductile regime due to grain size reduction : A case study for olivine. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 104(B11) :25167–25181. 118

Cahn, J. W. (1962). The impurity-drag effect in grain boundary motion. *Acta metallurgica*, 10(9) :789–798. 120, 133, 137

Ceuleneer, G., Nicolas, A., and Boudier, F. (1988). Mantle flow patterns at an oceanic spreading centre : the oman peridotites record. *Tectonophysics*, 151(1-4) :1–26. 136

Chu, X. and Korenaga, J. (2012). Olivine rheology, shear stress, and grain growth in the lithospheric mantle : geological constraints from the kaapvaal craton. *Earth and Planetary Science Letters*, 333 :52–62. 118, 119, 127, 136

Coleman, R. G. (1981). Tectonic setting for ophiolite obduction in oman. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 86(B4) :2497–2508. 136

Coogan, L., Hain, A., Stahl, S., and Chakraborty, S. (2005). Experimental determination of the diffusion coefficient for calcium in olivine between 900 c and 1500 c. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 69(14) :3683–3694. 125, 126

Cooper, R. and Kohlstedt, D. (1986). Rheology and structure of olivine-basalt partial melts. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 91(B9) :9315–9323. 128

Cottin, J.-Y., MiChon, G., and DelpeCh, G. (2011). The kerguelen volcanic plateau : the second largest oceanic igneous province (lip) on earth and a witness of the indian ocean opening. *The Kerguelen Plateau : Marine Ecosystems and Fisheries*, 2011 :29–42. 127

Cottrell, A. H. and Bilby, B. (1949). Dislocation theory of yielding and strain ageing of iron. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 62(1) :49. 119

Cruz-Fabiano, A. L., Logé, R., and Bernacki, M. (2014). Assessment of simplified 2d grain growth models from numerical experiments based on a level set framework. *Computational Materials Science*, 92 :305–312. 121, 122, 124

De Hoog, J. C., Gall, L., and Cornell, D. H. (2010). Trace-element geochemistry of mantle olivine and application to mantle petrogenesis and geothermobarometry. *Chemical Geology*, 270(1-4) :196–215. 124, 125

Dehvis, G., Sobolev, N., and Khar'kiv, A. (1980). New data on the age of yakutian kimberlites obtained by uranium-lead study of zircons. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 254(1) :175–179. 127

Florez, S., Shakoor, M., Toulorge, T., and Bernacki, M. (2020). A new finite element strategy to simulate microstructural evolutions. *Computational Materials Science*, 172 :109335. 122

Furstoss, J., Bernacki, M., Ganino, C., Petit, C., and Pino-Muñoz, D. (2018). 2d and 3d simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 283 :98–109. 118, 119, 121, 137

Furstoss, J., Bernacki, M., Petit, C., Fausty, J., Pino-Muñoz, D., and Ganino, C. (2020a). Full field and mean field modeling of grain growth in a multiphase material under dry conditions : application to peridotites. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, page e53942. 119, 121, 126, 128

Furstoss, J., Petit, C., Tommasi, A., Ganino, C., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2020b). On the role of solute drag in reconciling laboratory and natural constraints on olivine grain growth kinetics. *arXiv preprint arXiv :2007.04606*. 118, 137, 138

Goncharov, A., Ionov, D., Doucet, L. S., and Pokhilenko, L. (2012). Thermal state, oxygen fugacity and c o h fluid speciation in cratonic lithospheric mantle : New data on peridotite xenoliths from the udachnaya kimberlite, siberia. *Earth and Planetary Science Letters*, 357 :99–110. 128

Grégoire, M., Cottin, J.-Y., Mattielli, N., Nicollet, C., Weis, D., and Giret, A. (1995). The kerguelen archipelago : an hypothetic continental mafic protolith. *Terra Antarctica*, 2(1) :1ą6. 127, 128

Griffin, W., Batumike, J., Greau, Y., Pearson, N., Shee, S., and O'Reilly, S. Y. (2014). Emplacement ages and sources of kimberlites and related rocks in southern africa : U–pb ages and sr–nd isotopes of groundmass perovskite. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 168(1) :1032. 127

Griffin, W., Kaminsky, F., Ryan, C., O'Reilly, S., Win, T., and Ilupin, I. (1996). Thermal state and composition of the lithospheric mantle beneath the daldyn kimberlite field, yakutia. *Tectonophysics*, 262(1-4) :19–33. 127

Guillope, M. and Poirier, J. (1979). Dynamic recrystallization during creep of single-crystalline halite : An experimental study. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 84(B10) :5557–5567. 119

Harte, B. (1977). Rock nomenclature with particular relation to deformation and recrystallisation textures in olivine-bearing xenoliths. *The Journal of Geology*, 85(3) :279–288. 126

Hervig, R., Smith, J., and Dawson, J. (1986). Lherzolite xenoliths in kimberlites and basalts : petrogenetic and crystallochemical significance of some minor and trace elements in olivine, pyroxenes, garnet and spinel. *Earth and Environmental Science Transactions of the Royal Society of Edinburgh*, 77(3) :181–201. 127

Herwegh, M., Linckens, J., Ebert, A., Berger, A., and Brodhag, S. (2011). The role of second phases for controlling microstructural evolution in polymineralic rocks : A review. *Journal of Structural Geology*, 33(12) :1728–1750. 126

Hillert, M. (1965). On the theory of normal and abnormal grain growth. *Acta metallurgica*, 13(3) :227–238. 123

Hiraga, T., Anderson, I. M., and Kohlstedt, D. L. (2003). Chemistry of grain boundaries in mantle rocks. *American Mineralogist*, 88(7) :1015–1019. 124

Hiraga, T., Anderson, I. M., and Kohlstedt, D. L. (2004). Grain boundaries as reservoirs of incompatible elements in the earth's mantle. *Nature*, 427(6976) :699. 124, 125, 126, 133

Hiraga, T., Tachibana, C., Ohashi, N., and Sano, S. (2010). Grain growth systematics for forsterite±enstatite aggregates : Effect of lithology on grain size in the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 291(1-4) :10–20. 118, 119, 136, 137

Hirel, P., Moladje, G. F. B., Carrez, P., and Cordier, P. (2019). Systematic theoretical study of [001] symmetric tilt grain boundaries in mgo from 0 to 120 gpa. *Physics and Chemistry of Minerals*, 46(1) :37–49. 133

Hitti, K., Laure, P., Coupez, T., Silva, L., and Bernacki, M. (2012). Precise generation of complex statistical representative volume elements (rves) in a finite element context. *Computational Materials Science*, 61 :224–238. 121, 128

Humphreys, F. J. and Hatherly, M. (2012). *Recrystallization and related annealing phenomena*. Elsevier. 119

Ilupin, I., Vaganov, V., and Prokopchuk, B. (1990). Kimberlites. *Moscow, Nedra.[In Russian.]*. 127

Ionov, D. A., Carlson, R. W., Doucet, L. S., Golovin, A. V., and Oleinikov, O. B. (2015). The age and history of the lithospheric mantle of the siberian craton : Re–os and pge study of peridotite xenoliths from the obnazhennaya kimberlite. *Earth and Planetary Science Letters*, 428 :108–119. 127

Karato, S. (1989). Grain growth kinetics in olivine aggregates. *Tectonophysics*, 168(4) :255–273. 118, 126, 128, 129, 136, 137

Karato, S.-I., Paterson, M. S., and FitzGerald, J. D. (1986). Rheology of synthetic olivine aggregates : influence of grain size and water. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 91(B8) :8151–8176. 118

Kelemen, P. B. (1990). Reaction between ultramafic rock and fractionating basaltic magma i. phase relations, the origin of calc-alkaline magma series, and the formation of discordant dunite. *Journal of petrology*, 31(1) :51–98. 126

Lallemant, H. A., Mercier, J. C., Carter, N., and Ross, J. (1980). Rheology of the upper mantle : inferences from peridotite xenoliths. *Tectonophysics*, 70(1-2) :85–113. 126

Liu, S., Tommasi, A., Vauchez, A., and Mazzucchelli, M. (2019). Deformation, annealing, melt-rock interaction, and seismic properties of an old domain of the equatorial atlantic lithospheric mantle. *Tectonics*, 38(4) :1164–1188. 126, 136

Lücke, K. and Detert, K. (1957). A quantitative theory of grain-boundary motion and recrystallization in metals in the presence of impurities. *Acta Metallurgica*, 5(11) :628–637. 119, 120

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2016). Improvement of 3d mean field models for capillarity-driven grain growth based on full field simulations. *Journal of materials science*, 51(24) :10970–10981. 123, 124

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., Settefrati, A., and Bernacki, M. (2017). Modeling of dynamic and post-dynamic recrystallization by coupling a full field approach to phenomenological laws. *Materials & Design*, 133 :498–519. 121

Marquardt, K. and Faul, U. H. (2018). The structure and composition of olivine grain boundaries : 40 years of studies, status and current developments. *Physics and Chemistry of Minerals*, 45(2) :139–172. 133

Mattielli, N., Weis, D., Grégoire, M., Mennessier, J. P., Cottin, J.-Y., and Giret, A. (1996). Kerguelen basic and ultrabasic xenoliths : evidence for long-lived kerguelen hotspot activity. *Lithos*, 37(2-3) :261–280. 127

Mercier, J. C. and Nicolas, A. (1975). Textures and fabrics of upper-mantle peridotites as illustrated by xenoliths from basalts. *Journal of Petrology*, 16(1) :454–487. 126

Nakakoji, T. and Hiraga, T. (2018). Diffusion creep and grain growth in forsterite+ 20 vol% enstatite aggregates : 2. their common diffusional mechanism and its consequence for weak-temperature-dependent viscosity. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 123(11) :9513–9527. 119

Nicolas, A., Ceuleneer, G., Boudier, F., and Misseri, M. (1988). Structural mapping in the oman ophiolites : Mantle diapirism along an oceanic ridge. *Tectonophysics*, 151(1-4) :27–56. 136

Ohuchi, T. and Nakamura, M. (2007). Grain growth in the forsterite–diopside system. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 160(1) :1–21. 118

Osher, S. and Sethian, J. A. (1988). Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 79(1) :12–49. 121

Parsons, B. and Sclater, J. G. (1977). An analysis of the variation of ocean floor bathymetry and heat flow with age. *Journal of geophysical research*, 82(5) :803–827. 136

Pearson, D., Shirey, S., Carlson, R., Boyd, F. R., Pokhilenko, N., and Shimizu, N. (1995). Re/os, sm/nd, and rb/sr isotope evidence for thick archaean lithospheric mantle beneath the siberian craton modified by multistage metasomatism. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 59(5) :959–977. 127

Pokhilenko, L., Mal'Kovets, V., Kuz'Min, D., and Pokhilenko, N. (2014). New data on the mineralogy of megacrystalline pyrope peridotite from the udachnaya kimberlite pipe, siberian craton, yakutian diamondiferous province. In *Doklady Earth Sciences*, volume 454, page 179. Springer Science & Business Media. 126, 128

Pokhilenko, N., Sobolev, N., Boyd, F., Pearson, D., and Shimizu, N. (1993). Megacrystalline pyrope peridotites in the lithosphere of the siberian platform : mineralogy, geochemical peculiarities and the problem of their origin. *Russian Geology and Geophysics*, 34 :56–67. 127

Resk, H., Delannay, L., Bernacki, M., Coupez, T., and Logé, R. (2009). Adaptive mesh refinement and automatic remeshing in crystal plasticity finite element simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(7) :075012. 121

Rollinson, H. (2019). Dunites in the mantle section of the oman ophiolite–the boninite connection. *Lithos*, 334 :1–7. 136

Rospabé, M., Benoit, M., Ceuleneer, G., Hodel, F., and Kaczmarek, M.-A. (2018). Extreme geochemical variability through the dunitic transition zone of the oman ophiolite : implications for melt/fluid-rock reactions at moho level beneath oceanic spreading centers. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 234 :1–23. 136

Saltzer, R., Chatterjee, N., and Grove, T. (2001). The spatial distribution of garnets and pyroxenes in mantle peridotites : pressure–temperature history of peridotites from the kaapvaal craton. *Journal of Petrology*, 42(12) :2215–2229. 127

Scholtes, B., Boulais-Sinou, R., Settefrati, A., Muñoz, D. P., Poitrault, I., Montouchet, A., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2016). 3d level set modeling of static recrystallization considering stored energy fields. *Computational Materials Science*, 122 :57–71. 121

Scholtes, B., Shakoor, M., Settefrati, A., Bouchard, P.-O., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2015). New finite element developments for the full field modeling of microstructural evolutions using the level-set method. *Computational Materials Science*, 109 :388–398. 121

Searle, M. and Cox, J. (1999). Tectonic setting, origin, and obduction of the oman ophiolite. *Geological Society of America Bulletin*, 111(1) :104–122. 136

Shakoor, M., Scholtes, B., Bouchard, P.-O., and Bernacki, M. (2015). An efficient and parallel level set reinitialization method–application to micromechanics and microstructural evolutions. *Applied Mathematical Modelling*, 39(23-24) :7291–7302. 121, 122

Skemer, P. and Karato, S.-i. (2007). Effects of solute segregation on the grain-growth kinetics of orthopyroxene with implications for the deformation of the upper mantle. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 164(3-4) :186–196. 119

Smith, C. (1948). Grains, phases, and interphases : An interpretation of microstructure : Transactions of the american institute of mining and metallurgical engineers, v. 175. 136

Spandler, C., O'Neill, H. S. C., and Kamenetsky, V. S. (2007). Survival times of anomalous melt inclusions from element diffusion in olivine and chromite. *Nature*, 447(7142) :303. 125

Suhr, G. (1993). Evaluation of upper mantle microstructures in the table mountain massif (bay of islands ophiolite). *Journal of Structural Geology*, 15(11) :1273–1292. 136

Suhr, G., Kelemen, P., and Paulick, H. (2008). Microstructures in hole 1274a peridotites, odp leg 209, mid-atlantic ridge : Tracking the fate of melts percolating in peridotite as the lithosphere is intercepted. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 9(3). 136

Suzuki, K. (1987). Grain-boundary enrichment of incompatible elements in some mantle peridotites. *Chemical Geology*, 63(3-4) :319–334. 124

Tasaka, M. and Hiraga, T. (2013). Influence of mineral fraction on the rheological properties of forsterite+ enstatite during grain-size-sensitive creep : 1. grain size and grain growth laws. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 118(8) :3970–3990. 136, 137

Tasaka, M., Hiraga, T., and Michibayashi, K. (2014). Influence of mineral fraction on the rheological properties of forsterite+ enstatite during grain size sensitive creep : 3. application of grain growth and flow laws on peridotite ultramylonite. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 119(2) :840–857. 136

Tasaka, M., Hiraga, T., and Zimmerman, M. E. (2013). Influence of mineral fraction on the rheological properties of forsterite+ enstatite during grain-size-sensitive creep : 2. deformation experiments. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 118(8) :3991–4012. 136

Tilton, G., Hopson, C., and Wright, J. (1981). Uranium-lead isotopic ages of the samail ophiolite, oman, with applications to tethyan ocean ridge tectonics. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 86(B4) :2763–2775. 136

Tippit, P., Pessagno, E., and Smewing, J. (1981). The biostratigraphy of sediments in the volcanic unit of the samail ophiolite. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 86(B4) :2756–2762. 136

Vissers, R., Drury, M., Strating, E. H., and Wal, D. v. d. (1991). Shear zones in the upper mantle : A case study in an alpine iherzolite massif. *Geology*, 19(10) :990–993. 118

Winterburn, P. A., Harte, B., and Gurney, J. J. (1990). Peridotite xenoliths from the jagersfontein kimberlite pipe : I. primary and primary-metasomatic mineralogy. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 54(2) :329–341. 127, 128

Yan, M., Cannon, R., and Bowen, H. (1983). Space charge, elastic field, and dipole contributions to equilibrium solute segregation at interfaces. *Journal of Applied Physics*, 54(2) :764–778. 133

Yudin, D., Tomilenko, A., Travin, A., Agashev, A., Pokhilenko, N., and Orihashi, Y. (2014). The age of udachnaya-east kimberlite : U/pb and 40 ar/39 ar data. In *Doklady Earth Sciences*, volume 455, pages 288–290. Pleiades Publishing. 128

Chapitre 5

Simuler la déformation de l'olivine par CPFEM

Sommaire

5.1 Plasticité cristalline appliquée à l'olivine 148
5.1.1 Les systèmes de glissements 148
5.1.2 L'élasticité 149
5.1.3 Loi d'écoulement 150
5.1.4 Contrainte critique résolue 151
5.1.5 Durcissement 152
5.2 Handling tensors using tensorial Kelvin bases : application to olivine polycrystal deformation modeling using elastically anistropic CPFEM 154
5.2.1 Introduction 155
5.2.2 Kelvin base decomposition 156
5.2.3 Application to crystal plasticity 159
5.2.4 CPFEM application for olivine dislocation creep modeling 160
5.2.5 Results and discussion 164
5.2.6 Conclusions 168
5.2.7 Acknowledgments 169
5.3 Compléments et limites 169
5.3.1 Formulation de plasticité cristalline non-déviatorique 169
5.3.2 Surface d'écoulement ouverte 170
5.4 Références 170

5.1 Plasticité cristalline appliquée à l'olivine

Dans cette section, les différents ingrédients nécessaires à la description de la déformation de l'olivine par un modèle de plasticité cristalline sont abordés. Ainsi, comme introduits dans la section 1.4.2.3, on décrira les systèmes de glissement à considérer, l'élasticité, la loi d'écoulement, les contraintes critiques résolues (CRSS) et enfin le durcissement.

5.1.1 Les systèmes de glissements

La symétrie orthorhombique et la cristallochimie du cristal d'olivine restreignent le nombre de systèmes de glissement que l'on peut y observer. En effet, l'énergie élastique d'une dislocation étant proportionnelle au carré de son vecteur de Burgers, les seules dislocations observées jusqu'à maintenant sont celles ayant pour vecteur de Burgers les plus petits paramètres de maille du réseau c'est à dire les vecteurs [100] et [001], les autres étant énergétiquement trop défavorables. De plus, le nombre de plans de glissement (qui sont normalement les plans de plus grande compacité) est limité par les fortes liaisons covalentes Si-O que les plans doivent éviter de couper. En général, on observe expérimentalement le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [100] dans les plans (010), (001), (011) et (021) et le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] dans les plans (010), (100) et {110}. L'activation de ces systèmes de glissement dépend de la température et de la contrainte, ainsi aux hautes températures (> 1000°C) et basses contraintes le glissement des dislocations de vecteurs de Burgers [100] est dominant alors qu'à basses températures et fortes contraintes le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] est celui qui participe le plus à la déformation. Pour simuler la plasticité cristalline de l'olivine, il est nécessaire que la liste des systèmes de glissement utilisée permette au matériau de se déformer plastiquement au dessus d'une certaine contrainte et ce pour n'importe quelle orientation de la sollicitation. En cas contraire, des problèmes de stabilité numérique peuvent apparaître dû au fort rapport de rigidité entre l'élasticité et la plasticité. Cela implique, pour une direction de chargement donnée, qu'au moins un système de glissement ait un tenseur de Schmid non nul et soit donc activable une fois que le CRSS est dépassé (i.e. $|\tau^\alpha| > \tau_c^\alpha$). Suivant les études numériques, différentes listes de systèmes de glissement sont utilisées (table 5.1).

Case	Burgers vector	Glide plane	Characteristics
	[001]	(100) (010) (110) (1-10)	Low temperature
	[100]	(001) (010) (011) (0-11)	High temperature
	[100]	(021)	High temperature
	[011]	{111}	Fictitious
	[110]	{111}	Fictitious

TABLEAU 5.1 – Différentes listes de systèmes de glissement pour l'olivine utilisées dans des simulation numérique, (bleu) en dynamique des dislocations (DD) [Durinck et al., 2007b] (8 systèmes), (orange) en VPSC [Raterron et al., 2014] (9 systèmes) et (jaune) en VPSC [Knoll et al., 2009] (16 systèmes).

On peut, pour ces différentes listes, simuler sur un point matériel une déformation plane et reporter les valeurs des contraintes principales non nulles (σ_I et σ_{II}) pour lesquelles la limite d'élasticité a été atteinte (i.e. qu'un ou plusieurs systèmes de glissement ont été activés). En faisant varier la contribution de chacune des deux contraintes (et donc la direction de sollicitation), on peut alors tracer une partie de la surface d'écoulement du cristal (Fig.5.1).

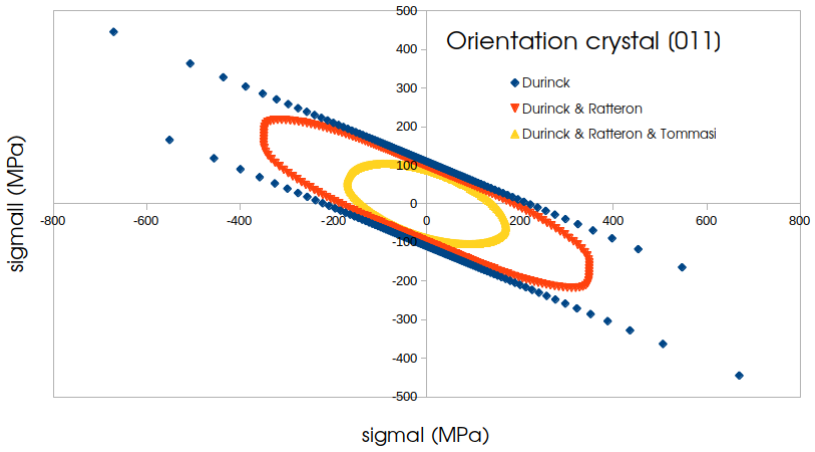


FIGURE 5.1 – Surface d'écoulement calculée sur un point matériel d'orientation cristallographique [011] par rapport à un repère fixe pour les différentes listes de systèmes de glissement présentées dans la table 5.1.

On voit rapidement que ne considérer que les 8 systèmes de glissement utilisés par [Durinck et al., 2007b] (bleu sur la figure 5.1) ne permet pas de fermer la surface d'écoulement ce qui implique que pour certaines directions de sollicitation le matériau ne pourra pas se déformer plastiquement et la réponse mécanique sera alors purement élastique. La prise en compte des 9 systèmes de glissement utilisés par [Raterron et al., 2014] permet, dans le cas de la figure 5.1 (orange), d'obtenir une déformation plastique du matériau dans toutes les directions. Toutefois, la figure 5.1 ne représente qu'un plan d'intersection de la surface d'écoulement et pour certaines orientations, celle ci n'est pas fermée et le matériau ne peut pas plastifier. La liste de systèmes de glissement utilisée par [Knoll et al., 2009] (jaune) permet quant à elle de fermer totalement la surface d'écoulement, cependant cette liste fait intervenir des systèmes de glissement pyramidaux fictifs (i.e. qui n'ont jamais été observés et sont énergétiquement très défavorables ; [011]{111} et [110]{111}).

Ces systèmes pyramidaux sont souvent utilisés dans les modèles VPSC, avec des CRSS généralement plus élevés que ceux des systèmes de glissements observés [Mameri et al., 2019], pour assurer les conditions de compatibilité des déformations à l'échelle du polycristal. Ils sont alors un moyen de prendre en compte des mécanismes d'accommodation de la déformation n'étant pas liés au glissement de dislocations. Ces mécanismes, qui peuvent comprendre la montée [Gouriet et al., 2019], le fluage diffusion [Miyazaki et al., 2013], le glissement aux joints de grains (accommodé ou non par les dislocations) [Précigout and Hirth, 2014] ou la superplasticité [Hiraga et al., 2010] sont connus pour jouer un rôle important dans la déformation des roches du manteau lithosphérique et ce d'autant plus que la taille de grain est fine (e.g. limites de plaques, zones cisaillées).

5.1.2 L'élasticité

La symétrie orthorhombique du cristal d'olivine confère à son tenseur des constantes élastiques 9 composantes indépendantes, en notation de Voigt ce tenseur peut s'écrire :

$$\mathbf{C}^e = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix} \tag{5.1}$$

Les valeurs de ces constantes élastiques sont très bien documentées dans l'état de l'art car elles sont nécessaires pour modéliser la propagation des ondes sismiques dans le manteau terrestre.

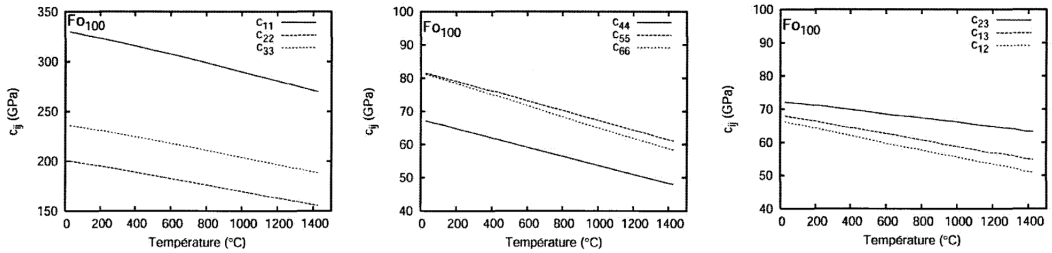


FIGURE 5.2 – Évolution des différentes constantes élastiques de la forstérite (pôle magnésien de l'olivine naturelle composé généralement de 90% de forstérite) en fonction de la température [Isaak et al., 1989a]

La figure 5.2 montre que le comportement élastique du cristal d'olivine est fortement anisotrope (rapports entre c_{11}, c_{22} et c_{33} importants) ce qui peut avoir une influence importante sur la réponse mécanique globale du matériau. Cette question sera abordée plus en détail dans ce chapitre.

5.1.3 Loi d'écoulement

Dans les modèles VPSC utilisés pour simuler le régime de fluage dislocation dans les roches mantelliques, la loi d'écoulement utilisée est presque systématiquement une loi puissance :

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^\alpha}{\tau_c^\alpha} \right|^{1/m} sign(\tau^\alpha), \tag{5.2}$$

avec $\dot{\gamma}_0$ la vitesse de glissement de référence, m un paramètre matériau et τ_c^α le CRSS du système de glissement α. La valeur de m dépend à la fois de la vitesse de déformation et de la température, il peut être exprimé comme [Marin, 2006] :

$$m = \frac{k\mathrm{T}}{\Delta \mathrm{F}} \frac{1}{pq} \left(\frac{\mathrm{T}}{\mathrm{T}_c} \right)^{1/q-1} \left(1 - \left(\frac{\mathrm{T}}{\mathrm{T}_c} \right)^{1/q} \right)^{-1}, \tag{5.3}$$

où T est la température (en K), p et q sont des constantes et ΔF est l'enthalpie d'activation du mécanisme de double décrochement non assisté par la contrainte. Les trois dernières constantes déterminées par DD [Durinck et al., 2007b] valent respectivement (en moyennant entre les systèmes de glissement [100] et [001]), 0.4462, 0.999 et $8.89 \cdot 10^{-19}$J. La température athermique T_c, en dessous de laquelle le CRSS est indépendant de la température, peut être exprimée par :

$$\mathrm{T}_c = \frac{\Delta \mathrm{F}}{k \ln\left(\dot{\gamma}_0 / \left|\dot{\gamma}^\alpha\right|\right)}. \tag{5.4}$$

Un autre type de loi d'écoulement qui pourrait être adapté au cas de l'olivine, est basé sur l'équation d'Orowan [Orowan, 1946] :

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \rho^{\alpha} b^{\alpha} v^{\alpha}. \tag{5.5}$$

La principale inconnue dans cette loi d'écoulement est la vitesse des dislocations mobiles v^{α}. Il n'existe à l'heure actuelle que peu de contraintes expérimentales sur ces vitesses et elles sont généralement déduites indirectement par comparaison de simulations en DD avec des essais mécaniques expérimentaux [Gouriet et al., 2019].

Dans un soucis de comparaison avec les modèles mésoscopiques existants (type VPSC) on utilisera dans ce travail de thèse une loi d'écoulement de type puissance. Il pourra être utile, dans le futur, de se servir d'une loi d'écoulement de type Orowan moins phénoménologique et permettant plus de liens entre les modèles de très petites échelles (type dynamique moléculaire ou DD) et les modèles à l'échelle du polycristal.

5.1.4 Contrainte critique résolue

Il existe de nombreuses données expérimentales ou numériques dans la littérature quant aux CRSS des systèmes de glissement de l'olivine. Les CRSS utilisés dans les modèles numériques de type VPSC peuvent être simples (une constante pour chaque système de glissement [Knoll et al., 2009]) ou plus complexes (dépendant de la pression, de la température, de la vitesse de déformation [Raterron et al., 2014]). On peut également trouver des données qui décrivent les CRSS (plus exactement les contraintes de Peierls, i.e. CRSS à 0K) en tenant compte du caractère de la dislocation (e.g. vis, coin).
Il est difficile de savoir jusqu'à quel point ces différents raffinements dans la description des CRSS sont nécessaires pour décrire correctement la plasticité de l'olivine dans un modèle mésoscopique.

Une première solution consiste à ne différencier les CRSS qu'en fonction du vecteur de Burgers du système de glissement. La valeur initiale (i.e. matériau non-écroui) du CRSS τ_{c0}^{α} est calculée grâce à une loi dépendante de la température [Durinck et al., 2007b] :

$$\tau_{c0}^{\alpha} = \tau_{p}^{\alpha} \left(1 - \left(\frac{T}{T_{c}^{\alpha}} \right)^{\frac{1}{q^{\alpha}}} \right)^{\frac{1}{p^{\alpha}}}, \tag{5.6}$$

où T est la température, τ_{p}^{α} est la contrainte de Peierls. En utilisant l'ajustement de Durinck et al. [2007b] (DD) on obtient les CRSS présentés en figure 5.3.

On voit sur la figure 5.3 qu'en dessous de 1050°C, les systèmes de glissement de vecteur de Burgers [100] ont un CRSS plus petit alors qu'au dessus de cette température, ce sont les systèmes de glissement de vecteur de Burgers [001] qui ont un CRSS plus faible. Cette description des CRSS est intéressante car elle permet de rendre compte de la transition d'une déformation contrôlée par le glissement des dislocations de vecteur de Burger [001] à basses températures vers le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [100] à plus hautes températures. Cependant, elle n'empêche en aucun cas le glissement des dislocations [100] à basses températures ni celui des [001] à hautes températures. Ainsi si un système de glissement avec un CRSS élevé est orienté favorablement par rapport à la direction de sollicitation (haut facteur de Schmid) il participera à la déformation plastique, le critère géométrique reste encore ainsi le facteur de premier ordre.

Une deuxième solution consiste en une description très détaillée des CRSS basée à la fois sur des expériences de déformation de monocristaux orientés et sur des calculs ab initio.
Le cristal d'olivine ne possédant que peu de systèmes de glissement (voir section 5.1.1), la déformation d'un monocristal orienté permet d'activer préférentiellement certains systèmes et ainsi

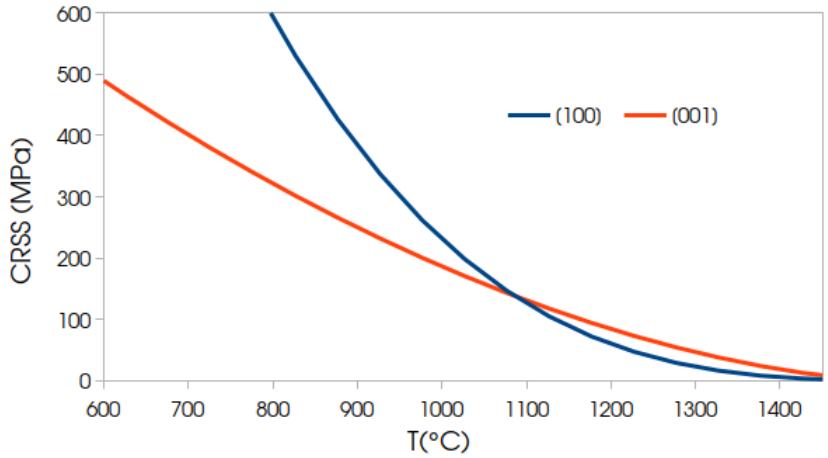


FIGURE 5.3 – Evolution des CRSS des systèmes de glissement de vecteur de Burgers [100] et [001] avec la température [Durinck et al., 2007b].

d'en déduire leurs CRSS. Ainsi, la déformation uniaxiale d'un cristal orienté $[110]_c$ (l'indice c correspond à la notation pseudo-cubique, par exemple ici la direction $[110]_c$ est à 45° des directions [100] et [010]) permet d'activer le système de glissement [100](010) uniquement. La déformation d'un cristal orienté $[011]_c$ permet d'activer le système de glissement [001](010) seul, et l'orientation $[101]_c$ permet d'activer les systèmes de glissement [001](100) et [100](001) simultanément (facteurs de Schmid égaux à 0.5 pour les deux). Les expériences de déformation de monocristaux permettent alors d'obtenir les CRSS de ces différents systèmes de glissement. Pour les systèmes de glissement ne pouvant pas être activés séparément, la comparaison des contraintes de Peierls calculées par DD entre les différents systèmes permet d'obtenir des valeurs de CRSS [Raterron et al., 2014].

Dans la suite, les CRSS n'ont été différenciés qu'entre des dislocations de vecteur de Burgers [100] et [001] en utilisant l'équation 5.6. Il serait intéressant pour un travail futur d'enrichir la description des CRSS en utilisant une approche telle que présentée dans le paragraphe ci dessus.

5.1.5 Durcissement

Le durcissement n'est généralement pas pris en compte dans les modèles VPSC qui traitent de l'olivine. En effet, ce type de modèles ne traite que des polycristaux et il est observé expérimentalement que le comportement mécanique des agrégats d'olivine montre peu de durcissement à part à basses températures et lorsqu'il n'y a pas d'évolutions microstructurales (e.g. recristallisation dynamique que les modèles VPSC prennent rarement en compte). Cependant, pour simuler le comportement mécanique d'un monocristal ou les évolutions microstructurales d'un polycristal, il semble important de tenir compte du durcissement. Dans la littérature autour de l'olivine et sauf erreur, une seule étude a utilisé une loi d'écrouissage [Wenk and Tomé, 1999] et ce pour simuler la recristallisation dynamique :

$$\tau_c^\alpha = \tau_{c0}^\alpha \left(1 + h \sum \gamma^\alpha\right), \tag{5.7}$$

où τ_{c0}^α est le CRSS initial, h est le coefficient de durcissement et γ^α la déformation totale vue par le système de glissement α. Pour simuler les évolutions microstructurales, [Wenk and Tomé, 1999] utilisent τ_c comme "proxy" de l'énergie stockée (i.e. moteur de la migration des joints de grains et de la nucléation).

Si l'on veut décrire le durcissement par l'intermédiaire des dislocations il faut commencer par définir une relation entre la résistance au glissement d'un système de glissement (CRSS) et la densité de dislocation. La manière la plus utilisée dans la littérature est la relation de Taylor [1934] :

$$\tau_c^\alpha = \tau_{c0}^\alpha + \Psi \mu b^\alpha \sqrt{\rho^{tot}}, \tag{5.8}$$

où μ est le module de cisaillement, b^α la norme du vecteur de Burgers, ρ^{tot} est la somme des densités de dislocations des différents systèmes de glissement et Ψ est un coefficient. Cette relation a été vérifiée expérimentalement pour de nombreux matériaux, dont l'olivine [Thom et al., 2020]. Cependant la valeur de Ψ déterminée expérimentalement varie fortement d'une étude à l'autre [Durinck, 2005]

Dans un second temps, il faut décrire l'évolution de la densité de dislocations d'un système de glissement ρ^α avec la déformation vue par ce système de glissement. Pour cela on peut utiliser une loi de type Yoshie-Lasraoui-Jonas [Laasraoui and Jonas, 1991a] :

$$\frac{d\rho^\alpha}{dt} = \left(K_1 - K_2 \rho^\alpha\right) \left|\dot{\gamma}^\alpha\right|, \tag{5.9}$$

avec $K_1 (mm^{-2}$ et K_2 les paramètres d'écrouissage et de restauration, respectivement. Ces deux paramètres sont des variables d'ajustement, à calibrer sur des résultats expérimentaux.
En utilisant cette loi d'écrouissage, au cours de la déformation, les CRSS des différents systèmes de glissement peuvent prendre des valeurs différentes. La résolution de l'écrouissage en utilisant le formalisme de CP devient alors difficile si l'on utilise une méthode de résolution explicite.

5.1.5.1 Résolution implicite du durcissement

Comme pour le calcul des déplacements dans un cadre EF (cf. section 1.4.2.1.b), on résout le durcissement de manière implicite par une méthode de Newton-Raphson. On cherche alors à résoudre :

$$R(\tau_c^{\alpha,\, t+\Delta t}) = \tau_c^{\alpha,\, t+\Delta t} - \tau_c^{\alpha,\, t} - \Delta t \Theta(\tau_c^{\alpha,\, t+\Delta t}) = 0, \tag{5.10}$$

où, dans le cas du formalisme développé ci dessus (relation de Taylor 5.8 avec évolution de la densité de dislocations par la loi de type Yoshie-Lasraoui-Jonas 5.9) :

$$\begin{aligned} \Theta(\tau_c^{\alpha,\, t+\Delta t}) = \dot{\tau}_c^{\alpha, t+\Delta t} &= \frac{\Psi \mu b^\alpha \sum^\alpha \dot{\rho^\alpha}}{2\sqrt{\rho^{tot}}} \\ &= \frac{\Psi \mu b^\alpha \sum^\alpha \left(K_1 - K_2 \rho^\alpha\right) \left|\dot{\gamma}^\alpha\right|}{2\sqrt{\sum^\alpha \rho^\alpha}}. \end{aligned} \tag{5.11}$$

On cherche alors à calculer $\Delta\tau_c^\alpha$ en résolvant le système 5.10 linéarisé au premier ordre :

$$\frac{\partial R(\tau_c^{\alpha,\, t+\Delta t})}{\partial \tau_c^\omega} \Delta\tau_c^\omega = -R\left(\tau_c^{\alpha, t+\Delta t}\right), \tag{5.12}$$

où,

$$\frac{\partial R(\tau_c^{\alpha, t+\Delta t})}{\partial \tau_c^\omega} = \delta_{\alpha\omega} - \Delta t \frac{\partial \Theta^\alpha}{\partial \tau_c^\omega}. \tag{5.13}$$

En posant :

$$\Theta^\alpha = c \frac{\sum^\alpha st}{v}, \tag{5.14}$$

avec :

$$\begin{aligned} c &= \frac{\Psi \mu b^{\alpha}}{2}, \\ s &= \mathrm{K}_1 - \mathrm{K}_2 \rho^{\alpha}, \\ t &= \left|\dot{\gamma}^{\alpha}\right|, \\ v &= \sqrt{\rho^{tot}}, \end{aligned} \tag{5.15}$$

on a :

$$\frac{\partial \Theta^{\alpha}}{\partial \tau_c^{\omega}} = c \frac{v \sum^{\alpha}(s' t + s t') - v' \sum^{\alpha}(s t)}{v^2} \tag{5.16}$$

avec,

$$\begin{aligned} v' = \frac{\partial \sqrt{\rho^{tot}}}{\partial \tau_c^{\omega}} = \frac{1}{2\sqrt{\rho^{tot}}} \left(\frac{\partial \tau_c^{\omega}}{\partial \rho^{tot}} \right)^{-1} = \frac{1}{2\sqrt{\rho^{tot}}} \left(\frac{\Psi \mu b^{\omega}}{2\sqrt{\rho^{tot}}} \right)^{-1} = \frac{1}{\Psi \mu b^{\omega}}, \\ s' = \frac{\partial \left(\mathrm{K}_1 - \mathrm{K}_2 \rho^{\alpha} \right)}{\partial \tau_c^{\omega}} = -\mathrm{K}_2 \left(\frac{\partial \tau_c^{\omega}}{\partial \rho^{tot}} \frac{\partial \rho^{tot}}{\partial \rho^{\alpha}} \right)^{-1} = \frac{-2\mathrm{K}_2 \sqrt{\rho^{tot}}}{\Psi \mu b^{\omega}}. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Ce qui permet de calculer tous les termes nécessaires à la résolution de l'équation 5.12 et d'obtenir l'évolution des CRSS avec la déformation. Enfin, on actualise les densités de dislocation en utilisant l'équation 5.9.

Dans la section suivante, on va utiliser le modèle constitutif présenté ci dessus pour étudier la déformation des agrégats d'olivine. En particulier, on va chercher à étudier l'influence de l'élasticité sur la déformation plastique en comparant des modèles prenant en compte l'anisotropie élastique de l'olivine avec des modèles utilisant un comportement élastique isotrope.

5.2 Handling tensors using tensorial Kelvin bases : application to olivine polycrystal deformation modeling using elastically anistropic CPFEM

This work has been submitted to the journal : Computational Mechanics.

abstract

In this work we present a simple and convenient method for handling tensors within computational mechanics frameworks based on the Kelvin decomposition. This methodology was set up within a crystal plasticity framework which permits, using the Kelvin base related to the crystal symmetries, to account for elastic anisotropy. The classical mixed velocity pressure finite element formulation has been modified in order to account for the elastic anisotropic behavior introduced into the crystal plasticity models. Moreover this modification of the mixed formulations allows to account for volume/pressure variations that can stream from constitutive models that could allow present compressible plasticity.

Using this numerical framework we explore the influence of elastic anisotropy onto the mechanical behavior of olivine within the dislocation creep regime. Our results suggest that at the polycrystal scale, the elastic anisotropy is not of first order importance. However the local changes on the stress state can be important for dome physical phenomena such as recrystallization and damage.

5.2.1 Introduction

Numerical modeling techniques in mechanics always need to deal with tensors, second order tensors such as stress $\boldsymbol{\sigma}$ or strain $\boldsymbol{\varepsilon}$ are common but also in some cases fourth rank order tensors such as compliance $\mathbf{C}$ or stiffness $\mathbf{S}$ are required. Numerical manipulation of fourth order tensors is inefficient and cumbersome. Therefore numerical implementations often take advantage of the symmetries of these second and forth order tensors in order to simplify their notations. Excepting for special formalism (such as within Cosserat medium [Lippmann, 1995]), the latter tensors are strongly symmetric. These symmetries allow to write these tensors in a simpler manner using, for example, the well-known Voigt notation. These manipulations permit to write forth and second order tensors as matrices and vectors of dimension six. This can be illustrated with a simple example of elasticity using Hooke's law : $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$. Using Voigt notation, this law can be rewritten as :

$$\underbrace{\begin{pmatrix}\sigma_{11}\\ \sigma_{22}\\ \sigma_{33}\\ \sigma_{12}\\ \sigma_{23}\\ \sigma_{31}\end{pmatrix}}_{\sigma_I^V} = \underbrace{\begin{pmatrix}C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1123} & C_{1131}\\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2223} & C_{2231}\\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3312} & C_{3323} & C_{3331}\\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1231} & C_{1212} & C_{1223} & C_{1231}\\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2312} & C_{2323} & C_{2331}\\ C_{3111} & C_{3122} & C_{3133} & C_{3112} & C_{3123} & C_{3131}\end{pmatrix}}_{C_{IJ}^V} \underbrace{\begin{pmatrix}\varepsilon_{11}\\ \varepsilon_{22}\\ \varepsilon_{33}\\ 2\varepsilon_{12}\\ 2\varepsilon_{23}\\ 2\varepsilon_{31}\end{pmatrix}}_{\varepsilon_J^V}. \tag{5.18}$$

Introducing a modified summation convention where major case indexes (e,g, I, J, ...) sum up to six, Voigt notation allows ro write Hooke's law as :

$$\sigma_I^V = C_{IJ}^V \varepsilon_J^V. \tag{5.19}$$

As convenient as it might seem, Voigt notation presents an important drawback : the tensorial properties of second and fourth order tensors are not preserved. For instance :

— $\sigma_{ij}\sigma_{ij} \neq \sigma_I^V \sigma_I^V$.

— $\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij} \neq \varepsilon_I^V \varepsilon_I^V$.

— The coefficient of two that appears on the shear terms of the strain in Voigt notation (ε_I^V) is added in an *adhoc* way such that :

$$\sigma_{ij}\varepsilon_{ij} = \sigma_I^V \varepsilon_I^V$$

.

— Let $\mathscr{F}_V^{4th}$ be the operator that transforms a four order tensor into its corresponding Voigt matrix : $C_{IJ}^V = F_V^{4th}(C_{ijkl})$. When we compute the inverse of $(C_{IJ}^V)^{-1} = S_{IJ}^V$, we expect to obtain the compliance tensor. In order to illustrate the problem with Voigt notation, lets define the compliance tensor (S_{ijkl}) such that :

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} \quad , \quad \text{with } S_{ijkl} = (C_{ijkl})^{-1},$$

and correspondingly :

$$\varepsilon_I^V = S_{IJ}^V \sigma_J^V \quad , \quad \text{with } S_{IJ}^V = (C_{IJ}^V)^{-1}.$$

The problem rises from the fact that S_{IJ}^V does not correspond to the Voigt notation of the fourth order compliance tensor :

$$S_{IJ}^V \neq \mathscr{F}_V^{4th}(S_{ijkl}).$$

It is worth mentioning that these drawbacks can be overcome by carefully applying corrections to the different terms. This is particularly necessary for terms that stream from operations

involving inverses of these compliance and stiffness matrices. Overall it can be say that although Voigt notation is still generic enough to be used in a general computational mechanics context, it is error prone and requires the use of some *adhoc* corrections.

We see that the main advantage of Voigt notation is that it allows to write fourth and second order tensors as matrices and vectors, respectively. However plenty of computational mechanics applications require intensive manipulation (e.g. inverting fourth rank order tensors, applying rotation) of these tensors and the Voigt notation is not well suited for this purpose. As those type of tensorial manipulations can be very recurrent within computational mechanics frameworks, an alternative method would allow simplify the structure of codes and make algorithms less error prone is desirable.

In this paper we propose an alternative to Voigt notation that is built upon a smart base choice that allows to obtain a simple notation similar to Voigt notation and yet preserving the tensorial properties of tensors. Thus, approach allows to simplify the structure of the codes and improve their robustness.

In this article, we initially introduce a tensorial base using the Kelvin's decompostion [Dellinger et al., 1998; Thomson, 1856]. Then, we use it in the context of crystal plasticity finite element simulations. Finally, as an application example, we will use this formalism to study the effect of elastic anisotropy on plastic deformation of olivine.

5.2.2 Kelvin base decomposition

Compliance and stiffness tensors are the most common fourth rank tensors used in computational mechanics. These tensors present multiple symmetries, and among the 81 components they contain, only 36 can be independent. Taking advantage of these symmetries, these fourth rank tensors can be expressed in a particular base of dimension six [Thomson, 1856]. As it will be presented next, this base is orthogonal and thus allows to rewrite the fourth rank tensor on as a six by six second order tensor, this base will be referred to as the Kelvin base from now on.

Tensors have particular features that are useful and handy, thus it is important to stress the importance of obtaining a $6\otimes 6$ second order tensor instead of a simple matrix, which is the case in the Voigt notation. For instance, one of these properties is related to the computation of the inverse of the tensor. In fact, computing the inverse of these $6\otimes 6$ tensors corresponds indeed to the inverse of the fourth order tensor written in the Kelvin base.

The Kelvin base is defined by a set of six second order symmetric tensors ($\mathrm{T}^{\mathrm{M}}_{ij}$ $\mathrm{M}=1,2,...,6$). This base is normalized and orthogonal, thus we can finally write [Cowin and Mehrabadi, 1989] :

$$\mathrm{T}^{\mathrm{M}}_{ij}=\mathrm{T}^{\mathrm{M}}_{ji} \quad ; \quad \mathrm{T}^{\mathrm{M}}_{ij}\mathrm{T}^{\mathrm{N}}_{ji}=\begin{cases}1 & \text{if } \mathrm{M}=\mathrm{N}\\ 0 & \text{if } \mathrm{M}\neq\mathrm{N}\end{cases} \quad \text{for } \mathrm{M}=1,2,...,6. \tag{5.20}$$

Once the tensorial base is defined, passing from a classical fourth order tensor to a second order Kelvin tensor is straightforward :

$$\mathrm{C}^{e}_{\mathrm{MN}}=\mathrm{T}^{\mathrm{M}}_{ij}\mathrm{C}^{e}_{ijkl}\mathrm{T}^{\mathrm{N}}_{kl} \quad \text{for } \mathrm{M},\mathrm{N}=1,2,...,6. \tag{5.21}$$

where $\mathrm{C}^{e}_{\mathrm{MN}}$ is the second order Kelvin tensor that corresponds to the classic fourth order tensor C^{e}_{ijkl}. The tensor $\mathrm{C}^{e}_{\mathrm{MN}}$ can be represented by a $6\otimes 6$ matrix. Reciprocally we can pass from a second order Kelvin tensor to a classic fourth order tensor :

$$\mathrm{C}_{ijkl}=\sum_{\mathrm{M}=1}^{6}\sum_{\mathrm{N}=1}^{6}\mathrm{C}^{\mathrm{K}}_{\mathrm{MN}}\mathrm{T}^{\mathrm{M}}_{ij}\mathrm{T}^{\mathrm{N}}_{kl} \quad \text{for } i,j,k,l=1,2,3, \tag{5.22}$$

The same Kelvin base can be used to write second order symmetric tensors as vectors in the Kelvin base :

$$\sigma_N^K = \sigma_{ij} T_{ij}^N \quad ; \quad \varepsilon_N^K = \varepsilon_{ij} T_{ij}^N \quad \text{for N} = 1,2,...,6, \tag{5.23}$$

where σ_N^K and ε_N^K are vectors and correspond to the stress and the strain tensors written in the Kelvin base. Reciprocally :

$$\sigma_{ij} = \sum_{N=1}^{6} \sigma_N^K T_{ij}^N \quad , \quad \varepsilon_{ij} = \sum_{N=1}^{6} \varepsilon_N^K T_{ij}^N. \tag{5.24}$$

Expressed in these bases, all fourth rank symmetric [1] tensors car be written as a second order tensor in the Kelvin base. In the same way, classic second order tensors can be written as vectors in the Kelvin base. Since these objects keep their tensorial properties, then in contrast to the Voigt approach, the following relations are verified :

— $\sigma_{ij}\sigma_{ij} = \sigma_I^K \sigma_I^K$.
— $\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij} = \varepsilon_I^K \varepsilon_I^K$.
— $\sigma_{ij}\varepsilon_{ij} = \sigma_I^K \varepsilon_I^K$.
— Let $\mathscr{F}_K^{4th}$ be the operator that transforms a four order tensor into its corresponding Kelvin tensor : $C_{IJ}^K = F_K^{4th}(C_{ijkl})$. Using Kelvin notation, we have :

$$(C_{IJ}^K)^{-1} = S_{IJ}^K,$$
$$S_{ijkl} = (C_{ijkl})^{-1},$$
$$S_{IJ}^V = \mathscr{F}_K^{4th}(S_{ijkl}).$$

So far we has discussed how to use the Kelvin base, but we have not shown how to obtain the tensors T_{ij}^N that form the base. This will be explained in the upcoming section.

5.2.2.1 Computation of the Kelvin base

The different tensors (T_{ij}^N) forming the base, are associated to the specific fourth order tensor that is being handled ($\mathbf{C}^e$) and therefore there is not a unique Kelvin decomposition.

The base used for the Kelvin decomposition streams from the computation of the eigentensors of fourth order tensor. In general the choice of the fourth order tensor used for this is the elastic tensor of material being considered.

Focusing on the elastic constants matrix, one can find a particular tensor base which diagonalizes this tensor [Thomson, 1856] :

$$C_{ijkl}^e T_{kl}^N = \lambda^N T_{ij}^N, \text{ with N} = 1,2,...,6. \tag{5.25}$$

where T_{ij}^N satisfies the constrains presented in Equation (5.20). Using this definition of the base, it is simple to show that the elastic fourth order tensor C_{ijkl}^e corresponds to a diagonal second order tensor in the Kelvin notation. Furthermore the coefficients of this diagonal tensor are the eigenvalues λ^N. Using this property, computing the stress is straighforward :

1. By symmetric we mean fourth order tensors that present two minor symmetries and the major one :

$$C_{ijkl} = \underbrace{C_{jikl}}_{\text{Minor}} = \underbrace{C_{ijlk}}_{\text{Minor}} = \underbrace{C_{klij}}_{\text{Major}}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= C^e_{ijkl}\epsilon_{kl}, \\ \sigma^N &= \lambda^N \epsilon^N. \end{aligned} \tag{5.26}$$

Moreover, as the stiffness tensor is diagonal using Kelvin base, the compliance tensor is also diagonal and its coefficients are simply $(\lambda^N)^{-1}$.

When considering elastoplastic materials, the stiffness tensor is equal to the elastic stiffness tensor only before yielding or during unloading. Therefore the elastoplastic stiffness tensor in Kelvin notation is not longer diagonal during plastic flow. However the same notation can still be used and computing the elastoplastic compliance tensor comes down to the computation of the inverse of the Kelvin stiffness tensor ($6 \otimes 6$ matrix).

As mentioned before, Kelvin decomposition depends on the choice of the fourth order tensor that is used for the computation of the Kelvin base (Equation (5.25)). The case of isotropic and orthorhombic stiffness tensors is discussed next.

5.2.2.1.a Isotropic case

In the isotropic case the stiffness tensor can be written as :

$$C_{ijkl} = \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \lambda\delta ij\delta_{kl}, \tag{5.27}$$

where, μ and λ are the shear modulus and the Lamé parameter, respectively.

Using the definition of the base in Eqs.(5.25) and (5.20), we can obtain the tensors that form the Kelvin base. For the isotropic materials this base is given by [Kocks et al., 1998] :

$$\begin{aligned} T^1_{ij} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \quad T^2_{ij} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T^3_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \\ T^4_{ij} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T^5_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T^6_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{5.28}$$

while the associated eigenvalues are :

$$\lambda^1 = \lambda^2 = \lambda^3 = \lambda^4 = \lambda^5 = 2\mu + 3\lambda, \lambda^6 = 2\mu, \tag{5.29}$$

It is worth mentioning that in this case, the first five tensors of the base correspond to deviatoric components and the last one represents the spherical part.

Some applications often decompose the stress and strain tensors into their corresponding deviatoric and spherical parts. For such applications, among which we can count crystal plasticity or incompressible plasticity in general, this Kelvin base is very convenient.

5.2.2.1.b Orthorhombic case

Materials exhibiting orthorhombic symmetry are common in nature [Robie and Bethke, 1962]. These materials are anisotropic and compared to isotropic materials, their elastic behavior has many independent parameters. Instead of presenting the 81 components of a full fourth order tensor, this elastic stiffness tensor is often reported in literature using the Voigt notation [Chang et al., 2018; Sutcliffe, 1992] :

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}, \tag{5.30}$$

where $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{22}, C_{23}, C_{33}, C_{44}, C_{55}$ and C_{66} are elastic constants.

The associated Kelvin base is not as simple as in the isotropic case. In fact some coefficients of the Kelvin base tensors depend on the elastic constants. The Kelvin base for the orthorhombic symmetry is presented in appendix D. In this case non of the tensors that form the base corresponds to the spherical stress, thus the deviatoric/spherical decomposition is not directly obtained in the Kelvin decomposition.

The proposed Kelvin decomposition will be used in order to study the effect of anisotropy on the development of texture of polycrystals. In fact, such simulations are often carried out using crystal plasticity (CP). The use of the Kelvin base within a CP framework is discussed in the next Section and the results are presented in Section 5.2.5.

5.2.3 Application to crystal plasticity

CP formulations have been widely used in the literature to describe the anisotropic plastic behavior of materials. Several formulations [Geers et al., 2014; Marin, 2006; Roters et al., 2010] are available and the main difference between them is related to the numerical scheme used to solve the associated equations. In simple words, CP allows to decompose plastic strain into a set of possible slip systems. These slip systems are defined as a function of the crystal structure of the material and are meant to account for how dislocations can move on the material. More advanced approaches account for other permanent strain mechanisms such as twinning and recrystallization [Ask et al., 2018; Sarrazola et al., 2020a,b; Wang et al., 2013].

CP can thus be used to study problems at scales similar to that of the grains of the microstructure. Therefore it is not possible to directly use CP at the structural scale that is often several order of magnitude larger than the polycrystalline scale. CP can nevertheless be used in combination with different homogenization schemes in order to compute an equivalent behavior. CP has been coupled to simple homogenization techniques like the Taylor models to more complex ones like crystal plasticity finite element method (CPFEM) [Van Houtte et al., 2005]. CPFEM allows to account for the effect of the interactions between neighbour grains and ensures strain compatibility but the computational cost is rather high.

The single crystal plasticity model used in this work is based on the formulation of [Marin, 2006] where the plastic strain is incompressible and the stress-strain response of each material point is defined by a single crystal model.

In such models, the decoupling between deviatoric and spherical stresses allows to simplify the formulations. Often the spherical stress is computed using pure elasticity and the deviatoric stress accounts for the incompressible plastic strain. Experimental studies support this decomposition since some materials (including most metals) plastically deform in an isochoric way. Therefore the plastic flow equations are written as a set of five components, which is in fact the number of independent components in a symmetric second order tensor.

Although the Kelvin decomposition allows to directly obtain the deviatoric part of the stress in the case of elastic isotropic materials, this is not true in the general case (e.g. see the orthorhombic materials). Therefore we have to ensure that the CP formulation handles the stress tensor properly in the Kelvin base [Marin, 2006].

To illustrate the utility of Kelvin base is this context, we can consider one of the main expression of CP, which lies with a total strain ($\boldsymbol{\varepsilon}$) decomposition into elastic ($\boldsymbol{\varepsilon^e}$) and plastic ($\boldsymbol{\varepsilon^p}$) strain, such as :

$$\varepsilon_{ij} - \varepsilon^e_{ij}\left(\sigma_{ij}\right) - \varepsilon^p_{ij}\left(\sigma_{ij}\right) = 0. \tag{5.31}$$

In fact, for a given strain ${}^{t+\Delta t}\varepsilon_{ij} = {}^{t}\varepsilon_{ij} + \Delta\varepsilon_{ij}$, we can say that the current elastic (${}^{t+\Delta t}\varepsilon^e_{ij}$) and plastic (${}^{t+\Delta t}\varepsilon^p_{ij}$) strains are only function of the stress (${}^{t+\Delta t}\sigma_{ij}$). In order to compute the stress, we can use a classic Newton-Raphson approach that allows us to compute iterativelly a stress increment (until reaching a given convergence criterion) by using :

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial(\varepsilon_{ij} - \varepsilon^e_{ij} - \varepsilon^p_{ij})}{\partial\sigma_{kl}}\right|_{\sigma_{kl}} \Delta\sigma_{kl} &= -\left(\varepsilon_{ij} - \varepsilon^e_{ij}\left(\sigma_{kl}\right) - \varepsilon^p_{ij}\left(\sigma_{kl}\right)\right), \\
\left.\left(\frac{\partial\varepsilon^e_{ij}}{\partial\sigma_{kl}} + \frac{\partial\varepsilon^p_{ij}}{\partial\sigma_{kl}}\right)\right|_{\sigma_{kl}} \Delta\sigma_{kl} &= \left(\varepsilon_{ij} - \varepsilon^e_{ij}\left(\sigma_{kl}\right) - \varepsilon^p_{ij}\left(\sigma_{kl}\right)\right),
\end{aligned} \tag{5.32}$$

where the first term represents the inverse of the elasto-plastic tangent fourth order tensor $\left(\mathscr{C}^{ep}_{ijkl}\right)^{-1}$:

$$\left(\mathscr{C}^{ep}_{ijkl}\right)^{-1} = \left.\left(\frac{\partial\varepsilon^e_{ij}}{\partial\sigma_{kl}} + \frac{\partial\varepsilon^p_{ij}}{\partial\sigma_{kl}}\right)\right|_{\sigma_{kl}}. \tag{5.33}$$

In order to solve Equation (5.32), the resolution of linear systems involving a fourth-order tensor $\left(\mathscr{C}^{ep}_{ijkl}\right)^{-1}$ is required. Although the computation of this actual elasto-plastic tangent tensor ($\mathscr{C}^{ep}_{ijkl}$) (which is a fourth rank order tensor) is not mandatory in order to solve Equation (5.32), some numerical schemes need it as a final output. Thus the computation of elasto-plastic tangent tensor ($\mathscr{C}^{ep}_{ijkl}$) might be required regardless of the numerical approach used to solve Eq.(5.32).

As the convergence of the Newton-Raphson loop may involve several iterations, solving Eq.(5.32) is a recurrent operation. Thus, writing all tensors within the Kelvin base gives a real advantage within since it simplifies the computations. For instance inverting a 6×6 matrix is much simpler than inverting a fourth order tensor.

In the case on anisotropic elasticity, the elastic stiffnes tensor is written in a material reference frame that rotates as the material develops texture. The Kelvin base has also the advantage of making transparent the calculations within different frames (or configurations). In fact applying a rotation to a fourth-order tensor, it as simple as applying the corresponding rotation to each tensor of the base since the associated eigenvalues (λ^N) are invariants to rotation transformations.

Overall it can be said that the use of the Kelvin formalism presented above (section 5.2.2) permits to work with a consistent tensorial base, making a maximum of operations (such as inverting or rotating tensors) physically and mathematically meaningful where, the use of the Voigt notation could have made some calculations cumbersome.

5.2.4 CPFEM application for olivine dislocation creep modeling

As an application example of the above approach, we explore the influence of the elastic anisotropy on the mechanical behaviour of olivine polycrystal deforming under the dislocation creep regime using CPFEM. To this end, we first present a FE formulation allowing to deal with elastic anisotropy. Then we present the constitutive model used for the description of the olivine dislocation creep mechanical behaviour.

5.2.4.1 Finite element formulation

In order to simulate the mechanical behaviour of a polycrystalline sample we use a FE framework based on a P1+/P1 mixed velocity pressure (v, P) formulation [Aravas, 1987; Zhang et al., 1995]. The first residual of the formulation is obtained considering the momentum conservation :

$$\sigma_{ij,j} = 0, \tag{5.34}$$

with the following boundary conditions :

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} \cdot n_i &= \vec{t} \qquad \forall \mathrm{X} \in \Gamma_t \\ v_i &= \bar{v}_i \qquad \forall \mathrm{X} \in \Gamma_v, \\ \text{with } \Gamma_t \cup \Gamma_v = \partial\Omega &\text{ and } \Gamma_t \cap \Gamma_v = \varnothing, \end{aligned} \tag{5.35}$$

where, n_i is the outward unit normal to the domain $\partial\Omega$, t_i is the stress vector and Γ_t and Γ_v are the Neumann and Dirichlet boundary conditions respectively. After integrating Eq. 5.34 with respect to the test functions $\psi_i^\star$ associated with $\vec{v}$ and by considering ${}^{t+\Delta t}\mathrm{S}_{ij} = {}^{t}\mathrm{S}_{ij} + {}^{\mathrm{Dev}}\mathscr{C}^{ep}_{ijkl}\Delta\varepsilon_{ij}$ we obtain the following expression for the first residual :

$$\mathrm{R}_1 = -\int_{\Gamma_t} t_i \psi_i^\star \, d\mathrm{V} + \int_\Omega {}^{t}\mathrm{S}_{ij}\epsilon_{ij}^\star d\mathrm{V} + \int_\Omega \left({}^{\mathrm{Dev}}\mathscr{C}^{ep}_{ijkl} : \Delta\epsilon_{kl}\right) : \epsilon_{ij}^\star d\mathrm{V} - \int_\Omega \mathrm{P}\psi_{i,i}^\star d\mathrm{V} = 0. \tag{5.36}$$

The tensor ${}^{\mathrm{Dev}}\mathscr{C}^{ep}_{ijkl} = \frac{\partial \mathrm{S}_{ij}}{\partial \epsilon_{kl}}$ and the deviatoric stress are provided by the crystal plasticity calculations.

The second residual, based on the evolution of pressure with the spherical deformation, is classically expressed using the elastic compressibility X by :

$$\begin{aligned} \mathrm{P} = {}^{t}\mathrm{P} + \Delta\mathrm{P} &= {}^{t}\mathrm{P} - \frac{\mathrm{X}\Delta t}{3}\dot{\epsilon_{ii}}, \\ \mathrm{P} - {}^{t}\mathrm{P} + \frac{\mathrm{X}\Delta t}{3} v_{i,i} &= 0, \end{aligned} \tag{5.37}$$

which leads, after integrating with respect to the test functions $q^\star$ associated with P, to the following residual :

$$\mathrm{R}_2 = -\int_\Omega v_{i,i} q^\star d\mathrm{V} - \int_\Omega \frac{\mathrm{P}}{\mathrm{X}\Delta t} q^\star d\mathrm{V} + \int_\Omega \frac{{}^{t}\mathrm{P}}{\mathrm{X}\Delta t} q^\star d\mathrm{V} = 0. \tag{5.38}$$

This formulation (Eqs.(5.36) and (5.38)), has the advantage of being symmetric as the last term of Eq.(5.36) is the tranpose to the first one of Eq.(5.38) from a FE point of view. However Eqs.(5.37) are no longer valid for an anisotropic compressibility behaviour, then we reformulate it as :

$$\begin{aligned} \mathrm{P} = {}^{t}\mathrm{P} + \Delta\mathrm{P} &= {}^{t}\mathrm{P} - \frac{(\dot{\sigma}_{kk})\,\Delta t}{3}, \\ \mathrm{P} - {}^{t}\mathrm{P} + \frac{(\mathscr{C}^{ep}_{kkij}\dot{\epsilon_{ij}})}{3}\Delta t &= 0, \\ \mathrm{P} - {}^{t}\mathrm{P} + \mathscr{B}_{ij} v_{i,j}\Delta t &= 0, \end{aligned} \tag{5.39}$$

where $\mathscr{B}_{ij} = \frac{\mathscr{C}^{ep}_{kkij}}{3}$ can be seen as a compressibility tensor which comes from a constitutive model (here crystal plasticity). The second residual then becomes :

Elasticity parameters	E	ν	μ	C_{11}	C_{22}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	C_{12}	C_{13}	C_{23}
Units	GPa		GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa
Value	200	0.25	80	290	170	210	55	70	68	55	60	65

TABLEAU 5.2 – Material parameters for olivine related to elasticity.

$$R_2 = -\int_\Omega \mathscr{B}_{ij} v_{i,j} q^\star dV - \int_\Omega \frac{P}{\Delta t} q^\star dV + \int_\Omega \frac{{}^tP}{\Delta t} q^\star dV = 0. \tag{5.40}$$

This new expression breaks the symmetry of the original formulation (Eqs.(5.36) and (5.38)).

To ensure the stability condition of the formulation we use the stabilization method of the mini-element (P1+/P1) [Arnold et al., 1984]. This approach ensures the existence and unicity of the solution by adding an additional internal degree of freedom to the velocity (P1+), while the pressure is still described by the classical P1 element. This additional degree of freedom can be statically condensed and thus the overall size of the FE problem is not modified. See [Cao et al., 2013] for further detail concerning the stabilization technique.

5.2.4.2 Olivine constitutive model

Crystal plasticity requires a constitutive model describing the material elastic response to the applied stress. In the following we aim to study the influence of anisotropic elasticity on the mechanical behaviour of an orthorhombic material, olivine, which is the major constituent of the Earth mantle. Olivine deformation have been extensively studied experimentally [Gasc et al., 2019; Hansen et al., 2016; Phakey et al., 1972] which permits to get good constraints on the parameters of the constitutive elastic model. Thus, we use linear elasticity either isotropic or orthorhombic with the constants presented in Table 5.2 from [Isaak et al., 1989b].

For an elastically isotropic olivine with E = 200GPa and μ = 0.25 the Kelvin moduli are $\lambda^1 = \lambda^2 = \lambda^3 = \lambda^4 = \lambda^5 = 160GPa$ and $\lambda^6 = 400$GPa (3 times the compressibility module), and the associated eigentensors are the ones presented in section 5.2.2.1.a.

With orthorhombic olivine elastic constants presented in Table 5.2, the Kelvin moduli are $\lambda^1 = 357$, $\lambda^2 = 192$, $\lambda^3 = 121$, $\lambda^4 = 110$, $\lambda^5 = 140$, $\lambda^6 = 136$ in GPa. Three of the associated eigentensors depend on the elastic constants and considering the presented case, we have :

$$\mathrm{T}^1_{ij} = \begin{pmatrix} 0.773 & 0 & 0 \\ 0 & 0.399 & 0 \\ 0 & 0 & 0.493 \end{pmatrix} \quad \mathrm{T}^2_{ij} = \begin{pmatrix} -0.631 & 0 & 0 \\ 0 & 0.396 & 0 \\ 0 & 0 & 0.667 \end{pmatrix}$$
$$\mathrm{T}^3_{ij} = \begin{pmatrix} 0.071 & 0 & 0 \\ 0 & -0.827 & 0 \\ 0 & 0 & 0.558 \end{pmatrix}, \tag{5.41}$$

While the last three eigentensors do not depend on the elastic properties (See Apendix D) :

$$\mathrm{T}^4_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathrm{T}^5_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathrm{T}^6_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \tag{5.42}$$

The plastic behaviour of the material is classically described, using crystal plasticity, considering :

1. A list of slip systems defined by a slip direction m_i^α and a normal to the slip plane n_i^α associated with slip system α.

Plasticity parameters	$\dot{\gamma_0}$	m	$\tau_{c0}^{[100]}$	$\tau_{c0}^{[001]}$	$b^{[100]}$	$b^{[001]}$	Ψ	K_1	K_2
Units	s^{-1}		MPa	MPa	mm	mm		mm^{-2}	
Value	2.10^{-2}	0.1	231	200	$4.76.10^{-7}$	$5.99.10^{-7}$	2.8	$1.65.10^{8}$	12

TABLEAU 5.3 – Material parameters for olivine related to plastic behaviour at 1000°C.

2. A flow rule quantifying the glide of a slip system $\dot{\gamma}^{\alpha}$ that quantifies the plastic strain induced by a resolved stress $\tau^{\alpha} = S_{ij}P_{ij}^{\alpha}$ (with $P_{ij}^{\alpha} = m_i^{\alpha} n_j^{\alpha}$ the Schmidt tensor of the slip system α).
3. A hardening law describing the evolution of the strength of the slip systems during the deformation.

The slip systems used in this work are commonly used within the state of the art of olivine deformation numerical modeling [Durinck et al., 2007a; Raterron et al., 2014], we consider [001] and [100] dislocations gliding on planes (100), (010), {110} and (001), (010), (011), $(0\bar{1}1)$, (021) respectively. Unlike to numerous modeling studies on olivine deformation [Mameri et al., 2019; Tommasi, 1998; Wenk and Tomé, 1999], we do not artificially close the flow surface by adding fictitious slip systems. Thus, as the Von Mises criterion is not satisfied, when a crystallite orientation does not allow to activate any slip system, this part of the crystal can only deform elastically.

In order to describe the strain accommodated by a slip system in response to a resolved stress, we use a power-law flow rule :

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 |\frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}}|^{\frac{1}{m}} sign(\tau^{\alpha}), \tag{5.43}$$

where $\dot{\gamma}_0$ and m are the classical parameters of the power law and τ_c^{alpha} is the critical resolved shear stress (CRSS) of the slip system α.

Numerous formalisms exist to relate the strength of slip systems (CRSS) with dislocation density, here we use a simple Taylor relationship :

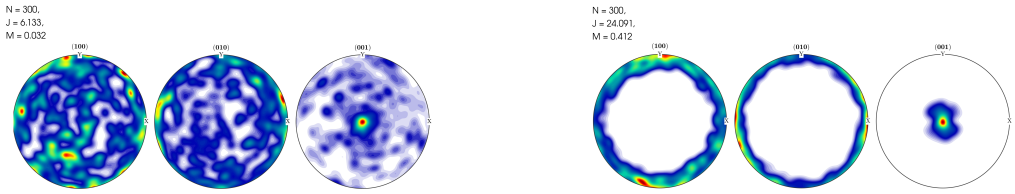
$$\tau_c^{\alpha} = \tau_{c0}^{\alpha} + \Psi \mu b^{\alpha} \sqrt{\rho^{tot}}, \tag{5.44}$$

where Ψ is the Taylor factor and is equal to 2.8 according to [Durinck et al., 2007b], μ is the shear modulus, b^{α} is the norm of the Burgers vector of the slip system α and ρ^{tot} is the sum of dislocation density over all slip systems (ρ^{α}). The initial CRSS (τ_{c0}^{α}) are assumed to be identical for slip systems with the same Burgers vector and are calculated following [Durinck et al., 2007b] (see Table 5.3).

The dislocation density evolves during deformation following a Yoshie-Lasraoui-Jonas type law [Laasraoui and Jonas, 1991b] which is resolved implicitly to ensure convergence :

$$\frac{d\rho^{\alpha}}{dt} = (K_1 - K_2\rho^{\alpha})|\dot{\gamma}^{\alpha}|, \tag{5.45}$$

where K1 and K2 are the dislocation creation and annihilation parameters respectively. The K1 and K2 parameters are taken to best reproduce monocrystal deformation experiments [Phakey et al., 1972] for three different orientations with respect to the deformation axe. The value of the parameters used for the crystal plasticity computations are listed in Table 5.3.



(a) (b)

FIGURE 5.4 – (001) Pole figures of the initial non textured (5.4a) and textured (5.4b) sample. The compression direction is vertical.

5.2.5 Results and discussion

In this section, we present the simulation results for the compression of a $2mm$-cube made of approximately 300 grains. The grains are only distinguished to each other by their initial orientations. The initial mean (in number) grain radius is $0.18mm$ and the initial dislocation density follows an uniform distribution with a value of $\rho_0^\alpha = 9.1 \cdot 10^3 mm^{-2}$ corresponding to $\rho_0^{tot} = 10^5 mm^{-2}$. The initial microstructure is generated using a Laguerre-Voronoï Dense Sphere Packing (VLDSP) algorithm [Hitti and Bernacki, 2013]. The mesh is composed of one million of tetrahedral elements and is remeshed every 1% of macroscopic deformation. The macroscopic strain rate is $10^{-3} s^{-1}$ and each time step corresponds to an increment of 0.1% of macroscopic deformation.

In terms of boundary conditions, we apply to the upper face of the cube a constant velocity in the vertical direction and leave free the velocities on the other directions. On the lower face of the cube we impose null velocities on the normal direction and left free on the other directions. The velocities on the other faces of the cube are left free in all directions.

The constitutive model used is the one presented in section 5.2.4.2 with material parameters of Tables 5.2 and 5.3.

Two different initial textures has been used (figure 5.4), one with random crystal orientations and one strongly textured with the [001] crystallographic axes mostly orthogonal to the compression direction.

For this two textures, we have compared the macroscopic strain/stress response (figure 5.5), the local total dislocation density (figures 5.6 and 5.8) and the crystal orientations (figures 5.7 and 5.9) between the models accounting or not for the elastic anisotropy.

The macroscopic stress is computed by integrating the stress in the compression direction σ_{yy} over a middle secant plane normal to the compression direction (y) :

$$\sigma_{eq} = \frac{\int_{\Omega_{2D}} \sigma_{yy} dA}{A}, \tag{5.46}$$

where A is the surface of the plane domain Ω_{2D} intersecting the sample. The computed equivalent stress (Eq.(5.46)) can be compared to ones determined experimentally (i.e. [Gasc et al., 2019]).

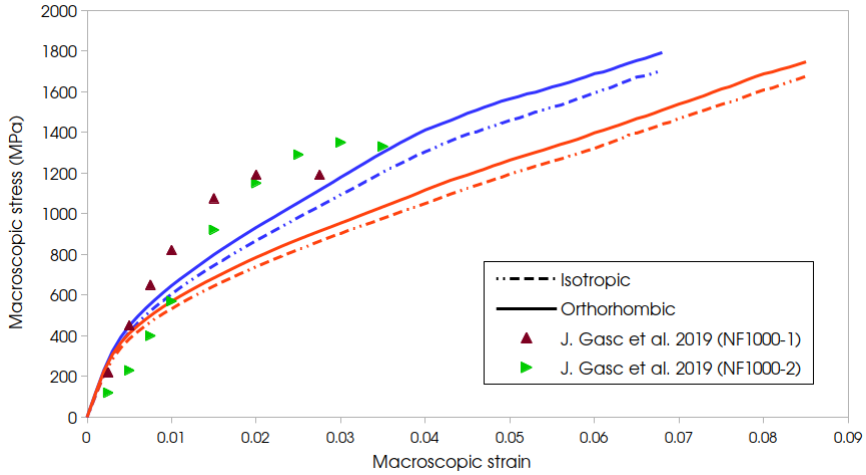
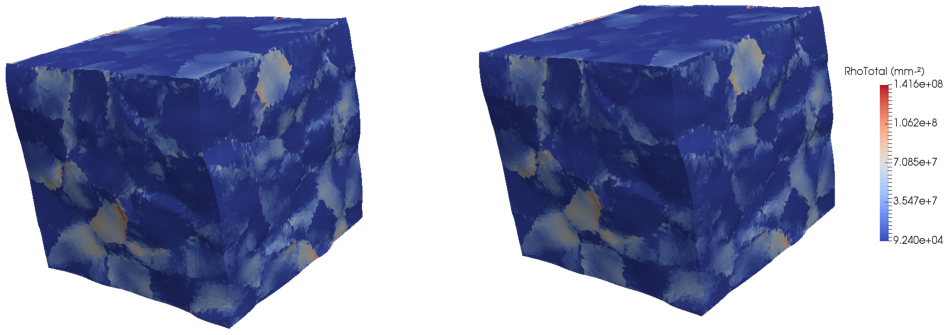


FIGURE 5.5 – Macroscopic strain/stress behaviour of the initially textured (blue) and non-textured (orange) sample deformed in compression accounting (solid line) or not (dashed line) for anisotropic elasticity, dots are experimental data of polycrystal compression at 1000°C from [Gasc et al., 2019].

The macroscopic mechanical behavior for all simulations shows globally the same trend (figure 5.5). The stresses for simulations accounting for elastic anisotropy are slightly higher than the ones with isotropic elasticity. Finally the initially textured polycrystals are harder than the ones with random orientations which was expected due to the plastic anisotropy of olivine.

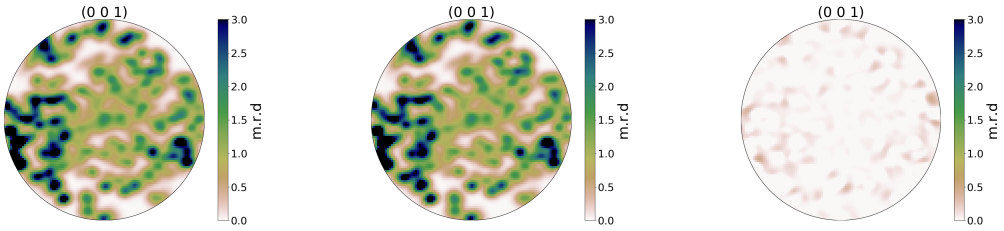
The experimental stress versus strain curves [Gasc et al., 2019] are in agreement with the simulated ones (figure 5.5), the slight differences could be due to the activation of other mechanisms accommodating deformation such as grain boundary sliding within experiments.

Similarly to the total dislocation densities (figure 5.6), the (001) pole figures (figure 5.7) for initially non-textured polycrystals do not exhibit visible differences between the model accounting for elastic anisotropy and the one which not account for.



(a) (b)

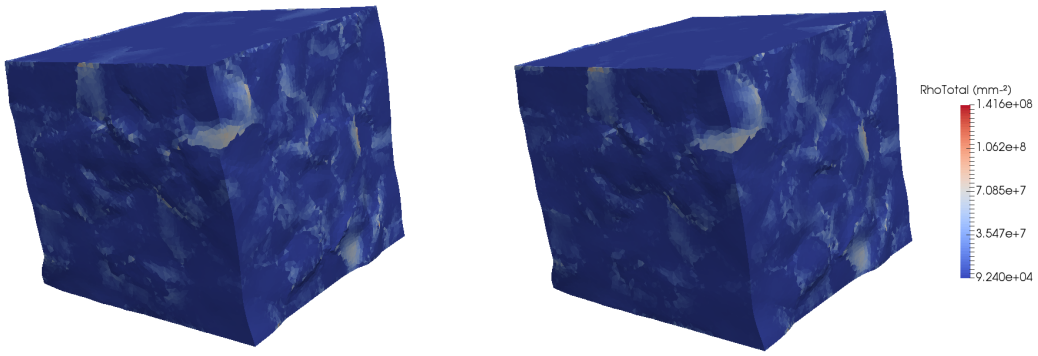
FIGURE 5.6 – Total dislocation density for initially non-textured polycrystals accounting (5.6a) or not (5.6b) for elastic anisotropy after 8.5% of macroscopic strain.



(a) (b) (c)

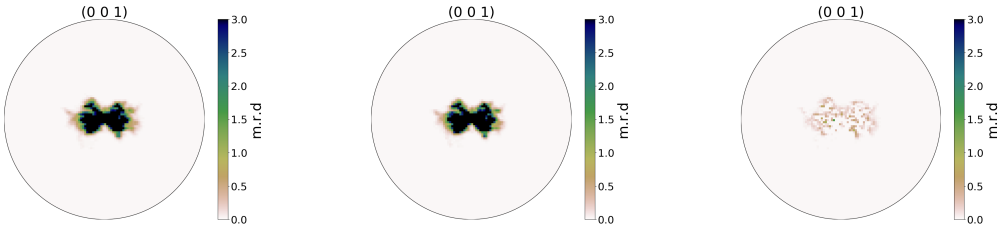
FIGURE 5.7 – (001) pole figures for initially non-textured polycrystals accounting (5.7a) or not (5.7b) for elastic anisotropy after 8.5% of macroscopic strain (the compression direction is vertical), Fig.5.7c represents the difference between Fig.5.7b and 5.7a.

For initially textured samples, one more time there is no observable difference on the total dislocation densities (figure 5.8) nor on the crystal orientations (figure 5.9) between the two models (with or without elastic anisotropy).



(a) (b)

FIGURE 5.8 – Total dislocation density for initially textured polycrystals accounting (5.8a) or not (5.8b) for elastic anisotropy after 6.5% of macroscopic strain.



(a) (b) (c)

FIGURE 5.9 – (001) pole figures for initially textured polycrystals accounting (5.9a) or not (5.9b) for elastic anisotropy after 6.5% of macroscopic strain (the compression direction is vertical), Fig.5.9c represents the difference between Fig.5.9b and 5.9a.

We then plot the evolution of the different components of the deviatoric stress tensor along a line passing through a randomly selected grain boundary (diagonal components in figure 5.10

and shear stresses in figure 5.11). Between the two models the stress components have the same trends but can differ locally about few tens of percents.

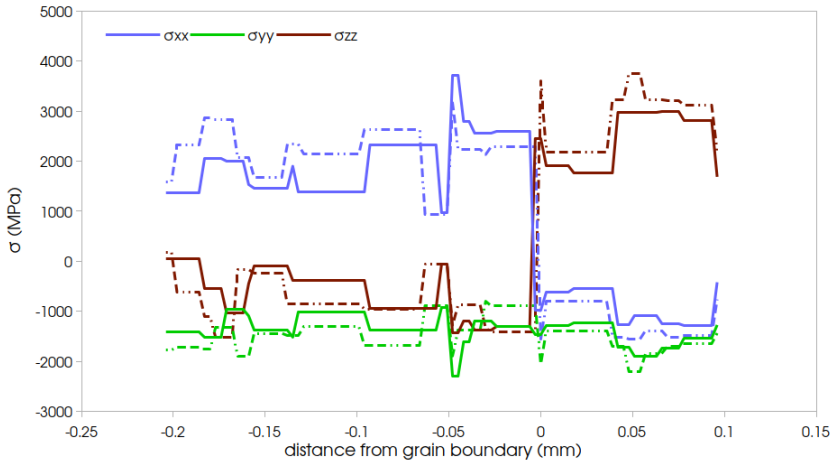


FIGURE 5.10 – Evolution of the deviatoric stress diagonal components along a line passing through a grain boundary, the dashed lines represent the results with anisotropic elasticity while the solid lines represent results assuming isotropic elasticity.

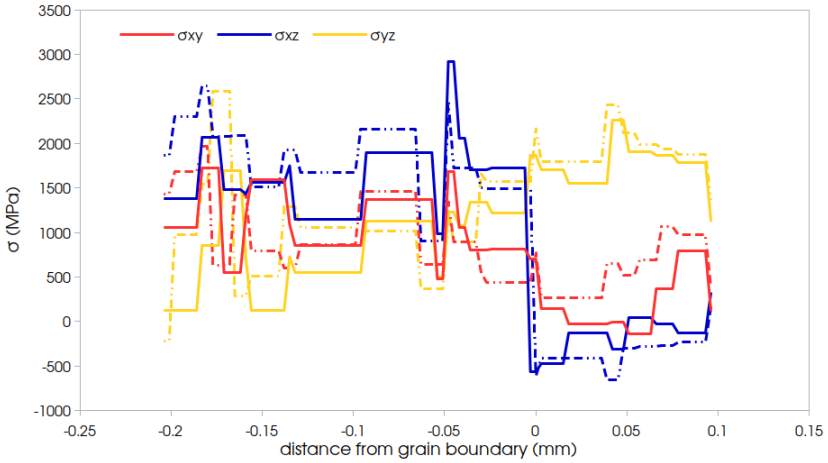


FIGURE 5.11 – Evolution of shear stress components along a line passing through a grain boundary, the dashed lines represent the results with anisotropic elasticity while the solid lines represent results assuming isotropic elasticity.

Along the same line, the total dislocation density shows also the same trends between the two models (see Fig.5.12). However, as for stress components, the total dislocation density can vary locally from one model to the other.

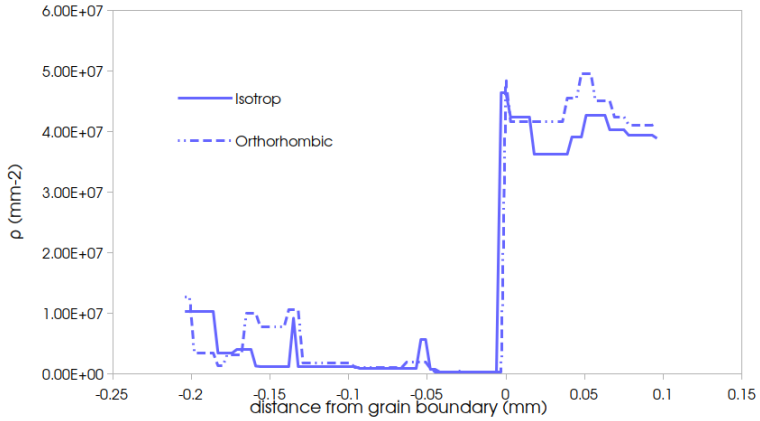


FIGURE 5.12 – Evolution of the total dislocation density along a line passing through a grain boundary for both models.

Finally, we examine the pressure along a line connecting to opposite edges of the compressed cube for the non textured models (figure 5.13).

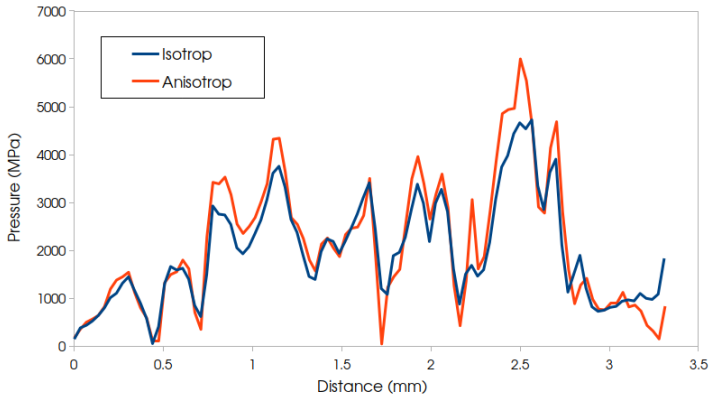


FIGURE 5.13 – Evolution of the pressure for model accounting (orange) or not (blue) for elastic anisotropy along a line passing through the sample connecting two opposite edges

Once again, the pressure evolution shows the same trends between the model accounting for elastic anisotropy and the one which does not account for with some local differences until 20%.

5.2.6 Conclusions

We have presented an alternative to the Voigt notation for handling of fourth rank order tensors within numerical mechanics frameworks. This method, based on a coherent tensorial base, allows to handle second and fourth order tensor in a physically and mathematically meaningful way. In fact the use of the Kelvin base also allows to diagonalize the elastic constants matrix. Since rotations of the fourth order tensors can simply be handled by applying the corresponding rotation to the base, it can be said that the technique greatly simplify numerical computations that involve elastic anisotropy and thus where the elastic stiffness tensor evolves as the material rotates.

Even when the Kelvin base does not exhibit spherical component, the use of this tensorial can be used to greatly simplify the structure and implementation of numerical algorithms.

Within a CPFEM context, we modified the classical mixed velocity pressure finite element formulation in order to account for the non isotropic compressiblity. This non isotropic compressibility can stream from an inherent elastic anisotropy or from a more classical elastoplastic model

that accounts for plastic compressibility [Marin and McDowell, 1998; Shen et al., 2012]. In the case of crystal plasticity, the compressible anisotropy comes from the elasticity.

We use the presented framework to explore the influence of elastic anisotropy on the dislocation creep of olivine at 1000°C. At the macroscopic scale (whole model), the anisotropic elasticity does not seem to have a strong influence on neither stress, dislocation density nor lattice preferred orientation development. Nevertheless at local scale the stress components and pressure show differences up to tens of percent from the isotropic elasticity model. Those local variations may play an important role on physical processes at microscopic scale such as nucleation or strain induced grain boundary migration (SIBM [Imran and Bambach, 2017; Lee et al., 2002; Shimizu, 2008]). Further studies will be carried out in order to assess this impact.

5.2.7 Acknowledgments

We wanted to thank Javier Signorelli for the constructive discussions that have advanced this work.
The supports of the French Agence Nationale de la Recherche (ANR), ArcelorMittal, FRAMATOME, ASCOMETAL, AUBERT&DUVAL, CEA, SAFRAN through the DIGIMU Industrial Chair and consortium are gratefully acknowledged.

5.3 Compléments et limites

5.3.1 Formulation de plasticité cristalline non-déviatorique

Comme évoqué dans la section précédente, la base de Kelvin orthorhombique n'a pas de composante sphérique triviale, c'est à dire qu'à la différence de la base de Kelvin isotrope, aucun tenseur ne représente la partie isostatique. Il faut donc s'assurer que la formulation de CP reste valable lorsque les différentes variables utilisées ne sont pas déviatoriques. Dans la formulation classique, le seul résidu faisant intervenir des variables déviatoriques est le résidu traduisant l'équilibre des déformations (section 1.4.2.3, Eq.1.75). En réécrivant ce résidu en remplaçant les variables déviatoriques par les variables complètes on obtient :

$$R_{ij} = (C^e_{ijkl})^{-1}\sigma^{t+\Delta t}_{kl} - \epsilon^{e,(t+\Delta t),\star}_{ij} + \Delta t \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{((t+\Delta t),\alpha)} P^{\alpha}_{ij} = 0. \tag{5.47}$$

Les deux premiers termes valent :

$$\begin{aligned} (C^e_{ijkl})^{-1}\sigma^{t+\Delta t}_{kl} &= \epsilon^{e,(t+\Delta t)}_{ij} \\ \epsilon^{e,(t+\Delta t),\star}_{ij} &= \mathrm{dev}(\epsilon^{e,(t+\Delta t),\star}_{ij}) + \mathrm{tr}(\Delta\epsilon_{ij})\delta_{ij} + \mathrm{tr}(\epsilon^{e,t}_{ij})\delta_{ij} \\ \text{avec : } \mathrm{dev}(\epsilon^{e,(t+\Delta t),\star}_{ij}) &= \Delta R_{ik}\mathrm{dev}(\epsilon^{e,t}_{kl})\Delta R_{jl} + \Delta t\,\mathrm{sym}(L_{ij}). \end{aligned} \tag{5.48}$$

Ainsi, l'équation 5.47 devient :

$$\epsilon^{e,(t+\Delta t)}_{ij} - \Delta R_{ik}\mathrm{dev}(\epsilon^{e,t}_{kl})\Delta R_{jl} - \Delta t\,\mathrm{sym}(L_{ij}) - \mathrm{tr}(\Delta\epsilon_{ij})\delta_{ij} - \mathrm{tr}(\epsilon^{e,t}_{ij})\delta_{ij} + \Delta\epsilon^{p}_{ij} = 0. \tag{5.49}$$

En utilisant les relations $\epsilon^{e,t}_{ij} = \Delta R_{ik}\mathrm{dev}(\epsilon^{e,t}_{kl})\Delta R_{jl} + \mathrm{tr}(\epsilon^{e,t}_{ij})\delta_{ij}$ et $\Delta\epsilon_{ij} = \mathrm{tr}(\Delta\epsilon_{ij})\delta_{ij} + \Delta t\,\mathrm{sym}(L_{ij})$, on peut réécrire l'équation 5.48 sous la forme :

$$\begin{aligned} \epsilon^{e,(t+\Delta t)}_{ij} - \epsilon^{e,t}_{ij} - \Delta\epsilon_{ij} + \Delta\epsilon^{p}_{ij} &= 0 \\ \Delta\epsilon_{ij} &= \Delta\epsilon^{e}_{ij} + \Delta\epsilon^{p}_{ij}, \end{aligned} \tag{5.50}$$

ce qui traduit, comme l'équation 1.74, l'équilibre des déformations. Ainsi la formulation de CP, telle que décrite par Marin [2006], reste valable en utilisant des variables non déviatoriques. Pour la résolution implicite de l'équation 5.47, réalisée de la même manière que pour le cas déviatorique (Eq.1.77), il faut également calculer l'expression de $\frac{\partial R_{ij}}{\partial \sigma_{mn}}$, d'autant plus qu'elle est ensuite utilisée pour le calcul de la matrice tangente.
En repartant de l'équation 5.47 :

$$\frac{\partial R_{ij}}{\partial \sigma_{mn}} = (C^e_{ijkl})^{-1} + \Delta t \sum_\alpha \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial \tau^\alpha} \frac{\partial \tau^\alpha}{\partial S_{rs}} \frac{\partial S_{rs}}{\partial \sigma_{mn}} P^\alpha_{ij}. \tag{5.51}$$

D'après l'équation 1.71, $\frac{\partial \tau^\alpha}{\partial S_{rs}} = P^\alpha_{rs}$, de plus S_{rs} peut être écrit comme $\sigma_{rs} - \frac{1}{3}\sigma_{ll}\delta_{rs}$, il vient alors :

$$\frac{\partial S_{rs}}{\partial \sigma_{mn}} = \delta_{rm}\delta_{sn} - \frac{1}{3}\delta_{mn}\delta_{rs}, \tag{5.52}$$

et l'équation 5.51 devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{ij}}{\partial \sigma_{mn}} &= (C^e_{ijkl})^{-1} + \Delta t \sum_\alpha \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial \tau^\alpha} P^\alpha_{rs}(\delta_{rm}\delta_{sn} - \frac{1}{3}\delta_{mn}\delta_{rs})P^\alpha_{ij} \\ &= (C^e_{ijkl})^{-1} + \Delta t \sum_\alpha \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial \tau^\alpha}(P^\alpha_{mn} - \frac{1}{3}\delta_{mn}P^\alpha_{rr})P^\alpha_{ij}. \end{aligned} \tag{5.53}$$

Comme la trace des tenseurs de Schmid est nulle ((m^α et n^α sont orthogonaux) :

$$\frac{\partial R_{ij}}{\partial \sigma_{mn}} = (C^e_{ijkl})^{-1} + \Delta t \sum_\alpha \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial \tau^\alpha} P^\alpha_{mn} P^\alpha_{ij}, \tag{5.54}$$

ce qui ne diffère de l'équation initiale 1.79 que par le fait que la matrice des constantes élastiques n'est plus déviatorique.

5.3.2 Surface d'écoulement ouverte

En utilisant le formalisme développé dans ce chapitre, la liste de systèmes de glissement ne permet pas de fermer la surface d'écoulement et aucun mécanisme n'a été ajouté pour accommoder la déformation lorsque le matériau ne peut pas plastifier. Seule l'élasticité permet d'accommoder les déformations dans ces cas ci et les cristallites "mal" orientées sont très vite dans des états de contrainte importants. Lorsque ces éléments se retrouvent côte à côte avec des éléments s'étant déformés de manière plastique, les gradients de contrainte entre les deux éléments sont très importants et la résolution EF ne converge plus. Dans les simulations présentées ci dessus, le solveur EF ne converge plus aux alentours de 10% de déformation macroscopique. Ainsi, avec cette approche, la simulation des évolutions microstructurales et en particulier de la DRX n'est pas possible car il faut pouvoir appliquer une déformation plus importante aux échantillons pour déclencher ces phénomènes.
Pour résoudre ce problème, il faut introduire un ou des mécanismes permettant d'accommoder la déformation lorsque l'orientation (ou la direction de chargement) ne permet pas à un ou des systèmes de glissement d'être activés, c'est l'objet du chapitre suivant.

5.4 Références

Aravas, N. (1987). On the numerical integration of a class of pressure-dependent plasticity models. *International Journal for numerical methods in engineering*, 24(7) :1395–1416. 161

Arnold, D. N., Brezzi, F., and Fortin, M. (1984). A stable finite element for the stokes equations. *Calcolo*, 21(4) :337–344. 162

Ask, A., Forest, S., Appolaire, B., Ammar, K., and Salman, O. U. (2018). A cosserat crystal plasticity and phase field theory for grain boundary migration. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 115 :167–194. 159

Cao, T.-S., Montmitonnet, P., and Bouchard, P.-O. (2013). A detailed description of the gurson–tvergaard–needleman model within a mixed velocity–pressure finite element formulation. *International journal for numerical methods in engineering*, 96(9) :561–583. 162

Chang, J., Zhou, X., Liu, K., and Ge, N. (2018). Structural, elastic, mechanical and thermodynamic properties of hfb4 under high pressure. *Royal Society open science*, 5(7) :180701. 158

Cowin, S. and Mehrabadi, M. (1989). Identification of the elastic symmetry of bone and other materials. *Journal of biomechanics*, 22(6-7) :503–515. 156

Dellinger, J., Vasicek, D., and Sondergeld, C. (1998). Kelvin notation for stabilizing elastic-constant inversion. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 53(5) :709–719. 156

Durinck, J. (2005). *Modélisation de la plasticité de la forsterite par calculs à l'échelle atomique et par dynamique des dislocations*. PhD thesis, Lille 1. 153

Durinck, J., Carrez, P., and Cordier, P. (2007a). Application of the peierls-nabarro model to dislocations in forsterite. *European Journal of Mineralogy*, 19(5) :631–639. 163

Durinck, J., Devincre, B., Kubin, L., and Cordier, P. (2007b). Modeling the plastic deformation of olivine by dislocation dynamics simulations. *American Mineralogist*, 92(8-9) :1346–1357. 148, 149, 150, 151, 152, 163

Gasc, J., Demouchy, S., Barou, F., Koizumi, S., and Cordier, P. (2019). Creep mechanisms in the lithospheric mantle inferred from deformation of iron-free forsterite aggregates at 900–1200° c. *Tectonophysics*, 761 :16–30. 162, 164, 165

Geers, M., Cottura, M., Appolaire, B., Busso, E. P., Forest, S., and Villani, A. (2014). Coupled glide-climb diffusion-enhanced crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 70 :136–153. 159

Gouriet, K., Cordier, P., Garel, F., Thoraval, C., Demouchy, S., Tommasi, A., and Carrez, P. (2019). Dislocation dynamics modelling of the power-law breakdown in olivine single crystals : Toward a unified creep law for the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 506 :282–291. 149, 151

Hansen, L. N., Warren, J. M., Zimmerman, M. E., and Kohlstedt, D. L. (2016). Viscous anisotropy of textured olivine aggregates, part 1 : Measurement of the magnitude and evolution of anisotropy. *Earth and Planetary Science Letters*, 445 :92–103. 162

Hiraga, T., Miyazaki, T., Tasaka, M., and Yoshida, H. (2010). Mantle superplasticity and its self-made demise. *Nature*, 468(7327) :1091. 149

Hitti, K. and Bernacki, M. (2013). Optimized dropping and rolling (odr) method for packing of poly-disperse spheres. *Applied Mathematical Modelling*, 37(8) :5715–5722. 164

Imran, M. and Bambach, M. (2017). A new model for dynamic recrystallization under hot working conditions based on critical dislocation gradients. *Procedia engineering*, 207 :2107–2112. 169

Isaak, D. G., Anderson, O. L., Goto, T., and Suzuki, I. (1989a). Elasticity of single-crystal forsterite measured to 1700 k. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 94(B5) :5895–5906. 150

Isaak, D. G., Anderson, O. L., Goto, T., and Suzuki, I. (1989b). Elasticity of single-crystal forsterite measured to 1700 k. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 94(B5) :5895–5906. 162

Knoll, M., Tommasi, A., Logé, R. E., and Signorelli, J. W. (2009). A multiscale approach to model the anisotropic deformation of lithospheric plates. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 10(8). 148, 149, 151

Kocks, U. F., Tomé, C. N., and Wenk, H.-R. (1998). *Texture and anisotropy : preferred orientations in polycrystals and their effect on materials properties*. Cambridge university press. 158

Laasraoui, A. and Jonas, J. (1991a). Prediction of steel flow stresses at high temperatures and strain rates. *Metallurgical transactions A*, 22(7) :1545–1558. 153

Laasraoui, A. and Jonas, J. (1991b). Prediction of steel flow stresses at high temperatures and strain rates. *Metallurgical transactions A*, 22(7) :1545–1558. 163

Lee, K.-H., Jiang, Z., and Karato, S.-i. (2002). A scanning electron microscope study of the effects of dynamic recrystallization on lattice preferred orientation in olivine. *Tectonophysics*, 351(4) :331–341. 169

Lippmann, H. (1995). Cosserat plasticity and plastic spin. 155

Mameri, L., Tommasi, A., Signorelli, J., and Hansen, L. N. (2019). Predicting viscoplastic anisotropy in the upper mantle : a comparison between experiments and polycrystal plasticity models. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 286 :69–80. 149, 163

Marin, E. and McDowell, D. (1998). Models for compressible elasto-plasticity based on internal state variables. *International Journal of Damage Mechanics*, 7(1) :47–83. 169

Marin, E. B. (2006). On the formulation of a crystal plasticity model. Technical report, Sandia National Laboratories. 150, 159, 170

Miyazaki, T., Sueyoshi, K., and Hiraga, T. (2013). Olivine crystals align during diffusion creep of earth's upper mantle. *Nature*, 502(7471) :321. 149

Orowan, E. (1946). Creep in metals. *J. West Scotland Iron & Steel Inst.*, 54 :45. 151

Phakey, P., Dollinger, G., and Christie, J. (1972). Transmission electron microscopy of experimentally deformed olivine crystals. *Flow and fracture of rocks*, 16 :117–138. 162, 163

Précigout, J. and Hirth, G. (2014). B-type olivine fabric induced by grain boundary sliding. *Earth and Planetary Science Letters*, 395 :231–240. 149

Raterron, P., Detrez, F., Castelnau, O., Bollinger, C., Cordier, P., and Merkel, S. (2014). Multiscale modeling of upper mantle plasticity : From single-crystal rheology to multiphase aggregate deformation. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 228 :232–243. 148, 149, 151, 152, 163

Robie, R. A. and Bethke, P. M. (1962). Molar volumes and densities of minerals. *Unites States Department of the Interior Geological Survey*, pages 4–21. 158

Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D. D., Bieler, T. R., and Raabe, D. (2010). Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling : Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 58(4) :1152–1211. 159

Sarrazola, D. R., Maire, L., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2020a). Full field modeling of dynamic recrystallization in a cpfem context–application to 304l steel. *Computational Materials Science*, 184 :109892. 159

Sarrazola, D. R., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2020b). A new numerical framework for the full field modeling of dynamic recrystallization in a cpfem context. *Computational Materials Science*, 179 :109645. 159

Shen, W., Shao, J.-F., Kondo, D., and Gatmiri, B. (2012). A micro–macro model for clayey rocks with a plastic compressible porous matrix. *International journal of plasticity*, 36 :64–85. 169

Shimizu, I. (2008). Theories and applicability of grain size piezometers : The role of dynamic recrystallization mechanisms. *Journal of Structural Geology*, 30(7) :899–917. 169

Sutcliffe, S. (1992). Spectral decomposition of the elasticity tensor. *Journal of Applied Mechanics*, 59 :762–773. 158

Taylor, G. I. (1934). The mechanism of plastic deformation of crystals. part i.—theoretical. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 145(855) :362–387. 153

Thom, C., Goldsby, D., Kumamoto, K., and Hansen, L. (2020). When minerals fight back : The relationship between back stress and geometrically necessary dislocation density. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, page 2773. 153

Thomson, W. (1856). Xxi. elements of a mathematical theory of elasticity. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, (146) :481–498. 156, 157

Tommasi, A. (1998). Forward modeling of the development of seismic anisotropy in the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 160(1-2) :1–13. 163

Van Houtte, P., Li, S., Seefeldt, M., and Delannay, L. (2005). Deformation texture prediction : from the Taylor model to the advanced Lamel model. *International Journal of Plasticity*, 21(3) :589–624. 159

Wang, H., Wu, P., Wang, J., and Tomé, C. (2013). A crystal plasticity model for hexagonal close packed (hcp) crystals including twinning and de-twinning mechanisms. *International Journal of Plasticity*, 49 :36–52. 159

Wenk, H.-R. and Tomé, C. (1999). Modeling dynamic recrystallization of olivine aggregates deformed in simple shear. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 104(B11) :25513–25527. 152, 163

Zhang, Z. et al. (1995). Explicit consistent tangent moduli with a return mapping algorithm for pressure-dependent elastoplasticity models. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 121(1) :29–44. 161

Chapitre 6

Plasticité cristalline réduite et évolutions microstructurales

Sommaire

6.1 Plasticité cristalline réduite 176
6.1.1 Mécanisme de relaxation isotrope 176
6.1.2 Implémentation 176
6.2 A new finite element approach to model microscale strain localization within olivine aggregates 177
6.2.1 Introduction 178
6.2.2 Full field modeling of olivine deformation and microstructural evolutions . 179
6.2.3 Material parameters and creep regime 185
6.2.4 Results 189
6.2.5 Discussion 191
6.2.6 Conclusion 194
6.3 Limites et discussion 194
6.4 Références 195

6.1 Plasticité cristalline réduite

Comme on a pu le voir dans le chapitre précédent, l'approche CPFEM classique appliquée au cas de l'olivine se heurte au manque de systèmes de glissement disponibles pour accommoder la déformation. Pour pouvoir simuler les évolutions microstructurales, comme la DRX, dans les agrégats d'olivine soumis à une déformation il faut pouvoir simuler la déformation du matériau en plus grande déformation (> 10%). Dans ce chapitre on va dans un premier temps présenter une des solutions pour résoudre ce problème qui est d'utiliser la plasticité cristalline réduite pour fermer la surface d'écoulement. On présentera également le formalisme utilisé pour décrire les évolutions microstructurales liées à la déformation. Enfin, on utilisera ce cadre numérique pour étudier la localisation de la déformation dans un agrégat d'olivine comportant des zones de faiblesses pré-existantes.

6.1.1 Mécanisme de relaxation isotrope

Comme évoqué dans la section 1.4.2.4, la plasticité cristalline réduite permet de fermer la surface d'écoulement en introduisant un mécanisme de relaxation. Le plus simple pour exprimer la vitesse de ce mécanisme $\dot{\varepsilon}^{rel}$ (voir Eq.1.84) est de le décrire comme un mécanisme isotrope de type Von Mises :

$$\dot{\varepsilon}^{rel} = \dot{\varepsilon}^{iso} = \dot{\varepsilon}_0 (\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}})^{\frac{1}{n}}, \tag{6.1}$$

où $\dot{\varepsilon}_0$, n, sont des paramètres décrivant la déformation accommodée par ce mécanisme, σ_c^{iso} représente une contrainte critique d'activation du mécanisme qui peut aussi évoluer au cours de la déformation, cependant cet aspect de durcissement ou d'adoucissement sera négligé ici.
Tel que formulé ci dessus, l'introduction de ce mécanisme de relaxation n'intervient pas dans la rotation du réseau. Comme pour les modèles VPSC introduisant des systèmes de glissement fictifs ne participant pas à la rotation du réseau, les tendances d'évolution des CPO ne devraient pas changer fortement [Mameri et al., 2019].

On peut noter qu'un formalisme similaire a déjà été utilisé dans une méthode VPSC pour décrire le comportement mécanique de l'olivine sans avoir à rajouter de systèmes de glissement fictifs [Detrez et al., 2015]. Les résultats de cette étude montrent sans surprise que la contrainte d'activation du mécanisme isotrope σ_c^{iso}, joue un rôle important sur le comportement mécanique global de l'agrégat.

6.1.2 Implémentation

L'équation 1.84 peut être directement ajoutée dans l'expression du résidu (équation 5.47) pour tenir compte de l'effet de ce mécanisme.
La contribution de ce mécanisme à la matrice tangente peut être calculée comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_{ij}^{iso}}{\partial \sigma_{kl}} &= \frac{\partial}{\partial \sigma_{kl}} \left(\Delta t \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}} \right)^{\frac{1}{n}-1} \frac{3}{2\sigma_c} {S^{\mathbb{P}}}_{ij} \right) \\ &= \Delta t \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}} \right)^{\frac{1}{n}-1} \frac{3}{2\sigma_c} \frac{\partial {S^{\mathbb{P}}}_{ij}}{\partial \sigma_{kl}} + S^{\mathbb{P}}_{ij} \frac{\partial}{\partial \sigma_{kl}} \left(\Delta t \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}} \right)^{\frac{1}{n}-1} \frac{3}{2\sigma_c} \right) \end{aligned} \tag{6.2}$$

où le premier terme se calcule aisément en utilisant :

$$\frac{\partial {S^{\mathbb{P}}}_{ij}}{\partial \sigma_{kl}} = \frac{\partial S_{ij}}{\partial \sigma_{kl}} \mathbb{P}_{ijkl} = \left(\delta_{ik}\delta_{jl} - \frac{1}{3}\delta_{kl}\delta_{ij} \right) \mathbb{P}_{ijkl}. \tag{6.3}$$

Le second terme de l'équation 6.2 se calcule en utilisant :

$$\begin{aligned} S^{\mathbb{P}}_{ij}\frac{\partial}{\partial\sigma_{kl}}\left(\Delta t\dot{\varepsilon}_0\left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}}\right)^{\frac{1}{n}-1}\frac{3}{2\sigma_c}\right) &= S^{\mathbb{P}}_{ij}\frac{\partial S_{eq}}{\partial\sigma_{kl}}\frac{\partial}{\partial S_{eq}}\left(\Delta t\dot{\varepsilon}_0\left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}}\right)^{\frac{1}{n}-1}\frac{3}{2\sigma_c}\right), \\ &= \left(\frac{1}{n}-1\right)\Delta t\dot{\varepsilon}_0\left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}}\right)^{\frac{1}{n}-2}\frac{3}{2{\sigma_c}^2}S^{\mathbb{P}}_{ij}\frac{\partial S_{eq}}{\partial\sigma_{kl}} \end{aligned} \tag{6.4}$$

où

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_{eq}}{\partial\sigma_{kl}} &= \frac{1}{2S_{eq}}\frac{3}{2}\frac{\partial}{\partial\sigma_{kl}}\left(S^{\mathbb{P}}_{ij}:S^{\mathbb{P}}_{ij}\right) \\ &= \frac{3S^{\mathbb{P}}_{kl}}{2S_{eq}}. \end{aligned} \tag{6.5}$$

Ainsi l'expression rendant compte de l'effet du mécanisme de plasticité isotrope à ajouter dans le calcul de la matrice tangente (équation 5.54) est :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial\varepsilon^{iso}_{ij}}{\partial\sigma_{kl}} = \\ &\Delta t\dot{\varepsilon}_0\left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}}\right)^{\frac{1}{n}-1}\frac{3}{2\sigma_c^{iso}}\left(\delta_{ik}\delta_{jl}-\frac{1}{3}\delta_{kl}\delta_{ij}\right)\mathbb{P}_{ijkl} \\ &+\left(\frac{1}{n}-1\right)\Delta t\dot{\varepsilon}_0\left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}}\right)^{\frac{1}{n}-2}\frac{3}{2{\sigma_c}^2}S^{\mathbb{P}}_{ij}\frac{3S^{\mathbb{P}}_{kl}}{2S_{eq}} \\ = \Delta t\dot{\varepsilon}_0\left(\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}}\right)^{\frac{1}{n}-1}&\frac{3}{2\sigma_c^{iso}}\left(\left(\delta_{ik}\delta_{jl}-\frac{1}{3}\delta_{kl}\delta_{ij}\right)\mathbb{P}_{ijkl}+\left(\frac{1}{n}-1\right)\frac{3}{2{S_{eq}}^2}S^{\mathbb{P}}_{ij}S^{\mathbb{P}}_{kl}\right) \end{aligned} \tag{6.6}$$

Dans la suite de ce chapitre, on va utiliser le formalisme numérique développé depuis le début de ce manuscrit pour simuler les évolutions microstructurales d'un agrégat d'olivine soumis à une déformation.

6.2 A new finite element approach to model microscale strain localization within olivine aggregates

Cette section représente un travail en cours ayant vocation à être soumis dans une revue scientifique.

Abstract

This paper presents a new mesoscopic full field approach for the modelling of microstructural evolutions and mechanical behavior of olivine aggregates. The mechanical framework is based on a reduced crystal plasticity (CP) formulation which is adapted to account for non-dislocation glide strain accommodating mechanisms in olivine polycrystals. This mechanical description is coupled with a mixed velocity pressure finite element (FE) formulation through a classic CPFEM approach. The microstrutural evolutions, such as grain boundary migration and dynamic recrystallization, are also computed within a FE framework using an implicit description of the polycrystal through the level-set approach.

This numerical framework is used to study the strain localization, at the polycrystal scale, by different types of pre-existing shear zones for thermomechanical conditions relevant to laboratory experiments. We show that fine grain and crystallographic textured pre-existing bands allow for strain localization at the sample scale. Combining reduced grain size and crystallographic orientation permits to stronger localize strain which emphasis the importance of both microstructural characteristics on the mechanical behavior of the aggregate.

6.2.1 Introduction

Strain localization is of first importance in the development and evolution of a tectonic plate regime [Bercovici and Ricard, 2014; Tommasi et al., 2009]. Indeed, plate boundaries are rheological weak zones, localizing strain and allowing for tectonic plates to move with respect to each other as almost rigid blocs.
At the plate scale, the rheological behavior is mainly controlled by the upper mantle [Heron et al., 2016] which is the strongest layer composing the lithosphere. The strain localizing mechanisms are thus often studied regarding to the upper mantle rocks, which are mainly composed of olivine. Once localization is initiated, the positive feedback due to shear heating leads to strong rheological weakening [Duretz et al., 2019; Willis et al., 2019], however the microscale processes initiating this localization are still debated. Two main mechanisms are often invoked : the plastic anisotropy of olivine [Knoll et al., 2009] and the weak rheological behavior of fine grained olivine polycrystals compared to coarse grained aggregates [Braun et al., 1999]. Those two weakening processes are supported by several experimental works on olivine aggregates deformation showing that, both the development of strong olivine LPO [Hansen et al., 2012] and grain size reduction [Drury, 2005] severely reduce the rheological behavior and may cause strain localization. Shape preferred orientation (SPO) has also been proposed as a factor involving viscous anisotropy during olivine aggregate diffusion creep [Wheeler, 2010] and which potentially implies strain localization. However, the weakening intensity due to those type of processes is not straightforward to quantify experimentally.

Numerical simulations are great tools to study strain localization because of their capability to use well defined initial setups and to follow variables anywhere and at any time in the numerical sample. Nevertheless, numerical simulation results only represent the solutions of physical models of the studied phenomena. Thus, a large problematic of numerical simulations belongs to the type of physical descriptions of natural processes. Regarding micromechanical models, different approaches can be found in the state of the art, from 2D finite element (FE) viscous models coupled with grain size and accounting for grain size reduction and growth via front tracking methods [Gardner et al., 2017; Jessell et al., 2005], to 3D Fast Fourier Transform (FFT) method accounting for crystallographic orientations through a crystal plasticity (CP) - like framework without modeling any microstructural evolutions [Castelnau et al., 2008].

Here we present a global FE framework describing the mechanical behavior by a CP model in which we incorporate a relaxation mechanisms representing non dislocation glide strain accommodating mechanisms existent within olivine aggregates. The microstructural evolutions, including grain boundary migration (GBM) driven by capillarity and stored energy, solute drag and nucleation, are computed within the FE framework through the level-set (LS) approach. This whole numerical framework constitutes a global tool for the modeling of olivine polycrystal deformation and also allows to discriminate a creep regime controlled by grain interiors and by grain boundaries. This approach is then used to quantify the intensity of strain localization by a pre-existing shear zone. Different type of pre-existing shear zones are tested and compared with each other which brings new insights on the relative importance of microscale localizing features on the mechanical behavior of a given microstructure.

6.2.2 Full field modeling of olivine deformation and microstructural evolutions

In this section, we present the numerical framework used to model the olivine aggregate creep and the subsequent microstructural evolutions. First we present the CP model used to model dislocation creep of olivine. Then we show that a reduced crystal plasticity formulation could allow to account for other strain accommodating mechanisms in olivine aggregates. Finally we introduce the LS approach used to model microstructural evolutions such as grain boundary migration (GBM) and nucleation.
The succession of the different steps presented bellow during an increment of the full field modelling of dynamic recrystallization (DRX) is summarized by a flow chart presented in Fig.6.1.

6.2.2.1 Crystal plasticity

CP models generally propose to decompose the plastic deformation into a combination of contributions coming from the crystal slip systems. CP calculations allow to compute a mechanical behavior at a scale smaller than the grain scale and larger than the dislocation scale. Thus, in order to describe the mechanical behavior of a polycrystal, an homogenization scheme has to be used in combination with the CP computations. The homogenization technique used in this work is the crystal plasticity finite element method (CPFEM) [Van Houtte et al., 2005] in which each element of the FE mesh is considered as a crystallite [Sarrazola et al., 2020a]. The CP equations are then solved on each element of the mesh between each FE resolution. The P1+/P1 mixed velocity pressure finite element (FE) formulation used for the CPFEM homogenization allows to deal with elastic anisotropy and is presented in details within [Furstoss et al., 2020c].

6.2.2.1.a Numerical framework

The single CP model used here describes the stress-strain behavior of a material point within the crystal (material point crystal plasticity - MPCP) [Marin, 2006] through an incompressible plastic strain formulation. The linear elastic behavior of the material is described by the Hooke's law relating the elastic strain $\boldsymbol{\varepsilon_e}$ (Green - Lagrange strain tensor) to the stress $\boldsymbol{\sigma}$ (second Piola-Kirchhoff stress tensor) using the fourth order elastic constants matrix $\mathbf{C_e}$:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C_e}\boldsymbol{\varepsilon_e}. \tag{6.7}$$

The plastic velocity gradient $\mathbf{L_p}$ is expressed by a summation over the slip systems α through :

$$\mathbf{L_p} = \sum_{\alpha=1}^{\mathrm{N}bSlip} \dot{\gamma}^{\alpha} m^{\alpha} \otimes n^{\alpha}, \tag{6.8}$$

where m^{α} and n^{α} represent the slip direction and normal to glide plane respectively, $\otimes$ represent the dyadic product such as $m^{\alpha} \otimes n^{\alpha} = \mathbf{P^{\alpha}}$ where $\mathbf{P^{\alpha}}$ is the Schmidt tensor. The slip rate γ^{α} is determined using the following constitutive model composed by a flow rule and an hardening law. The classical power-law flow rule [Asaro and Needleman, 1984] is used here :

$$\dot{\gamma^{\alpha}} = \dot{\gamma_0^{\alpha}} |\frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}}|^{\frac{1}{m}} sign(\tau^{\alpha}), \tag{6.9}$$

where m is a material parameter, $\dot{\gamma_0^{\alpha}}$ is the reference slip rate, τ^{α} is the resolved stress computed using $\tau^{\alpha} = \mathbf{S} : \mathbf{P^{\alpha}}$ where : represents the double contraction and $\mathbf{S}$ the deviatoric stress. The critical resolved shear stresses (CRSS) τ_c^{α} evolve during the deformation according to the hardening constitutive model. The dislocation based hardening model considered here, first relates the total dislocation density ($\rho^{tot} = \sum_{\alpha=1}^{\mathrm{N}bSlip} \rho^{\alpha}$) to the CRSS through the Taylor equation [Taylor, 1934] :

$$\tau_c^\alpha = \tau_{c0}^\alpha + \psi\mu b^\alpha \sqrt{\rho^{tot}}, \tag{6.10}$$

where τ_{c0}^α is the CRSS within the (almost) undeformed material, μ is the shear modulus, b^α is the Burgers vector norm and ψ is the Taylor coefficient.
Then the hardening or softening of the material through the increase or decrease of the CRSS respectively, is computed by changing the dislocation density according to the slip rate of the considered slip system :

$$\dot{\rho^\alpha} = (K_1 - K_2\rho^\alpha)|\dot{\gamma^\alpha}|. \tag{6.11}$$

This expression is a variation of the Yoshie-Lasraoui-Jonas law [Laasraoui and Jonas, 1991] driving changes in dislocation density by, an hardening parameter $K_1 (mm^{-2})$ representing the multiplication of dislocation during deformation, and a softening parameter K_2 representing the restoration capability of the material through dislocation annihilation for instance.

6.2.2.1.b Application to olivine

The constitutive model presented above is used, in this work within a CPFEM context, to model the mechanical behavior of olivine aggregate dislocation creep at 1573K.
The linear elastic behavior accounts for the orthorhombic symmetry of the olivine crystal using the following elastic constants (in Voigt notation) [Isaak et al., 1989] :

$$\mathbf{C_e}(\mathrm{GP}a) = \begin{pmatrix} 290 & 55 & 60 & 0 & 0 & 0 \\ 55 & 170 & 65 & 0 & 0 & 0 \\ 60 & 65 & 210 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 55 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 70 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 68 \end{pmatrix}. \tag{6.12}$$

The slip systems used in this work are the ones commonly used within olivine deformation numerical modeling literature [Castelnau et al., 2010; Raterron et al., 2014]. Indeed, only dislocations with [100] and [001] Burgers vectors are considered and gliding within (100), (010), 110 and (001), (010), (011), $(0\bar{1}1)$, (021) planes respectively. It is worth mentioning that this list of slip system gets only three linearly independent slip systems which does not allow to respect the Von-Mises criterion requiring five independent slip systems to accommodate any plastic deformation.
The initial CRSS (τ_{c0}^α) are only discriminated for the slip systems with different Burgers vector and are computed using the dislocation dynamics computations of [Durinck et al., 2007b] which gives at 1573K, $\tau_{c0}^{[100]} = 22.7$MPa and $\tau_{c0}^{[001]} = 46.6$MPa. The power law flow rule (eq.6.9) $\dot{\gamma_0^\alpha}$ and m parameters are taken equal for all slip systems and worth $5e^{-3}s^{-1}$ and 0.1 respectively.
For the Taylor relationship (eq. 6.10) parameters, the shear modulus is taken equal to 80GPa and the Burgers vector norms to $b^{[100]} = 4.76$Å and $b^{[001]} = 5.99$Å. The Taylor parameter ψ for olivine aggregate ranges between 0.5 and 2.8 (review in [Durinck, 2005]), we choose here to take a intermediate value of 1.1.
Finally, the softening and hardening parameters K_1 and K_2 are taken to best reproduce experimental data, this calibration is presented below.

6.2.2.2 Reduced crystal plasticity

As mentioned above, the olivine slip systems do not allow to respect the Von-Mises criterion. In nature, this lack of linearly independent slip systems is compensated by other strain accommodating mechanisms such as dislocation climb [Gouriet et al., 2019b], diffusion creep [Mei and

Kohlstedt, 2000] or grain boundary sliding (GBS) [Hansen et al., 2011]. Numerically, the lack of slip systems may cause issues in the problem resolution. As an example, using CPFEM homogenization scheme with an unclosed flow surface implies that the elements in which none of slip system can be activated will deform elastically. The stress gradients between those type of element and neighboring elements in which plasticity is active are considerable and the FE resolution becomes cumbersome or even impossible. This issue is generally bypassed within olivine deformation numerical modeling by adding some artificial slip systems allowing to satisfy the Von-Mises criterion [Mameri et al., 2019]. Those dummy slip systems are added with very high CRSS and do not participate to the lattice rotation which permits to model the lattice preferred orientation (LPO) induced by dislocation glide only. An other alternative is to introduce a relaxation mechanism accommodating strain within the deformation space not spanned by the slip systems. This has been made for the modeling of olivine deformation within a VPSC framework [Detrez et al., 2015] and could be done within CPFEM context by using a reduced crystal plasticity approach [Maresca et al., 2016].

6.2.2.2.a Numerical framework

The main idea of the reduced CP is to decompose the plastic velocity gradient into a part coming from dislocation glide of the defined slip systems (as in eq.6.8) and a part representing the strain accommodated by a relaxation mechanism $\mathbf{L_{rel}}$ [Maresca et al., 2016] :

$$\mathbf{L_p} = \mathbf{L_{rel}} + \sum_{\alpha=1}^{NbSlip} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{P^{\alpha}}. \tag{6.13}$$

The computation of $\mathbf{L_{rel}}$ requires to define the part of the deformation space not covered by the slip system. For this the list of the different Schmidt tensors has to be expressed as a base composed by a set of linearly independent and orthonormal tensors $\mathbf{M^{\beta}}$ such as [Maresca et al., 2016] :

$$\sum_{\alpha=1}^{ns} \lambda^{\alpha} \mathbf{P^{\alpha}} = \sum_{\beta=1}^{N} \mu^{\beta} \mathbf{M^{\beta}}, \tag{6.14}$$

where λ^{α} and μ^{β} are non null real. It could be noticed that if all the slip systems are linearly independent $N = ns$ (in a general case $N > ns$). In fact, the base formed by these tensors represent the part of the deformation space in which the strain can be accommodated by dislocation glide. Thus, one can define a fourth order projector $\mathbb{P}$ allowing to project any stress tensor within the deformation space not spanned by the slip systems as [Maresca et al., 2016] :

$$\mathbb{P} = \mathbb{1} - \sum_{\beta=1}^{N} (\mathbf{M^{\beta}})^{\mathbf{T}} \otimes (\mathbf{M^{\beta}}), \tag{6.15}$$

where $\mathbb{1}$ is the fourth order identity tensor. It only remains to define the strain accommodated by the relaxation mechanism ε^{rel} in response to the projected deviatoric stress $\mathbf{S}^{\mathbb{P}} = \mathbf{S} : \mathbb{P}$ [Maresca et al., 2016] :

$$\mathbf{L_{rel}} = \dot{\varepsilon}^{rel} \frac{3}{2S_{eq}} \mathbf{S}^{\mathbb{P}}, \tag{6.16}$$

where $\dot{\varepsilon}^{rel}$ is the plastic strain rate of the relaxation mechanism and :

$$S_{eq} = (\frac{3}{2} \mathbf{S}^{\mathbb{P}} : \mathbf{S}^{\mathbb{P}})^{\frac{1}{2}}. \tag{6.17}$$

The simplest for the relaxation plastic strain rate is to take, similarly to the power law flow rule (eq.6.9), a Von-Mises type isotropic expression such as [Maresca et al., 2016] :

$$\dot{\varepsilon}^{rel} = \dot{\varepsilon}^{iso} = \dot{\varepsilon}_0 (\frac{S_{eq}}{\sigma_c^{iso}})^{\frac{1}{n}}, \tag{6.18}$$

where $\dot{\varepsilon}_0$ and n are two parameters and σ_c^{iso} is a critical stress for the activation of the relaxation mechanism (analogously to the CRSS).
As for the hardening or softening of the dislocation glide presented above, the strength of the relaxation mechanism can also evolve during the deformation. However this aspect will not be taken into account in this work (i.e. $\dot{\sigma}_c^{iso} = 0$).
It is worth mentioning that the relaxation mechanism, as formulated and introduced above, is not involved within the lattice rotation computation. Thus, the introduction of this mechanism should not impact directly the development of LPO. The only influence on the lattice rotation may be indirect, by minimizing the elastic rotation through the slightest activation of the elastic deformation regime.

6.2.2.2.b Application to olivine

In this work, the relaxation mechanism introduced by the above presented reduced CP is used to model the strain accommodating processes taking place in olivine aggregates excluding dislocation glide which is accounted for within the classic CP (section 6.2.2.1). Two main families of strain accommodating mechanisms are distinguished here, the ones taking place at grain interiors and the ones occurring at grain boundaries. The first one gathers the effect of dislocation climb [Gouriet et al., 2019b] and diffusion creep within grain interiors (i.e. Nabarro-Herring creep [Herring, 1950; Nabarro, 1948]) while the latter should represent mechanisms such as grain boundary sliding (GBS) [Hansen et al., 2011] and its variations (dislocation accommodated GBS [Wang et al., 2010], superplasticity [Hiraga et al., 2010]) and diffusion creep within grain boundaries (i.e. Coble creep [Coble, 1963]). Even if numerical solutions exist for the modelling of dislocation climb [Geers et al., 2014] and GBS [Wheeler, 2010], the use of a unique CPFEM framework may be suited for numerical efficiency [Sarrazola et al., 2020b] (as CPFEM is already numerically expensive). Thus, the parameters of the relaxation mechanism in its isotropic formulation (Eq.6.18) should reflect the relative importance within the aggregate deformation of the strain accommodating mechanisms compared to dislocation glide. As we choose to take the ε_0 and n parameters constant and equal to the parameters of the dislocation glide power law (Eq.6.9) $\dot{\gamma}_0^{\alpha}$ and m, the only parameter we can use to discriminate grain boundaries and interiors is the relaxation strength σ_c^{iso}.
For grain interiors, we choose a $\sigma_c^{iso,\mathrm{GI}}$ as small as possible to left unchanged the mechanical response of the monocrystal deformation simulations used to calibrate the hardening and recovery parameters K_1 and K_2 (see section 6.2.3.1.a), we get $\sigma_c^{iso,\mathrm{GI}} = 20\tau_{c0}^{[001]}$.
Several laboratory observations report an amorphization olivine around grain boundaries due to the application of stress [Andrault et al., 1995; Santamaria-Perez et al., 2016]. An hypothesis on the origin of strain accommodating mechanisms at grain boundaries in olivine may be related to this amorphization. The stress needed to amorphize a crystal can be seen, at first order, as the stress above which the lattice is no more stable. Ab initio calculations make it possible to compute an ideal shear/tensile stress (ISS/ITS) representing a critical stress, at 0K, above which the structure of a perfect crystal is no more stable and could change to another phase, which could be amorphous. The ITS/ISS computed for olivine [Gouriet et al., 2019a] show magnitudes relatively low and similar to the ones of Peierls stresses [Durinck et al., 2007a] almost corresponding to the CRSS at 0K. Thus, in this work we consider the strength of the relaxation mechanism at grain boundaries $\sigma_c^{iso,\mathrm{GB}} = \tau_{c0}^{[001]}$.
The width around interfaces in which the relaxation mechanism is considered as the one representing GBS (or other strain accommodating mechanisms at grain boundary) will be called the

mechanical grain boundary width in the following. It could be noticed that this width does not correspond to the chemical or physical grain boundary width. In fact, this width should represent the zone around grain boundary in which the mechanical behavior of the crystal is impacted by the presence of the boundary. Such a width has never been described before in olivine but its value can be taken close to the grain size under which the creep regime of the aggregate is controlled by grain boundaries. In the thermomechanical conditions considered in this work (1573K and strain rate of $10^{-5}s^{-1}$) this value is close to $10\mu m$ [Skemer et al., 2011]. Thus the mechanical grain boundary width will be taken to 4 elements with a mean mesh size of $3\mu m$.

Using the slip systems presented in section 6.2.2.1.b, the linearly independent and orthonormal tensors $\mathbf{M^\beta}$ used to compute the projector $\mathbb{P}$ (see Eq.6.15) are :

$$\mathbf{M^1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{M^2} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{M^3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.19}$$

6.2.2.3 Microstructural evolutions

The microstructural evolutions of the olivine aggregate during deformation are modelled using the level-set (LS) framework [Bernacki et al., 2009; Furstoss et al., 2020a]. This formalism allows describing the polycrystal using signed distance functions (LS functions) representing the distance to the grain boundaries and defined positive inside the grain they represent and negative elsewhere. In order to reduce the number of LS functions needed to describe the aggregate, we use global LS (GLS) functions representing several non-neighboring grains [Scholtes et al., 2015]. The displacement of the GLS are computed within a 3D FE framework using isotropic mesh composed of P1 tetrahedral elements with a typical mean size of $3\mu m$. After 10% of macroscopic deformation we use isotropic remeshing in order to get element with good quality. The initial polycrystals are generated using a Voronoï-Laguerre tesselation algorithm allowing to respect a precise grain size distribution [Hitti et al., 2012].

6.2.2.3.a Grain boundary migration

Modelling grain boundary migration (GBM) within a LS framework is equivalent to moving the GLS functions according to the equations of GBM. In this work we use a capillarity and stored energy driven GBM accounting for solute drag such as the grain boundary velocity $\vec{v}$ can be expressed as :

$$\vec{v} = \mathrm{M}(-\gamma\kappa + \tau\Delta\rho - \mathrm{P}_d)\vec{n}, \tag{6.20}$$

where $\vec{n}$ and κ are the grain boundary outward unit normal and sum of main curvatures respectively, M and γ are the olivine/olivine grain boundary mobility and interfacial energy respectively. The latters are considered as constants and are taken as $2.9\cdot10^{-2}mm^4.\mathrm{J}^{-1}.s^{-1}$ and $1\cdot10^{-6}\mathrm{J}.mm^{-2}$ respectively according to [Furstoss et al., 2018]. $\tau = 1.3\cdot10^{-11}\mathrm{J}.mm^{-1}$ [Duringck, 2005] and ρ are the dislocation line energy and density, respectively. P_d is the solute drag pressure which can be written as :

$$\mathrm{P}_d = \frac{\alpha c_0 |\vec{v}|}{1 + v^2\beta^2}, \tag{6.21}$$

where c_0 is the impurity concentration taken as 200ppm, α and β are the solute drag parameters and are taken as $3\cdot10^8\mathrm{J}.s.mm^{-4}$ and $4.8\cdot10^8 s.mm^{-1}$, respectively, according to [Furstoss et al., 2020b].

The FE strong formulation for the displacement of the GLS functions Φ_i is obtained using the same semi-explicit first order time discretization presented in [Furstoss et al., 2020b] in addition with the accounting of stored energy :

$$\begin{cases} \mathscr{M}\frac{\Phi_i^{t+\Delta t}}{\Delta t} - \mathrm{M}\gamma\Delta\Phi_i^{t+\Delta t} + \vec{v}_e\vec{\nabla}\Phi_i^{t+\Delta t} = \mathscr{M}\frac{\Phi_i^t}{\Delta t}, \\ \vec{v}_e = \mathrm{M}\tau\Delta\rho\vec{n}, \end{cases} \tag{6.22}$$

where Δt is the timestep and $\mathscr{M}$ is a term (equivalent to a mass term by analogy with the heat equation) permitting to account for the solute drag effect [Furstoss et al., 2020b]. The difference of dislocation density across grain boundaries $\Delta\rho$ is computed by averaging the dislocation density per interface following the methodology presented in [Ilin et al., 2018]. The boundary conditions applied to GLS functions are null Neumann ones (i.e. $\vec{\nabla}\Phi\cdot\vec{n}_\Gamma = 0$ with $\vec{n}_\Gamma$ the unit normal to boundaries) which imposes to GLS functions to evolve toward an orthogonal position to the calculation domain boundaries.
After each GLS transport step, a reinitialization procedure is applied to the GLS functions in order to restore their metric properties (i.e. $||\vec{\nabla}\Phi|| = 1$) at least in a thin layer around interfaces. This reinitialization step is performed using the direct approach proposed by [Shakoor et al., 2015].
The volume swapped during GBM is tracked and assign to it a low dislocation density $\rho_0 = 10^5 mm^{-2}$ corresponding to the non-harden material. The lattice orientation in the elements swapped during GBM is defined as the orientation of the neighbor element belonging to the same grain and getting the minimal dislocation density (i.e. the less deformed one).

6.2.2.3.b Dynamic recrystallization

Olivine aggregates evidence both continuous (e.g. sub-grain rotation) [Poirier and Nicolas, 1975] and discontinuous (e.g. nucleation-growth) [Tommasi et al., 2017] dynamic recrystallization depending on termomechanical conditions. In the LS framework used here, only the discontinuous DRX is considered by inserting nuclei and make them growth. Potential nucleation sites are not restricted at zones around grain boundaries but in the whole aggregate. The nucleation is accounted for within the LS framework by simply modify some well chosen GLS functions, or if none GLS function can receive the nucleus, by adding a new GLS function [Scholtes et al., 2016].
Nucleation criteria are generally defined as either large orientation or dislocation density gradients or high dissipated energy or dislocation density. In the present work the nucleation criterion is only based on a critical dislocation density ρ^{cr} above which the nucleation probability is non-null. This critical dislocation density is computed in a way permitting to respect the Bailey-Hirsch criterion [Bailey and Hirsch, 1962] which relate the critical radius for a spherical nuclei R^{Nucl} to balance the capillarity force by the force due to the difference of stored energy :

$$\rho^{cr} = \omega\frac{2\gamma}{\mathrm{R}^{Nucl}\tau}, \tag{6.23}$$

where ω is a security factor taken as 2.
The nucleus radius is computed following the piezometric relationship defined by [Karato et al., 1980] and [Van der Wal et al., 1993] :

$$\sigma(\mathrm{MP}a) = 15.10^2\mathrm{R}^{Nucl^{-0.8}}(\mu m), \tag{6.24}$$

in combination with the diffusion creep law [Hirth and Kohlstedt, 2003] in which the grain size is replaced by the nucleus size :

$$\dot{\varepsilon} = \mathrm{A}\sigma\mathrm{R}^{Nucl^{-3}}e^{-\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{RT}}}, \tag{6.25}$$

where R is the perfect gas constant, T is the temperature, $\dot{\varepsilon}$ is the strain rate, A = 1.5MP$a^{-1}.mm^3.s^{-1}$ and E = 375$kJ.mol^{-1}$. Combining Eq. 6.24 and 6.25 gives the nucleus radius as a function of the strain rate (that is imposed in our simulation) and Eq. 6.23 gives the critical dislocation density.

The nucleation rate $\dot{V}$, representing a nuclei volume per time unit, is computed using the following expression [Maire et al., 2017] :

$$\dot{V} = K_g \phi \Delta t, \tag{6.26}$$

where ϕ represents the total boundary area surrounding the aggregate volume verifying $\rho > \rho^{cr}$ and $K_g(m.s^{-1})$ is probability coefficient which has to be calibrated on experimental data (see section 6.2.3.1.b).

As for the volume swapped during GBM, the low dislocation density ρ_0 is affected in the zones where nuclei have appeared while the nuclei orientations are defined as the initial orientations of the parent grains.

6.2.3 Material parameters and creep regime

In this section, we present the identification of the different material parameters used in this framework on experimental data. First, the hardening and recovery parameters K_1 and K_2 (Eq.6.11) are identify using monocrystal compression test. Then we calibrate the recrystallization rate K_g using experimental results on olivine aggregates simple shear. Finally we show that our numerical framework is able to capture two different creep regimes, one in which the deformation is accommodated by the bulk material (which could be the dislocation creep) and one controlled in majority by grain boundary strain accommodating mechanism.

6.2.3.1 Material parameters calibration

The different material parameters presented above and adjusted bellow are summarized in table 6.1.

CP parameters	$\dot{\gamma}_0$	m	$\tau_{c0}^{[100]}$	$\tau_{c0}^{[001]}$	$b^{[100]}$	$b^{[001]}$	Ψ	K_1	K_2
Units	s^{-1}		MPa	MPa	mm	mm		mm^{-2}	
Value	5.10^{-3}	0.1	22.7	46.6	$4.76.10^{-7}$	$5.99.10^{-7}$	1.1	$5.6.10^{8}$	35
Reduced CP parameters	$\dot{\epsilon}_0$	n	$\sigma_c^{iso,GI}$	$\sigma_c^{iso,GB}$					
Units	s^{-1}		MPa	MPa					
Value	5.10^{-3}	0.1	932	46.6					
Microstructural evolution parameters	M	γ	τ	α	β	c_0	ρ^{cr}	R^{Nucl}	K_g
Units	$mm^4.J^{-1}.s^{-1}$	$J.mm^{-2}$	$J.mm^{-1}$	$J.s.mm^{-4}$	$s.mm^{-1}$	ppm	mm^{-2}	mm	$mm.s^{-1}$
Value	$2.9.10^{-2}$	10^{-6}	$1.3.10^{-11}$	3.10^{8}	$4.8.10^{8}$	200	$2.68.10^{7}$	$1.15.10^{-2}$	$2.5.10^{-6}$

TABLEAU 6.1 – Values of the different material parameters used in this work (temperature of 1573K and strain rate of $10^{-5}s^{-1}$).

6.2.3.1.a Recovery and hardening

Monocrystal deformation experiments seem the most appropriate mechanical tests to calibrate the hardening and recovery parameters K_1 and K_2 because those tests do not involve grain boundaries and thus permit to consider only the deformation accommodated by dislocation creation and motion. The experimental data selected for this calibration are the ones of [Phakey et al.,

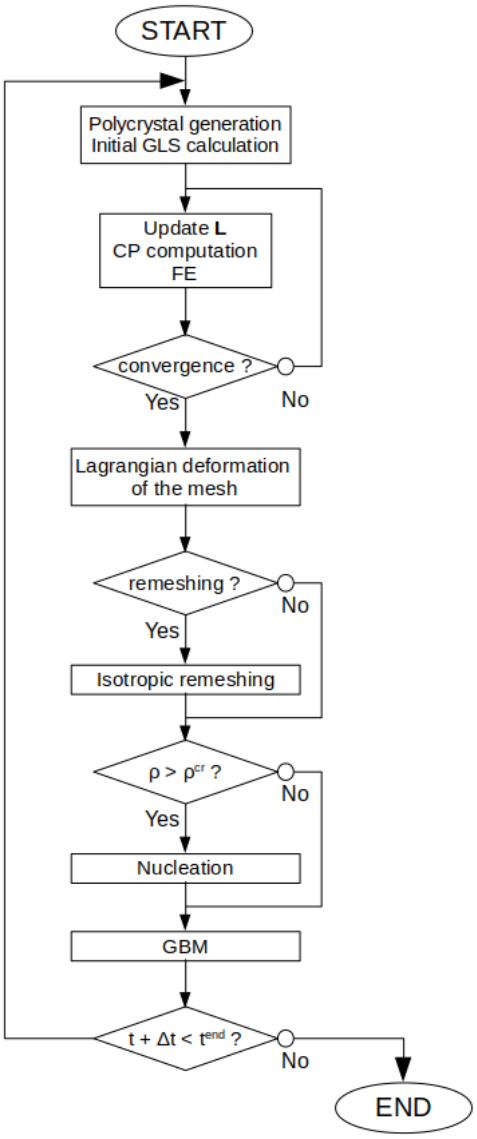


FIGURE 6.1 – Scheme describing the different steps of a resolution increment.

1972] in which three different monocrystal orientations with respect to the compression axis are used. The compression tests are performed for this three orientations at 1073K and 1273K. In order to compare the strain stress curves between experiments and simulations, we use the macroscopic strain and we compute the equivalent stress σ_{eq} as :

$$\sigma_{eq} = \frac{\int_{\Omega_{2D}} \sigma_{yy} dS}{S}, \tag{6.27}$$

where $\vec{y}$ is the compression direction, Ω_{2D} represents the cross section (normal to $\vec{y}$) of the sample in its middle and S represents the surface of this cross section. As in experiments, we use a cylinder sample with diameter of 3mm and 4mm length and a strain rate of $10^{-5}s^{-1}$. The upper face of the cylinder is moved at a constant velocity in the compression direction (with respect to the strain rate) and the displacements in the other directions are imposed as null. The movements of the lower face in the compression direction are imposed to zero while the displacements in the other

directions are left free. Finally the displacements of the other face are also left free.

The K_1 and K_2 parameters are considered only dependent on temperature and are calibrated by selecting the values permitting to best reproduce the experimental strain stress curves for the three orientations at a given temperature. The identification of the best fitting K_1 and K_2 is performed by using an optimization software, called MOOPI [Chenot et al., 2011], based on a genetic algorithm permitting to explore the parameter space by achieving random mutations in order to ensure that the proposed parameters do not represent a local minimum of the cost function (which represents the quality of the parameters with respect to the expected results). The strain stress curves of the best fitting hardening and recovery parameters are presented in figure 6.2.

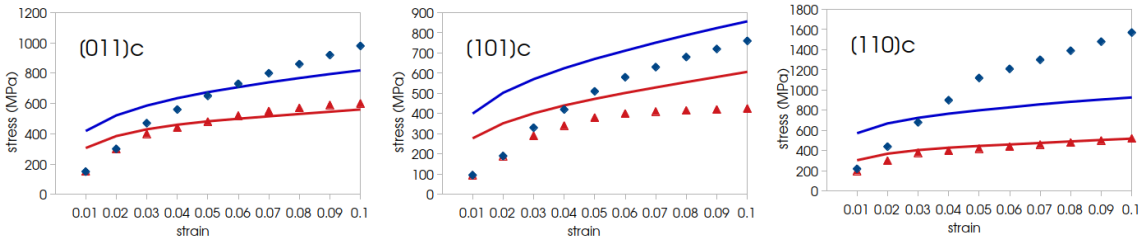


FIGURE 6.2 – Best fitting strain stress curves for hardening and recovery parameters calibration. Solid lines represent the simulated mechanical behavior while dots represent experiments of [Phakey et al., 1972]. For the three different orientations the colors represent the temperature of the compression test, 1073K (blue) and 1273K (red).

The simulated strain stress curves show similar trends than the experimental ones excepted for the $[110]c$ test at 1073K in which some experimental issues have been reported [Phakey et al., 1972]. The values of the hardening and recovery parameters are linearly extrapolated in order to get their values at 1573K which is the temperature used in the following. At 1073K the best fitting K_1 and K_2 are $9.6 \cdot 10^8 mm^{-2}$ and 10 respectively, at 1273K they are worth $8 \cdot 10^8 mm^{-2}$ and 20 respectively, and thus at 1573K, $K_1 = 5.6 \cdot 10^8 mm^{-2}$ and $K_2 = 35$.

6.2.3.1.b Dynamic recrystallization rate

For the adjustment of the dynamic recrystallization rate K_g, we seek to reproduce simple shear experiment of polycrystalline olivine performed by [Zhang et al., 2000]. For this, we use a computational domain of $0.15 \times 0.15 \times 0.1 mm$ initially composed by 17 grains having a mean radius size of $31.6 \mu m$ (Fig.6.3).

To deform the sample in simple shear we impose null displacement in the shear direction and normal to shear plane on the lower face of the sample while the other direction is left free. The upper face is displaced at constant velocity in the shear direction, no movements are authorized in the direction normal to the shear plane and the third direction is left free. The left and right faces are displaced in the shear direction at a constant velocity corresponding to the linear interpolation between the upper and lower face velocity in the shear direction. As for the other faces, the movements in the direction normal to shear plane are set to zero while in the other direction nothing is imposed. Finally, the movements of the front and back faces are left free in all directions.

As in experiments [Zhang et al., 2000], the sample is deformed at 1573K and $10^{-5} s^{-1}$. Multiple simulations with different K_g values are performed in order to obtain the 20% of dynamically recrystallized grain fraction after 60% of shear strain measured within experiments. Using a K_g value of $2.5 \cdot 10^{-6} mm.s^{-1}$ allows for having 26% of dynamically recrystallized grain fraction after 60% of shear strain which is the best fit obtained (Fig.6.3).

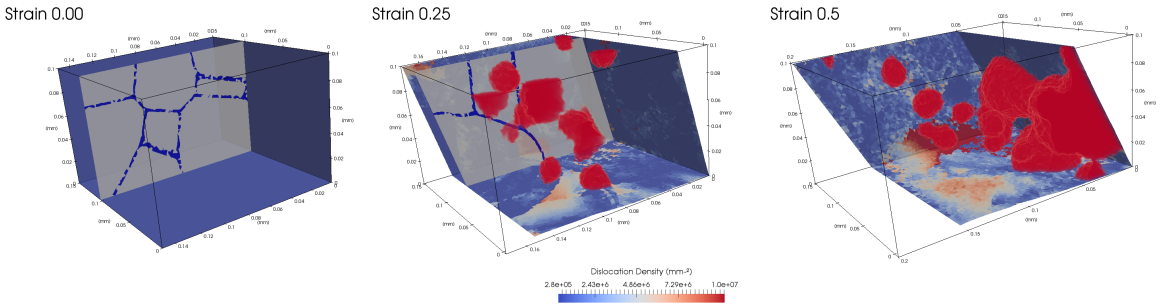


FIGURE 6.3 – Full field simulation of olivine aggregate deformed in simple shear for the best fitting K_g value and for different shear strain. Within the slice is represented the maximum of GLS functions which permits to visualize grain boundaries. The red volumes represent the dynamically recrystallized grains while the color scale represents the total dislocation density within the polycrystal.

6.2.3.2 Full field modeling of olivine creep regime

In the full field framework presented above, the grain boundaries and interiors contributions to the whole deformation of the polycrystal can be followed during the mechanical test. To do this, the local equivalent strain (ε) can be computed from the velocity gradient using $\varepsilon = \sqrt{\frac{2}{3}\mathbf{L}:\mathbf{L}}$, and once integrated upon the whole domain Ω separated into two components such as :

$$\int_{\Omega} \varepsilon dV = \int_{\Omega_{GB}} \varepsilon dV + \int_{\Omega_{GI}} \varepsilon dV, \tag{6.28}$$

where Ω_{GB} and Ω_{GI} represent the part of the microstructure in which the relaxation mechanism represents the grain boundary and grain interiors strain accommodating mechanisms respectively (see section 6.2.2.2.b).
During the deformation, DRX occurs and then implies a mean grain size reduction through nucleation of new small grains. Following the different terms of equation 6.28 during grain size reduction shows that for mean grain size superior to $\approx 20\mu m$ the deformation of the polycrystal is mainly controlled by strain accommodating mechanisms at grain interiors (Fig.6.4).
As strain goes further, mean grain size decreases under $20\mu m$ and deformation of the aggregate is controlled in majority by grain boundary strain accommodating mechanisms (Fig.6.4). The transition mean grain size between grain boundary and grain interior controlled creep find from this analysis is in accordance with deformation maps of olivine [Skemer et al., 2011] obtained from laboratory experiments (Fig6.4).
Those observations allows to argue that this framework is at least capable to discriminate two different creep regimes, one monitored by grain boundary strain accommodating mechanism and one mainly controlled by grain interiors.
It is worth noticing that this feature is mainly due to the increase of grain boundary volume with the decrease of mean grain size due to DRX. Indeed, the mechanical grain boundary width chosen for this study (see section 6.2.2.2.b) implies that for an aggregate with grain radii inferior to $\approx 10\mu m$, the majority of the aggregate behaves as grain boundary (i.e. the strain accommodating mechanism is the one of grain boundary).

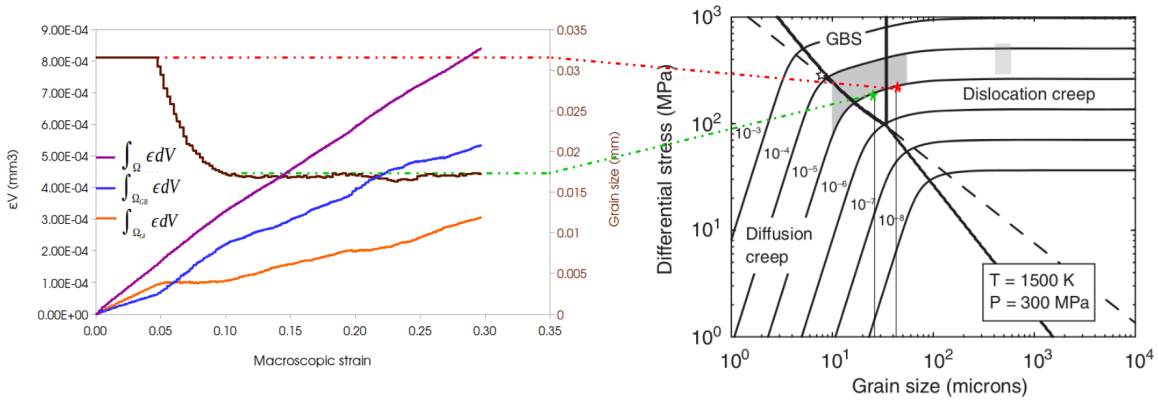


FIGURE 6.4 – Left : equivalent strain integrated (see Eq.6.28) over the whole polycrystal (purple), grain boundaries (blue) and grain interiors (orange), and integrated over time. Mean grain size evolution during deformation (brown) and correspondence in terms of thermomechanical conditions and mean grain size in an olivine deformation map (rigth) from [Skemer et al., 2011].

6.2.4 Results

In the following, the presented numerical framework is used to study the strain localization on different sorts of pre-existing microscale shear zones. For this we use computational domains of $0.69 \times 0.25 \times 0.35 mm$ deformed in extension and we adopt a shear zone geometry similar to one use in [Tommasi et al., 2009] such as the shear zone is a band oriented at 45° to the extension direction (Fig.6.5).

The left face of the domain is displaced at a constant velocity in the extension direction imposing a macroscopic strain rate of $10^{-5} s^{-1}$ while the displacements in the other directions are imposed to be null. The right face cannot move in the extension direction but is free in the other ones. The movements of the other faces are left free in all directions.

The simulations are performed at a temperature of 1573K and using the parameters described before (see table 6.1).

6.2.4.1 Initial setups

Five different models are tested here, one with no pre-existing shear zone which will serve as a reference case and four with different shear zone natures.

The first considered shear zone consists in a strongly textured (with large lattice preferred orientation) zone in which grains have orientations maximizing the dislocation plastic strain rate (Eq.6.8) while outside of the shear zone, grains have random orientations (Fig.6.5).

The second shear zone correspond to an ultrafine grained zone in which the mean grain size is $\approx 10 \mu m$, while elsewhere the mean grain size is of $\approx 30 \mu m$. Within the all polycrystal, orientations are chosen randomly (Fig.6.5).

The third one is composed by strongly elongated grains where the maximal elongation direction is the shear zone direction (45° to the extension direction). In this setup, called SPO (shape preferred orientation) shear zone in the following, the grain orientations are randomly selected (Fig.6.5).

The last shear zone consists in a combination of the two first ones such as the zone is composed of ultrafine grain with orientations maximizing the dislocation plastic strain rate. Elsewhere, the grain size are $\approx 30 \mu m$ and their orientations are randomly selected (Fig.6.5).

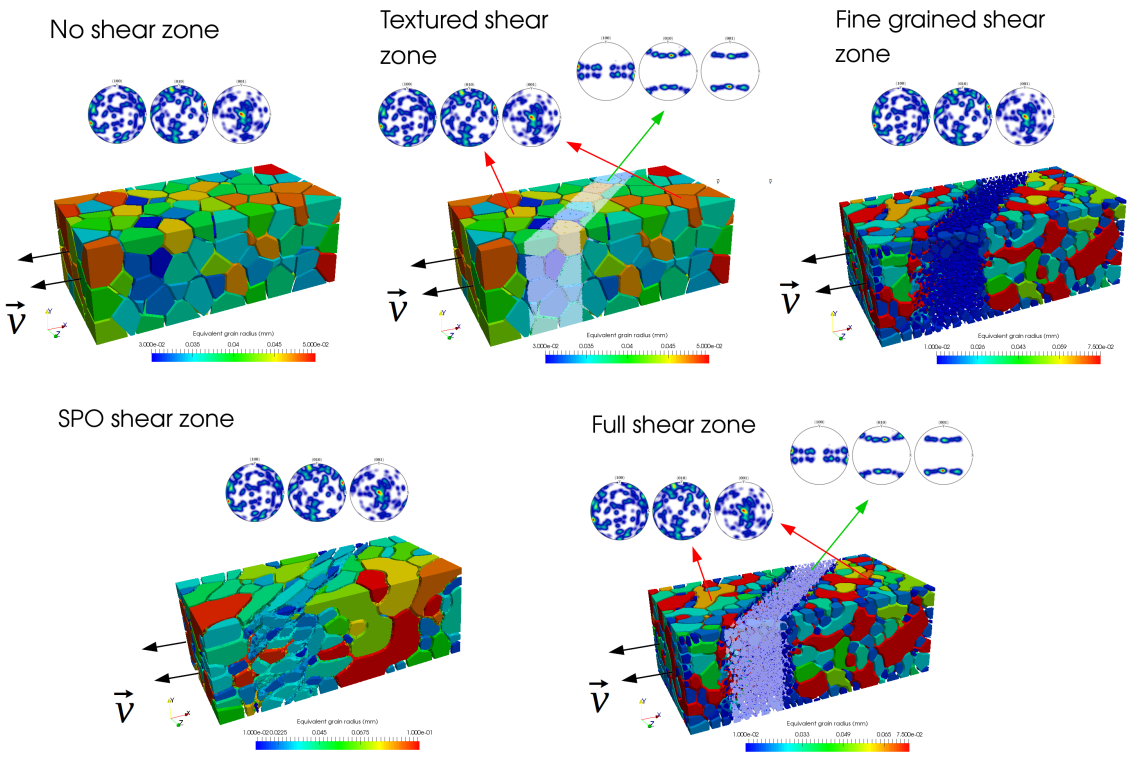


FIGURE 6.5 – Initial setups of the performed simulations, color scale represent equivalent grain radius. Orientations within the different zones are represented through pole figures computed using MTEX [Mainprice et al., 2015].

6.2.4.2 Full field results

Strain localization in the numerical sample can be examined by tracking the strain accumulated in the different part of the polycrystal, the inner part forming the shear zone and the outer parts (Fig.6.6).

For the case in which no specific shear zone has been imposed, the inner part accommodate quiet more strain than the outer parts. In this case, the strain rate is mainly located at grain boundaries in the whole microstructure and DRX occurs in the sample where dislocation density is the highest (Fig.6.7a). For the textured shear zone case, strain localization in the inner zone in more pronounced (Fig.6.6). Moreover, DRX through nucleation events occurs preferentially within the shear zone as well as on the outskirts of the shear zone (Fig.6.7b). Here again, strain rate seems to be mainly located at grain boundaries but more precisely at the interface between well oriented (for dislocation glide) and bad oriented grains. For the fine grained shear zone, the inner part of the sample accumulate the majority of the deformation (Fig.6.6). A strong and continuous shear band (with high strain rate) in the inner zone is observed while nucleation also occurs preferentially around and within the shear zone (Fig.6.7c). For the SPO model, the partition of deformation between the inner and the outer zones is nearly equivalent to the textured shear zone model, however the outer zones deform less (Fig.6.6). The strain rate pattern is different from the fine grain case, in fact we can observe the formation of multiple shear bands parallel to the initial shear zone and located around this area (Fig.6.7d). As for other models, the DRX events are mainly located near the shear zone. For the shear zone combining small grain size and crystallographic texture, the strain accumulated by the inner part is almost equivalent to the one of the small grain size

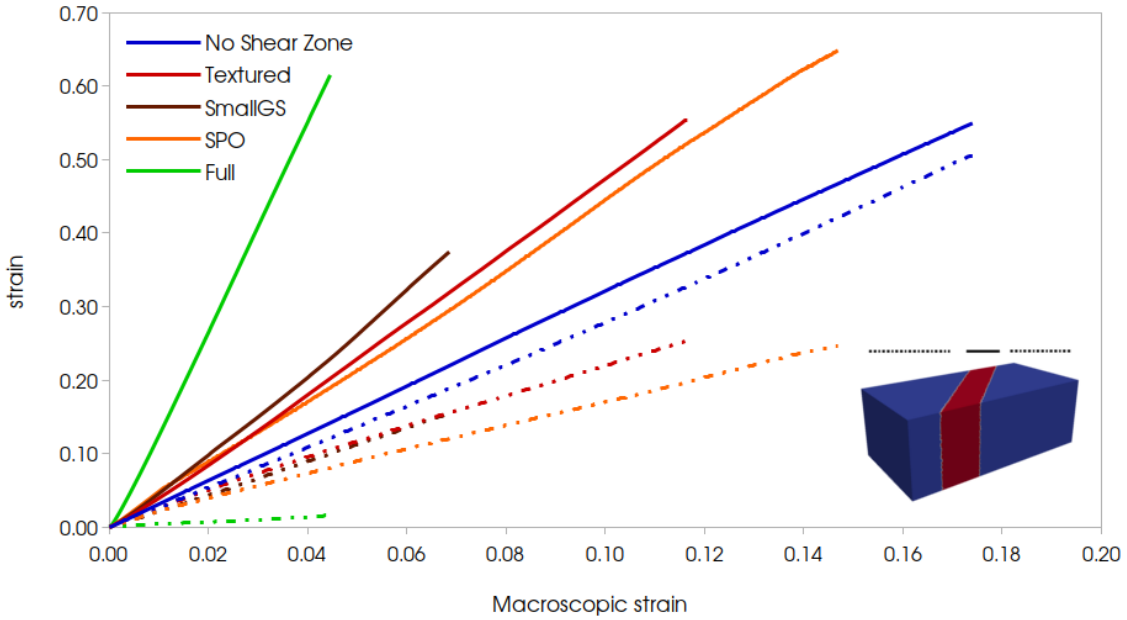


FIGURE 6.6 – Cumulated average strain for the inner (solid lines) and outer (dashed lines) parts of the sample for the different type of pre-existing shear zone.

shear zone model. Nevertheless, the strain accumulated by the outer parts is much lower than for the other cases (Fig.6.6). The pattern of strain rate distribution within the sample exhibit an abrubt transition between the inner zone strongly deformed and the outer parts mainly undeformed (Fig.6.7e),

Polycrystals also undergo grain growth and/or grain size reduction during extension test, 3D microstructures are presented in figure 6.8. For textured and no shear zone models, the mean grain size are nearly constant during the deformation (Figs.6.8a and 6.8b). For small grain size and "full" shear zone models the mean grain size evolutions are mainly equivalent, the grain sizes in the outer part are consuming the grains of the inner part (Figs.6.8c and 6.8e). For the SPO model, the grain sizes within the outer parts are nearly constant while the grain of the inner part, initially elongated are becoming more equiaxed (Fig.6.8d).

6.2.5 Discussion

Within the different full field models presented in the above section, the development of a strain localizing area and its characteristics are strongly related to the nature of the pre-existing shear zone.

First, all models exhibit strain localizing area excepted the one in which no initial shear zone has been imposed. Even if in this case, the inner part of the aggregate deform more than the outer parts, the strain is mainly distributed along all grain boundaries without exhibiting a strain localizing band at the sample scale. This type of feature could have been expected as a consequence of grain size reduction through DRX, for instance near a well oriented grain undergoing strong dislocation glide deformation. However, this type of spontaneous development of a weak area has not been observed in our models and will be discussed later.

Within the four models with a pre-existing weak zone, a strain localizing band is developed during the deformation of the sample. Depending on the initial shear zone nature, the mechani-

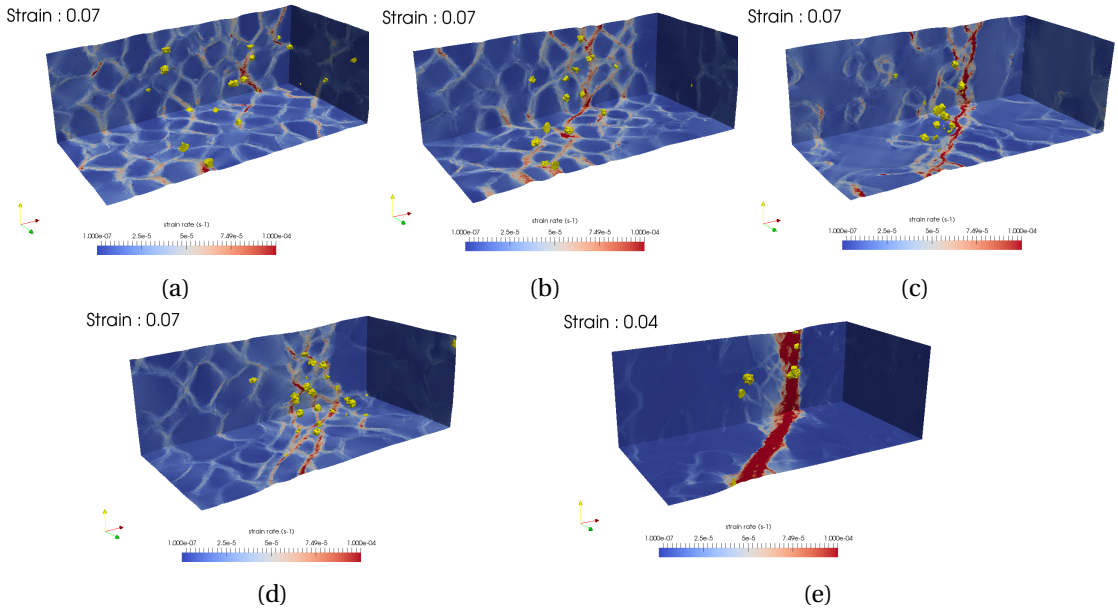


FIGURE 6.7 – Samples after 7% of macroscopic deformation for, no pre-existing 6.7a, textured 6.7b, small grain size 6.7c, SPO 6.7d shear zones and after 4% of macroscopic strain for textured plus small grain size shear zone 6.7e. Colors indicate the strain rate intensity and yellow volumes represent the dynamically recrystallized grains.

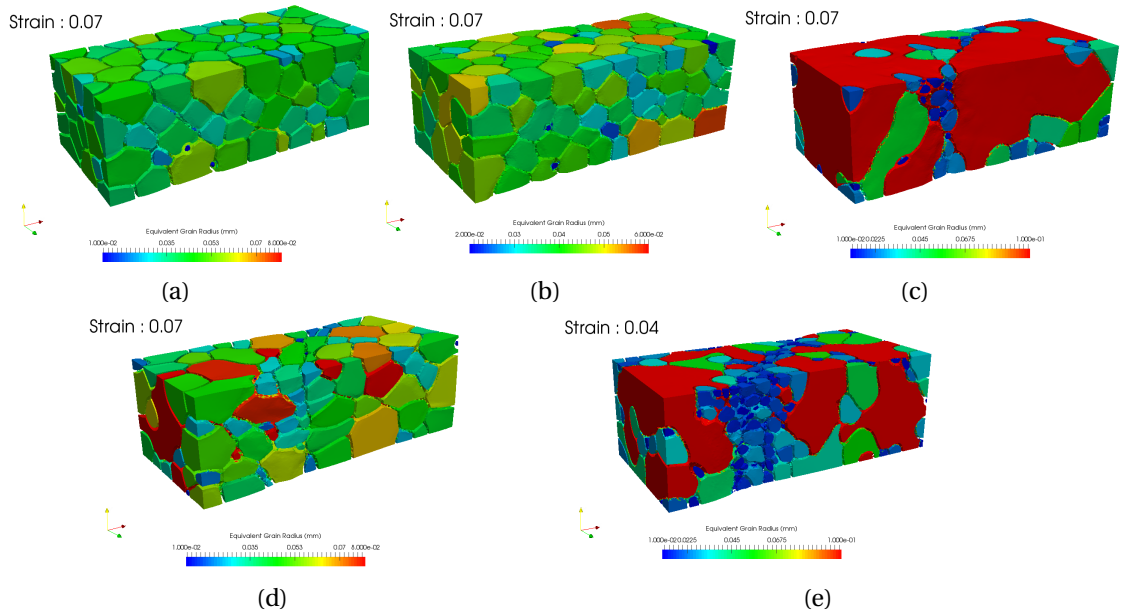


FIGURE 6.8 – 3D view of the microstructure (colors represent equivalent grain radius) for, no pre-existing 6.8a, textured 6.8b, small grain size 6.8c, SPO shear zones 6.8d after 7% of macroscopic deformation, and for textured plus small grain size shear zone 6.8e after 4% of macroscopic deformation.

cal process enhanced for the strain localization is different. Indeed the crystallographic textured shear zone was expected to localize strain through the plastic anisotropy of olivine due to the lack of slip systems and the heterogeneity of CRSS. This enhancement of the dislocation glide within the textured shear zone is highlighted by the several nucleation events within and near the shear zone. The SPO and small grain size shear zone models were expected to localize strain by increasing the total grain boundary volume within the shear zone. The heterogeneity of the relaxation mechanism strength between grain boundary and grain interior is then the feature enhanced for strain localization in those cases. The intensity of this localization seems to be controlled by the grain boundary density within the shear zone. In fact the grain boundary volume within the shear zone in SPO model is lower than the small grain size model which gives a stronger strain localization. The relative importance of the two features permitting to localize strain (i.e. dislocation glide anisotropy and relaxation mechanism strength heterogeneity) seems to be nearly equivalent as the intensities of strain accumulated within the shear zone are almost equal for the three models (i.e. textured, small grain size and SPO). The "full" shear zone model, which is characterized by small and well oriented grains, shows that the two mechanical processes, above mentioned, capable to localize strain can act together resulting in a strong strain localization. This was expected regarding to our numerical formalism as the introduction of the relaxation mechanism does not inhibit the contribution of dislocation glide to the deformation. However, the plastic anisotropy due to the lack of slip system is severely reduced by the introduction of this relaxation mechanism and this as much as its strength is small (such as within grain boundary). Nevertheless, the strain localization in this model seems to sum the contributions of both mechanisms such as we can infer from this result that the plastic anisotropy due to the lack of slip system is small compared to the one due to the heterogeneity of CRSS.

Within all models with an initial shear zone, nucleation events are mainly located inside and near the inner part of the sample. From this observation, one can expect that mean grain size within the shear zone should decrease and for textured and SPO models it could lead to the formation of a fine grain band. However for the latter models and for the model without pre-existing shear zone, the mean grain size is almost constant during the deformation and in fact, a large part of the nuclei are shrinking few increments after their apparitions. For the two other models, even if nucleation events are also located in majority inside the shear band, the inner mean grain size quickly increases as grains within the shear zone undergo strong grain growth. This could be explained by the high dislocation densities within those grains due to their strong deformation. Thus the grains of the outer parts, which are much less deform (implying a high driving pressure for GBM from difference in stored energy), are consuming the grains of the inner part. Thus, none of our models predicts neither the development nor the maintaining of a fine grain zone (mylonite-like). Several explanations can be provided to enlighten this feature.

First, the nuclei shrinking can be linked to a disequilibrium between the driving forces for GBM, the capillarity force tends to shrink nuclei while difference in stored energy leads to their growth. The shrinking of nuclei is then characteristic of a too weak difference of stored energy. On this point our constitutive model is tainted of uncertainties because the dislocation density levels are strongly related to the Taylor coefficient ψ (see section 6.2.2.1.b). In fact, for a same CRSS value, multiple (K_1, K_2, ψ) triplet are possible but involving different dislocation density levels. For olivine the value of the Taylor coefficient from the state of the art ranges from 0.5 to 2.8 which results in very different dislocation density levels. The ψ value chosen for this study could thus be to high and gives to low dislocation densities which results in an enhanced nuclei shrinking.

A second possible explanation could be inferred from the continuous nature of the DRX in olivine. In fact, our models have considered discontinuous DRX through nucleation events while in nature, olivine DRX also occurs through continuous DRX mechanisms such as sub-grain rotation [Poirier and Nicolas, 1975]. In this case, the sub-grain is surrounded by low angle grain boundaries,

which generally have a much lower reduced-mobility (Mγ product) than high angle grain boundary [Humphreys and Hatherly, 2012]. This low reduced-mobility implies slow GBM even with high driving pressure. Thus the sub-grains have a longer persistence within the microstructure. Moreover, if the sub-grains are persistent and are located near to each other, the capillarity force (making them shrink in our models) could be reduced and may allow the development of a fine grain zone.
A last explanation could be that the thermomechanical conditions used for those models do not allow to develop and/or self maintain a fine grain zone. In fact, the typical microstructures representative of high temperature deformation do not exhibit fine grain bands which is much more an intermediate or low temperature microstuctural feature. The last explanation could be tested using our full field frameworks at lower temperatures. Nevertheless, the material parameters and particularly the nucleation rate K_g is known to be strongly sensitive to temperature. Its dependency with temperature should then be investigated using a set of experimental data. The same type of comments can be addressed to those models regarding to their relevancy within a natural context. Indeed, the thermomechanical conditions used in this work are not representative of the upper mantle ones in terms of temperature and strain rate. For those type of applications, the material parameters should be calibrated or estimated using constraints from natural objects.

6.2.6 Conclusion

In this work, we have presented a full field approach for the modelling of deformation and DRX within olivine aggregates. The mechanical frameworks, based on a reduced CP formulation adapted for the specificities of olivine is able to capture creep regimes controlled by both grain boundaries (e.g. GBS) and grain interiors (dislocation creep). The LS approach coupled with the CP framework permits to model microstructural evolutions such as GBM and DRX.
Using this framework, the interdependence between the microstructural features and the mechanical behavior of olivine aggregates has been highlighted. By studying strain localization at the polycrystal scale by pre-existing shear zones, we have shown that the formation, the intensity and the shape of the developed strain localizing zones are dependent on the nature of the initial shear zone. Particularly, our models show that the intensity of strain localization by a crystallographic textured and a small grain size shear zones are nearly equivalent while these intensities are added when the shear zone is composed by textured small grains. These results underline the importance of taking into account the microstructural characteristics in the rheology of the lithosphere, and not only the mean grain size or LPO, as these two characteristics affect the mechanical behavior with the same intensity and cumulate with each other.
Future works will be dedicated to the enlargement of the material parameters range of calibration which will permit to study the comportment, in terms of microstructural evolutions and mechanical behavior, of olivine aggregates within lithospheric thermomechanical conditions.

6.3 Limites et discussion

Une des difficultés principales rencontrée dans le travail présenté ci dessus a été la calibration de la vitesse de nucléation K_g. Le problème majeur venait du fait que, pour les valeurs de K_1 et K_2 utilisées dans le chapitre 5 et la taille de germe respectant les piézomètres (section 6.2.2.3.b), la densité de dislocation critique n'était que rarement atteinte dans le polycristal et lorsqu'elle l'était, elle ne l'était que localement. Ainsi, la force motrice pour la migration de joint de grains dérivant de l'énergie stockée (sous forme de dislocations) n'était pas suffisante pour contrebalancer la force capillaire et la majorité des germes disparaissait. La fraction de grains recristallisés ne dépassait alors jamais 5% quelle que soit la déformation.

Pour résoudre ce problème, il a fallut diminuer la valeur du paramètre de Taylor ψ et recalibrer les paramètres K_1 et K_2 sur les données expérimentales de compression de monocristaux. En réalité, il existe des triplets (ψ, K_1, K_2) équivalents pour lesquels le comportement mécanique d'un monocristal est le même en terme de contrainte/déformation mais avec des densités de dislocations différentes. En diminuant la valeur de ψ on augmente la densité de dislocations dans le cristal à contrainte égale. Cependant, même en utilisant des densités de dislocations plus élevées, il a été compliqué de trouver une valeur de K_g permettant de reproduire les fractions recristallisées expérimentales. Suivant les valeurs de K_g, la fraction recristallisée augmentait bien trop vite ou à l'inverse, atteignait un plateau. Après de nombreux essais, la valeur de K_g utilisée dans ce chapitre a permis de reproduire la fraction recristallisée expérimentale de 20% après 60% de déformation macroscopique. Cependant, il y a peu de chances pour qu'elle reproduise la fraction recristallisée expérimentale de 50% après 150% de déformation macroscopique car on observe un plateau dans la fraction recristallisée simulée après 70% de déformation. C'est pour cette raison que les simulations de la section 6.2.4 ont été réalisées pour des conditions thermomécaniques identiques aux conditions dans lesquelles le paramètre K_g a été calibré, et pour des déformations inférieures à 50%.
Je pense que ce problème est lié au fait que la liste de systèmes de glissement de l'olivine ne permet pas de fermer la surface d'écoulement. Ainsi, les cristallites mal orientés vont se déformer par activation du mécanisme de relaxation et la densité de dislocation sera alors faible. Il y a donc de fortes chances pour qu'après la nucléation, le nouveau grain ne soit pas en contact avec des zones de forte densité de dislocations et la force capillaire aura tendance à faire disparaître le germe.
Pour résoudre ce problème, une des pistes serait de ne pas considérer seulement la densité de dislocation dans le terme d'énergie stockée et dans le critère de nucléation. Il faudrait tenir compte également de l'activation du mécanisme de relaxation. La manière la plus simple de faire cela serait peut être de calculer ce terme de densité d'énergie en utilisant le produit $\epsilon\sigma$ qui est homogène à une densité d'énergie. Ce type d'approche a déjà été utilisé dans le cadre de modélisations micro-mécaniques dans les péridotites [Bickert et al., 2020].

6.4 Références

Andrault, D., Bouhifd, M., Itie, J., and Richet, P. (1995). Compression and amorphization of (mg, fe) 2 sio 4 olivines : an x-ray diffraction study up to 70 gpa. *Physics and Chemistry of Minerals*, 22(2) :99–107. 182

Asaro, R. and Needleman, A. (1984). Overview texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *no*, 42 :7. 179

Bailey, J. and Hirsch, P. B. (1962). The recrystallization process in some polycrystalline metals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 267(1328) :11–30. 184

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2014). Plate tectonics, damage and inheritance. *Nature*, 508(7497) :513. 178

Bernacki, M., Resk, H., Coupez, T., and Logé, R. E. (2009). Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(6) :064006. 183

Bickert, M., Cannat, M., Tommasi, A., Jammes, S., and Lavier, L. (2020). Strain localization in abyssal peridotites from a magma-starved mid-ocean ridge : a microstructural study. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, page 10312. 195

Braun, J., Chéry, J., Poliakov, A., Mainprice, D., Vauchez, A., Tomassi, A., and Daignières, M. (1999). A simple parameterization of strain localization in the ductile regime due to grain size reduction : A case study for olivine. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 104(B11) :25167–25181. 178

Castelnau, O., Blackman, D., Lebensohn, R., and Ponte Castañeda, P. (2008). Micromechanical modeling of the viscoplastic behavior of olivine. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 113(B9). 178

Castelnau, O., Cordier, P., Lebensohn, R. A., Merkel, S., and Raterron, P. (2010). Microstructures and rheology of the earth's upper mantle inferred from a multiscale approach. *Comptes Rendus Physique*, 11(3-4) :304–315. 180

Chenot, J.-L., Bouchard, P.-O., Fourment, L., Lasne, P., and Roux, E. (2011). Optimization of metal forming processes for improving final mechanical strength. In *COMPLAS XI : proceedings of the XI International Conference on Computational Plasticity : fundamentals and applications*, pages 42–55. CIMNE. 187

Coble, R. (1963). A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials. *Journal of applied physics*, 34(6) :1679–1682. 182

Detrez, F., Castelnau, O., Cordier, P., Merkel, S., and Raterron, P. (2015). Effective viscoplastic behavior of polycrystalline aggregates lacking four independent slip systems inferred from homogenization methods ; application to olivine. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 83 :199–220. 176, 181

Drury, M. R. (2005). Dynamic recrystallization and strain softening of olivine aggregates in the laboratory and the lithosphere. *Geological Society, London, Special Publications*, 243(1) :143–158. 178

Duretz, T., Räss, L., Podladchikov, Y., and Schmalholz, S. (2019). Resolving thermomechanical coupling in two and three dimensions : spontaneous strain localization owing to shear heating. *Geophysical Journal International*, 216(1) :365–379. 178

Durinck, J. (2005). *Modélisation de la plasticité de la forsterite par calculs à l'échelle atomique et par dynamique des dislocations*. PhD thesis, Lille 1. 180, 183

Durinck, J., Carrez, P., and Cordier, P. (2007a). Application of the peierls-nabarro model to dislocations in forsterite. *European Journal of Mineralogy*, 19(5) :631–639. 182

Durinck, J., Devincre, B., Kubin, L., and Cordier, P. (2007b). Modeling the plastic deformation of olivine by dislocation dynamics simulations. *American Mineralogist*, 92(8-9) :1346–1357. 180

Furstoss, J., Bernacki, M., Ganino, C., Petit, C., and Pino-Muñoz, D. (2018). 2d and 3d simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 283 :98–109. 183

Furstoss, J., Bernacki, M., Petit, C., Fausty, J., Pino-Muñoz, D., and Ganino, C. (2020a). Full field and mean field modeling of grain growth in a multiphase material under dry conditions : application to peridotites. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, page e53942. 183

Furstoss, J., Petit, C., Tommasi, A., Ganino, C., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2020b). On the role of solute drag in reconciling laboratory and natural constraints on olivine grain growth kinetics. *arXiv preprint arXiv :2007.04606*. 183, 184

Furstoss, J., Ruiz Sarrazola, D., Bernacki, M., and Pino Munoz, D. (2020c). Accounting for elastic anisotropy within a general crystal plasticity framework. *submitted to Computationnal Mechanics*. 179

Gardner, R., Piazolo, S., Evans, L., and Daczko, N. (2017). Patterns of strain localization in heterogeneous, polycrystalline rocks–a numerical perspective. *Earth and Planetary Science Letters*, 463 :253–265. 178

Geers, M., Cottura, M., Appolaire, B., Busso, E. P., Forest, S., and Villani, A. (2014). Coupled glide-climb diffusion-enhanced crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 70 :136–153. 182

Gouriet, K., Carrez, P., and Cordier, P. (2019a). Ultimate mechanical properties of forsterite. *Minerals*, 9(12) :787. 182

Gouriet, K., Cordier, P., Garel, F., Thoraval, C., Demouchy, S., Tommasi, A., and Carrez, P. (2019b). Dislocation dynamics modelling of the power-law breakdown in olivine single crystals : Toward a unified creep law for the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 506 :282–291. 180, 182

Hansen, L., Zimmerman, M., and Kohlstedt, D. (2012). Laboratory measurements of the viscous anisotropy of olivine aggregates. *Nature*, 492(7429) :415–418. 178

Hansen, L., Zimmerman, M., and Kohlstedt, D. L. (2011). Grain boundary sliding in san carlos olivine : Flow law parameters and crystallographic-preferred orientation. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 116(B8). 181, 182

Heron, P. J., Pysklywec, R. N., and Stephenson, R. (2016). Lasting mantle scars lead to perennial plate tectonics. *Nature communications*, 7 :11834. 178

Herring, C. (1950). Diffusional viscosity of a polycrystalline solid. *Journal of applied physics*, 21(5) :437–445. 182

Hiraga, T., Miyazaki, T., Tasaka, M., and Yoshida, H. (2010). Mantle superplasticity and its self-made demise. *Nature*, 468(7327) :1091. 182

Hirth, G. and Kohlstedt, D. (2003). Rheology of the upper mantle and the mantle wedge : A view from the experimentalists. *GEOPHYSICAL MONOGRAPH-AMERICAN GEOPHYSICAL UNION*, 138 :83–106. 184

Hitti, K., Laure, P., Coupez, T., Silva, L., and Bernacki, M. (2012). Precise generation of complex statistical representative volume elements (rves) in a finite element context. *Computational Materials Science*, 61 :224–238. 183

Humphreys, F. J. and Hatherly, M. (2012). *Recrystallization and related annealing phenomena*. Elsevier. 194

Ilin, D. N., Bozzolo, N., Toulorge, T., and Bernacki, M. (2018). Full field modeling of recrystallization : Effect of intragranular strain gradients on grain boundary shape and kinetics. *Computational Materials Science*, 150 :149–161. 184

Isaak, D. G., Anderson, O. L., Goto, T., and Suzuki, I. (1989). Elasticity of single-crystal forsterite measured to 1700 k. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 94(B5) :5895–5906. 180

Jessell, M. W., Siebert, E., Bons, P. D., Evans, L., and Piazolo, S. (2005). A new type of numerical experiment on the spatial and temporal patterns of localization of deformation in a material with a coupling of grain size and rheology. *Earth and Planetary Science Letters*, 239(3-4) :309–326. 178

Karato, S.-i., Toriumi, M., and Fujii, T. (1980). Dynamic recrystallization of olivine single crystals during high-temperature creep. *Geophysical Research Letters*, 7(9) :649–652. 184

Knoll, M., Tommasi, A., Logé, R. E., and Signorelli, J. W. (2009). A multiscale approach to model the anisotropic deformation of lithospheric plates. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 10(8). 178

Laasraoui, A. and Jonas, J. (1991). Prediction of steel flow stresses at high temperatures and strain rates. *Metallurgical transactions A*, 22(7) :1545–1558. 180

Mainprice, D., Bachmann, F., Hielscher, R., and Schaeben, H. (2015). Descriptive tools for the analysis of texture projects with large datasets using mtex : strength, symmetry and components. *Geological Society, London, Special Publications*, 409(1) :251–271. 190

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., Settefrati, A., and Bernacki, M. (2017). Modeling of dynamic and post-dynamic recrystallization by coupling a full field approach to phenomenological laws. *Materials & Design*, 133 :498–519. 185

Mameri, L., Tommasi, A., Signorelli, J., and Hansen, L. N. (2019). Predicting viscoplastic anisotropy in the upper mantle : a comparison between experiments and polycrystal plasticity models. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 286 :69–80. 176, 181

Maresca, F., Kouznetsova, V., and Geers, M. (2016). Reduced crystal plasticity for materials with constrained slip activity. *Mechanics of Materials*, 92 :198–210. 181

Marin, E. B. (2006). On the formulation of a crystal plasticity model. Technical report, Sandia National Laboratories. 179

Mei, S. and Kohlstedt, D. L. (2000). Influence of water on plastic deformation of olivine aggregates : 1. diffusion creep regime. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 105(B9) :21457–21469. 180

Nabarro, F. (1948). Report of a conference on the strength of solids. *The Physical Society, London*, 75. 182

Phakey, P., Dollinger, G., and Christie, J. (1972). Transmission electron microscopy of experimentally deformed olivine crystals. *Flow and fracture of rocks*, 16 :117–138. 185, 187

Poirier, J. and Nicolas, A. (1975). Deformation-induced recrystallization due to progressive misorientation of subgrains, with special reference to mantle peridotites. *The Journal of Geology*, 83(6) :707–720. 184, 193

Raterron, P., Detrez, F., Castelnau, O., Bollinger, C., Cordier, P., and Merkel, S. (2014). Multiscale modeling of upper mantle plasticity : From single-crystal rheology to multiphase aggregate deformation. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 228 :232–243. 180

Santamaria-Perez, D., Thomson, A., Segura, A., Pellicer-Torres, J., Manjon, F. J., Corà, F., McColl, K., Wilson, M., Dobson, D., and McMillan, P. F. (2016). Metastable structural transformations and pressure-induced amorphization in natural (mg, fe) 2sio4 olivine under static compression : A raman spectroscopic study. *American Mineralogist*, 101(7) :1642–1650. 182

Sarrazola, D. R., Maire, L., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2020a). Full field modeling of dynamic recrystallization in a cpfem context–application to 304l steel. *Computational Materials Science*, 184 :109892. 179

Sarrazola, D. R., Muñoz, D. P., and Bernacki, M. (2020b). A new numerical framework for the full field modeling of dynamic recrystallization in a cpfem context. *Computational Materials Science*, 179 :109645. 182

Scholtes, B., Boulais-Sinou, R., Settefrati, A., Muñoz, D. P., Poitrault, I., Montouchet, A., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2016). 3d level set modeling of static recrystallization considering stored energy fields. *Computational Materials Science*, 122 :57–71. 184

Scholtes, B., Shakoor, M., Settefrati, A., Bouchard, P.-O., Bozzolo, N., and Bernacki, M. (2015). New finite element developments for the full field modeling of microstructural evolutions using the level-set method. *Computational Materials Science*, 109 :388–398. 183

Shakoor, M., Scholtes, B., Bouchard, P.-O., and Bernacki, M. (2015). An efficient and parallel level set reinitialization method–application to micromechanics and microstructural evolutions. *Applied Mathematical Modelling*, 39(23-24) :7291–7302. 184

Skemer, P., Sundberg, M., Hirth, G., and Cooper, R. (2011). Torsion experiments on coarse-grained dunite : implications for microstructural evolution when diffusion creep is suppressed. *Geological Society, London, Special Publications*, 360(1) :211–223. 183, 188, 189

Taylor, G. I. (1934). The mechanism of plastic deformation of crystals. part i.—theoretical. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 145(855) :362–387. 179

Tommasi, A., Knoll, M., Vauchez, A., Signorelli, J. W., Thoraval, C., and Logé, R. (2009). Structural reactivation in plate tectonics controlled by olivine crystal anisotropy. *Nature Geoscience*, 2(6) :423. 178, 189

Tommasi, A., Langone, A., Padrón-Navarta, J. A., Zanetti, A., and Vauchez, A. (2017). Hydrous melts weaken the mantle, crystallization of pargasite and phlogopite does not : Insights from a petrostructural study of the finero peridotites, southern alps. *Earth and Planetary Science Letters*, 477 :59–72. 184

Van der Wal, D., Chopra, P., Drury, M., and Gerald, J. F. (1993). Relationships between dynamically recrystallized grain size and deformation conditions in experimentally deformed olivine rocks. *Geophysical Research Letters*, 20(14) :1479–1482. 184

Van Houtte, P., Li, S., Seefeldt, M., and Delannay, L. (2005). Deformation texture prediction : from the Taylor model to the advanced Lamel model. *International Journal of Plasticity*, 21(3) :589–624. 179

Wang, Z., Zhao, Y., and Kohlstedt, D. L. (2010). Dislocation creep accommodated by grain boundary sliding in dunite. *Journal of Earth Science*, 21(5) :541–554. 182

Wheeler, J. (2010). Anisotropic rheology during grain boundary diffusion creep and its relation to grain rotation, grain boundary sliding and superplasticity. *Philosophical Magazine*, 90(21) :2841–2864. 178, 182

Willis, K., Houseman, G. A., Evans, L., Wright, T., and Hooper, A. (2019). Strain localization by shear heating and the development of lithospheric shear zones. *Tectonophysics*, 764 :62–76. 178

Zhang, S., Karato, S.-i., Gerald, J. F., Faul, U. H., and Zhou, Y. (2000). Simple shear deformation of olivine aggregates. *Tectonophysics*, 316(1-2) :133–152. 187

Chapitre 7

Discussion et perspectives

Sommaire

7.1 Perspectives 202
7.1.1 Modélisation de la croissance de grains avec phase secondaire et ancrage des solutés 202
7.1.2 Alternatives pour la modélisation de la migration des interphases 202
7.1.3 Détermination des paramètres d'ancrage par les solutés 207
7.1.4 Enrichissement du formalisme décrivant la déformation de l'olivine 208
7.1.5 Prise en compte des phases secondaires dans la déformation 209
7.1.6 Élargissement des conditions thermomécaniques pour la calibration 210
7.2 Discussion et conclusion 210
7.3 Références 211

7.1 Perspectives

Dans cette section je vais présenter une liste non-exhaustive de perspectives à ce travail de thèse. Elles pourront bien sur être enrichies ou complétées en fonction de potentiels projets qui pourraient se créer autour de ce formalisme numérique. Les perspectives présentées ici sont, en majorité, des perspectives de développements méthodologiques que j'aimerais pouvoir mener à bien à moyen terme afin de construire un cadre numérique pouvant être utilisé avec confiance dans des conditions thermomécaniques représentatives de la lithosphère. Les perspectives d'applications à des contextes naturels pourront alors être réellement envisagées pour répondre à des problématiques géologiques.

7.1.1 Modélisation de la croissance de grains avec phase secondaire et ancrage des solutés

Comme évoqué dans les chapitres traitant de la croissance de grains sans déformation, un des objectifs est de pouvoir simuler la croissance de grains d'une roche réelle dans des conditions représentatives de la lithosphère. Une des finalités de ce travail peut être, comme proposé dans la section 3.3.1, de déterminer des temps relatifs, entre différentes microstructures provenant d'une même province, correspondant au temps passé depuis le dernier épisode de déformation. En dehors des hypothèses géologiques qu'il faudrait argumenter sérieusement pour rendre une telle approche crédible, il reste encore deux points à résoudre pour réaliser ce travail. Ces deux points concernent l'utilisation concomitante des formalismes développés dans les chapitres 3 et 4, à savoir la prise en compte des phases secondaires et l'ancrage par les impuretés :

- Le premier a déjà été abordé dans la section 4.4 et concerne l'apparition de petits grains aux limites du domaine de calcul dans les modèles en champ complet.
- Le deuxième concerne le développement d'un modèle en champ moyen, liant les deux formalismes, nécessaire au positionnement relatif des cinétiques de croissance des différents échantillons (voir Fig.3.12).

Pour être précis, ce modèle en champ moyen devra intégrer l'impact des phases secondaires dans le modèle en champ moyen type "Hillert", développé pour prendre en compte la présence des impuretés (section 4.2). Certains choix méthodologiques doivent être testés, notamment pour le calcul de la cinétique de croissance des phases secondaires (i.e. une équation décrivant l'évolution du rayon moyen ou une équation du type Hillert pour calculer l'évolution de la distribution de taille).

7.1.2 Alternatives pour la modélisation de la migration des interphases

Dans la section 3.3.2, on a mis en évidence la nécessité de simuler correctement la cinétique de croissance des phases secondaires, car elle impacte fortement la cinétique de croissance de la microstructure complète. Comme dans les roches mantelliques, les grains de phases secondaires sont généralement séparés les uns des autres, une bonne description de leur cinétique de croissance revient à une description correcte de la migration des interphases. La migration des interphases olivine/pyroxène, s'effectue par un mécanisme de mûrissement d'Ostwald [Hiraga et al., 2010; Solomatov and Reese, 2008; Tasaka and Hiraga, 2013].
Dans notre formalisme actuel, nous modélisons ce phénomène par deux étapes de transport des fonctions LS représentant les interphases. Une première prenant en compte la force capillaire en attribuant aux interphases une mobilité (3 ordres de grandeurs en dessous de la mobilité des joints de grains d'olivine) puis une deuxième redistribuant de manière homogène le volume de seconde phase gagné ou perdu. Dans la réalité, le mûrissement d'Ostwald implique de la diffusion à longue

distance d'éléments chimiques. Comme notre approche actuelle ne correspond pas directement à la modélisation du murissement d'Ostwald, l'extrapolation des résultats des simulations aux échelles de temps géologiques pourrait être erronée. Pour palier à ce problème et modéliser correctement le mûrissement d'Ostwald plusieurs approches peuvent être adoptées.

7.1.2.1 Première proposition pour modéliser le mûrissement d'Ostwald

L'idée serait de résoudre la diffusion du silicium, élément limitant dans la migration de ces interphases [Nakakoji and Hiraga, 2018]. La concentration molaire du silicium n'est pas la même entre les deux phases et il existe des données expérimentales sur les coefficients de diffusion dans ces deux matériaux [Fei et al., 2012] ainsi que dans les joints de grains [Fisler et al., 1997].
En pratique, après la génération du polycristal, on attribue aux grains de phases différentes leurs fractions molaires respectives en silicium, on résout l'évolution de la concentration et on récupère les nouvelles frontières de zones de concentration différentes (ou les zones où le gradient de concentration est le plus important). En faisant la différence entre les anciennes frontières et les nouvelles on peut appliquer aux fonctions LS représentant les interphases un déplacement correspondant à la migration de l'interphase par diffusion.

Pour résoudre l'évolution de la concentration on peut partir de l'équation de diffusion de Cahn-Hilliard [Cahn, 1961] :

$$\frac{\partial c_{Si}}{\partial t} = -\vec{\nabla}.\vec{J}, \tag{7.1}$$

où $\vec{J}$ est le flux de matière que l'on peut écrire sous la forme :

$$\vec{J} = -M\vec{\nabla}\mu_{Si}, \tag{7.2}$$

avec $M = \frac{D c^0_{Si}(1-c^0_{Si})}{k_b T}$ la mobilité. On peut réécrire 7.1 sous la forme [Seol et al., 2003],

$$\frac{\partial c_{Si}}{\partial t} = \frac{D c^0_{Si}\left(1-c^0_{Si}\right)}{k_b T}\nabla^2\mu_{Si}, \tag{7.3}$$

avec c_{Si} la fraction molaire en silicium, c^0_{Si} la fraction globale du matériau, D le coefficient de diffusion et k_b, T la constante de Boltzmann et la température respectivement. μ_{Si} est le potentiel chimique du silicium, si on néglige la contribution de l'énergie élastique et électrostatique, on peut l'écrire comme la somme de l'énergie libre du bulk $f(c_{Si})$ et de l'énergie interfaciale :

$$\mu_{Si} = \frac{df(c_{Si})}{dc_{Si}} - \alpha\nabla^2 c_{Si}, \tag{7.4}$$

$\alpha(J.m^2)$ est relié à l'énergie d'interface $\gamma(J/m^2)$ par la relation $\alpha = (k_b T)^2/\gamma$ [Chakrabarti and Manna, 2018]. Si on pose pour l'énergie libre du bulk $f(c_{Si}) = k_b T\left(-\frac{1}{2}c^2_{Si} + \frac{1}{4}c^4_{Si}\right)$ [Seol et al., 2003] on obtient pour le potentiel chimique :

$$\mu_{Si} = k_b T\left(c^3_{Si} - c_{Si} - \frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}\right). \tag{7.5}$$

On propose de résoudre les équations 7.3 et 7.5 par EF en utilisant une formulation mixte fraction de silicium / potentiel chimique (c_{Si}, μ_{Si}). En effectuant une discrétisation temporelle d'Euler sur l'équation 7.3 et en réécrivant les équations 7.3 et 7.5 sous la forme faible on obtient :

$$\int_\Omega \frac{c_{Si}^{t+\Delta t}}{\Delta t}\Phi dV + \int_\Omega \frac{Dc_{Si}^0\left(1-c_{Si}^0\right)}{k_b T}\nabla\mu_{Si}\nabla\Phi dV = \int_\Omega \frac{c_{Si}^t}{\Delta t}\Phi dV \tag{7.6}$$

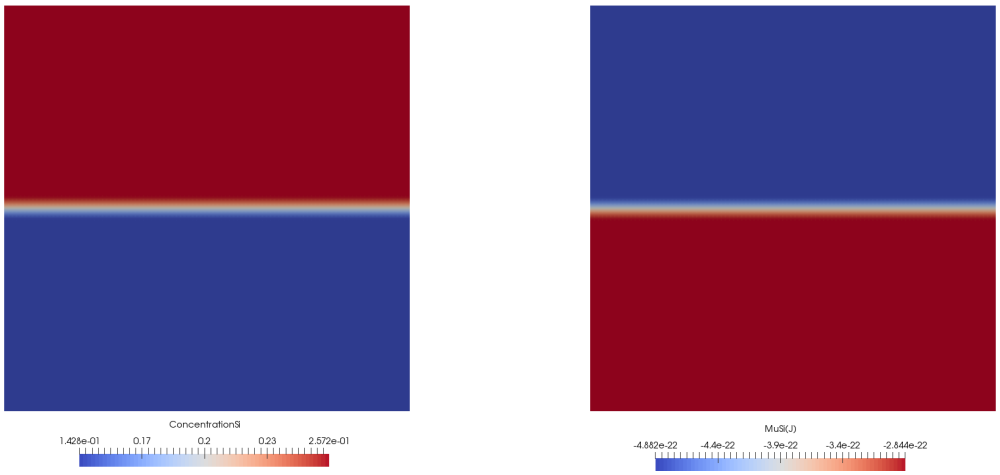
$$\int_\Omega k_b T c_{Si}^3 \omega dV - \int_\Omega k_b T c_{Si}\omega dV + \int_\Omega \frac{(k_b T)^2}{\gamma}\nabla c_{Si}\nabla\omega dV - \int_\Omega \mu_{Si}\omega dV = 0, \tag{7.7}$$

avec Φ et ω les fonctions tests liées à la concentration et au potentiel chimique respectivement.

Du point de vue des conditions aux limites, il faudrait qu'elles permettent de conserver la quantité de silicium dans le domaine, peut être en imposant un flux nul ($\vec{j}\cdot\vec{n}=0$) sur les bords du domaine.

7.1.2.1.a Premiers tests

La formulation mixte présentée ci dessus a été implémentée dans la librairie EF CimLib. Pour la tester, un modèle très simple a été construit en utilisant deux zones de concentration en silicium différentes, correspondants aux concentrations de l'olivine (0.1428 atome/atome) et d'orthopyroxène (0.2 atome/atome), séparées par une interface rectiligne (Fig.7.1.

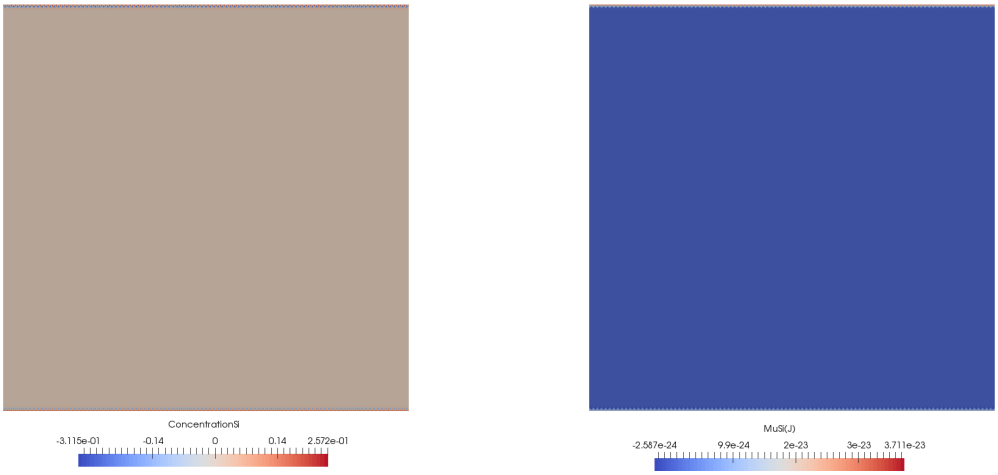


(a) (b)

FIGURE 7.1 – Setup initial de la simulation de la diffusion du silicium par la formulation mixte (Eq.7.12) en terme de concentration en silicium (Fig.7.1a) et potentiel chimique (Fig.7.1b). La taille du domaine de calcul est 0.1×0.1mm.

Un coefficient de diffusion constant a été affecté sur tout le domaine de calcul et valant $8.62\cdot 10^{-5} mm^2.^{-1}$ pour une température de 1473K, une énergie interfaciale $\gamma = 10^{-6}$J.mm^{-2} et un pas de temps de 0.01s. Les conditions aux limites imposées sont des conditions aux limites de Dirichlet imposant au champ de concentration de rester égal aux valeurs imposées sur les bords supérieur et inférieur du domaine de calcul. Sur les autres bords rien n'est imposé au champ de concentration. Le champ de potentiel chimique quant à lui n'a pas de valeur imposée sur les bords mais on lui attribue comme valeur de départ (à chaque incrément) la valeur calculée grâce au champ de concentration par l'équation 7.5 .

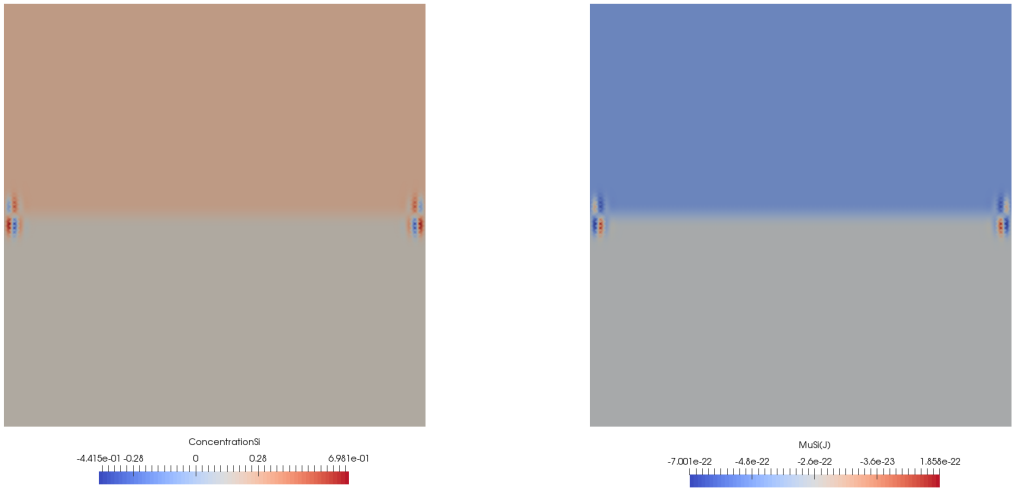
Le solveur EF converge correctement mais dès le premier incrément, le champ de concentration devient très proche de 0 sur la majorité du domaine de calcul et prend des valeurs négatives près des zones sur lesquelles on a imposé des conditions aux limites de Dirichlet (Fig.7.2a).



(a) (b)

FIGURE 7.2 – Concentration en silicium (Fig.7.2a) et potentiel chimique (Fig.7.2b) après le premier incrément de la résolution EF du problème de diffusion.

Pour tester si le problème ne vient pas de la résolution EF, les équations 7.3 et 7.5 ont été résolues de manière explicite en calculant dans un premier temps le potentiel chimique à partir de la concentration en utilisant l'équation 7.5. Enfin, le champ de concentration à l'instant t est calculé en utilisant l'équation 7.3 telle que $c_{\mathrm{S}i}^{t} = c_{\mathrm{S}i}^{t-\Delta t} + \frac{\Delta t \mathrm{D} c_{\mathrm{S}i}^{0}(1-c_{\mathrm{S}i}^{0})}{k_b \mathrm{T}} \nabla^2 \mu_{\mathrm{S}i}$. Les simulations sont réalisées en utilisant les mêmes paramètres que présentés ci dessus. Pendant les premiers incréments le champ de concentration n'évolue presque pas, puis à partir du $5^{ème}$ incrément, un motif commence à émerger au niveau de l'interface rectiligne (Fig.7.3) et des valeurs de concentration négatives apparaissent également.



(a) (b)

FIGURE 7.3 – Concentration en silicium (Fig.7.2a) et potentiel chimique (Fig.7.2b) après 10 incréments de la résolution explicite des équations 7.3 et 7.5.

Ces premiers résultats, peu concluants, indiquent sans doute une mauvaise formulation du problème de diffusion. Il faudrait aller plus loin en analysant de manière approfondie la contri-

bution relative de chaque terme des équations 7.3 et 7.5, ainsi que dans l'évolution du champ de concentration.

7.1.2.1.b Limite de la méthode

Même si la résolution numérique de l'évolution de la concentration en silicium était correctement réalisée, cette approche serait confrontée à un nouveau problème : comment définir une interphase à partir du champ de concentration? En effet, il y a très peu de chance pour que la concentration en silicium après plusieurs étapes de transport de ce champ soit égale à la concentration de l'olivine et du pyroxène. La définition des différentes phases et de leurs limites à partir du champ de concentration ne serait sans doute pas triviale et les choix nécessaires à sa définition ne seraient pas sans conséquences sur la cinétique de migration des interphases.

7.1.2.2 Deuxième proposition pour modéliser le mûrissement d'Ostwald

Une autre possibilité pour pallier à la limite de la première méthode présentée ci dessus est de définir directement une vitesse de migration de l'interphase à partir du flux $\vec{J}$. Pour cela, on peut faire l'hypothèse d'un champ de concentration stationnaire et purement géométrique représentant les deux phases en présence. L'évolution de c_{Si} en fonction du temps est nulle et on peut écrire en combinant les équations 7.3 et 7.5 :

$$\nabla^2\left(c_{Si}^3 - c_{Si} - \frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}\right) = 0. \tag{7.8}$$

On peut résoudre cette équation par EF, en utilisant le développement ci dessous pour obtenir la formulation faible (en posant $A = c_{Si}^3 - c_{Si} - \frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}$) :

$$\begin{aligned}
\int_\Omega \nabla^2 A\omega dV &= 0\\
\int_\Omega \nabla(\nabla A\omega)\, dV - \int_\Omega \nabla A\nabla\omega dV &= 0\\
\int_\Gamma \nabla A\omega dS - \int_\Omega \nabla\left(c_{Si}^3 - c_{Si} - \frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}\right)\nabla\omega dV &= 0\\
\int_\Gamma \nabla A\omega dS - \int_\Omega \nabla c_{Si}^3\nabla\omega dV + \int_\Omega \nabla c_{Si}\nabla\omega dV &\\
+ \int_\Omega \nabla\left(\frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}\right)\nabla\omega dV &= 0\\
\int_\Gamma \nabla A\omega dS - \int_\Omega \nabla c_{Si}^3\nabla\omega dV + \int_\Omega \nabla c_{Si}\nabla\omega dV &\\
+ \int_\Omega \nabla\left(\frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}\nabla\omega\right) dV - \int_\Omega \frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}\nabla^2\omega dV &= 0\\
\int_\Gamma \left(\nabla A\omega + \frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}\nabla\omega\right) dS - \int_\Omega \nabla c_{Si}^3\nabla\omega dV &\\
+ \int_\Omega \nabla c_{Si}\nabla\omega dV - \int_\Omega \frac{k_b T}{\gamma}\nabla^2 c_{Si}\nabla^2\omega dV &= 0.
\end{aligned} \tag{7.9}$$

On peut alors obtenir un champ de concentration en silicium à l'état stationnaire et donc calculer le potentiel chimique (Eq.7.5) et le flux correspondant (Eq.7.2). Dès lors, on peut calculer une vitesse de migration (v_s) à appliquer aux fonctions LS représentant les interphases en utilisant la relation [Bruchon et al., 2011] :

$$v_s = -\left(\nabla_s . \vec{J}\right) \vec{n}, \tag{7.10}$$

où ∇_s représente la divergence surfacique et $\vec{n}$ la normale sortant à l'interface.

Cette solution n'a pas encore été testée par manque de temps mais les outils principaux pour sa mise en place sont présents dans la librairie EF CimLib.

7.1.2.3 Troisième proposition pour modéliser le mûrissement d'Ostwald

Une dernière solution alternative pour modéliser la migration des interphases serait de définir directement une vitesse de migration de ces interphases en utilisant un modèle en champ moyen phénoménologique. Ainsi, les interphases ne seraient pas déplacées pendant la phase de transport des fonctions LS. Une étape de déplacement supplémentaire serait introduite pour déplacer spécifiquement les interphases suivant une loi phénoménologique. Cette approche est déjà utilisée dans le contexte Digimu dans le cadre d'une thèse traitant de l'évolution de particules de seconde phase dans des super-alliages base nickel. Pour notre cas, les résultats de [Nakakoji and Hiraga, 2018] pourraient être utilisés.

7.1.2.4 Discussion

Les trois propositions présentées ci dessus pour modéliser le mûrissement d'Ostwald ont leurs avantages et inconvénients. En effet, la première et la deuxième méthode pourraient être intéressantes car elles font intervenir directement les équations de diffusion. Les coefficients de diffusion étant des paramètres relativement bien contraints, l'utilisation de ces méthodes aux échelles de temps géologiques pourrait être envisagée. Cependant la difficulté de définir l'interphase à partir du champ de concentration en Si avec la première méthode pourrait être réellement problématique et la deuxième méthode serait sans doute à privilégier. La troisième méthode quant à elle, bien que plus facile à mettre en place, pourrait poser des problèmes d'extrapolation aux échelles de temps géologiques car elle utiliserait d'un modèle phénoménologique calibré sur des expériences de laboratoire. Il pourrait être intéressant d'utiliser cette troisième méthode comme une référence pour les conditions de laboratoire permettant de vérifier les résultats obtenus avec la première et deuxième méthode.

7.1.3 Détermination des paramètres d'ancrage par les solutés

Les paramètres α et β intervenant dans le calcul de la pression d'ancrage par les solutés (voir Chap.4) ont été considérés comme des variables d'ajustement, permettant de reproduire à la fois les résultats expérimentaux de recuit d'agrégats d'olivine et les observations naturelles de roches mantelliques recuites. Les valeurs obtenues sont assez éloignées des valeurs de ces paramètres calculées pour le calcium en ne considérant que l'interaction élastique entre le soluté et le joint de grains. Il conviendrait alors de vérifier que les valeurs de α et β obtenues par la calibration réalisée dans le chapitre 4 ne sont pas si éloignées des valeurs réelles de α et β pour le calcium ou une autre impureté ségréguant aux joints de grains dans les agrégats d'olivine. Dans le cas où les valeurs obtenues seraient très différentes des valeurs calibrées, il faudrait alors revoir les simulations du chapitre 4 pour voir si les implications sur la croissance de grains aux échelles de temps géologiques changent ou non.
L'olivine étant un matériau céramique, l'énergie d'interaction entre une impureté et un joint de grains ne peut pas se réduire à une interaction élastique. En effet, le caractère chargé de l'impureté, et (potentiellement) du joint de grains, induit des interactions électrostatiques et dipolaires [Yan et al., 1983] qui pourraient être d'un ordre de grandeur comparable à l'énergie d'interaction élastique.

Les expressions non simplifiées de α et β sont de la forme [Cahn, 1962] :

$$\alpha = 4\mathrm{N}_v k_b \mathrm{T} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh^2(\frac{\mathrm{E}(x)}{2k_b\mathrm{T}})}{\mathrm{D}(x)} dx \tag{7.11}$$

$$\frac{\alpha}{\beta^2} = \frac{\mathrm{N}_v}{k_b \mathrm{T}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\mathrm{E}}{dx}\right)^2 \mathrm{D}(x) dx, \tag{7.12}$$

où N_v, k_b et T sont la densité atomique, la constante de Boltzmann et la température, respectivement. Les fonctions $\mathrm{E}(x)$ et $\mathrm{D}(x)$ représentent l'énergie d'interaction et le coefficient de diffusion de l'impureté respectivement, en fonction de la distance au joint de grains x. Ces deux fonctions, très difficiles à mesurer expérimentalement, pourraient être estimées par des calculs en dynamique moléculaire à condition que des potentiels atomiques décrivant les interactions entre la ou les impuretés avec les atomes du cristal d'olivine existent. Une des difficultés potentielles de ce genre d'approche consisterait sans doute en la construction de joints de grains d'olivine réalistes. Ce type de constructions et d'étude systématique des joints de grains à déjà été réalisée pour des cristaux ioniques comme MgO [Hirel et al., 2019], il conviendrait de commencer cette étude par ce type d'approche.

7.1.4 Enrichissement du formalisme décrivant la déformation de l'olivine

La plasticité cristalline réduite a été utilisée dans ce travail essentiellement pour résoudre les problèmes numériques liés au fait que la liste des systèmes de glissement de l'olivine ne permet pas de fermer la surface d'écoulement (voir chapitre 6). Le formalisme développé a également eu pour but de mimer les mécanismes qui, dans la réalité, permettent d'accommoder la déformation plastique. Même si le glissement aux joints de grains semble être généralement modélisé dans la littérature par des lois visqueuses du même type que celle utilisée dans ce travail [Cheng et al., 2019; Wheeler, 2010], ce formalisme numérique n'apparaît pas très adapté pour simuler la montée de dislocation et le fluage diffusion. Des méthodes numériques existent pour prendre en compte explicitement ces mécanismes, sans avoir à les mimer par des mécanismes de relaxation isotrope, tels qu'on les a présentés dans le chapitre précédent. L'objet de cette section est de présenter les possibilités existantes pour intégrer ces mécanismes dans notre formalisme numérique actuel.

7.1.4.1 Prise en compte de la montée dans la plasticité cristalline

La montée de dislocation peut être prise en compte dans le formalisme de plasticité cristalline [Geers et al., 2014], de manière similaire au mécanisme de relaxation de la plasticité cristalline réduite (section 1.4.2.4), en ajoutant la contribution à la déformation de la montée dans la déformation plastique :

$$\boldsymbol{\varepsilon^p} = \sum^{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{P^{\alpha}} + \dot{\beta}^{\alpha} \mathbf{Q^{\alpha}}\right), \tag{7.13}$$

où $\dot{\beta}^{\alpha}$ est l'équivalent de la vitesse de glissement plastique $\dot{\gamma}^{\alpha}$ pour la montée pour le système de glissement α, et où :

$$\mathbf{Q^{\alpha}} = \vec{m}^{\alpha} \otimes \vec{m}^{\alpha}, \tag{7.14}$$

est l'équivalent du tenseur de Schmidt pour la montée.

La définition de $\dot{\beta}^{\alpha}$ est le point le plus important de ce formalisme car c'est dans cette vitesse que les mécanismes microscopiques contrôlant la montée vont être incorporés. Quelle que soit l'expression choisie pour $\dot{\beta}^{\alpha}$, cette relation de transition d'échelle va moyenner les effets de mécanismes, comme la diffusion de lacunes ou la formation de crans sur les dislocations (nécessaires

à la montée). Il s'agit donc de définir un modèle en champ moyen. Pour espérer faire cela correctement, il faut être conscient des processus microscopiques de premier ordre influant sur ce mécanisme. Des études en dynamique des dislocations prenant en compte la montée dans l'olivine ont déjà été réalisées [Boioli et al., 2015a,b; Gouriet et al., 2019], il serait très intéressant d'utiliser l'expertise développée par ces auteurs pour construire un formalisme champ moyen intégrant les processus microscopiques de premier ordre dans $\dot{\beta}^{\alpha}$.

7.1.4.2 Modélisation du fluage diffusion

Ici encore, l'idée est d'ajouter un terme à la déformation plastique $\boldsymbol{\varepsilon^p}$ permettant de prendre en compte la déformation induite par le déplacement des lacunes $\boldsymbol{\varepsilon^{diff}}$ [Villani et al., 2015] :

$$\varepsilon_{ij}^{diff} = \varepsilon_{ij}^{diff,\star} + \varepsilon_{ij}^{diff,in}, \tag{7.15}$$

où $\boldsymbol{\varepsilon^{diff,\star}}$ est la partie de la déformation liée à la relaxation du réseau autour des lacunes et $\boldsymbol{\varepsilon^{diff,in}}$ la déformation liée au mouvement des lacunes. Ce terme pourrait être étudié en utilisant des approches numériques atomistiques, dans un premier temps par des approche de relaxation des positions atomiques, ici autour d'une lacune donnée.
Le point critique de cette approche est la définition et le calcul du flux de lacune $\vec{j^v}$ qui est relié à $\boldsymbol{\varepsilon^{diff,in}}$ par la relation [Villani et al., 2015] :

$$\varepsilon_{ij}^{diff,in} = -\Delta t \left(\frac{1}{2} \left(j_{i,j}^{v} + j_{j,i}^{v} \right) - \frac{1}{3} j_{k,k}^{v} \delta_{ij} \right). \tag{7.16}$$

Le calcul du flux $\vec{j^v}$ doit alors être réalisé par l'intermédiaire d'un potentiel chimique tel que présenté dans la section 7.1.2, composé d'une partie mécanique et d'une partie chimique. Ici encore les calculs atomistiques pourraient être d'une aide précieuse pour étudier l'influence d'un champ de contrainte sur le déplacement des lacunes ou l'effet de la présence d'une phase secondaire dans le potentiel chimique lié à la cristallochimie du polycristal.

L'implémentation des deux approches évoquées ci dessus n'a pas été engagée durant cette thèse mais pourrait faire l'objet d'une étude future.

7.1.5 Prise en compte des phases secondaires dans la déformation

La présence de phases secondaires comme les pyroxènes ou le spinelle peut avoir une forte influence sur la déformation d'un polycristal. Si l'on prend l'exemple des pyroxènes, le nombre de systèmes de glissement est encore plus restreint que pour l'olivine et les CRSS sont plus élevées [Raterron et al., 2014]. Ainsi un grain de pyroxène dans une matrice d'olivine représentera, au premier ordre, une inclusion rigide. La présence d'une inclusion rigide au sein d'une matrice de grains plus facilement déformables peut avoir pour effet de localiser les déformations ou de développer des bandes de cisaillement [Finch et al., 2020; Jammes et al., 2015]. La présence d'une inclusion rigide peut également avoir pour effet de stimuler la nucléation par DRX autour d'elle [Robson et al., 2009]. Finalement, certains auteurs suggèrent que la DRX dans les roches mantelliques serait responsable d'un mélange important entre les phases [Linckens et al., 2014]. Ce mélange aurait pour effet d'augmenter la surface effective d'ancrage et ainsi de ralentir la croissance de grains [Bercovici and Ricard, 2012]. En bref, tout comme pour la croissance de grains, la présence de phases secondaires a une influence importante sur le comportement mécanique d'un agrégat et sur les évolutions microstructurales liées à la déformation.

Pour prendre en compte des phases secondaires dans le formalisme numérique existant, la première étape sera, comme pour l'olivine, de définir les ingrédients nécessaires à la plasticité cristalline c'est à dire : un comportement élastique, une liste de système de glissement, une loi

d'écoulement, les CRSS associées et une loi de durcissement. Si l'on utilise les mêmes lois de comportement que pour l'olivine il faudra alors calibrer les paramètres d'écrouissage et de restauration K_1 et K_2 sur des données expérimentales de déformation de monocristaux telles que [AvéLallemant, 1978]. Pour la vitesse de nucléation K_g, il faudra utiliser des données expérimentales de déformation de polycristaux ou, à défaut d'en avoir, utiliser des contraintes fournies par des données naturelles telles que [Skemer and Karato, 2008].

7.1.6 Élargissement des conditions thermomécaniques pour la calibration

Un point très important pour pouvoir utiliser le formalisme numérique développé dans des conditions représentatives de la lithosphère est l'élargissement des conditions thermomécaniques de calibration pour les paramètres d'écrouissage et de restauration K_1 et K_2 et la vitesse de nucléation K_g. En effet il a été montré, par des formalismes similaires sur des matériaux différents [Maire et al., 2017], que ces paramètres peuvent dépendre fortement de la température et de la vitesse de déformation. Ceci est d'autant plus vrai dans le cas de matériaux géologiques, compte tenu des écarts énormes entre les conditions de laboratoire et naturelles (une dizaine d'ordre de grandeur pour les vitesses de déformation par exemple). En plus d'utiliser les données expérimentales déja existantes, couvrant un spectre de conditions thermomécaniques bien plus large que celles considérées dans cette thèse [Demouchy et al., 2012; Gasc et al., 2019; Hansen et al., 2019; Skemer et al., 2011; Trepmann et al., 2013; Van der Wal et al., 1993], il faudrait réfléchir au moyen de contraindre les trois paramètres mentionnés à partir d'échantillons de roches naturelles. On pourra potentiellement s'inspirer de démarches telles que celles présentées dans [Cross and Skemer, 2019; Skemer and Karato, 2008]. Dans ces cas, on se heurtera également au choix des échantillons naturels tant la diversité (texturale, structurale, minéralogique, chimique) est grande.

7.2 Discussion et conclusion

Comme on a pu le voir dans ce chapitre, le formalisme numérique développé lors de cette thèse n'offre pas encore un cadre global pour l'étude des évolutions microstructurales dans les péridotites.

Cependant, pour la croissance de grains sans déformation, l'approche incrémentale, mécanisme par mécanisme, a permis de mettre en évidence les processus de premier ordre impactant la cinétique de croissance. En effet, en utilisant la méthode numérique comme un outil d'extrapolation, la comparaison des prédictions du modèle avec les phénomènes naturels permet de prendre du recul sur la compatibilité entre les processus physiques observés en laboratoire et ceux ayant lieu dans la nature.

Ainsi, on a pu confirmer que la description de la croissance de grains d'olivine par capillarité pure, telle qu'observée et analysée dans les expériences de laboratoire, ne permettait pas d'expliquer les observations naturelles car la cinétique de croissance est bien trop élevée.

La prise en compte des phases secondaires dans les modèles en champ complet a montré que, bien que la cinétique de croissance soit réduite, elle reste incompatible avec les contraintes provenant des observations naturelles.

Finalement, les modèles numériques de croissance ont permis de proposer un mécanisme physique, l'ancrage par les solutés, dont l'effet est difficilement accessible à l'expérience. Ce mécanisme a permis, in fine, d'obtenir une cinétique de croissance compatible à la fois avec les observations naturelles et les expériences de laboratoire.

La modélisation de la migration des interphases, et l'intégration ce formalisme à celui proposé pour l'ancrage par les impuretés, restent toutefois encore à développer.

Le travail réalisé pour la déformation n'étant pas aussi avancé que celui pour la croissance, le recul nécessaire pour analyser les inconsistances entre le modèle physique et les phénomènes naturels est forcément moins abouti.
Une campagne de comparaison entre les modèles et des expériences de laboratoire ou des observations naturelles, en terme de développement de LPO, de SPO, de taille de grains et de comportement mécanique devrait être réalisée pour tester les limites du modèle actuel et comprendre quels éléments sont à améliorer. Dans tous les cas, le formalisme actuel donne une base de départ pour des travaux futurs puisqu'il offre un cadre numérique polyvalent pouvant être agrémenté et enrichi par des descriptions plus fidèles des mécanismes.
Néanmoins, le cadre numérique développé pour la déformation a permis d'étudier différents points relatifs au fluage des agrégats d'olivine. On a notamment pu mettre en évidence que la prise en compte de l'anisotropie élastique ne modifiait pas drastiquement le comportement mécanique macroscopique du polycristal, mais que des variations locales relativement importantes (quelques dizaines de pourcents sur les contraintes, la densité de dislocations et la pression), entre un comportement élastique isotrope et anisotrope, étaient révélées.
La méthode actuelle a également permis d'étudier la localisation de la déformation par différents types de zone de faiblesse pré-existantes au sein du polycristal.

Les possibilités d'application à la géologie de cet outil numérique sont d'ores et déjà nombreuses, la porte est maintenant ouverte pour de riches perspectives d'exploitation.
Pour la suite, il serait intéressant d'analyser si le modèle numérique actuel est capable de générer spontanément, en imposant seulement une déformation, des zones de faiblesses telles que celles utilisées dans le chapitre 6. Pour cela il faudrait également examiner en détail la prédiction de l'évolution des textures cristallographiques par notre modèle. Ce travail est une autre perspective très importante car les LPO des roches du manteau intéressent une large partie de la communauté.
Outre les considérations champ complet à l'échelle du polycristal, l'enjeu majeur serait qu'à terme, les résultats de ces simulations puissent être utiles aux modèles géodynamiques de grande échelle. Dans ce but, un modèle en champ moyen devrait être développé et qui, idéalement, proposerait des prédictions en terme de taille de grains et de LPO (les deux variables couramment utilisées par les lois rhéologiques des modèles aux grandes échelles) en fonction des conditions thermomécaniques comme la contrainte, la vitesse de déformation et la température. Le développement d'un tel modèle est un travail d'envergure qui, de mon point de vue, pourrait s'inspirer d'un couplage entre modèle VPSC [Lebensohn and Tomé, 1993] (pour l'évolution des LPO), approche NHM [Maire et al., 2018] (pour la prise en compte de la DRX) et le modèle de prise en compte des impuretés proposé dans ce travail (chapitre 4). Une fois formulé, ce modèle devra être calibré pour des conditions thermomécaniques représentatives de la lithosphère, à l'aide du modèle en champ complet et d'observations naturelles.

7.3 Références

AvéLallemant, H. G. (1978). Experimental deformation of diopside and websterite. *Tectonophysics*, 48(1-2) :1–27. 210

Bercovici, D. and Ricard, Y. (2012). Mechanisms for the generation of plate tectonics by two-phase grain-damage and pinning. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 202 :27–55. 209

Boioli, F., Carrez, P., Cordier, P., Devincre, B., and Marquille, M. (2015a). Modeling the creep properties of olivine by 2.5-dimensional dislocation dynamics simulations. *Physical Review B*, 92(1) :014115. 209

Boioli, F., Tommasi, A., Cordier, P., Demouchy, S., and Mussi, A. (2015b). Low steady-state stresses

in the cold lithospheric mantle inferred from dislocation dynamics models of dislocation creep in olivine. *Earth and Planetary Science Letters*, 432 :232–242. 209

Bruchon, J., Drapier, S., and Valdivieso, F. (2011). 3d finite element simulation of the matter flow by surface diffusion using a level set method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 86(7) :845–861. 206

Cahn, J. W. (1961). On spinodal decomposition. *Acta metallurgica*, 9(9) :795–801. 203

Cahn, J. W. (1962). The impurity-drag effect in grain boundary motion. *Acta metallurgica*, 10(9) :789–798. 208

Chakrabarti, T. and Manna, S. (2018). Zener pinning through coherent precipitate : A phase-field study. *Computational Materials Science*, 154 :84–90. 203

Cheng, T.-L., Wen, Y.-H., and Hawk, J. A. (2019). Diffuse interface approach to modeling crystal plasticity with accommodation of grain boundary sliding. *International Journal of Plasticity*, 114 :106–125. 208

Cross, A. and Skemer, P. (2019). Rates of dynamic recrystallization in geologic materials. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 124(2) :1324–1342. 210

Demouchy, S., Tommasi, A., Barou, F., Mainprice, D., and Cordier, P. (2012). Deformation of olivine in torsion under hydrous conditions. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 202 :56–70. 210

Fei, H., Hegoda, C., Yamazaki, D., Wiedenbeck, M., Yurimoto, H., Shcheka, S., and Katsura, T. (2012). High silicon self-diffusion coefficient in dry forsterite. *Earth and Planetary Science Letters*, 345 :95–103. 203

Finch, M., Bons, P., Steinbach, F., Griera, A., Llorens, M.-G., Gomez-Rivas, E., Ran, H., and de Riese, T. (2020). The ephemeral development of c shear bands : A numerical modelling approach. *Journal of Structural Geology*, page 104091. 209

Fisler, D., Mackwell, S., and Petsch, S. (1997). Grain boundary diffusion in enstatite. *Physics and Chemistry of Minerals*, 24(4) :264–273. 203

Gasc, J., Demouchy, S., Barou, F., Koizumi, S., and Cordier, P. (2019). Creep mechanisms in the lithospheric mantle inferred from deformation of iron-free forsterite aggregates at 900–1200° c. *Tectonophysics*, 761 :16–30. 210

Geers, M., Cottura, M., Appolaire, B., Busso, E. P., Forest, S., and Villani, A. (2014). Coupled glide-climb diffusion-enhanced crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 70 :136–153. 208

Gouriet, K., Cordier, P., Garel, F., Thoraval, C., Demouchy, S., Tommasi, A., and Carrez, P. (2019). Dislocation dynamics modelling of the power-law breakdown in olivine single crystals : Toward a unified creep law for the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 506 :282–291. 209

Hansen, L. N., Kumamoto, K. M., Thom, C. A., Wallis, D., Durham, W. B., Goldsby, D. L., Breithaupt, T., Meyers, C. D., and Kohlstedt, D. L. (2019). Low-temperature plasticity in olivine : Grain size, strain hardening, and the strength of the lithosphere. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 124(6) :5427–5449. 210

Hiraga, T., Tachibana, C., Ohashi, N., and Sano, S. (2010). Grain growth systematics for forsterite±enstatite aggregates : Effect of lithology on grain size in the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 291(1-4) :10–20. 202

Hirel, P., Moladje, G. F. B., Carrez, P., and Cordier, P. (2019). Systematic theoretical study of [001] symmetric tilt grain boundaries in mgo from 0 to 120 gpa. *Physics and Chemistry of Minerals*, 46(1) :37–49. 208

Jammes, S., Lavier, L. L., and Reber, J. E. (2015). Localization and delocalization of deformation in a bimineralic material. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 120(5) :3649–3663. 209

Lebensohn, R. A. and Tomé, C. (1993). A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys. *Acta metallurgica et materialia*, 41(9) :2611–2624. 211

Linckens, J., Bruijn, R. H., and Skemer, P. (2014). Dynamic recrystallization and phase mixing in experimentally deformed peridotite. *Earth and Planetary Science Letters*, 388 :134–142. 209

Maire, L., Fausty, J., Bernacki, M., Bozzolo, N., De Micheli, P., and Moussa, C. (2018). A new topological approach for the mean field modeling of dynamic recrystallization. *Materials & Design*, 146 :194–207. 211

Maire, L., Scholtes, B., Moussa, C., Bozzolo, N., Muñoz, D. P., Settefrati, A., and Bernacki, M. (2017). Modeling of dynamic and post-dynamic recrystallization by coupling a full field approach to phenomenological laws. *Materials & Design*, 133 :498–519. 210

Nakakoji, T. and Hiraga, T. (2018). Diffusion creep and grain growth in forsterite+ 20 vol% enstatite aggregates : 2. their common diffusional mechanism and its consequence for weak-temperature-dependent viscosity. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 123(11) :9513–9527. 203, 207

Raterron, P., Detrez, F., Castelnau, O., Bollinger, C., Cordier, P., and Merkel, S. (2014). Multiscale modeling of upper mantle plasticity : From single-crystal rheology to multiphase aggregate deformation. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 228 :232–243. 209

Robson, J., Henry, D., and Davis, B. (2009). Particle effects on recrystallization in magnesium–manganese alloys : Particle-stimulated nucleation. *Acta Materialia*, 57(9) :2739–2747. 209

Seol, D., Hu, S., Li, Y., Shen, J., Oh, K., and Chen, L. (2003). Three-dimensional phase-field modeling of spinodal decomposition in constrained films. *Metals and Materials International*, 9(1) :61–66. 203

Skemer, P. and Karato, S.-i. (2008). Sheared lherzolite xenoliths revisited. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 113(B7). 210

Skemer, P., Sundberg, M., Hirth, G., and Cooper, R. (2011). Torsion experiments on coarse-grained dunite : implications for microstructural evolution when diffusion creep is suppressed. *Geological Society, London, Special Publications*, 360(1) :211–223. 210

Solomatov, V. and Reese, C. (2008). Grain size variations in the earth's mantle and the evolution of primordial chemical heterogeneities. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 113(B7). 202

Tasaka, M. and Hiraga, T. (2013). Influence of mineral fraction on the rheological properties of forsterite+ enstatite during grain-size-sensitive creep : 1. grain size and grain growth laws. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 118(8) :3970–3990. 202

Trepmann, C., Renner, J., and Druiventak, A. (2013). Experimental deformation and recrystallization of olivine-processes and timescales of damage healing during postseismic relaxation at mantle depths. *Solid Earth*, 4(2) :423. 210

Van der Wal, D., Chopra, P., Drury, M., and Gerald, J. F. (1993). Relationships between dynamically recrystallized grain size and deformation conditions in experimentally deformed olivine rocks. *Geophysical Research Letters*, 20(14) :1479–1482. 210

Villani, A., Busso, E. P., and Forest, S. (2015). Field theory and diffusion creep predictions in polycrystalline aggregates. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23(5) :055006. 209

Wheeler, J. (2010). Anisotropic rheology during grain boundary diffusion creep and its relation to grain rotation, grain boundary sliding and superplasticity. *Philosophical Magazine*, 90(21) :2841–2864. 208

Yan, M., Cannon, R., and Bowen, H. (1983). Space charge, elastic field, and dipole contributions to equilibrium solute segregation at interfaces. *Journal of Applied Physics*, 54(2) :764–778. 207

Annexe A

Analyse quantitative des textures cristallographiques

Avec la démocratisation des techniques de microscopie EBSD (electron backscatter diffraction), l'accès aux orientations des cristallites d'un polycristal est désormais très répandu. L'intérêt principal de ces informations est de savoir si un polycristal présente une ou des orientations cristallographiques préférentielles (CPO). L'orientation cristallographique d'un cristal est généralement décrit par les trois angles d'Euler (ψ, θ, φ) [Bunge, 1981] (Fig.A.1) représentants des rotations successives du réseau cristallin par rapport à un repère de référence (celui de l'échantillon par exemple).

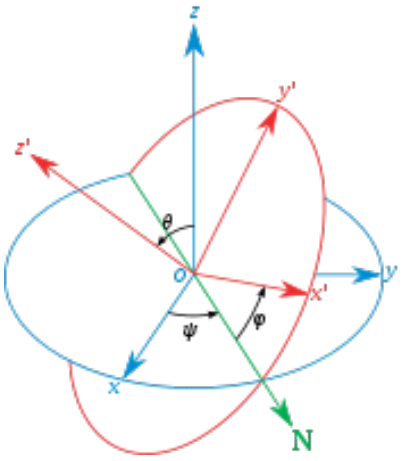


FIGURE A.1 – Illustration des angles d'Euler (ψ, θ, φ) d'après wikipédia.

Une fois que les orientations de chaque cristallite d'un échantillon ont été déterminées, une ou des directions cristallographiques particulières peuvent être représentées dans le repère de l'échantillon par des projections stéréographiques. Il est intéressant de noter que suivant la symétrie du cristal considéré, certains triplets d'angles d'Euler sont équivalents et qu'il n'est pas nécessaire d'explorer tout l'espace des orientations pour représenter des directions cristallographique particulière. Ainsi, l'analyse des textures d'un polycristal ne peut être faite que sur une seule et même phase (une symétrie cristalline donnée) à la fois.
Ces représentations permettent dans un premier temps de repérer si une orientation particulière est fortement représentée dans le polycristal. Cependant cette approche ne permet pas de quantifier l'intensité d'une orientation préférentielle. Pour analyser de manière quantitative une texture

cristallographique, le plus naturel consiste à définir une fonction de distribution des orientations (ODF), calculée à partir des orientions des cristallites. Pour calculer cette ODF $f(g)$, on note g l'orientation d'un cristallite par rapport au repère de l'échantillon, $V(g)$ le volume de l'ODF correspondant à l'orientation g (souvent considéré égal à 1 car les cartes EBSD utilisent des grilles régulières), $dV(g)$ la portion de volume de l'ODF correspondant aux cristallites ayant une orientation comprise dans un volume infinitésimal dg autour de g, on peut alors exprimer $f(g)$ par [Mainprice et al., 2015] :

$$\frac{dV(g)}{V} = f(g)dg, \tag{A.1}$$

où $dg = \sin\theta d\psi d\theta d\varphi/(8\pi^2)$. L'unité de cette ODF est exprimée en "multiple of a random distribution" (m.r.d.) car l'ODF est normalisée à 1 lorsque les orientations sont uniformes (par le rapport $8\pi^2$). Dans la pratique, l'ODF est calculée à partir des projections stéréographiques des directions cristallographiques en utilisant des kernels particuliers pour passer d'une distribution d'orientations discrètes à une fonction continue [Mainprice et al., 2015]. Les valeurs de l'ODF varient entre 0 pour une orientation n'existant pas dans le polycristal à l'infini si le polycristal est en fait un monocristal. Une fois l'ODF obtenue, on peut quantifier l'intensité de la CPO du polycristal en calculant le J-index (J) [Mainprice et al., 2015] :

$$J = \int |f(g)|^2 dg. \tag{A.2}$$

La valeur de cet index varie entre 1, pour des orientations uniformes et l'infini pour un monocristal.

Un autre index très utilisé est le M-Index qui est calculé à partir des angles de désorientation enre chaque cristallite α (toutes les combinaisons sont considérées et pas seulement entre les cristallites voisins). Le principe est de calculer l'écart entre les désorientations mesurées du polycristal R_i^0 avec celles d'un polycristal avec une distribution d'orientation uniforme R_i^T [Skemer et al., 2005] :

$$M = \sum_{i=1}^{n} |R_i^T - R_i^0| \frac{\alpha_{max}}{2n}, \tag{A.3}$$

où α_{max} est l'angle de désorientation maximum théorique (dépend de la symétrie cristalline) et n est le nombre de classes considérées. Cet indice varie entre 0, pour un polycristal avec une texture parfaitement aléatoire, à 1 pour un monocristal.

A.1 Références

Bunge, H. (1981). Fabric analysis by orientation distribution functions. *Tectonophysics*, 78(1-4) :1–21. I

Mainprice, D., Bachmann, F., Hielscher, R., and Schaeben, H. (2015). Descriptive tools for the analysis of texture projects with large datasets using mtex : strength, symmetry and components. *Geological Society, London, Special Publications*, 409(1) :251–271. II

Skemer, P., Katayama, I., Jiang, Z., and Karato, S.-i. (2005). The misorientation index : Development of a new method for calculating the strength of lattice-preferred orientation. *Tectonophysics*, 411(1-4) :157–167. II

Annexe B

La méthode de Saltykov

La méthode de Saltykov [Saltykov, 1958] est utilisée pour comparer des distributions de taille de grains 2D vers leurs distributions 3D statistiquement équivalentes et inversement. Cette méthode permet d'obtenir une distribution de taille de grain équivalente 2D correspondant à une section statistiquement représentative d'un polycristal 3D, et inversement (i.e. polycristal 3D statistiquement représentatif d'une section). Elle permet d'être cohérente par exemple lorsque l'on compare des données obtenues en 2D (par microscopie optique sur des lames minces par exemple) à des données obtenues en 3D (par tomographie au rayon X par exemple). Le principe consiste à considérer des grains 2D circulaires comme des intersections possibles des grains 3D sphériques. Dans la pratique, on cherche a passer d'une distribution 2D en histogramme $N_A(i)$ à une distribution 3D discrète $N_V(j)$ (voir Fig.B.1), et inversement (3D discrète vers 2D en histogramme).

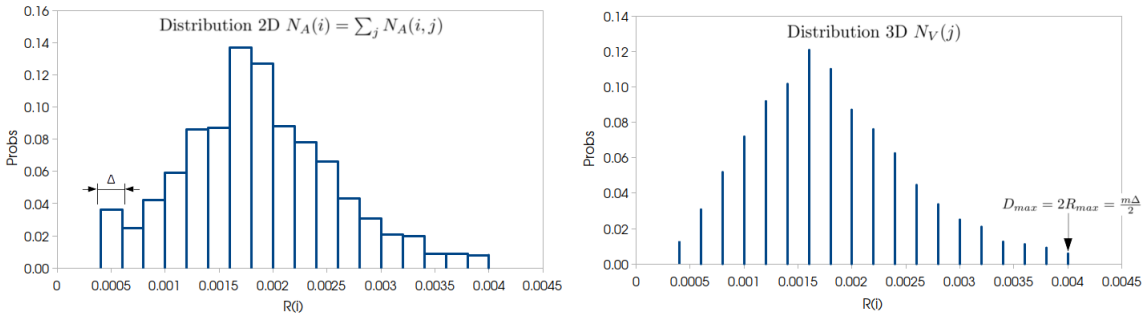


FIGURE B.1 – Distribution 2D en histogramme (gauche), distribution discrète 3D (droite), $N_A(i,j)$ représente la contribution des grains 3D de rayon $R(j)$ à la classe 2D i.

En utilisant les notations de la figure B.1, un grain 3D de rayon $R(j) = \frac{j\Delta}{2}$ va contribuer à la classe 2D i si :

$$H(i-1) < R(j) < H(i), \tag{B.1}$$

avec :

$$H(i) = \sqrt{R(j)^2 - R(i)^2} = \frac{\Delta}{2}\sqrt{j^2 - i^2}. \tag{B.2}$$

Ainsi, la contribution de la classe 3D de rayon $R(j)$ à la classe 2D i est :

$$N_A(i,j) = 2(H(i-1) - H(i))N_V(j), \tag{B.3}$$

où le facteur 2 permet de prendre en compte les deux hémisphères du grain 3D de rayon $R(j)$.

En utilisant la relation B.2 on peut écrire :

$$N_A(i,j) = \Delta N_V(j) k_{ij}, \tag{B.4}$$

avec :

$$k_{ij} = \sqrt{j^2 - (i-1)^2} - \sqrt{j^2 - i^2}. \tag{B.5}$$

En utilisant la relation $N_A(i) = \sum_j N_A(i,j)$ et en notation matricielle on peut écrire :

$$\vec{N_A} = \Delta \boldsymbol{k} \vec{N_V}. \tag{B.6}$$

Cette relation permet alors de passer de la distribution discrète 3D à une distribution 2D en histogramme statistiquement équivalente.
Pour passer d'une distribution en histogramme 2D à une distribution discrète 3D statistiquement équivalente, on peut utiliser la relation précédente :

$$\vec{N_V} = \frac{1}{\Delta} \boldsymbol{k}^{-1} \vec{N_A}. \tag{B.7}$$

En utilisant la méthode développée ci dessus, il est possible d'obtenir des valeurs de probabilités négatives, il faut alors faire un choix pour éviter ceci. Un premier choix peut être de mettre toute les probabilité négative à 0 puis de normaliser la distribution. Un deuxième choix peut consister à redistribuer équitablement les probabilités négatives entre chaque classe. Dans ce travail de thèse c'est le premier choix qui a été utilisé.

B.1 Références

Saltykov, S. A. (1958). Stereometric metallography. *Metallurgizdat, Moscow*, 267. III

Annexe C

Volume conservation enforcement

The artificial volume conservation through the use of another LS functions transport step is not only needed in order to respect the hypothesis, made in section 3.2.2.2, that the phase fractions remain constant. In fact, the computational domain can also be considered as an open domain where chemical compounds, such as silica, may enter and exit through diffusion, which may cause variations in the volume fraction of the different phases. However, in order to estimate the effect of the proportion of DSP on grain growth kinetics, we have to keep this proportion constant throughout the simulation. Using periodic boundary conditions or enlarging the computational domain could have been other solutions to treat or limit this border domain aspect but the first is not implemented (due to remeshing operations) and the second would have been too computer time consuming.
Therefore, at each timestep the signed DSP volume variation $\Delta\Omega$ is tracked and uniformly redistributed by applying the following velocity to the interphase boundaries of the microstructure as schematized in figure C.1 :

$$\vec{v} = -\frac{\Delta\Omega}{\Gamma \Delta t}\vec{n} \tag{C.1}$$

where Γ is the interphase boundary surface where the velocity is applied and Δt is the timestep.

By using this methodology, already tested within a LS context [Pino-Munoz et al., 2014], the volume change over the all simulation does not exceed 0.01% while without this redistribution step the DSP fraction generally increases up to full the calculation domain after a long simulation time. As shown in figure C.1 this phase redistribution step does not change the shape of the DSP grain since the homogeneous velocity field is applied along and through the normal of the interface. It is important to notice that this method is not mass conserving in the traditional sense (e.g. no species conservation equation). Moreover the DSP volume is not locally redistributed though realistic local composition gradient because all of the loss or win volume is homogeneously redispatched on each DSP grain of the microstructure. A perspective of this treatment consists to consider a more realistic redistribution by considering, at each time step, the velocity of Eq.C.1 as locally dependant of the size of the considering second phase grain comparatively to the second phase mean grain size. The idea being to reproduce more closely Ostwald Ripening effects.

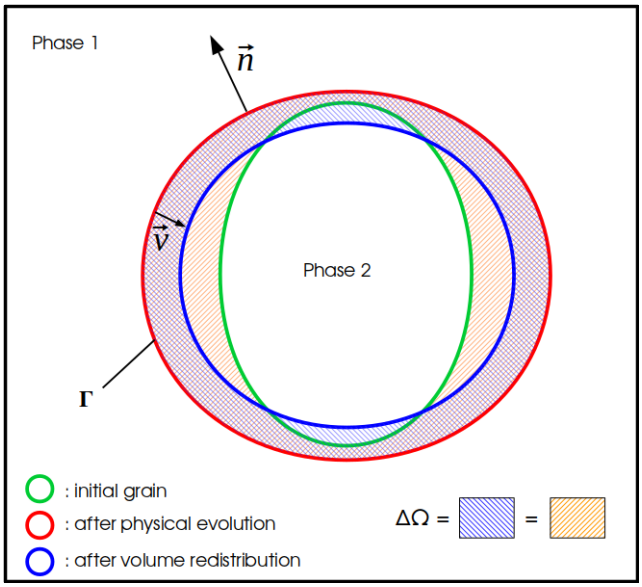


FIGURE C.1 – Representation of the volume conservation enforcement, the green grain is the initial dynamic second phase grain, the red grain is the one obtained after the physical LS function transport step and the blue one is obtained after the volume redistribution transport step.

C.1 Références

Pino-Munoz, D., Bruchon, J., Drapier, S., and Valdivieso, F. (2014). Sintering at particle scale : an eulerian computing framework to deal with strong topological and material discontinuities. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 21(2) :141–187. V

Annexe D

Orthorhombic Kelvin base

In the following, C_{ij} denotes the elastic stiffness matrix written in the Voigt notation such as, for an orthorhombic material :

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}. \tag{D.1}$$

The first three eigenvalues $\lambda_{k=1,2,3}$ of the Kelvin base for this type of symmetry are obtained by searching the values for which the following matrix has a null determinant [Mehrabadi and Cowin, 1990] :

$$\begin{pmatrix} C_{11}-\lambda & C_{12} & C_{13} \\ C_{12} & C_{22}-\lambda & C_{23} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33}-\lambda \end{pmatrix}. \tag{D.2}$$

The associated eigentensors can be written as :

$$\begin{aligned} T^k_{ij} &= L(\lambda_k,\lambda_i,\lambda_j)\times \\ &\begin{pmatrix} C_{12}C_{23}-C_{13}(C_{22}-\lambda_k) & 0 & 0 \\ 0 & C_{12}C_{13}-C_{23}(C_{11}-\lambda_k) & 0 \\ 0 & 0 & (C_{11}-\lambda_k)(C_{22}-\lambda_k)-C_{12}^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{D.3}$$

where :

$$\begin{aligned} L(\lambda_k,\lambda_i,\lambda_j) &= \frac{1}{(\lambda_k-\lambda_i)(\lambda_k-\lambda_j)[C_{12}(C_{13}^2-C_{23}^2)]} \\ \times[&[C_{12}C_{13}-C_{23}(C_{11}-\lambda_i)][(C_{11}-\lambda_j)\epsilon_{11}+C_{12}\epsilon_{22}+C_{13}\epsilon_{33}] \\ -&[C_{12}C_{23}-C_{13}(C_{22}-\lambda_i)][C_{12}\epsilon_{11}+(C_{22}-\lambda_j)\epsilon_{22}+C_{23}\epsilon_{33}]] \end{aligned} \tag{D.4}$$

The last three eigentensors associated to the eigenvalues $\lambda_4 = 2C_{44}, \lambda_5 = 2C_{55}, \lambda_6 = 2C_{66}$, are :

$$T^4_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T^5_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T^6_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}. \tag{D.5}$$

D.1 Références

Mehrabadi, M. M. and Cowin, S. C. (1990). Eigentensors of linear anisotropic elastic materials. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 43(1) :15–41. VII

RÉSUMÉ

Cette thèse a pour but de simuler les évolutions microstructurales des roches du manteau supérieur dans des conditions thermomécaniques représentatives de la lithosphère terrestre. En effet, c'est le comportement mécanique de ces roches qui contrôle, au premier ordre la rhéologie de la lithosphère et donc des plaques tectoniques.

Les outils utilisés et développés dans ce travail sont basés sur le formalisme level-set (LS) permettant une description implicite de la microstructure et la modélisation de la migration de joint de grains à l'échelle du polycristal. Les évolutions microstructurales sont simulées dans un cadre élément fini (EF) robuste et efficace permettant un couplage avec des calculs de plasticité cristalline décrivant le comportement mécanique de la roche.

Une première grande partie de cette thèse est consacrée à la croissance de grain en absence de déformation dans les péridotites. Il est montré, dans un premier temps que la cinétique de croissance d'un agrégat d'olivine (minéral principal des péridotites) n'est pas en accord avec les contraintes naturelles sur la cinétique de croissance de grain des péridotites. Il est ensuite montré que l'introduction de phases secondaires telles que les pyroxènes et le spinelle permet de ralentir la croissance mais ne suffit pas à obtenir des cinétiques cohérentes avec les contraintes naturelles. Finalement il est proposé que les impuretés jouent un rôle important dans la cinétique de croissance des roches mantelliques et que leur prise en compte permet de concilier les contraintes venant des expériences de laboratoire et des observations naturelles.

Dans une deuxième grande partie, le modèle constitutif utilisé pour décrire le comportement mécanique de l'olivine dans un cadre de plasticité cristalline est présenté. La manipulation des différents tenseurs dans ce cadre numérique repose sur la construction de bases tensorielles particulières tenant compte des symétries du cristal et permettant l'utilisation d'une élasticité anisotrope de manière transparente et naturelle. La formulation mixte EF vitesse-pression est également modifiée pour tenir compte de l'anisotropie élastique. Cette manière de décrire la déformation est ensuite enrichie d'un mécanisme de relaxation sensé représenter les mécanismes, autres que le glissement de dislocation, accommodant la déformation dans les polycristaux d'olivine. Cette description est alors couplée avec le formalisme LS pour simuler les évolutions microstructurales d'un agrégat d'olivine durant la déformation. Ce cadre numérique est enfin utilisé pour étudier la localisation de la déformation, dans les polycristaux d'olivine, par différents types de zone de faiblesse pré-existantes.

Finalement, les limites et les perspectives de développement du formalisme numérique pour aboutir à une description fidèle des évolutions microstructurales d'une roche mantellique dans des conditions thermomécaniques de la lithosphère sont discutées.