

LABORATOIRE DE
PHYSIQUE ET
MECANIQUE DES
MATERIAUX

UMR CNRS 7554



Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Metz

MEMOIRE D'HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

**Modélisations physiques et micromécaniques
du comportement des matériaux hétérogènes :
prise en compte de la topologie et
des effets du temps (viscosité et vieillissement)**

Véronique FAVIER

Soutenue le 29 juin 2005 devant le jury composé de :

Michel Suéry	Directeur de Recherche CNRS, INP Grenoble, GPM2	Président
Yves Bréchet	Professeur, INP Grenoble, LTPCM	Rapporteur
Georges Cailletaud	Professeur, Ecole des Mines Paris, Centre Matériaux	Rapporteur
Dierk Raabe	Professeur, Max-Planck-Institut, Düsseldorf	Rapporteur
Jean Yves Cavailé	Professeur, INSA de Lyon, GEMPPM	Examinateur
Pierre Gilormini	Directeur de Recherche CNRS, ENSAM, LIM	Examinateur
Marcel Berveiller	Professeur, ENSAM Metz, LPMM	Examinateur
Xavier Lemoine	Docteur, ARCELOR RESEARCH, Maizières les Metz	Invité

Résumé

MODELISATIONS PHYSIQUES ET MICROMECHANIQUES DU COMPORTEMENT DES MATERIAUX HETEROGENES : PRISE EN COMPTE DE LA TOPOLOGIE ET DES PHENOMENES DEPENDANT DU TEMPS (VISCOSITE ET VIEILLISSEMENT)

Les industries productrices de matériaux, que ce soit dans le domaine des polymères ou celui des métaux, conçoivent de nouveaux matériaux pour répondre à des fonctions spécifiques définies par leurs clients. Elles s'appuient sur les progrès spectaculaires des dernières années dans le domaine de la modélisation des procédés et de la prédiction des propriétés d'emploi. Cependant, des efforts importants restent encore à faire dans la compréhension des relations entre une microstructure et ses propriétés de mise en forme et de tenue en service pour développer et inventer les matériaux de demain. Pour mieux comprendre les relations entre microstructures et propriétés mécaniques, les modèles basés sur une démarche micromécanique par changement d'échelles sont très utiles par leur caractère prédictif étendu. Comment représenter au mieux cette microstructure ? Quel est le rôle de la topologie, c'est-à-dire de la morphologie et l'arrangement spatial des constituants ? Quel est le rôle du comportement propre de chaque constituant sur la réponse du matériau ? Ces questions sont au centre de mes activités de recherche. Ma contribution porte plus particulièrement sur le développement de modèles micromécaniques par changement d'échelles dans deux domaines ouverts : le couplage entre des mécanismes instantanés et dépendants du temps tels que l'élasticité et la viscoplasticité et la prise en compte de la topologie dans les matériaux hétérogènes à fort contraste mécanique.

Dans le cas d'un fort contraste mécanique, l'arrangement des phases joue un rôle du premier ordre sur les propriétés mécaniques. Il induit en particulier que seule une fraction des phases, appelée fraction effective, est active mécaniquement. Cela amène à définir des «phases mécaniques» qui (i) ne sont pas forcément définies par une homogénéité chimique ou physique et (ii) peuvent évoluer avec les conditions de chargements. On parle alors de « motif morphologique évolutif ». Le modèle autocohérent appliqué au motif morphologique de l'inclusion enrobée a été appliqué avec succès aux semi-solides où inclusion et enrobage sont tous deux composés de liquide et de solide. Il a été implanté dans un code d'éléments finis afin de simuler la mise en forme d'alliages métalliques à l'état semi-solide et en particulier le thixoforgeage en collaboration avec ASCOMETAL CREAS.

En ce qui concerne le couplage entre des déformations élastiques instantanés et des déformations viscoplastiques dépendants du temps, un modèle de transition d'échelle, dit modèle à champs translatsés, est proposé en s'inspirant de l'approximation autocohérente. Il fournit une description élastique-viscoplastique des interactions entre hétérogénéités efficace et simple à mettre en œuvre numériquement. Cet outil de transition d'échelle a été appliqué à l'étude du comportement élastique-viscoplastique d'aciers polycristallins présentant différentes microstructures en collaboration avec ARCELOR. Les lois décrivant le comportement du monocristal fondées sur la théorie de la plasticité cristalline, prenant en compte les mécanismes de déformation par glissement cristallographique et éventuellement par maclage, ont été adaptées et enrichies aux types de comportement étudiés : dépendants de la vitesse de déformation, de la température, sous sollicitations monotones ou cycliques, après vieillissement de type Bake Hardening.

La démarche de modélisation proposée jusqu'alors décrit l'activité plastique à l'aide de variables internes homogènes à l'échelle du grain. Or la plasticité apparaît selon des événements spatio-temporels discrets. Un nouveau projet de recherche est proposé pour lever cette hypothèse de « microhomogénéité » en représentant l'activité plastique par une distribution spatiale mais périodique de « particules » de déformation. Cette approche cherche à prendre en compte l'auto-organisation spatiale de la microstructure dans les calculs de champs dans le but de rendre compte naturellement des effets de taille en plasticité.

*« Jamais sans l'autre »
Michel de Certeau*

*A Stéphane
A Sylvain, Clément et Lucie*

A la mémoire de Gilles Canova

Remerciements

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été effectués successivement au Centre d'Etudes et de Recherche sur les Macromolécules Végétales à Grenoble (CERMAV, unité propre du CNRS), au Laboratoire de Physique des Matériaux (LPM UMR CNRS 7556) au sein l'Ecole des Mines de Nancy et au Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux (LPMM UMR CNRS 7554) au sein du Centre d'Enseignement et de Recherche de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers (ENSAM) à Metz.

Je souhaiterais tout d'abord remercier très sincèrement Messieurs Godefroy Kugel et Jean Luc Bauchat, Directeur et Directeur Adjoint de l'ENSAM de Metz pour leurs encouragements dans mes différentes activités, Gabrielle Goutfreind, responsable des services administratifs, sensible à la souplesse nécessaire aux activités de recherche et Denis Matheis, responsable de la scolarité, pour sa grande compréhension de mes nombreuses contraintes.

Je voudrais remercier également chaleureusement Etienne Patoor, Directeur du LPMM à Metz, pour son soutien, son écoute et sa confiance.

Je souhaiterais ensuite exprimer ma très grande reconnaissance à tous les chercheurs expérimentés qui m'ont guidé dans mes différents travaux de recherche : tout d'abord de l'époque grenobloise, Jean Yves Cavaillé, Professeur et Directeur du Groupe d'Etudes de Métallurgie Physique des Matériaux de l'INSA de Lyon, qui m'a transmis son goût pour la Recherche avec un sujet de thèse très riche et très motivant, Henry Chanzy, Directeur de Recherche au CNRS au CERMAV à l'époque, qui m'a fait découvrir l'organisation structurale étonnante des espèces vivantes et Gilles Canova, qui était Directeur de Recherche au CNRS au Laboratoire de Génie Physique et Mécanique des Matériaux (GPM2) et qui restera pour moi un exemple, avec son ouverture d'esprit, ses compétences scientifiques et ses grandes qualités humaines ; ensuite de l'époque nancéenne, Christian G'Sell, Professeur à l'Ecole des Mines de Nancy, qui m'a initié avec rigueur et enthousiasme au comportement mécanique des polymères semi-cristallins ; enfin de l'époque messine, Marcel Berveiller, Professeur à l'ENSAM, qui m'a fait bénéficier de ses larges compétences en micromécanique avec générosité et conviction, apportant toujours des éclairages à mes nombreuses questions et montrant une grande disponibilité. Que l'aventure en micromécanique continue encore longtemps !

J'aimerais remercier très sincèrement tous les membres du jury car ils représentent pour moi des références, chacun dans leur domaine : - ceux déjà cités, Jean Yves Cavaillé et Marcel Berveiller - mais aussi Yves Bréchet, Professeur à l'Institut National Polytechnique de Grenoble, Georges Cailletaud, Professeur à l'Ecole des Mines de Paris et Dierk Raabe, Professeur et Directeur du Max-Planck-Institut für Eisenforschung à Düsseldorf, qui m'on fait l'honneur de rapporter ce travail, Michel Suéry, Directeur de Recherche au CNRS au GPM2, qui a accepté de présider le jury et Pierre Gilormini, Directeur de Recherche au CNRS au futur Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux de l'ENSAM Paris, qui a examiné avec soin mes travaux. Ils ont tous porté un vif intérêt à ce mémoire d'habilitation et ont suscité de nombreuses pistes de réflexion pour mes travaux futurs. Un remerciement tout particulier revient à Xavier Lemoine, chercheur à ARCELOR RESEARCH, qui m'a fait découvrir les aciers industriels et la recherche dans ce grand groupe sidérurgique.

Mes activités ont toujours été menées en partenariat fort avec le monde industriel : autrefois, ELF-ATOCHEM et SOLVAY, aujourd'hui ASCOMETAL CREAS et ARCELOR RESEARCH. Je tiens à remercier plus particulièrement Marc Robelet du CREAS ainsi que les chercheurs d'ARCELOR, Sébastien Allain, Corrine Besseyrias, Pascal Buessler, Olivier Bouaziz, André Galtier, et Jean Louis Uriarte, de la confiance qu'ils m'accordent et des échanges scientifiques constructifs et enrichissants que nous avons.

Mes plus grands remerciements s'adressent aux anciens et nouveaux doctorants sans qui ces travaux n'auraient pu se réaliser : Stéphane Berbenni, qui a retrouvé depuis un an notre équipe en tant que Chargé de Recherche au CNRS, Carole Rouff, Nicolas Bonnet, Pierre Cézard, Najeeb Shielkelsouk et Charles Mareau. J'ai toujours un très grand plaisir à réfléchir avec eux pour faire avancer nos problèmes scientifiques et techniques.

Je tiens à remercier très sincèrement Paul Lipinski, Mohamed Cherkaoui, et Alexis Rusinek, chercheurs au laboratoire pour nos échanges fructueux, Albert Tidu du Laboratoire d'Etude des Textures et Application aux Matériaux (LETAM) à Metz pour un début de collaboration très motivante et Régis Bigot du Laboratoire de Génie Industriel et Production Mécanique (LGIPM) à Metz pour nos discussions animées et constructives dans tous les domaines et sur le thixoforgeage en particulier. Je voudrais également exprimer toute ma gratitude à mes collègues, anciens et nouveaux, de l'équipe ENSAM du LPMM avec qui je partage une vie d'équipe au quotidien Farid Abed Meraim, Tudor Balan, Tarak Ben Zineb, Christophe Collard, Karim Inal, Fodil Meraghni et mes collègues féminines Shabnam Arbab Chirani et Sophie Berveiller. Un grand merci à Abderrahim Nachit et Marc Wary toujours prêts à rendre service et Dominique Vincent qui fait un travail formidable pour nous assister dans nos démarches administratives.

Un grand merci aussi à tous les membres du LPMM et de l'ENSAM pour leurs encouragements et leurs marques de sympathie.

Je remercie enfin toute ma famille pour sa patience et son soutien précieux.

Table des Matières

Préambule : Mon parcours

Chapitre I : Introduction générale : Contexte et Démarche

- I.1 Contexte industriel
- I.2 Démarche micromécanique par changement d'échelles
- I.3 Thème central de mes activités de recherche et plan du mémoire

Chapitre II : Mécanismes de déformation et d'érouissage à l'échelle du monocristal – Plasticité cristalline

- II.1 Contexte
- II.2 Lois d'écoulement – Approche viscoplastique
- II.3 Lois d'érouissage
- II.4 Lois de comportement du monocristal
- II.5 Conclusions

Chapitre III : Applications au comportement des aciers polycristallins

- III.1 Introduction
- III.2 Application au comportement dépendant de la vitesse de déformation et de la température
- III.3 Application à l'analyse de l'échauffement en fatigue
- III.4 Modélisation de l'effet Bake-Hardening
- III.5 Application aux aciers à faible énergie de faute d'empilement présentant de la déformation
- III.6 Conclusion

Chapitre IV : Interactions entre hétérogénéités : Transitions d'échelle

- IV.1 Introduction
- IV.2 Hétérogénéités faiblement contrastées : Cas des polycristaux
- IV.3 Hétérogénéités fortement contrastés
- IV.4 Conclusion

Chapitre V. Conclusions et perspectives

- V.1 Recherche d'un comportement homogénéisé
- V.2 Amélioration de la description du comportement d'un grain monocristallin – Prise en compte d'hétérogénéités d'origine physique
- V.3 Couplage expérience/modèle aux différentes échelles
- V.4 Approche pluridisciplinaire

Références Bibliographiques

- Annexe A** : Application au comportement dépendant de la vitesse de déformation et de la température
- Annexe B** : Application à l'analyse de l'échauffement en fatigue
- Annexe C** : Modélisation de l'effet Bake-Hardening
- Annexe D** : Approximation autocohérente classique
- Annexe E** : Modèles à champs translats
- Annexe F** : Modélisation et simulation des effets de percolation mécanique
- Annexe G** : Comportement des alliages métalliques à l'état semi-solide
- Annexe H** : Curriculum Vitae et Notice des Titres et Travaux

Préambule : Mon Parcours

Avant mon intégration au Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux, j'ai travaillé dans le «monde» des polymères et composites. Aujourd'hui, j'ai rejoint celui des métaux et c'est avec une certaine surprise et surtout un grand plaisir que j'ai découvert que ces «vieux» matériaux et notamment les aciers sur lesquels je travaille aujourd'hui ont énormément de ressources. Autrefois essentiellement ductiles et monophasés, les aciers modernes combinent les propriétés de leurs différentes phases. Dans le cas des aciers Dual-Phase, ils allient la ductilité de la ferrite et la résistance de la martensite. Mieux, ils transforment leur phase ou leur microstructure lors de la déformation de mise en forme pour être encore plus performants en tenue en service. C'est le cas des aciers TRIP et TWIP où la déformation plastique est source de transformation de phase ou de maillage, mécanismes qui procurent une grande résistance mécanique.

Ayant démarré plutôt dans le domaine de l'expérimentation avec l'élaboration et les caractérisations microstructurale et mécanique de matériaux composites, mes activités de recherche se tournent aujourd'hui essentiellement vers la modélisation en interaction forte avec l'expérimentation et la simulation numérique. L'objectif est toujours le même : analyser, comprendre, et décrire les mécanismes de déformation des matériaux hétérogènes. Les modélisations développées cherchent à représenter les mécanismes de déformation à l'échelle la plus pertinente et font apparaître des paramètres physiques et microstructuraux que l'on peut atteindre expérimentalement dans la mesure du possible. Ainsi, je privilégie une approche pluridisciplinaire alliant des outils de modélisation et des outils de caractérisation expérimentale fine grâce à des collaborations de plus en plus fréquentes avec des chercheurs ayant développé des techniques de caractérisation expérimentale tels que les essais dynamiques sur barres d'Hopkinson, les mesures de thermographie infrarouge et l'analyse de contraintes.

Je souhaite également souligner le fait que mes activités de recherche ont toujours cherché à répondre à des problèmes industriels : ATOCHEM durant ma thèse, SOLVAY dans le cadre de mes deux années d'ATER et aujourd'hui ARCELOR (SOLLAC et IRSID) et ASCOMETAL-CREAS. Cette préoccupation répond d'une part à mon souhait de participer (humblement) au développement économique de la recherche française et à mon souci de transmettre l'enjeu de la recherche et du développement aux élèves ingénieurs pour l'avenir d'une entreprise et d'un pays.

Je terminerai ce préambule en insistant sur le fait que le travail présenté ne se serait jamais fait sans «guides» scientifiques et pédagogiques, sans chercheurs collègues passionnés, sans doctorants motivés, sans industriels compétents, sans ingénieurs et techniciens disponibles et sans secrétaires efficaces. Qu'ils et qu'elles soient de Grenoble, Lyon, Montréal, Nancy ou Metz, je les en remercie très sincèrement.

Chapitre I

Introduction

I.1 Contexte industriel

I.2 Démarche micromécanique par changement d'échelles

I.3 Thème central de mes activités de recherche et plan du mémoire

I.1 Contexte industriel

Les industries productrices de matériaux, que ce soit dans le domaine des polymères ou celui des métaux, cherchent à concevoir de nouveaux matériaux pour répondre à des fonctions spécifiques définies par leurs clients. Par exemple :

- ATOCHEM cherche à renforcer les latex par des fibres naturelles pour améliorer leur stabilité thermique et éviter leur effritement au cours du temps (*Favier, 1995 ; Favier et al, 1995a*).
- SOLVAY développe de nouvelles générations de polyoléfines toujours plus résistantes à la propagation de fissure (*Favier et al, 2002*).
- ARCELOR produit des nouveaux aciers alliant ductilité et résistance tout en répondant aux attentes d'allègement des véhicules du secteur automobile (*Berbenni et al, 2004abc*).

Ces évolutions doivent se faire dans les meilleures conditions de coûts de fabrication et de délais. Les industriels cherchent alors à optimiser toute leur chaîne de production, de l'élaboration du produit jusqu'à l'utilisation finale. Des progrès spectaculaires ont été accomplis ces dernières années dans le domaine de la modélisation des procédés et de la prédiction des propriétés d'emploi. Cependant, des efforts importants restent encore à faire dans le domaine des relations entre une microstructure et ses propriétés de mise en forme et de tenue en service pour développer et inventer les matériaux de demain.

I.2 Démarche micromécanique par changement d'échelles

Dans l'optique d'une meilleure compréhension et d'une meilleure maîtrise du comportement mécanique de matériaux hétérogènes sans cesse en évolution, les modèles basés sur une démarche micromécanique par changement d'échelles (modèles micro-macro, modèles d'homogénéisation) sont très utiles par leur caractère prédictif étendu. Contrairement aux modèles phénoménologiques, ils peuvent prédire le comportement de matériaux présentant des écarts de microstructure ou de trajet de chargements sans avoir recours à une nouvelle identification des paramètres tant que les mécanismes élémentaires de déformation restent identiques. En utilisant les modèles d'homogénéisation comme des simulateurs numériques d'essais mécaniques, on peut alors, en jouant sur la microstructure, optimiser les caractéristiques mécaniques d'un matériau plus rapidement parce que s'appuyant sur un nombre limité d'essais expérimentaux.

L'approche micromécanique en question cherche à décrire le comportement macroscopique en effectuant le lien avec l'échelle des mécanismes physiques responsables du comportement effectif du matériau. Plus précisément, on remplace le matériau hétérogène dont on connaît au moins en partie des caractéristiques microstructurales par un matériau homogène équivalent. Cette démarche d'homogénéisation nécessite :

- l'identification de l'échelle pertinente où se jouent les propriétés mécaniques considérées (échelle définissant l'hétérogénéité « principale » du matériau)
- la détermination du comportement local (à l'échelle des hétérogénéités)
- la description des interactions mécaniques entre les hétérogénéités.

L'hétérogénéité des matériaux a des origines très variées. Dans le cas des matériaux composites particuliers ou à fibres, l'hétérogénéité considérée correspond généralement à une phase associée à des états chimique et physique donnés. Au contraire, dans le cas des polycristaux présentant une phase unique définie par sa nature physique, sa composition chimique et sa structure cristallographique, la principale source d'hétérogénéité vient de la désorientation des grains couplée à l'anisotropie du comportement du monocristal inhérente au caractère cristallographique des mécanismes de déformation. L'hétérogénéité considérée est alors le grain monocristallin. Lors de la déformation plastique, les grains monocristallins sont le siège d'une évolution microstructurale forte qui contrôle, au même titre que la texture, la réponse macroscopique du polycristal. L'effort de modélisation doit donc se situer simultanément aux deux échelles : intra et intergranulaires en introduisant au mieux les caractéristiques physiques et mécaniques de la déformation. Au contraire, le comportement des composites dépend essentiellement de l'hétérogénéité matrice-renfort et des propriétés des interfaces. On peut alors se contenter pour le comportement local d'une description phénoménologique du comportement local pour se concentrer dans un premier temps sur la description de l'arrangement spatial des phases et éventuellement de son évolution puis si nécessaire de l'interface.

I.3 Thème central de mes activités de recherche et plan du mémoire

C'est dans ce cadre et dans la thématique plus générale «approche micromécanique par changement d'échelles» fortement développée au LPMM que se développent aujourd'hui mes travaux de recherche. Ils s'effectuent dans l'équipe Rhéologie et Microstructures et plus particulièrement l'équipe «ENSAM», sous la direction de Marcel Berveiller. Dans le thème central «modélisation physique et mécanique des effets de la topologie et du temps (viscosité et vieillissement) sur le comportement des matériaux hétérogènes», ma contribution porte plus particulièrement sur :

- l'adaptation et l'amélioration des lois monocristallines pour prendre en compte les effets du temps, de la vitesse de déformation et de la température sur le comportement mécanique,
- le développement de méthodes de transition d'échelles dans deux domaines ouverts : le comportement élastoviscoplastique et les matériaux hétérogènes à forts contrastes mécaniques.

Cette modélisation s'appuie sur des considérations physiques et mécaniques de la microstructure et de la déformation. Elle se place à l'échelle microscopique et cherche à faire le lien avec l'échelle macroscopique en utilisant et développant des outils micromécanique et de transition d'échelle tel que le modèle autocohérent. On peut classer les matériaux hétérogènes étudiés dans ce mémoire en deux catégories : les polycristaux qui présentent un faible contraste mécanique et des matériaux présentant

deux phases mécaniquement très contrastées tels que les composites à matrice polymère caoutchoutique renforcée par des whiskers de cellulose et les alliages métalliques à l'état semi-solide.

Ce mémoire comprend cinq grands chapitres.

Après ce chapitre introductif, le deuxième chapitre rappelle les concepts de base de la modélisation du comportement à basse température de monocristaux métalliques essentiellement de structures cubiques centrées bien que le cas des structures cubiques à faces centrées soit également abordé. Au niveau du grain, le mécanisme de déformation plastique principalement présent dans les applications ensuite visées est le glissement cristallographique, résultant lui-même de mouvements d'ensembles de dislocations. La description du comportement se fait dans le cadre de la théorie de la plasticité cristalline qui permet de séparer les variables process scalaires (vitesse de glissement, contrainte effective) des variables tensorielles qui caractérisent le réseau cristallin et de séparer ainsi le caractère tensoriel de la déformation plastique (qui fait toute la difficulté de la modélisation phénoménologique) de son caractère évolutif. On peut alors se concentrer sur les lois d'écoulement et d'écrouissage qui relient des variables scalaires (bien que des variables internes tensorielles ont et seront certainement de plus en plus introduites pour prendre par exemple en compte le caractère anisotrope des dislocations (Sedláček et al, 2002)). Pour décrire le glissement, le formalisme viscoplastique a été retenu car il permet de mieux prendre en compte la cinétique du mouvement des dislocations limitée par le franchissement d'obstacles de nature différente. Les lois du monocristal intègrent des paramètres physiques pertinents pour une application donnée : changement de trajet, effet de la température ou de la vitesse de déformation sur le comportement mécanique.

Ainsi, le troisième chapitre montre comment, dans le cadre de mes activités de recherche, les lois monocristallines se déclinent selon que l'on s'intéresse au comportement dépendant de la vitesse de déformation, au comportement en fatigue ou au comportement après vieillissement de type Bake Hardening d'aciers polycristallins. Nous verrons également comment intégrer le mécanisme de déformation par maclage dans le formalisme de la plasticité cristalline pour modéliser le comportement des aciers Fer-Manganèse. Le passage du comportement du monocristal aux applications de polycristaux suppose implicitement une transition d'échelle entre le monocristal et le polycristal. Pour toutes ces applications où les conditions de séparabilité des échelles sont satisfaites (macrohomogénéité), un outil de transition d'échelle en élastoviscoplasticité a été développé. Il est exposé dans la quatrième partie du mémoire.

Le quatrième chapitre de ce mémoire concerne les méthodes de transition d'échelle dans deux problématiques particulières : l'élastoviscoplasticité et les matériaux présentant des hétérogénéités fortement contrastées.

Comme déjà signalé, la principale source d'hétérogénéité des polycristaux vient de l'anisotropie du comportement plastique du monocristal. Les grains ayant des orientations cristallographiques différentes, il y a alors incompatibilité plastique de grain à grain. L'incompatibilité du champ de déformation plastique engendre immédiatement un champ de déformation élastique pour permettre à la déformation totale d'être compatible. D'un point de vue modélisation, il est donc naturel de considérer simultanément les deux champs de déformation, élastiques et plastiques. Par ailleurs, si on adopte le parti pris dans ce travail de considérer la plasticité comme un phénomène cinétique donc dépendante de la vitesse de déformation, il faut coupler élasticité et viscoplasticité, autrement dit des

champs indépendants et dépendants du temps. Ainsi, on cherche à déterminer via une méthode de transition d'échelle le comportement de nature élastique-viscoplastique de polycristaux où les conditions de séparabilité des échelles sont satisfaites.

Dans le cas des polycristaux, le contraste mécanique entre les hétérogénéités reste faible. Celles-ci sont distribués aléatoirement en petits domaines relativement décorrélés (on parle de morphologie désordonnée). On peut alors négliger en première approximation le voisinage immédiat d'une hétérogénéité et supposer qu'elle ne « voit » en moyenne qu'un milieu homogène équivalent (MHE) possédant les mêmes propriétés macroscopiques que le matériau réel. C'est l'idée de base de l'approximation autocohérente où la connaissance de la texture est « suffisante » pour décrire le matériau. Ainsi les grains de même orientation sont rassemblés dans un domaine, appelé inclusion, qui est plongée dans une matrice qui n'est autre que le MHE. Dans le cadre du travail présenté dans ce mémoire, un modèle de transition d'échelle en élastoviscoplasticité, dit modèle à champs translétés, est proposé en s'inspirant de cette approximation autocohérente (§ IV.2). Cette dernière ne porte plus uniquement sur les modules comme dans le cas classique, mais sur des champs compatibles par rapport auxquels on translate les champs réels.

Lorsque le contraste mécanique entre les hétérogénéités devient important, l'arrangement des domaines hétérogènes entre eux joue un rôle du premier ordre dans le comportement mécanique. Modéliser le matériau à partir du seul motif de l'inclusion entourée du MHE devient alors clairement insuffisant. Pour mieux représenter la topologie des phases, on utilise le concept plus riche de motif morphologique qui permet de mettre en avant les caractéristiques microstructurales et les mécanismes de déformation pertinents pour le comportement étudié. Dans le cadre de ce mémoire, deux types de matériaux biphasés ayant deux phases présentant un fort contraste mécanique sont étudiés : des composites polymères renforcés par des whiskers de cellulose et des semi-solides (§ IV.3). Nous verrons dans les deux cas que l'arrangement des phases induit que seule une fraction des phases, appelée fraction effective, est active mécaniquement. Il faut alors identifier cette fraction effective et mettre en avant son rôle mécanique. Cela amène à définir des « phases mécaniques » qui (i) ne sont pas forcément définies par une homogénéité chimique ou physique et (ii) peuvent évoluer avec les conditions de chargements. On parle alors de « motif morphologique évolutif ».

Le cinquième chapitre dresse un bilan de la démarche de modélisation développée jusqu'à présent et propose un projet de recherche pour les années futures destiné à améliorer cette modélisation pour répondre aux enjeux actuels concernant les sollicitations complexes et les effets de taille dans les matériaux.

Dans ce mémoire, les références bibliographiques de l'auteur sont indiquées en italique. Pour chaque action de recherche que j'ai menée, nous indiquons les travaux scientifiques majeurs associés. Le contexte industriel et/ou scientifique est brièvement rappelé. Enfin, les principaux résultats de ces actions sont exposés. Dans certains cas, une annexe complémentaire, sous forme de publications ou de notes d'approfondissement, est proposé pour permettre au lecteur une description plus détaillée du travail.

Chapitre II

Mécanismes de déformation et d'écrouissage à l'échelle du monocristal – Plasticité cristalline

II.1 Contexte

II.2 Lois d'écoulement – Approche viscoplastique

II.2.1 Introduction

II.2.2 Lois de type « puissance »

II.2.3 Loi thermiquement activée – Description générale

II.2.4 Loi du drainage visqueux

II.2.5 Cas particulier des structures CC à fort frottement de réseau

II.3 Lois d'écrouissage

II.3.1 Ecrouissage de nature isotrope

II.3.2 Ecrouissage de nature cinématique

II.4 Lois de comportement du monocristal

II.5 Conclusions

II.1 Contexte

Les approches micro-macro appliquées aux polycristaux nécessitent une description à deux échelles : (i) la détermination du comportement du grain monocristallin et (ii) la modélisation des interactions mécaniques entre grains. Le comportement à basse température du monocristal est décrit dans le cadre de la théorie de la plasticité cristalline qui permet de séparer les variables process scalaires (vitesse de glissement, contrainte effective) des variables tensorielles qui caractérisent le réseau cristallin et de séparer ainsi le caractère tensoriel de la déformation plastique de son caractère évolutif. On peut alors se concentrer sur les lois d'écoulement et d'écrouissage qui s'écrivent sur chaque système de glissement et qui relient classiquement des variables scalaires. Dans ce deuxième chapitre, nous passons en revue ces différentes lois avec le choix clair d'une approche viscoplastique. Ce choix est motivé par les différentes applications étudiées dans le troisième chapitre où la prise en compte des sensibilités à la vitesse de déformation et à la température est essentielle.

II.2 Lois d'écoulement – Approche viscoplastique

II.2.1 Introduction

Pour décrire l'écoulement d'un monocristal dû au glissement cristallographique sur des systèmes de glissement bien définis, on peut distinguer deux voies : celle de la plasticité indépendante du temps et celle de la plasticité dépendant du temps encore appelée viscoplasticité. La première est fondée sur l'observation expérimentale d'une contrainte d'écoulement qui, dans le cas des polycristaux métalliques à basse température ($<0.3 \times$ température de fusion), dépend peu de la vitesse

de déformation tant que celle-ci reste faible ($< 0.1 \text{ s}^{-1}$, ce qui est le cas dans les essais classiquement effectués pour caractériser le comportement). Elle implique l'utilisation de critères de sélection des systèmes de glissement actifs qui peuvent conduire à des indéterminations mathématiques rencontrées lors d'un glissement multiple. La seconde, largement utilisée parce qu'elle ne provoque jamais d'indéterminations dans la sélection, se révèle beaucoup mieux fondée physiquement car l'écoulement plastique (le glissement cristallographique) est bien un phénomène cinétique. Il résulte du mouvement de dislocations. Selon Frost et Ashby (1982), ces dernières peuvent être considérées comme des « porteurs » de déformation au même titre que les électrons sont des porteurs de charge. La vitesse de glissement $\dot{\gamma}$ d'un système de glissement dépend alors de la quantité et de la vitesse de ces porteurs comme le représente la loi d'Orowan (1940) :

$$\dot{\gamma} = \rho_m b \bar{v} \quad (\text{Equation II.2.1})$$

où b est le vecteur de Burgers, ρ_m la densité de dislocation mobiles, \bar{v} la vitesse moyenne des dislocations.

L'introduction d'une vitesse moyenne de dislocations et la loi d'Orowan permettent le passage du mouvement discret des dislocations au glissement continu. Trois types de loi d'écoulement seront abordés : les lois de type «puissance» les plus usuelles, physiquement établies dans le cas du fluage mais largement étendue à tous les types de chargement conduisant à la plasticité, les lois thermiquement activées qui permettent de décrire à la fois la sensibilité à la vitesse de déformation et à la température du comportement des matériaux et le drainage visqueux décrivant l'écoulement aux vitesses de déformations supérieures à 1000 s^{-1} .

II.2.2 Lois de type «puissance»

Les lois de type «puissance» peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau}{\tau_0} \right|^n \text{signe}(\tau) \quad (\text{Equation II.2.2})$$

où $\dot{\gamma}_0$ et τ_0 sont les vitesse de glissement et contrainte de cisaillement de référence, respectivement. L'exposant n est tel que $n = 1/m$ où m est le coefficient de sensibilité à la vitesse.

Cette loi a été développée tout d'abord pour les polycristaux de structure cubique à faces centrées CFC (Asaro et Needleman, 1985 ; Tabourot et al, 1997) et appliquée avec succès aux polycristaux d'alliages de cuivre (Kalidindi, 2001 ; Dumoulin et al, 2003) ou d'aluminium (Zhao et al, 2004). Son application a été étendue aux monocristaux présentant d'autres structures cristallographiques telles que la structure hexagonale dans le cas par exemple d'alliages de zirconium (Lebensohn et Tomé, 1993), la structure cubique centrée CC dans le cas par exemple des travaux que je mène sur les aciers ferritiques (Paquin et al, 2001). Dans le cadre de mes activités sur la plasticité des polymères semi-cristallins, la loi puissance a également été utilisée pour décrire l'écoulement des lamelles de polypropylène qui présentent une structure monoclinique (G'Sell et al, 1999). Le succès de la loi puissance vient en partie de sa simplicité (il ne faut que trois paramètres pour la décrire) et de la possibilité d'en déduire aisément un potentiel de dissipation viscoplastique utile dans les modèles

d'homogénéisation (estimations et bornes) en viscoplasticité. De plus, elle permet de lever le problème de non unicité dans le choix des systèmes actifs inhérent à la plasticité indépendante du temps. En particulier, lorsque $n \rightarrow \infty$, on tombe sur la cas limite de la plasticité indépendante du temps et τ_0 apparaît comme un seuil de plasticité.

Dans le cadre de la thèse de Stéphane Berbenni, nous avons utilisé la loi puissance pour décrire l'écoulement de grains ferritiques d'un acier doux (Paquin et al, 2001). Le choix de n pris égal à 20 a été motivé par le souci de décrire un comportement fortement non linéaire tout en permettant de décrire correctement la sensibilité à la vitesse de l'acier étudié. Il est cependant difficile de faire jouer ces deux rôles à la seule loi puissance. En effet, la Figure II.2.1 montre que la description de la sensibilité à la vitesse de déformation n'est correcte que dans une gamme de vitesse de déformation limitée. Pour aller plus loin, il faut comprendre d'où vient cette dépendance du comportement à la vitesse de déformation. Ceci nous amènera à étudier la loi thermiquement activée (§ II.2.3) puis la loi du drainage visqueux (§ II.2.4). On peut souligner que la loi puissance peut être aussi interprétée comme une approximation de la loi thermiquement activée obtenue lorsque τ est proche de τ_0 .

Afin de mieux rendre compte de la forte non linéarité du comportement (visco)plastique tout en laissant à n son rôle de coefficient de sensibilité à la vitesse, une alternative, proposée par Meric et al (1991), Cailletaud (1992), est d'utiliser une loi à seuil telle que celle écrite ci-dessous :

$$\dot{\gamma} = 0 \quad \text{si} \quad |\tau - \tau_\mu| \leq \tau_0$$

$$\dot{\gamma} = \left(\frac{|\tau - \tau_\mu| - \tau_0}{K} \right)^n \text{signe}(\tau - \tau_\mu) \quad \text{sinon} \quad \text{(Equation II.2.3)}$$

où K et n caractérisent la sensibilité à la vitesse de déformation du matériau, τ_0 représente la cission critique de glissement et τ_μ les contraintes internes à longue distance (§ II.2.3). Cette formulation a l'avantage de mieux décrire le comportement aux très faibles déformations, notamment pour des essais cycliques (§ III.3).

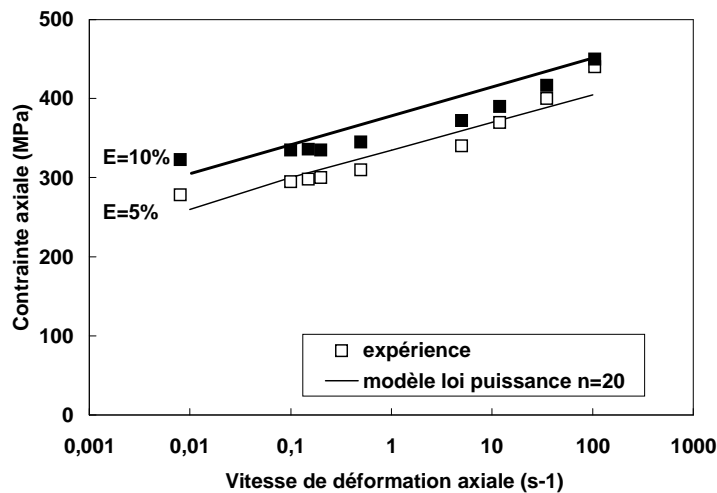


Figure II.2.1 : Courbe de sensibilité à la vitesse pour un polycristal d'acier doux IF (sans interstitiel)
Description de l'écoulement avec une loi puissance où $n=20$

II.2.3 Loi thermiquement activée - Description générale

Le mouvement des dislocations est limité par la présence d'obstacles et leur vitesse est contrôlée par la nature de ces obstacles et les champs de contrainte qu'ils induisent, le champ de contrainte appliqué et la température. Les obstacles présents dans le grain peuvent être séparés en deux grandes catégories : (i) les obstacles qui engendrent des champs de contrainte à longue distance tels que les empilements de dislocations sur les précipités ou les joints de grain - ils sont associés à une contrainte interne athermique notée τ_μ - et (ii) les barrières diffuses tels que le frottement de réseau et les obstacles engendrant des champs de contrainte à courte distance tels que les atomes en solution solide qui peuvent être franchis par activation thermique - ils sont associés à une contrainte effective notée τ^* . La forêt de dislocations est classée dans l'une ou l'autre des catégories selon l'importance des autres obstacles.

Pour déplacer les dislocations, la contrainte appliquée doit être supérieure à la contrainte interne et c'est la contrainte effective qui provoque le mouvement des dislocations (Fig. II.2.2) :

$$\tau^* = \tau - \tau_\mu \quad (\text{Equation II.2.4})$$

Dans un formalisme indépendant du temps, τ^* est associé à un seuil critique qu'il faut atteindre pour mettre en mouvement les dislocations. Dans le formalisme viscoplastique adopté dans ce mémoire, le franchissement des obstacles à courte distance, assisté par la température, s'exprime en terme de probabilité. Il n'y a alors pas de seuil critique associé sauf à 0 K et la contrainte $\tau^*(0\text{ K})$ correspond à la résistance réelle des obstacles. La contrainte effective à une température T , $\tau^*(T)$, nécessaire pour franchir les obstacles peut donc être inférieure à la résistance réelle des obstacles. Au-delà d'une température T_T , l'énergie thermique devient suffisante pour que les barrières diffuses et les obstacles à courte distance soient franchis sans l'aide d'énergie mécanique. On quitte alors le régime dit thermiquement activée pour le régime athermique.

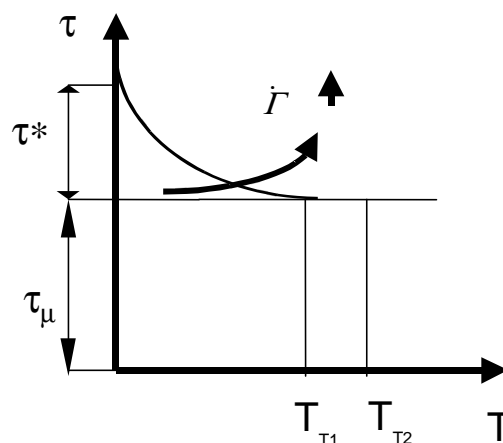


Figure II.2.2 : Evolution de la contrainte d'écoulement τ avec la température T et la vitesse de glissement $\dot{\Gamma}$

Les obstacles pouvant être franchis à l'aide des fluctuations thermiques sont de deux natures :

- les obstacles discrets qui sont franchis individuellement par la dislocation (Fig. II.2.3)
- les barrières diffuses qui sont franchis collectivement par la dislocation (Fig. II.2.4).

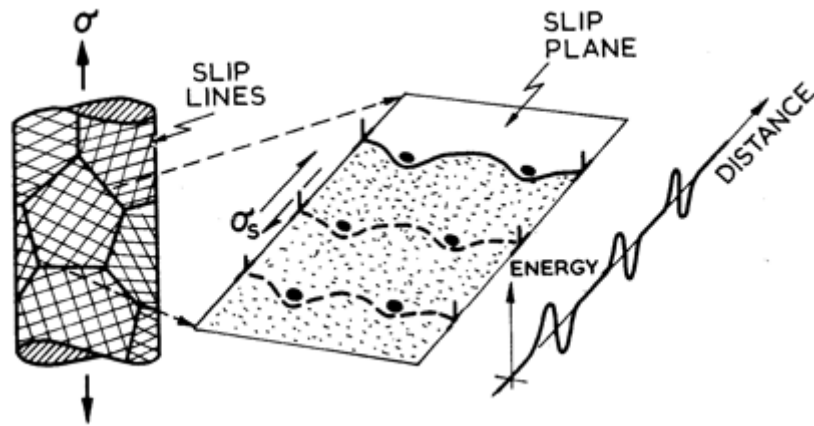


Figure II.2.3 : Glissement cristallographique à basse température limité par la présence d'obstacles discrets (Frost et Asbhy, 1982)

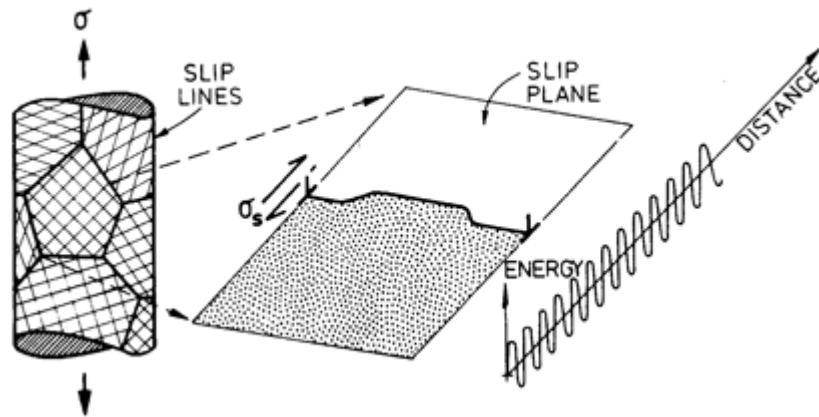


Figure II.2.4 : Glissement cristallographique à basse température limité par la présence d'obstacles diffus (frottement de réseau) (Frost et Asbhy, 1982)

Dans ce formalisme viscoplastique, la vitesse moyenne des dislocations s'écrit sous la forme d'une loi d'Arrhenius (Kocks et al, 1975 ; Louchet et al, 1979 ; Klepaczko, 1981 ; Tang et al, 1998, *Berbenni et al, 2004ab*) :

$$\bar{v} = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau)}{kT}\right) \quad (\text{Equation II.2.5})$$

où $\Delta G(\tau)$ est l'énergie d'activation thermique nécessaire pour franchir les obstacles, T est la température absolue, k est la constante de Boltzmann et v_0 est une vitesse de référence.

Dans cette représentation phénoménologique de la vitesse moyenne des dislocations qui rencontrent un ensemble d'obstacles, $\Delta G(\tau)$ dépend de la distribution des obstacles et du champ (on parle de profil) de contrainte interne qu'ils produisent. Sa représentation la plus générale est donnée par Kocks et al (1975) :

$$\Delta G(\tau) = \Delta G_0 \left(1 - \left(\frac{\tau^*(T)}{\tau^*(0K)} \right)^p \right)^q \quad (\text{Equation II.2.6})$$

$\tau^*(0K)$ est la contrainte seuil qu'il faut atteindre pour franchir les obstacles sans aide de l'activation thermique. Elle dépend en particulier de la distance entre obstacles et donc de l'état d'écroutissage du matériau (Tab. II.2.1) (Frost et Asbhy, 1982). ΔG_0 (ΔF du Tableau II.2.1) est l'énergie d'activation requise pour franchir un obstacle isolé sans aide d'une contrainte extérieure. p et q sont deux paramètres qui dépendent de la nature des obstacles. Leur influence n'est importante que lorsque ΔG_0 est élevée.

<i>Obstacle strength</i>	ΔF	$\dot{\tau}$	<i>Example</i>
Strong	$2 \mu b^3$	$> \frac{\mu b}{\ell}$	Dispersions; large or strong precipitates (spacing ℓ)
Medium	$0.2-1.0 \mu b^3$	$\approx \frac{\mu b}{\ell}$	Forest dislocations, radiation damage; small or weak precipitates (spacing ℓ)
Weak	$< 0.2 \mu b^3$	$\ll \frac{\mu b}{\ell}$	Lattice resistance; solution hardening (solute spacing ℓ)

Tableau II.2.1 : Caractéristiques des obstacles tirés de Frost et Asbhy (1982)

Finalement, en combinant les équations II.2.1, II.2.5 et II.2.6, on obtient la vitesse de glissement par l'équation II.2.7 :

$$\dot{\gamma} = \rho_m b v_0 \exp \left[- \Delta G_0 \left(1 - \left(\frac{\tau^*(T)}{\tau^*(0K)} \right)^p \right)^q \right] \quad (\text{Equation II.2.7})$$

avec $\tau^* = \tau - \tau_\mu$.

En général, l'écoulement plastique est limité par des obstacles de nature variée et représenter la superposition de ces différentes contributions est loin d'être trivial. Certains auteurs (Goto et al, 2000 ; Campagne et al, 2005) utilisent une contribution additive des contraintes seuil associées aux différents obstacles selon le modèle « Mechanical Threshold Stress » proposé par Follansbee et Kocks (1988). Cette démarche nécessite d'identifier les paramètres ($\Delta G_0, p, q, \tau^*(0K)$) associés à chaque type d'obstacle, ce qui est délicat puisque qu'on ne sait pas, en général, différencier les contributions des différents obstacles expérimentalement. On peut, plus simplement, chercher l'obstacle dominant. Dans le cas des structures CFC, la contrainte d'écoulement est contrôlée essentiellement par les interactions

entre dislocations alors que dans le cas des structures CC, c'est surtout le frottement de réseau qui limite la plasticité. Le paragraphe II.2.5 aborde les mécanismes de glissement prédominants dans le cas des structures CC qui seront essentiellement étudiées dans la suite de ce mémoire. Auparavant, intéressons-nous au régime où la vitesse de glissement est contrôlée par le drainage visqueux.

II.2.4 Drainage visqueux

D'une manière générale, la vitesse des dislocations entre deux obstacles est contrôlée par le temps d'attente à l'obstacle et le temps de parcours entre deux obstacles. :

- Pour des vitesses de déformation inférieures à 100 s^{-1} , le temps d'attente à l'obstacle est beaucoup plus grand que le temps de parcours. L'activation thermique facilite le franchissement de l'obstacle et la contrainte à appliquer sera d'autant plus faible que la température est élevée. On est dans le régime thermiquement activé décrit précédemment (§ II.2.3).
- Pour des vitesses de déformations supérieures à 1000 s^{-1} , les niveaux de contraintes deviennent assez élevés pour que les dislocations franchissent instantanément les obstacles sans aide nécessaire de l'activation thermique. Le parcours des dislocations entre deux obstacles est dans ce cas freiné par le réseau cristallin et la vibration des atomes (drainage visqueux ou "phonon drag"). La force de cette interaction se mesure par le coefficient de drainage visqueux B et selon une relation linéaire entre la vitesse de glissement et la contrainte (Follansbee et al, 1984) :

$$\bar{v} = \frac{\tau b}{B} \quad (\text{Equation II.2.8})$$

Les valeurs de B variant typiquement entre 10^{-5} et 10^{-4} Ns/m^2 (Klahn et al., 1970). En combinant les équations II.2.1 et II.2.8, on obtient :

$$\dot{\gamma} = \rho_m b^2 \frac{\tau}{B} \quad (\text{Equation II.2.9})$$

A forte vitesse de déformation, la densité de dislocation tend vers une valeur limite (Kumar et al, 1968 ; Kumar et Kumble, 1969). Le rapport ρ_m/B devient alors quasi-indépendant de la contrainte et de la température. La vitesse de glissement suit ainsi une loi visqueuse newtonienne.

- La gamme des vitesses intermédiaires semble être une zone de transition du mécanisme thermiquement activé au mécanisme « phonon drag ».

II.2.5 Cas particulier des structures CC à fort frottement réseau

Dans les structures cubiques centrées, l'obstacle le plus limitant pour l'écoulement plastique est le frottement de réseau. L'énergie de cœur le long d'une dislocation est minimale lorsqu'elle suit une rangée atomique dense. Pour la dislocation, le cristal se présente alors comme un réseau de vallées dites de Peierls, droites et longues, correspondant à des minimums de cette énergie (Peierls, 1940). Le déplacement d'une dislocation d'une vallée à l'autre nécessite l'application d'une force pour vaincre la force de Peierls comme si un frottement existait (François et al, 1995). La force de Peierls ou la cission

critique associée dépend de la structure cristallographique du cristal et de la nature de la dislocation. Elle est élevée pour les dislocations vis dans les structures CC ($\approx 10^{-2}\mu$ où μ est le module de cisaillement) à cause des dissociations de cœur qui s'amorcent dans plusieurs plans. Elle est en revanche extrêmement faible pour les dislocations coins ou pour les structures CFC ($\approx 10^{-5}\mu$).

Dans les structures CC, la plasticité est donc contrôlée par le mouvement des dislocations vis, limité lui-même par le frottement de réseau. Le déplacement de la ligne de dislocation s'effectue par nucléation et propagation de double-décrochements formés de courts segments de dislocations qui vont d'une vallée de Peierls à une autre (Shockley, 1952). La formation de ces doubles décrochements est thermiquement activée. D'après l'équation II.2.7, la vitesse de glissement suit la loi suivante :

$$\dot{\gamma} = 0 \quad \text{si } \tau^* = \tau - \tau_{\mu} \leq 0$$

$$\dot{\gamma} = \rho_m b v \exp \left[-\frac{\Delta G_0}{kT} \left(1 - \left(\frac{\tau^*(T)}{\tau^*(0K)} \right)^p \right)^q \right] \quad \text{si } \tau^* = \tau - \tau_{\mu} > 0 \quad (\text{Equation II.2.10})$$

La valeur de l'énergie d'activation correspond à celle des barrières de Peierls et est de l'ordre de $0.1\mu b^3 eV$ et la contrainte thermiquement activée $\tau^*(T)$ est la contrainte nécessaire pour franchir les barrières de Peierls à la température T . $\tau^*(0K)$ est la contrainte de Peierls à $0K$.

Il est important de souligner que l'équation II.2.10 doit permettre aussi de décrire la sensibilité à la température des cristaux à structure CC observée expérimentalement (Keh et Nakada, 1967 ; Campbell et Ferguson, 1970, Luft et al, 1972). Celle-ci est attribuée à une diminution de la contrainte de Peierls avec la température. Notons que dans le formalisme adopté, la contrainte de Peierls, $\tau^*(T)$, diminue naturellement avec la température (cf. Fig II.2.2). En revanche, dans un formalisme de type «indépendant du temps» ne faisant pas intervenir la notion de probabilité mais de seuil, il faut introduire une loi complémentaire pour faire décroître le seuil (associé à la contrainte de Peierls) avec la température par exemple en suivant la loi empirique de Jaoul (1964) pour les structures CC :

$$\tau_p(T) = \tau_p(0K) - aT^{1/3} \quad (\text{Equation II.2.11})$$

II.3 Lois d'écrouissage

La loi d'écoulement thermiquement activée est écrite pour un état structural constant. Une manière simple de prendre en compte l'écrouissage du matériau avec la déformation consiste à faire évoluer les contraintes internes τ_{μ} ou la contrainte seuil à $0 K$, $\tau^*(0K)$. D'un côté, les contraintes internes qui proviennent des champs de déformations élastiques de l'ensemble des défauts du monocristal donnent lieu à un écrouissage dit cinématique, orienté par la déformation plastique. D'un autre côté, l'évolution de la contrainte seuil associé à un mécanisme bien défini (ici concept de force d'obstacle et tension de ligne) conduit à un écrouissage de nature isotrope dans le sens où il produit une expansion du domaine élastique. Les représentations de ces deux types d'écrouissage sont brièvement rappelées dans les paragraphes suivants. Notons qu'ils peuvent être « vus » comme deux méthodes pour durcir les métaux : « on peut accumuler les obstacles pour empêcher les dislocations de

se déplacer, ou on peut développer au cours de la déformation des contraintes qui s'opposent à la contrainte appliquée » (Philibert et al, 1998).

II.3.1 Ecouissage de nature isotrope

Dans les monocristaux de structure CC ne présentant pas de précipités, après le frottement de réseau, le deuxième obstacle limitant l'écoulement plastique est lié aux interactions entre dislocations. Ces dernières ont deux effets. Le premier est la génération de contraintes internes plutôt à longue distance de l'ordre de $(\mu b/2\pi)\sqrt{\rho}$. Il génère donc un écouissage de nature cinématique (§ II.3.2). Le deuxième est la création de points d'ancrage aux autres dislocations (jonctions triples par exemple) qui, à cause de la tension de ligne, ne peuvent être franchis que lorsque la cission résolue atteint la valeur de $(\alpha\mu b)\sqrt{\rho}$ ou dans une approche multi-systèmes avec N systèmes de glissement (Franciosi,

1985) $\mu b \left(\sum_{h=1}^N a^{(gh)} \rho^{(h)} \right)^{\frac{1}{2}}$ où (g) et (h) définissent des systèmes de glissement et $a^{(gh)}$ est la

matrice d'interaction. Ces obstacles appelés dislocations forêts sont plutôt des obstacles à courte distance mais dont la portée reste supérieure à celle du frottement de réseau (Tab. II.2.1). Par ailleurs, la présence de points d'ancrage aux dislocations est à l'origine du mécanisme de multiplication des dislocations par les sources de Frank-Read et de l'écouissage de nature isotrope (au sens d'une évolution de la contrainte seuil mais bien anisotrope puisque différent selon chaque système de glissement) survenant avec la déformation. Pour un système (g) , l'évolution de la densité de dislocations $\dot{\rho}^{(g)}$ provient des mécanismes de multiplication et d'annihilation des dislocations. Elle est souvent représentée par l'équation suivante (Kocks et Mecking, 2003 ; Tabourot et al, 1997):

$$\dot{\rho}^{(g)} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^{(g)}} - 2\gamma_c \rho^{(g)} \right) \dot{\gamma}^{(g)} \quad (\text{Equation II.3.1})$$

Dans le premier terme, $L^{(g)}$ est le libre parcours moyen des dislocations pour le système (g) . Dans le cas où le parcours des dislocations est limité par les dislocations forêts perçant le plan de glissement, son expression est donnée par :

$$L^{(g)} = \left(\frac{K}{\sqrt{\sum_{i \neq g} \rho^{(i)}}} \right) \quad (\text{Equation II.3.2})$$

où on fait l'hypothèse que la distance moyenne entre les obstacles produits par un système (i) est proportionnelle à $\frac{1}{\sqrt{\rho^{(i)}}}$. La modélisation précédente considère que le libre parcours moyen des

dislocations est uniquement déterminé par la forêt de dislocations. Estrin et Mecking (1984) proposent une extension de ce modèle prenant en compte des obstacles d'autres natures tels que la taille de grain, des particules d'une seconde phase ...

$$\frac{I}{L^{(g)}} = \frac{I}{D} + \left(\frac{K}{\sqrt{\sum_{i \neq g} \rho^{(i)} K}} \right) + \dots = \sum_i \frac{I}{d_i} \quad (\text{Equation II.3.3})$$

ou plus généralement

$$\frac{I}{L^{(g)}} = \sum_i \frac{w_i}{d_i} \quad (\text{Equation II.3.4})$$

où d_i est la distance moyenne entre des obstacles de type i et w_i le poids associé à ces obstacles (Roters et al, 2000). Les équations II.3.3 et II.3.4 sont une façon de traiter la superposition de différents obstacles (d'autres concepts pourraient bien sûr être imaginés) qui décrit de manière simple que le libre parcours moyen des dislocations est contrôlé par les obstacles qui sont les plus rapprochés. On incorpore ainsi des effets de taille dans le comportement en y introduisant des dimensions microstructurales caractéristiques dont l'importance relative de la contribution évolue avec la déformation. En revanche, on ne tient pas compte des différentes forces d'obstacle, ni de l'arrangement local des dislocations dû aux interactions obstacle-dislocation (dislocations géométriquement nécessaires) (Roters et al, 2000). Dans le paragraphe III.5, nous suivons ce modèle en y intégrant l'effet des macles sur le libre parcours moyen des dislocations dans la phase austénitique d'aciers monophasés et biphasés (aciers DUPLEX).

Le deuxième terme de l'équation précédente est associé à l'annihilation des dislocations caractérisée par une distance critique y_c qui dépend de la température. Une relation approximative basée sur l'interaction de deux dislocations vis est proposée par Essmann et Mughrabi (1979) :

$$y_c(T) \approx \frac{\mu b}{2\pi\tau_c^{(g)}(T)} \quad (\text{Equation II.3.5})$$

où $\tau_c^{(g)}(T)$ est la cisssion critique. Dans cette description, y_c peut donc dépendre du système de glissement au travers de $\tau_c^{(g)}(T)$. Ce deuxième terme peut être vu aussi plus généralement comme un terme de restauration dynamique englobant plusieurs mécanismes (annihilation de paires ou aux joints de grain) (Verdier et al, 1998).

Comme le remarque Kubin (2004), ce type de modélisation marche bien tant que la déformation reste monotone, ce qui tend à montrer que les gradients de déformation qui se développent ne contribuent pas de manière significative à la contrainte d'écoulement. De fait, une description détaillée de la microstructure ne s'impose que lors de changement de trajet de déformation. Utiliser la seule variable densité de dislocation ρ pour représenter l'état d'écrouissage du matériau devient alors insuffisant. Il faut en particulier prendre en compte l'écrouissage de nature cinématique qui résulte de l'auto arrangement spatial des dislocations.

II.3.2 Ecroissage de nature cinématique

L'écroissage cinématique est par définition orienté par la déformation et est donc de nature anisotrope. Il traduit des hétérogénéités locales de déformation liées à la présence par exemple de précipités ou de cellules de dislocations. Le modèle le plus simple pour le décrire est le modèle de Prager. Il décrit le fait que la contrainte ou le taux de contrainte interne sur le grain $\dot{\sigma}_{ij}^{\mu}$ évolue linéairement avec la déformation ou le taux de déformation (visco) plastique $\dot{\epsilon}_{ij}^{vp}$:

$$\dot{\sigma}_{ij}^{\mu} = H \dot{\epsilon}_{ij}^{vp} \quad (\text{Equation II.3.6})$$

où H est le coefficient de Prager. Le taux de contrainte interne résolue $\dot{\tau}_{\mu}^{(g)}$ sur le système de glissement (g) est alors donnée par :

$$\dot{\tau}_{\mu}^{(g)} = R_{ij}^{(g)} \dot{\sigma}_{ij}^{\mu} \quad (\text{Equation II.3.7})$$

Ce modèle permet d'estimer correctement le seuil de plasticité pour un essai Baushinger (cf. par exemple § III.3) mais est nettement insuffisant pour décrire la courbe d'écroissage et donne de très mauvais résultats pour les autres trajets complexes. La raison principale de ce non succès est que dans ce type de représentation, la microstructure est prise en compte de façon très « moyennée ». Or, lors de changements de trajets, les effets de l'hétérogénéisation de la déformation plastique par création de cellules de dislocations deviennent prépondérants. Pour améliorer les résultats, beaucoup d'auteurs prennent alors en compte la microstructure hétérogène de dislocations considérée comme un milieu biphasé : l'intérieur des cellules constitue la première phase et les murs de dislocations la deuxième (Mughrabi, 1983 ; Muller et al, 1994). En particulier, en utilisant les outils de la micromécanique, on peut ainsi introduire un écroissage non local à l'échelle des cellules correspondant au durcissement des murs du au glissement dans les cellules. A l'inverse de cette démarche qui cherche à se rapprocher de la physique, Cailletaud (1992) propose des modèles d'écroissage issus des modèles phénoménologiques macroscopiques mais écrits à l'échelle du système de glissement en utilisant des variables d'écroissage liées aux quantités de glissement (taux de glissement et glissement cumulé). Cette modélisation de l'écroissage avec saturation permet de décrire avec succès le comportement de métaux sous chargements cycliques. A ce stade, il est important de souligner que, même si notre démarche cherche à rester au plus près des mécanismes physiques de la déformation (visco)plastique, à cette échelle (échelle du système de glissement et du grain), la description ne peut être que phénoménologique mais nous y reviendrons dans la conclusion de ce chapitre.

II.4 Lois de comportement du monocristal

Dans le cadre de ce mémoire, le comportement du monocristal est décrit par un élément de Maxwell associant en série un ressort linéaire représentant l'élasticité ou la puissance stockée et un amortisseur, non linéaire dans le cas général, représentant la viscoplasticité ou la puissance dissipée (Fig. II.4.1). Le choix de l'élément de Maxwell correspond à l'hypothèse classique de partition des déformations que l'on pose dans les problèmes élasto-(visco)plastiques mais il ne permet pas de

prendre en compte des mécanismes de déformations anélastiques comme nous le verrons pour l'application de la modélisation proposée pour déterminer la puissance dissipée sous faibles contraintes (§ III.3). Le choix de l'élément de Maxwell impose la forme des équations du modèle de transition d'échelle, dit à champs translétés, en élastoviscoplasticité que nous avons développé (§ IV.2.3.2) bien que les idées de base de ce modèle puissent être aussi appliquées au cas d'un comportement de type Kelvin-Voigt.

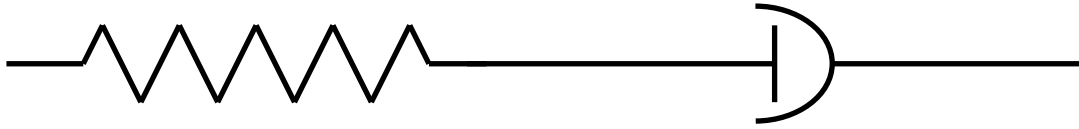


Figure II.4.1 : Représentation de l'élément de Maxwell

La loi de comportement du monocristal s'écrit donc ainsi :

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^v = s_{ijkl} \dot{\sigma}_{kl} + m_{ijkl} (\sigma_{mn}) \sigma_{kl} = s : \dot{\sigma} + m(\sigma) : \sigma \quad (\text{Equation II.4.1})$$

où « : » indique un produit doublement contracté. s est le tenseur des complaisances élastiques. La loi de comportement viscoplastique suit une linéarisation sécante où m est le tenseur des complaisances viscoplastiques qui dépend en général des contraintes mais qui devient constant dans le cas de la viscosité linéaire. La théorie de la plasticité cristalline permet d'écrire que :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^v = \sum_g R_{ij}^{(g)} \dot{\gamma}^{v(g)} \quad (\text{Equation II.4.2})$$

La loi d'écoulement (cf. § II.2) peut se mettre sous la forme générale suivante :

$$\dot{\gamma}^{v(g)} = m_{\dot{\gamma}}^{(g)} \tau^{(g)} \quad (\text{Equation II.4.3})$$

où $m_{\dot{\gamma}}^{(g)}$ est un scalaire dépendant en général des cisssions résolues et de référence sur (g) . Sachant que :

$$\tau^{(g)} = R_{kl}^{(g)} \sigma_{kl} \quad (\text{Equation II.4.4})$$

on peut écrire :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^v = \left[\sum_g R_{ij}^{(g)} m_{\dot{\gamma}}^{(g)} R_{kl}^{(g)} \right] \sigma_{kl} \quad (\text{Equation II.4.5})$$

Le choix de la formulation sécante impose, là encore, les équations de transition d'échelle mais les bases de la méthode pourraient être appliquées à d'autres méthodes de linéarisation du comportement viscoplastique telle que la linéarisation affine. Ces questions seront discutées au paragraphe IV.2.

II.5 Conclusion

Les concepts de base présentés reposent sur la physique des mécanismes de déformation. Ils sont communs à l'ensemble des études que j'ai menées sur les aciers polycristallins. Pour chaque application, ils ont été enrichis de manière spécifique pour décrire au mieux le comportement du grain monocristallin puis la réponse du polycristal dans différentes conditions de chargement (effet de la température ou de la vitesse de déformation, trajet cyclique sous faible contrainte, vieillissement de type Bake Hardening) et pour différentes microstructures (présence de solution solide, de précipités, d'une deuxième phase). Toutes ces applications sont décrites dans le chapitre suivant.

Notons auparavant que dans cette modélisation monocristalline, les mécanismes physiques sont décrits par une "homogénéisation" implicite des mécanismes consistant à substituer aux événements spatio-temporels discrets des "Variables Internes Phénoménologiques de Process" dont on modélise les évolutions par l'intermédiaire des outils de la micromécanique et de la thermodynamique. Par exemple, dans le cas de la plasticité, il s'agit de l'approche cristallographique dans laquelle la variable interne est le glissement plastique. Ce formalisme s'étend facilement à d'autres mécanismes donnant lieu à des déformations inélastiques tels que le maillage (traité au paragraphe III.4) ou la transformation de phase ; la variable interne est alors la fraction volumique de macles ou de martensite. Cette hypothèse de "microhomogénéité" peut être levée par des simulations de mouvements discrets de défauts (Devincre et Kubin, 1997 ; von Blanckenhagen et al, 2004 ; Fivel et Forest, 2004) mais le passage aux échelles supérieures n'est alors plus directement possible en raison des capacités mémoire et des temps de calcul prohibitifs. Dans la partie « perspectives » (§ 5) de ce mémoire, une approche alternative est proposée pour passer des mécanismes discrets à une modélisation continue. Fondée sur la description spatiale mais périodique de « particules » de déformation caractérisées par leur nombre, leur orientation, leur amplitude, leur distribution spatiale, elle cherche à prendre en compte l'auto-organisation spatiale de la microstructure dans les calculs de champs.

Chapitre III

Applications au comportement des aciers polycristallins

III.1 Introduction

III.2 Application au comportement sensible à la vitesse de déformation et à la température

III.2.1 Contexte industriel

III.2.2 Lois monocristallines

III.2.3 Principaux résultats

III.2.4 Perspectives

III.3 Application à l'analyse de l'échauffement en fatigue

III.3.1 Contexte industriel

III.3.2 Lois monocristallines

III.3.3 Principaux résultats

III.3.4 Perspectives

III.4 Modélisation de l'effet Bake-Hardening

III.4.1 Contexte industriel

III.4.2 Modélisation des mécanismes à l'origine de l'effet Bake hardening

III.4.3 Principaux résultats

III.4.4 Perspectives

III.5 Application aux aciers à faible énergie de faute d'empilement présentant de la déformation plastique par maillage

III.5.1 Contexte industriel

III.5.2 Lois monocristallines

III.5.3 Premiers résultats

III.5.4 Perspectives

III.6 Conclusion

III.1 Introduction

Dans cette partie, nous appliquons les différents concepts vus précédemment pour décrire le comportement de polycristaux d'aciers pour des applications très différentes, essentiellement tournées vers la tenue en service tels que l'effet de la vitesse de déformation sur le comportement (§ III.2), le comportement en fatigue (§ III.3), le comportement après vieillissement de type Bake Hardening (§ III.4). La prise en compte de microstructures variées est aussi un point fort de la modélisation proposée. Nous verrons en particulier des aciers monophasés et multiphasés, des aciers durcis par la présence de précipités ou d'atomes en solution solide et des aciers présentant des mécanismes de déformation par glissement et par maillage (§ III.5). Dans ces applications concernant des polycristaux «massifs», pour passer du comportement du monocristal au polycristal, nous avons développé une méthode de transition d'échelle pour des comportements élastique-viscoplastiques (modèle à champs translétés, *Sabar et al, 2002, Favier et al, 2003*) qui sera discutée dans le quatrième chapitre de ce mémoire (§ IV). Toutes les actions décrites dans ce chapitre s'effectuent dans le cadre d'un partenariat fort entre le LPMM et ARCELOR.

III.2 Application au comportement dépendant de la vitesse de déformation et de la température

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de S. Berbenni soutenue en janvier 2002 encadrée par M. Berveiller et V. Favier et 2 actions contractuelles dans le cadre de Projet de Fins d'Etudes de l'ENSAM avec ARCELOR
- DEA de C.A. Dhulst 2004-2005 encadré par V. Favier, A. Rusinek et T. Balan
- Favier V., Berbenni S., Lemoine X., Berveiller M. (2004b), Dynamic behaviour of steels : an elastic-viscoplastic micro-macro polycrystalline approach, DYMAT 15th Technical Meeting "Crashworthiness and constitutive relationships for engineering materials", Metz, France, 51-56
- Berbenni S., Favier V., Lemoine X., Berveiller M. (2004a), Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures, Materials Science and Engineering A, 372, 128-136
- Berbenni S., Favier V., Berveiller M., Lemoine X. (2004b), Modélisation micromécanique du comportement élastique-viscoplastique des aciers IF et Dual-Phase, La Revue de la Métallurgie, 5, 381-389
- Paquin A, Berbenni S, Favier V, Lemoine X, Berveiller M (2001), Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels. Int. J. Plasticity, 17, 1267-1302.

III.2.1 Contexte industriel

La course à l'allègement des véhicules conduit les fabricants de produits plats comme ARCELOR à développer des nuances d'aciers de plus en plus résistantes tout en restant ductiles pour répondre au cahier des charges en terme de formabilité et de tenue au crash. Par exemple, les aciers doux à emboutissage supérieur (deep drawing quality) sont en partie remplacés aujourd'hui par des aciers multiphasés comme les aciers ferrite-martensite (Dual-Phase steels) ou des aciers micro-alliés (HSLA steels). Les performances mécaniques de ces aciers doivent être testées et validées non seulement dans des conditions de chargements statiques mais aussi à grandes vitesses de déformation pour s'approcher des conditions réelles d'utilisation. L'intérêt d'utiliser un modèle micromécanique par changement d'échelles pour estimer le comportement est double :

- simuler des trajets de chargement complexes à différentes vitesses de déformation et différentes températures en remplacement d'essais expérimentaux difficiles et coûteux à mettre en œuvre,
- déterminer la sensibilité à la vitesse de déformation de différentes microstructures en vue de les optimiser pour répondre à la fois aux exigences de ductilité et de résistance des aciers.

III.2.2. Lois monocristallines

Les aciers étudiés sont des aciers à base ferritique de structure cubique centrée. Les systèmes de glissement pris en compte sont les systèmes $(110)\langle 111 \rangle$ et $(112)\langle 111 \rangle$. La vitesse de glissement est supposée être contrôlée (i) aux vitesses de déformation inférieures à 100 s^{-1} par le mouvement thermiquement activé des dislocations de type vis pour lesquelles l'obstacle principal est le frottement de réseau (ii) aux vitesses de déformation supérieures à 1000 s^{-1} par les mécanismes de drainage visqueux conduisant à une forte augmentation de la sensibilité à la vitesse de déformation. A partir des concepts présentés au chapitre II et suivant (Follansbee et al, 1984 ; Teodosiu, 1975) l'expression de la

vitesse de glissement pour chaque système de glissement s'écrit dans une approche multi-systèmes de la manière suivante :

$$\dot{\gamma}^{(g)} = \frac{(\tau^{(g)})^2}{\underbrace{\frac{\mu^2}{\dot{\gamma}_0} \exp \left[+ \frac{\Delta G_0}{kT} \left(1 - \left(\frac{|\tau^{(g)}|}{\tau_r^{(g)}} \right)^p \right)^q \right]}_A + \underbrace{\frac{\mu^2}{\dot{\gamma}_1} |\tau^{(g)}|}_B} \text{signe}(\tau^{(g)}) \quad (\text{Equation III.2.1})$$

Dans l'équation III.2.1, les contraintes internes $\tau_{\mu}^{(g)}$ ont été négligées pour alléger l'écriture. Dans le régime du phonon drag, le terme A est négligeable et l'équation III.2.1 s'écrit :

$$\dot{\gamma}^{(g)} = \dot{\gamma}_1 \left(\frac{1}{\mu^2} \right) \tau^{(g)} \quad (\text{Equation III.2.2})$$

Elle traduit bien un comportement newtonien et la saturation de la densité de dislocation à fortes vitesses de déformation vers une valeur limite (intégrée dans la valeur de $\dot{\gamma}_1$) (§ II.2.4). Dans le régime thermiquement activé, le terme B est négligeable et l'équation III.2.1 s'écrit :

$$\dot{\gamma}^{(g)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau}{\mu} \right)^2 \exp \left[- \frac{\Delta G_0}{kT} \left(1 - \left(\frac{\tau^{(g)}}{\tau_r^{(g)}} \right)^p \right)^q \right] \quad (\text{Equation III.2.3})$$

Le terme pré-exponentiel inclut la densité de dislocations mobiles ρ_m qui en première approximation est proportionnelle à (Kocks et al, 1975) :

$$\rho_m \alpha \left(\frac{\tau}{\mu b} \right)^2 \quad (\text{Equation III.2.4})$$

Par ailleurs, la contrainte seuil à 0 K, $\tau^*(0K)$, nécessaire pour franchir les barrières de Peierls a été remplacée par une contrainte de référence $\tau_r^{(g)}$. Cette dernière représente de manière phénoménologique la résistance interne du matériau qui présente de nombreux défauts ne se limitant pas au frottement de réseau. Cette contrainte seuil perd alors sa signification physique première mais permet de prendre en compte l'évolution de l'état d'écrouissage du matériau en écrivant :

$$\tau_r^{(g)} = \tau_{r0}^{(g)} + \mu b \left(\sum_{h=1}^N a^{(gh)} \rho^{(h)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{Equation III.2.5})$$

Le deuxième terme de la somme est la contrainte nécessaire pour franchir la forêt de dislocations où en première approximation la densité de dislocations forêts est assimilée à la densité totale de dislocations. L'évolution de la densité de dislocations est calculée par l'équation II.3.1 que l'on rappelle ici :

$$\dot{\rho}^{(g)} = \frac{1}{b} \left(\frac{\sqrt{\sum_{i \neq g} \rho^{(i)}}}{K} - 2y_c(T)\rho^{(g)} \right) |\dot{\gamma}^{(g)}| \quad (\text{Equation III.2.6})$$

$\tau_{r0}^{(g)}$ est la contrainte associée au frottement de réseau. Comme physiquement attendu dans les structures CC, l'étape d'identification des paramètres du modèle conduit à une valeur de la contrainte de Peierls $\tau_{r0}^{(g)}$ environ 10 fois plus forte que la contrainte interne initiale liée à la forêt de dislocation $\mu b \left(\sum_{h=1}^N a^{(gh)} \rho_0^{(h)} \right)^{\frac{1}{2}}$ (avec $\rho_0^{(h)} = 10^{10} \text{ m}^{-2}$).

y_c est la distance critique d'annihilation qui dépend de la température T selon la relation :

$$y_c(T) = \frac{\beta}{\tau_{r0}(T)} \quad (\text{Equation III.2.7})$$

β est un paramètre matériau à ajuster et $\tau_{r0}(T)$ est défini, d'après l'équation. II.3.11, par :

$$\tau_{r0}(T) = \tau_{r0}(293K) - a((T - 293K))^{1/3} \quad (\text{Equation III.2.8})$$

où 293K est la température initiale de l'essai.

Pour prendre en compte l'échauffement du matériau apparaissant aux vitesses de déformation élevées, un couplage thermomécanique traduisant la conversion partielle de la dissipation viscoplastique en chaleur a été introduit. Ainsi, à chaque pas, la valeur de la température est réactualisée et son effet sur la réponse du matériau est intégré dans la modélisation et ceci à plusieurs niveaux :

- au niveau du terme de restauration dynamique (via la distance d'annihilation (Eqn. III.2.7 et III.2.8)),
- au niveau la loi d'écoulement (Eqn. III.2.3) puisque cette dernière dépend explicitement de la température,
- au niveau de la cission de référence $\tau_r(T)$ via $\tau_{r0}(T)$ (Eqn. III.2.5 et III.2.8) dans la loi d'écoulement (Eqn. III.2.3). Cet adoucissement thermique est-il justifié ? En effet, dans

l'équation III.2.3, la résistance (contrainte seuil) de «l'ensemble des obstacles» est définie par $\tau_r(\theta K)$ (§ II.2.2). Lorsque la température augmente, c'est la probabilité de «franchir ces obstacles» qui augmente grâce à la présence de l'énergie thermique et non, a priori, la résistance «des obstacles» qui diminue, contrairement au formalisme de la plasticité indépendante du temps. Ne prend-on pas alors deux fois en compte l'effet de la température? Dans quelles mesures a-t-on le droit de considérer que la résistance « des obstacles » reste indépendante de la température ? Ces questions méritent une étude approfondie de l'effet de la température et sa modélisation sur le comportement des aciers.

Notons par ailleurs que la modélisation de l'écroutissement présenté ici (Eqn. III.2.5) est issue du comportement des structures CFC principalement contrôlé par les interactions entre dislocations (Tabourot et al, 1997 ; Kocks et Mecking, 2003). Dans le cas des structures CC sollicitées à basse température, le comportement est gouverné par l'interaction des dislocations vis avec le réseau cristallin qui confine ces dislocations dans des directions cristallographiques bien particulières. De ce fait, la configuration de ces lignes de dislocations ancrées entre deux obstacles présente de longues parties rectilignes. Le calcul de la résistance de la « forêt » basée sur la courbure classique de la ligne de dislocation et sa tension de ligne ne peut plus alors être appliqué aussi simplement que dans le cas des structures CFC. La mobilité des dislocations vis participe à l'écroutissement qui devient alors dépendant de la vitesse de déformation et de la température (Tang et al, 1999). A partir des mécanismes élémentaires de mouvement des dislocations et de leurs interactions, Ortiz et son équipe (Stainier et al, 2002) proposent un modèle micromécanique complet permettant de décrire l'écroutissement, la sensibilité à la vitesse et l'adoucissement thermique des structures CC.

III.2.3 Principaux résultats

Dans le cadre de la thèse de Stéphane Berbenni, seul le régime thermiquement activé a été considéré. Le modèle a été appliqué au comportement dépendant de la vitesse de déformation dans la gamme [10^{-3} s^{-1} - 100 s^{-1}] d'aciers présentant différentes microstructures. Trois classes d'aciers ont été plus particulièrement étudiées : un acier monophasé ferritique (Interstitial Free Steel) (Fig. III.2.1), un acier monophasé contenant des précipités (HSLA steels) (Fig. III.2.2) et des aciers biphasés ferrite-martensite (aciers Dual-Phase) (Fig.III.2.3). Pour chaque acier, les textures expérimentales ont été discrétisées sur un ensemble de grains (dont le nombre varie entre 100 et 5000 suivant la caractéristique étudiée) pour être prises en compte dans les simulations. A titre d'exemple, la Figure III.2.4 compare les courbes de sensibilités à la vitesse de trois aciers à base de ferrite contenant 0%, 8% et 15% de martensite. Du point de vue modélisation, les aciers Dual-Phase sont considérés comme des polycristaux biphasés. Les paramètres de la loi de comportement de la ferrite ont été identifiés à partir de trois essais expérimentaux effectués en traction uniaxiale à 8.10^{-3} s^{-1} , 12 s^{-1} , 100 s^{-1} sur l'acier 100% ferritique. Dans le cas des aciers Dual-Phase, ces paramètres ont été gardés identiques à l'exception des valeurs initiales de cission de référence et du libre parcours moyen des dislocations qui ont été modifiées pour prendre en compte la diminution de la taille moyenne des grains de ferrite avec la fraction volumique de martensite. Le comportement de la phase martensitique, en première approximation, a été supposé suivre une même classe de loi de comportement que celle de la phase ferritique. Cependant, les valeurs de l'énergie d'activation et de la cission de référence initiale ont été modifiées pour représenter sa plus haute résistance mécanique. Pour plus de détails sur la modélisation développée et ses applications, le lecteur peut se référer à *Berbenni et al (2004a)* donné en Annexe A.

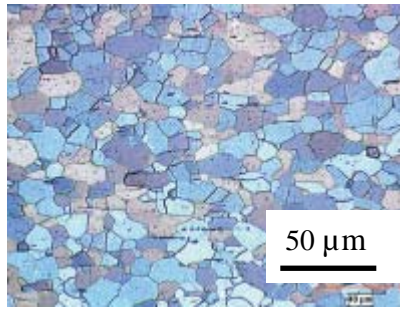


Figure III.2.1 : Micrographie d'un acier monphasé ferritique IF (ARCELOR)

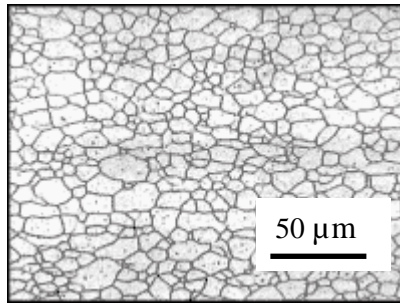


Figure III.2.2 : Micrographie d'un acier monphasé ferritique HSLA contenant environ 0.1% de précipités (ARCELOR)

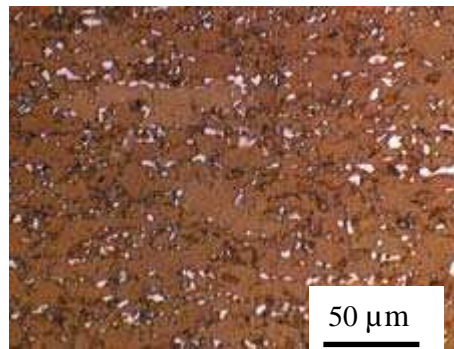


Figure III.2.3 : Micrographie d'un acier biphasé (ferrite-8% martensite) Dual-Phase contenant 8% de martensite (ARCELOR)

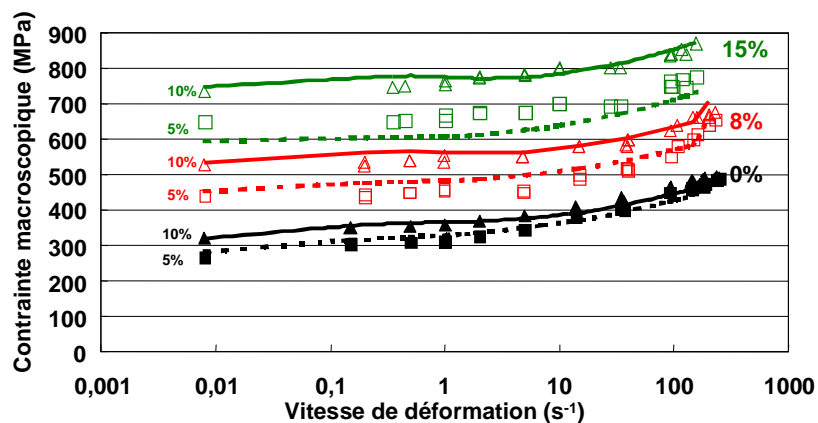


Figure III.2.4 : Courbes de sensibilité à la vitesse pour des déformations macroscopiques de 5% et 10% : pour l'acier IF (0% de martensite), l'acier DP450 (8% de martensite), l'acier DP600 (15% de martensite) : expérience (points) et modèle (lignes) (Berbenni et al, 2004ab)

En prenant en compte le régime de drainage visqueux, l'application du modèle a été étendue aux vitesses de déformation voisines de 1000 s^{-1} . Les paramètres de la loi de comportement du monocristal ont été identifiés manuellement à partir de trois essais expérimentaux obtenus en traction uniaxiale pour trois vitesses de déformation 8.10^{-3} s^{-1} , 92 s^{-1} , 983 s^{-1} (Fig.III.2.5). Les valeurs des paramètres physiques ainsi déterminées sont cohérentes avec les données de la littérature (Favier *et al*, 2005). Avec le même jeu de paramètres, le modèle a été utilisé avec succès pour prédire l'évolution de la sensibilité à la vitesse de déformation jusqu'à environ 5000 s^{-1} lors d'essais en cisaillement (Fig. III.2.6). Les figures III.2.5 et III.2.6 et comparent les résultats du modèle obtenus en prenant en compte ou non le drainage visqueux. Elles montrent un bon accord entre expériences et simulations dans le régime thermiquement activé, ce qui permet de valider le modèle aux vitesses de déformation inférieures à 100 s^{-1} . Dans le domaine des grandes vitesses de déformation, elles tendent à prouver que le drainage visqueux est à l'origine de la forte augmentation de la sensibilité à la vitesse observée au-delà de 1000 s^{-1} .

Enfin, le modèle a été utilisé pour simuler la sensibilité du comportement à la température dans le régime thermiquement activé. Une nouvelle identification des paramètres a été effectuée sur un essai de traction uniaxiale à 253 K. On observe une bonne adéquation expérience/modèle dans la gamme de température étudiée (Fig. III.2.7). Remarquons que lorsque l'on garde les paramètres identifiés sur des essais à différentes vitesses de déformation pour effectuer ces mêmes simulations, on décrit très mal la sensibilité à la température. Inversement, les paramètres identifiés sur des essais effectués à différentes températures ne sont pas pertinents pour une bonne description de la sensibilité à la vitesse de déformation. Il est clair que la qualité d'un modèle résulte de la pertinence à la fois de la modélisation et de la procédure d'identification des paramètres qui, dans ce cas présent, doit combiner des essais effectués à différentes températures et à différentes vitesses de déformation. Reste à déterminer le nombre et lesquels.

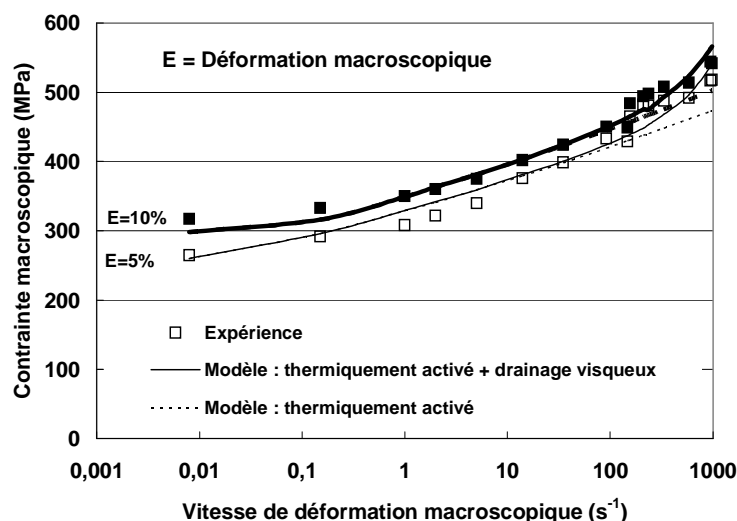


Figure III.2.5 : Courbes de sensibilité à la vitesse de déformation obtenues en traction uniaxiale pour des déformations macroscopiques de 5% et 10% : pour l'acier doux : expérience (points) et modèle (lignes)

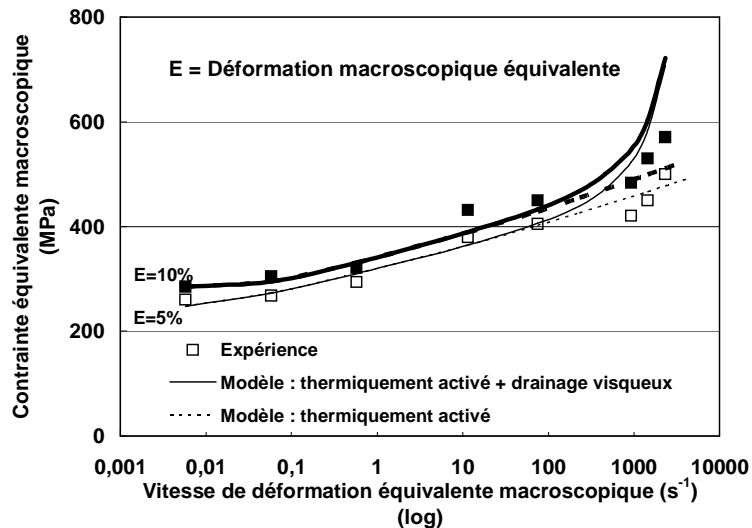


Figure III.2.6 : Courbes de sensibilité à la vitesse de déformation obtenues en cisaillement pour des déformations macroscopiques de 5% et 10% : pour l'acier doux : expérience venant de Rusinek et Klepaczko (2001) et Berbenni (2002)) (points) et modèle (lignes)

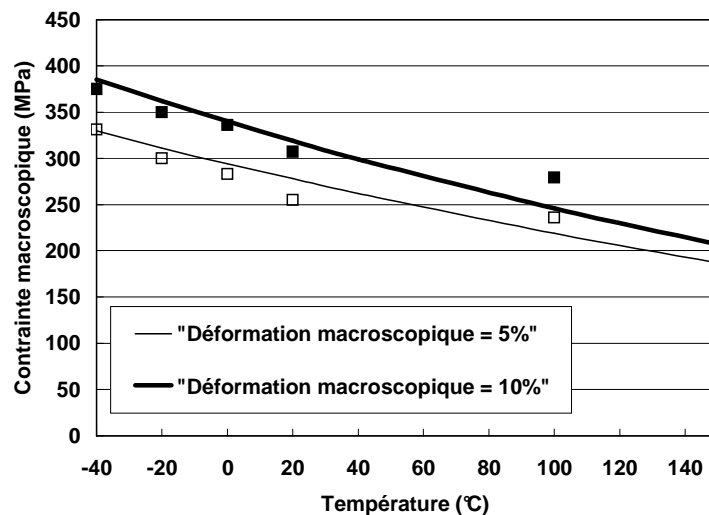


Figure III.2.7 : Courbes de sensibilité à la température obtenues en traction uniaxiale pour des déformations macroscopiques de 5% et 10% pour l'acier IF : expérience (points) et modèle (lignes)

III.2.4 Perspectives

L'utilisation de paramètres physiques facilite grandement l'étape d'identification. Mais elle permet surtout une extrapolation en dehors de la zone de calage pour peu que l'on s'assure que les mécanismes pris en compte restent valides et que l'on choisisse de manière appropriée les courbes expérimentales de référence pour l'identification. Les perspectives de ce travail sont de mettre au point une procédure d'identification automatique afin d'utiliser cet outil pour prédire les sensibilités à la vitesse de déformation et à la température d'aciers présentant différentes microstructures et ainsi remplacer une partie des essais expérimentaux. Pour cela, il faut encore poursuivre l'analyse de l'échauffement et de ces effets sur le comportement à différentes vitesses. Un travail de collaboration avec A. Rusinek dans le cadre du DEA de Charles Antoine Dhulst se met en place pour confronter expérience et modèle dans ce domaine.

III.3 Application à l'analyse de l'échauffement en fatigue

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de C. Mareau démarrée en octobre 2004 avec ARCELOR encadrée par M. Berveiller et V. Favier + 2 Projets de Fin d'Etudes de l'ENSAM + 1 étudiant stagiaire de l'ENSEM Nancy
- Favier V., Berveiller M., Buessler P., Galtier A. (2004), «Analyse, à l'aide d'un modèle polycristallin, de l'échauffement d'aciers sollicités en fatigue», Colloque Plasticité, Metz, France, Avril 2004
- Morgado P., Favier V., Buessler P. (2002), «Analyse de l'échauffement en fatigue d'aciers sollicités en fatigue», Note interne ARCELOR Innovation R&D, CMC/02/R/3211/pilote

III.3.1 Contexte industriel

La fatigue d'une structure est un phénomène très complexe car il dépend de trois éléments : le matériau (son état après mise en forme, son état de surface...), le chargement (sa contrainte moyenne, son amplitude, ses changements de trajets, ...) et le milieu environnant (son état corrosif, sa température, ...). La détermination des propriétés à la fatigue se fait classiquement par construction de la courbe de Wöhler du matériau étudié (Lieurade, 1982 ; Bathias et Bailon, 1997). Cette méthode nécessite de nombreux essais d'endurance qui sont longs et coûteux et constitue un frein pour des études approfondies des mécanismes à l'origine de la fatigue. Une alternative repose sur l'analyse d'essais d'échauffement pour déterminer la limite d'endurance moyenne du matériau (Luong, 1998 ; La Rosa et Risitano, 2000). Les essais d'échauffement consistent à appliquer une séquence de blocs de chargements cycliques au matériau et d'observer l'évolution de la température stationnaire de l'échantillon sur chaque bloc de chargement (voir par exemple Doudard, 2004).

Dans le cas des aciers, l'analyse d'une courbe d'échauffement, fonction de la contrainte maximale appliquée au cours du bloc, montre que cet échauffement de quelques dixièmes de degrés aux faibles contraintes s'accélère à partir d'une contrainte dite de réversibilité (Fig. III.2.1) (Vaucheret et Galtier, 2002). Cette contrainte de réversibilité qui correspond à une inflexion de la courbe est bien inférieure à la limite élastique du matériau et semble être liée (au moins empiriquement) à sa limite d'endurance (Luong, 1998 ; La Rosa et Risitano, 2000). D'un point de vue industriel, cette méthode pourrait donc remplacer les essais d'endurance, à condition de préciser le lien entre échauffement et mécanismes de déformation, par exemple pour expliquer l'effet de la microstructure sur la courbe d'échauffement. En particulier, on constate que dans le cas de l'acier S355, l'inflexion de la courbe (Fig.III.3.1) est beaucoup moins marquée que dans le cas de l'acier biphasé HR 55 ferrite- bainite (Danielou et al, 1999 ; Morgado et al, 2002) ou de l'acier Dual Phase 60 ferrite-marténite (Doudard, 2004). Au-dessus de la contrainte de réversibilité, il est admis que l'augmentation de la température est liée à la présence d'une plasticité qui «commence à se voir» dans le matériau (La Rosa et Risitano, 2000). Elle se manifeste par l'apparition de lignes de glissement en surface dans la partie centrale de l'éprouvette ou des bandes de glissement plus intenses dans les grains bien orientés (Vaucheret et Galtier, 2002 ; Galtier et al, 2002). Au contraire, l'origine de l'échauffement aux contraintes inférieures à la contrainte de réversibilité reste une question ouverte. Est-elle due à des mécanismes anélastiques, c'est-à-dire engendrant des déformations mécaniquement réversibles mais dissipatifs ? Si oui, lesquelles ? Dans les matériaux à fort frottement de réseau tels que les aciers IF étudiés dans le paragraphe III.1, on sait que les dislocations coins se déplacent bien avant d'atteindre la cission critique

déclenchant le mouvement des parties vis (Astié et al, 1981 ; Tang et al, 1999). L'échauffement aux faibles contraintes est-il le signe d'une microplasticité liée au glissement des dislocations coins ?

L'intérêt d'utiliser un modèle micromécanique par changement d'échelles dans cette étude est de :

- mieux comprendre l'effet de mécanismes anélastiques et inélastiques et l'influence de l'écroutissage sur le comportement cyclique et la courbe d'échauffement,
- analyser l'influence de paramètres microstructuraux (densité de dislocation, taille de grain, présence d'une seconde phase, ...) et l'effet des conditions de chargements (rapport de la contrainte maximale sur la contrainte minimale, fréquence, trajet) sur la courbe d'échauffement.

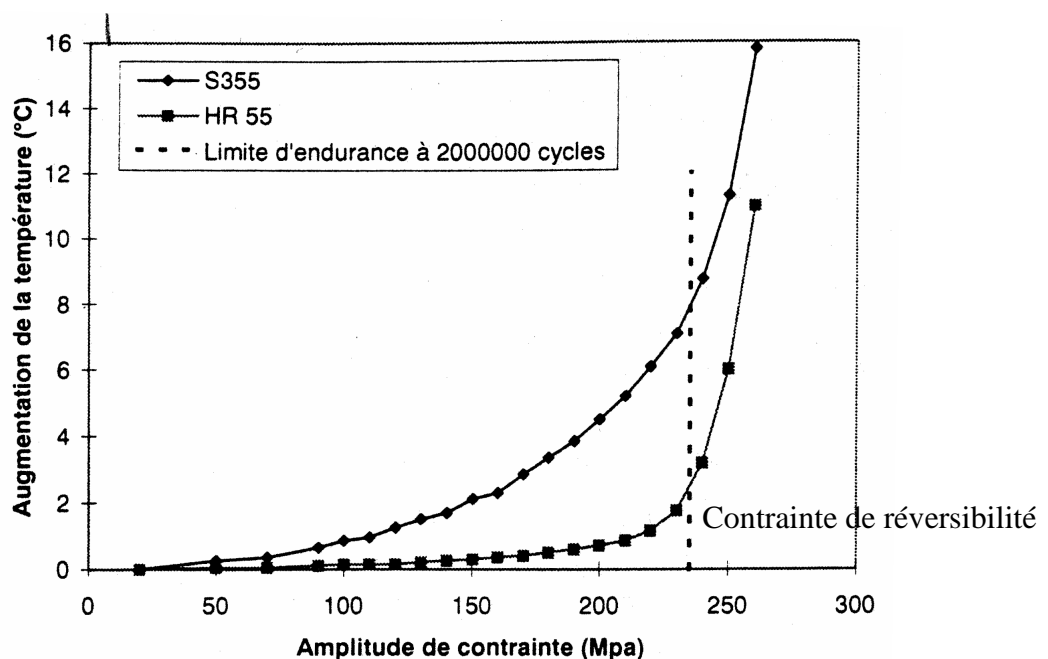


Figure III.3.1 : Evolution de l'échauffement en fatigue en fonction de l'amplitude de contrainte de l'acier S355 (94% de ferrite et 6% de perlite) et de l'acier HR 55 (40% de ferrite et 60% de bainite) (Morgado et al, 2002)

Avant de poursuivre, notons que l'échauffement mesuré lors d'essais cycliques dépend de la géométrie de l'éprouvette, des propriétés thermiques des matériaux étudiés et des sources de chaleurs. Dans les essais d'échauffement, deux sources de chaleurs sont classiquement présentes (Chrysochoos et Louche, 2000 ; Boulanger et al, 2004) : la source thermoélastique et la dissipation intrinsèque. Dans le cadre de notre approche micromécanique par changement d'échelles, c'est à cette dernière que nous nous intéressons en cherchant à la comparer à des valeurs issues de l'expérience. Cette dissipation peut être estimée expérimentalement par des mesures d'échauffement à l'aide d'un thermocouple, ou plus finement à l'aide de la thermographie infrarouge (Boulanger et al, 2004), en remontant par méthode inverse aux sources de chaleur. Une autre méthode consiste à mesurer l'aire de boucles d'hystérésis (Vaucheret et Galtier, 2002).

III.3.2 Lois monocristallines

Comme dans le cas de l'application dynamique, les aciers étudiés sont des aciers ferritiques à fort frottement réseau. Dans ce travail, les principaux mécanismes de dissipation considérés sont la relaxation et le glissement des dislocations. Deux interprétations à deux échelles différentes en sont données. Elles restent à discuter.

Interprétation n°1 :

A l'échelle des segments vis de la dislocation, on suppose que la relaxation et le glissement sont tous deux régis par le mouvement des dislocations vis en interaction avec le réseau cristallin. Plus précisément, dans ces aciers de structures CC, les dislocations franchissent les barrières de Peierls par la formation thermiquement activée de décrochements (§ II.2.5). Suivant l'idée de Karato (1998), sous une contrainte faible, la formation et la propagation de double-décrochement isolés produisent des micro-déformations réversibles lorsque l'on relâche les contraintes et conduisent à un processus de relaxation. Sous une contrainte plus élevée, le mécanisme continu et coopératif de nucléation et de migration des doubles décrochements entraîne un déplacement de grandes longueurs de lignes de dislocations vis. Combiné à un processus de multiplication des dislocations (voir 2^{ème} interprétation), il en résulte un vrai glissement cristallographique et une déformation viscoplastique irréversible.

Interprétation n°2

A l'échelle de la dislocation, on suppose que la relaxation et le glissement sont tous deux régis par des effets de tension de ligne. Tant que la contrainte est inférieure au frottement de réseau, la ligne de dislocation est immobile, rectiligne, ancrée entre deux obstacles (voir 1^{ère} interprétation). Dès qu'elle commence à bouger, elle forme un arc entre les points d'ancrage d'un rayon de courbure résultant de l'équilibre entre la tension de ligne et la force de Peach-Kohler. La déformation appelée microdéformation (Astié et al, 1981) engendrée par ce mouvement de dislocation est parfaitement réversible et à la décharge, la dislocation revient à sa position initiale (Granato et al, 1958 ; Stern et Granato, 1962 ; Isaac et Granato, 1989). Lorsque la contrainte atteint une valeur critique, l'arc devient instable et la ligne de dislocation s'allonge pour former une boucle puis une deuxième, etc... selon le mécanisme de Franck-Read. Ce mécanisme de multiplication des dislocations conduit à un glissement irréversible. Au lieu du schéma d'une ligne de dislocation ancrée entre deux obstacles, on peut préférer celui d'une boucle de dislocation qui se prête mieux à des calculs micromécaniques puisqu'elle peut être considérée comme une inclusion d'Eshelby (voir calcul micromécanique d'une boucle de dislocation en Annexe B).

En première approximation, la transition de la relaxation au glissement est représentée par le critère suivant :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^{vl(g)} &= \dot{\gamma}^{vl(g)} \quad \text{si } \tau^{(g)} \leq \tau_c^{(g)} \quad \text{et } \gamma \leq \gamma_c \\ \dot{\gamma}^{vp(g)} &= \dot{\gamma}^{vp(g)} \quad \text{si } \tau^{(g)} > \tau_c^{(g)} \quad \text{ou } \gamma > \gamma_c \end{aligned} \quad \text{(Equation III.3.1)}$$

$\dot{\gamma}^{vl(g)}$ et $\dot{\gamma}^{vp(g)}$ sont les vitesses de glissement associées à la relaxation et au glissement, respectivement. $\tau_c^{(g)}$ est la cission critique du système de glissement (g). γ_c est un glissement critique introduit pour prendre en compte le fait qu'une dislocation cherche toujours à réduire sa

longueur pour minimiser son énergie et ne peut donc pas conduire à un glissement cristallographique uniquement en s'allongeant mais également en se déplaçant par franchissement d'obstacles.

Dans le cas du mécanisme de relaxation, la vitesse de glissement est supposée linéairement reliée à la cission résolue $\tau^{(g)}$ qui s'applique sur le système (g) par l'équation suivante :

$$\dot{\gamma}^{vl(g)} = \frac{\left(\rho^{(g)} b\right)^2}{\eta'} \tau^{(g)} \quad (\text{Equation III.3.2})$$

où η' est un coefficient visqueux. Cette équation a été déterminée à l'aide d'un calcul micromécanique donné en Annexe B basé sur l'évolution du rayon d'une boucle de dislocation avec la contrainte appliquée mais négligeant le frottement de réseau et les interactions entre dislocations. On trouve ainsi que la vitesse de glissement $\dot{\gamma}^{vl(g)}$ augmente avec la densité de dislocation $\rho^{(g)}$. Certains auteurs (de Fouquet et al, 1970 ; Astié et al, 1980) ont bien observé expérimentalement une augmentation du pic de frottement interne lié aux doubles décrochements avec une pré-déformation. De même, Granato et son équipe (Granato et al, 1958 ; Stern et Granato, 1962) montrent une augmentation des effets de relaxation avec la déformation plastique (tant que celle-ci n'est pas trop élevée) attribuée à une augmentation du nombre de dislocations considérées comme des corde vibrantes. Il serait donc intéressant d'analyser plus finement l'effet de la densité de dislocation ou de la pré-déformation sur la courbe d'échauffement (voir par exemple Doudard, 2004).

Dans le cas du mécanisme de glissement, nous avons repris une loi thermiquement activée mais cette fois avec seuil (cf Eqn III.3.1) en suivant les travaux de Meric et al (1991), Cailletaud (1992). Elle s'exprime de la manière suivante :

$$\dot{\gamma}^{vp(g)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(g)}}{\mu} \right)^2 \exp \left(- \frac{\Delta G_0}{kT} \left(1 - \left(\frac{|\tau^{(g)}| - \tau_c^{(g)}}{\tau_r^{(g)}} \right)^p \right)^q \text{signe}(\tau^{(g)}) \right) \quad (\text{Equation III.3.3})$$

L'état d'écroissage de nature isotrope (§ II.3.1) est représentée par $\tau_c^{(g)}$. $\tau_r^{(g)}$ est une cission de référence qui reste constante avec la déformation. L'écroissage cinématique, du à l'auto-organisation spatiale des dislocations et qui joue un rôle important dans le comportement cyclique, a été introduit via les contraintes internes $\tau_\mu^{(g)}$. En première approximation, $\tau_\mu^{(g)}$ suit une loi d'évolution linéaire de type Prager (§ II.3.2). Dans les équations III.3.2 et III.3.3, la contrainte appliquée $\tau^{(g)}$ doit donc être remplacée par la contrainte effective $\tau_{eff}^{(g)}$ où :

$$\tau_{eff}^{(g)} = \tau^{(g)} - \tau_\mu^{(g)} \quad (\text{Equation III.3.4})$$

III.3.3 Principaux résultats

L'acier S355 étudié est un acier ferritique contenant 6% de perlite (Fig. III.3.1). Dans le modèle, le matériau est considéré comme 100% ferritique et la perlite est représentée par des précipités, engendrant des contraintes internes supplémentaires.

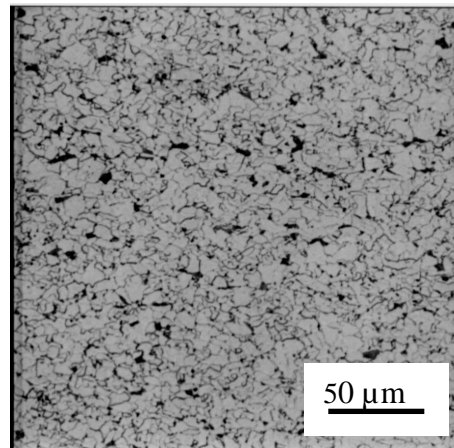


Figure III.3.1 : Micrographie d'un acier ferritique contenant 6% de perlite (ARCELOR)

L'identification des paramètres du modèle a été réalisée à l'aide de courbes expérimentales contrainte-déformation cycliques obtenues à vitesse de déformation constante pour une déformation maximale imposée de 0,3%. Le comportement cyclique simulé est ainsi en bon accord avec celui obtenu expérimentalement et ceci pour diverses déformations maximales imposées (Fig.III.3.2).

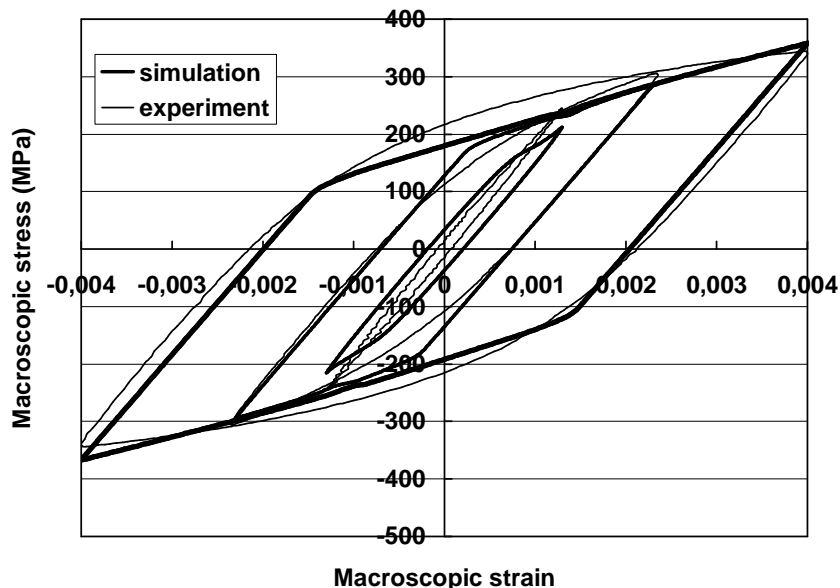


Figure III.3.2 : Courbes cycliques en traction-compression obtenues à une vitesse de déformation constante de $4 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et pour trois déformations maximales imposées 0,13%, 0,23% et 0,4% - Comparaisons expériences/simulations pour l'acier S355

En première approximation, l'écroissage isotrope a été négligé au profit de l'écroissage cinématique. Ce choix se justifie par la présence d'un fort effet Baushinger à l'échelle macroscopique et par le rôle clé des structures de dislocations dans le cas de sollicitations cycliques engendrant des contraintes internes. Ainsi, l'écroissage cinématique modélisé se situe à deux échelles : (i) celle du grain décrit par le modèle de Prager (§ II.3.2) et (ii) celle du polycristal décrit par la relation de localisation du modèle de transition d'échelle (§ IV.2.3.2). On peut remarquer que l'utilisation du modèle de Prager conduit à un écroissage trop linéaire et l'absence d'écroissage isotrope oblige à choisir une valeur du coefficient de Prager H de 2800 MPa qui n'a plus de sens physique.

A partir du jeu de paramètres précédemment identifiés, la dissipation obtenue en fatigue, c'est-à-dire sous des sollicitations alternées où la vitesse de contrainte et la contrainte maximale sont cette fois imposées, a été simulée et comparée à des résultats issus de l'expérience (Fig. III.3.3). Pour ces essais, la dissipation moyenne par cycle a été calculée par l'expression suivante :

$$D = f \oint \left[\frac{1}{V} \int \sigma_{ij} : \dot{\epsilon}_{ij}^v dV \right] dt \quad (\text{Equation III.3.5})$$

où f est la fréquence des cycles. On constate que le modèle prédit correctement la dissipation. Comme attendu, la contribution du mécanisme de relaxation est prépondérante aux faibles contraintes puis disparaît pour une contrainte maximale environ de 230 MPa au profit de celle du glissement. Le passage d'un mécanisme à l'autre semble bien être à l'origine de l'accélération de l'échauffement avec la contrainte maximale. On constate cependant que le modèle sous-estime la dissipation et que l'« arrivée » du glissement est (trop ?) brutale.

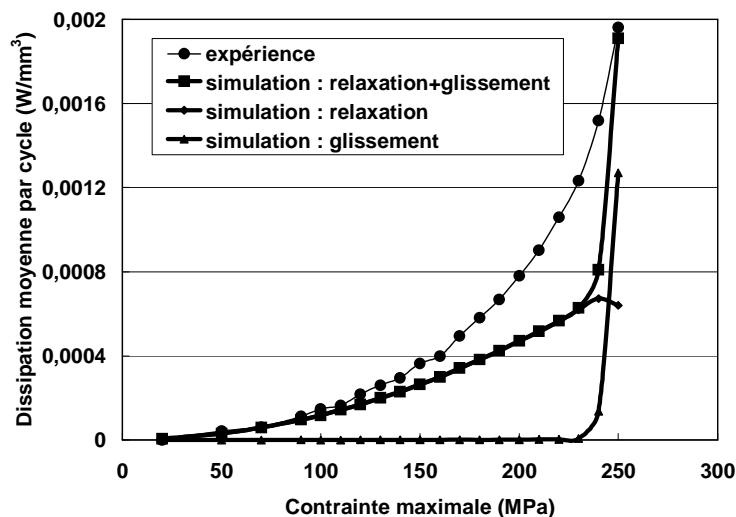


Figure III.3.3 : Prédiction de la dissipation pour des sollicitations cycliques pilotées en contrainte

III.3.4 Perspectives

L'ensemble de ces résultats montre la capacité du modèle micromécanique développé à estimer la courbe de dissipation en fatigue et à déterminer la contrainte de réversibilité à partir d'une identification des paramètres effectuée sur des essais de comportement cycliques pilotés en déformation. De nombreuses questions restent cependant ouvertes. Existents-ils d'autres mécanismes

de dissipation à prendre en compte ? En dessous de la contrainte de réversibilité, sont-ils vraiment d'origine anélastique ou viennent-ils d'une microplasticité liée au glissement des dislocations coins ? Comment améliorer la transition du mécanisme de relaxation à celui du glissement, qui représentée ici par τ_c et γ_c , reste artificielle ? Autrement dit, comment passer «naturellement» de l'anélasticité à l'inélasticité ? Notons que des calculs micromécaniques couplés à une analyse thermodynamique comme ceux développés dans l'Annexe B peuvent aider la représentation phénoménologique des mécanismes et de leur transition. Ainsi, la micromécanique prend le relais de la métallurgie physique comme illustré dans Aubert et Berveiller (1997) où l'effet taille de grain résulte de l'analyse micromécanique et thermodynamique de la configuration de boucles de dislocations. Par ailleurs, la poursuite de ce travail requiert des modifications importantes de la loi de comportement du monocristal (lois d'écoulement mais aussi lois d'écrouissage dont on a peu parlé ici) qui doit être représenté par un élément, plus complexe que celui de Maxwell, combinant élasticité instantanée, élasticité retardée (viscoélasticité ou anélasticité) et viscoplasticité (Fig. III.3.4). Cette modification de loi de comportement entraînera automatiquement des modifications dans les équations de transition d'échelle établies aujourd'hui pour un élément de Maxwell (§ IV.2.3.2).

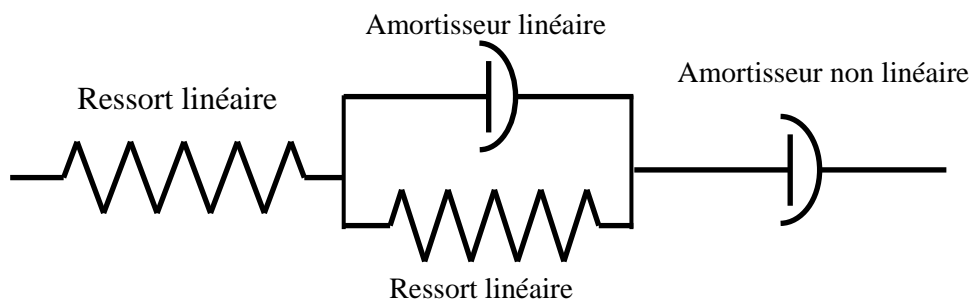


Figure III.3.4 : Association de ressort et d'amortisseur selon le modèle de Burger pour représenter le comportement d'un monocristal ferritique pour des applications en fatigue

Notons enfin que dans cette approche de la modélisation des courbes d'échauffement sous sollicitations cycliques, on ne tient pas compte des effets de surface or des études expérimentales et théoriques ont montré le rôle des surfaces libres sur la plasticité et sur la fatigue (voir par exemple Neumann, 1992 ; Sauzay, 2000 ; Sauzay et Gilormini, 2000).

Dans ce contexte, la thèse de Charles Mareau a pour objectif de caractériser et comprendre l'influence du chargement (fréquence, rapport de la contrainte maximale sur la contrainte minimale) et de la microstructure (pré-déformation, texture, précipités...) sur les courbes d'échauffement et sur la contrainte de réversibilité. Le travail approfondi de modélisation sera alimenté par des analyses expérimentales fines de comportement et d'échauffement effectuées sous différents trajets de chargement en collaboration avec le Laboratoire de Mécanique et Génie Civil de Montpellier (A. Chrysochoos) et le LMT-Cachan (S. Calloch maintenant à l'ENSIETA de Brest et F. Hild). En particulier, les mesures de thermographie infrarouge permettent de remonter à des valeurs très faibles de dissipation (de l'ordre de 10^{-5} W/mm³) et de détecter ainsi au cours de la sollicitation l'apparition de mécanismes de déformation «invisibles» habituellement.

III.4 Modélisation de l'effet Bake-Hardening

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de S. Berbenni soutenue en janvier 2002 encadrée par M. Berveiller et V. Favier + 1 action contractuelle dans le cadre d'un Projet de Fins d'Etudes de l'ENSAM en 2004-2005 avec ARCELOR
- Berbenni S., Favier V., Berveiller M., Lemoine X., "A physically based micromechanical approach to model the Bake-Hardening effect for polycrystalline for low carbon steels", 8th International Conference ESAFORM 2005, Cluj-Napoca, Romania, in press
- Berbenni S., Favier V., Lemoine X., Berveiller M. (2004), A micromechanical approach to model the bake hardening effect for low carbon steels, Scripta Materialia, 51, 303-308

III.4.1 Contexte industriel

Les aciers dits à *BH* (Bake-Hardening) caractérisent une classe d'aciers d'emboutissage utilisée dans l'industrie automobile pour les ailes et panneaux de portes. Ils associent à la fois une bonne formabilité avant le traitement de peinture, appelé Baking en anglais, et une bonne résistance à l'indentation ainsi qu'une limite élastique élevée après cuisson. L'effet Bake Hardening correspond à un durcissement obtenu par vieillissement du matériau, déjà écroui par une pré-déformation plastique (Fig. III.4.1). Il est dû à un mécanisme de diffusion - précipitation des atomes de carbone sur les dislocations. Pour caractériser cet effet, on effectue un essai « *BH* » défini par trois étapes successives:

1. l'étape de pré-déformation obtenue en effectuant un essai de traction uniaxiale suivi d'une décharge élastique pour une déformation plastique donnée,
2. l'étape de « Baking » obtenue par traitement thermique à une température et un temps de vieillissement donnés de l'éprouvette pré-déformée,
3. l'étape de recharge obtenue en effectuant un essai de traction uniaxiale sur l'éprouvette pré-déformée et vieillie.

Notons que lors de la recharge, la réponse du matériau vieilli présente un palier de Lüders (voir Fig. III.4.1) non prise en compte dans la modélisation proposée. Le niveau de *BH* ou plus simplement le *BH* est défini comme étant la différence entre la limite élastique du matériau après pré-déformation R_p et la contrainte d'écoulement correspondant au début de la courbe d'écrouissage homogène (c'est-à-dire juste après le palier de Lüders) R_{AL} du matériau écroui et vieilli (Soler, 1998).

Dans cette étude, l'intérêt de l'utilisation d'un modèle micromécanique par changement d'échelles est double :

- comme dans les cas précédents, simuler des trajets de chargements complexes et notamment dans cette étude des étapes de pré-déformation sous différents trajets de chargements (traction uniaxiale, traction plane, expansion équibaxée ou cisaillement)
- introduire facilement les mécanismes de durcissement par vieillissement grâce à l'utilisation de la variable interne densité de dislocations.

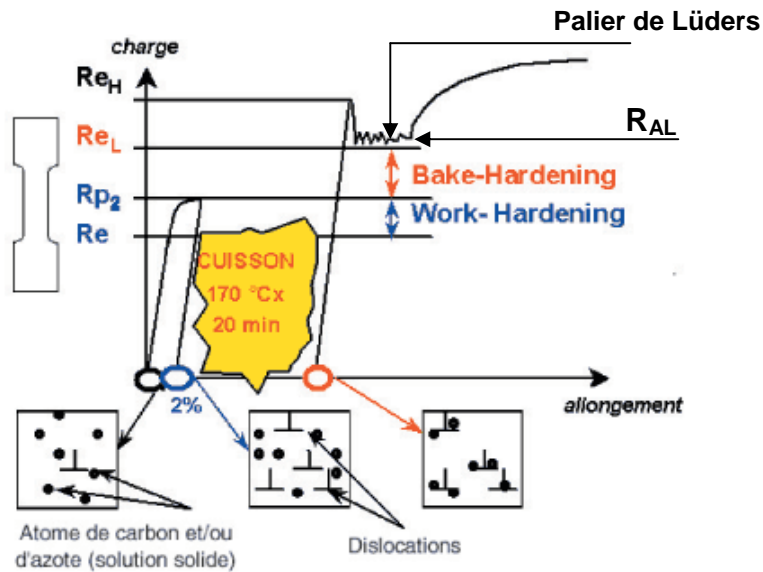


Figure III.4.1 : Illustration de l'effet Bake-Hardening (ARCELOR)

III.4.2 Modélisation des mécanismes à l'origine de l'effet *BH*

Deux mécanismes sont à l'origine de l'effet *BH*. Il s'agit d'abord de la formation des atmosphères de Cottrell qui bloquent les dislocations présentes au sein du matériau à la fin de l'étape de pré-déformation. Ensuite, une densification des atmosphères a lieu, formant alors des amas d'atomes de carbone et/ou des précipités préférentiellement le long des dislocations (Elsen et Hougardy, 1993 ; Soler, 1998). Dans ce travail, le durcissement lié à ces deux mécanismes est modélisé séparément au niveau de la cission critique (ou de référence) associée à chaque système de glissement selon l'équation III.4.1 :

$$\tau_r^{(g)} = \tau_{r0}^{(g)} + \alpha \mu b \sqrt{\sum_g a^{(gh)} \rho^{(h)}} + \tau_{BH}^{(g)} \quad (\text{Equation III.4.1})$$

où $\rho^{(h)}$ est la densité de dislocation du système (*h*) après la pré-déformation obtenue par l'équation II.3.1. $\tau_{BH}^{(g)}$ représente le saut de la variable d'écrouissage dû au durcissement par effet *BH* qui se décompose en deux termes :

$$\tau_{BH}^{(g)} = \tau_{r1}^{(g)} + \tau_{r2}^{(g)} \quad (\text{Equation III.4.2})$$

Cette décomposition additive est justifiée par des résultats expérimentaux de cinétique d'évolution du niveau de *BH* (Elsen et Hougardy, 1993 ; Soler, 1998). Notons qu'une autre formulation considérant les précipités formés comme des obstacles de « même force » que les forêts de dislocation peut être utilisée (Kocks et al, 1975 ; Deschamps et al, 1999b). Elle a la forme suivante :

$$\tau_r^{(g)} = \tau_{r0}^{(g)} + \sqrt{\left(\alpha\mu b \sqrt{\sum_g a^{(gh)} \rho^{(h)}}\right)^{\frac{1}{2}} + \tau_{BH}^{(g)\frac{1}{2}}} \quad (\text{Equation III.4.3})$$

Le durcissement associé au premier mécanisme (blocage des dislocations par les atmosphères) est décrit par une fonction linéaire du degré de saturation des atmosphères de Cottrell (De et al, 1999 ; Zhao et al, 2001).

$$\tau_{r1}^{(g)} = \eta \frac{c_{\perp}^{(g)}}{c_{sat}^{(g)}} \quad (\text{Equation III.4.4})$$

où $c_{\perp}^{(g)}$ et $c_{sat}^{(g)}$ sont respectivement les concentrations d'atomes de carbone formant l'atmosphère de Cottrell et nécessaire pour saturer l'atmosphère. η est un paramètre ajustable. Au cours de ce premier mécanisme, les atomes de carbone se réunissent autour des dislocations en suivant une cinétique de ségrégation pilotée par une loi de type Cottrell-Bilby.

La seconde contribution au BH est produite par une précipitation de carbures (Elsen et Hougardy, 1993) et/ou une densification des atmosphères (clusters) (Soler, 1998). Suivant l'idée de Elsen et Hougardy (1993), on suppose que cette précipitation se produit essentiellement sur les dislocations sous la forme de «cylindres» allongés le long des dislocations. On néglige donc la précipitation homogène dans la matrice présente par exemple dans des alliages d'aluminium (Deschamps et al, 1999ab). Ainsi, les atmosphères servent de nucléis à la précipitation. La croissance des précipités est fonction du nombre d'atomes qui se sont réunis autour de chaque dislocation à l'issue de la première cinétique. Pour un même temps de vieillissement, dans le cas de l'amorce de la seconde cinétique, les précipités seront donc plus gros dans le cas des faibles pré-déformations. Les précipités formés sont cohérents et cisailables par les dislocations (Elsen et Hougardy, 1993). Dans ce cas, le durcissement induit dépend de la fraction volumique f_v et du rayon effectif moyen des précipités \bar{R} (voir par exemple Deschamps et al, 1999b dans le cas où on suppose des précipités sphériques) de la manière suivante :

$$\tau_{r2} \propto \sqrt{f_v \bar{R}}$$

Suivant ces idées physiques et en introduisant dans les calculs de force d'obstacle, la distance moyenne entre obstacles le long d'une ligne de dislocation que l'on relie via une statistique de Friedel (Friedel, 1964) à la densité de dislocation issue de la pré-déformation, on arrive à une expression de la cission critique :

$$\tau_{r2}^{(g)} = \xi \frac{f_v^{\frac{3}{4}}}{\left(\sum_{h \neq g} \rho_p^{(h)}\right)^{1/4}} \quad (\text{Equation III.4.5})$$

Dans l'équation III.4.5, ξ est un paramètre matériau à identifier, $\rho_p^{(h)}$ est la densité de dislocation du système (h) après pré-déformation et f_v est la fraction volumique de précipités qui dépend des paramètres temps et température de vieillissement selon une cinétique du type Avrami.

Les détails des calculs concernant la modélisation des mécanismes à l'origine du BH sont donnés dans (Berbenni, 2002 ; Berbenni *et al*, 2004c : Annexe C).

III.4.3 Principaux résultats

L'acier étudié est un acier bas carbone à Bake-Hardening calmé à l'aluminium (Grade E180BH) (Fig. III.4.1). Sa teneur en carbone en solution solide, mesurée par frottement intérieur, est de l'ordre de 20 ppm.poids, le reste du carbone serait contenu dans des précipités pré-existants (probablement de cémentite) et situés essentiellement aux joints de grains. Du point de vue de la modélisation, on ne tient pas compte de ces précipités initiaux.

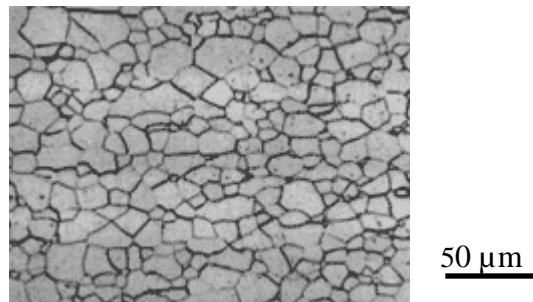


Figure III.4.1 : Micrographie d'un acier ferritique Bake Hardening (ARCELOR)

L'identification des paramètres des lois monocristallines a été réalisée par rapport à la courbe de traction uniaxiale correspondant au trajet de pré-déformation en traction. Les paramètres du modèle de vieillissement statique ont été déterminés à l'aide d'essais « BH » correspondant à 1% de pré-déformation à 170°C et plusieurs temps de vieillissement. A la recharge, les densités de dislocation pour chaque système de glissement sont égales à celles obtenues en fin de pré-déformation et les cissions de référence sont celles réactualisés après l'étape de vieillissement. A titre d'exemple, les Figures III.4.1 et III.4.2 comparent les courbes de comportement simulées et expérimentales obtenues pour une pré-déformation de 2% à 70°C (donc dans des conditions différentes de celles utilisées pour l'identification des paramètres) pour différents traitements de vieillissement. On constate que la limite élastique après vieillissement (c'est à dire le niveau de BH) est correctement prédite. L'écrouissage est cependant légèrement trop fort par rapport à celui observé expérimentalement. Cette différence est attribuée à la perte de ductilité liée au vieillissement non prise en compte dans la modélisation.

Dans la modélisation proposée, le niveau de BH est dépendant de la bonne estimation de la densité obtenue après l'étape de pré-déformation, ce qui a été vérifiée dans Berbenni *et al* (2004c). L'effet de la pré-déformation sur le niveau de BH selon la température et le temps de vieillissement a été simulé et comparé à des résultats expérimentaux issus de Soler (1998) (Fig. III.4.4). A 70°C, le niveau de BH ne varie pratiquement pas avec l'amplitude de pré-déformation. En effet, à cette température, le premier mécanisme de durcissement, qui est indépendant de la densité de dislocation issue de la pré-déformation (Eqn. III.4.4), est prépondérant. Au contraire, à 170°C et pour une température de

vieillissement de 1000 minutes, le deuxième mécanisme a pris place conduisant selon l'équation III.4.5 à une diminution du BH avec la pré-déformation. Ces résultats qualitatifs sont en accord avec les résultats de Elsen (1993). On retrouve d'ailleurs une diminution similaire de l'effet du durcissement par précipitation obtenu dans un matériau écroui puis vieilli dans d'autres alliages métalliques (voir par exemple Deschamps et al, 1999a).

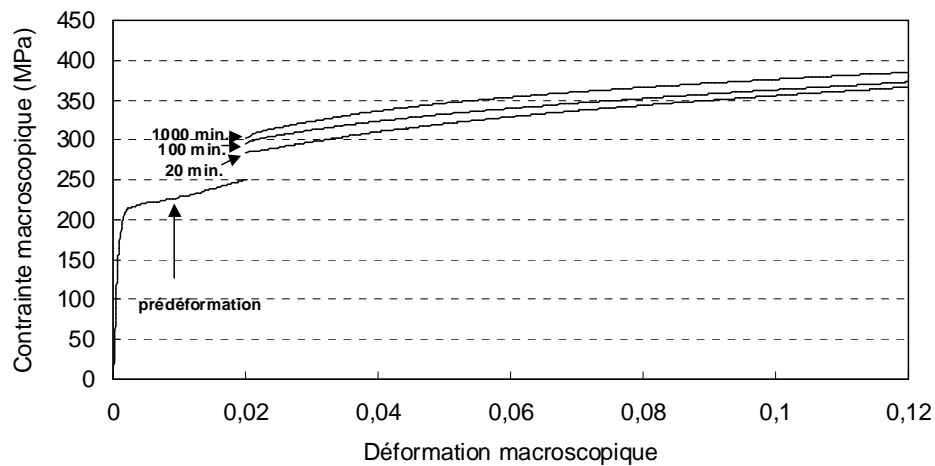


Figure III.4.2 : Courbes de recharge en traction statique expérimentale après une pré-déformation de 2% et un vieillissement à 70°C (Soler, 1998)

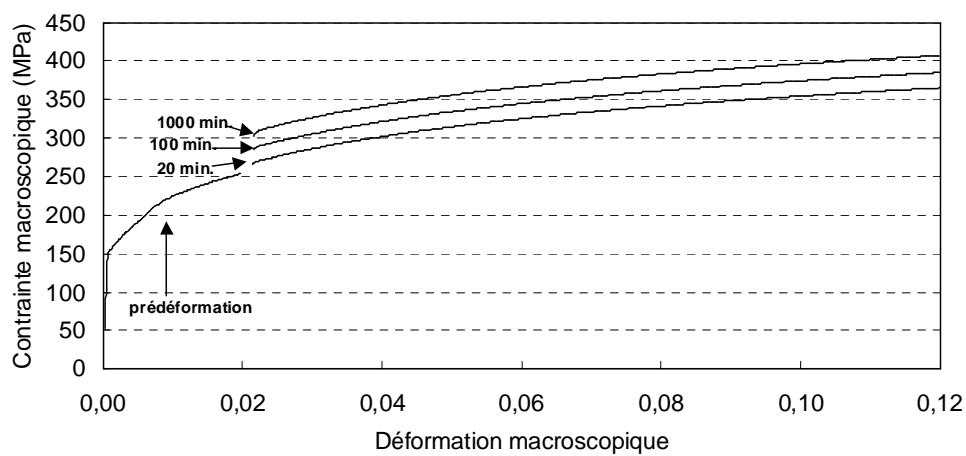


Figure III.4.3 : Courbes de recharge en traction ($0,008s^{-1}$) issues du modèle après une pré-déformation de 2% et un vieillissement à 70°C.

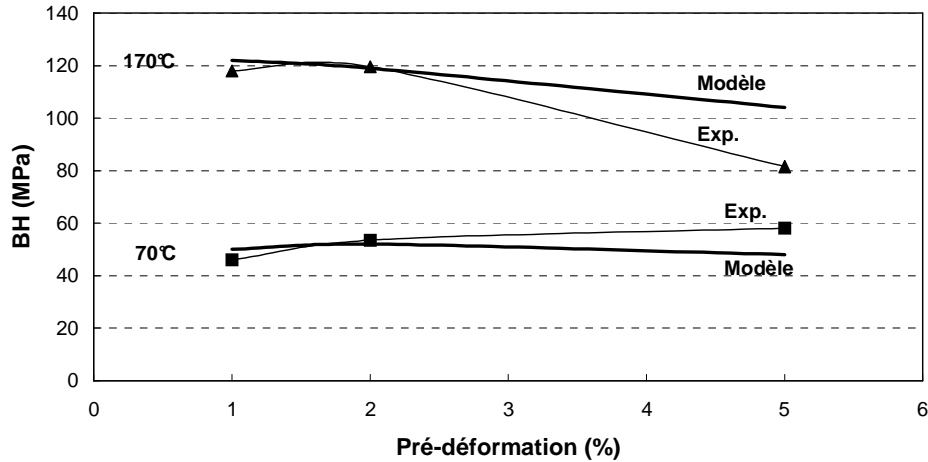


Figure III.4.4 : Evolution du BH en fonction du niveau de pré-déformation en traction uniaxiale pour $t=1000$ min. Confrontation modèle/expérience (Soler, 1998).

III.4.4 Perspectives

Afin de valider notre modélisation de l'effet BH notamment celle liée au deuxième mécanisme, une confrontation quantitative sur l'évolution du BH en fonction du temps et de la température de vieillissement doit être menée.

Les estimations de l'effet BH sont généralement basées sur des essais de traction uniaxiale (pré-déformation en traction uniaxiale dans la direction de laminage suivie d'un traitement de vieillissement et d'une recharge en traction dans la même direction que l'étape de pré-déformation). Cependant, au cours des opérations de mise en forme, les trajets de déformation possibles sur une pièce emboutie sont bien plus complexes. D'un point de vue industriel, il est nécessaire de prédire le niveau de BH pour différents trajets de pré-déformation et de manière plus général de connaître l'évolution de la surface de charge après mise en forme et vieillissement. Cette tâche est complexe car elle demande de bien modéliser à la fois les phénomènes liés aux changements de trajet de chargement qui peuvent donner lieu aussi à un durcissement (Rauch et Schmitt, 1989) et ceux liés au vieillissement. Par ailleurs, il est important de comprendre le rôle du palier de Lüders sur le niveau de BH (lors d'un changement de trajet, le palier de Lüders n'est pas toujours observé) et surtout sur l'écrouissage lors de la recharge surestimée dans notre modélisation.

La perspective principale de cette étude consiste donc à analyser l'effet du trajet de pré-déformation sur le niveau de BH . Dans la modélisation proposée du BH , on peut « imaginer » quel sera l'effet du BH sur les surfaces de charges par rapport à l'effet seul du changement de trajet. Le premier mécanisme (Eqn. IV.4.4) engendre un écrouissage identique sur tous les systèmes de glissement et devrait donc conduire à une expansion isotrope du domaine élastique obtenue après pré-déformation. Le deuxième mécanisme dépend lui de la densité de dislocation forêt (Eqn IV.4.5) entraînant un durcissement anisotrope, plus élevé sur les systèmes fortement écrouis que sur les autres. L'effet du trajet de chargement sur les surfaces de charge devrait donc être renforcée. Cette étude fait l'objet d'une action contractuelle avec ARCELOR en cours de réalisation. La formulation viscoplastique, non justifiée dans ce travail, a été remplacée par une formulation élastoplastique, formulée en transformations finies déformations, mieux adaptée pour décrire les effets de changements trajets sur la limite élastique (Lorrain et al, 2004).

III.5. Application aux aciers à faible énergie de faute d'empilement présentant de la déformation plastique par maclage

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de M.N. Shielkhelsouk depuis octobre 2003 avec ARCELOR encadré par M. Cherkaoui, K. Inal et V. Favier
- Shielkhelsouk M.N., Favier V., Inal K., Cherkaoui M., «Modélisation et simulation du comportement thermomécanique des aciers austénitiques à effet TWIP (TWinning Induced Plasticity)», XVII^{ème} Congrès Français de Mécanique 2005, Troyes, sous presse

III.5.1 Contexte industriel

Les aciers austénitiques Fe-Mn-C à haute teneur en manganèse constituent une classe d'aciers suscitant un regain d'intérêt au niveau de la sidérurgie mondiale car, contrairement aux aciers ferritiques, ils combinent simultanément très haute résistance mécanique (pouvant dépasser 1200 MPa en traction) et très grande ductilité (avec un allongement à rupture pouvant aller jusqu'à 70%). Ces excellentes propriétés mécaniques sont liées à la présence de maclage mécanique, mécanisme connu sous le nom d'effet TWIP pour TWinning Induced Plasticity. Depuis peu, des aciers austéno-ferritiques dits DUPLEX se développent pour combiner les propriétés de cette phase austénitique à «effet TWIP» avec la plus faible densité de la ferrite afin de répondre doublement (par la plus haute résistance et par le poids) aux problèmes de l'allègement des véhicules.

Dans cette étude, l'intérêt d'utiliser une approche micromécanique par changement d'échelles pour modéliser le comportement de ces aciers peut se décliner en trois points :

- tester les hypothèses avancées pour la modélisation des mécanismes à l'échelle du grain en confrontant modélisation et expérimentation à différentes échelles (le grain, la phase, le matériau biphasé),
- optimiser la proportion de ferrite/austénite pour conserver les excellentes propriétés de l'austénite tout en élaborant l'acier le plus léger possible,
- simuler le comportement dans différentes conditions de vitesses de déformation, de température, de trajets de chargement et analyser selon ces conditions, la compétition entre les mécanismes de glissement et de maclage.

III.5.2 Lois monocristallines

Contrairement aux aciers étudiés jusqu'à présent, les aciers austénitiques sont de structure cubique à faces centrées (CFC). Ils se caractérisent par une faible faute d'empilement (EDE) qui induit des mécanismes de déformation particuliers, en plus du glissement des dislocations, tels que le maclage ou la martensite ϵ . Lorsque l'EDE est assez faible, le maclage mécanique entre en compétition avec le glissement. L'EDE dépend non seulement de la composition de l'alliage (Miodownik, 1998 ; Allain, 2004), variable que nous ne prenons pas en compte explicitement dans notre modèle, et de la température (Rémy, 1975).

D'un point de vue modélisation, le maclage peut être considéré comme un «pseudo-glissement» caractérisé par un cisaillement γ_0 constant ($= 0,7$) et des systèmes de maclage définis par une normale au plan de maclage et une direction de cisaillement. Il y a ainsi 12 systèmes de maclage $\{111\}\langle\bar{2}11\rangle$ dans les structures CFC (Karaman et al, 2000 ; Kalidindi, 2001 ; Cherkaoui, 2003). On utilise alors le

formalisme de la plasticité cristalline pour combiner glissement et maillage. L'activation de chacun des mécanismes est contrôlée par une loi de Schmid associée à une cission critique (ou cission de référence) qui évolue chacune de manière spécifique avec la température et la déformation plastique.

En ce qui concerne le mécanisme de déformation par glissement, les systèmes de glissement considérés sont les systèmes (111)<110>. La vitesse de glissement est décrite, comme dans les paragraphes précédents, par une loi thermiquement activée. Dans ces aciers de structure CFC où le frottement de réseau est faible, les obstacles majeurs au mouvement des dislocations sont les atomes en solution solide et la forêt de dislocations (Allain, 2004). Les lois d'érouissage sont identiques à celles des paragraphes II.3.1 et III.2.2. Seule, l'expression du libre parcours moyen des dislocations a été modifiée pour prendre en compte un effet de type « Hall & Petch dynamique » (Allain et al, 2004). En effet, les macles, de manière similaire aux joints de grain, sont considérées comme des obstacles infranchissables pour les dislocations. Notons cependant que pour des raisons de symétrie cristallographique, elles constituent sans doute une barrière plus souple que les joints de grain. Leur apparition induit une réduction du libre parcours moyen des dislocations conduisant à une augmentation de l'érouissage. Cette dernière est responsable du décalage vers de plus grandes déformations de la striction observée en traction et donc de la grande ductilité de ces aciers. Ainsi le libre parcours moyen associé au système de glissement (g) s'écrit :

$$\frac{l}{L^{(g)}} = \frac{l}{D} + \left(\frac{\sqrt{\sum_{i \neq g} \rho^{(i)}}}{K} \right) + \frac{l}{T^{(g)}} \quad (\text{Equation III.5.1})$$

où D est le diamètre du grain et $T^{(g)}$ est l'espacement entre les macles sécantes au système de glissement (g). $T^{(g)}$ est calculé en faisant intervenir la topologie des macles (micromacles et faisceaux de macles) et les interactions entre systèmes de glissement et systèmes de macles, suivant les travaux de Allain et al (2004ab) :

$$\frac{l}{T^{(g)}} = \frac{B^{(gh)} f^{(h)}}{2re(1-F)} \quad (\text{Equation III.5.2})$$

avec r le nombre moyen de micromacles par faisceaux, e l'épaisseur moyenne de ces micromacles, $f^{(h)}$ la fraction volumique de macles sur le système (h), $F = \sum_{h=1}^{12} f^{(h)}$ la fraction volumique totale de

macles, $B^{(gh)}$ la matrice d'interaction entre systèmes de glissement et systèmes de macles :

- $B^{(gh)} = 0$ si les systèmes de glissement (g) et les systèmes de macles (h) sont coplanaires,
- $B^{(gh)} = 1$ si les systèmes de (g) et (h) sont sécants.

En ce qui concerne le mécanisme de déformation par maillage, la vitesse de déformation par maillage est déterminée par l'équation suivante :

$$\dot{\gamma}^{tw(h)} = \gamma_0 \dot{f}^{(h)} \quad (\text{Equation III.5.3})$$

L'évolution de la fraction volumique de macles du système (h) est supposée suivre, dans un premier temps, une loi de type puissance suivant les travaux de Kalidindi (2001) :

$$\begin{aligned} \dot{f}(h) &= 0 & \text{si } \tau^{tw}(h) \leq 0 \\ \dot{f}(h) &= \dot{f}_0 \left(\frac{\tau^{tw}(h)}{\tau_r^{tw}(h)} \right)^{1/m} & \text{si } \tau^{tw}(h) > 0 \end{aligned} \quad (\text{Equation III.5.4})$$

où \dot{f}_0 et m sont des paramètres à identifier et $\tau^{tw}(h)$ et $\tau_r^{tw}(h)$ sont, respectivement, les cisssions résolue et de référence du système (h). La cisssion de référence qui représente la résistance du matériau à la création de nouvelles macles décrit les interactions entre les systèmes de macles et néglige, dans un premier temps, les interactions glissement-maclage. Suivant les travaux de Kalidindi (2001), elle est donnée par :

$$\dot{\tau}_r^{tw}(h) = H_1 F \delta \sum_{\substack{k \text{ non coplanaire} \\ \text{avec } h}} \gamma_0 \dot{f}^{(k)} + H_2 F \sum_{\substack{k \text{ coplanaire} \\ \text{avec } h}} \gamma_0 \dot{f}^{(k)} \quad (\text{Equation III.5.5})$$

où δ , H_1 et H_2 sont des paramètres à ajuster.

Finalement, en négligeant la déformation plastique dans les zones maclées, la vitesse de déformation viscoplastique provient de deux contributions (i) le glissement dans la phase non maclée et (ii) l'apparition instantanée de macles :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp} = (1 - F) \sum_g R_{ij}^{(g)} \dot{\gamma}^{(g)} + \sum_{\alpha} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{f}_{\alpha} \gamma_0 \quad (\text{Equation III.5.6})$$

III.5.3 Premiers résultats

L'acier étudié est un acier Fe-Mn 100% austénitique. Avant de présenter les résultats, notons que les déformations atteintes dans les simulations présentées sont élevées bien que le modèle soit formulé en petites déformations. Une extension du modèle en transformations finies sera nécessaire dans la suite ce travail.

Dans un premier temps, les paramètres du modèle associés au glissement ont été identifiés à partir de résultats expérimentaux, issus de la thèse de Allain (2004), obtenus sur un acier 100% austénitique sollicité en traction uniaxiale à une vitesse de déformation de 7.10^{-4} s⁻¹ et à deux températures :

- A 673 K, température à laquelle l'énergie de faute d'empilement est suffisamment élevée pour inhiber le maclage,
- à 298 K dans des conditions où le maclage n'est pas activé (essai expérimental simulé à 298 K à partir de pré-déformations à 673 K et de mesures de limites élastiques successives à 298 K) (Allain et al, 2004).

Dans un deuxième temps, avec les paramètres du glissement précédemment déterminés, les paramètres du modèle associé au maclage ont été identifiés à partir d'un essai classique à 298 K, température à laquelle le maclage est activé (Fig. III.5.1). Les résultats expérimentaux montrent que la présence de maclage provoque une forte augmentation de l'écroissage bien représenté par le modèle (Fig. III.5.2) (Shiekhelsouk *et al*, 2005). Il est directement lié à la diminution du libre parcours moyen des dislocations provoquée par la présence de macles (Fig. III.5.3).

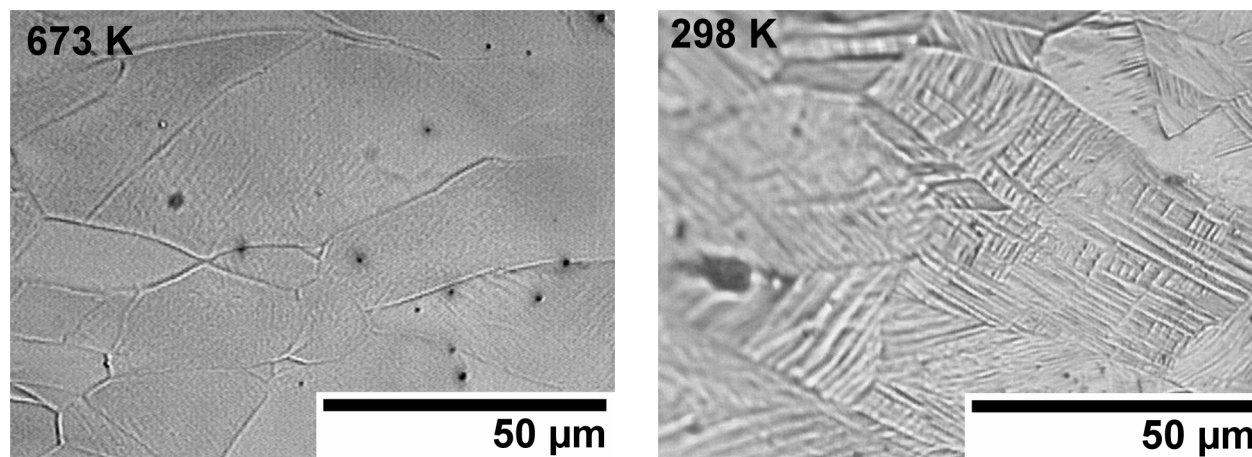


Figure III.5.1 : Micrographie d'un acier 100% austénitique après déformation à rupture à 673 K (présence uniquement de glissement) et à 298 K (présence de maclage et de glissement) (Allain, 2004)

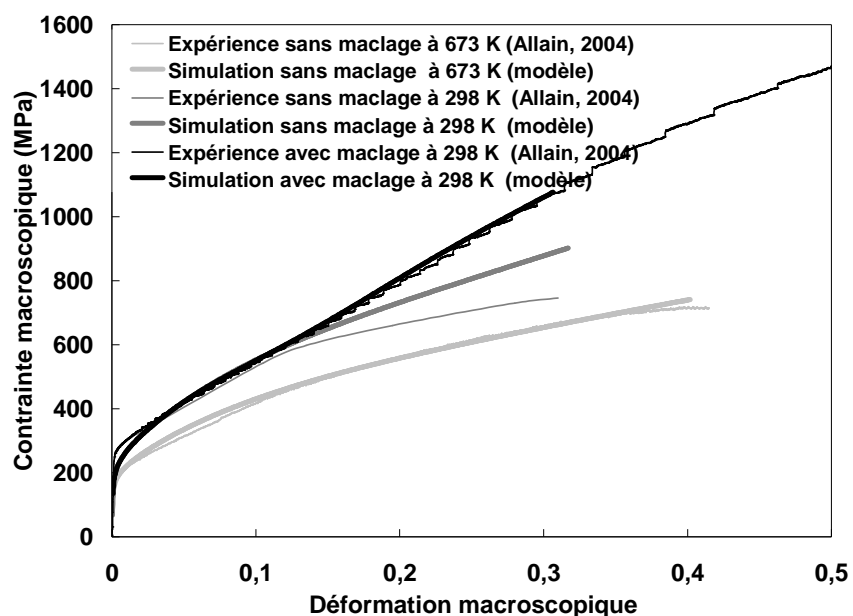


Figure III.5.2 : Courbes contrainte-déformation obtenues à une vitesse de déformation de 7.10^{-4} s^{-1} pour deux températures 673 K et 298 K avec et sans maclage – Comparaisons expériences/simulations pour un acier 100% austénitique

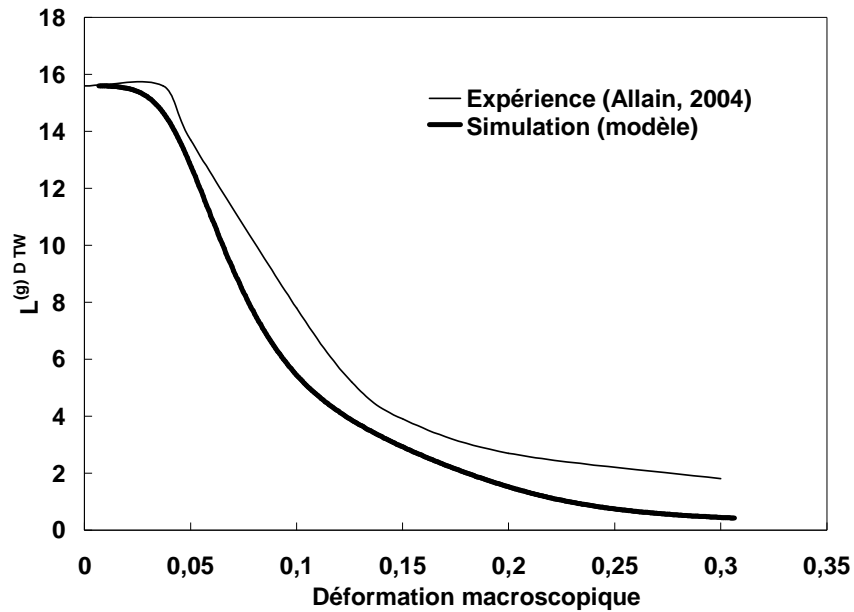


Figure III.5.3 : Evolution du libre parcours moyen lié à la taille de grain et au maillage $L^{(g)DTW}$ $\left(\frac{l}{L^{(g)DTW}} = \frac{l}{D} + \frac{l}{T^{(g)}} \right)$ en fonction de la déformation macroscopique lors d'un essai de traction à $7.10^{-4} s^{-1}$ et $298 K$ - Comparaisons expériences/simulations pour un acier 100% austénitique

III.5.4 Perspectives

Les perspectives de ce travail sont nombreuses tant du point de vue de la caractérisation que de la modélisation du comportement mécanique de ces matériaux. En ce qui concerne la modélisation du comportement du monocristal austénitique à effet TWIP, une première approche a été donnée issue des travaux de Kalidindi (2001), Cherkaoui (2003) et Allain et al (2004). Elle est satisfaisante dans le sens où elle prend en compte un effet de « Hall & Petch dynamique », mécanisme essentiel à l'origine de la résistance élevée et de la grande ductilité de ces aciers. En revanche, de nombreuses questions restent ouvertes, notamment sur le critère d'apparition et la cinétique de maillage.

La contrainte critique de maillage observée dans les monocristaux dépend du type de chargement (traction ou compression), de la température, de l'état de pré-déformation, de la taille de grain et de la vitesse de déformation (Meyers et al, 2001). Une faible EDE est une condition nécessaire pour activer le maillage mais n'est donc pas suffisante. Une activité plastique précurseur est tout aussi requise. Comment représenter l'évolution de la cission critique (ou de référence) de maillage avec le glissement, le maillage lui-même, l'EDE ? Comment décrire l'effet de la température ? A haute température, le maillage est inhibé. Pourquoi ? Parce que la température favorise le glissement (qui est thermiquement activé) ? Parce qu'elle conduit à une augmentation de l'EDE ? Comment décrire les interactions entre systèmes de glissement et systèmes de macles ?

Dans la modélisation proposée, la cinétique de maillage est décrite par une loi phénoménologique faisant intervenir comme variable interne la fraction volumique de phase maillée sur chaque système de maillage. D'autres approches (Allain et al, 2004) préfèrent utiliser une loi

d'évolution du nombre de macles. Ceci permet de calculer le volume de macle indépendamment en tenant compte de la topologie particulière des macles (présence de faisceaux de micromacles, taille des macles du système secondaire inférieure à celle du système primaire, ...). Dans tous les cas, les descriptions restent qualitatives et tentent, faute de mesures expérimentales directes, de décrire la cinétique de maclage en intégrant l'influence du glissement et de ses caractéristiques (intensité, interactions entre les systèmes créant des germes de macles) (Allain et al, 2004). Enfin, notons que la cinétique de maclage dépend de l'état de contrainte dans la phase non maclée (zone de germination des nouvelles macles) qui est approximée pour l'instant à l'état de contrainte moyen du grain.

Toutes ces questions sont au cœur du travail de thèse de Najeeb Shiekhelsouk. Son objectif est de caractériser et modéliser le comportement et les évolutions microstructurales des aciers 100% austénitiques et duplex (austénite-ferrite) à effet TWIP. L'accent est mis en particulier sur l'influence de la fraction volumique de ferrite, de la température, de la vitesse de déformation et du trajet de chargement sur l'apparition du maclage. Le travail approfondi de modélisation concernant le critère d'apparition et la cinétique de maclage sera alimenté et confronté à des mesures par diffraction des Rayons X de contraintes internes, par phase (ferrite ou austénite) ou par grains de même orientation, développées lors de la déformation couplées à des observations microstructurales.

III.6 Conclusion

Dans les différentes applications précédentes, les lois décrivant le comportement du monocristal fondées sur la théorie de la plasticité cristalline ont été adaptées aux types de comportement étudiés. Le comportement dépendant de la vitesse de déformation est décrit grâce à la prise en compte des mécanismes thermiquement activés et de drainage visqueux, de l'évolution de la densité de dislocations avec la déformation plastique (stockage et annihilation) et d'un couplage thermomécanique. L'échauffement dû à la dissipation intrinsèque en sollicitations cycliques est attribuée à deux mécanismes : la relaxation et le glissement des dislocations. Un fort écrouissage cinématique est introduit à l'échelle intragranulaire. Dans les aciers à *BH*, le durcissement obtenu après pré-déformation et vieillissement est lié à la diffusion-précipitation d'atomes de carbone sur les dislocations créées par l'étape de pré-déformation. Enfin, pour décrire le comportement des aciers austénitiques à effet TWIP, le maclage, assimilable à un pseudo-cisaillement, est introduit dans le formalisme de la plasticité cristalline. Certains aspects du couplage maclage/glissement ont été modélisés.

Comme nous venons de le voir, pour décrire le comportement des polycristaux, la qualité du modèle de comportement du grain est de première importance car celui-ci est le siège d'une évolution microstructurale forte qui contrôle en partie la réponse macroscopique. Cependant, la texture et les incompatibilités de déformations entre grains jouent un rôle tout aussi important. L'effort de modélisation doit donc se situer également à l'échelle intergranulaire pour décrire au mieux les interactions entre les hétérogénéités. C'est le sujet du quatrième chapitre de ce mémoire.

Chapitre IV

Interactions entre hétérogénéités : Transitions d'échelle

IV.1 Introduction

IV.2 Hétérogénéités faiblement contrastées : Cas des polycristaux

IV.2.1 Représentation

IV.2.2 Approximation autocohérente classique

IV.2.3 Extension au cas de l'élastoviscoplasticité

IV.2.3.1 Introduction

IV.2.3.2 Modèles à champs translés

IV.2.3.2.1 Présentation du modèle avec le point de vue de la déformation (visco)plastique non libre de contrainte

IV.2.3.2.2 Différentes manières de traiter le couplage élasticité-viscosité

IV.2.3.2.3 Principaux résultats

IV.2.3.2.4 Conclusions et Perspectives

IV.3 Hétérogénéités fortement contrastés

IV.3.1 Introduction

IV.3.2 Rôle de la morphologie

IV.3.2.1 Mise en évidence expérimentale de l'effet de percolation mécanique : cas des composites à matrice polymère renforcée par des whiskers de cellulose

IV.3.2.2. Modélisation et simulation des effets de percolation mécanique – Notion de fraction volumique effective

IV.3.3 Motif morphologique évolutif

IV.3.3.1 Introduction

IV.3.3.2 Comportement des alliages métalliques à l'état semi-solide

IV.3.3.2.1 Contexte

IV.3.3.2.1 Représentation

IV.3.3.2.2 Approximation autocohérente dans le cas de l'inclusion enrobée

IV.3.3.2.3 Principaux résultats

IV.3.3.2.3.1 : Cas des alliages à bas point de fusion

IV.3.3.2.3.2 : Cas des alliages à haut point de fusion

IV.3.3.2.4 Perspectives

IV.3.4 Conclusions

IV.4 Conclusion

IV.1 Introduction

Les méthodes de transition d'échelles encore appelées méthodes d'homogénéisation ou micro-macro ont pour objectif principal de déterminer le comportement macroscopique ou effectif d'un milieu homogène équivalent (MHE) ayant les mêmes propriétés que le matériau hétérogène réel. La démarche micromécanique par changement d'échelles comprend trois étapes :

- 1) la représentation : elle repose sur une description statistique de la microstructure (on ne s'intéresse pas au cas de l'homogénéisation périodique) et a pour objet d'identifier les "phases" mécaniques qui gouvernent le comportement puis de les décrire géométriquement et mécaniquement,
- 2) la localisation : elle consiste à relier les champs de contraintes ou de déformations locaux aux champs globaux,
- 3) l'homogénéisation : elle combine la description du comportement local, les relations de localisations de l'étape (2) et relie la moyenne volumique des champs locaux aux champs globaux.

La pertinence d'une approche à transition d'échelle tient en premier lieu aux soins apportés à l'étape de représentation. Celle-ci consiste à définir un Volume Élémentaire Représentatif (VER) qui se doit de respecter les conditions de séparation d'échelle (macrohomogénéité et microhétérogénéité) et vise à mettre en avant les aspects microstructuraux et les mécanismes de déformation pertinents pour le comportement mécanique étudié au travers du choix d'un motif morphologique. Deux cas sont en particulier étudiés dans ce travail : les polycristaux (§ IV.2) qui présentent généralement une « faible » hétérogénéité mécanique et des matériaux biphasés présentant un fort contraste mécanique (§ IV.3.) tels que des composites polymères renforcés par des whiskers de cellulose et des alliages métalliques à l'état semi-solide.

La deuxième étape (localisation) est celle qui différencie les modèles de transition d'échelle. Le modèle autocohérent, auquel on s'intéresse dans ce mémoire, a ainsi été développé et appliqué avec succès aux polycristaux dans les cas de l'élasticité, l'élastoplasticité et la viscoplasticité. Dans le cas de comportements non linéaires tels que l'élastoplasticité ou la viscoplasticité, une linéarisation du comportement local est effectuée afin de se ramener à un problème de pseudo-élasticité ou plus généralement de thermoélasticité (Zaoui, 2001) pour lequel le traitement autocohérent est bien rigoureux. Ainsi Ponte Castañeda (1991) systématise la notion de "milieu linéaire de comparaison" qui consiste à assimiler, dans un état structural donné, le milieu non linéaire réel à un milieu linéaire fictif ayant localement des caractéristiques mécaniques obtenues par linéarisation de celles du milieu réel. La démarche d'homogénéisation est alors effectuée sur le "milieu linéaire de comparaison" et fournit un module effectif définissant une relation linéarisée du comportement macroscopique. Si le comportement local est linéarisé de la manière suivante :

$$\dot{\sigma}(r) = l(r) : \dot{\epsilon}(r) \quad (\text{Equation IV.1.1})$$

où $l(r)$ est ici le module tangent supposé connu dans un premier temps. On obtient le comportement homogénéisé et le module effectif associé L^e par les équations :

$$\dot{\Sigma} = L^e : \dot{E} \quad (\text{Equation IV.1.2})$$

$$\text{avec } L^e = \overline{A^{L^e}(r)} : l(r) \quad (\text{Equation IV.1.3})$$

où A^{L^e} est le tenseur de localisation des déformations associé au MHE (milieu effectif) et $\overline{a(r)} = \frac{1}{V} \int_V a(r) dV$.

Notons que plusieurs schémas de linéarisation sont possibles donnant lieu à autant de modules effectifs (et de modèles !) : la formulation incrémentale (Hill, 1965) (Eqn. IV.1.1), la formulation sécante (Hutchinson, 1976), la formulation tangente (Molinari et al, 1987 ; Lebensohn et Tomé, 1993) et sa généralisation, la formulation affine (Masson et al, 2000) qui, quelque soit la loi de comportement non linéaire locale, permet de se ramener à un problème de thermoélasticité linéaire. Afin de pouvoir juger de leur pertinence, certaines extensions du modèle autocohérent (incrémentale, tangente, sécante) ont été comparées à la borne la plus restrictive de Ponte Castañeda (1991) dans le cas d'un comportement viscoplastique en loi puissance isotrope et incompressible (Gilormini, 1995, 1997). Ces travaux montrent que ces extensions peuvent excéder cette borne lorsque le contraste ou la non linéarité sont suffisamment importants. Ainsi, l'étape de linéarisation "rigidifie" l'estimation du comportement et l'objectif principal des nouveaux modèles développés est donc de l'"assouplir".

A ce stade, faisons une parenthèse pour souligner que, étant donné la complexité des systèmes étudiés, les champs de contraintes et de déformations et donc le comportement linéarisé ne sont en fait pas connus en tout point r . Dans les approches en « champ moyen » reposant sur le problème d'inclusion d'Eshelby, on ne s'intéresse en fait qu'aux valeurs moyennes des champs. Pour chaque phase, on considère des caractéristiques linéarisées associées à la déformation ou à la contrainte moyenne. Cette approximation explique en partie (mais ce n'est pas la seule raison (Gilormini, 1997)) les estimations trop raides de la réponse macroscopique (Zaoui, 2001). Ces approches peuvent être améliorées en linéarisant le comportement local par rapport au second moment des contraintes donnant lieu aux théories dites "modifiées" (Suquet, 1995 ; Brenner et al, 2001). Le succès de ces approches se heurte cependant à deux difficultés majeures qui sont (i) l'approximation d'uniformité du comportement par phase et (ii) leur incapacité de rendre compte d'effet d'échelle tel que l'effet de taille de grain. Ce sont ces limites qui motivent aujourd'hui mes projets de recherche sur la prise en compte des hétérogénéités intragranulaires et de longueurs internes que j'aborderai dans les conclusions et perspectives (§ V).

Mais revenons à l'approche en "champ moyen" autocohérente. En élastoplasticité et en viscoplasticité, les formes linéarisées du comportement définissent de manière claire un module tangent ou sécant unique sur lequel porte ensuite l'approximation autocohérente (Eqn. IV.1.3). Dans le cas de la viscoélasticité linéaire ou non linéaire (élastoviscoplasticité), c'est plus complexe. En effet, comme nous le verrons dans le paragraphe IV.2.3, la prise en compte du couplage entre l'élasticité et la viscosité introduit la présence simultanée de deux ordres de dérivation d'un même champ : $\sigma, \dot{\sigma}$ ou $\varepsilon, \dot{\varepsilon}$ dans la loi de comportement local (cf. par exemple Eqn II.4.1). Cela rend délicat la définition d'un module unique et nécessite une démarche spécifique. Dans ce travail, une nouvelle classe de modèles, appelés modèles à champs translés (*Sabar et al, 2002*), est proposée. Elle fait appel à une approximation autocohérente qui ne porte plus uniquement sur les modules comme dans le cas classique, mais sur des champs compatibles par rapport auxquels on translate les

champs réels. Nous expliquons dans la suite la genèse de cette démarche en abordant le point de vue de l'écoulement plastique comme dépendant de l'histoire mécanique du matériau (§ IV.2.3.2).

IV.2 Hétérogénéités faiblement contrastées : Cas des polycristaux

IV.2.1 Représentation

Le polycristal monophasé est un matériau hétérogène. La principale source d'hétérogénéité vient de l'anisotropie du comportement plastique du monocristal. Notons que pour simplifier, l'élasticité a été supposée isotrope car son caractère anisotrope a un effet mineur dès l'entrée en plasticité. L'anisotropie plastique est inhérente au caractère cristallographique des mécanismes de déformation (cf. § II). Les grains ayant des orientations cristallographiques différentes, il y a incompatibilité plastique de grain à grain. L'hétérogénéité considérée dans les polycristaux est donc en général le grain ou plus exactement l'ensemble des grains de même orientation définissant une phase cristallographique. Le matériau est considéré alors comme un « composite » à n phases et les modèles associés sont qualifiés alors de polycristallins.

IV.2.2 Approximation autocohérente classique

Travaux scientifiques majeurs :

- G'Sell C., Dahoun A., Favier V., Hiver J.M., Philippe M.J., Canova G.R. (1997), Microstructure transformation and plastic behavior of isotactic polypropylene under large plastic deformation, *Polymer Engineering and Science*, 37, 1702-1715

Parmi les méthodes de transition d'échelle, le modèle autocohérent est le plus utilisé car il prend en compte le caractère désordonné de la morphologie polycristalline. Dans sa forme classique (dite à un site), il assimile l'interaction d'une phase avec ses voisines à celle entre la phase en question et le MHE. Autrement dit, on considère que chaque phase, en moyenne, est dans la même situation mécanique, qu'une inclusion de type Eshelby (1957) plongée dans une matrice qui n'est autre que le MHE. La démarche autocohérente consiste à estimer le module effectif du MHE. Dans le cas d'un comportement élastique linéaire, le schéma autocohérent est clairement établi (Kröner, 1958). Son extension aux comportements non linéaires nécessite une linéarisation du comportement local définissant un module tangent ou sécant pour se ramener pas à pas à un problème de pseudo-élasticité. Dans le cas de l'élastoplasticité et de la viscoplasticité, les formes des lois de comportement locale et globale sont identiques et le module effectif se déduit facilement d'une homogénéisation des modules locaux.

Appliqué essentiellement aux polycristaux métalliques, le modèle autocohérent a également été utilisé pour simuler le comportement (visco)plastique de polymères semi-cristallins (par exemple Dahoun et al, 1995, Makradi et al, 2004). Dans le cadre de mes activités sur les polymères semi-cristallins et d'une étude sur les relations microstructure-comportement plastique du polypropylène, un modèle autocohérent viscoplastique (Molinari et al, 1987) a été utilisé pour simuler le comportement plastique en traction et en cisaillement du matériau. La phase amorphe de comportement caoutchoutique dans la gamme de température étudiée a été négligée. Le polypropylène est donc considéré, en première approximation, comme un polycristal de structure

monoclinique avec huit systèmes de glissement associés à des cissons de référence différentes. Les simulations permettent de reproduire correctement les courbes de comportement et l'évolution des textures. En particulier, le modèle traduit la forte différence d'écrouissage observée en traction et en cisaillement. Le fort écrouissage en traction est attribué au développement d'une texture due à la rotation des lamelles cristallines dans la direction de traction. Au contraire, la texture planaire qui se développe en cisaillement conduit à une absence d'écrouissage. Pour plus de détails, le lecteur pourra se référer à *G'Sell et al (2002)* donné en Annexe D.

IV.2.3 Extension au cas de l'élastoviscoplasticité

IV.2.3.1 Introduction

Dans le cas de la viscoélasticité linéaire ou non linéaire, la présence simultanée de mécanismes de déformation instantanée (élasticité) et dépendant du temps (visqueux) donne lieu à un comportement héréditaire, c'est-à-dire que la réponse actuelle du matériau dépend non seulement de la sollicitation actuelle mais aussi de toute son histoire. Cette propriété d'hérédité combinée à l'hétérogénéité du matériau engendre un couplage espace-temps entre les champs mécaniques. Considérons un élément de Maxwell obéissant à la loi de comportement suivante (cf. aussi Eqn. II.4.1) :

$$\dot{\varepsilon} = s : \dot{\sigma} + m : \sigma \quad (\text{Equation IV.2.1})$$

Un assemblage d'éléments maxwelliens ne se comporte pas à l'échelle macroscopique comme un élément de Maxwell (Suquet, 1985). Il apparaît dans la loi de comportement macroscopique un terme intégral supplémentaire, appelé effet de mémoire longue, qui traduit la présence d'interactions mécaniques différées entre les phases :

$$\dot{E} = S^{hom} : \dot{\Sigma} + M^{hom} : \Sigma + \int_0^t J(t-v) : \dot{\Sigma}(v) dv \quad (\text{Equation IV.2.2})$$

où les tenseurs S^{hom} et M^{hom} découlent de l'homogénéisation respectivement purement élastique et visqueuse. On voit alors apparaître la difficulté de définir un module (ou complaisance) effectif. Comment appliquer alors la démarche autocohérente ?

Déjà à l'échelle locale (Eqn. IV.2.1), la présence simultanée de deux ordres de dérivation d'un même champ, $\sigma, \dot{\sigma}$, rend délicate la détermination d'un module tangent ou sécant. Dans le cas de la viscoélasticité linéaire sans vieillissement, le problème a été résolu par Laws et McLaughlin (1978) en transformant le problème d'homogénéisation en viscoélasticité linéaire non vieillissant en problème élastique symbolique. En effet, dans ce cas, le comportement local s'écrit sous la forme d'une fonctionnelle linéaire résultant du principe de superposition de Boltzmann :

$$\varepsilon(t) = \int_{-\infty}^t j(t-v) : d\sigma(v) \quad (\text{Equation IV.2.3})$$

où j est la fonction de fluage du matériau. Le principe de correspondance permet alors d'écrire le comportement dans l'espace de Laplace-Carson de variable p sous la forme élastique symbolique :

$$\hat{\varepsilon}(p) = j(p) : \hat{\sigma}(p) \quad (\text{Equation IV.2.4})$$

On peut alors maintenant appliquer l'approximation autocohérente et obtenir dans l'espace de Laplace-Carson la complaisance effective comme dans l'équation IV.1.3. Cette méthode a le grand avantage de permettre l'application d'une démarche autocohérente classique rigoureuse. C'est pourquoi elle sert de référence pour les autres modèles développés.

Une extension de cette méthode dans le cas de la viscoélasticité non linéaire a été proposée par Rougier et al (1994) puis par Masson et Zaoui (1999) et Masson et al (2000) dans le cadre de la formulation affine. La linéarisation permet de se ramener à un problème de viscoélasticité avec déformation libre (thermoviscoélasticité). Le comportement local linéarisé au temps ζ est écrit sous la forme :

$$\varepsilon(t) = \int_{-\infty}^t q_{\zeta}(v) : d\sigma(v) + \varepsilon^0(\zeta, t) \quad (\text{Equation IV.2.5})$$

ou dans l'espace de Laplace-Carson

$$\hat{\varepsilon}(p) = \hat{q}_{\zeta}(p) : \hat{\sigma}(p) + \hat{\varepsilon}^0(\zeta, p) \quad (\text{Equation IV.2.6})$$

Le comportement homogénéisé est ensuite obtenu de manière classique dans l'espace de Laplace-Carson où \hat{Q}_{ζ}^e est la complaisance effective et $\hat{E}^0(\zeta, p)$ la déformation libre homogénéisée (Eqn. IV.2.7). Remarquons que cette déformation libre résulte uniquement du processus de linéarisation et n'a pas de sens physique.

$$\hat{E}(p) = \hat{Q}_{\zeta}^e(p) : \hat{\Sigma}(p) + \hat{E}^0(\zeta, p) \quad (\text{Equation IV.2.7})$$

Il faut ensuite inverser la solution pour retourner dans l'espace réel.

L'intérêt de la méthode de la transformation de Laplace-Carson couplée à une formulation affine est double. Premièrement, cette approche permet d'utiliser une démarche autocohérente classique dans l'espace de Laplace-Carson. Deuxièmement, elle s'applique, a priori, à n'importe quel type de comportement local, si on s'assure que le "milieu linéaire de comparaison" thermoviscoélastique retenu est non vieillissant pour pouvoir appliquer le principe de correspondance. Or dans le cas d'un comportement non linéaire, les paramètres du matériau évoluent avec le temps. L'utilisation des techniques de Laplace-Carson ne peut donc se faire de manière exacte et induit des approximations, difficiles à quantifier (Mercier et al, 2005). Par ailleurs, la nécessité de stocker toute l'histoire mécanique du matériau et le traitement par les techniques de transformées de Laplace-Carson inverses rendent la démarche délicate à mettre en œuvre et coûteuse en temps de calcul. Une méthode alternative approchée mais plus rapide a été proposée par Brenner et al (2002) mais elle reste limitée aux cas de sollicitations lentes.

Mais est-on réellement obliger de connaître toute l'histoire mécanique du matériau ? Un autre point de vue, donnant lieu aux approches dites « à variables internes » et adopté dans ce travail, consiste à considérer que l'histoire mécanique du matériau est contenue dans son état interne. Celui-ci est représenté par des variables internes qu'il faut réactualiser à chaque pas. Le modèle à champs translétés proposé repose sur cette idée. Il est expliqué par la nature de l'écoulement (visco)plastique en tant que déformation non libre de contraintes .

IV.2.3.2 Modèle à champs translétés

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de S. Berbenni soutenue en janvier 2002 encadrée par M. Berveiller et V. Favier
- Sabar H., Berveiller M., Favier V., Berbenni S. (2002), A new Class of Micro-Macro Models for elastic-viscoplastic heterogeneous Materials, *Int. J Solids Structure*, 39, 3257-3276.
- Favier V, Sabar H, Berveiller M, Berbenni S (2003) New self-consistent approach for inelastic materials based on translated fields, *Journal de Physique IV*, 105, 231-238
- Favier V., Sabar H., Berveiller M., Berbenni S., New micro-macro approach for elastic-viscoplastic materials based on translated fields, *CanCNSM 2002*, Vancouver, Canada, June 2002 – Conférence invitée

IV.2.3.2.1 Présentation du modèle avec le point de vue de la déformation (visco)plastique non libre de contrainte

Ce modèle est inspiré des travaux de Kröner (1961) en élastoplasticité dont une nouvelle présentation est donnée en détail dans *Sabar et al (2002)* (Annexe E).

En tout point r du matériau, la loi de comportement élastoviscoplastique peut s'écrire :

$$\dot{\epsilon}(r) = s(r) : \dot{\sigma}(r) + \dot{\epsilon}^{vp}(r) \quad (\text{Equation IV.2.8})$$

où $\dot{\epsilon}^{vp}(r)$ est la vitesse de déformation viscoplastique qui dépend non linéairement de la contrainte. La première tentative d'étendre les outils d'homogénéisation à l'élastoviscoplasticité a été formulée par Weng (1981) inspiré par l'approximation développée par Kröner (1961) en élastoplasticité. Elle consiste notamment à introduire des fluctuations du champ de vitesses de déformation viscoplastique $\dot{\epsilon}^{vp}$ autour d'un champ de vitesses de déformation viscoplastique de référence uniforme \dot{E}^{vp} (qui n'est pas nécessairement la moyenne de $\dot{\epsilon}^{vp}$). Dans cette approche, Weng commet deux erreurs. La première est de prendre comme vitesse de déformation viscoplastique de référence, autrement dit pour la matrice, un champ uniforme. Ce choix ne permet pas une accommodation (visco)plastique de la matrice autour de l'inclusion. La deuxième erreur est de considérer la vitesse de déformation viscoplastique comme une vitesse de déformation « libre de contraintes ». Cette vitesse de déformation est donc « figée » lors de la transition d'échelle, ce qui conduit à une interaction purement élastique et donc une surestimation des contraintes.

Dans le modèle dit à champs translétés que nous proposons, la même démarche est adoptée mais la nature de la vitesse de déformation viscoplastique de référence est fortement modifiée. Ainsi,

nous introduisons des fluctuations du champ de vitesses de déformation viscoplastique $\dot{\epsilon}^{vp}$ autour d'un champ de vitesses de déformation viscoplastique $\dot{\epsilon}^{vp}(r)$ qui n'est, cette fois, pas nécessairement uniforme mais qui doit être compatible. Ce choix d'un champ cinématiquement admissible est relié à l'utilisation des opérateurs de projection (Kunin, 1983) qui ont des propriétés très utiles lorsqu'ils sont appliqués à des champs cinématiquement (et statiquement) admissibles, facilitant l'introduction de champs translatés (Sabar et al, 2002).

$$\dot{\epsilon}^{vp}(r) = \dot{\epsilon}^{vp}(r) + \delta \dot{\epsilon}^{vp}(r) \quad (\text{Equation IV.2.9})$$

L'équation IV.2.9 traduit ainsi une translation du champ $\dot{\epsilon}^{vp}(r)$ en tout point r du champ de déformation viscoplastique réel $\dot{\epsilon}^{vp}(r)$. Ce champ de référence est choisi comme étant la solution autocohérente du problème purement viscoplastique soumis à ces frontières à un champ \dot{X} . Il s'écrit ainsi :

$$\dot{\epsilon}^{vp}(r) = A^{B^e}(r) : \dot{X} \quad (\text{Equation IV.2.10})$$

La condition d'autocohérence appliquée sur le champ de déformation viscoplastique impose que \dot{X} soit la vitesse de déformation viscoplastique effective \dot{E}^{vpe} du matériau définie par :

$$\dot{E} = S^e : \dot{\Sigma} + \dot{E}^{vpe} \quad (\text{Equation IV.2.11})$$

Dans l'équation IV.2.10, A^{B^e} est le tenseur de localisation des vitesses de déformations viscoplastiques d'un problème purement viscoplastique. Sa détermination demande une linéarisation du comportement viscoplastique. Une formulation sécante a été retenue car elle permet de retrouver facilement le cas linéaire où le tenseur des complaisances visqueuses est constant :

$$\dot{\epsilon}^{vp}(r) = m(r, \sigma) : \sigma(r) \quad (\text{Equation IV.2.12})$$

Ainsi les déformations viscoplastiques réelles $\dot{\epsilon}^{vp}(r)$, de référence $\dot{\epsilon}^{vp}(r)$ et effective \dot{E}^{vpe} ne sont plus figées mais dépendent de l'état actuel des contraintes. Finalement après calculs (Sabar et al, 2002, Annexe E), la loi d'interaction s'écrit :

$$\dot{\sigma} = c : A^{C^e} : S^e : \dot{\Sigma} - c : A^{C^e} : (I - S^E) : \left(\dot{\epsilon}^{vp} - A^{B^e} : \dot{E}^{vpe} \right) \quad (\text{Equation IV.2.13})$$

Dans le cas de l'élasticité homogène, elle se réduit à :

$$\dot{\sigma} = \dot{\Sigma} - C : (I - S^E) : \left(\dot{\epsilon}^{vp} - A^{B^e} : \dot{E}^{vpe} \right) \quad (\text{Equation IV.2.14})$$

La relation IV.2.14 diffère de la célèbre formulation de Kröner-Weng par la présence du tenseur de localisation viscoplastique A^{B^e} . Cette dernière permet d'adoucir les interactions entre hétérogénéités.

L'accommodation est bien de nature élastique-viscoplastique comme le montre l'équation d'interaction obtenue à partir des relations de localisation de déformations (Sabar et al, 2002) et de concentration des contraintes (Eqn. IV.2.13) :

$$(\dot{\epsilon} - \dot{E}) = S : (\dot{\sigma} - \dot{\Sigma}) + m : \sigma - \overline{m : \sigma} \quad (\text{Equation IV.2.15})$$

Ainsi, contrairement aux approches de Weng (1981), Nemat-Nasser et Obata (1986), Harren (1991), la nature élastoviscoplastique (et pas seulement élastique !) du comportement est intégrée dans la loi d'interaction.

IV.2.3.2.2 Différentes manières de traiter le couplage élasticité-viscosité

Nous avons vu dans le paragraphe précédent (§ IV.2.3.2.1) la nécessité d'introduire, dès le début de la formulation, la loi d'écoulement de la déformation viscoplastique. En prenant une linéarisation sécante, les équations du problème s'écrivent alors :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \dot{\sigma}(r) = c(r) : (\dot{\epsilon}(r) - m(\sigma, r) : \sigma(r)) & \text{loi de comportement} \\ \text{div } \dot{\sigma} = 0 & \text{équation d'équilibre} \\ \dot{\epsilon} = \nabla^s \dot{u} & \text{relation de compatibilité cinématique} \\ \dot{u}_i^d = \dot{E}_{ij} x_j \text{ sur } \partial V & \text{conditions aux limites} \end{array} \right. \quad (\text{Equation IV.2.16})$$

Dans ce problème, les inconnues sont les vitesses de déformation et vitesses de contrainte. Les contraintes qui apparaissent dans l'équation de comportement sont supposées connues. Ce sont des variables internes qui représentent la mémoire du matériau et qu'il faut donc réactualiser à chaque pas. Elles ont la propriété supplémentaire d'être auto-équilibrées. Notons que cette analyse reste identique pour le choix d'un autre schéma de linéarisation (affine par exemple). Contrairement à l'approche utilisant les transformées de Laplace-Carson qui fait intervenir dans la loi locale une seule complaisance combinant à la fois élasticité et viscoplasticité (voir Eqn IV.2.6), l'équation IV.2.16 fait apparaître une complaisance élastique et une complaisance viscoplastique. Or on sait que le comportement homogénéisé ne pourra pas être défini uniquement par ces deux complaisances effectives car il n'est pas maxwellien.

Aux temps très courts ou aux toutes petites déformations, la réponse du matériau est purement élastique. Aux temps très longs ou aux grandes déformations, la réponse du matériau est purement visqueux. S'appuyant ainsi sur ces états asymptotiques, Molinari et al (Kouddane et al, 1993 ; Molinari et al, 1997), Paquin et al (1999) choisissent de traiter de manière symétrique les parties élastiques et viscoplastiques définissant deux milieux de référence, un purement élastique et l'autre purement visqueux. Cependant, pour appliquer l'approximation autocohérente tout en préservant la nature élastoviscoplastique des interactions, Kouddane et al (1993) sont obligés d'imposer une relation restrictive entre les modules élastiques et les complaisances viscoplastiques effectives. Molinari et al (1997) proposent une relation d'interaction approchée, numériquement simple à mettre en œuvre. Mais ils doivent supposer que le comportement homogénéisé est maxwellien. Même si celui-ci est réactualisé à chaque pas, cela suffit-il à traduire l'effet de mémoire dont l'importance augmente avec la non linéarité du comportement ? Ne faisant aucune hypothèse sur la forme de loi de comportement homogénéisé, Paquin et al (1999) caractérisent leurs deux milieux de référence non seulement par un module mais aussi par un champ de déformation. Le modèle à champs translatsés n'est qu'une

simplification du modèle de Paquin et al (1999) en retournant à la base du problème. Il en diffère cependant fortement dans le sens où l'élasticité et la viscoplasticité sont toujours traitées de manière séparée, dissociant ainsi mécanismes de stockage et mécanismes de dissipation, mais non de manière symétrique. Ainsi le milieu de référence élastique est défini par un module élastique alors que le milieu de référence viscoplastique est défini par un champ de vitesse de déformation $\dot{\epsilon}^{vp}(\sigma) = A^{B^e}(\sigma) : \dot{E}^{vpe}(\sigma)$.

IV.2.3.2.3 Principaux résultats

Pour situer le modèle à champs translatsés par rapport aux autres modèles de la littérature, la loi d'interaction IV.2.14 (élasticité homogène) est écrite tout d'abord dans le cas d'une inclusion sphérique plongée dans une matrice homogène infinie où inclusion et matrice présentent toutes deux un comportement viscoélastique linéaire de type Maxwell, isotrope et incompressible. Suivant les travaux de Mercier et al (2005), elle est comparée à la solution exacte (donc de référence) de Hashin (1969), calculée dans l'espace de Laplace-Carson, et aux solutions proposées par Kouddane et al (1993), Paquin et al (1999) et Weng (1981) (Tab. IV.2.1).

Matrice	Inclusion
$\dot{\Sigma}_D = 2\mu \left[\dot{E}_D - \dot{E}_D^{vp} \right] = 2\mu \left[\dot{E}_D - \frac{\Sigma_D}{2\eta} \right]$	$\dot{\sigma}_D^I = 2\mu \left[\dot{\epsilon}_D^I - \dot{\epsilon}_D^{vpI} \right] = 2\mu \left[\dot{\epsilon}_D^I - \frac{\sigma_D^I}{2\eta_I} \right]$
L'indice D indique que les tenseurs sont des déviateurs	
Lois d'interaction	
Hashin (1969) – Solution exacte	
$\dot{\sigma}_D^I = \dot{\Sigma}_D - 2\mu \left[\left(\frac{2\eta_I + 3\eta}{5\eta} \right) \dot{\epsilon}_D^{vpI} - \dot{E}_D^{vp} \right]$	
Kouddane et al (1993)	Weng (1981)
$\dot{\sigma}_D^I = \dot{\Sigma}_D - 2\mu \left[\left(\frac{2\eta_I + 3\eta}{5\eta} \right) \dot{\epsilon}_D^{vpI} - \dot{E}_D^{vp} \right]$	$\dot{\sigma}_D^I = \dot{\Sigma}_D - 2\mu(1 - \beta) \left[\dot{\epsilon}_D^{vpI} - \dot{E}_D^{vp} \right]$
Paquin et al (1999)	Modèle à champs translatsés : Sabar et al (2002)
$\dot{\sigma}_D^I = \dot{\Sigma}_D - 2\mu \left[\left(\frac{2\eta_I + 3\eta}{5\eta} \right) \dot{\epsilon}_D^{vpI} - \dot{E}_D^{vp} \right]$	$\dot{\sigma}_D^I = \dot{\Sigma}_D - 2\mu(1 - \beta) \left[\dot{\epsilon}_D^{vpI} - \left(\frac{2\eta_I + 3\eta}{5\eta} \right) \dot{E}_D^{vp} \right]$
	Cailletaud et Pilvin (1994)
	$\sigma_D^I = \Sigma_D - 2\mu(1 - \beta) \left(\beta_D^{vpI} - B_D^{vp} \right)$
	avec $\dot{\beta}_D^{vpI} = \dot{\epsilon}_D^{vpI} - \Delta \left(\beta_D^{vpI} - \delta \epsilon_D^{vp} \right) \dot{\epsilon}_{eq}^{vp}$
	et $\dot{B}_D^{vpI} = \overline{\dot{\beta}_D^{vpI}}$

Tableau IV.2.1 : Lois d'interaction dans le cas d'une inclusion sphérique plongée dans une matrice homogène infinie où inclusion et matrice ont un comportement viscoélastique linéaire de type Maxwell, isotrope et incompressible avec élasticité homogène – Comparaisons entre différents modèles

On constate que les modèles de Kouddane et al (1993) et Paquin et al (1999) coïncident avec la solution exacte. Dans le cas du modèle à champs translétés, l'expression de la loi d'interaction est différente mais une analyse fine, dans l'espace de Laplace-Carson et dans l'espace directe, montre que :

- elle coïncide avec le résultat de Hashin (1969) dans les états asymptotiques correspondants aux comportements purement élastique obtenu aux très faibles déformations et purement visqueux obtenu grandes déformations,
- l'écart, dans le régime transitoire, reste faible même pour un fort contraste mécanique (*Sabar et al, 2002*).

L'écart subsistant, provient sans doute d'un traitement différent du couplage viscoélastique (§ IV.2.3.2.2).

Le tableau IV.2.1 donne également la loi d'interaction du modèle proposé par Cailletaud et Pilvin (1994). Celle-ci a été a priori postulée en s'inspirant des travaux de Berveiller et Zaoui (1979) en élastoplasticité. La variable β_D , de nature heuristique, traduit l'accommodation intergranulaire de chaque phase et permet d'adoucir les interactions mécaniques. On peut remarquer les similarités de forme des lois d'interactions des modèles de Weng, Cailletaud-Pilvin et du modèle à champs translétés même si la représentation des interactions est sensiblement différente. Dans le modèle de Cailletaud-Pilvin, les paramètres Δ et δ permettent d'"ajuster" la nature des interactions. En particulier si $\Delta = 0$, on obtient une interaction purement élastique comme dans le cas du modèle de Weng.

La figure IV.2.1 compare, dans le cas de l'élastoviscoplasticité (non linéaire), la réponse globale obtenue par le modèle proposé à celle obtenue par d'autres approches (Fig. IV.2.1) (*Favier et al, 2003*). Rappelons que, dans ce cas, il n'existe pas de solution autocohérente exacte. On constate que les réponses issues des modèles de Masson et Zaoui (1999), Paquin et al (1999) et du champs translétés tendent tous vers les mêmes états asymptotiques. En particulier, la contrainte associée à l'état purement viscoplastique est bien inférieure à celle issue du modèle de Weng (1981), comme attendu, mais également à celles estimées par des approches purement viscoplastiques (Fig. IV.2.2). Dans le régime transitoire, on constate que la réponse du modèle à champs translétés est inférieure à celle du modèle utilisant les transformées de Laplace-Carson (Masson et Zaoui, 1999) tout en restant proche. Le modèle de Paquin et al présente un régime transitoire beaucoup plus court que celui des deux autres modèles.

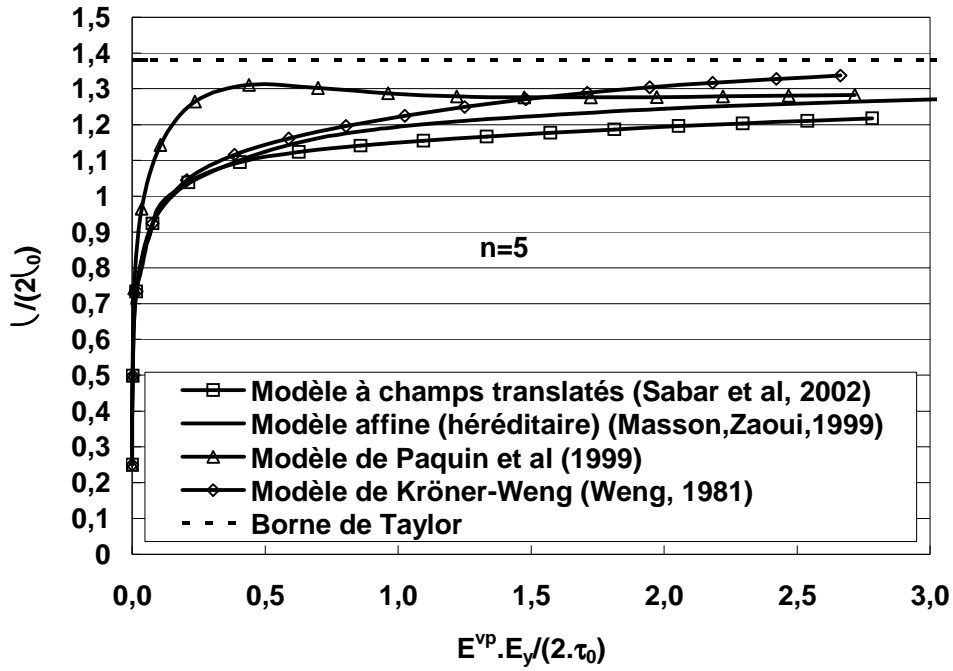


Figure IV.2.1 : Courbes contrainte-déformation normalisées en traction uniaxiale à une vitesse de déformation de 10^{-2} s^{-1} pour un polycristal cubique à faces centrées. Comparaison entre différentes méthodes d'homogénéisation en élastoviscoplasticité

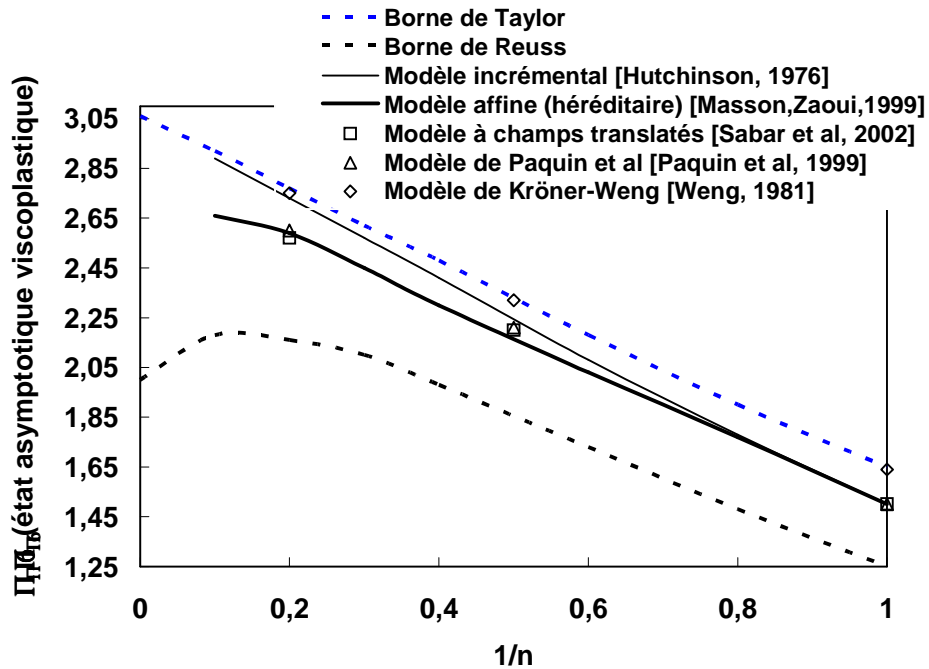


Figure IV.2.2 : Fluage en loi puissance d'un polycristal CFC sans texture en traction simple : évolution de la contrainte de référence Σ_0/τ_0 avec la sensibilité à la vitesse $m = 1/n$. Comparaison des résultats obtenus par différents modèles de nature élastoviscoplastique ou purement viscoplastique.

IV.2.2.3.4 Conclusions et Perspectives

En résumé, les comparaisons du modèle à champs translétés avec d'autres modèles de la littérature et notamment ceux issus d'une approche utilisant les transformées de Laplace-Carson montrent les points suivants :

- Le modèle à champs translétés présente une formulation simple et une mise en œuvre numérique facile.
- La description des interactions élastique-viscoplastiques reste partielle puisque l'élasticité et la viscoplasticité sont traitées de manière séparée mais les comparaisons effectuées avec les approches utilisant les transformées de Laplace-Carson montrent qu'elle est très satisfaisante.
- En ce qui concerne les états asymptotiques purement élastique et purement viscoplastique, le modèle à champs translétés coïncide avec les modèles utilisant les transformées de Laplace-Carson dans les cas de comportements linéaire et non linéaire. Cette coïncidence n'est cependant pas suffisante pour juger la qualité du modèle. En effet, la pertinence d'un modèle viendra surtout de sa capacité à décrire les interactions de nature élastoviscoplastique, autrement dit l'effet de mémoire qui se manifeste surtout dans le régime transitoire.
- Dans le régime transitoire, le modèle à champs translétés donne une réponse proche de celle des modèles utilisant les transformées de Laplace-Carson, là encore dans les cas de comportements linéaire et non linéaire. On peut noter que, contrairement à d'autres approches, il ne reproduit pas la loi d'interaction exacte entre une inclusion et une matrice infinie présentant un comportement viscoélastique linéaire de type Maxwell, isotrope et incompressible. Mais le prix à payer pour satisfaire cette coïncidence ne nous paraît pas forcément justifier lorsque l'on cherche à décrire le comportement élastoviscoplastique de matériaux hétérogènes puisque le comportement homogénéisé ne suit pas une loi de Maxwell.
- Le modèle à champs translétés ne fait aucune hypothèse sur la forme de la loi de comportement macroscopique.
- Il peut être utilisé pour n'importe quel type de comportement, linéaire ou non linéaire, isotrope ou anisotrope, compressible ou incompressible et pour n'importe quel type de chargement, lent ou rapide.

Il est important de souligner que le choix du champ cinématique de translation n'est pas unique et donne lieu à diverses estimations. De la même manière, le schéma de linéarisation peut-être amélioré (formulation affine, théorie modifiée) et donnera lieu à d'autres modèles. La démarche de translation de champs donne ainsi lieu à une nouvelle classe de modèles.

Le modèle à champs translétés est utilisé comme outil de transition d'échelle dans les applications concernant des polycristaux d'aciers décrites dans le chapitre III. Dans la suite de notre travail, une extension de la modélisation aux grandes déformations est prévue afin de mieux répondre aux applications rentrant dans le cadre de la mise en forme. Par ailleurs, la démarche des champs translétés sera appliquée au cas d'un comportement de type Bürger pour décrire la présence simultanée des mécanismes de déformations réversibles, instantanée (élasticité) et retardée (anélasticité), et irréversibles dépendant du temps (viscoplasticité). C'est le cas par exemple des aciers à structure cubique centrée sollicités en fatigue sous faibles contraintes étudiés dans le chapitre III de ce mémoire.

IV.3 Hétérogénéités fortement contrastés

IV.3.1 Introduction

Lorsque le contraste mécanique entre les phases devient important, l'arrangement des phases et en particulier leur continuité joue un rôle du premier ordre dans le comportement donnant lieu à des effets de percolation mécanique (§ IV.3.2). Modéliser le matériau à partir du seul motif de l'inclusion (représentant une phase) entourée du MHE devient alors clairement insuffisant. Pour mieux représenter la topologie (morphologie et distribution spatiale) des phases on utilise le concept plus riche du motif morphologique qui permet de mettre en avant les caractéristiques microstructurales et les mécanismes de déformation pertinents pour le comportement étudié (§ IV.3.3). Le comportement effectif est ensuite déterminé par un modèle autocohérent généralisé.

IV.3.2 Rôle de la morphologie

IV.3.2.1 Mise en évidence expérimentale de l'effet de percolation mécanique : cas des composites à matrice polymère renforcée par des whiskers de cellulose

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de V. Favier soutenue en octobre 1995 (CERMAV) avec ELF-ATOCHEM
- Favier V., Chanzy H., Cavailhé J.Y. (1995a), Polymer nanocomposites reinforced by cellulose whiskers, *Macromolecules*, 28, 6365-6367

Dans le cadre d'un programme de recherche sur la valorisation de la biomasse mené au CERMAV, mon travail de thèse a porté sur l'élaboration et la caractérisation de systèmes composites modèles à matrice polymère renforcée par des whiskers (monocristaux) cellulosiques. Ces whiskers obtenus à partir d'animaux marins (tuniciers) ont un diamètre d'environ 20 nm et leur longueur peut atteindre plusieurs microns. Ces renforts de taille nano-micrométrique ont d'excellentes propriétés mécaniques puisque le module d'Young suivant l'axe des microfibrilles est estimé à 150 GPa. L'élaboration des matériaux composites étudiés se fait par mélange en milieu aqueux de la matrice polymère et des whiskers de cellulose, ce qui favorise une bonne dispersion des constituants, puis par éviction de l'eau. Les films composites, contenant des fractions massiques de whiskers variant de 0% à 14%, ont été élaborés par trois techniques différentes : par évaporation directe de l'eau (E), par lyophilisation et compression à chaud (PP), par lyophilisation, extrusion et compression à chaud (XP) (Favier, 1995).

Des analyses mécaniques (faibles et fortes déformations) ont mis en évidence une augmentation du module élastique tout à fait remarquable et inhabituelle à de si faibles taux de renfort pour les films "évaporés" (E), à des températures supérieures à la température de transition vitreuse de la matrice ($T_g=0^\circ\text{C}$). L'addition de 6% en masse (4% en volume) de whiskers provoque une augmentation du module de plus d'un facteur mille. La mise en oeuvre a cependant une très nette influence sur l'efficacité des charges renforçantes. A fraction volumique de whiskers égale, les films élaborés par la méthode "lyophilisation-extrusion-compression" ont un module relaxé 10 fois plus faible que ceux élaborés par la méthode "lyophilisation-compression" et 100 fois plus faible que ceux élaborés par la méthode "évaporation" (Fig. IV.3.1).

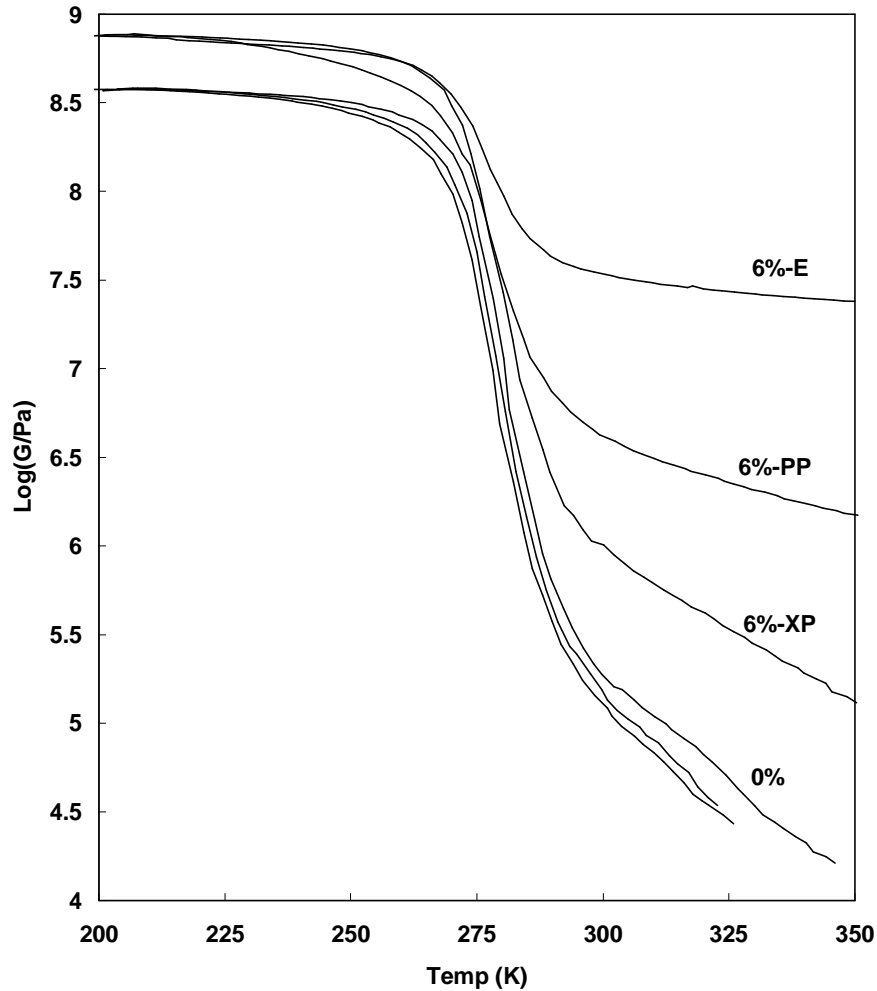


Figure IV.3.1: Log(G/Pa) en fonction de la température pour les films composites renforcés avec 0 ou 6% (g/g), soit 4% (v/v), de whiskers de tunicine et élaborés par les trois types de mises en oeuvre

La morphologie des composites apparaît donc déterminante pour comprendre les comportements mécaniques décrits précédemment. Elle a été étudiée par différentes techniques telles que la microscopie électronique à balayage et à transmission, l'observation des films composites entre polariseurs croisés et la diffraction de rayons-X. Dans le cas de films (E), le remarquable effet de renfort est attribué à la présence d'un véritable réseau continu et percolant de whiskers au sein de la matrice (Fig. IV.3.2), assurant une grande rigidité au matériau (*Favier et al, 1995ab*). Un procédé comme l'extrusion, provoquant un très fort cisaillement de la matière et orientant localement les whiskers, limite fortement la formation de ce réseau. On observe alors une diminution des propriétés mécaniques.

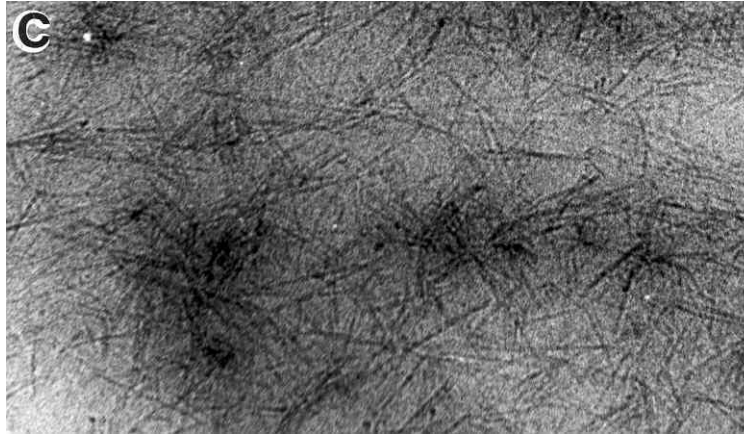


Figure IV.3.2 : Micrographie prise en microscopie électronique à transmission de coupes réalisées par ultra cryo microtomie des films (E) renforcés par 6% en masse de whiskers

IV.3.2.2 Modélisation et simulation des effets de percolation mécanique – Notion de fraction volumique effective

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de V. Favier soutenue en octobre 1995 (CERMAV) avec ELF-ATOCHEM
- Favier V., Canova G.R., Cavailé J.Y., Chanzy H., Dufresne A., Gauthier C. (1995b), Nanocomposites from latex and cellulose whiskers, *Polymer for Advanced Technologies*, 6 , 351-355
- Favier V., Dendievel R., Canova G.R., Cavailé J.Y., Gilormini P. (1997a), Simulation and modelling of 3D percolating structures: case of latex matrix reinforced by a network of cellulose fibers, *Acta Materialia*, 45, 1557-1563
- Favier V., Canova G.R., Shrivastava S.C., Cavailé J.Y. (1997b), Mechanical percolation in cellulose whiskers nanocomposites, *Polymer Engineering and Science*, 37, 1732-1742

Pour analyser plus finement les mécanismes responsables du remarquable renforcement observé, plusieurs modèles ont été utilisés. Dans un premier temps, un modèle autocohérent en élasticité, avec une extension dite "multisite" pour mieux tenir compte des effets de voisinage (Molinari et El Mouden, 1996) et prenant en compte la morphologie allongée des renforts a été utilisé. Les simulations obtenues lorsque la matrice polymère est vitreuse sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Au contraire, lorsque la matrice polymère a un comportement caoutchoutique, elles sous-estiment très fortement le renforcement observé dans les films (E) (Fig. IV.3.3). Ces résultats montrent que lorsque le contraste mécanique est faible (≈ 10), les whiskers et la matrice jouent un rôle mécanique similaire et leurs interactions peuvent être représentées par l'approximation autocohérente (§ IV.2). En revanche, lorsque le contraste mécanique est fort ($\approx 10^5$), le transfert de charge de la matrice vers les whiskers n'est plus le mécanisme de renforcement prédominant, un autre mécanisme prend alors le relais.

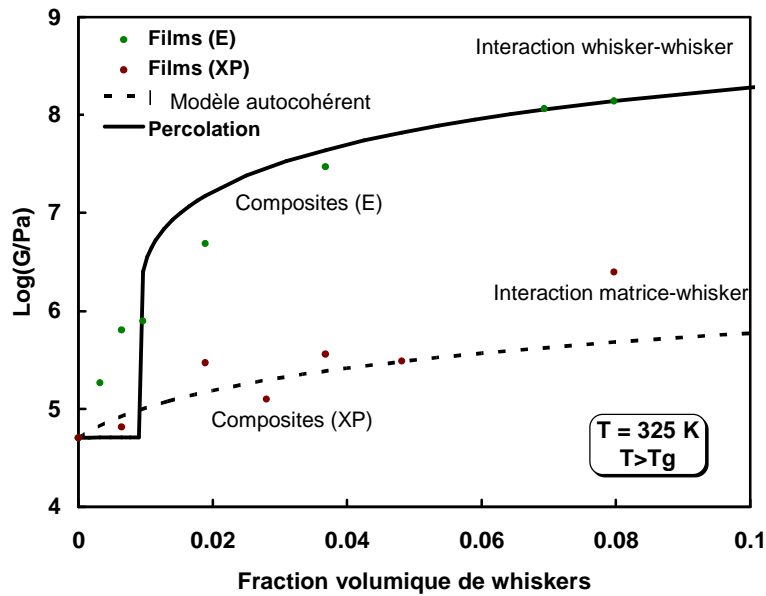


Figure IV.3.3 : Comparaison des modules expérimentaux dans le domaine caoutchoutique des composites obtenus par évaporation (E) et par extrusion (XP) et des modules prédits par le modèle autocohérent et le modèle de Voigt/Reuss basé sur la percolation

Un modèle simple de type Voigt et Reuss mais prenant en compte la percolation des whiskers a été développé (Fig. IV.3.3). En accord avec la théorie de la percolation, nous avons pu mettre ainsi en évidence que seule une fraction volumique de whiskers, appelée "fraction volumique effective", participe activement aux transferts de charge. Elle correspond aux whiskers qui appartiennent aux amas percolants en excluant les branches mortes du réseau et les agrégats isolés (Fig. IV.3.4). Les whiskers sont liés entre eux par des liaisons hydrogènes, qui jouent un rôle clé non seulement dans la cohésion mais aussi dans la rigidité du réseau de whiskers. En ce sens, la percolation mécanique est différente de la percolation de contact car elle dépend non seulement du seuil de percolation géométrique mais aussi de la densité du réseau et la nature des liaisons. Pour mieux comprendre le rôle des liaisons, des simulations éléments finis bidimensionnelles puis tridimensionnelles représentant le réseau de whiskers par un réseau de barres ou de poutres ont été effectués (Favier et al, 1997ab). Les résultats obtenus montrent qu'au-delà du seuil de percolation géométrique, un réseau de barres, liées entre elles par des liaisons rotules, agit de manière équivalente à des bâtons dispersés aléatoirement dans une matrice continue où les interactions entre les whiskers ne sont pas prises en compte. Au contraire, un réseau de poutres à cause de ses liens rigides d'encastrement présente un effet de percolation mécanique dès la formation du « premier amas infini ». Ainsi, dans le cas de réseaux de poutres, les conditions d'encastrement conduisent à un transfert de charges par les forces mais aussi par les moments, les variables cinématiques associées étant les déplacements et les rotations.

Le schéma autocohérent ne peut décrire les propriétés mécaniques de ces composites pour deux raisons :

- supposant les phases organisées en petits domaines décorrélés et distribués aléatoirement, il ne peut prendre en compte leur continuité.
- fondé sur la mécanique des milieux continus classique, il est inadapté pour décrire le transfert de charges par les moments entre les whiskers.

Une nouvelle approche où le matériau est décrit comme un milieu de Cosserat a été proposé. Il apparaît dans le modèle des longueurs caractéristiques qu'il est cependant difficile de relier à des longueurs physiques. Pour plus de détails sur ces modélisations, le lecteur pourra se référer à *Favier et al (1997a)* donné en Annexe F.

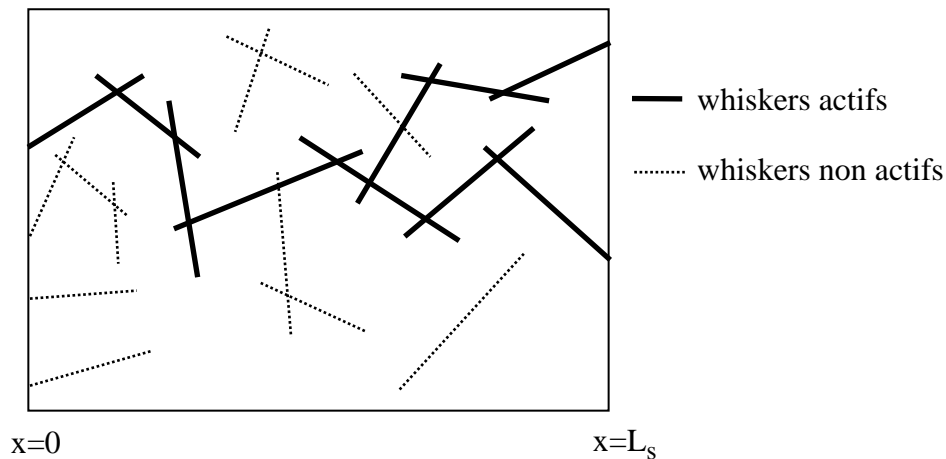


Figure IV.3.4 : Représentation schématique des whiskers considérés comme actifs ou non actifs dans la rigidité du matériau

IV.3.3 Motif morphologique évolutif

IV.3.3.1 Introduction

Le travail précédent a mis en lumière le rôle important de l'arrangement des phases dans le comportement lorsque celles-ci présentent un fort contraste mécanique. En particulier, la phase mécanique qui a le statut de matrice entourant l'autre considérée alors comme une inclusion contrôle le comportement de l'ensemble. C'est le cas des composites (XP) étudiés au paragraphe précédent : la matrice polymère entoure des agrégats isolés de whiskers. Lorsque la matrice polymère a un comportement caoutchoutique, le renforcement obtenu avec 6% en masse de monocristaux permet d'augmenter le module élastique d'environ un facteur 10. Ce résultat est certes déjà très bon par rapport à celui classiquement observé dans des composites particuliers mais reste loin du module élastique du renfort. En revanche, dans les composites (E), le renforcement obtenu atteint un facteur 1000. La topologie du matériau est formée alors deux phases continues qui s'entremêlent. A l'image du modèle de Voigt, c'est alors la plus rigide qui contrôle le comportement de l'ensemble.

Pour mieux prendre en compte le rôle mécanique de la topologie du matériau, il est très intéressant d'utiliser le concept du "motif morphologique" introduit par Stolz et Zaoui (1991). Le "motif morphologique" a pour objet de représenter les caractéristiques essentielles de la distribution des phases à l'échelle locale. Il est donc par construction hétérogène. On suppose ensuite que ce motif se reproduit dans tout le matériau. Dans le cadre du schéma autocohérent, alors qualifié de généralisé (Bornert, 1996), il joue ainsi le rôle de l'inclusion plongée dans le MHE. L'hypothèse de l'uniformité du comportement dans l'inclusion est cependant cette fois levée. La difficulté est alors de déterminer

la relation de localisation c'est-à-dire la réponse du motif plongé dans le MHE soumis à l'infini à un champ uniforme. On peut alors avoir recours à des résolutions numériques telles que la méthode des éléments finis (par exemple Chabert et al, 2004). Plus simplement, on peut ne considérer que certains aspects microstructuraux et mécaniques des phases, les plus déterminants pour le comportement étudié, et choisir un motif morphologique sphérique multicouches pour lequel on sait estimer la relation de localisation (Christensen et Lo, 1979 ; Hervé et Zaoui, 1993 ; Cherkaoui et al, 1994.). Dans le cas biphasé, ce motif est constitué d'une inclusion contenant la première phase) entourée d'une couche de matrice contenant la deuxième phase. Il est alors essentiel de bien définir ces phases "mécaniques" qui (i) ne sont pas forcément associées à des phases chimiques ou physiques et (ii) peuvent évoluer avec les conditions de chargements. On introduit ici le concept de "motif morphologique évolutif". Dans le paragraphe suivant, nous allons préciser ce concept en traitant l'exemple des alliages métalliques semi-solides.

IV.3.3.2 Comportement des alliages métalliques à l'état semi-solide

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de C. Rouff soutenue en mars 2003 encadrée par M. Berveiller, R. Bigot (LGIPM) et V. Favier avec ASOMETAL CREAS et le CNRS
- Thèse de P. Cézard depuis octobre 2002 encadrée par M. Berveiller, R. Bigot (LGIPM) et V. Favier avec ASOMETAL CREAS et la Région Lorraine
- Projet du programme "Matériaux-Procédés-Produits" mis en place en Lorraine dans le cadre du Contrat de Plan Etat-Région 2000-2006
- Bigot R., Favier V., Rouff C. (2004), Characterization of semi-solid material mechanical behavior by indentation test, *Journal of Material Processing and Technology*, 160, 43-53
- Cézard P, Favier V., Balan T., Bigot R., Berveiller M. (2004), Simulation of semi-solid thixoforging using a micro-macro constitutive equation, *Computational Materials Science*, 32, 223-228
- Favier V. Rouff C., Bigot R., Berveiller M., Robelet M. (2004a), Micro-macro modeling of the isothermal steady-state behaviour of semi-solids, *International Journal of Forming Processes*, 7, 177-194

IV.3.3.2.1 Contexte

Les alliages métalliques semi-solides présentent un comportement thixotrope, dépendant du temps et caractérisé par une forte chute de la viscosité avec la vitesse de déformation (comportement rhéofluidifiant). Cette propriété est exploitée en mise en forme donnant lieu à deux grandes classes de procédés : le thixoforgage lorsque l'état semi-solide est obtenu par refusion et le rhéoforgage lorsqu'il est obtenu par solidification partielle (Gabathuler, 2002). La maîtrise de ces procédés requiert une bonne connaissance du comportement mécanique des semi-solides. Dans le cadre des travaux de thèse de Carole Rouff et Pierre Cézard, en partenariat avec le Laboratoire de Génie Industriel et Production Mécanique et le Centre de Recherche et d'Etude des Aciers Spéciaux (CREAS) d'ASCOMETAL, nous avons cherché à caractériser et modéliser ce comportement en nous intéressant en particulier aux alliages à haut point de fusion tel que l'acier. Les travaux se sont concentrés sur deux points : la mise en œuvre d'essais de caractérisation du comportement des semi-solides et la modélisation de ce comportement, compatible avec une utilisation dans le code éléments finis de mise en forme FORGE2.

Le comportement des semi-solides est complexe car il dépend du temps et de la vitesse de déformation mais également fortement de la microstructure (et notamment de la morphologie de la phase solide) qui évolue elle-même avec la déformation, la température et la vitesse de déformation (voir par exemple Suéry, 2002b pour un bilan des connaissances actuelles dans ce domaine). De nombreux modèles existent dans la littérature pour décrire ce comportement et on renvoie le lecteur des publications de synthèse telles que (Fan, 2002 ; Martin et Orgéas, 2002 ; Favier D. et al, 2002 ; Atkinson, 2005). Dans ce travail, nous avons choisi de développer un modèle autocohérent généralisé associé à un motif morphologique évolutif. L'intérêt d'utiliser un modèle micromécanique par changement d'échelle est de :

- prendre en compte la morphologie complexe du matériau
- séparer le rôle mécanique des différents types de phase liquide et solide
- introduire des variables internes physiques que l'on sait relier à la microstructure.

IV.3.3.2.2 Représentation

La Figure IV.3.5 illustre une microstructure typique d'un alliage Sn-15%Pb poids semi-solide. Le matériau présente une morphologie particulière constituée d'une phase solide plus ou moins globulaire entourée de liquide. L'observation plus fine de la micrographie montre (i) la présence de liquide emprisonné à l'intérieur des particules solides et (ii) la présence de « pontages » entre les particules solides. Ainsi, le matériau présente une distribution bimodale liquide-solide. Lors de la déformation du système et selon la vitesse de déformation, les pontages solides se rompent sous l'effet de cisaillements intenses libérant une partie du liquide piégé (Joly et Mehrabian, 1976 ; Ito et al, 1992 ; Kumar et al, 1993 ; Doherty et al, 1984 ; Seconde et Suéry, 1984). On observe alors une évolution de la distribution bimodale. Les phases actives mécaniquement sont identifiées comme les lieux où la déformation se localise à savoir les pontages solides et le liquide libre. Au contraire, les grains solides et le liquide piégé contribuent très peu à la déformation.

Pour décrire les caractéristiques microstructurales et les mécanismes de déformation pertinents, le matériau est représenté à l'aide du motif morphologique de l'inclusion enrobée, l'inclusion et l'enrobage étant tous deux composés de solide et de liquide. Plus précisément, l'inclusion contient les particules solides et le liquide piégé et l'enrobage, appelée encore zone active, est associé aux pontages solides et au liquide libre (Fig. IV.3.6).

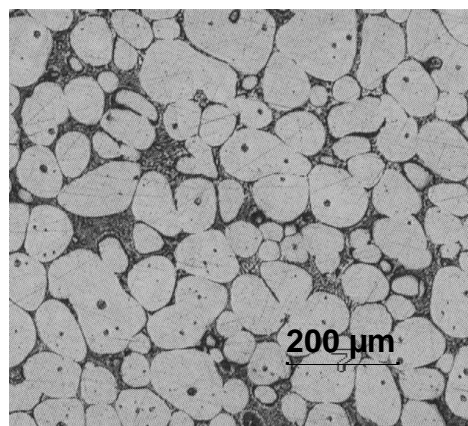


Figure IV.3.5 : Micrographie d'une microstructure d'un alliage Sn-15%Pb poids après une trempe à partir de l'état semi-solide avec une fraction de solide de 0.6

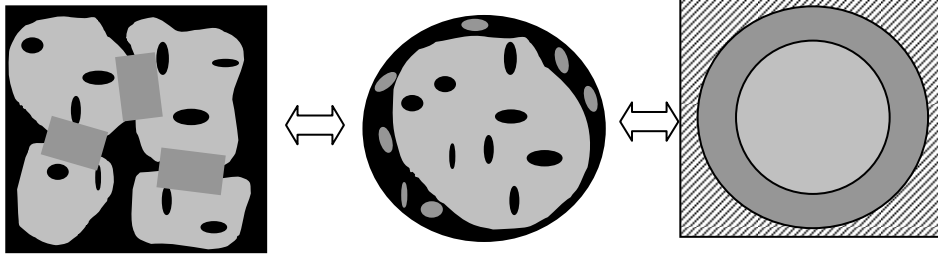


Figure IV.3.6 : Représentation schématique de la microstructure à l'état semi-solide et motif morphologique

Pour décrire l'évolution de la distribution bimodale liquide-solide associée à la désagglomération du réseau solide, suivant les travaux de plusieurs auteurs (par exemple Kumar et al, 1993, 1994ab), la variable interne, fraction de solide dans la zone active f_A^S , est introduite. Elle correspond physiquement aux pontages solides. Plus précisément, sa loi d'évolution dépend de la fraction de solide f^S et de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}$ selon les équations suivantes :

$$f_A^S = \frac{f^S}{f^S + D(1 - f^S)(\dot{\gamma})^n} \quad \text{pour } f^S > f^c$$

$$f_A^S = 0 \quad \text{pour } f^S \leq f^c$$

où f^c est le seuil critique de percolation de la phase solide, D et n sont deux paramètres matériaux. Une discussion plus approfondie sur la signification et la loi d'évolution de cette variable interne est proposée en Annexe G.

IV.3.3.2.3 Approximation autocohérente dans le cas de l'inclusion enrobée

La détermination des propriétés effectives du semi-solide nécessite en premier l'évaluation des comportements globaux de l'inclusion et de la couche, à partir des comportements du liquide et du solide. Dans les deux cas, les interactions mécaniques entre les constituants sont déterminées à l'aide d'une approximation autocohérente classique. Ainsi, les constituants liquide et solide sont traités de manière équivalente et étant distribués de manière isotrope, sont représentés par une inclusion (au sens d'Eshelby) sphérique. Par ailleurs, leur comportement, supposé visqueux isotrope incompressible, est défini par un seul scalaire, la viscosité μ :

$$s_{ij}^l = \mu^l \dot{\epsilon}_{ij} \quad \text{avec } \mu^l = K^l \quad \text{pour le liquide newtonien} \quad (\text{Equation IV.3.2})$$

$$s_{ij}^s = \mu^s (\dot{\epsilon}_{eq}) \dot{\epsilon}_{ij} \quad \text{avec } \mu^s = K^s (\dot{\epsilon}_{eq})^{m-1} \quad \text{pour le solide viscoplastique} \quad (\text{Equation IV.3.3})$$

où S_{ij} est le déviateur des contraintes, $\dot{\epsilon}_{ij}$ est le déviateur des vitesses de déformations, K est la consistance et m est le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation.

Les viscosités μ_I de l'inclusion et μ_A de la zone active sont déterminées par :

$$\mu_B = f_B^S \mu_B^S T_B^S + (1 - f_B^S) \mu_B^L T_B^L$$

où l'indice B est égal à I lorsqu'il fait référence à l'inclusion et à A pour la zone active. Les tenseurs de localisation T_B^S et T_B^L sont donnés par (Berveiller et Zaoui, 1981) :

$$\begin{aligned} T_B^L &= \frac{5\mu_B}{3\mu_B + 2\mu_B^L} \\ T_B^S &= \frac{5\mu_B}{3\mu_B + 2\mu_B^S} \end{aligned} \quad (\text{Equation IV.3.5})$$

La viscosité effective μ_{SS} du semi-solide est ensuite estimée à partir des précédents résultats en supposant que le motif morphologique de l'inclusion enrobée (inclusion + couche) est plongée dans le MHE :

$$\mu_{SS} = f_A \mu_A T_A + f_I \mu_I T_I = \mu_A + f_I (\mu_I - \mu_A) T_I$$

où l'expression du tenseur de localisation dans le cas d'une inclusion enrobée sphérique isotrope incompressible avec une approximation de couche mince est donnée par (Cherkaoui et al, 1994) :

$$T_I = \frac{5\mu_{SS}}{3\mu_{SS} + 2\mu_I + \left(\frac{1-f_I}{f_I}\right) \frac{6}{5} (\mu_I - \mu_A) \left(\frac{\mu_{SS}}{\mu_A} - 1\right)} \quad (\text{Equation IV.3.7})$$

avec $f_I = \frac{R^3}{(R + \Delta R)^3}$ (Equation IV.3.8)

où R est le rayon de l'inclusion sphérique et ΔR l'épaisseur de la couche. On retrouve l'expression associée au cas de l'inclusion sphérique homogène en faisant tendre f_I vers un.

Signalons que le problème micromécanique de l'inclusion enrobée sphérique ou cylindrique et des matériaux isotropes a été étudié par différents auteurs tels que Christensen et Lo (1979) qui ont développé le modèle à 3 phases, Luo et Weng (1989), Hervé et Zaoui (1990, 1993) qui l'ont généralisé à n phases. L'approche de Cherkaoui et al (1994), utilisant les techniques des fonctions de Green et des opérateurs interfaciaux (Hill, 1983), est préférée parce qu'elle permet une extension au cas des ellipsoïdes enrobées et des matériaux anisotropes. Bien que son utilisation soit pour l'instant limitée au cas isotrope, elle pourra par la suite permettre de prendre en compte l'évolution de la forme des inclusions au cours de la mise en forme des matériaux semi-solides.

IV.3.3.2.4 Principaux résultats

IV.3.3.2.4.1 Cas des alliages à bas point de fusion

Les résultats issus du modèle autocohérent sont comparés avec des données expérimentales obtenues dans des conditions isothermes sur des alliages Sn-15%Pb poids de fraction de solide 0.5. On retrouve deux types d'essais :

- des essais de compression entre plateaux parallèles (Laxmanan et Flemings, 1980) qui couvrent une gamme de vitesses de déformation comprises entre 10^{-5} à 10 s^{-1}
- des essais effectués sur des viscosimètres de type Couette (Joly et Mehrabian, 1976) pour des vitesses de déformation variant de 2 à 1000 s^{-1} .

Les paramètres du modèle ont été identifiés à partir de mesures expérimentales correspondant à une fraction de solide de 0.5 dans le domaine des fortes vitesses (A) et des faibles vitesses (B) de cisaillement (Fig. IV.3.7). L'évolution de la viscosité pour une fraction de solide de 0.45 a ensuite été simulée sans modifier aucun paramètre. Le très bon accord trouvé avec les résultats expérimentaux permet de valider (au moins dans une gamme de fraction de solide voisine de 0.5) le modèle.

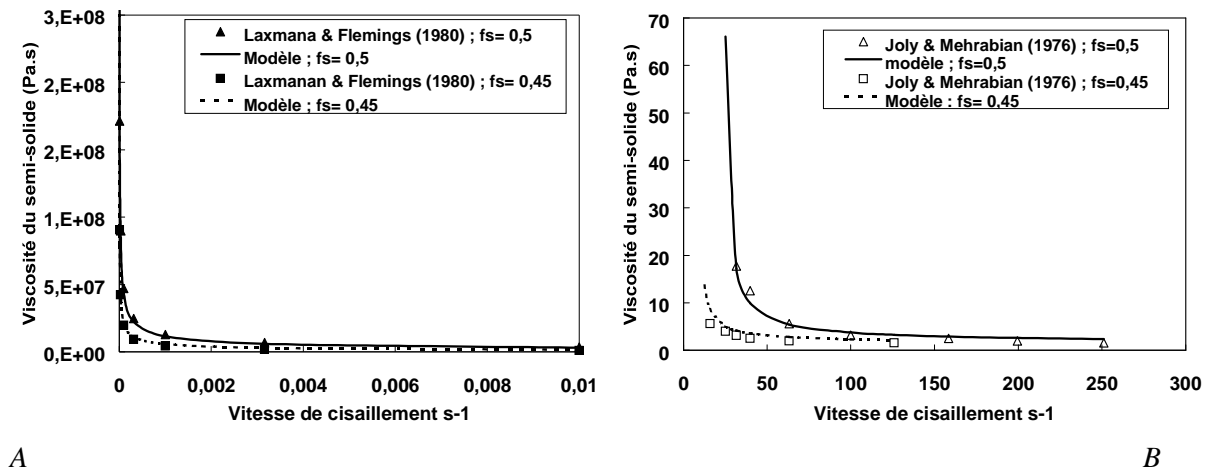


Figure IV.3.7 : Evolution de la viscosité du semi-solide en fonction de la vitesse de cisaillement. Comparaison entre résultats simulés et expérimentaux pour un alliage Sn-15%Pb contenant des fractions de solide de 0,45 et 0,5. A : domaine des fortes vitesses. B : domaine des faibles vitesses

Les résultats de la Figure IV.3.7 montrent clairement la présence de deux régimes : le régime des faibles vitesses de cisaillement où la viscosité du semi-solide est élevée (10^7 - 10^8 Pa) - le comportement est alors de type solide - et le régime des fortes vitesses de déformation où la viscosité devient très faible (10 Pa) - le comportement est alors de type liquide. Cette chute de viscosité d'environ 7 ordres de grandeur est attribuée à la désagglomération des particules solides.

La Figure IV.3.8 rassemble l'ensemble des résultats des Figures IV.3.7A et IV.3.7B sur des échelles logarithmiques. L'évolution de la viscosité de la zone active calculée par le modèle montre

que celle-ci contrôle le comportement global du semi-solide. Pour des vitesses de déformation variant de 10^{-5} à 1 s^{-1} , la fraction de solide dans la zone active est élevée (supérieure à 0.4) traduisant la présence d'un squelette solide assez fortement connecté qui participe activement à la transmission de l'effort. Lorsque la vitesse de cisaillement augmente, la fraction de solide dans la zone active diminue pour refléter la rupture progressive des pontages solides jusqu'à atteindre le seuil de percolation (égal à 0.4) indiquant la destruction complète du réseau percolant de solide. Le comportement est alors contrôlé par le liquide. Cette valeur de 0.4 correspond au seuil de percolation mécanique du modèle autocohérent classique dans le cas d'un milieu composé de deux phases isotropes incompressibles présentant un fort contraste mécanique (Berveiller et Zaoui, 1981). Elle ne représente malheureusement pas le véritable seuil de percolation géométrique qui, dans le cas de sphères jetées aléatoirement, est d'environ 0.3 (Balberg et al, 1984).

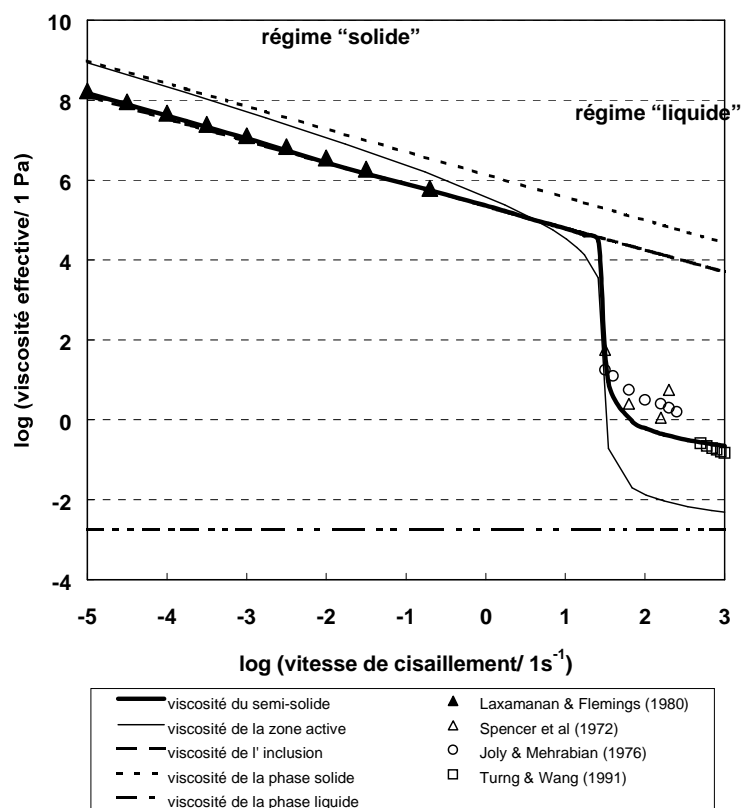


Figure IV.3.8 : Evolution de la viscosité du semi-solide en fonction de la vitesse de cisaillement
 Comparaison entre résultats simulés et expérimentaux pour un alliage Sn-15%Pb contenant une fraction de solide de 0,5

Dans le cas d'alliages de Magnésium AZ91, on obtient le même type de résultats. On peut cependant remarquer que les valeurs expérimentales des viscosités peuvent différer d'un facteur 100 aux grandes vitesses de déformation à cause de modes d'élaboration des matériaux et de conditions expérimentales différents (Gebelin et al, 1999 ; Fan, 2002). Il souligne la difficulté de mener des essais expérimentaux pour caractériser la viscosité dans un large domaine de vitesse de déformation de ces matériaux semi-solides qui présentent une microstructure si fortement dépendante des conditions d'élaboration (solidification ou fusion) et évoluant avec le temps, la déformation et la vitesse de déformation.

IV.3.3.2.4.2 Cas des alliages à haut point de fusion

Les aciers atteignent leur état semi-solide pour des températures beaucoup plus élevées que celles des alliages légers entraînant de fortes complications au niveau des systèmes de chauffage, de caractérisation et de mise en forme des lopins. Par ailleurs, la microstructure globulaire recherchée pour la phase solide semble beaucoup plus difficile à obtenir que dans les alliages à bas point de fusion (Fig. IV.3.9) (Omar et al, 2005). Il faut cependant être très prudent quand à l'interprétation d'une micrographie obtenue après solidification complète lorsque le liquide n'est pas de composition eutectique (Suéry, 2002a). Pour déterminer le comportement rhéologique des semi-solides, les essais traditionnellement exploités sont les essais de compression entre plateaux parallèles qui couvrent le domaine des faibles vitesses de déformation et les essais de cisaillement effectués sur des viscosimètres de type Couette qui balayent le domaine des fortes vitesses de déformation. Ces essais sont difficilement transposables à des températures supérieures à 1400°C. Valette-Brives (1992) a mis au point un dispositif d'essais de filage permettant de travailler à des températures pouvant atteindre 1450°C et de balayer une gamme de vitesse de déformation comprise entre 0,01 et 15 s⁻¹. Nous nous sommes placés dans la continuité de ce travail, avec comme souci de pouvoir atteindre des vitesses de déformation encore plus élevées, en développant des essais de compression entre plateaux parallèles, des essais de filages axiale et radiale.

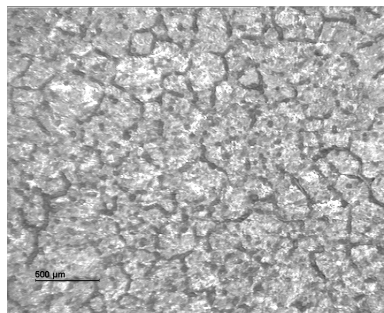


Figure IV.3.9 : Micrographie d'une microstructure d'un acier C80 contenant une fraction de solide de 0.6

L'exploitation de ces essais destinés à caractériser la rhéologie de l'acier semi-solide nécessite de simuler numériquement les écoulements et de raisonner en méthode inverse. Ainsi le modèle autocohérent développé précédemment a été implanté dans le code d'éléments finis FORGE2. La validation de l'implantation a été effectuée en partie en simulant un essai de compression isotherme et sans frottement et permettant d'atteindre la vitesse de déformation à laquelle apparaît la chute de la viscosité (Fig. IV.3.8). Le résultat obtenu par FORGE2 a été comparé avec succès à un calcul fait en dehors de FORGE2 (Fig IV.3.10). On constate que la réponse obtenue présente un pic d'effort suivi d'un adoucissement du matériau délicat à traiter numériquement. Cette réponse, qualifiée d'« anormale » par McLelland et al (1997), est liée à l'apparition d'une sensibilité à la vitesse de déformation négative du comportement dans une certaine gamme de vitesses de déformation.

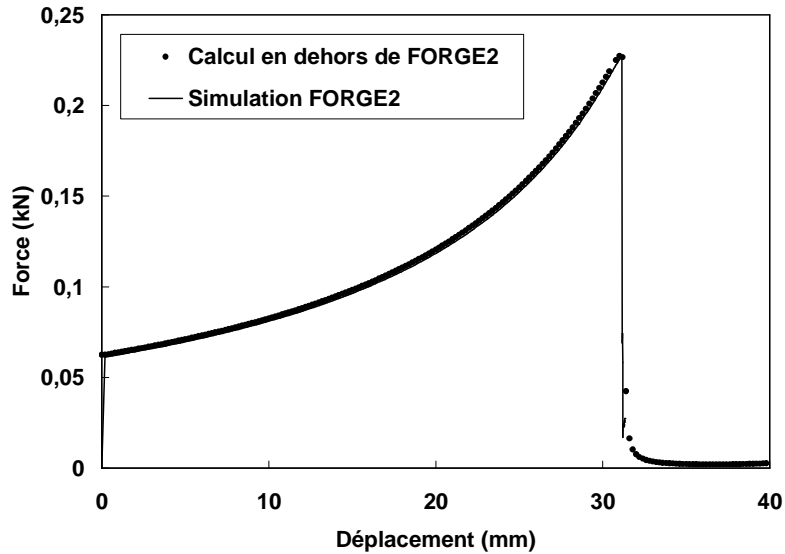


Figure IV.3.10 : Evolution de la force en fonction du déplacement lors d'un essai de compression à vitesse de déplacement constante, sans frottement et isotherme, dans le cas d'un comportement "anormal" – Comparaison des réponses obtenue en dehors et dans FORGE2 afin de valider l'implantation

L'apparition d'une sensibilité à la vitesse de déformation négative est liée physiquement à la perte de rigidité du réseau solide. Elle engendre un pic de contrainte en compression, résultat largement observé expérimentalement sur différents types d'alliage (Loué et al, 1992 ; Kirkwood, 1994 ; McLelland et al, 1997 ; Liu et al, 2003, Omar et al, 2005). Or, dans le cas de l'acier étudié, nous n'avons jusqu'à présent jamais observé clairement de pic (Fig. IV.3.11). Des essais d'indentation effectués sur des alliages Sn-15%Pb ont montré que l'apparition du pic était aussi conditionné par la différence de température entre l'outil (l'indenteur) et le matériau semi-solide (*Bigot et al, 2005*). La présence du pic est alors attribuée à la rupture d'une peau solide qui se crée à l'interface entre l'outil "froid" et le matériau "chaud". Pour étudier l'influence de la température des outils sur la réponse du matériau, des essais de filage direct ont été menés à deux températures d'outils, 20°C et 450°C. La figure IV.3.12 montre clairement une différence de réponse qui reste cependant difficile à interpréter. Dans le cas de l'outil "chaud" (mais encore bien "froid" pour le matériau à 1450°C), la fraction de solide à l'interface est probablement plus faible que dans le cas d'un outil froid, expliquant le plus faible niveau d'effort. Mais les frottements sont sans doute également différents dans les deux cas. Ces résultats, confirmés par d'autres études, montrent que dans le cas des alliages à haut point de fusion, on ne peut négliger les échanges thermiques entre l'environnement gazeux, les outils et le semi-solide. Ils modifient localement les fractions de solide et donc la microstructure du matériau. Les effets de la fraction de solide et de sa distribution dans le matériau en cours de mise en forme deviendraient alors prépondérants devant les effets de microstructure.

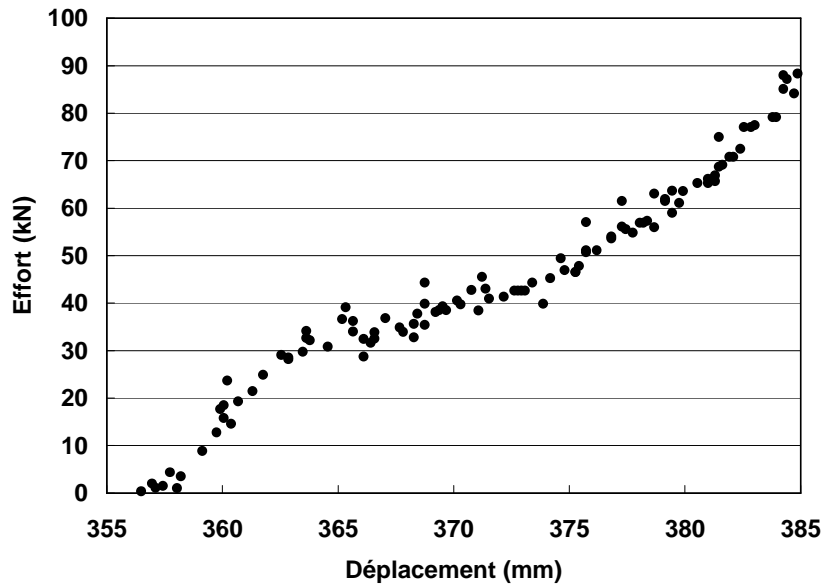


Figure IV.3.11 : Evolution de la force en fonction du déplacement lors d'un essai de compression entre plateaux parallèles d'un acier semi-solide (à une température proche de 1450°C avant mise en forme) dans un outillage "froid"

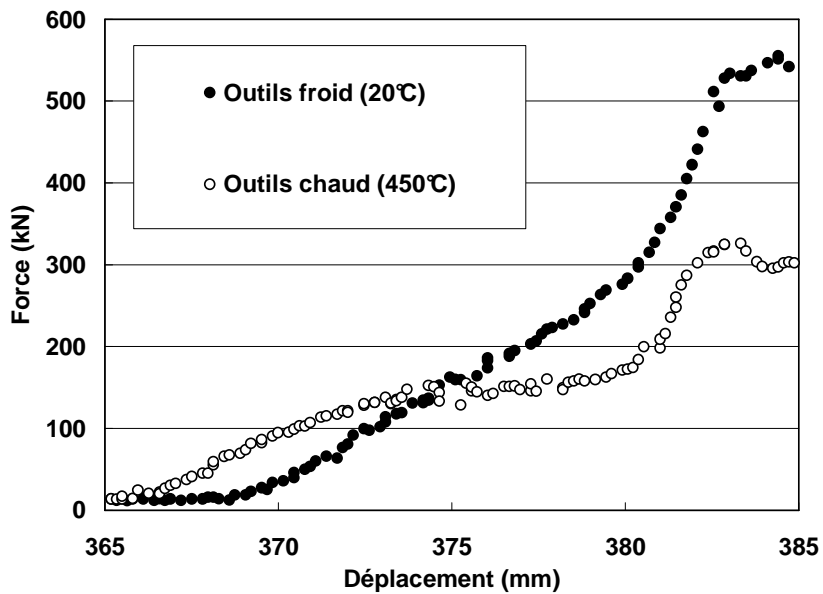


Figure IV.3.12 : Evolution de la force en fonction du déplacement lors d'un essai de filage direct d'un acier semi-solide (à une température proche de 1450°C avant mise en forme) dans un outillage maintenu à deux températures : 20°C et 450°C

IV.3.3.2.5 Perspectives

L'application industrielle du thixoforgeage aux aciers est technologiquement et scientifiquement ambitieuse. Elle nécessite la conception et la fabrication d'outillages capables de résister à des sollicitations thermomécaniques élevées et à une usure importante et de maîtriser les écoulements et les échanges thermiques. L'intérêt des simulations numériques pour optimiser ce

procédé est manifeste pourvu que les comportements thermique et mécanique du système soient bien représentés. La loi de comportement est en particulier déterminante et modifie les écoulements selon sa nature. Ainsi, selon la gamme de vitesse de déformation (et de déformation), le semi-solide peut présenter un comportement (i) "normal" où la contrainte augmente avec la vitesse de déformation ou (ii) "adoucissant" où la contrainte diminue avec la vitesse de déformation.

L'application réussie du modèle autocohérent au thixoforgeage passe par un couplage modélisation, simulation et expérimentation. Les points suivants doivent être en particulier étudiés :

- Une amélioration du modèle consistant à prendre en compte l'évolution de la microstructure en fonction non seulement de la vitesse de déformation mais aussi de la déformation et de la température est nécessaire. Des premiers résultats encourageants sont donnés dans l'Annexe G et permettent d'étudier séparément les différents effets.
- Le comportement dépendant au premier ordre de la fraction de solide, la connaissance de cette grandeur à l'issue de l'étape de l'élaboration du semi-solide est indispensable. Elle passe par le développement d'outils permettant de caractériser la cinétique de refusion lors de l'élaboration du lopin de départ et de solidification en cours de mise en forme.
- Une meilleure maîtrise des paramètres expérimentaux d'élaboration du matériau et de mise en forme tels que la température et le frottement, pour obtenir des essais fiables et exploitables, est souhaitable.
- Pour mener à bien les simulations numériques par éléments finis, il est nécessaire de connaître les lois de comportements thermiques, en plus de la loi de comportement du matériau.
- Une étude sur la robustesse numérique du modèle éléments finis est également à poursuivre.

La thèse de Carole Rouff a permis de poser les premiers jalons de ce couplage en se focalisant sur l'effet de la microstructure sur la réponse du matériau. La thèse de Pierre Cézard est un approfondissement de ce premier travail. Ce dernier a notamment permis d'identifier la forte influence des échanges thermiques sur la réponse des aciers semi-solides. L'objectif final est de disposer d'un outil de modélisation permettant de mieux comprendre les mécanismes en jeu lors de la mise en forme des aciers semi-solides et de prédire le comportement de ces matériaux lorsqu'ils subissent des écarts de microstructure (fraction de solide, degré d'agglomération du squelette, ...) ou de process (vitesse de déplacement du piston de mise en forme, température, géométrie de la pièce, ...).

IV.4 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était de montrer les spécificités et les difficultés de la démarche d'homogénéisation dans deux domaines ouverts : l'élastoviscoplasticité et les matériaux à fort contraste mécanique.

Dans le cas des matériaux faiblement contrastés et en particulier des polycristaux, les estimations issues de l'approche autocohérente ont largement montré leur succès pour décrire l'évolution des textures pour les chargements monotones, de l'anisotropie plastique induite par la texture, des surfaces de plasticité, des contraintes internes intergranulaires. Aujourd'hui une vision unifiée des différents modèles est proposé (Ponte Castañeda, 1991 ; Zaoui, 2001). Dans le cas de

l'élastoviscoplasticité, de nombreux efforts ont été faits ces dernières années pour décrire, plus ou moins partiellement, l'effet mémoire longue. L'approche à champs translatés que nous proposons donne lieu à une nouvelle classe de modèles permettant de coupler des champs d'origine différente : élasticité et viscoplasticité, élasticité et magnétostriction, élasticité et piézoélectricité...

Dans le cas des matériaux à plus fort contraste mécanique, la démarche d'homogénéisation se fait encore largement au cas par cas. Dans ce travail, deux exemples présentant des cas extrêmes de contraste (10^6 à 10^9) ont été exposés. Cependant, beaucoup d'autres matériaux et en particulier certains polycristaux multiphasés présentent des microstructures spécifiques rendant non pertinente l'utilisation de l'approximation autocohérente classique. Dans tous ces cas, on sait qu'il est indispensable de représenter la topologie des phases. Cette topologie couplée au fort contraste mécanique conduit à des localisations de la déformation qu'il est délicat de décrire par des approches en champ moyen. Lorsque ces zones de localisations restent petites et que la notion de VER garde un sens, on peut construire un motif morphologique hétérogène (Stolz et Zaoui, 1991 ; Bornert, 1996) qui dépendra du matériau étudié. La difficulté vient ensuite du fait que la microstructure et donc les phases « mécaniques » pertinentes évoluent avec la déformation. Dans l'exemple des semi-solides, les zones actives de localisations de la déformation « voient » leur composition liquide-solide mais aussi leur fraction volumique évoluer avec la déformation, la vitesse de déformation, ce qui n'est pas encore complètement décrit dans notre modélisation (Annexe G). L'introduction de variable interne phénoménologique peut permettre de décrire ces évolutions. Néanmoins, on se heurte alors au problème de l'identification de paramètres non physiques intervenant dans les lois d'évolution et on perd une partie de la capacité prédictive de l'approche micromécanique par changement d'échelles. Notons, enfin, que plus que la fraction volumique c'est sans doute la taille des zones de localisation de déformation qui contrôle la réponse macroscopique. Or les modèles d'homogénéisation fondée sur la mécanique des milieux continus sont incapables de décrire des effets de taille.

Pour essayer de modéliser ces effets de taille, plus particulièrement dans le cadre de la plasticité, nous proposons de développer dans les futures années une approche alternative aux méthodes purement « continues » basées sur la définition d'un gradient de déformation (Aifantis, 1987 ; Fleck et Hutchinson, 1997) ou sur l'hypothèse d'un milieu de Cosserat (Forest et al, 2000) et purement discrètes basées sur des techniques telles que la dynamique des dislocations (Devincre et al, 1997, Schwarz, 1999, von Blanckenhagen et al, 2004). Cette approche est exposée dans le dernier chapitre de ce mémoire.

Chapitre V

Conclusions et Perspectives

V.1 Recherche d'un comportement homogénéisé

V.2 Amélioration de la description du comportement d'un grain monocristallin – Prise en compte d'hétérogénéités d'origine physique

V.2.1 Introduction

V.2.2 Calculs de microstructure

V.2.2.1 Introduction

V.2.2.2 Cas de feuilles minces polycristallines avec quelques grains dans l'épaisseur

V.2.2.3 Cas de feuilles minces multicristallines avec quelques grains dans le volume

V.2.3 Etude des hétérogénéités inélastiques d'origine physique

V.3 Couplage expérience/modèle aux différentes échelles

V.4 Approche pluridisciplinaire

V.1 Recherche d'un comportement homogénéisé

La modélisation du comportement des matériaux hétérogènes est complexe parce que le comportement macroscopique résulte d'un ensemble de mécanismes physiques et de caractéristiques microstructurales intervenant à différentes échelles. Ceux-ci induisent des transformations de microstructure pouvant elles mêmes entraîner des évolutions de mécanismes. L'élaboration d'un modèle universel, fondé sur des mécanismes à l'échelle la plus fine (quelle est-elle ?) pour simuler tous les phénomènes se produisant aux échelles supérieures, est sans doute illusoire et présente peu d'intérêt en pratique car demandant une mise en œuvre trop lourde. En revanche, dégager les mécanismes qui contrôlent, dans des conditions de chargement données, le comportement étudié est l'enjeu (le plus motivant à mon sens) des modélisations visant à décrire un comportement homogénéisé en vue d'applications industrielles.

Dans ce travail, les différentes études montrent comment la modélisation s'adapte au matériau et au comportement étudiés. Les modèles micromécaniques par changement d'échelles ont été clairement choisis parce qu'ils reposent justement sur la description de la microstructure (de manière statistique) du matériau et du comportement local de ces phases constitutives. Des variables internes sont introduites pour traduire l'évolution de l'état interne du matériau avec la déformation. En particulier, deux classes de matériau ont été étudiées :

- les polycristaux qui présentent généralement une faible hétérogénéité mécanique - le matériau est considéré comme un « composite » à n phases dont chaque phase représente l'ensemble des grains de même orientation,
- les matériaux hétérogènes à fort contraste mécanique - des composites polymères renforcés par des whiskers de cellulose et des alliages métalliques semi-solides. Dans ces cas, la morphologie du matériau peut donner lieu à des effets de percolation mécanique qu'il faut traduire au mieux dans la modélisation. Le matériau est considéré comme un composite à

quelques phases (en général 2 ou 3). La définition des phases est plus complexe que dans le cas précédent : elle se définissent par leur caractère chimique, physique et/ou leur rôle mécanique.

Dans cette deuxième classe de matériaux, l'effort de modélisation porte essentiellement sur la description de la microstructure et plus particulièrement de l'arrangement des phases (topologie) et de son évolution. Le fort contraste de propriétés justifie l'utilisation d'une description grossière du comportement mécanique des phases.

Au contraire, dans le cas des polycristaux, l'effort de modélisation doit porter simultanément sur les descriptions du comportement du grain et des interactions entre grains. La raison principale de ce "double" effort vient du fait que si le contraste intergranulaire est prédominant aux faibles déformations et en chargement monotone, il « s'efface » progressivement devant le contraste intragranulaire dans le cas des polycristaux fortement déformés ou subissant des changements de trajets (voir par exemple Feaugas, 1999). La non linéarité du comportement renforce l'hétérogénéité et la propage à des échelles inférieures (formation de cellules de dislocations, par exemple).

L'objectif essentiel des modélisations que j'ai développées jusqu'à présent est de fournir une estimation des propriétés effectives de matériaux hétérogènes. De nombreuses perspectives pour enrichir ces modélisations ont été données tout au long du mémoire. Par ailleurs, la démarche exposée peut être étendue à d'autres mécanismes physiques. Nous avons déjà évoqué l'application de la méthode des champs translés au cas d'un comportement de type Bürger pour décrire la présence simultanée des mécanismes de déformations réversibles, instantanée (élasticité) et retardée (anélasticité), et irréversibles dépendant du temps (viscoplasticité), présents dans les aciers sollicités en fatigue. Les matériaux polymères présentent aussi ces spécificités. Notons, par ailleurs, que les mécanismes de déformation de ces matériaux, qui sont liés à la mobilité moléculaire des chaînes polymères, pourraient être parfaitement intégrées dans un formalisme de lois thermiquement activées. Ainsi, contribuer au développement des modélisations micro-macro pour décrire le comportement non linéaire des polymères m'intéresserait beaucoup, d'autant plus que les travaux sur ce sujet reste encore limité (Dahoun et al, 1995 : Makradi et al, 2004, *G'Sell et al, 2002*). Enfin, pourquoi ne pas étendre ce modèle à d'autres couplages physiques et mécaniques tels que la magnétostriction ou la piézoélectricité ?

Pour améliorer les estimations des réponses globale mais aussi locale et pour répondre aux enjeux actuels concernant les effets de taille et les sollicitations complexes, développer une meilleure description du comportement local est, à mon avis, la voie la plus prometteuse, des efforts importants ayant déjà été effectués ces vingt dernières années dans les méthodes de transition d'échelle (Zaoui, 2001). C'est donc l'orientation que je souhaite donner à mes recherches futures dont les principales idées sont exposées dans les paragraphes suivants.

V.2 Amélioration de la description du comportement d'un grain monocristallin – Prise en compte d'hétérogénéités d'origine physique

V.2.1 Introduction

Initialement, les modèles d'homogénéisation ont été élaborés pour représenter les hétérogénéités mécaniques interphases ou intergranulaires. A l'échelle du grain, la microstructure n'est prise en compte que de façon très « moyennée ». La manière alors la plus simple d'intégrer l'effet des hétérogénéités intragranulaires est d'introduire une contrainte interne qui traduit les modifications du champ de contrainte dues aux évolutions de la microstructure. Pour intégrer directement les évolutions microstructurales dans les équations de champs, on peut utiliser l'approche micromécanique à frontière mobile qui, couplée à une analyse thermodynamique, prend en compte le mouvement propre des interfaces de « particules » élémentaires caractéristiques de la microstructure tels qu'une phase, une macule ou des cellules de dislocations (Sabar et al, 1990 ; Langlois et Berveiller, 2003). Mais cette approche associée à des modèles à transition d'échelles reste lourde. Plus simplement, on peut faire évoluer la composition de la « phase » et utiliser des doubles transitions d'échelle à partir des constituants chimiques comme dans la modélisation proposée pour décrire la viscosité des semi-solides. Cette approche micromécanique décrit naturellement l'hétérogénéité des champs et du comportement de la phase. Mais elle utilise une description grossière du comportement des constituants chimiques en utilisant des lois phénoménologiques à deux ou trois paramètres. Les modèles à gradient de variable interne (Aifantis, 1987 ; Fleck et Hutchinson, 1997) ou de manière alternative les modèles intégrant les milieux de Cosserat (Forest et al, 2000) introduisent le gradient de la déformation plastique ou d'autres variables. Ils représentent ainsi une certaine hétérogénéité intraphase des champs mécaniques et captent des effets de taille. Cependant, il s'éloigne de la représentation microstructurale des hétérogénéités.

Dans les modèles d'homogénéisation classiques, la description des mécanismes consiste à substituer aux événements spatio-temporels discrets des variables internes phénoménologiques de processus dont on modélise les évolutions par l'intermédiaire des outils de la micromécanique et de la thermodynamique des processus irréversibles. Par exemple, dans le cas de la plasticité, il s'agit de l'approche cristallographique dans laquelle la variable interne est le glissement plastique ou mieux la densité de dislocation. Pour prendre en compte l'auto-organisation spatiale de la microstructure, sans aller vers les méthodes purement discrètes basées sur des techniques telles que la dynamique des dislocations, nous proposons de développer une approche fondée sur la description spatiale mais périodique de « particules » de déformation caractérisées par leur nombre, leur orientation, leur amplitude et leur distribution spatiale. Ce projet de recherche sera exposé plus en détail dans le paragraphe V.2.3.

Auparavant, je souhaiterais aborder le développement d'autres modèles fondés sur une homogénéisation cette fois numérique des propriétés des matériaux hétérogènes en utilisant la méthode des éléments finis car ceux-ci constituent de précieux outils pour analyser les différentes sources d'hétérogénéités associées à la fois au matériau (microstructure, contraste mécanique des phases, ...) et à la structure (forme, conditions aux limites, ...)

V.2.2 Calculs de microstructure

V.2.2.1 Introduction

Pour étudier et mieux prendre en compte les hétérogénéités des champs, les calculs de microstructure (Forest et al, 2002 ; Cailletaud et al, 2003) par éléments finis connaissent actuellement une pleine expansion. Ils sont principalement utilisés pour :

- estimer ou valider une loi d'interaction dans les problèmes inclusion-matrice (voir par exemple Cailletaud et Pilvin, 1994 ; Gilormini, 1997 ; Sausay et Gilormini, 2000 ; Mercier et al, 2005)
- prédire le comportement effectif de matériaux hétérogènes lors de chargements complexes (Feyel et al, 1997) ou en vue d'optimiser la texture pour des applications de mise en forme (Zhao et al, 2004)
- analyser les différentes sources d'hétérogénéités (paramètres du procédé ou de la pièce : frottement, géométrie de la pièce, surfaces libres..., paramètres du matériau : désorientation des grains, contraste de propriétés, topologie de la microstructure (Raabe et al, 2001)
- simuler la mise en forme ou la tenue en service de pièces de petite taille (micro-contacteurs, stents) où les principes de séparation des échelles et de macro-homogénéité ne sont plus respectés.

Bien que ne développant pas personnellement ces outils, je participe à des projets utilisant le calcul de microstructure pour analyser différentes sources d'hétérogénéité. Ces travaux concernent le comportement de feuilles minces sollicitées sous chargements complexes. Ils alimentent des recherches plus en amont sur l'amélioration de la description du comportement intragranulaire (§ V.2.3)

V.2.2.2 Cas de feuilles minces polycristallines avec quelques grains dans l'épaisseur

Travaux scientifiques majeurs :

- Thèse de N. Bonnet depuis octobre 2003 avec SOLSI partenaire d'un contrat européen MACHNINI, encadrée par P. Lipinski, T. Ben Zineb et V. Favier
- DEA de D. Barbier 2004-2005 encadré par A. Tidu (LETAM) et V. Favier
- Projet "Approche expérimentale in situ lors de sollicitations complexes" de la Fédération "Génie industriel, Mécanique, Matériaux" des laboratoires messins
- Bonnet N., Favier V., Ben Zineb T., Lipinski P., "Comportement mécanique des films minces en emboutissage", Colloque MECAMAT-AUSSOIS, "Mécanismes et mécanique du comportement, de la dégradation et de la rupture des matériaux sous sollicitations dynamiques", Aussois, France, Janvier 2005, CD-ROM bonnet.doc

Les feuilles minces polycristallines étudiées ont une épaisseur d'environ 100 μm formée seulement de quelques grains. D'un côté, le faible nombre de grains dans l'épaisseur rend caduque l'hypothèse de macro-homogénéité nécessaire pour utiliser les modèles micromécaniques par changement d'échelle. D'un autre côté, le nombre tout de même important de grains (environ 10000) dans le volume sollicité (10 mm^3) ne permet pas une description géométrique exacte de la microstructure dans des calculs éléments finis. Celle-ci est alors approchée en cherchant à représenter

au mieux certaines caractéristiques jugées pertinentes du matériau telle que les distributions d'orientation, de taille, de forme des grains, leur nombre moyen dans l'épaisseur ... L'objectif de ce projet est d'analyser l'influence de la texture et du nombre de grains dans l'épaisseur sur la réponse macroscopique et les hétérogénéités du matériau soumis à des sollicitations complexes.

Pour les simulations éléments finis, la loi de comportement de chaque grain est choisie de nature élasto-viscoplastique et est formulée en grandes déformations. Ces choix sont justifiés par les applications visées dans le domaine de la mise en forme où les vitesses de déformation peuvent varier de 10^{-3} s^{-1} à 100 s^{-1} . Son implantation dans le code de calcul Abaqus via la routine Umat est en cours de développement.

Parallèlement, une analyse expérimentale fine de l'effet de la taille des grains et du ratio épaisseur/nombre de grains (voir par exemple Weiss et al, 2002) est effectuée sur différentes feuilles minces de cuivre pur. Ces derniers se distinguent par la taille moyenne des grains et leur nombre dans l'épaisseur obtenus par différents traitements thermiques de recuits. L'analyse expérimentale allie des mesures de texture et de contraintes résiduelles par diffraction des rayons X, des cartographies par EBSD et des micrographies optiques pour caractériser l'état initial des films et leur évolution lors de la sollicitation mécanique. Pour caractériser le comportement mécanique et les mécanismes de déformation, des essais de traction interrompus et in situ sont effectués. Pour se rapprocher des trajets de déformation de mise en forme et obtenir des déformations plus importantes, une machine d'essai d'emboutissage in situ a également été conçue (Fig V.1). Elle peut être utilisée dans un microscope électronique à balayage et dans un goniomètre à diffraction des rayons X.

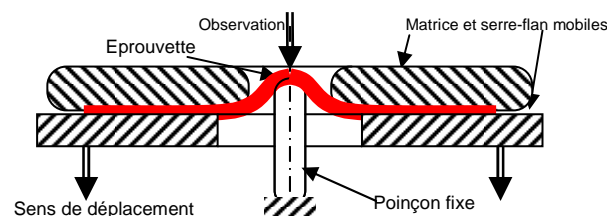


Fig. V.1 : Schéma de principe de la mini machine d'emboutissage in situ

Après le développement des outils numériques et expérimentaux, le projet se poursuivra par une confrontation entre résultats expérimentaux et résultats simulés à deux échelles différentes : l'échelle macroscopique et l'échelle de l'ensemble des grains de même orientation. Les attentes techniques et scientifiques de ce projet ambitieux et qui ne peut se concevoir qu'au sein d'une équipe (collaboration LPMM-LETAM) sont multiples :

- développer des outils d'analyses expérimentale et numérique aux échelles macroscopique et microscopique adaptés aux sollicitations complexes,
- analyser l'évolution de la texture, des contraintes internes par grains de même orientation, des hétérogénéités de déformation inter et intra granulaires pour différents trajets de chargement et différentes vitesses de déformation,
- analyser les différentes sources d'hétérogénéité de la déformation liées au matériau telles que la désorientation des grains ou le nombre de grains dans l'épaisseur et aux paramètres de process (trajet et vitesse de chargement, ...)

V.2.2.3 Cas de feuilles minces multicristallines avec quelques grains dans le volume

Travaux scientifiques majeurs :

- Collaboration internationale avec les équipes des Professeurs Hirt et Vehoff de l'université de Sarrebrücken et l'équipe de M. Berveiller (T. Ben Zineb, C. Collard, V. Favier) sur l'étude des effets de microstructure et de taille sur la mise en forme de micro-systèmes pour poser les limites de la miniaturisation des procédés conventionnels
- Projet "Hétérogénéités inélastiques d'origine physique ; application à la mise en forme de mini composants et au comportement des micro systèmes" du programme Matériaux CNRS 2002-2003 "Approches multi-échelles des propriétés macroscopiques des matériaux de structures pour applications aux micro-systèmes et mini-composants "

Dans le projet précédent, on commence à s'intéresser aux effets de taille et plus précisément au rapport entre la taille moyenne des grains et l'épaisseur des films. Les effets de taille ne sont cependant pris en compte qu'au travers d'une représentation discrète de la microstructure qui couplée à la résolution numérique des équations de champs fait apparaître des hétérogénéités inter et intra granulaires. Ils ne sont pas directement intégrés dans la description du comportement utilisant des lois telles que celles décrites dans le chapitre II. On néglige par exemple l'effet de taille de grain, la distance entre obstacles forts, la longueur caractéristique des sous-structures de dislocations, la distance entre bandes de glissement. Seul le libre parcours moyen est introduit et peut être relié à des longueurs internes de la microstructure telles que la taille de grain, taille des cellules de dislocations, la distance entre macles... via l'équation II.3.4.

Lorsque la taille des pièces mécaniques est encore réduite - c'est-à-dire pour des systèmes dont la taille est micronique - le rôle des surfaces externes aussi bien qu'internes sur la réponse macroscopique du matériau devient primordial. On peut s'attendre à des effets spécifiques lorsque, par exemple, la taille de la structure initiale atteint des ordres de grandeurs proches des longueurs caractéristiques des mécanismes discrets. En particulier, les surfaces internes (joints de grain, joints de macles, parois matrice/précipités) ou externes (surfaces libres) et le rapport (libre parcours moyen des dislocations / distance entre obstacles) jouent un rôle sur l'« auto-organisation » des dislocations et donc sur la réponse macroscopique du matériau. Peut-on alors toujours utiliser des lois de comportement issues d'une description "moyennée" de la microstructure ?

Dans le cadre d'une collaboration avec les équipes des Professeurs Hirt et Vehoff de l'université de Sarrebrücken, nous cherchons à étudier des effets de microstructure et de taille sur la mise en forme de micro-systèmes pour poser les limites de la miniaturisation des procédés conventionnels. En emboutissage par exemple, les effets de taille ont clairement deux origines (Hirt et al, 2003). La première est liée aux paramètres de process (vitesse de déplacement du piston, température des outillages, frottement...) qui engendrent, avec la réduction de taille de la structure, des champs de vitesse de déformation et de température très différents de ceux observés dans le cas de la mise en forme de pièces massives. Pourvu que l'on prenne en compte la sensibilité à la vitesse de déformation et à la température du comportement, ces effets peuvent être décrits dans le cadre de simulations éléments finis classiques. La deuxième origine des effets de taille concerne la présence de longueurs internes caractéristiques des mécanismes qui interagissent avec celles de la structure. Pour découpler et mieux comprendre les deux types d'effets de taille précédemment évoqués, des essais de traction et de flexion in situ sur des multicristaux Fer-Silicium sont effectués par l'équipe du Professeur Vehoff

(Henning et Vehoff, 2003). On s'intéresse à la réponse des matériaux aussi bien à l'échelle macroscopique qu'au niveau local (variations de l'orientation et allongement des grains, formation des lignes de glissement). Les évolutions des champs de déformation et rotation (désorientation) sont caractérisées par des techniques de microgrilles et d'EBSD. Toutes ces analyses expérimentales seront comparées avec des résultats obtenus par simulations éléments finis sur des microstructures où les relations locales d'orientation sont décrites précisément à partir des microstructures réelles (Fig. V.2).

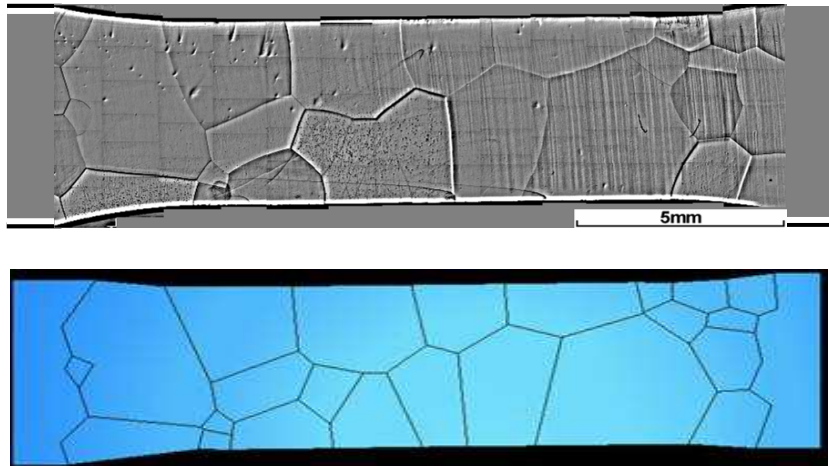


Figure V.2 : Géométrie des différents grains d'un multicristal Fe-Si (1 seul grain dans l'épaisseur) servant pour le maillage de la microstructure (fourni par M. Henning de l'Université de Saarbrücken)

Pour les simulations éléments finis, trois types de description sont considérés au niveau du comportement du grain:

- La première est classique et utilise le formalisme décrit dans le chapitre II du mémoire.
- La deuxième cherche à prendre en compte les variations du libre parcours moyen des dislocations au sein d'un même grain en intégrant par exemple les variations de distance entre un point du grain et les surfaces internes ou externes ou la désorientation d'un grain en surface par rapport à la surface libre.
- La troisième consiste à lever l'hypothèse de "micro-homogénéité" et mieux prendre en compte l'auto-organisation spatiale de la microstructure. Elle sera alimentée par des études décrites dans le paragraphe suivant.

V.2.3 Etude des hétérogénéités inélastiques d'origine physique

Afin d'intégrer le caractère hétérogène des champs à l'échelle du grain, nous proposons une approche fondée sur la thermo-micromécanique. Elle se situe à la frontière entre la représentation du physicien et celle du mécanicien. L'approche du physicien, largement utilisée dans ce mémoire par la pertinence des résultats qu'elle procure et sa simplicité à mettre en œuvre, n'implique que des variables internes "micro-homogènes". Des longueurs internes ayant un sens physique peuvent être introduites mais explicitement à l'aide d'équations complémentaires. Au contraire, l'approche du mécanicien décrit l'hétérogénéité de comportement via les équations de champs mais les longueurs caractéristiques qui en résultent sont difficiles à interpréter. L'approche proposée vise à décrire

l'activité plastique, non plus à l'aide du seul glissement plastique mais de plusieurs variables internes d'origine physique.

Par exemple le glissement plastique cristallographique peut être décrit par l'intermédiaire de la formation instantanée de boucles de dislocations de rayon a . Il faut alors deux variables : a et le nombre moyen de boucles par unité de volume. On introduit alors directement une longueur caractéristique qui en plus a un sens physique (Aubert et Berveiller, 1997). On peut également se placer à une échelle supérieure et considérer comme hétérogénéités plastiques des lignes de glissement « discrètes » tapissant l'intérieur du grain selon une période caractéristique (Fig. V.3). On dispose ainsi de trois variables physiques : la période spatiale d_2 , l'épaisseur des lignes d_1 et l'amplitude du glissement γ qui augmente avec le nombre de dislocations traversant le grain. Cette configuration est suggérée par les observations expérimentales telles qu'illustré sur la figure V.4.

L'objectif de ce type d'étude est de mieux comprendre la physique des mécanismes discrets et l'origine des configurations microstructurales résultant de l'activité plastique. Par exemple, la figure V.4 montre que la période spatiale d_2 dans le grain 1 est plus élevée que celle du grain 2. Pour quelles raisons ? De manière plus générale, pour augmenter son activité plastique : le matériau va-t-il :

- augmenter le nombre de boucles de dislocations (germination de nouveaux domaines plastiques)
- augmenter la taille des boucles existantes (croissance des domaines plastiques déjà existants)
- augmenter le nombre de lignes de glissement (germination de nouveaux domaines plastiques)
- augmenter l'épaisseur des lignes de glissement (croissance des domaines plastiques déjà existants)
- augmenter l'amplitude du glissement dans ces lignes (accroissement du glissement plastique des domaines plastiques) ?

Ce même type d'analyse peut être effectué dans le cas du maillage ou de la transformation martensitique. Notons, cependant que, dans ces cas, contrairement au glissement cristallographique, l'amplitude de la déformation ne pouvant pas augmenter dans une zone déjà maillée ou transformée, l'intensification de l'activité « inélastique » ne peut se faire que par germination ou croissance de domaines dans les zones « vierges » de maillage ou de transformation.

Une des voies possibles pour tenter de répondre à ces questions est d'utiliser des calculs de micromécaniques, tels que ceux décrits dans l'Annexe B, pour estimer par exemple les contraintes internes qui résultent de ces configurations. On peut également déterminer l'énergie élastique d'une configuration donnée et dans le cas de la thermodynamique des processus réversibles, estimer la configuration qui fournira le minimum d'énergie élastique. On peut étendre le cas « simplifié » de la figure V.3 de façon à prendre en compte le glissement multiple, l'anisotropie géométrique du grain, l'effet des interfaces et des surfaces libres, leur désorientation par rapport aux systèmes de glissement...

En résumé, cette méthodologie cherche à mieux prendre en compte l'auto-organisation spatiale de la microstructure dans les calculs de champs. Elle est fondée sur la description spatiale mais périodique de « particules » de déformation caractérisées par leur nombre, leur orientation, leur amplitude, leur distribution spatiale. Elle se situe donc aussi à la frontière entre les mécanismes discrets et la modélisation continue. Les études issues de cette démarche alimenteront l'écriture de

nouvelles lois de comportement « monocristallines » formulées à partir du glissement plastique, des densités de dislocation en incluant des longueurs internes caractéristiques dépendant de l'orientation cristallographique, de la morphologie et de la taille du grain. Dans ces modélisations, il sera important d'étudier non seulement l'influence de la valeur moyenne de ces longueurs mais aussi de leur distribution. Je conclurai en soulignant que ce projet de recherche a fortement motivé le recrutement de Stéphane Berbenni en tant que Chargé de Recherche au CNRS, il se fait en étroite collaboration avec Christophe Collard, Ingénieur en calcul scientifique au LPMM et sous l'impulsion de Marcel Berveiller.

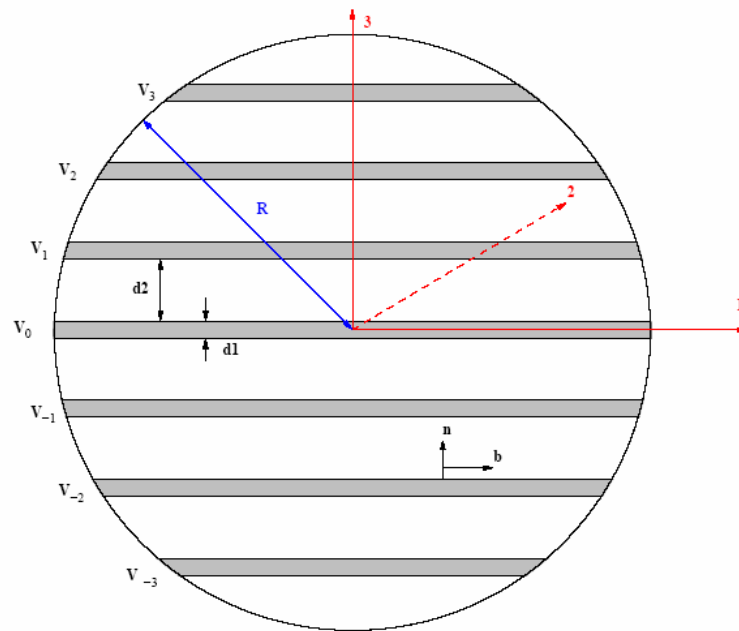


Figure V.3. Grain sphérique noyé dans une matrice infinie. Les parties grisées correspondent aux « lignes » de glissement d' « épaisseur » d_1 . La longueur caractéristique d_2 traduit l'espacement inter-lignes de glissement.

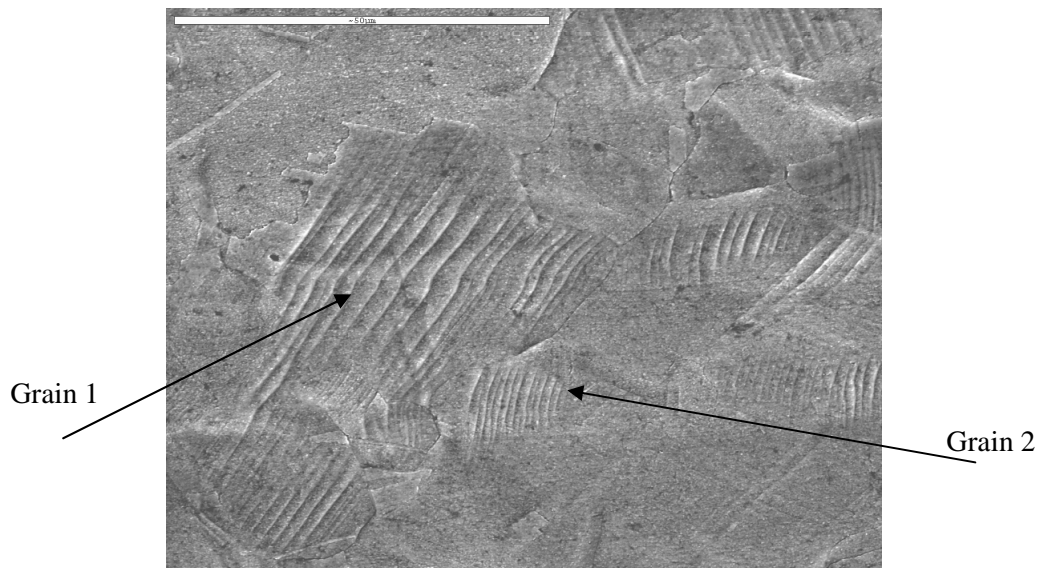


Figure V.5 : Micrographie obtenue sous MEB de lignes de glissement qui apparaissent à la surface de certains grains (D. Barbier)

V.3 Couplage expérience/modèle aux différentes échelles

Toutes les modélisations proposées ne peuvent être enrichies que si elles sont confrontées à des analyses expérimentales à différentes échelles. Depuis mon arrivée au LPMM, mes activités de recherche se sont concentrées sur la modélisation du comportement pour asseoir mes compétences dans ce domaine. L'expérience que j'ai vécu en thèse et durant mes deux années d'ATER me pousse aujourd'hui à coupler davantage expérience et modèle dans les projets auxquels je participe en collaboration avec des « expérimentateurs ». Il ne s'agit plus de comparer expérience et modèle seulement à l'échelle macroscopique. Une analyse locale est indispensable. On peut citer par exemple la thèse de N. Shiekhelsouk où l'on cherche à coupler observations microstructurales et analyse des contraintes. C'est aussi le cas de la thèse de N. Bonnet où l'on souhaite caractériser les évolutions de microstructure lors d'essais in-situ d'emboutissage sous microscope à balayage. Dans le cadre de la thèse de C. Mareau sur l'échauffement en fatigue des aciers, il faut mettre en évidence des déformations très faibles. La détection des mécanismes dissipatifs par thermographie infrarouge répond à ce besoin. Coupler des techniques de mesure de l'énergie élastique stockée telle que la diffraction X à des techniques de mesures des mécanismes dissipatifs telles que la thermographie infrarouge et des techniques de mesures de champ de déformation me paraît très pertinent pour analyser la genèse des mécanismes de déformation, de transformation et d'endommagement dans les matériaux.

V.4 Approche pluridisciplinaire

Pour conclure, je dirai que mes activités de recherche se situent entre Physique et Mécanique, Expérience et Modélisation, Discret et Continu. L'approche pluridisciplinaire que je privilégie pour mener à bien mes projets de recherche s'enrichit des progrès effectués dans chacun des domaines. En ce qui concerne la modélisation aux différentes échelles, on voit aujourd'hui les apports des simulations atomiques ou de dynamique de dislocations dans l'analyse des mécanismes élémentaires et de leurs interactions (Fivel et Forest, 2004). De la même manière, la micromécanique aux échelles inférieures (dans la limite de l'hypothèse de milieu continu) cherche à fournir, comme résultats des équations de champs et de l'analyse thermodynamique, la valeur des variables internes retenues et leur évolution. Tous ces renseignements peuvent être ensuite intégrés dans des modèles aux échelles supérieures de manière phénoménologique à l'aide de lois complémentaires en ayant le souci de préserver des formes compatibles avec des besoins de prévisions de comportement divers dans un contexte d'applications industrielles.

Références bibliographiques

- Aifantis E.C. (1987)**, The physics of plastic deformation, *International Journal of Plasticity*, 3, 211-248
- Allain S. (2004)**, Caractérisation et modélisation thermomécaniques multi-échelles des mécanismes de déformation et d'écrouissage d'aciers austénitiques à haute teneur en manganèse - Application à l'effet TWIP, Thèse de Doctorat de l'INP Lorraine, Nancy
- Allain S., Chateau J.P., Bouaziz O. (2004a)**, A physical model of the twinning-induced plasticity effect in a high manganese austenitic steel, *Materials Science and Engineering A*, 387-389, 143-147
- Allain S., Chateau J.P., Dahmoun D., Bouaziz O. (2004b)**, Modeling of mechanical twinning in a high manganese content austenitic steel, *Materials Science and Engineering A*, 387-389, 272-276
- Asaro A., Needleman A. (1985)**, Overview no. 42 Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals, *Acta Metallurgica*, 33, 923-953
- Astié P., Peyrade J.P., Groh P. (1980)**, Pics de relaxation des dislocations dans le fer après déformation à basse température, *Scripta Metallurgica*, 14, 611-616
- Astié P., Peyrade J.P., Groh P. (1981)**, Microdéformation liée à la relaxation des dislocations vis dans le fer, *Scripta Metallurgica*, 15, 477-482
- Atkinson H.V. (2005)**, Modelling the semisolid processing of metallic alloys, *Progress in Materials Science*, 50, 341-412
- Aubert I., Berveiller M. (1997)**, Constrained and unstable expansion of dislocation loops using an invariant formulation of the free energy, *Mechanics of Materials*, 26, 127-137
- Balberg I., Binenbaum N., Wagner N. (1984)**, Percolation thresholds in a three-dimensional sticks system, *Physical Review Letters*, 52, 1465-1468
- Bathias C., Bailon J.P. (1997)**, La fatigue des matériaux et des structures, Hermès, Paris (France), 2ème édition
- Berbenni S. (2002)**, Elastoviscoplasticité des aciers polycristallins : Modélisation micromécanique et physique – Applications au comportement dynamique et à l'effet Bake-Hardening, Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Metz
- Berbenni S., Favier V., Lemoine X., Berveiller M. (2004a)**, Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures, *Materials Science and Engineering A*, 372, 128-136
- Berbenni S., Favier V., Berveiller M., Lemoine X. (2004b)**, Modélisation micromécanique du comportement élastique-viscoplastique des aciers IF et Dual-Phase, *La Revue de la Métallurgie*, 5, 381-389
- Berbenni S., Favier V., Lemoine X., Berveiller M. (2004c)**, A micromechanical approach to model the bake hardening effect for low carbon steels, *Scripta Materialia*, 51, 303-308
- Berveiller M., Zaoui A. (1981)**, A simplified self-consistent scheme for the plasticity of two-phase metals, *Research Mechanics Letters*, 1, 119-124.
- Berveiller M., Zaoui A. (1979)**, An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals, *Journal of Mechanics and Physics and Solids*, 26, 325-344
- Bigot R., Favier V., Rouff C. (2005)**, Characterization of semi-solid material mechanical behavior by indentation test, *Journal of Material Processing and Technology*, 160, 43-53
- von Blanckenhagen B., Arzt, E., Gumbsch P. (2004)**, Discrete dislocation of plastic deformation in metal thin films, *Acta Materialia* 52, 773-784
- Bonnet N., Favier V., Ben Zineb T., Lipinski P. (2005)**, Comportement mécanique des films minces en emboutissage, Colloque MECAMAT-AUSSOIS, "Mécanismes et mécanique du comportement, de la dégradation et de la rupture des matériaux sous sollicitations dynamiques", Aussois, France, CD-ROM bonnet.doc

- Bornert M. (1996)**, A generalized pattern-based self-consistent scheme, *Computational Material Science*, 5, 17-31
- Boulanger T., Chrysochoos A., Mabru C., Galtier A. (2004)**, Calorimetric analysis of dissipative and thermoelastic effects associated with the fatigue behavior of steels, *International Journal of Fatigue*, 26, 221-229
- Brenner R. (2001)**, Influence de la microstructure sur le comportement en fluage thermique d'alliages de zirconium : analyse expérimentale et mise en oeuvre de méthodes d'homogénéisation, Thèse de Doctorat de l'Université Paris XIII
- Brenner R., Castelnau O., Gilormini P. (2001)**, A modified affine theory for the overall properties of nonlinear composites, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, t. 329, Série II b, 649-654
- Brenner R., Masson R., Castelnau O., Zaoui A. (2002)**, A "quasi-elastic" affine formulation for the homogenised behaviour of nonlinear viscoelastic polycrystals and composites, *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 21, 943-960
- Cailletaud G. (1992)**, A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals, *International Journal of Plasticity*, 8, 55-73
- Cailletaud G., Pilvin P. (1994)**, Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis, *Revue Européenne des Eléments Finis*, 3, 515-541
- Cailletaud G., Forest S., Jeulin D., Feyel F., Galliet I., Mounoury V., Quilici S. (2003)**, Some elements of microstructural mechanics, *Computational Materials Science*, Volume 27, 351-374
- Campagne L., Daridon L., Ahzi S. (2005)**, A physically based model for dynamic failure in ductile metals, *Mechanics of Materials*, in press
- Campbell J.D., Ferguson W.G. (1970)**, The temperature and strain-rate dependence of the shear strength of mild steel, *Philosophical Magazine*, 81, 63-82
- Chabert E., Bornert M., Bourgeat-Lami E., Cavallé J.Y., Dendievel R., Gauthier C., Putaux J.L., Zaoui A. (2004)**, Filler-filler interactions and viscoelastic behavior of polymer nanocomposites, *Materials Science and Engineering A*, 381, 320-330
- Cherkaoui M., Sabar H., Berveiller M. (1994)**, Micromechanical approach of the coated inclusion problem and applications to composite materials, *Journal of Engineering Materials and Technology*, 116, 274-278.
- Cherkaoui M. (2003)**, Constitutive equations for twinning and slip in low-stacking-fault-energy metals : a crystal plasticity-type model for moderate strains, *Philosophical Magazine*, 83, 3945-3958
- Christensen R.M., Lo K.H. (1979)**, Solutions for effective shear properties in three-phase sphere and cylinder models, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 27, 315-330.
- Chrysochoos A., Louche H. (2000)**, An infrared image processing to analyse the calorific effects of accompanying strain localisation, *International Journal of Engineering Science*, 38, 1759-1788
- Dahoun A., Aboulfaraj M., G'Sell C., Molinari A., Canova G.R. (1995)**, Plastic behavior and deformation textures of poly(etherether ketone) under uniaxial tension and simple shear, *Polymer Engineering and Science*, 35, 317 -330
- Daniélou A., Galtier A., Versatel J.M. (1999)**, Influence de la vitesse de sollicitation sur les propriétés en fatigue, Note technique IRSID, MPM n 99/PPM/213
- De A.K., Vandeputte S., De Cooman B.C. (1999)**, Static strain ageing behavior of ultra low carbon Bake Hardening steel. *Scripta Materialia*, 41, 831-837.
- Deschamps A. Bréchet T. (1999a)**, Influence of predeformation and ageing of an Al-Zn-M Alloy – I. Microstructure evolution and mechanical properties, *Acta Materialia*, 47, 281-392.
- Deschamps A. Bréchet T. (1999b)**, Influence of predeformation and ageing of an Al-Zn-M Alloy – II. Modelling of precipitation kinetics and yield stress, *Acta Materialia*, 47, 293-305.

- Devincre B., Kubin, L.P. (1997)**, Mesoscopic simulations of dislocations and plasticity, *Materials Science and Engineering A* 234-236, 8-14
- Doherty R., Lee H., Feest E. (1984)**, Microstructure of stir-cast metal, *Materials Science and Engineering*, 65, 181-189
- Doudard C. (2004)**, Détermination rapide des propriétés en fatigue à grand nombre de cycles à partir d'essais d'échauffement, Thèse de Doctorat de l'Ecole Normale Supérieure de Cachan
- Dumoulin S., Tabourot L., Chappuis C., Vacher P., Arrieux R. (2003)**, Determination of the equivalent stress–equivalent strain relationship of a copper sample under tensile loading, *Journal of Materials Processing Technology*, 133, 79-83
- Elsen P. (1993)**, Bake-Hardening-Effekt bei Feinblechen. Dr. Ing. Dissertation RWTH Aachen, VDI-Verlag, Düsseldorf, Deutschland.
- Elsen P., Hougardy H.P. (1993)**, On the mechanism of bake-hardening, *Steel Research* 64 No. 8-9, 431-436
- Eshelby J.D. (1957)**, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, *Proceedings of the Royal Society London*, A241, 376-396
- Essmann U, Mughrabi H (1979)**, Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities, *Philosophical Magazine*, 40, 731-756
- Estrin Y., Mecking H. (1984)**, A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models, *Acta Metallurgica*, 32, 57-70
- Fan Z. (2002)**, Semisolid metal processing, *International Materials Reviews*, 47, 49-83
- Favier V. (1995)**, Etude de nouveaux matériaux composites obtenus à partir de latex filmogènes et de whiskers de cellulose : effets de percolation mécanique, Thèse de Doctorat de l'INP Grenoble
- Favier V., Chanzy H., Cavallé J.Y. (1995a)**, Polymer nanocomposites reinforced by cellulose whiskers, *Macromolecules*, 28, 6365-6367
- Favier V., Canova G.R., Cavallé J.Y., Chanzy H., Dufresne A., Gauthier C. (1995b)**, Nanocomposites from latex and cellulose whiskers, *Polymer for Advanced Technologies*, 6, 351-355
- Favier V., Dendievel R., Canova G.R., Cavallé J.Y., Gilormini P. (1997a)**, Simulation and modelling of 3D percolating structures: case of latex matrix reinforced by a network of cellulose fibers, *Acta Materialia*, 45, 1557-1563
- Favier V., Canova G.R., Shrivastava S.C., Cavallé J.Y. (1997b)**, Mechanical percolation in cellulose whiskers nanocomposites, *Polymer Engineering and Science*, 37, 1732-1742
- Favier V., Giroud T., Strijko E., Hiver J.M., G'Sell C., Hellinckx S., Goldberg A. (2002)**, Slow crack propagation in polyethylene under fatigue at controlled stress intensity, *Polymer*, 43, 1375-1382
- Favier D., Orgéas L., Geindreau C., Bay F., Chastel Y., Bellet M. (2002)**, Modélisation des phénomènes de ségrégation entre phases liquide et solide, dans *Mise en forme des alliages métalliques à l'état semi-solide*, sous la direction de M. Suery, Eds Hermes Lavoisier, Chap.9, 223-261
- Favier V., Sabar H., Berveiller M., Berbenni S. (2003)**, New self-consistent approach for inelastic materials based on translated fields, *Journal de Physique IV*, 105, 231-238
- Favier V. Rouff C., Bigot R., Berveiller M., Robelet M. (2004a)**, Micro-macro modeling of the isothermal steady-state behaviour of semi-solids, *International Journal of Forming Processes*, 7, 177-194
- Favier V., Berbenni S., Lemoine X., Berveiller M. (2004b)**, Dynamic behaviour of steels : an elastic-viscoplastic micro-macro polycrystalline approach, *DYMAT 15th Technical Meeting "Crashworthiness and constitutive relationships for engineering materials"*, Metz, France, 51-56
- Favier V., Berbenni S., Berveiller M., Lemoine X. (2005)**, Micromechanical modeling of dynamic behaviour of steels, *Colloque MECAMAT-AUSSOIS, "Mécanismes et mécanique du comportement, de la dégradation et de la rupture des matériaux sous sollicitations dynamiques "*, Aussois, France, Janvier 2005, CD-ROM favier.doc

- Feaugas X. (1999)**, On the origin of the tensile flow stress in the stainless steel AISI 316L at 300 K: back stress and effective stress, *Acta Materialia*, 47, 3617-3632
- Feyel F., Calloch S., Marquis D., Cailletaud G. (1997)**, F.E. computation of a triaxial specimen using a polycrystalline model, *Computational Materials Science*, 9, 141-157
- Fleck N.A., Hutchinson J.W. (1997)**, Strain gradient plasticity, *Advanced in Applied Mechanics*, 33, 295-361
- Fivel M., Forest S. (2004)**, Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du monocristal, *Traité des Matériaux métalliques*, Techniques de l'Ingénieur, M4 016, 1-18
- de Fouquet J., Boch P., Petit J., Rieu G. (1970)**, A contribution to the study of internal friction peaks associated with dislocations in various metals and their relations with cold-work, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 31, 1901-1906
- Follansbee P.S., Regazzoni G., Kocks U.F. (1984)**, The transition to drag-controlled deformation in copper at high strain rates, *Institute of Physics Conference Series*, 70, 71-80
- Follansbee P.S., Kocks U.F. (1988)**, A constitutive description of the deformation of copper based on the use of the mechanical threshold stress as an internal state variable, *Acta Metallurgica*, 36, 81-93
- Forest S., Barbe F., Cailletaud G. (2000)**, Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviour of polycrystals and multi-phase materials. *International Journal of Solids and Structures* 37, 7105-7126
- Forest S., Cailletaud G., Jeulin D., Feyel F., Galliet I., Mounoury V., Quilici S. (2002)**, Introduction au calcul de microstructures : Elements of microstructural mechanics, *Mécanique & Industries*, 3, 439-456
- Franciosi P (1985)**, The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metallurgica*, 33, 1601-1612
- François D., Pineau A, Zaoui A. (1995)**, *Comportement mécanique des matériaux : élasticité et plasticité*, Paris : Hermès
- Friedel J. (1964)**, *Dislocations*, Pergamon Press, Oxford, UK
- Frost H.J., Ashby M.F. (1982)**, *Deformation-Mechanism Maps, The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics*, <http://thayer.darmouth.edu/~defmech/>
- Gabathuler J.P. (2002)**, Mise en forme, dans *Mise en forme des alliages métalliques à l'état semi-solide*, sous la direction de M. Suéry, Eds Hermes Lavoisier, Chap.4, 85-113
- Galtier A., Bouaziz O., Lambert A. (2002)**, Influence de la microstructure des aciers sur leur propriétés mécaniques : Influence of steel microstructure on their mechanical properties, *Mécanique & Industries*, 3, 457-462
- Gebelin J.C., Suéry M., Favier D. (1999)**, Characterisation of the rheological behaviour in the semi-solid state of grain-refined AZ91 magnesium alloys, *Materials Science and Engineering*, A272, 134-144
- Gilormini P. (1995)**, Insuffisance de l'extension classique du modèle autocohérent au comportement non linéaire, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris*, t. 320, Série IIb, 115-122
- Gilormini P. (1997)**, Une insuffisance de plusieurs extensions du modèle autocohérent au comportement des milieux hétérogènes non linéaires, *La Revue de la Métallurgie*, Septembre, 1081-1087
- Goto D.M., Bingert J.F., Reed W.R., Garrett Jr. R.K. (2000)**, Anisotropy-corrected MTS constitutive strength modeling in HY-100 steel, *Scripta Materialia*, 42, 1125-1131
- Granato A., Hikata A., Lücke K. (1958)**, Recovery of damping and modulus changes following plastic deformation, *Acta Metallurgica*, 6, 470-480
- G'Sell C., Dahoun A., Favier V., Hiver J.M., Philippe M.J., Canova G.R. (1997)**, Microstructure transformation and plastic behavior of isotactic polypropylene under large plastic deformation, *Polymer Engineering and Science*, 37, 1702-1715
- Harren S.V. (1991)**, Rate dependent finite elastoplastic deformation of polycrystals I : a self-consistent framework, II : a comparison of the self-consistent and the Taylor models, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 39, 345-383

- Hashin Z. (1969)**, The inelastic inclusion problem, *International Journal of Engineering Science*, 7, 11-36
- Henning M., Vehoff H. (2003)**, Characterisation of reference samples for continuum mechanics simulation – grain orientation, rotation and deformation as a function of the applied loads”, *First Colloquium process scaling*, Bremen
- Hervé E., Zaoui A. (1990)**, Modelling the effective behaviour of non-linear matrix-inclusion composites”, *European Journal of Mechanics A*, 9, 505-515.
- Hervé E., Zaoui A. (1993)**, n-Layered inclusion-based micromechanical modeling, *International Journal of Engineering Science*, 31, 1-10
- Hill R (1965)**, Continuum micromechanics of elastoplastic polycrystals, *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 13, 89-101.
- Hill R. (1983)**, Interfacial operators in the mechanics of composite media, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 31, 347-357.
- Hirt G., Justinger H., Witulski N. (2003)**, Analysis of size effects in micro-sheet forming, *Process scaling Strahltechnik*, 24 F. Hollmann (Eds.), 19-26
- Hutchinson J.W. (1976)**, Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials, *Proceedings of the Royal Society London, A* 348, 101-127
- Hutchinson J.W. (2000)**, Plasticity at the micron scale, *International Journal of Solids and Structures*, 37, 225-238
- Isaac R.D., Granato A.V. (1989)**, Normal modes of dislocations and rate theory, *Journal of Nuclear Materials*, 169, 24-30
- Ito Y., Flemings M.C., Cornie J.A. (1992)**, Rheological behaviour and microstructure of Al-6.5wt% Si alloy, dans *Nature and Properties of semi solid materials*, J.A Sekhar et J.A. Dantzig, 3-18
- Jaoul B. (1964)**, *Etude de la plasticité et application aux métaux*, Dunod, Paris France
- Joly P.A., Mehrabian R. (1976)**, The rheology of a partially solid alloy, *Journal of Materials Science*, 11, 1393-1418.
- Kalidindi S.R. (2001)**, Modeling anisotropic strain hardening and deformation textures in low stacking fault energy fcc metals, *International Journal of Plasticity*, 17, 837-860
- Karaman I., Sehitoğlu H., Beaudoin A.J., Chumlyakov Y.I., Maier H.J., Tomé C.N. (2000)**, Modeling the deformation behavior of Hadfield steel single and polycrystals due to twinning and slip, *Acta Materialia*, 48, 2031-2047
- Karato S. (1998)**, A dislocation model of seismic wave attenuation and micro-creep in the earth, *Harold Jeffreys and the Rheology of the Solid Earth Pure and Applied Geophysics*, 153, 239-256
- Keh A.S., Nakada Y. (1967)**, Plasticity of iron single crystal, *Canadian Journal of Physics*, 45, 1101-1120.
- Kirkwood D.H. (1994)**, *Semisolid metal processing*, *International. Material Reviews*, 39, 173-189
- Klahn D., Mukherjee A.K., Dorn J.E. (1970)**, in *Second International Conference on the Strength of Metals and Alloys*, Asilomar, California: ASM.
- Klepaczko J. (1981)**, The relation of thermally activated flow in BCC metals and ferritic steels to strain rate history and temperature history effects, *Technical Report DMR -79-23257/2*, Materials Research Laboratory Brown University
- Kocks U.F., Argon A.S., Ashby M.F. (1975)**, *Thermodynamics and kinetics of slip*, *Progress in Materials Science*, 19, Pergamon Press, Oxford
- Kocks U.F., Mecking H. (2003)**, Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case, *Progress in Materials Science*, 48, 171-273
- Kouddane R., Molinari A., Canova G.R. (1993)**, Self-consistent modelling of heterogeneous viscoelastic and elastoplastic materials. In: *MECAMAT'91 Teodosiu C; Raphanel JL; Sidoroff F (Eds.) Large plastic deformations, Fundamentals and application to metal forming*, Balkema, Rotterdam, 185-192.

- Kröner E. (1958)**, Berechnung der elastischen konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls, *Z. Phys*, 151, 504-518
- Kröner E. (1961)**, Zur plastischen Verformung des Vielkristalls. *Acta Metallurgica* 9, 155-161
- Kubin L.P., Canova G., Condat M., Devincere B., Pontikis V., Brechet Y. (1992)**, In: Martin, G., Kubin L.P. (eds.), *Non Linear Phenomena in Materials Science II*, Sci-Tech, Vaduz, p. 455
- Kubin L. (2004)**, Dislocations et effets de taille en plasticité, *Comportement et effets d'échelle*, Mecamat, Aussois, 55-62
- Kumar A., Hauser F.E., Dorn J.E. (1968)**, Viscous drag on dislocations in aluminum at high strain rates, *Acta Metallurgica*, 16, 1189
- Kumar A., Kumble R.C. (1969)**, Viscous drag on dislocations at high strain rates in copper, *Journal of Applied Physics*, 40, 475-80
- Kumar P., Martin C., Brown S.B. (1993)**, Shear rate thickening behaviour of semisolid slurries, *Metallurgical Transactions A*, 24, 1107-1116
- Kumar P., Martin C., Brown S.B. (1994a)**, Constitutive modeling and characterization of the flow behaviour of semi-solid metal alloy slurries – I The flow response, *Acta Metallurgica and Materialia*, 42, 3595-3602
- Kumar P., Martin C., Brown S.B. (1994b)**, Constitutive modeling and characterization of the flow behaviour of semi-solid metal alloy slurries – II Structural evolution under shear deformation, *Acta Metallurgica and Materialia*, 42, 3603-3614
- Kunin I.A. (1983)**, *Elastic Media with Microstructure II: Three Dimensional Models*. Springer Series in Solid-State Sciences 44, Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New-York, Tokyo
- Langlois L., Berveiller M. (2003)**, Overall softening and anisotropy related with the formation and evolution of dislocation cell structures, *International Journal of Plasticity*, 19, 599-624
- La Rosa G., Risitano A. (2000)**, Thermographic methodology for rapid determination of the fatigue limit of materials and mechanical components, *International Journal of Fatigue*, 22, 65-73
- Laxmanan V., Flemings M. (1980)**, Deformation of semi-solid Sn-15 pct Pb alloy, *Metallurgical Transactions A*, 11A, 1927-1937
- Laws N., McLaughlin R. (1978)**, Self-consistent estimates for the viscoelastic creep compliance of composite materials, *Proceedings of the Royal Society London, A*, 359, 251-273
- Lebensohn R., Tomé C.N. (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, 2611-2624
- Lieurade H.P. (1982)**, *La pratique des essais de fatigue*, PYC Edition
- Liu T.Y., Atkinson H.V., Kapranos P., Kirkwood D.H., Hogg S.C. (2003)**, Rapid compression of aluminum alloys and its relationship to thixoformability, *Metallurgical Materials Transactions A*, 34, 1545-1554
- Louchet F., Kubin LP, Vesely D (1979)**, In situ deformation of b.c.c. crystals at low temperatures in a high-voltage electron microscope – Dislocation mechanisms and strain-rate equation, *Philosophical Magazine, A* 39, 433-454
- Loué W.R., Lankroon S., Kool W.H. (1992)**, Rheology of partially solidified AlSi7Mg0.3 and the influence of SiC additions, *Materials Science and Engineering A*, 191, 255-262
- Lorrain J.P. (2004)**, Modélisation d'un critère de ductilité basé sur la perte d'ellipticité du module tangent élastoplastique, thèse de Doctorat de l'ENS Arts et Métiers, Metz
- Lucas L.D. (1984)**, Viscosité des principaux métaux et métalloïdes, *Techniques de l'ingénieur*, MB1, M66
- Luft A., Richter J., Reitzenstein W., Finke P. (1972)**, Der Einfluss der Temperatur auf das Verformungsverhalten, die Gleitgeometrie und Verformungsstruktur von Molybdän-Einkristallen, *Reinststoffprobleme*, Balarin M (ed.), B1. IV Akademie-Verlag Berlin, Germany, 285-320

- Luo H.A., Weng G.J. (1989)**, On Eshelby's S-tensor in a three-phase cylindrically concentric solid, *Mechanics of Materials*, 8, 77-88
- Luong M.P. (1998)**, Fatigue limit evaluation of metals using an infrared thermographic technique, *Mechanics of Materials*, 28, 155-163
- McLelland A.R.A., Henderson N.G., Atkinson H.V., Kirkwood D.H. (1997)**, Anomalous rheological behaviour of semi solid alloy slurries at low shear rates, *Materials Science and Engineering A*, 232, 110-118
- Makradi A., Ahzi S., Gregory R.V., Edie D.D. (2004)**, A two-phase self-consistent model for the deformation and phase transformation behavior of polymers above the glass transition temperature: application to PET, *International Journal of Plasticity*, In Press
- Martin C., Orgéas L. (2002)**, Modélisation des procédés de mise en forme, dans *Mise en forme des alliages métalliques à l'état semi-solide*, sous la direction de M. Suery, Eds Hermes Lavoisier, Chap.8, 197-221
- Masson R., Zaoui A. (1999)**, Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behaviour of polycrystalline materials, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 47, 1543-1568
- Masson R., Bornert M., Suquet P., Zaoui A. (2000)**, An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 48, 1203-1227
- Mercier S., Jacques N., Molinari A. (2005)**, Validation of an interaction law for the Eshelby interaction problem in elasto-viscoplasticity, *International Journal of Solids and Structure*, 42, 1923-1941
- Méric L., Poubanne P., Cailletaud G. (1991)**, *Journal of Engineering Materials and Technology*, Single crystal modeling for structural calculations. Part 1 : Model presentation, 113, 162-170
- Meyers M.A., Vöhringer O., Lubarda V.A. (2001)**, The onset of twinning in metals: a constitutive description, *Acta Materialia*, 49, 4025-4039
- Miodownik A.P. (1998)**, *Zeitschrift für Metallkunde*, 89, 840-846
- Molinari A., Canova G.R., Ahzi S. (1987)**, A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity, *Acta Metallurgica*, 35, 2283-2994
- Molinari A., El Mouden M. (1996)**, The problem of elastic inclusions at finite concentration, *International Journal of Solids and Structures*, 33, 3131-3150
- Molinari A., Ahzi S., Kouddane R. (1997)**, On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals, *Mechanics of Materials*, 26, 43-62
- Morgado P., Favier V., Buessler P. (2002)**, Analyse de l'échauffement en fatigue d'aciers sollicités en fatigue, Note interne ARCELOR Innovation R&D, CMC/02/R/3211/pilote
- Mughrabi H. (1983)**, Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals, *Acta Metallurgica*, 31, 1367-1379
- Muller D., Lemoine X., Berveiller M. (1994)**, Nonlocal behavior of elastoplastic metals : theory and results, *Transactions of the ASME*, 116, 378-383
- Mura T. (1987)**, *Micromechanics of defects in solids*, Kluwer Academic Publishers (Eds.)
- Nemat-Nasser S., Obata M. (1986)**, Rate dependent, finite elastoplastic deformation of polycrystals, *Proceedings of the Royal Society of London*, A407, 343-345
- Neumann P. (1992)**, The effect on surface related grain boundary stresses on fatigue, *Scripta Metallurgica*, 26, 1535-1540
- Omar M.Z., Palmiere EJ, Howe A.A., Atkinson H.V., Kapranos P. (2005)**, Thixoforming of a high performance HP9/4/30 steel, *Materials Science and Engineering A*, 395, 53-61
- Orowan E. (1940)**, Problems of plastic gliding, *Proceedings of Physics Society of London*
- Paquin A., Sabar H., Berveiller M. (1999)**, Integral formulation and self-consistent modelling of elastoviscoplastic behavior of heterogeneous materials, *Archive of Applied Mechanics*, 69, 14-35

- Paquin A., Berbenni S., Favier V., Lemoine X., Berveiller M. (2001)**, Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels, *International Journal of Plasticity*, 17, 1267-1302
- Peierls R. (1940)**, *Proceedings of Physics Society London*, 62, 34
- Perez M., Barbé J.C., Néda Z., Bréchet Y., Salvo L. (2000)**, Computer simulation of the microstructure and rheology of semi-solid alloys under shear, *Acta Materialia*, 48, 3773-3782
- Philibert J., Vignes A., Brechet Y., Combrade P. (1998)**, *Métallurgie : du minerai au matériau*, Eds. Paris : Masson
- Ponte Castañeda P. (1991)**, The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 39, 45-71
- Quaak C.J., Kool W.H. (1994)**, Properties of semisolid aluminium matrix composites, *Material Science and Engineering A*, 188, 277-282
- Raabe D., Sachtler M., Zhao Z., Roters F., Zaefner S. (2001)**, Micromechanical and macromechanical effects in grain scale polycrystal plasticity experimentation and simulation, *Acta Materialia*, 49, 3433-3441
- Rauch E.F., Schmitt J.H. (1989)**, Dislocation substructures in mild steel deformed in simple shear, *Materials Science and Engineering, A*, 113, 441-448
- Rémy L. (1975)**, Thèse de l'Université Paris Sud
- Rice J. (1970)**, On the structure of stress-strain relations for time dependent plastic deformation in metals, *Transactions of the ASME*, September, 728-737
- Roters F., Raabe D., Gottstein G. (2000)**, Work hardening in heterogeneous alloys – A microstructural approach based on three internal state variables, *Acta Materialia*, 48, 4181-4189
- Rougier Y. (1994)**, Etude du comportement sous irradiation : Modélisation micromécanique de l'élastoviscoplasticité, Thèse de l'Ecole Polytechnique
- Rougier Y., Stolz C., Zaoui A. (1994)**, Self-consistent modelling of elastic-viscoplastic polycrystals, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris, Série II*, 318, 145-151
- Rusinek A. (2000)**, Modélisation thermoviscoplastique d'une nuance de tôle d'acier aux grandes vitesses de déformation - Etude expérimentale et numérique du cisaillement, de la traction et de la perforation, Thèse de Doctorat de l'Université de Metz, France
- Rusinek A., Klepaczko J.R. (2001)**, Shear testing of a sheet steel at wide range of strain rates and a constitutive relation with strain-rate and temperature dependence of the flow stress, *International Journal of Plasticity*, 17, 87-115
- Sabar H., Berveiller M., Buisson M. (1990)**, Problème d'inclusion à frontière mobile, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris, Série II*, 310, 447-452
- Sabar H., Berveiller M., Favier V., Berbenni S. (2002)**, A new Class of Micro-Macro Models for elastic-viscoplastic heterogeneous Materials, *International Journal of Solids and Structure*, 39, 3257-3276
- Sauzay M. (2000)**, Effets de surface et d'anisotropie en fatigue multiaxiale, Thèse de Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure de Cachan
- Sauzay M., Gilormini P. (2000)**, Inclusion élastoplastique en surface, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics-Physics-Astronomy*, 328, 117-122
- Schwarz K.W. (1999)**, Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. I. Methods and Examples, *Journal of Applied Physics* 85, 108-119
- Seconde J.F., Suery M. (1984)**, Effect of solidification conditions on deformation behaviour of semi-solid Sn-Pb alloys, *Journal of Materials Science*, 19, 3995-4006
- Sedláček R., Blum W., Kratochvíl, Forest S. (2002)**, Subgrain formation during deformation : physical origin and consequences, *Metallurgical and Materials Transactions, A*, 33A, 319-327

- Sheikhelsouk M.N., Favier V., Inal K., Cherkaoui M. (2005)**, Modélisation et simulation du comportement thermomécanique des aciers austénitiques à effet TWIP (TWinning Induced Plasticity), XVIIème Congrès Français de Mécanique 2005, Troyes, sous presse
- Shockley W. (1952)**, Trans AIME, 194, 829
- Soler M. (1998)**, Etude du vieillissement d'un acier à Bake-Hardening : évolution des propriétés mécaniques de traction – corrélation avec la microstructure, Thèse de Doctorat de l'INSA de Lyon
- Suéry M. (2002a)**, Propriétés des pièces formées, dans Mise en forme des alliages métalliques à l'état semi-solide, sous la direction de M. Suery, Eds Hermes Lavoisier, Chap.5, 115-125
- Suéry M. (2002b)**, Rhéologie des alliages semi-solides, dans Mise en forme des alliages métalliques à l'état semi-solide, sous la direction de M. Suery, Eds Hermes Lavoisier, Chap.7, 167-195
- Stainier L., Cuitiño A.M., Ortiz M. (2002)**, A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in BCC single crystals, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 50, 1511-1545
- Stern R.M., Granato A.V. (1962)**, Overdamped resonance of dislocations in copper, Acta Metallurgica, 10, 358-381
- Stolz C., Zaoui A. (1991)**, Analyse morphologique et approches variationnelles du comportement d'un milieu élastique hétérogène, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris, Série II, 312, 143-150
- Suquet P. (1985)**, Elements of homogenization for inelastic solid mechanics, Homogenization techniques for composite media, Sanchez-Palencia. E and Zaoui A. (Eds.), Springer Verlag, Berlin, Germany, 193-278
- Suquet P. (1995)**, Overall properties of nonlinear composites: a modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda's nonlinear variational procedure, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris, Série Iib 320, 563-571
- Tabourot L., Fivel M., Rauch E. (1997)**, Generalised constitutive laws for f.c.c. single crystals, Materials Science and Engineering A, 234-236, 639-642
- Tang M., Kubin L.P., Canova G.R. (1998)**, Dislocation mobility and the mechanical response of B.C.C. single crystals : a mesoscopic approach, Acta Materialia, 46, 3221-3235
- Tang M., Devincere B., Kubin L.P. (1999)**, Simulation and modeling of forest hardening in body centre cubic crystals at low temperature, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 7, 893-908
- Teodosiu C. (1975)**, A physical theory of the finite elastic-viscoplastic behaviour of single crystals, Engineering transactions, 23, 151-184
- Valette-Brives E. (1992)**, Mise en forme d'aciers à l'état semi-solide : étude expérimentale et modélisation, Thèse de Doctorat de l'Ecole des Mines de St Etienne
- Vaucheret P., Galtier A. (2002)**, Etude de la microplasticité dans l'acier inoxydable 304 L, La Revue de la Métallurgie, Janvier, 63-69
- Verdier M., Brechet Y., Guyot P. (1998)**, Recovery of AlMg alloys: flow stress and strain-hardening properties, Acta Materialia, 47, 127-134
- Weiss B. (2002)**, Characterisation of mechanical and thermal properties of thin Cu foils and wires, Sensors and actuators, A99, 172-182
- Weng G.J. (1981)**, A self-consistent scheme for the relaxation behavior of metals, Journal of Applied Mechanics, 48, 779-784.
- Zaoui A. (2001)**, Plasticité : approches en champ moyen, Homogénéisation en mécanique des matériaux 2, Hermes Science, 17-44.
- Zbib H.M., Rhee M., Hirth J.P. (1998)**, On plastic deformation and the dynamics of 3D dislocations. International Journal of Mechanical Science 40, 113-127
- Zhao J.Z., De A.K., De Cooman B.C. (2001)**, Formation of the Cottrell atmosphere during strain aging of bake-hardenable steels, Metallurgical Transactions, 32A, 417-423

Zhao Z., Mao W., Roters F., Raabe D. (2004), A texture optimization study for minimum earing in aluminium by use of a texture component crystal plasticity finite element method, *Acta Materialia* 52, 1003-1012

ANNEXE A

III.2. Application au comportement dépendant de la vitesse de déformation et de la température

Berbenni S., Favier V., Lemoine X., Berveiller M. (2004a), Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures, *Materials Science and Engineering A*, 372, 128-136

ANNEXE B

III.3 Application à l'échauffement en fatigue

Analyse micromécanique et thermodynamique de l'évolution d'une boucle de dislocation

1. Introduction
2. Représentation du glissement plastique
3. Calcul de l'énergie libre de Helmholtz
 - 3.1 Formulation dans le cas général
 - 3.2 Formulation dans le cas de N inclusions siège d'une déformation plastique libre et sans interactions
4. Calcul de la force motrice d'évolution des boucles de dislocations

1. Introduction

Ce calcul a pour objectif de déterminer, à l'aide des outils de micromécanique s'appuyant sur la thermodynamique des processus irréversibles, la loi d'évolution de la variable glissement dans le domaine des faibles déformations et faibles contraintes en fonction de la contrainte appliquée et des variables internes retenues dans cette étude.

La première étape de ce calcul consiste à représenter les mécanismes élémentaires de déformation par l'évolution du diamètre de boucles de dislocations. Le glissement cristallographique classiquement décrit par l'unique variable γ est ici décrit par l'intermédiaire de la formation instantanée de boucles de dislocations de diamètre a . Il faut alors deux variables : a et le nombre moyen de boucles par unité de volume (Aubert et Berveiller, 1997). La deuxième étape implique le calcul de l'énergie libre de Helmholtz. Cette dernière correspond à l'énergie élastique stockée dans le cas d'une transformation à température constante. Elle provient des déformations élastiques liées, soit au chargement extérieur, soit aux contraintes internes. Cette énergie joue un rôle essentiel dans la résolution des problèmes de micromécaniques car elle permet de déterminer la force motrice.

2. Représentation du glissement plastique

Le glissement cristallographique provient notamment de l'expansion de boucles de dislocation. Il est ici représenté par deux variables : le diamètre moyen a des boucles et le nombre de boucles par unité de volume N' . La topologie retenue pour représenter les boucles de dislocations correspond à une inclusion ellipsoïdale aplatie (penny shape) à frontière mobile de diamètre a et d'épaisseur c constante. Le volume d'une boucle est calculé par l'équation B1 :

$$V_b = \frac{4}{3} \pi a^2 c \quad (\text{Equation B1})$$

Cette inclusion est le siège d'une déformation plastique uniforme et constante. Le glissement associé à une boucle vaut :

$$\gamma_b = \frac{b}{c} \quad \text{où } b \text{ est le vecteur de Burgers} \quad (\text{Equation B2})$$

Le glissement moyen $\bar{\gamma}$ sur le volume V dû à l'ensemble des boucles est égal à :

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{V} \int \gamma_b = N' V_b \gamma_b = f \gamma_b = N' \left(\frac{4}{3} \pi a^2 c \right) \frac{b}{c} \quad (\text{Equation B3})$$

où f est la fraction volumique de boucles de dislocations.

Le glissement moyen évolue si a évolue (dans la modélisation, la création de dislocations n'est pas considérée donc N' n'évolue pas) selon l'équation :

$$\dot{\bar{\gamma}} = N' \frac{8}{3} \pi a \dot{a} \frac{b}{c} \quad (\text{Equation B4})$$

On décrit ainsi l'évolution du glissement plastique en résolvant un problème de « particules » de déformation à frontière mobile.

Dans le domaine des faibles contraintes et faibles déformations auquel on s'intéresse ici, on suppose que a évolue avec sa force motrice selon un mécanisme visqueux linéaire, ce qui s'écrit :

$$\dot{a} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial \phi}{\partial a} \quad (\text{Equation B5})$$

où ϕ est l'énergie libre de Helmholtz par unité de volume ou encore énergie élastique par unité de volume.

3. Calcul de l'énergie libre de Helmholtz

3.1. Formulation dans le cas général

Soit un milieu de volume V élastique-(visco)plastique. On décompose la déformation totale en une déformation élastique et une déformation viscoplastique au sens large du terme :

$$\varepsilon_{ij}(r) = \varepsilon_{ij}^e(r) + \varepsilon_{ij}^{vp}(r) \quad (\text{Equation B6})$$

L'énergie libre d'Helmholtz du système par unité de volume en conditions isotherme et quasi-statique s'écrit :

$$\phi\left(E_{ij}, \varepsilon_{ij}^p(r)\right) = \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^e(r) dV \quad (\text{Equation B7})$$

où σ_{ij} et ε_{ij}^e sont respectivement les tenseurs des contraintes et des déformations élastiques. Dans le cas de propriétés élastiques homogènes, et en introduisant τ_{ij} le tenseur des contraintes internes telles que $\sigma_{ij}(r) = \Sigma_{ij} + \tau_{ij}(r)$ où Σ_{ij} est le tenseur des contraintes macroscopiques, on obtient une nouvelle écriture de l'énergie élastique en fonction des variables pilote et interne (Aubert et Berveiller, 1997) :

$$\phi\left(E_{ij}, \varepsilon_{ij}^{vp}(r)\right) = \frac{1}{2} \left(E_{ij} - E_{kl}^{vp}\right) C_{ijkl} \left(E_{kl} - E_{kl}^{vp}\right) - \frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^{vp}(r) dV \quad (\text{Equation B8})$$

où E_{ij} et E_{ij}^{vp} sont les tenseurs de déformations totales et viscoplastiques macroscopiques reliés par la relation : $\Sigma_{ij} = C_{ijkl} \left(E_{kl} - E_{kl}^{vp}\right)$. L'énergie élastique stockée apparaît bien comme la somme de deux termes, le premier provenant du chargement extérieur et le deuxième dû aux contraintes internes. Si on préfère prendre contrainte macroscopique Σ_{ij} comme variable pilote, on utilise l'énergie de Gibbs par unité de volume ou énergie complémentaire définie à partir de la transformée de Legendre :

$$\psi\left(\Sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}^{vp}(r)\right) = -\phi\left(E_{ij}, \varepsilon_{ij}^{vp}(r)\right) + \Sigma_{ij} E_{ij} = \frac{1}{2} \Sigma_{ij} C_{ijkl}^{-1} \Sigma_{kl} + \Sigma_{ij} E_{ij}^{vp} + \frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^{vp}(r) dV \quad (\text{Equation B9})$$

Pour aller plus loin dans le calcul, il faut maintenant se donner une représentation de la déformation viscoplastique en utilisant la description du paragraphe 2.

3.2 Formulation dans le cas de N inclusions siège d'une déformation plastique libre et sans interactions

Pour simplifier, on considère un seul système de glissement. Les boucles de dislocations de ce système sont peu nombreuses et sans interactions entre elles. On peut alors utiliser l'hypothèse d'un milieu dilué pour calculer les contraintes internes dans les boucles. Dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale, les contraintes internes sont uniformes et données par la résolution effectuée par Eshelby (1957) du problème de l'inclusion (Aubert et Berveiller, 1997) :

$$\tau_{ij}^I = -C_{ijmn} \left(I_{mnkl} - S_{mnkl}^E\right) \varepsilon_{ij}^{pI} \quad (\text{Equation B10})$$

où S_{ijkl}^E est le tenseur d'Eshelby dans le cas d'un ellipsoïde aplati et ε_{ij}^{pI} est la déformation plastique libre à l'intérieur de l'inclusion :

$$\varepsilon_{ij}^{pI} = R_{ij} \gamma_b = R_{ij} \frac{b}{c} \quad (\text{Equation B11})$$

On en déduit l'expression de la déformation plastique moyenne E_{ij}^p :

$$E_{ij}^p = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij}^p dV = f \varepsilon_{ij}^{pI} = f R_{ij} \frac{b}{c} \quad (\text{Equation B12})$$

L'énergie de Gibbs (Eqn. B9) s'écrit alors :

$$\psi\left(\Sigma_{ij}, f, \frac{b}{c}\right) = \frac{1}{2} \Sigma_{ij} C_{ijkl}^{-1} \Sigma_{kl} + f \left(\Sigma_{ij} + \frac{1}{2} \tau_{ij}^I \right) R_{ij} \frac{b}{c} \quad (\text{Equation B13})$$

Pour maintenant aller encore plus loin dans le calcul, on choisit un système de glissement défini par la normale au plan de glissement $n = (0 \ 0 \ 1)$ et la direction de glissement $m = (1 \ 0 \ 0)$. La déformation plastique dû à une boucle de dislocation dans ce système s'écrit donc :

$$\varepsilon_{ij}^{pI} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{b}{c} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{b}{c} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Equation B14})$$

La partie de l'énergie de Gibbs due aux boucles de dislocations ψ^b est égale à :

$$\psi^b = \psi - \frac{1}{2} \Sigma_{ij} C_{ijkl}^{-1} \Sigma_{kl} = f \left(2 \Sigma_{13} + \tau_{13}^I \right) R_{13} \frac{b}{c} \quad (\text{Equation B15})$$

L'expression du tenseur d'Eshelby dans le cas d'un ellipsoïde aplati dans la direction $e_3 = (0 \ 0 \ 1)$ ($a_1 = a_2 = a \gg c$) conduit à l'expression des contraintes internes suivante (Mura, 1982):

$$\tau_{13}^I = 2\mu \left(\frac{-4\pi^2 \frac{c}{a} + 2\nu\pi^2 \frac{c}{a} + 4\pi \left(\frac{c}{a}\right)^2 - 3\pi^2 \left(\frac{c}{a}\right)^3}{8\pi(1-\nu)} \right) \varepsilon_{13}^{pI} \quad (\text{Equation B16})$$

Après calcul, on obtient :

$$\psi^b(\tau, a) = N' \left[\frac{4}{3} \pi a^2 b^2 \Sigma_{13} R_{13} + \frac{1}{12} \frac{\mu c \pi b^2}{(1-\nu)} \left(2\pi \frac{a}{c} (\nu - 2) + 4 - 3\pi \left(\frac{c}{a}\right) \right) \right] \quad (\text{Equation B17})$$

4. Calcul de la force motrice d'évolution des boucles de dislocations

Nous cherchons maintenant à déterminer la loi d'évolution du diamètre moyen a des boucles de dislocations en supposant une relation linéaire visqueuse entre \dot{a} et la force motrice associée (Eqn. B5). Cette force motrice correspond à la dérivée partielle de l'énergie de Gibbs par rapport à la variable interne a :

$$\frac{\partial \psi}{\partial a} = \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial (\Sigma_{ij} C_{ijkl} \Sigma_{kl})}{\partial a}}_{=A} + \underbrace{\frac{\partial (\psi^{vp})}{\partial a}}_{=B} \quad (\text{Equation B18})$$

Etant donné que Σ_{ij} est la variable pilote, le terme A de l'équation B18 est nul. Le terme B vaut :

$$\frac{\partial (\psi^{vp})}{\partial a} = N' \left[\frac{8}{3} \pi b a \tau + \frac{1}{12} \frac{\mu c \pi^2 b^2}{(1-\nu)} \left(2(\nu-2) \frac{1}{c} + 3 \frac{c}{a^2} \right) \right] \quad (\text{Equation B19})$$

d'où

$$\dot{a} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial (\psi^{vp})}{\partial a} = \frac{N'}{\eta} \left[\frac{8}{3} \pi b a \tau + \frac{1}{12} \mu b^2 \frac{\pi^2}{(1-\nu)} \left(2(\nu-2) + 3 \left(\frac{c}{a} \right)^2 \right) \right] \quad (\text{Equation B20})$$

Une estimation des valeurs des deux termes du crochet de l'équation B20 montre que premier terme linéaire en τ est du même ordre de grandeur que le deuxième terme pour les faibles valeurs de τ puis devient prépondérant lorsque τ augmente (Tab. B1).

μ (MPa)	ν	$c \approx b$ (m)	a_0 (m)	$\frac{1}{12} \mu b^2 \frac{\pi^2}{(1-\nu)} \left(2(\nu-2) + 3 \left(\frac{c}{a_0} \right)^2 \right)$	$\frac{8}{3} \pi b a_0 \tau$
80000	0,3	$2,5 \cdot 10^{-10}$	$2,5 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-14}$	τ [10-100 MPa]
					$[2,5 \cdot 10^{-14} - 5,2 \cdot 10^{-13}]$

Tableau B1 : Estimation de la valeur des termes utilisés dans l'équation B20

Afin de déterminer la loi d'évolution visqueuse linéaire du diamètre des boucles a et du glissement γ , nous ne retenons que le terme variant linéairement avec la contrainte. On obtient alors :

$$\dot{a} = \frac{8}{3} \frac{\pi N' b a}{\eta} \tau \quad (\text{Equation B21})$$

L'équation B21 montre que sous l'action d'une contrainte alternée, la taille de la boucle oscille autour de sa taille initiale a_0 . D'après l'équation B5, la loi d'évolution du glissement moyen est donnée par :

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{\eta} \left(\frac{8}{3} \pi N' b a \right)^2 \tau \quad (\text{Equation B22})$$

Dans l'expression B22, on reconnaît la densité de dislocation : $\rho = N' a$. L'équation B22 s'écrit donc encore :

$$\dot{\gamma}^{(g)} = \frac{I}{\eta'} (\rho b)^2 \tau \quad \text{où } \eta' = \frac{3}{8\pi} \eta \quad (\text{Equation B23})$$

On peut remarquer que la vitesse de glissement, liée à l'oscillation des boucles de dislocation, augmente avec la densité de dislocation. Il serait donc intéressant de vérifier ces dépendances expérimentalement (§ III.3). Ce calcul néglige cependant les interactions entre dislocations puisqu'on suppose les boucles isolées. Il néglige donc l'effet de la densité des points d'ancrage sur la vibration des lignes de dislocations. Notons par ailleurs que ce calcul prend en compte un frottement visqueux mais n'intègre pas la configuration particulière des dislocations piégées dans les vallées de Peierls, typique des structures CC.

ANNEXE C

III.4 Modélisation de l'effet Bake-Hardening

Berbenni S., Favier V., Lemoine X., Berveiller M. (2004c), A micromechanical approach to model the bake hardening effect for low carbon steels, *Scripta Materialia*, 51, 303-308

ANNEXE D

IV.2.2 Approximation autocohérente classique

G'Sell C., Dahoun A., Favier V., Hiver J.M., Philippe M.J., Canova G.R. (1997), Microstructure transformation and plastic behavior of isotactic polypropylene under large plastic deformation, *Polymer Engineering and Science*, 37, 1702-1715

ANNEXE E

IV.2.3.2 Modèle à champs translatés

Sabar H., Berveiller M., Favier V., Berbenni S. (2002), A new Class of Micro-Macro Models for elastic-viscoplastic heterogeneous Materials, *International Journal of Solids and Structure*, 39, 3257-3276.

ANNEXE F

IV.3.2.2 Modélisation et simulation des effets de percolation mécanique – Notion de fraction volumique effective

Favier V., Dendievel R., Canova G.R., Cavallé J.Y., Gilormini P. (1997a), Simulation and modelling of 3D percolating structures: case of latex matrix reinforced by a network of cellulose fibers, *Acta Materialia*, 45, 1557-1563

ANNEXE G

IV.3.3.2 Comportement des alliages métalliques à l'état semi-solide

Description de l'évolution de la microstructure des semi-solides lors de la mise en forme

Favier V., Rouff C., Bigot R., Berveiller M., Robelet M. (2004a), Micro-macro modeling of the isothermal steady-state behaviour of semi-solids, *International Journal of Forming Processes*, 7, 177-194

Description de l'évolution de la microstructure des semi-solides lors de la mise en forme

1. Rappels bibliographiques
2. Analyse des variables internes f_I , f_A , f_A^s de la modélisation micromécanique
 - 2.1 Fraction d'inclusion f_I et fraction de zone active f_A
 - 2.2 Fraction de solide dans la zone active f_A^s
 - 2.2.1 Essais isothermes (à fraction de solide constante)
 - 2.2.2 Essais anisothermes (avec variation de la fraction de solide)

1. Rappels bibliographiques

Le comportement mécanique d'un matériau semi-solide est fortement contrôlé par sa fraction de solide et sa microstructure. A faibles vitesses de déformation, les particules solides s'agglomèrent et forment un réseau tridimensionnel plus ou moins interconnecté selon la fraction de solide et la globularité des particules solides. Une partie du liquide se trouve ainsi piégée entre des agglomérats solides et ainsi ne participe plus à la déformation (Ito et al, 1992). D'un point de vue mécanique, elle contribue à "augmenter" la fraction de solide qui est alors remplacée par une fraction de solide effective f_s^{eff} définie par l'équation :

$$f_s^{eff} = \frac{\text{volume de particules solides} + \text{volume de liquide piégé}}{\text{volume total}} = f_s + f_{lpiégé} \quad (\text{Equation G1})$$

Pour mieux comprendre le rôle de cette fraction de solide effective, Perez et al (2000) ont simulé la formation de clusters solides résultant d'un équilibre dynamique entre les mécanismes d'agglomération et de désagglomération. Ils ont ensuite calculé la fraction de liquide piégé pour différentes vitesses de cisaillement et ont clairement mis en évidence la relation entre l'évolution de la viscosité et celle de la fraction de solide effective avec la vitesse de cisaillement. Étrangement, dans les modèles analytiques proposés, l'évolution de cette quantité n'est pas modélisée directement. Une autre variable interne structurale notée s est introduite (Kumar et al, 1993) :

$$f_s^{eff} = f_s (1 + 0.1s) \quad (\text{Equation G2})$$

La définition de cette variable reste cependant assez floue - Kumar et al (1994b) souligne la difficulté de la rattacher à un paramètre microstructural quantifiable expérimentalement - mais elle donne une mesure du degré d'agglomération (défini comme étant le nombre de pontages par particule solide) du réseau solide. L'approche la plus physique de la loi d'évolution de s est donnée par ces mêmes auteurs (Kumar et al, 1994) et repose sur le comportement d'une paire de particules :

$$\dot{s} = H(T, f_s)(1 - s) - R(T, f_s)s\dot{\gamma}^n \quad (\text{Equation G3})$$

où $H(T, f_s)$ et $R(T, f_s)$ sont les deux fonctions qui définissent respectivement la cinétique d'agglomération et de désagglomération. Elles ont été écrites en considérant que (Martin et Orgéas, 2002) :

- « La formation d'une liaison entre deux particules nécessite une collision et la formation d'un joint de grains non mouillé par le liquide,
- La destruction d'une liaison nécessite la déformation visqueuse jusqu'à rupture du pont solide entre les deux particules ».

Dans le cas de la désagglomération, la rupture d'un pontage est supposée se produire lorsque le cisaillement atteint une valeur critique. On a alors (Kumar et al, 1994b) :

$$\dot{s} = -\frac{\dot{\gamma}_{\text{pontage}}}{\gamma_c} s \quad (\text{Equation G4})$$

Dans le paragraphe suivant, nous analysons les liens éventuels entre f_s^{eff} , s et les variables internes introduites dans notre modélisation : la fraction d'inclusion f_I , la fraction de zone active f_A et la fraction de solide dans la zone active f_A^S (§ IV.3.3.2.2).

2. Analyse des variables internes f_I , f_A , f_A^S de la modélisation micromécanique

2.1 Fraction d'inclusion f_I et fraction de zone active f_A

Dans la représentation de la microstructure des semi-solides proposée au paragraphe IV.3.3.2.2, l'inclusion représente la zone qui participe peu à la déformation. Elle renferme les particules solides (à l'exclusion des pontages) et le liquide piégé. D'un point de vue microstructural, on constate une similarité avec le concept de fraction de solide effective définie par l'équation G1 et celui de fraction d'inclusion. D'un point de vue mécanique, elles ne sont cependant pas définies de la même manière : la fraction de solide effective est la fraction de solide qui participe efficacement à la rigidité du système ou aux transferts de charge (telle que je l'ai défini également dans ma thèse) alors que la fraction d'inclusion est la fraction qui participe peu à la déformation. Est-ce équivalent ? Notons par ailleurs, que contrairement à l'étude sur les composites renforcés par des whiskers de cellulose, ni la fraction d'inclusion, ni la fraction de solide effective ne correspondent à la fraction de solide géométriquement percolante (Tab. G1).

Le tableau G1 compare les valeurs des fractions d'inclusion et de solide effective calculées à partir des travaux de Perez et al (2000) en fonction de la vitesse de cisaillement. On constate que, selon le calcul de Perez et al, et comme attendu, la fraction de solide effective diminue avec la vitesse de cisaillement. En revanche, le modèle que nous proposons prévoit une fraction d'inclusion constante avec la vitesse de cisaillement. Cela ne signifie pas qu'il n'y a pas d'évolution de la microstructure mais que celle-ci se répercute uniquement dans la distribution des phases liquide et solide entre l'inclusion et la zone active. Ainsi, la fraction d'inclusion reste constante, c'est sa viscosité qui diminue avec la vitesse de cisaillement. Cette description, si elle suffit d'un point de vue mécanique, n'est clairement pas satisfaisante pour traduire l'évolution microstructurale. En particulier, elle ne

permet pas de prendre en compte le cas extrême où tout le liquide est libre et participe entièrement à la déformation. Prendre en compte l'évolution de la fraction d'inclusion et par conséquent de la zone active avec la vitesse de cisaillement est donc une voie d'amélioration du modèle pour faire correspondre "phases" microstructurales et "phases" mécaniques.

Vitesse de cisaillement généralisé $\dot{\gamma} = \sqrt{3}\dot{\epsilon}_{eq}$	Fraction de zone active f_A (Favier et al, 2004a)	Fraction d'inclusion $f_I = 1 - f_A$	Fraction de solide effective f_s^{eff} (D'après Fig.12 de Perez et al, 2000)	Fraction géométriquement percolante ψ (Favier et al, 1995a) $\psi = f_s \left(\frac{f_s - f^c}{1 - f^c} \right)^{0.4}$
$\dot{\gamma} = 10s^{-1}$	0.007	0.993	1.25 \rightarrow 1	0.24 avec $f^c = 0.3$ (seuil de percolation)
$\dot{\gamma} = 100s^{-1}$	0.007	0.993	0.75	
$\dot{\gamma} = 1000s^{-1}$	0.007	0.993	0.5	

Tableau G1 : Estimation des fractions volumiques de zone active et d'inclusion selon le modèle micromécanique et de la fraction de solide effective selon le modèle de Perez et al (2000) pour une taille initiale de particules solides de 100 μm et une fraction de solide de 0.5

(Remarque : la valeur étonnante de f_s^{eff} trouvée pour $\dot{\gamma} = 10s^{-1}$ montre que ce type de simulation ne peut être étendu à des fractions de solide "trop" élevées).

2.2 Fraction de solide dans la zone active f_A^s

2.2.1 Essais isothermes (à fraction de solide constante)

La fraction de solide dans la zone active correspond physiquement à la fraction volumique de pontages et donc donne une mesure du degré d'agglomération du squelette solide, au même titre que la variable interne s . Elle est déterminée lorsque la microstructure atteint un état d'équilibre résultant d'une compétition entre les mécanismes d'agglomération et de désagglomération. Elle dépend de la fraction de solide f^s et de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}$ selon les équations suivantes (voir Eqn. IV.3.1) :

$$f_A^s = 0 \quad \text{pour } f^s \leq f^c$$

$$f_A^s = \frac{f^s}{f^s + D(1 - f^s)(\dot{\gamma})^n} \quad \text{pour } f^s > f^c$$

où f^c est le seuil critique de percolation de la phase solide, D et n sont deux paramètres matériaux.

Lors des opérations de mise en forme qui sont très rapides, cet état d'équilibre de la microstructure n'est en général pas atteint. La variable interne f_A^s , calculée par l'équation G5, reflète donc mal l'état microstructural du matériau. Pour améliorer cette représentation, il est nécessaire de

prendre en compte la loi d'évolution de cette variable en fonction des cinétiques d'agglomération et de désagglomération. Il est admis que la cinétique de désagglomération est beaucoup plus élevée que celle d'agglomération (Kumar et al, 1994b) de telle manière que cette dernière puisse être négligée dans un premier temps. Suivant les travaux de Kumar et al (1994a) et l'équation G4, la loi d'évolution de f_A^S peut être écrite comme :

$$\dot{f}_s^A = -\frac{\dot{\gamma}_{pontage}}{\gamma_c} f_s^A \quad (\text{Equation G6})$$

où $\dot{\gamma}_{pontage} = \sqrt{3}\dot{\epsilon}_{eqs}^A$ est calculé à partir des relations de localisation (Favier et al, 2004).

La figure G1 donne l'évolution de la contrainte en fonction de la déformation pour un essai de compression effectué à vitesse constante de déplacement de la traverse. f_A^S est calculée (i) en supposant que la microstructure a atteint instantanément son état stationnaire et (ii) en prenant en compte la cinétique d'évolution de la microstructure avec la déformation. Dans les deux cas, on observe une chute de la contrainte lorsque f_A^S atteint le seuil de percolation de 0.4. Cette valeur correspond à la perte de rigidité du squelette solide. La prise en compte de la cinétique de désagglomération conduit à décaler la chute vers de plus grandes déformations et à réduire son amplitude. En effet, dans le cas (i), f_A^S dépend de manière phénoménologique de la vitesse de cisaillement macroscopique. Celle-ci, qui augmente progressivement avec la déformation, entraîne une diminution graduelle de f_A^S (Fig. G2) et donc de la viscosité et de la contrainte qui deviennent très faibles. Au contraire, dans le cas (ii), f_A^S dépend de la vitesse de cisaillement dans les pontages. Si l'évolution de cette dernière suit l'évolution de la vitesse macroscopique au début de l'essai, dès que f_A^S atteint 0.4, on observe une forte diminution de la vitesse de cisaillement des pontages : c'est au tour du liquide libéré de participer à la déformation. Les cisaillements dans les pontages restant ne sont alors plus suffisants pour entraîner la rupture de ces liens solides et f_A^S n'évolue plus (Fig. G2). Le semi-solide se déforme ainsi à microstructure constante. La contrainte est alors régit par les lois visqueuses des solides et liquides et augmente à nouveau avec la déformation. Notons, que la présence d'un tel pic est tout à fait conforme aux observations expérimentales et est généralement attribué à la destruction d'agglomérats solides (Loué et al, 1992 ; Kirkwood, 1994 ; McLelland et al, 1997 ; Liu et al, 2003).

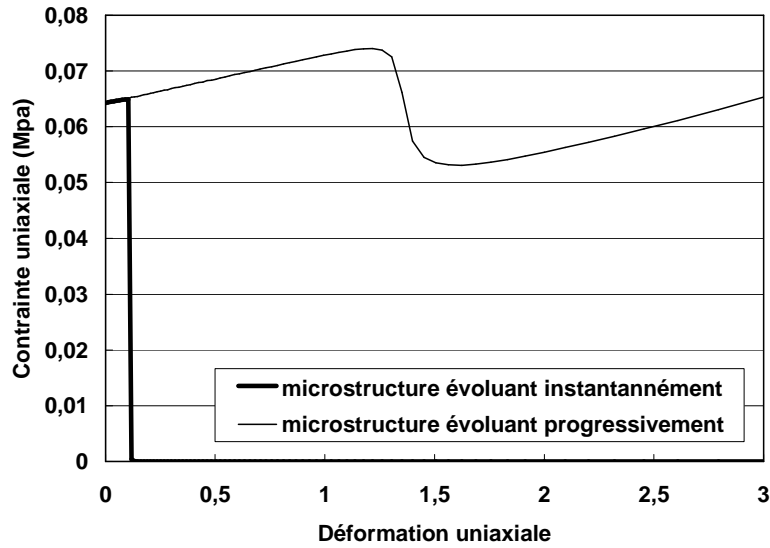


Figure G1 : Evolution de la contrainte en fonction de la déformation pour un essai de compression isotherme

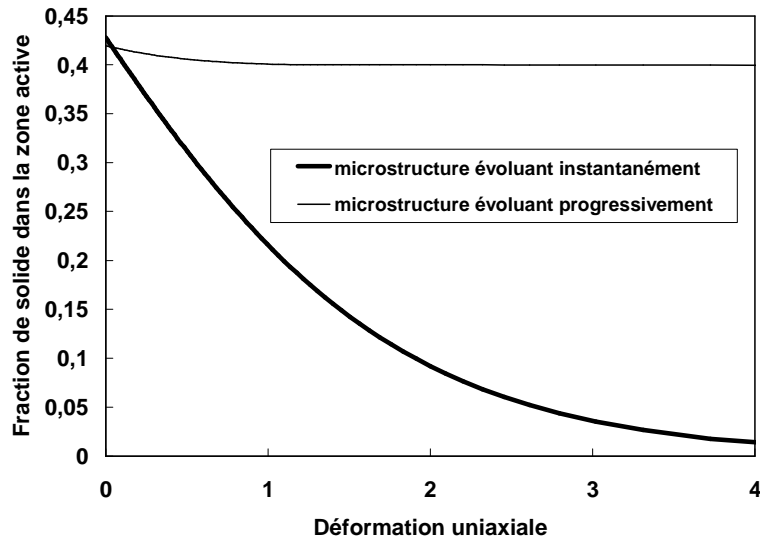


Figure G2 : Evolution de la fraction de solide dans la zone active en fonction de la déformation lors d'un essai de compression isotherme

2.2.2 Essais anisothermes (avec variation de la fraction de solide)

L'équation G6 néglige la cinétique d'agglomération devant celle de désagglomération. Cette hypothèse est raisonnable lorsque la fraction de solide reste constante au cours de la déformation. En revanche, dès que celle-ci varie, par exemple lorsque le lopin semi-solide "chaud" rentre en contact avec les outils "froids", il est nécessaire de décrire l'agglomération associée à la solidification. Ainsi, un incrément de température conduit à une augmentation de la fraction de solide f_s et par conséquent de la fraction de solide active f_A^S selon l'équation G7 :

$$\dot{f}_s^A = a(1 - f_s^A) f_s(T) \dot{T}^b - (1 - f_s) \frac{\dot{\gamma}_{pontage}}{\gamma_c} f_s^A \quad (\text{Equation G7})$$

où a et b sont des paramètres à identifier. $f_s(T)$ est déterminée à partir d'une courbe de cinétique de solidification. A titre d'exemple, la figure G3 illustre l'influence d'un refroidissement du matériau sur la réponse du semi-solide en compression où les évolutions de f_s et f_A^S avec la température ont été prises en compte. Le comportement est fortement modifié par l'augmentation de la fraction de solide, l'effet de la microstructure devenant alors secondaire.

On comprend alors la difficulté d'interpréter la réponse du semi-solide lorsque celui-ci subit des évolutions thermiques importantes. Mettre au point des outils numériques pour découpler l'effet des échanges thermiques et l'effet de la microstructure est une voie. Elle est complexe car elle demande de connaître aussi le comportement thermique des systèmes étudiés mais cela est sans doute inévitable.

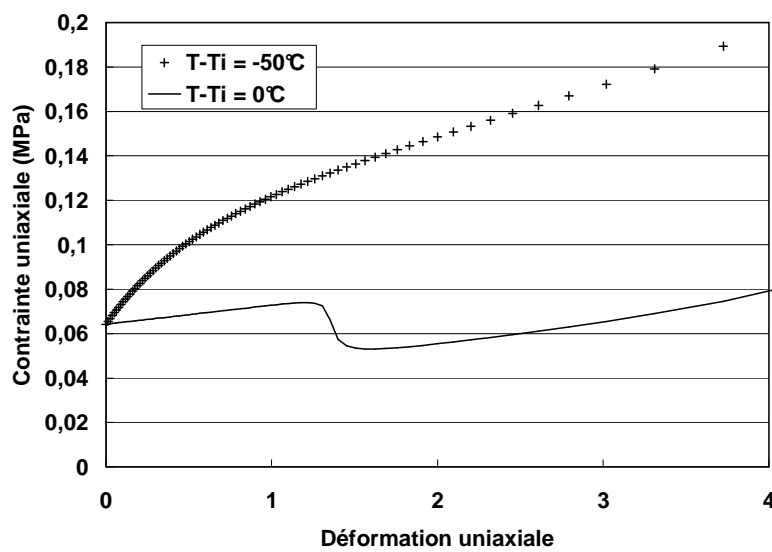


Figure G3 : Evolution de la contrainte en fonction de la déformation pour un essai de compression isotherme et anisotherme

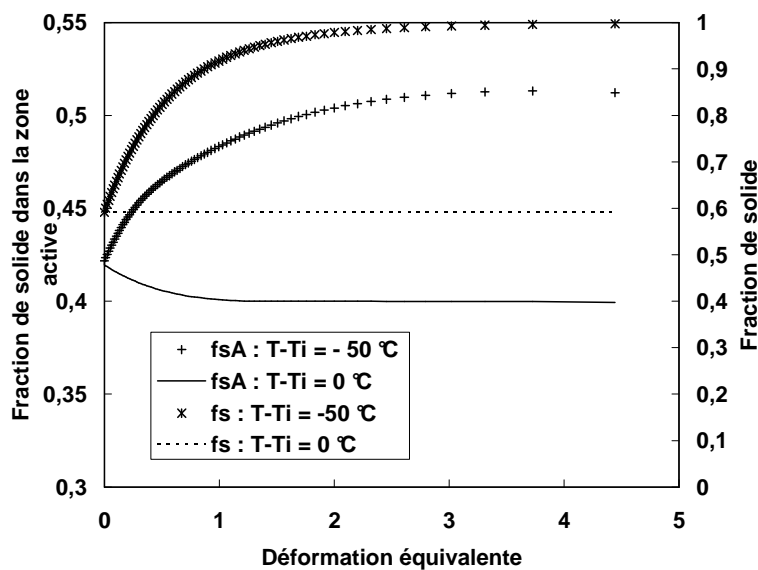


Figure G4 : Evolution de f_s et f_A^S (Eqn. G7) en fonction de la déformation au cours d'un essai de compress

