Modélisation multi-échelle du comportement non linéaire et hétérogène en surface de l'acier AISI H11

Ahmed Zouaghi

▶ **To cite this version:**

Ahmed Zouaghi. Modélisation multi-échelle du comportement non linéaire et hétérogène en surface de l'acier AISI H11. Matériaux. Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, 2015. Français. NNT : 2015EMAC0008 . tel-01304772

HAL Id: tel-01304772

https://theses.hal.science/tel-01304772

Submitted on 20 Apr 2016

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

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

Université Fédérale
Toulouse Midi-Pyrénées

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

l'École Nationale Supérieure des Mines d'Albi-Carmaux conjointement avec l'INP Toulouse

---

Présentée et soutenue le *31/03/2015* **par :**

AHMED ZOUAGHI

Modélisation multi-échelle du comportement non linéaire et hétérogène en surface de l'acier AISI H11

JURY

M. Georges CAILLETAUD, Professeur, Mines ParisTech	Rapporteur
M. Olivier CASTELNAU, Directeur de recherche, Arts et Métiers ParisTech	Rapporteur
M. Khemais SAANOUNI, Professeur, UTT Troyes	Président
M. Farhad RÉZAÏ-ARIA, Professeur, École des Mines d'Albi-Carmaux	Directeur
Mme. Adriana SOVEJA, Maître de conférences, ISAE	Co-directeur
M. Vincent VELAY, Maître assistant, École des Mines d'Albi-Carmaux	Examinateur

---

École doctorale et spécialité :
MEGEP : Génie mécanique, mécanique des matériaux
Unité de Recherche :
Institut Clément Ader (FRE CNRS 3687)
Directeur(s) de Thèse :
Farhad RÉZAÏ-ARIA et Adriana SOVEJA
Rapporteurs :
Georges CAILLETAUD et Olivier CASTELNAU

Remerciements

"Il sera ici question de science, ce qui n'exclut pas la poésie."

Hubert Reeves

L'aboutissement de cette thèse de doctorat est avant tout le fruit d'un parcours jalonné avec la contribution de bon nombre de personnes marquantes. Leur accompagnement a été souvent bien au-delà de l'aspect scientifique, d'où l'exceptionnelle richesse humaine de ce travail. Pleinement conscient de la forte valeur ajoutée de leur contribution et accompagnement, je consacrerais les prochaines lignes pour remercier en toutes sincérité les personnes ayant fait part de cette expérience. Je me dois également présenter mes excuses par avance pour tout *oubli*, et ce, en raison de la liste bien exhaustive...

Mené au sein de l'Institut Clément Ader (ICA) à l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE) et à l'École des Mines d'Albi-Carmaux (Mines Albi), ce travail à été achevé et récompensé devant un jury d'exception. Je souhaiterais donc lui exprimer toute ma gratitude pour avoir bien porté attention à ce travail. Je voudrais particulièrement remercier dans un premier lieu Khemais Saanouni, Professeur à l'Université de Technologie de Troyes (UTT) d'avoir assurer la présidence du jury et de son grand intérêt au contenu scientifique de cette thèse de doctorat. Je tiens également à adresser mes remerciements les plus sincères à Georges Cailletaud, Professeur à Mines ParisTech, et Olivier Castelnau, Directeur de recherche aux Arts et Métiers ParisTech, de m'avoir fait l'honneur d'examiner ce travail avec grand intérêt. Je les remercie pour toutes les discussions fructueuses ayant contribuer à la valorisation scientifique de cette thèse de doctorat.

L'entreprise de cette thèse de doctorat est une épopée fédérative. Son histoire a été partagée avec une équipe d'encadrants qui est loin d'être dénué d'une extrême richesse humaine. Je voudrais dans un premier lieu exprimer toute ma reconnaissance à Farhad Rézaï-Aria qui a assuré la direction de cette thèse de doctorat. Son soutien, sa rigueur intellectuelle et ses conseils avisés ne m'ont jamais fait défaut. Je tiens également à remercier Adriana Soveja pour ses positions constructives, son rôle fédérateur mais surtout pour son apport de la dose humaine dont ce travail avait besoin. Enfin, je témoigne toute ma gratitude à Vincent Velay qui, au-delà de son apport scientifique, n'a jamais hésité à mettre en œuvre toute son énergie pour nourrir le climat d'effervescence intellectuelle du consensus. *"...Un grand merci à vous !"*

Parce que ce travail a fait l'objet de bon nombre de développements expérimentaux et mathématiques, j'aimerais saluer ceux qui y ont contribué et les ont partagé de plus près. Je fais notamment référence à Mohammed Cheikh, Thomas Pottier, Pascal Lamesle,

Thomas Papaix, Serge Tovar, Sabine Le Roux, Frédéric Lachaud, Thierry Martin, Nicolas Renon (Institut de Mathématiques de Toulouse) et Cédric Seguineau (Centre National d'Études Spatiales). Leur implication m'a permis de saisir la dimension charnelle et vivante de l'ensemble de ces développements et de rendre ainsi la réussite de ce projet possible.

L'environnement propice du bon déroulement de cette thèse de doctorat fut le fruit de la dynamique collective au sein de l'Institut Clément Ader. Je tiens donc à témoigner toute ma reconnaissance à l'ensemble des permanents que j'ai eu l'opportunité de côtoyer durant mon ces années de travail, en particulier Laurent Michel à qui je dois énormément pour mes premiers pas dans la recherche. Avec une ambition d'être assez exhaustif, je remercie Jacques Huet, Rémy Chieragatti, Catherine Mabru, Christine Espinosa, Robert Piquet, Frédéric Lachaud, Miguel Charlotte, Joseph Morlier, Anis Hor et Marie-Odile Monsu du côté toulousain ainsi que Thierry Cutard, Jean-José Orteu, Fabrice Schmidt, Luc Penazzi, Vanessa Vidal, Christine Boher, Gerard Bernhart, Mehdi Salem, Denis Delagnes et Esther Ramirez du côté albigeois, sans oublier les personnes des centres de documentation et surtout Alban Azais (pour la langue germanique).*"...Merci à tous !"*

L'épopée de cette thèse de doctorat fut en outre riche de rencontres et de moments de bonheur avec des doctorants pleins de joie de vivre. Je salue toute cette élite qui a su apporter la bonne humeur et le sourire quotidien à l'univers de la recherche scientifique. Je pense notamment à Florent (mon collègue de bureau), Irène, Grégory, Samuel, Sylvain, Jean-Philippe, Thomas, Marion, Manel, Laurent, Paul, Jérémy, Paul, Myriam, Élodie, Johnathan *"...Que ceux qui ne trouveraient pas ici leur nom n'en prennent pas ombrage !"*

Parce que certaines traditions ne se perdent jamais, je garde ces remerciements pour la fin... Je pense fortement à ma mère, mon père et ma sœur .*"...Un immense merci !"*. Une pensée également à toute ma famille ainsi qu'à l'ensemble de mes proches qui ont fait preuve de soutien tout au long de ce parcours. Enfin pour finir, je remercie celle qui m'a épaulé, motivé, encouragé pendant toutes ces années, celle qui me ramenait la joie de vivre, mon épouse Ikram. *"...Merci pour ta patience et ton soutien continu !"*

Table des matières

Introduction **1**
Modélisation multi-physique et multi-échelle . . . 1
Progrès des techniques expérimentales . . . 3
Contexte scientifique et industriel . . . 4
Contexte industriel et enjeux économiques . . . 4
Intérêt et contexte technico-scientifique . . . 5
Organisation du manuscrit . . . 8

I Approche expérimentale **11**

1 Matériau et surface **13**
1.1 Les aciers à outils : rappels . . . 14
1.2 L'acier AISI H11 : une structure martensitique . . . 15
1.2.1 Composition chimique . . . 16
1.2.2 Traitements thermiques . . . 17
1.2.2.1 Opérations d'un traitement usuel . . . 17
1.2.2.2 Application à une nuance « SMV3 » à 47 HRC . . . 21
1.2.3 Microstructure . . . 21
1.2.3.1 Microstructure martensitique : aspects théoriques . . . 21
1.2.3.2 Caractérisation expérimentale . . . 28
1.2.4 Comportement mécanique . . . 33
1.2.4.1 État de l'art . . . 34
1.2.4.2 Essais cycliques complémentaires . . . 37
1.2.4.3 Mécanismes physiques élémentaires . . . 40
1.3 Surface . . . 41
1.3.1 Procédé expérimental . . . 42
1.3.1.1 Banc d'essais . . . 42
1.3.1.2 Conditions de chargement . . . 43
1.3.1.3 Traitement de données . . . 44
1.3.2 Caractérisation de l'état de surface . . . 45

2 Comportement mécanique en surface : investigation expérimentale 53
2.1 État de l'art . . . 54
2.1.1 Approches à champs moyens . . . 54
2.1.2 Approches à champs complets . . . 55
2.1.3 Approche retenue . . . 57
2.2 Technique de corrélation d'images numériques . . . 57
2.2.1 Coefficients de corrélation . . . 58
2.2.2 Transformation matérielle . . . 60
2.2.3 Interpolation subpixel . . . 61
2.2.4 Mise en œuvre numérique . . . 62
2.2.5 Calcul des déformations . . . 63
2.3 Essais mécaniques in-situ . . . 65
2.3.1 Dispositif expérimental . . . 65
2.3.2 Procédure expérimentale . . . 66
2.4 Analyse du comportement mécanique . . . 68
2.4.1 Cas du chargement monotone . . . 68
2.4.2 Cas du chargement cyclique . . . 75
2.5 Notion de volume élémentaire représentatif . . . 79
2.5.1 Définition . . . 79
2.5.2 Identification expérimentale . . . 80

II Traitement numérique 83

3 Approches multi-échelles 85
3.1 Approches phénoménologiques . . . 86
3.2 Équations constitutives à une échelle locale . . . 87
3.2.1 Approches indépendantes du temps . . . 90
3.2.2 Approches dépendantes du temps . . . 91
3.2.3 Quelques modèles de comportement locaux . . . 92
3.2.3.1 Modèles à base de densité de dislocations . . . 93
3.2.3.2 Modèles phénoménologiques . . . 97
3.3 Techniques de transition d'échelles . . . 102
3.3.1 Quelques définitions intuitives . . . 102
3.3.2 Approches en champs moyens . . . 103
3.3.2.1 Modèles d'homogénéisation en linéaire . . . 104
3.3.2.2 Modèles d'homogénéisation en non linéaire . . . 105
3.3.3 Approches en champs complets . . . 113
3.3.4 Couplage de techniques de transition d'échelle . . . 115
3.4 Modèles à gradients . . . 117

4 Modélisation numérique des champs mécaniques locaux en surface 121
4.1 Modèles de comportement : approche thermodynamique . . . 122
4.1.1 Quelques aspects fondamentaux . . . 123

4.1.2 Formalisme thermodynamique des équations constitutives 128
4.1.2.1 Potentiels énergie libre d'Helmholtz et lois d'état 128
4.1.2.2 Potentiels des dissipations et équations d'évolution 130
4.2 Intégration numérique des modèles 133
4.2.1 Quelques aspects généraux : revue des schémas d'intégration numérique 133
4.2.2 Algorithme d'intégration numérique 136
4.2.3 Validation de l'algorithme d'intégration numérique 142
4.3 Identification des paramètres du matériau 144
4.3.1 Base de données expérimentales 145
4.3.2 Procédure d'identification 145
4.3.3 Résultats de l'identification 148
4.4 Pré-traitement des calculs par éléments finis 149
4.4.1 Génération de microstructure virtuelle 149
4.4.2 Génération des orientations cristallographiques 153
4.4.3 Procédure de maillage 153
4.4.4 Définition des chargements 155
4.4.5 Parallélisation des calculs 156
4.5 Investigation des champs mécaniques locaux 156
4.5.1 Cas du chargement monotone 157
4.5.1.1 Effet de la morphologie des lattes en surface 157
4.5.1.2 Effet de la texture cristallographique en surface 164
4.5.1.3 Effet de l'écrouissage en surface 171
4.5.1.4 Effet du profil de surface 175
4.5.1.5 Effet de la forme des équations constitutives 180
4.5.2 Cas du chargement cyclique 182
4.5.2.1 Effet de la morphologie des lattes en surface 182
4.5.2.2 Effet de la texture cristallographique en surface 184
4.5.2.3 Effet de l'écrouissage en surface 186
4.5.2.4 Effet du profil de surface 188

5 Extension vers les transformations finies : formulations et applications 193
5.1 Cinématique des transformations finies 194
5.2 Thermodynamique des équations constitutives en transformations finies . . 198
5.2.1 Revue des aspects fondamentaux en transformations finies 198
5.2.2 Formalisme thermodynamique en transformations finies 203
5.3 Intégration numérique des modèles multi-échelles 205
5.3.1 Description spatiale : notion de dérivée objective 205
5.3.2 Algorithme d'intégration numérique 207
5.4 Investigation des champs mécaniques locaux 212
5.4.1 Effet de la morphologie des lattes en surface 212
5.4.2 Effet de la texture cristallographique en surface 217
5.4.3 Effet de l'écrouissage en surface 221
5.4.4 Effet du profil de surface 225

Conclusions et perspectives **229**
Conclusions générales . . . 229
Investigation expérimentale . . . 229
Traitement numérique . . . 231
Perspectives . . . 232
Approches expérimentales multi-échelles . . . 233
Modélisation multi-physique et multi-échelles . . . 233

A Notations **255**
A.1 Notation tensorielles . . . 255
A.2 Opérations tensorielles . . . 255
A.3 Variables et paramètres . . . 256

B Orientations et désorientations cristallographiques **259**
B.1 Orientations cristallographiques . . . 259
B.2 Désorientations cristallographiques . . . 263
B.3 Représentation graphique des orientations cristallographiques . . . 264
B.4 Relation d'orientations KS . . . 265

C Intégration numérique du modèle de Méric-Cailletaud dans la librairie Z-MAT **267**
C.1 Méthode-θ d'intégration numérique . . . 267
C.2 Éléments d'intégration numérique du modèle dans la librairie Z-MAT . . . 268

Table des figures

1 Représentation schématique des possibilités de modéliser le comportement mécanique d'un volume de matière de taille donnée pendant un temps physique (dans le cas des modélisations dynamiques). Les frontières tracées en traits pleins représentent les limites de validité des modèles. Les pointillés montrent les limites actuelles imposées par la puissance des calculateurs [1] . 2
2 Modes de dégradation des outillages de mise en forme d'après [2] 5
3 Écoulement plastique en surface d'un outillage en acier AISI H11 observé au MEB [3] 7

1.1 Diagramme TRC (transformations en refroidissement continu) de l'acier AISI H11 (données Aubert & Duval) 19
1.2 Évolution de la dureté finale de l'acier AISI H11 en fonction de la température du second revenu (données Aubert & Duval) 20
1.3 Processus de transformation martensitique de par les joints de grains austénitiques [4] 22
1.4 Principaux aspects morphologiques des aciers martensitiques [5] 23
1.5 Évolution de l'aspect morphologique de la structure martensitique en fonction de la teneur (massique) en carbone d'après [6] 23
1.6 Schématisation de la transformation displacive d'une structure austénitique via une déformation d constituée d'un cisaillement et d'une translation (liée à l'allongement de la structure martensitique) d'après [7] 24
1.7 Identification des orientations des plans d'habitat et des variants martensitiques par la méthode d'analyses de traces au MET [8] 25
1.8 Schématisation du mécanisme de transformation de Bain d'après [9] 26
1.9 Structure martensitique en lattes et mise en évidence des anciens joints de grains austénitiques de l'acier AISI H11 au MEB 28
1.10 Structure d'un ancien grain austénitique de l'acier AISI H11 observée au MEB 29
1.11 Répartition spatiale des pixels mal indexés ou isolés dans la zone d'analyses . 30
1.12 Répartition spatiale de la netteté des bandes de Kikuchi dans la zone d'analyses 31
1.13 Répartition spatiale des désorientations locales dans la zone d'analyses . . . 31
1.14 Analyses statistiques des données de la granulométrie de l'acier AISI H11 . . 32
1.15 Répartitions spatiales des orientations selon les directions principales du repère de la plaque et figures de pôles inverses associées 33

1.16 Courbe de traction quasi-statique uniaxiale de l'acier AISI H11 à température ambiante d'après [3] . . . 34
1.17 Comportement cyclique de l'acier AISI H11 à température ambiante ($\Delta\varepsilon = 1,6\%$) et mise en évidence de la déconsolidation cyclique d'après [10] . . . 35
1.18 Mise en évidence du caractère indépendant du temps du comportement cyclique phénoménologique de l'acier AISI H11 à température ambiante d'après [10] . . . 36
1.19 Illustration de l'effet de rochet lors des sollicitations à contraintes imposées sur l'acier AISI H11 à température ambiante d'après [10] . . . 36
1.20 Essai cyclique à amplitude de déformation totale imposée de 1,8% . . . 38
1.21 Essai cyclique à amplitude de déformation totale imposée de 2,2% . . . 39
1.22 Essai cyclique à amplitude de déformation totale imposée de 1,5% . . . 40
1.23 Échelles des défauts microstructuraux engendrés par l'opération de réalisation des outillages d'après [11] . . . 42
1.24 Banc d'essais polyvalent de préparation de surface . . . 43
1.25 Conditions de chargement des essais de préparation de surface . . . 44
1.26 Évolution « cyclique » de l'effort d'étirement de la plaque 3 de premier type 45
1.27 Morphologie des couches superficielles à l'issue du traitement des plaques de premier type (1 mm) . . . 46
1.28 Essais de nanoindentation . . . 47
1.29 Évolution des paramètres de l'acier AISI H11 dans les couches superficielles de la plaque 3 de premier type (1 mm) . . . 47
1.30 Profil de surface à l'issue du traitement des plaques . . . 48
1.31 Répartition spatiale de la netteté des bandes de Kikuchi dans la zone d'analyse globale . . . 49
1.32 Analyses statistiques des données de la granulométrie globale en surface de l'acier AISI H11 . . . 50
1.33 Répartitions spatiales des orientations dans les couches superficielles selon les directions principales du repère de la plaque et figures de pôles inverses associées . . . 51

2.1 Figures de pôle de déformation de différentes orientations de cristaux de cuivre à un état de chargement donné acquises par diffraction des rayons X synchrotron d'après [12] . . . 55
2.2 Principe de la technique de corrélation d'images d'après [13] . . . 58
2.3 Interpolation bilinéaire des niveaux de gris de par les pixels les plus proches . 61
2.4 Méthodes d'interpolation (a) interpolation du coefficient de corrélation (b) et (c) interpolation des niveaux de gris [14] . . . 62
2.5 Dispositif expérimental des essais mécaniques in-situ . . . 65
2.6 Dimensions des éprouvettes de premier type (1 mm) et position de la zone d'analyses in-situ . . . 66
2.7 Exemple de distribution des niveaux de gris . . . 67
2.8 Comportement monotone global des éprouvettes en AISI H11 ayant des surfaces « usinées » . . . 68

2.9 Confrontation des mesures de la déformation uniaxiale globale issues de la corrélation d'images à celles issues de l'extensomètre 69
2.10 Évolution des champs locaux des différentes composantes planes du tenseur de déformation selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 2 71
2.11 Évolution des champs locaux des différentes composantes du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 2 72
2.12 Évolution des champs locaux des différentes composantes planes du tenseur de déformation selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 3 73
2.13 Évolution des champs locaux des différentes composantes du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 3 74
2.14 (a) Localisation de la composante ε_I et (b) orientation ϕ du tenseur des déformations par rapport au repère global dans les couches superficielles . . . 75
2.15 Évolution cyclique des champs locaux de composante ε_I du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 1 76
2.16 Évolution cyclique des champs locaux de composante ε_I du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 2 77
2.17 Évolution cyclique des champs locaux de composante ε_I du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 3 78
2.18 Identification d'un VER de l'acier AISI H11 par la méthode de corrélation d'images numériques (DIC) 81

3.1 Schématisation du principe des approches multi-échelles d'après [15] 87
3.2 Illustration d'une intersection d'hyperplans dans l'espace des contraintes via une projection 2D de la surface d'écoulement et mise en évidence des écoulements multiples d'après [16] 89
3.3 Illustration du schéma de résolution itératif séquentiel (« sequential shooting algorithm ») d'après [17] 91
3.4 Schématisation du principe du modèle auto-cohérent. 105
3.5 Confrontation de diverses approches auto-cohérentes. 113
3.6 Transition d'échelle via la méthode des éléments finis (EF) d'après [18] . . . 114
3.7 Couplage de la méthode des éléments finis (EF) à une technique de transition d'échelle d'après [18] 116

4.1 Définition des diverses échelles concernées dans le traitement numérique . . . 123
4.2 Schématisation des données d'entrée et de sortie d'un algorithme d'intégration d'un modèle multi-échelle selon le type du solveur du code de calcul par éléments finis (EF) 134
4.3 Confrontation des champs de la composante de contrainte σ_{11} 143
4.4 Confrontation des champs de la composante de déformation ε_{33} 144
4.5 Confrontation des champs de cisaillement du système de glissement $G1$ . . . 144
4.6 Confrontation des évolutions des contraintes selon la déformation ε_{33} 144
4.7 Procédure d'identification des paramètres du matériau 147

4.8 Confrontation modèle/essais boucles d'hystérésis de demi durée de vie 148
4.9 Confrontation modèle/essai de traction monotone (essai 1) et mise en évidence du caractère indépendant du temps du comportement prédit à l'échelle *macro* 149
4.10 Génération de microstructures virtuelles par tesselation de Voronoï 152
4.11 Répartition de la taille des lattes martensitiques 152
4.12 Figures de pôle (100) de la relation d'orientations KS, des orientations de la structure austénitique et celle de la martensite. 153
4.13 Modifications de la topologie des cellules de Voronoï. Ces dernières sont colorées selon les orientations cristallographiques générées 154
4.14 Discrétisation spatiale de la microstructure virtuelle 154
4.15 Illustration de la répartition du nombre d'éléments finis par cellule de Voronoï et de la qualité du maillage 155
4.16 Conditions aux limites 155
4.17 Génération d'une microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope des lattes martensitiques en surface 158
4.18 Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la morphologie des couches superficielles 158
4.19 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface 159
4.20 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface 159
4.21 Évolution de la dissipation intrinsèque Θ et du facteur de Taylor-Quinney ι à l'échelle des lattes martensitiques selon la déformation uniaxiale à l'échelle *macro*. 160
4.22 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 161
4.23 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement 162
4.24 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface à l'issue du chargement 163
4.25 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface à l'issue du chargement 163
4.26 Figures de pôles inverses selon la direction de sollicitation des diverses textures traitées 164
4.27 Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la texture cristallographique des couches superficielles 165
4.28 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant la texture « T2 » des couches superficielles . . 166
4.29 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant la texture « Texp » des couches superficielles . 166
4.30 Courbes de comportement monotone uniaxiale des couches superficielles à l'échelle des lattes martensitiques pour diverses orientations cristallographiques 166
4.31 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 167

4.32 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement . . . 168
4.33 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle avec une texture T2 des couches superficielles à l'issue du chargement . . . 169
4.34 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle avec une texture Texp des couches superficielles à l'issue du chargement . . . 169
4.35 Cartographies des isovaleurs des déformation ε_{33} selon les orientations cristallographiques des couches superficielles à l'issue du chargement . . . 170
4.36 Nombre de systèmes activés N_s selon les orientations cristallographiques des couches superficielles pour une sélection de lattes martensitiques situées au niveau de la surface libre . . . 170
4.37 Introduction d'un gradient de cissions critiques τ_0^s dans les couches superficielles de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope . . . 171
4.38 Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon l'écrouissage des couches superficielles . . . 172
4.39 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant des couches superficielles écrouies . . . 172
4.40 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 173
4.41 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement . . . 174
4.42 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant des couches superficielles écrouies à l'issue du chargement 174
4.43 Cartographies des isovaleurs des déformation ε_{33} selon l'écrouissage des couches superficielles à l'issue du chargement . . . 175
4.44 Introduction d'une ondulation de surface de la microstructure virtuelle . . . 175
4.45 Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon le profil de surface . . . 176
4.46 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé . . . 176
4.47 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 177
4.48 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement . . . 178
4.49 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé à l'issue du chargement . . . 179
4.50 Cartographies des isovaleurs des déformation ε_{33} selon le profil de surface à l'issue du chargement . . . 179
4.51 Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon le modèle multi-échelle utilisé pour les mêmes paramètres du matériau 180
4.52 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 181
4.53 Glissement cumulé moyen pour chaque système de glissement selon le modèle multi-échelle . . . 181
4.54 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du 9^{e} cycle . . . 182

4.55 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du 9e cycle . . . 183
4.56 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface à l'issue du 9e cycle 184
4.57 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface à l'issue du 9e cycle . . . 184
4.58 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du 9e cycle . . . 185
4.59 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du 9e cycle . . . 186
4.60 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle avec une texture Texp des couches superficielles à l'issue du 9e cycle . . . 186
4.61 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du 9e cycle . . . 187
4.62 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du 9e cycle . . . 188
4.63 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant des couches superficielles écrouies à l'issue du 9e cycle . . . 189
4.64 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du 9e cycle . . . 189
4.65 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du 9e cycle . . . 190
4.66 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé à l'issue du 9e cycle . . . 190

5.1 Décomposition multiplicative du tenseur de gradient de transformation . . . 196
5.2 Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la morphologie des couches superficielles et la formulation du modèle multi-échelle . . . 213
5.3 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface . . . 213
5.4 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface . . . 214
5.5 Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) à l'échelle des lattes de martensite . . . 214
5.6 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 215
5.7 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement . . . 216
5.8 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface à l'issue du chargement 217
5.9 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface à l'issue du chargement . . . 217

5.10 Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la texture cristallographique des couches superficielles 218
5.11 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant la texture « T2 » des couches superficielles . . 218
5.12 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant la texture « Texp » des couches superficielles . 218
5.13 Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) à l'échelle des lattes de martensite 219
5.14 Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) selon la profondeur à l'échelle des lattes de martensite 219
5.15 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 220
5.16 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement 221
5.17 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle avec une texture Texp des couches superficielles à l'issue du chargement 222
5.18 Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) selon la profondeur à l'échelle des lattes de martensite pour la microstructure virtuelle de surface écrouie 222
5.19 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 223
5.20 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement 224
5.21 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant des couches superficielles écrouies à l'issue du chargement 224
5.22 Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la formulation du modèle multi-échelle pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé 225
5.23 Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé 225
5.24 Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) selon la profondeur à l'échelle des lattes de martensite pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé 226
5.25 Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement . 227
5.26 Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement 227
5.27 Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé à l'issue du chargement . . . 228

B.1 Définition des angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ selon la convention de Bunge [19] . . 261

B.2 Définition d'une orientation par une figure de pôles : principe de construction d'une figure de pôles {1 0 0} : (gauche) Intersection du pôle avec la sphère. (milieu) Projection stéréographique sur le plan équatorial. (droite) Figure de pôles {1 0 0} [19] 264
B.3 Définition d'une orientation par une figure de pôles inverse : (gauche) plan équatorial complet. Les lignes pointillées délimitent les parties équivalentes dans le cas d'un cristal de symétrie cubique. Les lignes épaisses délimitent la partie suffisante, *i.e.* (droite) le triangle standard [19] 265

C.1 Représentation graphique des méthodes-θ du point milieu généralisé et de trapèze généralisé 268

Liste des tableaux

1.1 Exemples d'équivalences internationales de normalisation de l'acier AISI H11 16
1.2 Composition chimique de l'acier AISI H11 (en pourcentage massique) 16
1.3 Traitement thermique effectué pour l'acier AISI H11 47 HRC 21
1.4 Correspondance de quelques relations d'orientations 26
1.5 Données caractéristiques des relations d'orientations usuelles 27
1.6 Données caractéristiques du comportement quasi-statique uniaxial de l'acier AISI H11 à température ambiante 35
1.7 Amplitudes de déformation des différents essais cycliques 37
1.8 Paramètres caractéristiques des essais de premier type 40
1.9 Paramètres caractéristiques des essais de premier type 44
1.10 Caractéristiques moyennes des profils des surfaces de l'ensemble des plaques . 49

2.1 Répartition des différents blocs pour le chargement cyclique 67

4.1 Équivalence des notations de Schmid-Boas et celles de Miller 130
4.2 Récapitulatif des équations constitutives du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée 132
4.3 Récapitulatif du schéma d'intégration numérique dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) 142
4.4 Paramètres du matériau utilisés pour la validation de l'algorithme d'intégration numérique 143
4.5 Base de données expérimentales 145
4.6 Modèles de transition d'échelle utilisés dans la procédure de l'identification . 146
4.7 Paramètres de l'acier AISI H11 issus de la procédure d'identification 148
4.8 Moyennes des variables étudiées à l'issue du chargement 161

5.1 Récapitulatif du schéma d'intégration numérique dans le cadre de la théorie des transformations finies. 212

B.1 Orientations des divers variants au sein d'un grain austénitique parent selon la relation d'orientations KS 266

Introduction

"The important thing in science is not so much to obtain new facts as to discover new ways of thinking about them."

William Henry Bragg (1862-1942)

Modélisation multi-physique et multi-échelle

La compréhension et la maîtrise de la nature des divers phénomènes physiques et systèmes complexes requièrent la reproduction de leurs architectures avec des modèles mathématiques que l'on implémente dans des codes de calcul. La prise de conscience de cette démarche est depuis quelques années en pleine évolution aussi bien dans le monde scientifique, que dans le monde industriel, mais reste tout de même assez limitée dans quelques secteurs industriels, notamment dans les secteurs du transport et de l'énergie... Malgré l'avancée importante, voire impressionnante, des outils numériques et de la puissance des processeurs informatiques, la reproduction des architectures complexes représente un challenge pour les industriels. Ce challenge consiste à traduire de multiples phénomènes physiques élémentaires en algorithmes numériques décrivant divers systèmes tout en optimisant le coût de calcul. Cette traduction, appelée « modélisation multi-physique », doit non seulement décrire la réalité, mais aussi la prévoir à court, moyen et long terme pour que l'ingénieur ou le chercheur puisse maîtriser tel ou tel système.

La description et la prévision de la réalité d'un système complexe par la modélisation multi-physique représentent le passage du monde virtuel vers le monde réel. Ce passage ne peut être réalisé que si certaines exigences sont satisfaites :

- les algorithmes numériques sont robustes,
- les codes de calcul sont validés par des essais expérimentaux,
- la transition d'échelles est maîtrisée.

Ce dernier point est la principale caractéristique de la modélisation multi-physique, et plus particulièrement dans le domaine de la mécanique des matériaux et des structures. Couplé à la modélisation multi-physique, il constitue une thématique de recherche en plein essor appelée « modélisation multi-physique et multi-échelle » dont la finalité est bien définie dans son principe. En effet, ce couplage est la forme la plus complète d'une modélisation d'un enchaînement de divers phénomènes physiques, et ce, à des échelles distinctes dépendantes les unes des autres.

Le comportement des matériaux hétérogènes est un domaine d'étude où la maîtrise des méthodes de transition d'échelles s'avère essentielle à cause de la nécessité de prendre en compte tous les mécanismes physiques élémentaires. À l'heure actuelle, la complexité des systèmes microstructuraux et des mécanismes associés fait que les modèles de comportement ont été développés sur chacune des échelles impliquées (Figure 1). Malgré le fait que les propriétés physiques et mécaniques des matériaux soient liées, entre autres, à leurs structures et liaisons atomiques, il n'est cependant pas possible pour le moment de modéliser un processus de mise en forme ou un comportement d'une structure en conditions de service à partir d'un modèle de dynamique moléculaire. En effet, utilisant même un calcul massivement parallèle, les modèles moléculaires permettent de traiter uniquement un volume d'environ de $10^{-3}\mu m^3$ dans le cas des métaux cubiques [22]. Pour étudier le comportement phénoménologique à partir des mécanismes physiques élémentaires, la modélisation multi-physique et multi-échelle s'appuie sur les méthodes de transitions d'échelles, également connues sous le nom de « techniques d'homogénéisation ». Plus concrètement, ces techniques consistent à utiliser des paramètres représentatifs des relations des mécanismes physiques d'une échelle inférieure sans marquer de discontinuités, il devient alors possible de déduire le comportement phénoménologique d'une structure. Une conséquence immédiate de ces techniques d'homogénéisation, lorsque celles-ci utilisent des méthodes assez particulières, est le surcout du calcul, ce qui justifie le fait que la modélisation multi-physique et multi-échelle soit très peu utilisée en industrie malgré son intérêt technique et scientifique.

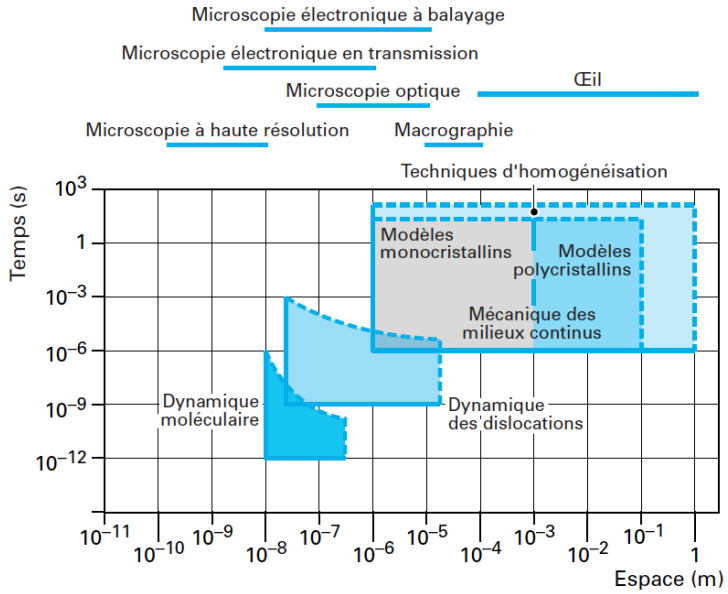


Figure 1 – Représentation schématique des possibilités de modéliser le comportement mécanique d'un volume de matière de taille donnée pendant un temps physique (dans le cas des modélisations dynamiques). Les frontières tracées en traits pleins représentent les limites de validité des modèles. Les pointillés montrent les limites actuelles imposées par la puissance des calculateurs [1]

La modélisation multi-physique et multi-échelle n'est rendue possible que par la conjonction de deux aspects fondamentaux : celui de la connaissance des mécanismes physiques élémentaires et celui des méthodes de calcul numérique par la puissance des processeurs et de la capacité de résolution numérique. C'est l'approche numérique actuelle la plus complète pour étudier le comportement mécanique d'une structure tout en s'appuyant sur des phénomènes physiques élémentaires. Avec une volonté de mieux appréhender le comportement des matériaux et d'accroître le caractère prédictif des modèles mathématiques, ce travail de thèse contribue au développement des approches multi-physiques et multi-échelles.

Progrès des techniques expérimentales

Si la modélisation numérique s'articule autour d'approches théoriques ayant pour finalité de réduire le coût des essais expérimentaux, ces derniers constituant une démarche indispensable de validation de la pertinence des modèles et des algorithmes mathématiques employés. Dans le domaine de la mécanique des matériaux et des structures hétérogènes, la complexité des systèmes microstructuraux fait que les approches multi-physiques et multi-échelles requièrent des techniques expérimentales de plus en plus sophistiquées. Celles-ci permettent d'accéder aux mécanismes physiques élémentaires du matériau et de caractériser le comportement mécanique à différentes échelles de la structure.

Outre le développement des modèles numériques, l'avènement de la puissance des ordinateurs a fortement contribué dans le déploiement de ces techniques expérimentales. Parmi ces techniques, on retrouve celles qui ont séduit la communauté des métallurgistes [1] telles que la microscopie électronique à balayage (MEB) ou la diffraction d'électrons rétrodiffusés (EBSD) [2]. Du fait de l'architecture complexe des microstructures des matériaux métalliques, cette dernière technique, dans sa version entièrement informatisée, est devenue aujourd'hui un outil indispensable pour les ingénieurs et chercheurs en métallurgie. Elle permet d'accéder à des caractéristiques microstructurales notamment la texture locale du matériau métallique permettant ainsi de mieux appréhender certains mécanismes physiques élémentaires liés à la recristallisation, aux transformations de phases, à la restauration... ou encore au comportement mécanique.

D'autres techniques expérimentales sophistiquées ont vu leur succès auprès de la communauté des mécaniciens des solides. Dans le cas présent, on fait essentiellement référence à la corrélation d'images. Ayant fait sa première apparition dans les années 1980, cette technique a été initialement dédiée aux mesures de champs de déplacements et de déformations au sein des milieux solides supposés homogènes sous sollicitations complexes. Les champs mécaniques hétérogènes induits ont été longtemps associés au type de chargement. Ce n'est qu'avec l'apport de la puissance des ordinateurs et des nouvelles générations de caméras numériques au début du XXI^{e} siècle que les ingénieurs et chercheurs en mécanique des solides ont commencé à articuler ces champs hétérogènes à l'architecture interne des matériaux métalliques. Du fait de la croissance continue de sa résolution spatiale et de sa

1. Ce travail de thèse est consacré à l'étude de l'acier AISI H11, on fait donc abstraction des autres classes de matériaux et des techniques expérimentales associées

2. Il est à noter que la technique de l'EBSD est couplée à celle du MEB.

précision, la corrélation d'images constitue aujourd'hui un outil d'étude de comportement mécanique indispensable pour la communauté des mécaniciens des solides.

La conjonction de ces deux types de techniques expérimentales complétée par une approche numérique de type multi-physique et multi-échelle a donné naissance à une nouvelle discipline scientifique, celle de la mécanique des matériaux « hétérogènes ». Celle-ci, pré-introduite précédemment, se traduit par la corrélation du comportement mécanique à l'architecture interne des matériaux et des mécanismes physiques élémentaires associés. Elle a permis de réconcilier deux communautés qui se sont longtemps ignorées et de construire une passerelle de compétences entre métallurgistes et mécaniciens des solides. Le travail de cette thèse s'inscrit dans le cadre de cette discipline. Une dialectique de type approche numérique et expérimentale est menée pour répondre à la problématique scientifique et industrielle de ce travail.

Contexte scientifique et industriel

L'approche scientifique introduite ci-dessus s'attache à un contexte industriel dans lequel les challenges économiques et écologiques sont liés à la recherche et l'innovation dans le domaine de la mécanique des matériaux.

Contexte industriel et enjeux économiques

Avec un chiffre d'affaire annuel et un excédent commercial respectivement de près de 5,8 et de 0,6 milliards d'euros [23], l'industrie de la forge et de la fonderie s'affiche comme étant l'un des piliers de l'économie française. Elle se place en amont de l'ensemble des secteurs industriels civils et militaires. Dans le secteur du transport, l'industrie automobile constitue la plus importante part du marché des produits d'alliages ferreux et non ferreux en Europe devançant celles de l'aéronautique et du ferroviaire, mais également celles des autres secteurs notamment le bâtiment et travaux publics.

En 2011, la France a produit près de 2047 milliers de tonnes métriques de pièces moulées [23]. Elle se place ainsi comme étant respectivement le 9^{e} et 11^{e} producteur mondial de métaux ferreux et non ferreux. La production mondiale de ces deux types de métaux est estimée à près de 98500 milliers de tonnes métriques dont environ 40% est assurée par la Chine en cette même année [23].

Face à une telle concurrence, l'industrie de la forge et de la fonderie n'a guère d'autres choix que de miser sur la recherche et le développement (R&D) dans sa feuille de route stratégique. Les enjeux socio-économiques sont majeurs et imposent la réduction des coûts de production et le déploiement de modes opératoires conformes à la politique de développement durable. Dans leur stratégie d'innovation, les départements de la R&D concentrent constamment dans leurs lignes de mire les performances des outillages de mise en forme afin de conserver un avantage concurrentiel tant en productivité qu'en qualité. La tenue en service des outillages porte en effet un intérêt technico-économique fondamental pour l'industrie de la forge et de la fonderie. À l'heure actuelle, la durée moyenne d'utilisation des outillages de mise en forme se situe pour les opérations de forgeage entre 10000 et 40000

pièces mécaniques [24]. Ces performances conduisent à des coûts d'outillages pouvant représenter 5 à 15% du coût de la pièce produite[3] [24], mais les incertitudes sur le caractère imprévisible de ces chiffres sont toujours à signaler...

Intérêt et contexte technico-scientifique

Problématique des performances mécaniques des outillages

L'articulation des coûts des outillages de mise en forme autour de leur cycle de vie n'est pas à démontrer. Cependant, la durée d'utilisation est très souvent mal maîtrisée et loin d'être en accord avec les prévisions. Les risques d'arrêts prématurés des chaînes de production sont donc inévitables en cas de dégradation précipitée de ces pièces. Ce caractère diffus des performances est directement lié à la conception, à la réalisation mais également aux modes opératoires des outillages. Lors de la mise en service de ces pièces, les outillages de mise en forme à chaud subissent en effet des sollicitations thermo-mécaniques sévères et complexes engendrant ainsi des endommagements dans la partie active. Selon des études antérieures [3], ces endommagements peuvent être regroupés en quatre catégories distinctes allant de l'usure à la déformation plastique (Figure 2).

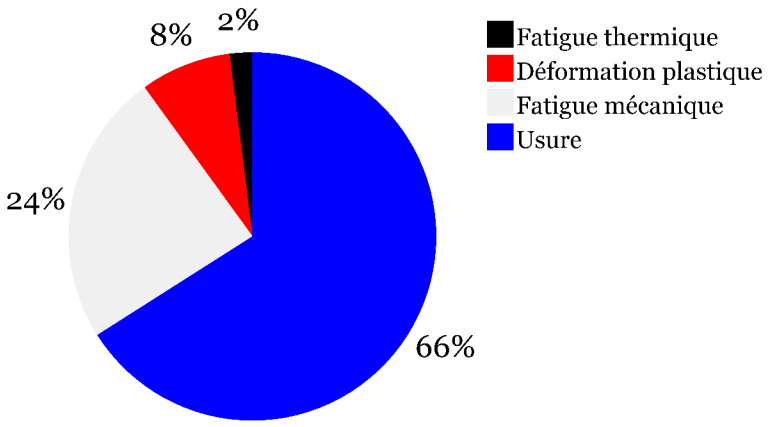


Figure 2 – Modes de dégradation des outillages de mise en forme d'après [2]

L'usure. L'usure est sans doute la cause majeure de la réforme des outillages de mise en forme (Figure 2). Elle se manifeste dans l'ensemble des modes opératoires de forgeage à chaud, mais plus particulièrement lorsque la cadence de la production des pièces forgées est importante comme dans le secteur de l'automobile. Ce mode d'endommagement se traduit par la perte de matière en surface selon différents mécanismes.

L'usure abrasive. Ce mécanisme est très sensible à la géométrie de l'outillage. Il est généralement situé dans des zones de fort glissement avec des vitesses d'écoulement de matières allant jusqu'à 2 et 3 $m.s^{-1}$ telles que les rayons des matrices. L'enlèvement

3. Ces estimations prennent en compte l'amortissement des coûts de fabrication des outillages

de matière dans ces zones peut atteindre 2 mm en profondeur, ce qui est assimilé au micro-usinage. L'usure abrasive est conditionnée par la dureté et la raideur de la structure, elle est fréquemment associée à d'autres modes d'endommagement notamment à la fatigue thermique.

L'usure par écaillage. L'usure par écaillage se manifeste essentiellement lors des sollicitations cycliques de choc, de roulement ou de glissement en régime lubrifié. Ce mécanisme se traduit par des piqûres issues de l'émission de particules en surface et par des cavités en profondeur après faïençage de la partie active.

L'usure adhésive. Ce mécanisme s'illustre essentiellement par des phénomènes d'oxydation et de réactivité en surface. Des adhérences locales entre les parties actives oxydées de la pièce forgée et de l'outillage en résultent.

La fatigue thermique. Les fluctuations brutales des sollicitations d'origine thermique génèrent une succession de contraintes de type traction et compression engendrant la formation d'un réseau de fissures en structure mosaïque ou de faïençage. Ces réseaux sont le plus souvent localisés dans des parties planes en contact avec la pièce forgée. Les fortes sollicitations thermiques font en effet que l'expansion des couches superficielles de la partie active soient contrariées par le cœur de l'outillage. De par ces conditions, les contraintes sont propices à se concentrer en surface.

Les principaux paramètres du procédé répondant à l'endommagement par la fatigue thermique sont :

- la température maximale atteinte par l'outillage,
- le temps de contact entre pièce produite et l'outillage,
- la vitesse de refroidissement,
- le mode de lubrification ou de poteyage.

La fatigue mécanique. La fatigue mécanique résulte des fluctuations des contraintes, de type traction et compression, et de leurs répartitions dans la partie active. Elle se présente le plus souvent sous forme de rupture brutale. L'un des aspects symptomatiques de la fatigue mécanique est la rupture en fond de gravure qui est liée à une concentration de contrainte conséquente en surface.

La déformation plastique. Les sollicitations thermo-mécaniques sévères et complexes font que les concentrations de contraintes dans certaines zones de la partie active vont au-delà du seuil d'élasticité. Ce mode d'endommagement intervient fréquemment lors des opérations de forge de précision, notamment dans le secteur de l'aéronautique lorsque la cadence de production n'est pas très élevée. Les temps de forgeage sont, dans ce type d'opérations, assez longs et entraînent des déformations non-linéaires essentiellement en surface. Cette plasticité concerne généralement une épaisseur de quelques dizaines de *microns* et s'accompagne d'évolutions microstructurales. La synergie des précédents modes d'endom-

magement avec la déformation plastique est également envisageable dans certains types d'opérations.

Dans l'ensemble des modes d'endommagement présentés ci-dessus, la surface s'illustre comme étant la zone privilégiée des sollicitations thermo-mécaniques dans la partie active. L'articulation de la durée de vie des outillages de mise en forme au comportement et à l'état de surface ne fait pas de doute. Cependant, il est inhérent de noter que, lors de la réalisation de l'outillage, les couches superficielles présentent un aspect similaire aux conséquences de l'endommagement par la déformation plastique. Cette opération entraîne en effet des évolutions de l'architecture microstructurale dans lesquelles certains paramètres sont affectés, notamment la morphologie, la texture et l'écrouissage des cristaux constitutifs, mais encore le profil de surface. Il suffit d'un examen micrographique pour se rendre compte de cet écoulement plastique, ce dernier se met clairement en évidence par une texture globale apparente (Figure 3).

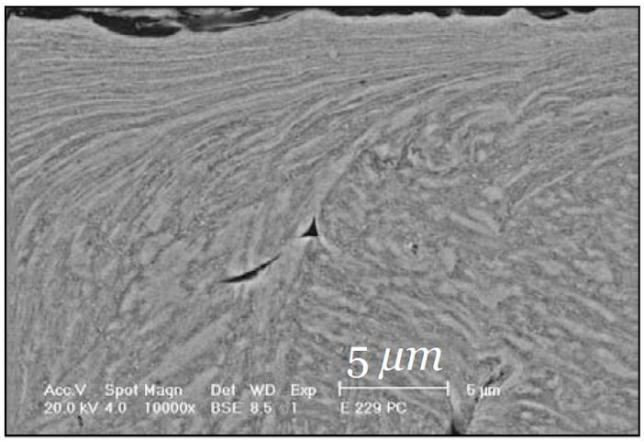


Figure 3 – Écoulement plastique en surface d'un outillage en acier AISI H11 observé au MEB [3]

Cette variabilité des paramètres microstructuraux est à l'origine des effets néfastes sur la performance des outillages de mise en forme. De ce fait, des solutions, de type traitement de surface, sont souvent envisagées à l'échelle industrielle afin d'améliorer le cycle de vie de ces pièces. Ces recours, bien qu'ils soient efficaces, présentent l'inconvénient d'augmenter le coût et le délai de réalisation de l'outillage. L'optimisation de ce procédé se présente comme une stratégie alternative à ce type de recours. Cependant, la compréhension et la maîtrise du comportement mécanique en surface est une nécessité pour la mise au point de cette solution.

Dans un contexte scientifique, ce travail de thèse s'inscrit dans une stratégie d'optimisation de type multi-échelle pour la compréhension du comportement mécanique en surface des outillages de mise en forme réalisés en acier AISI H11. Il s'intéresse, plus particulièrement, à l'impact de l'état de surface sur le comportement non-linéaire hétérogène et anisotrope dans les couches superficielles de ces pièces avec une dialectique numérique complétée par une approche expérimentale. Il faut également mentionner que la modélisation

multi-échelle appliquée à ce contexte industriel n'est pas si aisée...

Optimisation multi-échelle : un challenge scientifique

Malgré les développements théoriques majeurs sur le comportement non-linéaire des matériaux métalliques, la prédiction quantitative du comportement mécanique hétérogène et anisotrope d'un alliage tel que l'acier AISI H11 comporte de nombreux obstacles. Outre le coût des calculs numériques, celles-ci sont essentiellement liées à la nature complexe de l'architecture microstructurale de cet acier, mais également aux mécanismes physiques élémentaires à l'origine de l'écoulement plastique. La modélisation multi-échelle doit en effet prendre en compte ces éléments afin de prédire simultanément, au mieux, les champs mécaniques locaux hétérogènes et anisotropes, et le comportement phénoménologique homogénéisé en surface. Sur ce principe, il en résulte une littérature en pleine croissance sur les modèles multi-échelles et les algorithmes numériques associés qui traitent des problèmes complexes liés au comportement non-linéaire des matériaux métalliques. L'orientation numérique de cette thèse est fondée sur un état de l'art de ces modèles et algorithmes de résolution.

Dans ce même contexte, il a été constaté que diverses formulations peuvent éventuellement être employées dans la modélisation multi-échelle. Ces formulations dépendent le plus souvent du procédé de mise en forme et des conditions de service de l'outillage. Cependant le choix de celles-ci est rarement justifié. Il est évident que l'emploi de la théorie des transformations finies dans la modélisation multi-échelle conduit à des contraintes supplémentaires au niveau de l'algorithme numérique, voire à des coûts de calculs plus élevés. L'autre conséquence est sans doute les champs mécaniques locaux prédits par de telles formulations. La question de la formulation du modèle porte un intérêt pour ce travail dans lequel une approche comparative entre la théorie des transformations finies utilisant la notion de dérivée objective et une certaine hypothèse des petites perturbations (HPP) est menée.

En ce qui concerne le contexte expérimental, les difficultés de l'approche multi-échelle sont également liées à la nature complexe de l'architecture microstructurale martensitique de l'acier AISI H11, mise évidence dans ce travail. La reproduction à l'échelle du laboratoire de surfaces similaires à celles obtenues lors de la mise en œuvre des outillages de mise en forme nécessite des moyens appropriés. Par ailleurs, l'investigation des champs mécaniques locaux en surface n'est toutefois pas aisée. Outre la mise en place d'une procédure expérimentale, une corrélation entre les résultats obtenus et certains paramètres microstructuraux est en effet délicate mais parfois nécessaire.

Organisation du manuscrit

Ce manuscrit s'articule autour de cinq chapitres avec deux parties distinctes réparties de la manière qui suit.

Première partie. La première partie s'intéresse à l'approche expérimentale menée dans ce travail et comporte deux chapitres. Le premier est, tout d'abord, le lieu d'une étude

bibliographique des structures martensitiques. Il s'attache par la suite à une caractérisation expérimentale de la structure interne de l'acier AISI H11, notamment par le biais d'analyses micrographiques et EBSD. Des essais cycliques à température ambiante, y sont également menés. Le premier chapitre se destine, en outre, à la génération de surfaces équivalentes à celles issues des opérations de mise en œuvre des outillages, et ce, à l'échelle du laboratoire. Une caractérisation expérimentale de celles-ci est menée dans un dernier point. Elle concerne surtout des analyses EBSD, au MEB, des essais de nanoindentation, mais également des mesures du profil de surface par altimétrie.

Le second chapitre de ce manuscrit s'intéresse essentiellement à une investigation expérimentale des champs mécaniques locaux en surface de l'acier AISI H11. À l'issue d'une présentation de la technique de corrélation d'images numériques (DIC), des essais mécaniques monotones quasi-statiques et cycliques in-situ sont mis en œuvre. Une telle approche permet ainsi de mener une investigation du comportement de l'acier AISI H11 à diverses échelles. Par ailleurs, le second chapitre se consacre, dans un dernier temps, à la notion de volume élémentaire représentatif (VER). Une identification de celui-ci est effectuée par le biais d'une approche expérimentale, *i.e.* via des essais mécaniques in-situ.

Deuxième partie. Le traitement numérique du comportement non linéaire en surface de l'acier AISI H11 fait l'objet de cette seconde partie. Celle-ci est divisée en trois chapitres. Le troisième chapitre s'articule autour d'un état de l'art des approches multi-physiques et multi-échelles. Il présente, plus particulièrement, une revue des équations constitutives à l'échelle locale, et ce, en effectuant une disjonction des modèles phénoménologiques de ceux qui s'attachent à la densité des dislocations. Ce même chapitre se consacre, en outre, aux techniques de transition d'échelles, à savoir une revue de modèles en champs moyens mais également en champs complets. Par ailleurs, la notion de modèles à gradient permettant une prise en compte des longueurs internes est brièvement présentée dans un dernier temps.

Le quatrième chapitre est le lieu d'une investigation numérique des champs mécaniques locaux en surface de l'acier AISI H11 sous sollicitations monotones quasi-statiques et cycliques. Pour ce faire, l'intérêt est essentiellement porté au modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et à une formulation modifiée de celui-ci dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Ces modèles sont implantés dans le code de calcul par éléments finis (EF) Abaqus/Standard par le biais d'une routine utilisateur UMAT écrite en Fortran. L'algorithme d'intégration numérique utilise un schéma semi-implicite avec deux méthodes de résolution, *i.e.* une méthode de résolution directe et une procédure itérative. La validation de celui-ci est effectuée par confrontation des résultats obtenus avec ceux donnés par l'algorithme de la librairie Z-MAT du code Z-Set/Zébulon. Par ailleurs, les paramètres du matériau pour le modèle de Méric-Cailletaud [20,21] sont identifiés par le biais de techniques de transition d'échelles en champs moyens, et ce, en utilisant des données de comportement mécanique à l'échelle globale, *i.e. macro*. Le traitement numérique s'attache, en outre, à une génération de microstructures virtuelles représentatives de l'architecture complexe des structures martensitiques. Celle-ci est effectuée par une tesselation adaptée de Voronoï, et ce, en tenant compte des relations particulières d'orientations cristallographiques entre les grains austénitiques parents et les lattes de martensite à l'issue du traitement thermique approprié. L'investigation numérique est menée a postériori et s'articule autour des effets d'un

certain nombre de paramètres issus de la caractérisation expérimentale sur le comportement local en surface de l'acier AISI H11. Ceux-ci concernent essentiellement la morphologie des lattes de martensite, les orientations cristallographiques, l'écrouissage interne et enfin le profil de surface.

L'extension de cette investigation vers les transformations finies fait l'objet du cinquième chapitre. La formulation du modèle est réalisée dans le cadre d'une description spatiale, et ce, en faisant appel à la notion de dérivée objective. Dans ce contexte, l'intérêt est essentiellement porté à la dérivée objective de Truesdell, ou éventuellement celle d'Oldroyd, mais également à celle de Jaumann-Zaremba. Du fait de son équivalence au formalisme lagrangien, la formulation de Truesdell du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] est utilisée pour le traitement numérique des champs mécaniques locaux en surface de l'acier AISI H11. Une confrontation des résultats obtenus avec de l'hypothèse des petites perturbations est traitée. Celle-ci est menée dans le cadre des sollicitations monotones quasi-statiques en considérant l'ensemble des paramètres expérimentaux évoqués ci-dessus.

Première partie

Approche expérimentale

Chapitre 1

Matériau et surface

"L'idée, trempée dans le vers, prend soudain quelque chose de plus incisif et de plus éclatant. C'est le fer qui devient acier."

Victor Hugo (1802-1885) dans Cromwell (1827), Préface

Sommaire

1.1 Les aciers à outils : rappels 14
1.2 L'acier AISI H11 : une structure martensitique 15
1.2.1 Composition chimique 16
1.2.2 Traitements thermiques 17
1.2.2.1 Opérations d'un traitement usuel 17
1.2.2.2 Application à une nuance « SMV3 » à 47 HRC 21
1.2.3 Microstructure 21
1.2.3.1 Microstructure martensitique : aspects théoriques . . . 21
1.2.3.2 Caractérisation expérimentale 28
1.2.4 Comportement mécanique 33
1.2.4.1 État de l'art 34
1.2.4.2 Essais cycliques complémentaires 37
1.2.4.3 Mécanismes physiques élémentaires 40
1.3 Surface 41
1.3.1 Procédé expérimental 42
1.3.1.1 Banc d'essais 42
1.3.1.2 Conditions de chargement 43
1.3.1.3 Traitement de données 44
1.3.2 Caractérisation de l'état de surface 45

Après quelques rappels sur les aciers à outils, ce premier chapitre se consacre à la caractérisation microstructurale des couches superficielles de l'acier AISI H11. Dans un premier temps, les caractéristiques de cette nuance sont présentées avec un focus sur les aspects fondamentaux des structures martensitiques. Ceci permet d'introduire l'étude expérimentale de caractérisation du système microstructural du matériau et de décrypter son

comportement mécanique cyclique et quasi-statique. On s'intéresse par la suite à la génération de surfaces similaires à celles issues de l'opération de mise en œuvre des outillages à l'échelle du laboratoire. Celles-ci sont réalisées par le biais d'un mode opératoire que l'on expose dans un second temps. Une caractérisation expérimentale assez complète de l'état des surfaces résultantes est enfin effectuée à l'aide de techniques adéquates.

1.1 Les aciers à outils : rappels

Un acier à outils se définit comme étant un acier spécial permettant d'effectuer des opérations de transformation de matériaux, de manutention et de mesure de pièces à façonner. Selon la norme NF EN ISO 4957 [1], les nuances des aciers à outils sont réparties en quatre catégories suivant leur utilisation [2].

Les aciers à outils non alliés pour travail à froid. Ces aciers sont uniquement à base de fer et de carbone. La teneur respective des différents éléments d'alliage reste inférieure à une limite spécifique conformément à la norme NF EN 10020. Ils constituent des outillages de mise en forme dont la température en service se situe couramment entre 150 et 200$^{\circ}C$. Le niveau des sollicitations mécaniques y est également assez faible. Parmi ces outillages, on retrouve les lames de découpe, tarauds, limes, burins, alésoirs, forets, martellerie... Ils sont caractérisés par une haute résistance à l'usure et une dureté assez élevée. Cependant, ils présentent une faible capacité de trempe et une médiocre résistance aux chocs et aux revenus.

Les aciers à outils alliés pour travail à froid. Ils sont également destinés aux outillages de mise en forme dont la température en service n'excède pas les 200$^{\circ}C$. Toutefois, leurs propriétés résultent d'une teneur d'au moins d'un des éléments d'alliage supérieure à la limite spécifique imposée par la norme NF EN 10020. A titre d'exemple, une teneur en chrome élevée engendre des carbures durs qui améliorent la résistance à l'usure. Outre cette propriété, ces aciers sont bien souvent assez ductiles et résistants à la pression. Cependant, il est préférable qu'ils aient le moins de variations dimensionnelles possibles comme suite au traitement thermique approprié.

Les aciers à outils alliés pour travail à chaud. L'apport de certains éléments d'alliage, notamment le nickel, le molybdène ou encore le cobalt fait que ces aciers peuvent être utiliser dans une gamme de températures bien supérieure à 200$^{\circ}C$. Ils présentent en effet une haute ténacité et une haute résistance à la chaleur et à l'usure, aux variations thermiques, ainsi qu'une haute résistance au revenu. Les applications concernées sont essentiellement la forge, le laminage à chaud mais aussi les cisailles à chaud.

1. Cette norme vient remplacer la norme NF A 35590 de 1992 qui définit les nuances en fonction de leur composition chimique

2. Une autre classification est possible. La norme NF EN 10027-2 définit les nuances d'aciers à outils suivant une désignation numérique.

Les aciers rapides. Les aciers rapides constituent essentiellement les outils dont les applications nécessitent une importante vitesse de coupe telles que le fraisage, d'où leur appellation « HSS » (High Speed Steel). Leur capacité d'atteindre des vitesses de coupe pouvant être jusqu'à dix fois plus importantes que celles des aciers non alliés est due à la forte présence d'éléments d'alliage carburigènes tels que le vanadium, le tungstène et molybdène. Ces composants chimiques sont le plus souvent élaborés par la métallurgie des poudres et permettent d'obtenir des performances supérieures pour les outils de coupe. Les aciers rapides présentent en effet une très haute résistance à la chaleur, à l'usure, une remarquable stabilité au revenu ainsi qu'une haute dureté, et ce à une température de près de $600^{\circ}C$.

Lors du développement d'une nuance d'acier à outils pour une utilisation suivant un cahier des charges donné, les exigences en terme de qualité s'appuient sur un certain nombre de critères articulées autour des propriétés d'emploi notamment :

- la ténacité, soit la résistance à l'amorçage et à la propagation des fissures,
- la dureté, i.e la résistance du matériau à la déformation et aux chocs mécaniques,
- la résistance à la fatigue thermique qui correspond à la résistance à la fissuration sous l'effet de la succession des cycles de chauffages et refroidissements,
- la tenue à la corrosion,
- la résistance à l'usure caractérisée par la faculté de la surface de l'outil à retarder l'endommagement le plus longtemps possible.

Outre ces propriétés d'usage, l'acier à outils doit également présenter un ensemble de caractéristiques liées aux conditions du procédé de réalisation, notamment à l'élaboration, au traitement thermique, au traitement de surface, à la rectification...,ou encore à la formation d'une texture microstructurale superficielle. Il doit en effet présenter entre autres une bonne trempabilité, un volume exempt de criques et de tapures, et peu de variations dimensionnelles après traitement thermique.

1.2 L'acier AISI H11 : une structure martensitique

L'acier AISI H11 appartient à la troisième catégorie des aciers à outils du fait de la présence du chrome, du molybdène et du vanadium en tant qu'éléments d'alliage. Il est utilisé dans l'élaboration des moules d'injection sous pression d'alliages légers, les lames de cisaille, les poinçons, les outillages d'extrusions... ou encore les matrices de forges [25]. Malgré une utilisation de plus en plus rare dans le secteur de l'aéronautique, l'acier AISI H11 s'illustre comme étant un matériau indispensable pour la réalisation de quasiment l'ensemble des structures métalliques dédiées à ce secteur.

En France, il a été surtout produit par la société Aubert & Duval avec une désignation commerciale « SMV3 ». Le Tableau 1.1 présente quelques exemples d'équivalences internationales de désignation selon les standards en vigueur.

Les diverses applications de l'acier AISI H11, notamment la forge à chaud, font que cette nuance présente certaines propriétés d'usage à savoir :

- une bonne résistance à la fatigue et aux chocs thermo-mécaniques ainsi qu'à l'usure,

Tableau 1.1 – Exemples d'équivalences internationales de normalisation de l'acier AISI H11

Allemagne	Etats-Unis	France	Grande-Bretagne	Russie
DIN 17350	ASTM A681	NF A35-590	BS 4659	GOST 5950
X38CrMoV5-1	H11	X38CrMoV5	BH11	4Ch5MFS

– une dureté assez élevée, fréquemment au-delà de 40 HRC,
– une haute résistance à l'adoucissement permettant une employabilité à des températures situées entre 600 et 650$^{\circ}C$,
– une bonne tenue à l'oxydation.

Celles-ci résultent surtout d'une combinaison précise de certains composants chimiques mais également d'un traitement thermique adéquat. Ces aspects sont traités dans ce qui suit.

1.2.1 Composition chimique

Outre des éléments carburigènes, i.e le molybdène et le vanadium, d'autres éléments d'alliage contribuent aux propriétés physico-chimiques et mécaniques de l'acier AISI H11. Le carbone, élément clé dans l'ensemble des aciers à outils, ne représente qu'une teneur en masse de 0,40 % (Tableau 1.2). Cependant, sa présence témoigne de la dureté assez considérable et de la bonne stabilité de l'acier à haute température [26]. Avec certains composants chimiques, il permet la précipitation de différents types de carbures [27]. Les atomes de carbone situés dans les sites interstitiels du réseau cristallin [28] sont également à l'origine du durcissement par solution solide [29].

Tableau 1.2 – Composition chimique de l'acier AISI H11 (en pourcentage massique)

C	Cr	Mn	V	Ni	Mo	Si	Fe
0,40	5,05	0,49	0,47	0,20	1,25	0,92	Bal.

Si l'acier AISI H11 ne fait pas partie de la famille des aciers inoxydables, sa teneur en chrome à 5% lui confère une résistance à l'oxydation en conditions de service, bien supérieure aux aciers faiblement alliés [30, 31]. Du fait de sa nature alphagène, le chrome favorise l'augmentation de la capacité du matériau à la trempe. Sa seconde nature carburigène possède une tendance à former des carbures de type M_2C_3, M_7C_3 et $M_{23}C_6$ [26, 27]. Ces derniers assurent la bonne résistance de l'acier à l'abrasion [32, 33] et participent à l'inhibition des grossissements des grains lors de la phase d'austénisation du traitement thermique. Ils contribuent également au retardement de la déconsolidation lors du revenu.

D'une manière analogue, le vanadium permet la formation de carbures de type MC et M_4C_3 [27] et l'inhibition des grossissements des grains lors du traitement thermique de l'acier. Le caractère durcissant des carbures MC contribue à l'obtention d'une dureté élevée du matériau à haute température et lui confère une remarquable résistance à l'usure [33]. Cependant, le vanadium, même à faible teneur, présente certains effets néfastes sur les propriétés d'usage. Il a en effet tendance à diminuer la tenue à l'oxydation de l'acier à l'air et à des températures élevées, mais celle-ci est plus ou moins compensée par la présence

du chrome. À noter également que la teneur en vanadium est liée à celle en carbone. Elle est le plus souvent limitée par des problèmes de trempabilité et de meulabilité après les opérations de trempe et revenu du traitement thermique [31].

En tant qu'élément carburigène, le molybdène favorise la création de carbures de type M_2C et M_6C permettant d'atteindre un niveau de dureté assez considérable ce qui contribue fortement à la résistance à l'usure [26,27,32,33]. Il procure aussi à l'acier un effet retardateur à l'adoucissement et s'oppose aux grossissements des grains lors de la phase d'austénisation du traitement thermique. Le molybdène présente des propriétés d'usage équivalentes au tungstène, mais son utilisation est essentiellement due à des raisons économiques [31].

Par ailleurs, le silicium permet de réduire et de diminuer respectivement la ségrégation et la stabilité des carbures de type M_2C [27, 34]. Ces derniers sont présents à l'état brut de coulée et subsistent après transformation à chaud entraînant une fragilisation du matériau. La teneur en silicium compense cette fragilisation et augmente la limite élastique. Il contribue également à la bonne tenue à l'oxydation à haute température et augmente la capacité de trempe [31]. Une diminution de la teneur en silicium permet une meilleure tenue en service de l'acier AISI H11 [34].

1.2.2 Traitements thermiques

Les traitements thermiques consistent en un ensemble d'opérations dans lesquelles le matériau est soumis en totalité ou partiellement à des cycles thermiques. Ces opérations permettent d'effectuer des transformations de la structure interne de l'acier et donc de lui conférer des propriétés d'usage répondant à un cahier des charges donné. Malgré les évolutions technologiques des traitements thermiques des aciers dans les dernières décennies, la connaissance des diverses opérations aussi bien sur le plan théorique que technique est essentielle pour une meilleure optimisation des propriétés d'emploi. Cette maîtrise de l'exécution du traitement thermique permet également de contourner certains incidents de mise en œuvre, notamment la surchauffe ou encore la rupture du matériau...

1.2.2.1 Opérations d'un traitement usuel

Le traitement thermique usuel de l'acier AISI H11 comprend trois opérations essentielles, à savoir le recuit, la trempe et le revenu [35].

Le recuit. Comme suite aux sévères sollicitations thermo-mécaniques de la fabrication de l'acier précédents le traitement thermique, le recuit consiste en la transformation de l'acier à un état dit « quasi-stable ». Celui-ci est constitué d'un mélange de ferrite et de carbures dont les proportions et les répartitions dépendent de l'histoire thermomécanique antérieure du matériau. Sur le plan mécanique, l'acier présente des niveaux de contraintes résiduelles très atténuées [36]. On distingue alors deux types d'opération de recuit dans le traitement thermique de l'acier AISI H11.

Le recuit de détente. Le recuit de détente a surtout pour idée d'atténuer le niveau des contraintes résiduelles dues aux sollicitations thermo-mécaniques antérieures. Il permet

d'atteindre un niveau d'adoucissement tel que les opérations de mise en forme ultérieures soient plus aisées. Son mode opératoire consiste en un maintien de quelques heures à une température de l'ordre de $750^{\circ}C$, soit inférieure à AC_1 [3], suivi d'un refroidissement contrôlé avec une vitesse de l'ordre de $20^{\circ}C.h^{-1}$ afin de ne pas générer de nouvelles contraintes. Ce recuit est surtout utile pour les outils de géométrie complexe, il favorise également l'atténuation des niveaux de déformations lors de l'opération de trempe ultérieure [35].

Le recuit d'homogénéisation. Si le recuit de détente consiste en l'atténuation des contraintes résiduelles, le recuit d'homogénéisation s'attache à une diminution des hétérogénéités dans le matériau. Il lui confère ainsi une structure interne plus uniforme constituée de ferrite et de carbures primaires [36]. Le cycle thermique associé comprend également un maintien de quelques heures à une température inférieure à AC_1 suivi le plus souvent d'un refroidissement à l'air.

La trempe. L'opération de trempe a essentiellement pour idée le durcissement de l'acier. Il consiste en deux phases distinctes dont les paramètres permettent de contrôler la dureté et la stabilité de l'état structural du matériau [4], à savoir l'austénisation et le refroidissement.

L'austénisation. Lors de la phase d'austénisation, la montée en température va bien au-delà de AC_1, soit près de $1000^{\circ}C$, en raison de la délicatesse de la mise en solution des carbures de type M_3C, M_7C et $M_{23}C_6$ présentés dans §1.2.1. Le temps de maintien est le plus souvent de quelques heures afin de permettre l'obtention d'une austénite assez homogène. Cependant, un compromis concernant cette durée doit être exposé. Le temps de maintien doit en effet être suffisamment court pour éviter d'éventuels risques d'importantes décarburations et croissances des grains austénitiques [37,38], mais également suffisamment long afin d'atteindre un certain équilibre thermodynamique.

Le refroidissement. Le milieu de refroidissement est un élément prépondérant pour l'opération de trempe. Son efficacité est liée à un ensemble de paramètres notamment la capacité calorifique, la capacité thermique ou encore la viscosité. Cet ensemble permet de contrôler les échanges thermiques entre la surface du matériau et le milieu de trempe. La nature et la composition de la structure interne de l'acier dépendent en effet de la vitesse de refroidissement. Ayant également pour objet l'obtention d'une structure martensitique quasi-homogène, l'opération de trempe nécessite des vitesses d'échanges thermiques assez élevées. Pourtant, lors du refroidissement, les risques d'importants gradients thermiques locaux peuvent avoir pour répercussions des champs de déformations et de contraintes assez conséquents, voire la rupture de l'outillage. La trempe à l'air représente ainsi le mode de refroidissement le moins sévère pour l'acier AISI H11, mais surtout le mieux approprié pour des géométries assez complexes.

3. Température à laquelle l'austénite commence à se former.
4. Les dimensions de l'outillage sont également des paramètres à prendre en compte lors de la trempe.

Si l'opération de trempe s'attache, en outre au durcissement du matériau, à l'homogénéisation martensitique de la structure interne de l'acier, des proportions non négligeables d'austénite résiduelle subsistent d'une manière imbriquée à la structure martensitique. La présence de ces proportions présente généralement des effets assez néfastes au niveau des propriétés d'emploi de l'acier AISI H11. L'austénite résiduelle a pour conséquences la diminution de la dureté ou la transformation en martensite secondaire par écrouissage provoquant ainsi des champs de déformations locaux assez importants [37, 38]. La quantité de l'austénite résiduelle est fortement liée à l'abaissement de M_f [5] et dépend de trois paramètres essentiels, à savoir la composition chimique, la température d'austénisation et la vitesse de refroidissement.

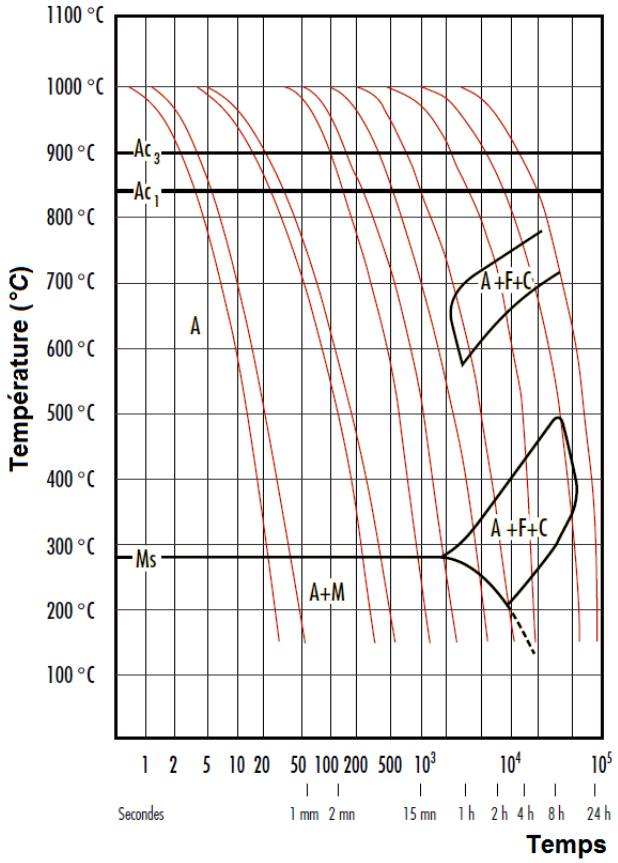


Figure 1.1 – Diagramme TRC (transformations en refroidissement continu) de l'acier AISI H11 (données Aubert & Duval)

Les valeurs assez élevées de la dureté affichées par l'acier AISI H11 comme suite à l'opération de trempe s'expliquent par des phénomènes physiques élémentaires au niveau de la structure interne du matériau. Ces phénomènes sont essentiellement liés à la forte densité de dislocations générées lors de la transformation martensitique, mais également à la présence de carbures non remis en solution [39].

5. Température à laquelle la transformation de l'austénite en martensite s'achève.

Le revenu. Le revenu ne présente a priori aucune difficulté particulière pourvu que les paramètres de cette opération, notamment la température et le temps de maintien, soient bien contrôlés. L'opération de revenu comporte l'idée d'éliminer l'austénite résiduelle et de conférer à l'acier la dureté finale et les propriétés mécaniques optimisées suivant le cahier des charges donné. Pour ce faire, un double revenu est nécessaire pour les aciers de type AISI H11. Le premier revenu est effectué à des températures de l'ordre $550^{\circ}C$ et concerne l'homogénéisation de la structure par la transformation de l'austénite résiduelle en martensite secondaire. Il s'accompagne également d'un premier adoucissement de la martensite issue de la trempe. Le second revenu permet d'adoucir la martensite secondaire et d'obtenir la dureté finale de l'acier. La température du second revenu dépend de la valeur de dureté fixée par le cahier des charges (Figure 1.2), elle se situe le plus souvent aux alentours de $600^{\circ}C$.

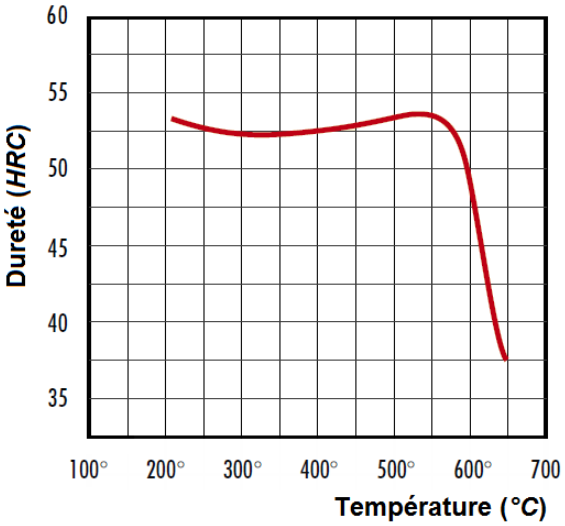


Figure 1.2 – Évolution de la dureté finale de l'acier AISI H11 en fonction de la température du second revenu (données Aubert & Duval)

Dans cet ordre, les risques liés à la transformation de l'austénite résiduelle en un mélange de ferrite et de carbures sont fortement atténués [35]. Cette transformation est très aisée si le premier revenu est effectué à une température de $600^{\circ}C$. Par ailleurs, la réalisation du second revenu sur une structure contenant de la martensite secondaire confère à l'acier des propriétés mécaniques mieux optimisées que s'il était effectué sur une structure contenant des agrégats de ferrite et de carbures.

Les phénomènes physiques élémentaires articulés autour des mécanismes de transformation de l'austénite résiduelle et de production de la martensite secondaire sont très complexes. Le flou qui réside sur ces phénomènes est lié à la complexité de la microstructure des aciers tels que l'AISI H11, mais également à la multitude de mécanismes physiques qui interviennent lors de l'opération de revenu. Sans rentrer dans les détails, le lecteur est invité à consulter la référence [35] dans laquelle l'auteur propose une séquence de mécanismes associés à la transformation de l'austénite résiduelle et à la production de la martensite secondaire.

1.2.2.2 Application à une nuance « SMV3 » à 47 HRC

Le présent travail s'intéresse à la nuance « SMV3 » à 47 HRC. Un barreau cylindrique de diamètre 80 mm et de hauteur 250 mm a fait l'objet d'un traitement thermique approprié en vue de l'obtention de propriétés d'usage optimisées (cf. §1.1). Les opérations de traitement thermiques sont résumées dans le Tableau 1.3. Celles-ci ont été réalisées dans un milieu inerte chez la société Bodycote afin d'éviter surtout les risques liés à l'oxydation. À noter également que l'environnement inerte permet de réduire les déformations internes lors des transformations de phase.

Tableau 1.3 – Traitement thermique effectué pour l'acier AISI H11 47 HRC

Austénisation	Trempe	1$^{\text{er}}$ revenu	2$^{\text{nd}}$ revenu
$1000^{\circ}C/1h$	gaz$/1h$	$550^{\circ}C/2h$	$605^{\circ}C/2h$

1.2.3 Microstructure

À l'issue du traitement thermique, l'acier AISI H11 présente une structure martensitique homogénéisée avec une architecture relativement complexe. Dans ce qui suit, l'intérêt est porté, dans un premier temps, aux aspects théoriques de cette microstructure avec un état de l'art qui traite les principales caractéristiques des structures martensitiques. La caractérisation expérimentale menée dans ce travail est présentée dans un second temps.

1.2.3.1 Microstructure martensitique : aspects théoriques

Transformation displacive non diffusionnelle. La transformation martensitique se distingue des transformations diffusionnelles qui s'établissent par des mécanismes de germination et nucléation d'une phase donnée [40–42]. Lors de l'opération de trempe, les vitesses d'échanges thermiques assez élevées provoquent un abaissement de la température qui correspond au début de la transformation martensitique M_s (Figure 1.1). Cette diminution de M_s induit une forte atténuation du caractère diffusionnel des atomes de carbone ainsi qu'une augmentation du potentiel chimique de la transformation associée à la différence entre les énergies libres des structures austénitique et martensitique. Le processus de transformation s'effectue en effet suivant un mouvement coopératif de l'ensemble des atomes constitutif. Ces derniers vont occuper de nouvelles positions grâce aux déplacements préalables des atomes voisins sur des distances inférieures à leur distance interatomique.

Le processus displacif de la transformation martensitique dans les aciers de type AISI H11 permet, à partir d'une phase austénitique ayant une structure de type cubique à faces centrées (CFC), la formation d'une structure quadratique centrée d'une manière analogue aux déformations plastiques [6]. Contrairement aux transformations diffusionnelles, ce phénomène ne requiert aucune activation thermique. Il se produit le plus souvent d'une manière instantanée, avec des vitesses de l'ordre de celle du son dans le fer, dans des zones dites de

6. Cette transformation est essentiellement caractéristique des aciers de type FeC. À noter que la nature de la structure cristalline de la martensite dépend du type d'alliage traité.

« transformation » situées au niveau des joints de grains austénitiques (Figure 1.3) [4,40,41]. Les liaisons atomiques dans ces zones sont ainsi modifiées et réformées[7] ce qui engendre l'allongement des réseaux cristallins selon certaines directions [41].

Par ailleurs, le rapport des paramètres de maille de la structure quadratique centrée de la phase martensitique sont associés au taux de carbone dans l'acier. Lorsque la teneur en celui-ci est assez faible, telle que dans l'acier AISI H11, la structure de la martensite peut être considérée comme étant cubique centrée (CC) [43].

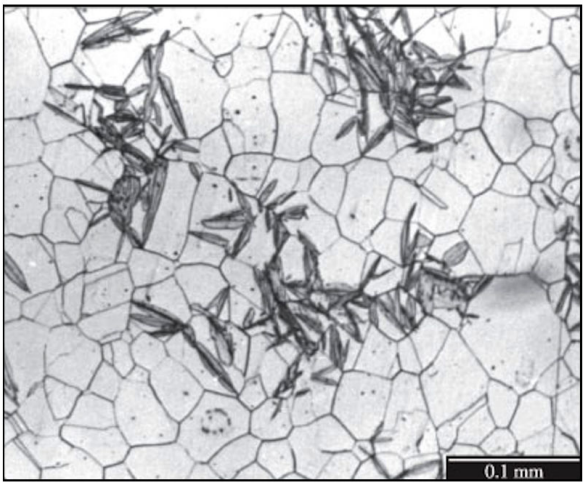


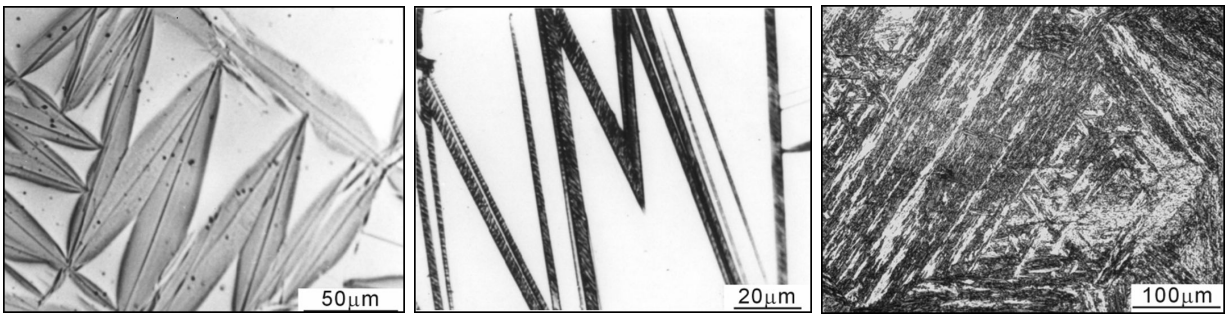
Figure 1.3 – Processus de transformation martensitique de par les joints de grains austénitiques [4]

Aspects morphologiques. Les mécanismes assez complexes de la transformation displacive font que la martensite α' de structure CC, ou éventuellement quadratique centrée, ait différentes morphologies. Des études antérieures montrent que selon la teneur en carbone et la température M_s, l'acier présente le plus souvent les morphologies qui suivent [5, 6] :

- un aspect sous forme lenticulaire marquée (Figure 1.4a) qui apparaît pour les aciers fortement alliés ayant une teneur en carbone relativement importante et une température de début de formation de la martensite M_s élevée,
- une morphologie de plaquette (Figure 1.4b) caractéristique des aciers ayant également une importante teneur en carbone, une température M_s un peu plus élevée que l'aspect lenticulaire mais de faible proportion en éléments d'alliages,
- un aspect morphologique sous forme de lattes empilées en paquets (Figure 1.4c) pour les aciers alliés et ayant une faible teneur en carbone, soit inférieure à 0,4%.

À noter également que d'autres aspect morphologiques peuvent apparaître à l'issue de la transformation martensitique. Quand la température M_s prend des valeurs extrêmement faibles, la martensite prend occasionnellement la forme de micro-plaquettes avec une forte densité de macles. Des morphologies ayant de formes de « papillons », correspondant à des

7. Ce phénomène est équivalent aux conséquences des mouvements des dislocations en déformations plastiques.



(a) Morphologie en lentilles (b) Morphologie en plaquettes (c) Morphologie en lattes

Figure 1.4 – Principaux aspects morphologiques des aciers martensitiques [5]

plaquettes maclées formant des « zigzags », peuvent également se révéler dans des aciers ayant des teneurs assez importantes en carbone et des températures M_s modérées.

Outre la température M_s, il est évident que la teneur en carbone s'illustre comme étant un paramètre essentiel dans l'aspect morphologique de la martensite. Par ailleurs, des études de métallurgistes ont été menées sur ce sujet sur des alliages de types Fe-Cr-C et Fe-Ni-C [8, 44, 45]. En modifiant les paramètres de l'opération de trempe, i.e de la phase d'austénisation du traitement thermique, il est assez aisé d'obtenir une variabilité de la teneur en carbone dans l'acier. Les examens micrographiques révèlent que la distinction des paquets dans lesquels les lattes sont empilées est de plus en plus délicate avec l'augmentation de la teneur en carbone. Les dimensions des lattes deviennent également de plus en plus faibles avec une tendance d'une métamorphose en une morphologie lenticulaire pour des teneurs massiques en carbone de l'ordre de 0,8% (Figure 1.5).

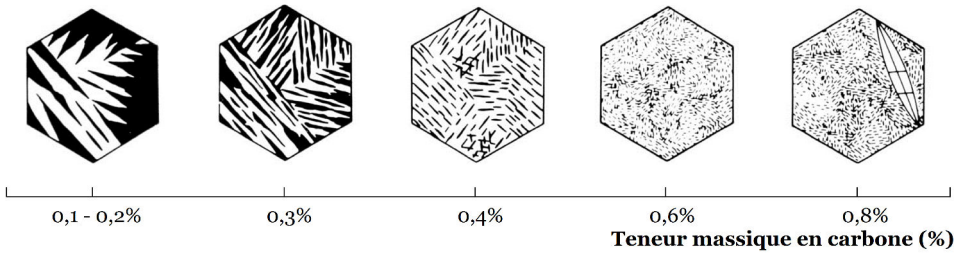


Figure 1.5 – Évolution de l'aspect morphologique de la structure martensitique en fonction de la teneur (massique) en carbone d'après [6]

Aspects structuraux. Comme évoqué précédemment, le processus de transformation martensitique s'établit suivant des mécanismes displacifs similaires aux déformations plastiques, mais plus typiquement aux déformations par cisaillement. Ces mécanismes obligent alors une certaine cohérence entre les réseaux des structures austénitique et martensitique. Les aspects structuraux de la martensite induits, à savoir les caractéristiques des défauts engendrées, les plans d'habitat et les relations d'orientations, sont à l'image des aspects morphologiques. Ils dépendent en effet de la composition chimique de l'acier et des paramètres des opérations du traitement thermique.

Caractéristiques des défauts structuraux. La martensite en plaquettes se différencie, en outre de son aspect morphologique, de la martensite ayant une morphologie en lattes par le type de défaut structural interne dans les réseaux. Des études antérieures montrent que le maclage est une caractéristique structurale de la martensite en plaquettes [5]. Néanmoins, ce type de défaut n'est guère mis en évidence dans la martensite en lattes. Cette dernière est en effet caractérisée par un enchevêtrement concentré de dislocations. La densité de celles-ci est associée à la dureté du matériau issu de l'opération de revenu, tel qu'exposé dans les travaux de Mebarki et al. [46] concernant l'acier AISI H11.

Si l'approche menée par Mebarki et al. reste qualitative en raison de la complexité de la structure interne de l'acier en question, d'autres auteurs ont pu établir une dialectique quantitative des dislocations sur des aciers assez similaires. Sandvik et Wayman [47] montrent que les dislocations qui concernent les martensites en lattes sont le plus souvent les dislocations vis avec quatre vecteurs de Burgers possibles, de type $\frac{a}{2}\langle 1\,1\,1\rangle_{\alpha'}$. Leur étude quantitative révèle une prépondérance de la densité des dislocations ayant des vecteurs de Burgers selon $\frac{a}{2}[1\,1\,-1]_{\alpha'}$. Par ailleurs, les examens menés sur les interfaces entre les structures martensitiques et austénitiques ont permis de mettre en évidence des groupements de dislocations parallèles ayant des vecteurs de Burgers $\frac{a}{2}[1\,-1\,1]_{\alpha'}$ || $\frac{a}{2}[0\,-1\,1]_{\gamma}$.

Plans d'habitat. D'un point de vue macroscopique, le plan d'habitat, également connu sous l'appellation de plan d'accolement, correspond à l'interface des structures martensitiques et austénitiques. Il s'agit d'un plan invariant par le processus de transformation martensitique (Figure 1.6). Lors de la déformation par cisaillement, l'orientation du plan d'habitat est conservée et les positions relatives des atomes constitutifs sont inchangées [42]. Certes, les caractéristiques du plan d'habitat dépendent des mécanismes du processus de transformation, mais plus typiquement de la capacité des structures austénitiques et martensitiques à accommoder des déformations par cisaillement. Ceci se traduit également par la dépendance de la nature du plan d'habitat de l'ampleur de l'énergie élastique à l'interface des deux structures.

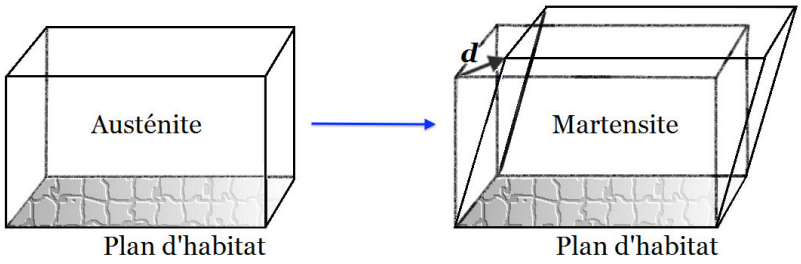


Figure 1.6 – Schématisation de la transformation displacive d'une structure austénitique via une déformation d constituée d'un cisaillement et d'une translation (liée à l'allongement de la structure martensitique) d'après [7]

D'une manière analogue aux aspects morphologiques de la martensite, la composition chimique et les paramètres des opérations de traitement thermique présentent des impacts sur la nature et l'orientation du plan d'habitat. Ces impacts peuvent être mis en évidence par

le biais de méthodes assez pointues qui utilisent la microscopie électronique en transmission (MET), notamment la méthode d'inclinaison des lames minces ou la méthode d'analyse de traces (Figure 1.7). Les études menées sur ce sujet présentent une multitude de possibilités d'identification de l'orientation du plan d'accolement selon la morphologie de la structure martensitique [8, 42, 44, 45] :

- Pour les martensites ayant une morphologie lenticulaire, l'orientation du plan est généralement selon $\{2\,5\,9\}_\gamma$.
- Dans le cas des martensites en plaquettes, l'orientation du plan d'habitat est le plus souvent proche de $\{2\,2\,5\}_\gamma$, $\{2\,5\,9\}_\gamma$, ou encore $\{3\,10\,15\}_\gamma$ pour les aciers ayant une faible température M_s.
- En ce qui concerne les martensites ayant une morphologie en lattes, une importante dispersion des orientations des plans d'habitat est constaté dans la littérature. Les plans d'accolement mis en évidence sont bien souvent orientés selon $\{1\,1\,1\}_\gamma$, $\{1\,1\,2\}_\gamma$, $\{3\,3\,5\}_\gamma$, $\{2\,2\,3\}_\gamma$, ou encore $\{5\,5\,7\}_\gamma$ (Figure 1.7).

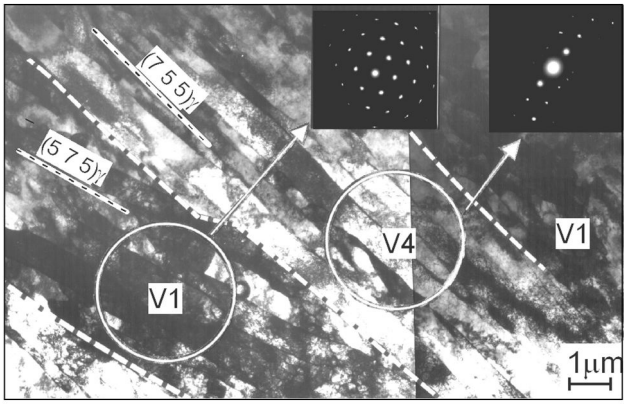


Figure 1.7 – Identification des orientations des plans d'habitat et des variants martensitiques par la méthode d'analyses de traces au MET [8]

Relations d'orientations. Le caractère displacif du processus de transformation implique également des relations d'orientations bien définies entre les structures austénitiques et martensitiques, et ce, quel que soit l'aspect morphologique de ces dernières [5, 42]. La cohérence d'orientations entre les deux structures a été initialement associée au mécanisme de Bain [9]. Ce dernier a en effet proposé un modèle de mécanisme de transformation en se fondant sur les paramètres des mailles des structures austénitiques et martensitiques. Celui-ci consiste en une contraction selon la direction $[0\,0\,1]_\gamma$ d'une maille quadratique centrée commune à deux mailles adjacentes de la structure austénitique suivi d'une dilatation homogène suivant $[0\,1\,0]_\gamma$ et $[1\,0\,0]_\gamma$. Le modèle de transformation de Bain se traduit ainsi par un tenseur de déformation sphérique.

Cependant, comme évoqué ci-dessus, les plans d'habitats sont toujours présents et mis en évidence par des reliefs de surface lors des transformations martensitiques. Or, le modèle de mécanisme de Bain n'illustre pas de plan invariant. Pour satisfaire une telle condition, le tenseur de déformation associé doit comporter une composante principale nulle tout en

ayant les autres de signe contraire [48]. Ceci n'est guère aisé en raison de la cohérence à respecter des relations interfaciales issues du processus de transformation. La considération de déformations supplémentaires, notamment le glissement, s'avère ainsi nécessaire pour retrouver un plan d'accolement.

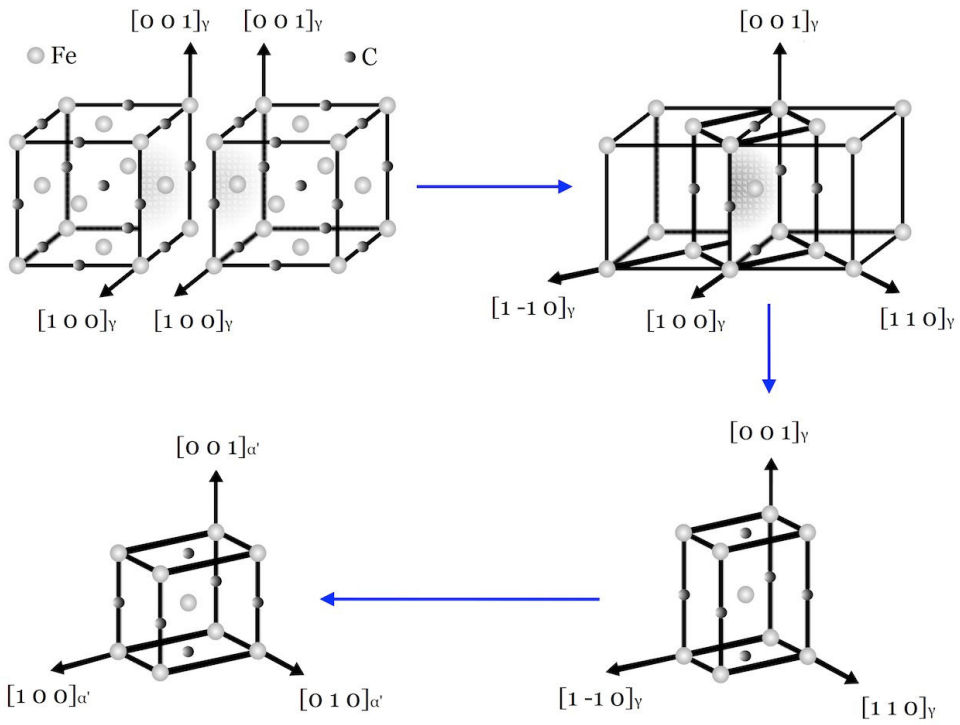


Figure 1.8 – Schématisation du mécanisme de transformation de Bain d'après [9]

La cohérence interfaciale entre les structures martensitiques et austénitiques fait qu'une configuration fréquente des orientations cristallographiques se joint aux plans les plus denses et des directions compactes parallèles. Sur ce principe, des relations d'orientations ont été par la suite proposées, à savoir Kurdjumov-Sachs (KS) [49], Nishiyama-Wassermann (NW) [50] et Greninger-Troiano (GT) [51]. Celles-ci ont été toutes instaurées sur la base du parallélisme entre les plans $\{1\,1\,1\}_\gamma$ et $\{1\,1\,0\}_{\alpha'}$. Les directions compactes associées s'attachent à ces plans et sont désorientées à quelques degrés près (Tableau 1.4).

Tableau 1.4 – Correspondance de quelques relations d'orientations

Kurdjumov-Sachs (KS)	Nishiyama-Wassermann (NW)	Greninger-Troiano (GT)
$\{1\,1\,1\}_\gamma \parallel \{1\,1\,0\}_{\alpha'}$ $\langle 1\ -1\,0\rangle_\gamma \parallel \langle 1\,1\ -1\rangle_{\alpha'}$ $\langle 1\ -2\,1\rangle_\gamma$ à 5,26° $\langle 1\,0\ -1\rangle_{\alpha'}$	$\{1\,1\,1\}_\gamma \parallel \{1\,1\,0\}_{\alpha'}$ $\langle 1\ -1\,0\rangle_\gamma$ à 5,26° $\langle 1\,1\ -1\rangle_{\alpha'}$ $\langle 1\ -2\,1\rangle_\gamma \parallel \langle 1\,0\ -1\rangle_{\alpha'}$	$\{1\,1\,1\}_\gamma \parallel \{1\,1\,0\}_{\alpha'}$ $\langle 1\ -1\,0\rangle_\gamma$ à 2,5° $\langle 1\,1\ -1\rangle_{\alpha'}$ $\langle 1\ -2\,1\rangle_\gamma$ à 2,5° $\langle 1\,0\ -1\rangle_{\alpha'}$

D'une manière plus concrète, la relation KS est définie par le parallélisme possible entre les trois directions compactes de la structure austénitique $\langle 1\,1\,0\rangle_\gamma$ et les deux directions de

la structure martensitique $\langle 1\,1\,1\rangle_{\alpha'}$. En tenant compte des quatre plans denses équivalents, cette définition lui attribue la possibilité de 24 relations d'orientations. Dans la relation NW, seule la direction de la structure martensitique $\langle 1\,1\,2\rangle_{\alpha'}$ peut être parallèle à la direction $\langle 1\,1\,0\rangle_{\gamma}$. La relation NW est donc caractérisé par uniquement 12 relations d'orientations. Dans le cas de la relation GT, on retrouve également 24 relations d'orientations issues des six possibilités de parallélisme entre les directions $\langle 123\rangle_{\gamma}$ et $\langle 133\rangle_{\alpha'}$. Le Tableau 1.5 présente les principales données caractéristiques de quelques relations d'orientation usuelles.

Tableau 1.5 – Données caractéristiques des relations d'orientations usuelles

Relation d'orientation	Parallélisme	Nombre de variants	Désorientation minimale
Bain [9]	$\{1\,0\,0\}_{\gamma} \parallel \{1\,0\,0\}_{\alpha'}$ $\langle 1\,0\,0\rangle_{\gamma} \parallel \langle 1\,1\,0\rangle_{\alpha'}$	3	$45^{\circ}/\langle 1\,1\,0\rangle$
Kurdjumov-Sachs [49]	$\{1\,1\,1\}_{\gamma} \parallel \{1\,1\,0\}_{\alpha'}$ $\langle 1\,1\,0\rangle_{\gamma} \parallel \langle 1\,1\,1\rangle_{\alpha'}$	24	$42,85^{\circ}/\langle 0,968\,0,178\,0,178\rangle$
Nishiyama-Wassermann [50]	$\{1\,1\,1\}_{\gamma} \parallel \{1\,1\,0\}_{\alpha'}$ $\langle 1\,1\,2\rangle_{\gamma} \parallel \langle 1\,1\,0\rangle_{\alpha'}$	12	$45,98^{\circ}/\langle 0,976\,0,083\,0,201\rangle$
Greninger-Troiano [51]	$\{1\,1\,1\}_{\gamma} \parallel \{1\,1\,0\}_{\alpha'}$ $\langle 1\,2\,3\rangle_{\gamma} \parallel \langle 1\,3\,3\rangle_{\alpha'}$	24	$44,23^{\circ}/\langle 0,973\,0,189\,0,133\rangle$
Pitsch [52]	$\{1\,0\,0\}_{\gamma} \parallel \{1\,1\,0\}_{\alpha'}$ $\langle 1\,1\,0\rangle_{\gamma} \parallel \langle 1\,1\,1\rangle_{\alpha'}$	12	$45,98^{\circ}/\langle 0,08\,0,20\,0,98\rangle$

À l'image des aspects traités précédemment, la composition chimique, les paramètres des opérations du traitement thermique mais également la texture cristallographique initiale de la structure austénitique, conditionnent généralement le type de relation d'orientation dans la martensite. La détermination du type de relations reste une opération relativement délicate. Elle s'effectue par le biais de techniques similaires à celles de l'identification des plans d'habitat, à savoir la méthode d'analyse de traces au MET (Figure 1.7) ou encore le dépouillement des cartographies d'EBSD [53–55].

Bien que certains auteurs approuvent la prépondérance de la relation d'orientation KS dans les structures martensitiques ayant une morphologie en lattes [8, 44], d'autres démontrent que les relations de type NW ou GT sont celles qui prédominent dans les aciers à faibles teneurs en carbone [56]. Par ailleurs, selon certaines études antérieures, l'unicité des relations d'orientations n'est pas assurée au sein du même matériau [53, 55]. On parle alors de modes mixtes. Ces derniers sont essentiellement liés à l'état et aux évolutions du système microstructural au cours du processus de transformation martensitique. Plus typiquement, la multitude des relations d'orientation s'attache aux dilatations différentielles qui se produisent lors du traitement thermique, mais également aux contraintes résiduelles locales.

Il est évident qu'une importante dispersion des relations d'orientation est constatée dans les structures martensitiques. Cependant, certains auteurs, notamment Réglé et al. [57], persistent sur l'unicité des relations suivies lors des processus de transformation. Dans leur

étude, les diverses relations d'orientations, mises en évidence par analyse EBSD, sont associées aux désorientations initiales au sein d'un même grain austénitique. Cette constatation consolide l'idée de la complexité d'identification du type de relation préférentielle et de l'orientation de la structure austénitique. Toutefois, les relations d'orientation usuelles de type KS, NW ou GT sont relativement proches. Les modes mixtes sont le plus souvent situés dans un espace borné respectivement par les relations KS et NW.

1.2.3.2 Caractérisation expérimentale

Comme suite aux opérations de traitement thermique réalisées et présentées dans §1.2.2.2 (Tableau 1.3), l'acier AISI H11 présente une microstructure martensitique. Des analyses au MEB et EBSD sont effectuées au niveau des surfaces de plaques extraites par électroérosion du barreau cylindrique traité [8] (cf. §1.2.2.2). La première permet une approche plus ou moins qualitative, tandis que la seconde est mise à profit pour une caractérisation explicite et quantifiée de la structure interne du matériau.

Analyses au MEB. À l'issue d'un polissage classique, une attaque chimique au nital 3% permet de révéler la structure martensitique de l'acier AISI H11. Les observations actuelles ont été effectuées dans un MEB-FEG [9] Nova NanoSEM 450. Ces analyses mettent en évidence un aspect morphologique en lattes assez hétérogènes dont la taille, à première vue, est inférieure à 2 μm (Figure 1.9). Cependant, la révélation des carbures et des dislocations avec des analyses au MEB reste une opération très délicate. Pour ce faire, l'usage du MET associé à des méthodes de préparation, à savoir la méthode des répliques [27] ou celle des lames minces, permet d'effectuer des analyses à des échelles encore plus fines.

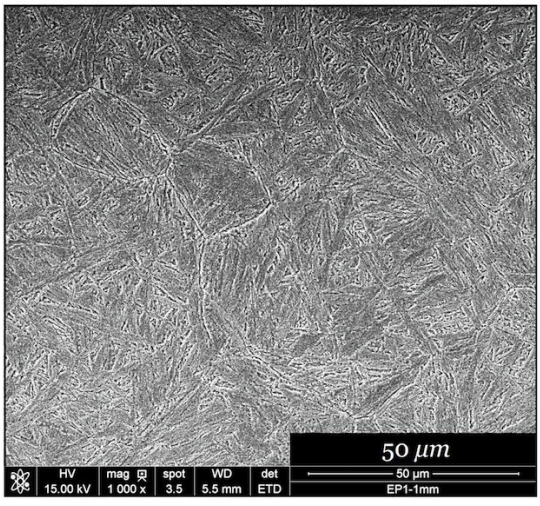


Figure 1.9 – Structure martensitique en lattes et mise en évidence des anciens joints de grains austénitiques de l'acier AISI H11 au MEB

8. Ces plaques sont dimensionnées en vue d'une génération de surfaces similaires à celles issues de la mise en œuvre des outillages de mise en forme (cf. §1.3).

9. Canon à émission de champs (« Field Emission Gun »).

Outre l'aspect morphologique de la martensite, les observations au MEB menées dans le présent travail ont permis la mise en évidence des anciens joints de grains austénitiques selon leurs reliefs (Figure 1.9). Cette mise en évidence, qui n'est toutefois pas aisée, amène à une estimation de la taille des anciens grains austénitiques qui est de l'ordre de 30 μm pour l'acier AISI H11 concerné. Par ailleurs, une analyse plus approfondie à l'échelle de ces anciens grains révèle une distinction de paquets dans lesquels les lattes de martensite sont empilées d'une manière quasi-parallèle (Figure 1.10). Ces observations semblent être bien cohérentes avec les études antérieures menées sur ce sujet (cf. §1.2.3.1).

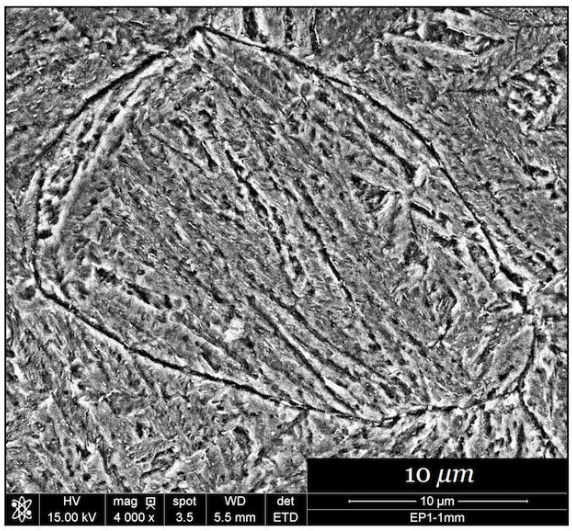


Figure 1.10 – Structure d'un ancien grain austénitique de l'acier AISI H11 observée au MEB

Analyses EBSD. L'EBSD est une technique permettant de cartographier une surface d'analyse d'un matériau métallique donné et de quantifier un certain nombre de caractéristiques de sa structure interne au travers des orientations cristallographiques des cristaux constitutifs [10]. Les présentes analyses ont été réalisées au Centre National d'Études Spatiales (CNES) sur le site de Toulouse, dans un MEB-FEG Zeiss Ultra 55.

Dans le contexte actuel, une zone située au niveau de l'épaisseur d'une plaque en acier AISI H11 est analysée par la technique EBSD. Le champs spatial de celle-ci a pour dimensions 300×150 μm^2. La préparation de la surface d'analyses a été réalisée par une série de polissages mécaniques jusqu'à une finition à base de silice colloïdale suivie d'un polissage vibratoire atténuant l'écrouissage résiduel. Cette méthode de préparation suppose ainsi une non perturbation de l'incidence du faisceau d'électrons, soit un balayage de la surface selon une incrémentation stable. À noter que la résolution du faisceau d'électrons balayant la surface concernée est de 150 nm. De par cette approche, les mesures réalisées ont permis la génération d'un ensemble de données caractéristiques de la cartographie en question. Ces

10. les diverses définitions des orientations et désorientations cristallographiques sont respectivement présentés dans l'Annexe B.

données sont répertoriées dans des fichiers de format « .ctf » et traitées avec la toolbox Mtex, développée à l'Université de Freiburg (Allemagne), dans Matlab [58].

Qualité des mesures. La cartographie de la zone analysée comprend près de 1,9 *Mpixels*, à savoir que chaque pixel définit une mesure EBSD. Cependant, certaines mesures présentent des indexations de Kikuchi erronées ou isolées. Celles-ci se situent le plus souvent au niveau des joints de grains, mais également aux points triples ce qui met en cause les superpositions des clichés. La première étape consiste alors en la correction de la cartographie EBSD par élimination de l'ensemble des pixels isolés ou mal indexés. Pour ce faire, des extrapolations des valeurs moyennes des indexations moyennes des pixels les plus proches sont réalisées au niveau des pixels considérés. La répartition spatiale des pixels mal indexés ou isolés est donnée en Figure 1.11. À noter que la zone analysée présente un taux de mauvaise indexation de 5,02%.

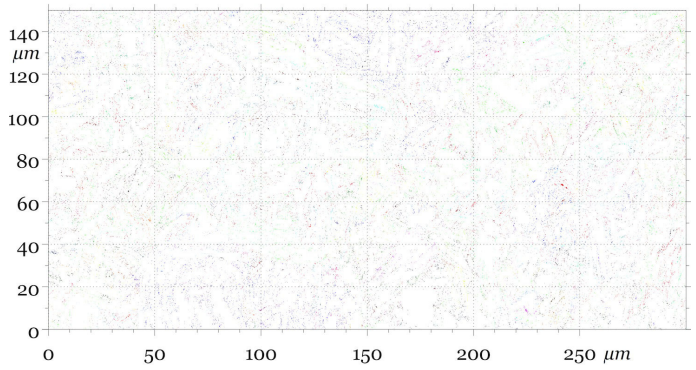


Figure 1.11 – Répartition spatiale des pixels mal indexés ou isolés dans la zone d'analyses

La qualité des mesures s'évalue également par l'intensité, le contraste ou encore la netteté des bandes de Kikuchi. Ces paramètres sont fortement liés à la précision des analyses EBSD dans la mesure où ils reflètent la nature et l'état de la structure interne du matériau concerné. Ils permettent alors de donner des informations complémentaires concernant l'état de la structure interne quand seule l'indexation automatique ne suffit pas. À l'image de la mauvaise indexation, les joints de grains et les points triples présentent des sites privilégiés pour la perturbation de ces paramètres en raison des fortes densités de dislocations. Par ailleurs, des études antérieures utilisent ces paramètres pour évaluer le niveau des déformations locales et identifier la nature des phases présentes [59, 60]. Dans le contexte actuel, la quasi-homogénéité de la répartition spatiale de la netteté des bandes de Kikuchi illustre, à titre d'exemple, la pertinence de la qualité des mesures et consolide bien la nature martensitique monophasée de la structure analysée.

La désorientation locale constitue un autre paramètre reflétant la qualité des mesures EBSD. Celle-ci consiste à évaluer la variabilité des orientations cristallographiques locales au sein d'un grain donné. Le calcul de la désorientation locale s'effectue pour chaque pixel en considérant l'ensemble des pixels voisins du premier ordre. À noter que ce calcul prend en compte une certaine tolérance, le plus souvent aux alentours de 5°, afin de ne pas incorporer

les joints de grains dans le champ des désorientations locales. Outre la pertinence des mesures, ce paramètre permet également d'évaluer l'état de la structure interne du matériau, plus typiquement, l'état des déformations et contraintes locales. Plus la désorientation locale est élevée, plus le « grain » est contraint et affiche des déformations résiduelles. La qualité des mesures associées a donc tendance à être plus médiocre. Dans les présentes analyses, à l'image de la cartographie de netteté, la répartition spatiale des désorientations locales est quasiment homogène avec des valeurs plus ou moins inférieures à l'unité. Les valeurs élevées des désorientations sont essentiellement localisées aux joints des lattes de martensite. Ces analyses reflètent alors un état non contraint de l'acier.

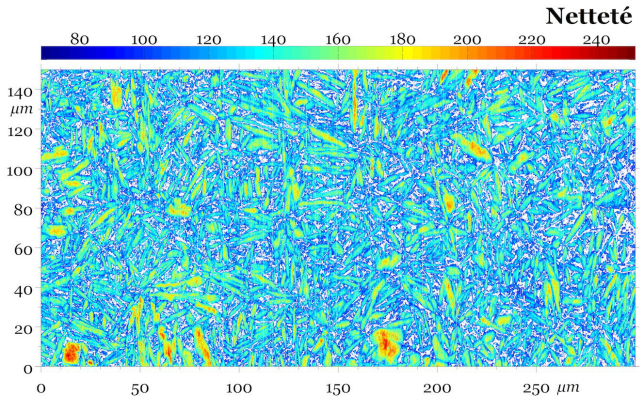


Figure 1.12 – Répartition spatiale de la netteté des bandes de Kikuchi dans la zone d'analyses

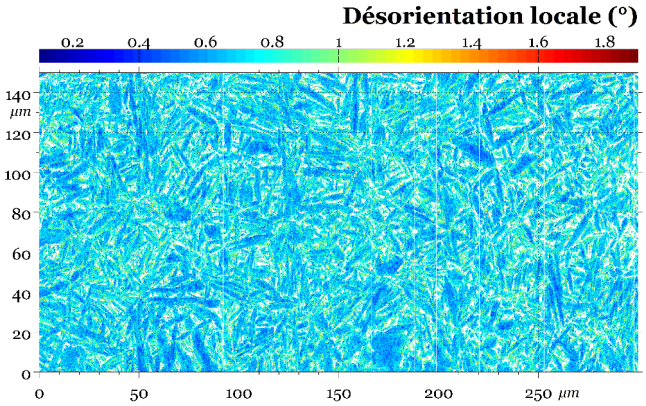
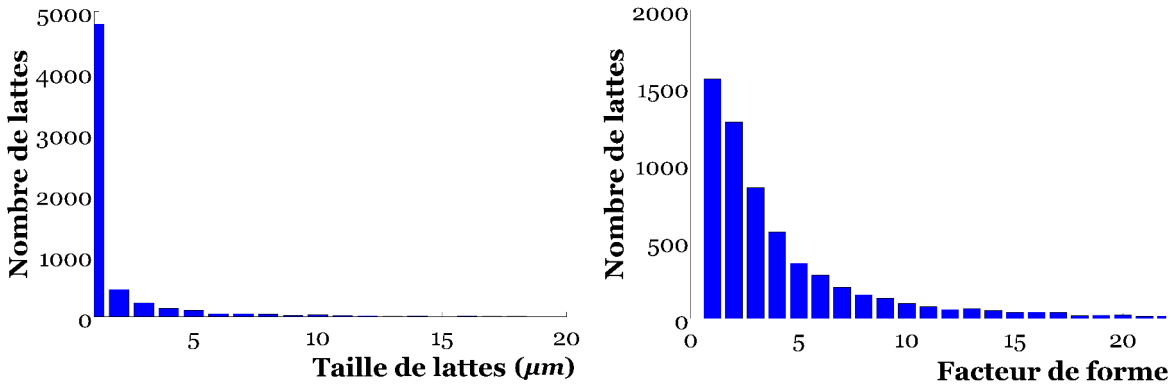


Figure 1.13 – Répartition spatiale des désorientations locales dans la zone d'analyses

Granulométrie. Comme évoqué précédemment, les mesures EBSD permettent des analyses quantitatives quant à la morphologie et la répartition des lattes martensitiques au sein de la zone concernée. Les mesures effectuées ont en effet permis un comptage de 6056 lattes de martensite. Par ailleurs, selon les analyses statistiques menées, les lattes

possèdent une taille de 2,02 ± 1,90 μm (Figure 1.14b) et un facteur de forme de 2,77 ± 0,56 (Figure 1.14a). À savoir que le facteur de forme correspond au ratio de la plus grande longueur sur le petit axe de l'ellipse équivalente à la latte martensitique. Un facteur proche de l'unité reflète des lattes « équiaxes », tandis que l'aspect morphologique allongé des lattes est traduit par des valeurs plus importantes du facteur de forme. Dans les analyses actuelles, le faible allongement est généralement associé à des lattes de faible taille dont l'orientation est orthogonale à la surface ou la détection présente éventuellement un bruit de fond numérique.



(a) Taille de lattes de martensite

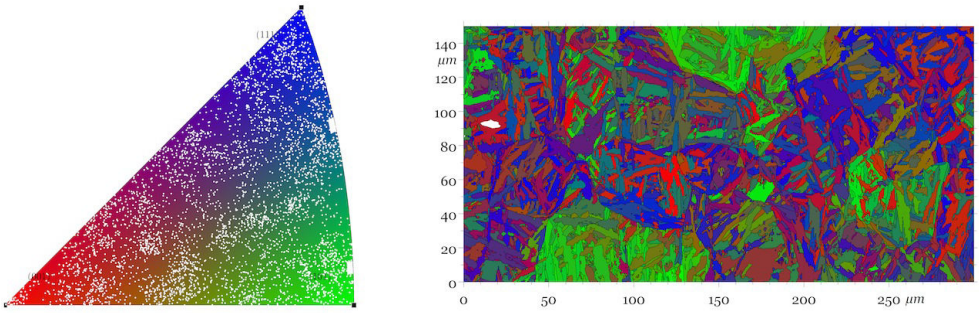
(b) Facteurs de forme

Figure 1.14 – Analyses statistiques des données de la granulométrie de l'acier AISI H11

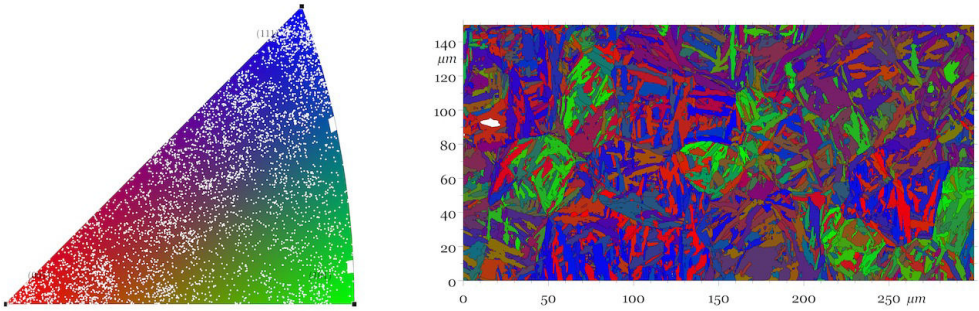
Texture cristallographique. Dans l'état actuel, les analyses EBSD ne mettent en évidence aucune texture globale anisotrope apparente. Cet aspect justifie le caractère macroscopique isotrope de la texture de l'acier préalable aux opérations de traitement thermique. La Figure 1.15 présente les répartitions spatiales des orientations cristallographiques selon les trois axes principaux de la plaque en acier AISI H11. Les spectres associés, sous forme de figure de pôle inverse, comportent les différentes orientations des lattes pour mettre en évidence le caractère isotrope global du matériau.

De par ces analyses, il est assez aisé d'extraire les différentes orientations cristallographiques sous la forme d'angles d'Euler ou encore des indices de Miller. Il est également possible d'identifier par le biais de ces données les relations d'orientations entre la structure austénitique et celle de la martensite (Tableau 1.5), ainsi les anciens joints de grains austénitiques. Pour ce faire, les approches nécessaires sont relativement complexes et coûteuses malgré les diverses études menées sur ce sujet [6, 8, 53–55, 61]. Celles-ci utilisent des traitements spécifiques de ces données et consistent à établir des relations d'équivalence entre les désorientations locales des pixels indexés et les valeurs de désorientations théoriques des variants des relations d'orientations usuelles (Tableau 1.5). Ces approches ont été surtout développées dans le cadre de la théorie phénoménologique de la transformation martensitique, en vue d'une meilleure appréhension des mécanismes associés [42]. Dans le présent travail, ce type de traitement de données n'a pas été mis en place en raison de son

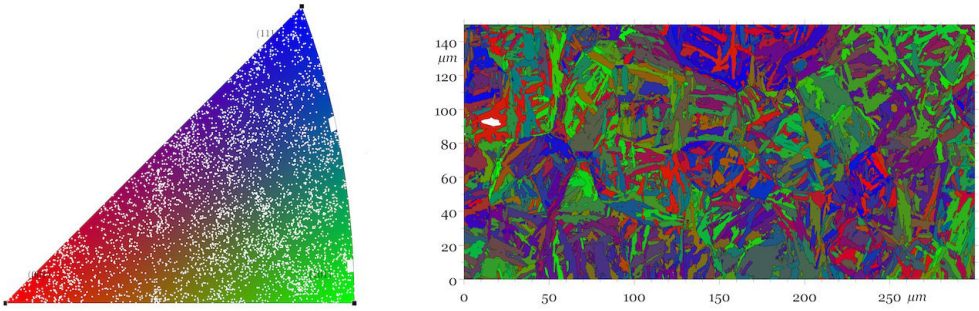
coût et du fait que les bornes des modes mixtes sont désorientées uniquement de près de 5° (Tableau 1.4). Cependant, de par les cartographies des orientations cristallographiques, il est possible d'établir une première estimation des anciens paquets dans lesquels les lattes martensitiques sont empilées. Cette estimation est faite sur la base de l'aspect morphologique des lattes de martensite qui sont regroupées d'une manière quasi-parallèle (Figure 1.15).



(a) Orientations et figure de pôle inverse selon l'axe X



(b) Orientations et figure de pôle inverse selon l'axe Y



(c) Orientations et figure de pôle inverse selon l'axe Z

Figure 1.15 – Répartitions spatiales des orientations selon les directions principales du repère de la plaque et figures de pôles inverses associées

1.2.4 Comportement mécanique

En raison des enjeux économiques qui s'articulent autours de la durée de vie des outillages de mise en forme, l'intérêt porté au comportement mécanique de l'acier AISI H11

s'est bien illustré au cours de ces dernières années. Les études menées sur ce sujet se distinguent essentiellement par le type d'approche utilisé, à savoir :

- une approche globale du comportement en vue du développement de modèles purement phénoménologiques [10, 62],
- une approche locale caractérisant les mécanismes physiques élémentaires associés au comportement sans pour autant les incorporer dans les modèles prédictifs [38, 46].

Ce paragraphe comporte, dans un premier temps, l'idée de la mise en place d'un état de l'art sur le comportement phénoménologique quasi-statique et cyclique de l'acier AISI H11. L'accent est essentiellement mis sur le comportement à température ambiante qui fait l'objet du présent travail. Des essais cycliques complémentaires nécessaires à l'identification du modèle multi-échelle sont effectués dans un second temps. La dernière partie de ce paragraphe s'attache aux mécanismes physiques élémentaires associés au comportement qui sont à incorporer dans les approches multi-échelles.

1.2.4.1 État de l'art

Comportement monotone. À température ambiante, l'acier AISI H11 présente un comportement quasi-statique global de type élasto-plastique. La Figure 1.16 et le Tableau 1.6 présentent respectivement la courbe et les paramètres de l'essai de traction uniaxiale mené par Barrau [3].

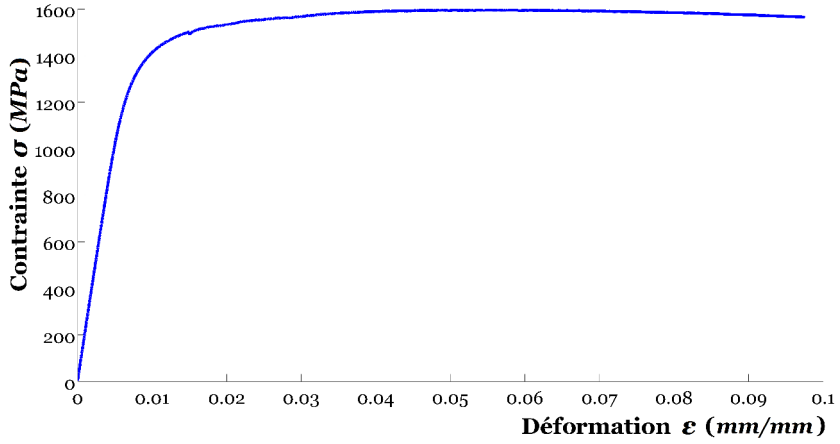


Figure 1.16 – Courbe de traction quasi-statique uniaxiale de l'acier AISI H11 à température ambiante d'après [3]

Selon ces données, l'acier AISI H11 présente un léger écrouissage (durcissement) dès la limite de la surface de charge. Une forte ductilité est par la suite explicitement mise en évidence, et ce, jusqu'à la rupture du matériau. Le niveau de contrainte y est quasiment constant. À noter que l'acier présente un léger adoucissement mécanique à partir d'un taux de déformation aux alentours de 8%. Cet adoucissement peut en effet être associé à une certaine variation de la section de la zone utile ou éventuellement à de l'endommagement ductile. Dans son étude, Barrau [3] fait ressortir une amplification de ce phénomène à des hautes températures (de l'ordre de 500 et 600°C). Dans ces mêmes conditions, l'auteur

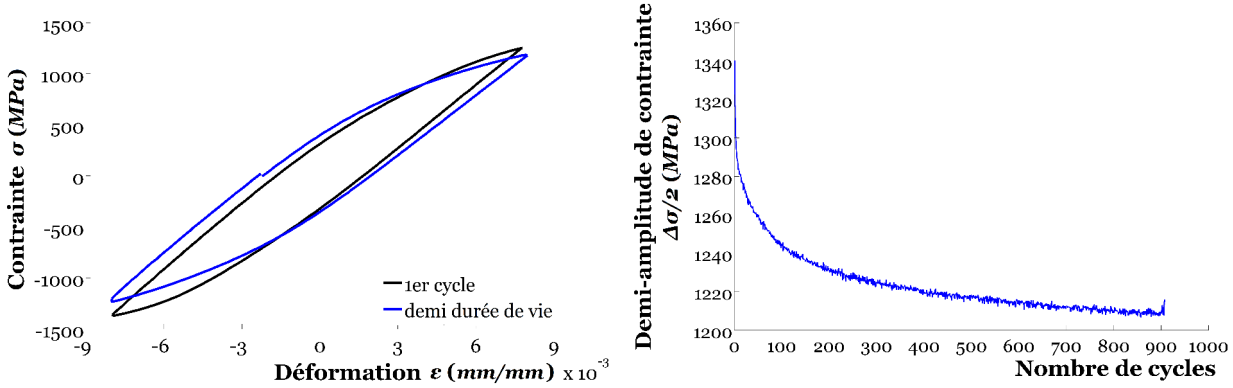
Tableau 1.6 – Données caractéristiques du comportement quasi-statique uniaxial de l'acier AISI H11 à température ambiante

$E\ (GPa)$	$R_{e0,2}\ (MPa)$	$R_m\ (MPa)$	$A\ (\%)$
208,0	1270,0	1560,0	9,8

constate une forte baisse de la limite d'élasticité $R_{e0,2}$ et du module d'Young E, mais une augmentation conséquente du comportement ductile.

Par ailleurs, il est inhérent de mentionner que la procédure de l'essai mécanique présenté ci-dessus comporte deux types de pilotage. Dans un premier temps, une vitesse de contrainte de 6 $MPa.s^{-1}$ est imposée, et ce, jusqu'à un taux de déformation de 1,5%. La suite de l'essai est pilotée en déplacement, plus typiquement avec une vitesse de 4,5 $mm.s^{-1}$. Ce découplage de la procédure d'essai est en effet à l'origine du saut constaté à l'issue de la transition élasto-plastique du comportement mécanique (Figure 1.16).

Comportement cyclique. Le comportement cyclique de l'acier AISI H11 se distingue du comportement monotone par un mécanisme caractéristique de la quasi-totalité des aciers martensitiques, celui-ci étant la déconsolidation cyclique. L'étude menée par Velay [10] sur le comportement en fatigue de l'acier AISI H11 a pu aisément mettre en évidence cet aspect par le biais d'une campagne d'essais cycliques. L'essai, présenté dans la Figure 1.17, est réalisé à une amplitude de déformation totale imposée de 1,6%, et fait explicitement ressortir deux phases de déconsolidation distinctes. Une déconsolidation quasi-instantanée qui a lieu lors des premiers cycles de sollicitation et une déconsolidation moins conséquente dont l'évolution est continue et linéaire jusqu'à la rupture du matériau. À noter que la seconde phase de ce mécanisme est d'autant plus prononcée que la température d'essai est importante.

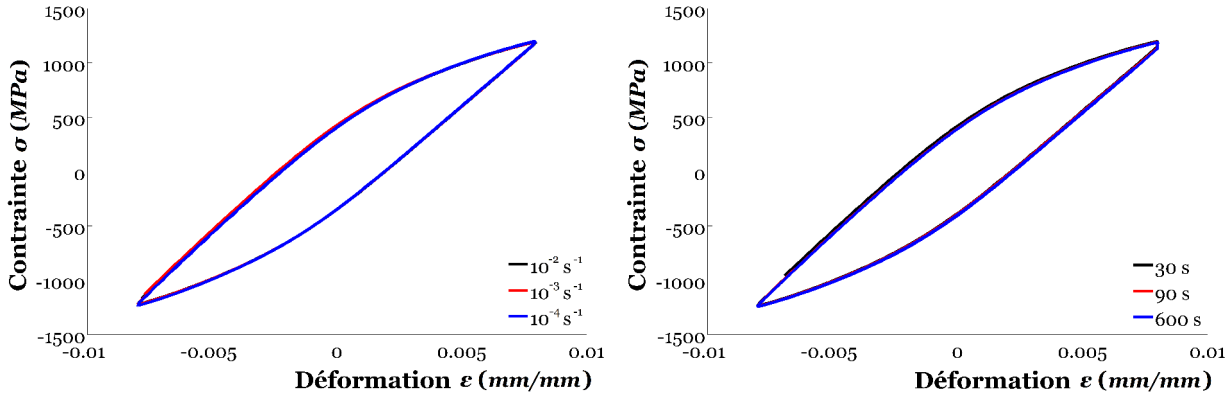


(a) Courbe σ - ε (b) Courbe $\Delta\sigma/2$ - Nombre de cycles

Figure 1.17 – Comportement cyclique de l'acier AISI H11 à température ambiante ($\Delta\varepsilon = 1,6\%$) et mise en évidence de la déconsolidation cyclique d'après [10]

Dans son étude, Velay [10] témoigne en outre de l'absence totale d'effets visqueux sur le comportement phénoménologique cylique à température ambiante. Cette constatation a

été mise en évidence par des essais cycliques à diverses vitesses de sollicitations (Figure 1.18a) mais également par des cycles de fatigue relaxation réalisés avec différents temps de maintien en traction (Figure 1.18b). La dépendance du comportement cyclique à l'échelle macroscopique se révèle essentiellement à des températures de sollicitations assez élevées.



(a) Essais à différentes vitesses de sollicitations (b) Essais de fatigue − relaxation

Figure 1.18 – Mise en évidence du caractère indépendant du temps du comportement cyclique phénoménologique de l'acier AISI H11 à température ambiante d'après [10]

Par ailleurs, le type de sollicitations a une influence apparente sur le comportement cyclique de l'acier AISI H11. Lors d'un chargement imposé en contrainte non symétrique, la réponse de l'acier révèle un certain effet de rochet. Celui-ci consiste en une augmentation progressive du taux de déformation, qui toutefois peut se stabiliser par accommodation en quelques cycles (Figure 1.19). La vitesse de cette accommodation dépend surtout de la température à laquelle le matériau est sollicité.

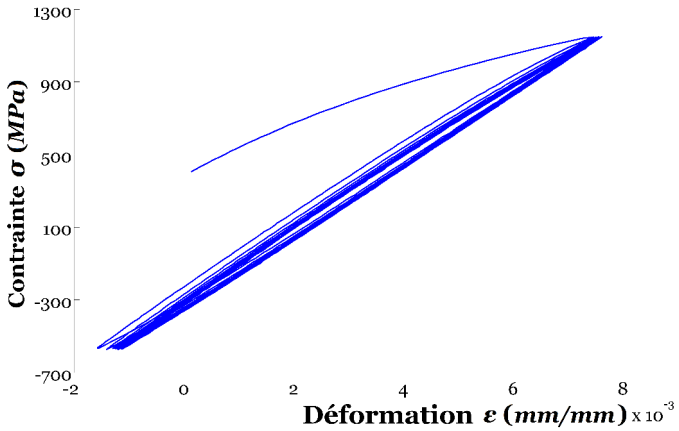


Figure 1.19 – Illustration de l'effet de rochet lors des sollicitations à contraintes imposées sur l'acier AISI H11 à température ambiante d'après [10]

1.2.4.2 Essais cycliques complémentaires

En vue d'une approche qui consiste à instaurer une base de donnée relativement complète sur le comportement mécanique de l'acier AISI H11 à température ambiante, des essais cycliques complémentaires sont menés dans le présent travail. Les procédures et les données expérimentales sont traitées dans ce qui suit.

Procédures expérimentales. L'ensemble des essais cycliques sont réalisés sur une machine électrohydraulique de type Schenck Hydroplus série 56 ayant une capacité de charge de 250 kN. Le système de mesure est constitué d'un extensomètre longitudinal ayant une base de 10 mm pour la déformation et d'un pont de mesure incorporé dans la machine et permettant l'obtention d'une tension proportionnelle à la déformation. La valeur instantanée de cette déformation est comparée au sein d'un régulateur à la valeur de consigne que délivre le générateur de fonctions. L'écart entre ces deux valeurs est amplifié et un second signal est envoyé afin de minimiser la marge de différence entre la valeur instantanée et celle de la consigne. Par ailleurs, une erreur de mesure de $\pm 4\%$ a été précédemment constatée dans une plage de déformation totale comprise entre $\pm 0{,}3\%$ et $\pm 1\%$. L'ensemble mécanique est reliée à un ordinateur permettant l'enregistrement des configurations des consignes de pilotage, mais également d'acquisition et le stockage de l'essai en cours. Les consignes sont transmises par l'intermédiaire du générateur de fonctions engendrant ainsi l'action des mors hydrauliques. Dans le présent contexte, les signaux du générateur de fonctions sont triangulaires et la fréquence utilisée est de 1 Hz. Les données dont la fréquence d'acquisition peut être programmée manuellement dans les consignes de configurations d'essai sont stockeés par le logiciel propriétaire Vistest.

Dans les conditions expérimentales actuelles, des éprouvettes cylindriques sont utilisées. Celles-ci sont dimensionnées de manière à ce que le facteur théorique de concentration de contrainte K_t soit considéré comme étant le paramètre prépondérant afin d'éviter les risques liés au flambement et à la rupture aux congés de raccordement [63]. À noter également qu'un polissage à pâte diamantée est réalisé sur ces éprouvettes en vue d'une optimisation de l'état de surface.

Le programme expérimental destinée au comportement cyclique de l'acier AISI H11 à température ambiante comporte deux types d'essais opérés à amplitude de déformation totale imposée. Le premier type d'essai (essais 1 et 2) consiste à définir une amplitude de déformation fixe avec un rapport de charge $R = -1$, et ce, jusqu'à la ruine du matériau. Quant au second type (essai 3), celui-ci est de type traction - traction avec un rapport de charge R nul. Le Tableau 1.7 présente un récapitulatif des essais cycliques menés.

Tableau 1.7 – Amplitudes de déformation des différents essais cycliques

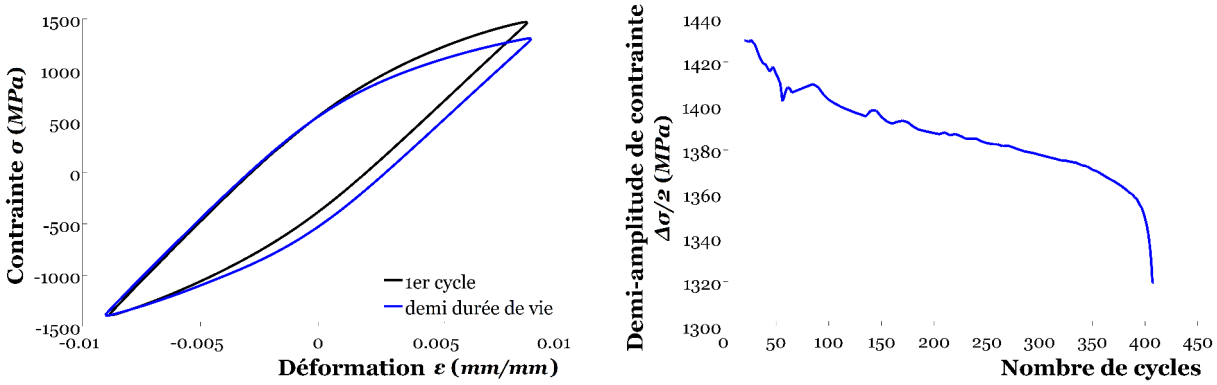
N° d'essai	Essai 1	Essai 2	Essai 3
$\Delta\varepsilon$	1,8%	2,2%	1,5%

Traitement et analyse des données. Pour chaque essai présenté ci-dessus, les consignes d'acquisition des données expérimentales sont programmées de manière à enregistrer les 25 premiers cycles, puis avec une fréquence d'un enregistrement tous les cinq cycles. Le traitement de ces données qui consistent en temps, déplacement, force, déformation et contrainte permettent l'extraction de certains paramètres caractéristiques des boucles d'hystérésis du comportement en fatigue, notamment :

- l'amplitude de déformation totale ($\Delta\varepsilon$),
- l'amplitude de déformation plastique pour un cycle donnée ($\Delta\varepsilon_p$),
- l'amplitude de contrainte pour un cycle donnée ($\Delta\sigma$),
- la déformation plastique cumulée (p),
- l'intensité de déconsolidation cyclique ($\delta\sigma$).

De par ce traitement de données, les courbes $\sigma - \varepsilon$ et $\Delta\sigma/2-$ Nombre de cycles, ou éventuellement $\sigma - \varepsilon_p$ et $\Delta\sigma/2 - p$, peuvent être tracées.

L'ensemble des essais menés mettent en évidence le caractère de déconsolidation cyclique à température ambiante de l'acier AISI H11. L'intensité de déconsolidation cyclique du premier essai réalisé à une amplitude de déformation totale de 1,8% n'a cependant pas pu être évalué correctement, comme dans la quasi-totalité des essais. L'amplitude de déformation prescrite n'a pu être atteinte qu'au 20^{e} cycle dans cet essai [11]. Les données antérieures ne sont alors pas prises en compte et le premier cycle de la Figure 1.20 correspond en effet à la 20^{e} boucle d'hystérésis.



(a) Courbe $\sigma - \varepsilon$ (b) Courbe $\Delta\sigma/2-$ Nombre de cycles

Figure 1.20 – Essai cyclique à amplitude de déformation totale imposée de 1,8%

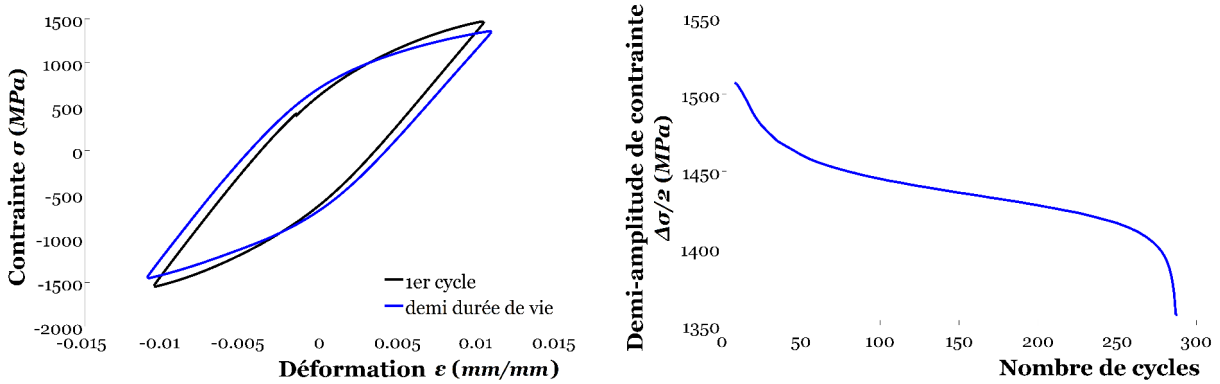
À l'image de l'essai prescrit à une amplitude de déformation totale de 1,6% par Velay [10], le présent essai met en évidence les deux phases de déconsolidation continue et instantanée [12], mais fait ressortir en outre une dernière phase qui correspond à une chute de la contrainte caractéristique de la rupture du matériau. Le cycle stabilisé est défini dans ce

11. Les premiers cycles peuvent être prise en compte. Cependant, en vue de simplifier l'exploitation des essais et la procédure d'identification menée dans le chapitre 4, seules les boucles d'hystérésis ayant des amplitudes de déformation prescrites atteintes sont considérés.

12. La mise en évidence de la déconsolidation instantanée est fortement atténuée en raison de la non prise en compte des données des 20 premières boucles d'hystérésis.

contexte comme étant la dernière boucle d'hystérésis avant la chute brutale de la contrainte. Par ailleurs, il est clair que la déconsolidation est apparente uniquement dans le sens de la traction. Le niveau de contrainte en compression est quasiment constant tout au long de l'essai. Ceci a pour conséquences des erreurs de surestimation de l'amplitude de contrainte et des complications au niveau de l'identification du modèle multi-échelle. À noter que cette constatation est essentiellement due au banc d'essai utilisé qui présente probablement des problèmes de symétrie. Néanmoins, selon les données récoltées, on peut noter un niveau de contrainte plus conséquent et une durée d'essai moins importante que celui qui a été réalisé à une amplitude de déformation totale de 1,6%. L'intensité de déconsolidation ne peut être comparée en raison du fait que les deux essais n'ont pas été effectués dans les mêmes conditions et du manque de données. Cependant, on constate une intensité de déconsolidation continue légèrement plus importante pour ce premier essai.

Pour les mêmes raisons liées aux conditions expérimentales, la prise en compte de l'acquisition des données n'est effectuée qu'après le 10^{e} cycle pour le second essai à amplitude de déformation totale de 2,2%. Contrairement aux données précédentes, la déconsolidation instantanée se fait nettement mieux sentir malgré quelques éléments manquants (Figure 1.21b). L'intensité de la déconsolidation continue, tout comme la réponse en contrainte de l'acier, est plus conséquente que dans l'essai précédent. De même, la durée de l'essai est bien inférieure, ce qui est assez cohérent, vu l'amplitude de déformation imposée. Par ailleurs, malgré les problèmes de symétrie persistants, la déconsolidation s'illustre un peu mieux dans les deux sens des sollicitations que précédemment (Figure 1.21a).

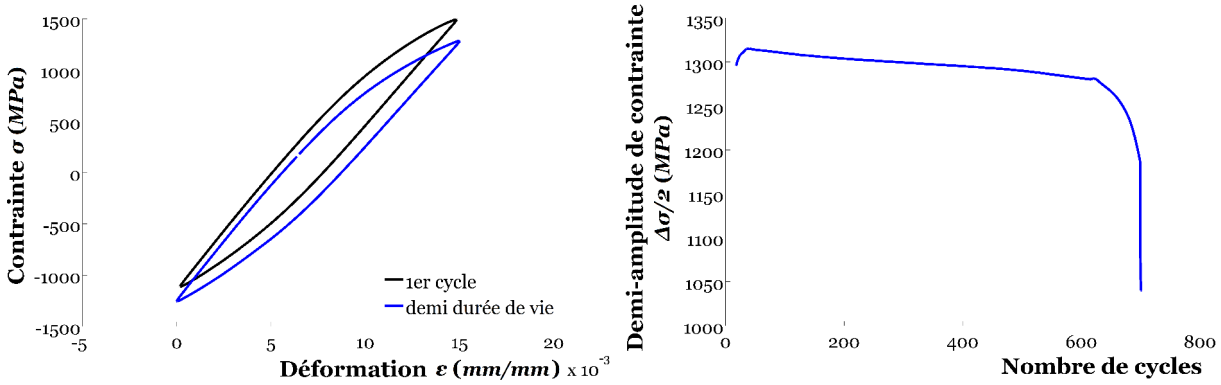


(a) Courbe $\sigma - \varepsilon$ (b) Courbe $\Delta\sigma/2-$ Nombre de cycles

Figure 1.21 – Essai cyclique à amplitude de déformation totale imposée de 2,2%

Le dernier essai du premier type a été réalisé avec un rapport de charge nul ($\Delta\varepsilon = 0,0 - 1,5\%$) en raison du niveau de déformation prescrit dans le sens de la traction. Cette approche a été effectuée en vue d'éviter le flambage de l'éprouvette et ainsi une interruption prématurée de l'essai. En dépit d'une amplitude de déformation totale inférieure à l'essai réalisé par Velay, la durée du présent essai est moins importante que celui-ci. Cette constatation est en effet articulée au rapport de charge qui fait que, dans le cas actuel, la plasticité cumulée est plus conséquente dès les premiers cycles. À noter également que la durée de cet essai reste tout de même inférieure à celle des essais présentés ci-dessus. Par

ailleurs, la déconsolidation instantanée n'est pas constatée ici malgré une prise en compte des données acquises dès lors du 20^{e} cycle. Seule une déconsolidation continue et linéaire est apparente sur la quasi-totalité de l'essai, précédant la chute soudaine de la contrainte (Figure 1.22b). Une très faible consolidation est même constatée lors des premières boucles d'hystérésis (Figure 1.22b), mais qui pourrait être une conséquence des problèmes de symétrie rencontrés fréquemment. Ces derniers sont désormais nettement mis en évidence dans cet essai. Le minimum de la contrainte dans les boucles d'hystérésis a en effet tendance à diminuer au lieu d'augmenter,d'où une certaine translation de ces boucles (Figure 1.22a).



(a) Courbe $\sigma - \varepsilon$ (b) Courbe $\Delta\sigma/2-$ Nombre de cycles

Figure 1.22 – Essai cyclique à amplitude de déformation totale imposée de 1,5%

Le Tableau 1.8 résume quelques données caractéristiques des essais cycliques présentés.

Tableau 1.8 – Paramètres caractéristiques des essais de premier type

N° d'essai	ε_{min} (%)	ε_{max} (%)	$\delta\sigma$ (MPa)	Cycles à rupture
Essai 1	−0,9	+0,9	73	407
Essai 2	−1,1	+1,1	95	284
Essai 3	0,0	+1,5	47	698

1.2.4.3 Mécanismes physiques élémentaires

Si le comportement non linéaire de l'acier AISI H11 est dépendant des conditions de sollicitations d'un point de vue macroscopique, des mécanismes physiques élémentaires à des échelles locales sont également à l'origine des réponses mécaniques du matériau.

Certes, d'une manière commune à la quasi-totalité des structures métalliques, le comportement non linéaire s'intéresse aux mouvements des dislocations selon des systèmes de glissement donnés définis par un ensemble de plans et directions compactes du réseau cristallin. Comme évoqué dans §1.2.3.1, le mouvement des dislocations vis a lieu par glissement dévié selon les directions $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$, ce qui est caractéristique des structures CC. Quant à la

nature des plans de glissement, une importante dispersion de leur identification est constatée dans la littérature. Le premier mécanisme pionnier du mouvement des dislocations dans les structures CC est certainement celui qualifié de « pencil glide » proposée par Taylor et Elam [64]. Celui-ci suggère que seule la direction $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ est l'élément déterminant du mécanisme et s'établit selon un plan fortement contraint, mais pas nécessairement cristallographique ou compact. De leur côté, Gough [65] et Barret et al. [66] définissent les plans compacts de type $\{1\ 1\ 0\}$, $\{1\ 1\ 2\}$ ou encore $\{1\ 2\ 3\}$ comme étant les plans privilégiés du mouvement des dislocations. Dans leur approche, le mécanisme proposé par ces auteurs est qualifié de « easy glide », dans lequel le mouvement de dislocations s'opère selon uniquement la loi de Schmid [67] (cf. chapitre 3). Cependant, des études plus récentes font valoir le fait que l'aspect « easy glide » dans les structures CC s'articule autour de l'orientation du cristal constitutif [68]. Le mécanisme « pencil glide » est bien présent mais s'opère surtout sur des plans compacts.

De par ce mouvement des dislocations, des mécanismes de multiplications et d'annihilation de ce type de défaut peuvent s'établir. Contrairement au contexte du chargement quasi-statique, la déconsolidation cyclique résulte d'une diminution de la densité des dislocations. Des études antérieures de caractérisation au MET ont en effet mis en évidence cet aspect sur les aciers martensitiques et notamment l'acier AISI H11. Outre l'annihilation qui s'opère selon le signe des dislocations, des cellules de faible densité de dislocations se génèrent et enclenchent un mouvement plus libre de ces défauts [38, 46, 69, 70]. À noter que ces mécanismes physiques élémentaires sont également à l'origine de l'effet Bauschinger lors des essais cycliques sur l'acier AISI H11.

À une échelle équivalente, les différents carbures présents dans la structure interne de l'acier ont tendance à coalescer lors des sollicitations cycliques. De par ces coalescences qui s'accentuent à haute température, des obstacles se forment et le mouvement des dislocations est perturbé [46]. L'accommodation qui en résulte apporte une forte contribution à la diminution de la densité de dislocations, d'où la déconsolidation cyclique de l'acier. Par ailleurs, les études menées sur la durée de vie des aciers martensitiques font ressortir le fait que les carbures coalescés présentent des sites privilégiés d'initiation de fissures [71].

D'autres études sur la déconsolidation cyclique et l'effet Bauschinger des aciers martensitiques font valoir que ces aspects sont les conséquences de la coalescence des lattes et des « paquets » lors des sollicitations cycliques [72–74]. Bien que ces études aient été menées à hautes températures, les auteurs associent ce mécanisme à ceux de la coalescence des carbures et de l'accommodation des dislocations. Cependant, cette coalescence des lattes et des « paquets » est également influencée par la stéréologie de la structure interne et les orientations des cristaux constitutifs.

1.3 Surface

Dans le langage usuel, la surface d'un corps matériel est un ensemble de points présentant un domaine spatial frontalier avec le milieu environnant. Celui-ci est caractérisé par des discontinuités de nature physico-chimique ou mécanique par rapport au milieu considéré. En d'autres termes, l'approche simplifiée de la surface consiste en la partie « visible » et

« extérieure » du corps matériel. Cependant, en science des matériaux, la notion de surface présente une définition plus générale. Celle-ci constitue désormais une certaine épaisseur comprise généralement entre 10^{-2} et 10^{-6} mm et est caractérisée par un gradient de propriétés physico-chimiques et mécaniques. Suivant cette approche, Beilby [75] introduit dans son étude une description qualitative de la surface permettant de distinguer certaines zones du gradient de propriétés. L'auteur fait ressortir que les premières couches sont surtout constituées de films de contamination et d'oxydation à hauteur de quelques microns. En se rapprochant du cœur du matériau, celles-ci s'attachent à des couches superficielles présentant un certain écrouissage mécanique.

Comme évoqué précédemment, la surface est la zone privilégiée des sollicitations thermomécaniques lors des opérations de forge. Les modes d'endommagement présentés en introduction de ce manuscrit dépendent du type de sollicitations et de l'état de la structure interne du matériau en surface. On rappelle également que la réalisation des outillages de mise en forme induit des évolutions de l'architecture microstructurale. Les caractéristiques et défauts résultant de la mise en œuvre des outillages sont souvent données à des échelles distinctes (Figure 1.23) et ont des effets néfastes sur les performances mécaniques du matériau. L'échelle de ces caractéristiques microstructurales revêt alors d'une importance conséquente pour l'optimisation des performances mécaniques des outillages.

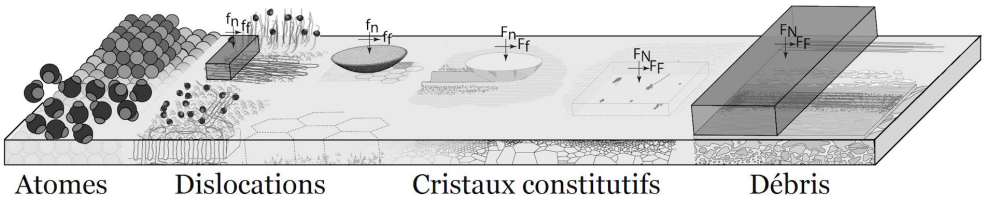


Figure 1.23 – Échelles des défauts microstructuraux engendrés par l'opération de réalisation des outillages d'après [11]

En vue d'appréhender le comportement non linéaire en service de l'acier AISI H11, ce paragraphe se consacre à la présentation d'un mode opératoire permettant la reproduction à l'échelle du laboratoire d'une surface similaire à celle issue du procédé de réalisation des outillages. Il s'agit de couches superficielles à caractère macroscopique anisotrope tel que présenté en introduction de ce manuscrit. Le système microstructural induit est ensuite caractérisé par les techniques appropriées.

1.3.1 Procédé expérimental

1.3.1.1 Banc d'essais

La reproduction de surfaces similaires à celles obtenues par la mise en œuvre des outillages a été réalisée à l'Institut Universitaire de Technologie (IUT) de Figeac. Le banc d'essai mis à profit [76] est semblable à celui utilisé pour les essais cycliques présentés dans §1.2.4.2. Plus concrètement, le banc consiste en une machine d'essais mécanique hydraulique de type MTS ayant une capacité de charge de 120 kN (Figure 1.24). Des organes de frottement sont placés latéralement sur la machine via des accessoires de jonctions structurées

en poutres et rattachées à des colonnes. Ces composants sont agencés de pions cylindriques de prises latérales d'appuis antagonistes contre la plaque. Ces pions sont conçus en carbure et ont pour dimensions un diamètre de 10 mm et une hauteur de 250 mm. Les accessoires de jonctions sont équipés de moyens de déplacement des organes de frottement entre une position dégagée et une position de travail. Ces derniers composants sont par ailleurs reliés à des cellules de charge de 25 kN permettant la mesure des efforts de contact. À noter également que l'ensemble de ces composants est relié à un ordinateur permettant la programmation des configurations des consignes d'essais et l'acquisition des diverses données. La transmission des consignes est réalisée via un générateur de fonctions engendrant l'action des mors hydrauliques et le travail des organes de frottement.

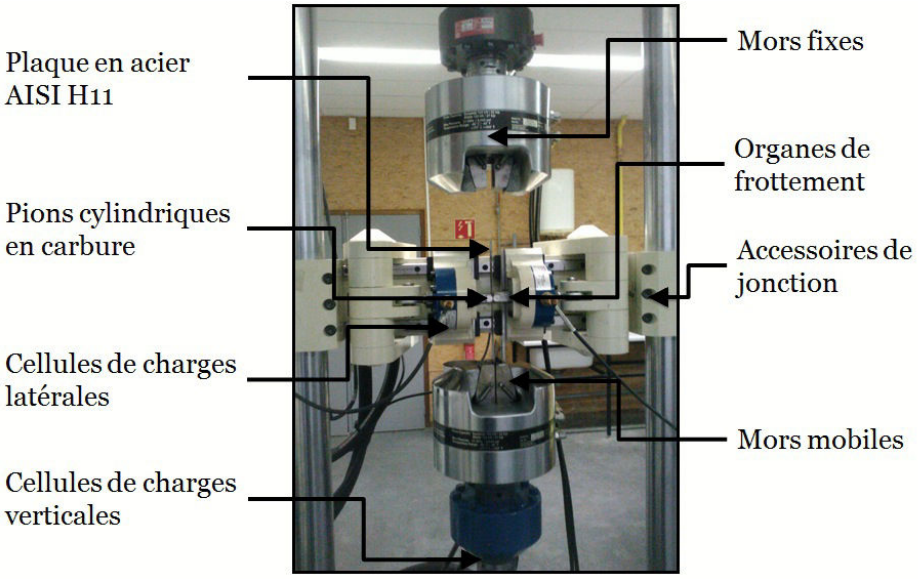
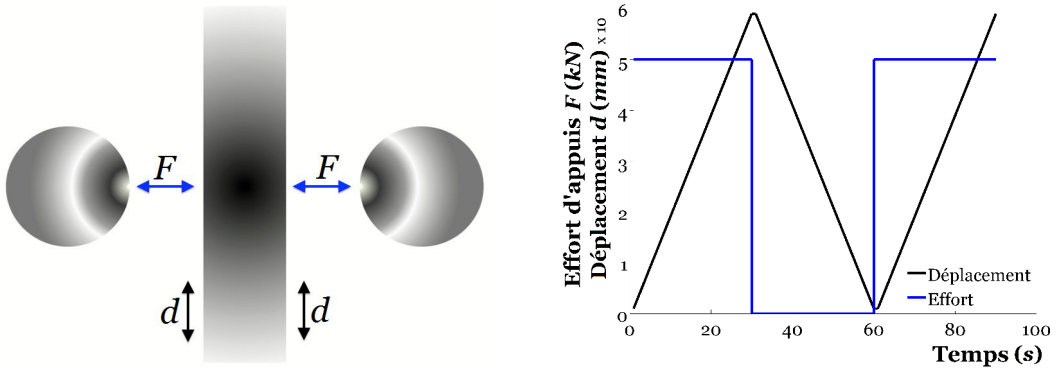


Figure 1.24 – Banc d'essais polyvalent de préparation de surface

1.3.1.2 Conditions de chargement

Dans le contexte actuel, il est évident qu'une approche par fatigue de contact à température ambiante n'est guère adaptée pour générer des surfaces semblables à l'opération de réalisation des outillages, et ce, en raison de la dureté de 47 HRC de l'acier AISI H11. Le mode opératoire comporte alors l'idée de procéder à des chargements cycliques relativement élevés mais limités en nombre en vue d'un écoulement inélastique des couches superficielles du matériau. En tenant compte des contraintes géométriques et des capacités de charge du banc d'essai ci-dessus et par l'intermédiaire d'un pré-dimensionnement numérique, il a été convenu de traiter six plaques équiréparties de dimensions respectives de $270 \times 20 \times 1$ mm^3 (premier type) et de $270 \times 20 \times 0{,}5$ mm^3 (second type). Le mode opératoire consiste alors à imposer des efforts d'appui antagonistes latéraux contre la plaque et d'appliquer une translation verticale par déplacement des mors mobiles reliés au socle de la machine. À la fin de l'intervalle de translation, qui est de 60 mm, les organes agencés des pions sont relâchés à une distance dégagée et la plaque est ramenée à sa position initiale également par

déplacement des mors mobiles. Par ailleurs, il est inhérent de mentionner qu'à l'exception d'un cas test, ces consignes sont réalisées en une vingtaine de cycles pour l'ensemble des plaques. Les valeurs des forces sur les appuis antagonistes des pions sont respectivement aux alentours de 10 kN pour le premier type de plaque et de 5 kN pour le second type.



(a) Schématisation (b) Courbes F, d – temps

Figure 1.25 – Conditions de chargement des essais de préparation de surface

Tableau 1.9 – Paramètres caractéristiques des essais de premier type

N° de plaque Type de plaque	Plaque 1 1 mm	Plaque 2 1 mm	Plaque 3 1 mm	Plaque 1 0,5 mm	Plaque 2 0,5 mm	Plaque 3 0,5 mm
Cycles	69	22	22	10	10	10
Effort d'étirement maximal (kN)	4,9	8,1	9,8	3,8	2,2	3,4

1.3.1.3 Traitement de données

Pour l'ensemble des essais, les données acquises sont les efforts respectifs d'appuis latéraux des pions cylindriques et de l'étirement vertical de la plaque dans le sens du socle, ainsi que les déplacements respectifs latéraux des organes de frottement et vertical des mors mobiles. Dans le présent contexte, l'intérêt est essentiellement porté à l'effort d'étirement vertical de la plaque, étant donné que c'est l'unique paramètre non enregistré dans les consignes d'essais. Le traitement de données révèle en effet une augmentation conséquente de l'effort d'étirement vertical au fur et à mesure des cycles d'appuis sur la quasi-totalité des plaques. Cette constatation justifie non seulement l'atteinte du seuil d'écoulement inélastique mais surtout un écrouissage en surface de l'acier AISI H11.

Par ailleurs, l'évolution de l'effort vertical au cours de l'essai fait ressortir certaines chutes qui sont sans doute articulées aux conditions tribologiques, soit à de l'endommagement en plus de l'écoulement inélastique. Il a été constaté que la fréquence de ces chutes est relativement en concordance avec l'intensité de l'effort vertical. À noter que cette dernière s'attache aux efforts d'appuis et aux conditions tribologiques. Le Tableau 1.9 récapitule les

données des essais de reproduction de surface semblable à la réalisation des outillages de mise en forme.

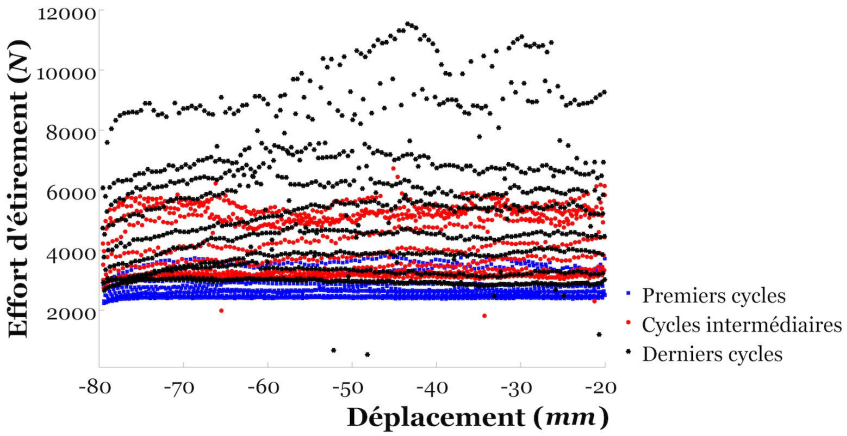


Figure 1.26 – Évolution « cyclique » de l'effort d'étirement de la plaque 3 de premier type

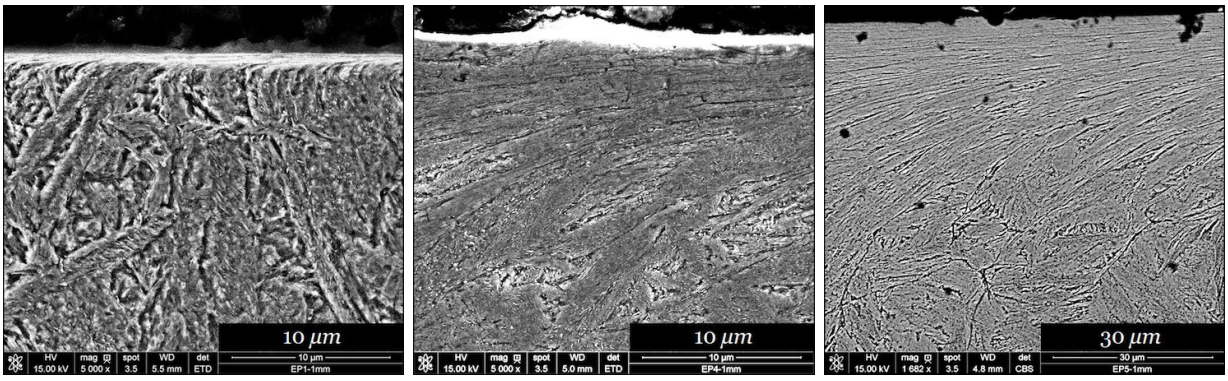
1.3.2 Caractérisation de l'état de surface

Il est évident que le procédé de préparation des surfaces a entraîné certaines modifications au sein de l'architecture interne des couches superficielles de l'acier AISI H11. De par l'analyse des données, notamment de l'effort d'étirement vertical, de premières déductions quant à l'état de la structure interne ont été établies. Celles-ci sont toutefois faites en s'appuyant sur le comportement phénoménologique du matériau. Une caractérisation microstructurale est alors menée sur les plaques en acier AISI H11 par des techniques adéquates en vue d'une analyse locale de l'état de surface.

Analyses au MEB. Les observations menées au MEB-FEG Nova NanoSEM 450 mettent en évidence les modifications structurales induites par le procédé de préparation de surface. Sur l'ensemble des plaques, de fortes déformations non linéaires sur les lattes ainsi que les anciens joints de grains austénitiques des premières couches superficielles sont constatées. Il est évident qu'une anisotropie marquée s'est constituée en surface avec une morphologie de la quasi-totalité des lattes martensitiques orientée selon le sens de sollicitation des organes de frottement. Par ailleurs, l'épaisseur des couches superficielles concernées suit l'évolution de l'effort d'étirement maximal (Tableau 1.9) qui est également un indicateur sur le taux d'écrouissage en surface. Ces constatations concernent surtout les plaques de premier type (1 mm) où différents efforts d'étirement ont été enregistrés. En dépit d'un nombre assez considérable de cycles, la plaque 1 n'affiche que près de 5 μm d'épaisseur affectée, et ce, en raison du faible effort d'appui imposé. Ceci prouve également que l'approche fatigue de contact n'est pas adaptée à la reproduction des surfaces similaires à celles issues de la réalisation des outillages.

Concernant les plaques 2 et 3 de premier type, celles-ci présentent respectivement 20 et 65 μm d'épaisseur de couches superficielles affectées. L'intensité d'écoulement de matière en

surface de la plaque 3 est quasiment similaire au procédé de mise en forme à haute température. Cette approche s'avère donc concluante. Il est également intéressant de mentionner qu'un endommagement superficiel est constaté dans certaines zones, surtout pour la plaque 3 (Figure 1.27c), en raison de l'intensité conséquente de l'effort d'appui. En ce qui concerne les plaques de second type (0,5 mm), l'écoulement non linéaire présente uniquement une épaisseur de 5 μm à l'image de la plaque 1 de premier type. De ce fait, la caractérisation de l'état de surface est menée avec une attention particulière sur les plaques de premier type et surtout la plaque 3.

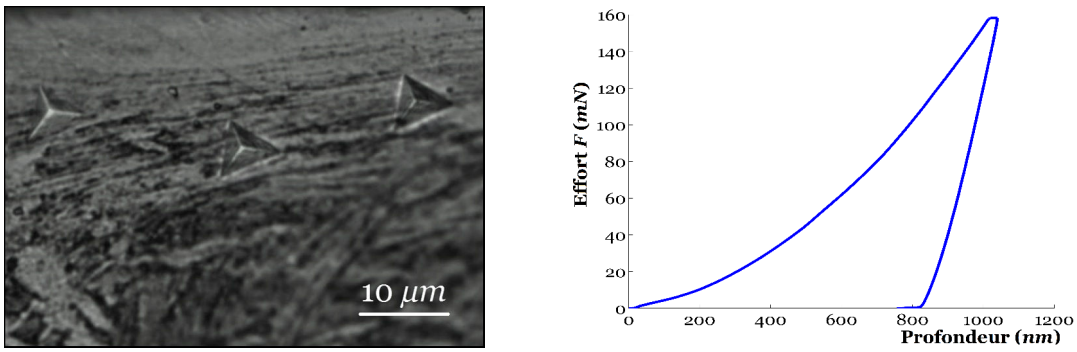


(a) Plaque 1 (b) Plaque 2 (c) Plaque 3

Figure 1.27 – Morphologie des couches superficielles à l'issue du traitement des plaques de premier type (1 mm)

Nanoindentation. La nanoindentation est une technique permettant essentiellement la caractérisation de films minces pour la détermination de certaines propriétés mécaniques, notamment le module d'Young, la dureté ou encore la sensibilité du matériau à la vitesse de chargement. La présente caractérisation s'intéresse uniquement à la plaque 3 de premier type (1 mm) et est menée sur un nanoindenteur de type CSM NHTX couplé à un microscope à force atomique (AFM). Les consignes de commande sont transmises par le biais d'une cellule composée d'une bobine de force piézo-électrique. Le transfert de l'objectif aux coordonnées de la pointe du nanoindenteur se fait au moyen d'un moteur électrique couplé à une vis guide. La pointe, dont la mise au point est contrôlée par un système d'interférométrie laser, est de type Berkovich (Figure 1.28a) en diamant. À l'issue du contact qui s'établit avec une vitesse d'approche de 2500 $nm.min^{-1}$, un chargement est imposé, et ce, jusqu'à une profondeur seuil de 1 μm (Figure 1.28b). Ce chargement est effectué à une vitesse de 800 $mN.min^{-1}$. Lors de l'atteinte de la profondeur seuil, l'effort de contact est maintenu pendant 10 s précédant un relâchement également à une vitesse de 800 $mN.min^{-1}$ (Figure 1.28b). Plus concrètement, la présente caractérisation de nanoindentation concerne une profondeur de 60 μm en vue d'une détermination des propriétés mécaniques dans les couches superficielles. Les données récupérées considèrent trois paramètres, à savoir le temps, le déplacement de l'indenteur (équivalent à la profondeur) et l'effort d'appui F. Outre les conditions de chargement, la courbe effort F − déplacement de la Figure 1.28b illustre

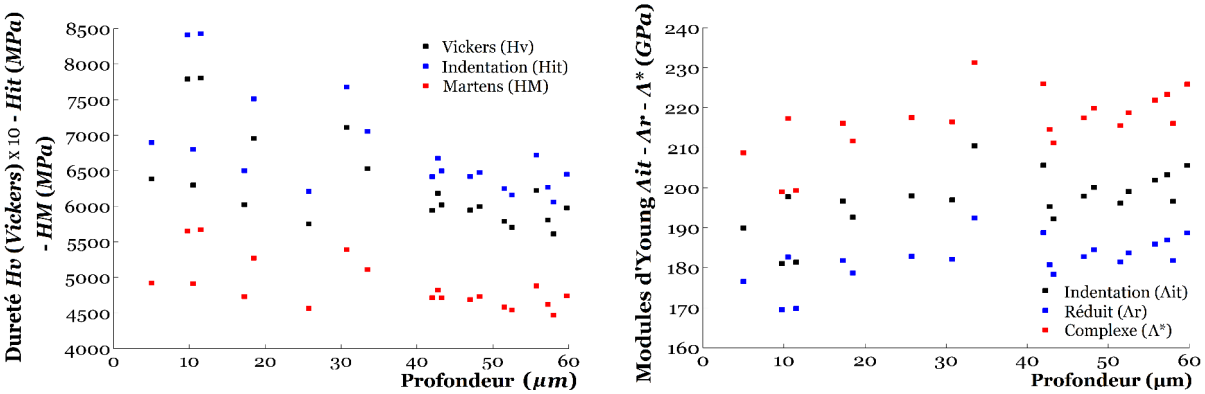
une courbe typique d'un essai de nanoindentation de laquelle les différents propriétés mécaniques, notamment les modules d'Young d'indentation Λit, réduit Λr et complexe Λ^* ou encore les dureté de Vickers Hv, d'indentation Hit et de Martens HM sont déduites selon l'approche analytique d'Oliver et Pharr [77].



(a) Indents de type Berkovich (b) Courbe F – profondeur

Figure 1.28 – Essais de nanoindentation

La caractérisation menée par nanoindentation témoigne des premières constatations concernant l'écrouissage en surface donné par l'amplification cyclique de l'effort d'étirement. Il apparaît qu'une certaine évolution de la dureté du matériau dans les couches superficielles est mise en évidence. Celle-ci a en effet tendance à augmenter de près de 38% lorsque la pointe de l'indenteur se rapproche de la surface de l'acier AISI H11 (Figure 1.29a). À noter que la dureté de Vickers Hv à « cœur » du matériau est de 573 Hv. Cette évolution s'accompagne également d'une dispersion plus importante de la dureté en surface qu'à cœur (Figure 1.29a). Ces constatations peuvent s'expliquer par une hétérogénéité de la répartition des dislocations ou des carbures, voire un endommagement local, malgré une certaine homogénéité apparente de la structure interne en limite de surface.



(a) Duretés (b) Modules d'Young

Figure 1.29 – Évolution des paramètres de l'acier AISI H11 dans les couches superficielles de la plaque 3 de premier type (1 mm)

Par ailleurs, cette même dispersion est également constatée pour l'évolution du module

d'Young. Cependant, ce paramètre a tendance à diminuer de près de 11% en limite de surface. À cœur, le module d'Young de l'acier AISI H11 (ou d'indentation) mesuré par nanoindentation est de 205 GPa. Cette diminution peut en effet être associée à de l'endommagement en surface, ou éventuellement au caractère fortement anisotrope de la structure interne dans les couches superficielles extrêmes. ll est également intéressant de noter que la taille de la pointe d'indent est bien supérieure à celle de la latte de martensite. Lors de la mise en contact, l'effort d'appui est appliqué sur un agrégat de lattes, ce qui explique la faible dispersion des propriétés mécaniques à cœur de l'acier. De par la présente caractérisation, la mise en évidence d'un lien direct entre la dureté et le module d'Young, ainsi que le caractère anisotrope local d'une latte donnée ne sont guère aisés.

Profil de surface. Le profil de surface est certainement considéré comme étant un paramètre prépondérant dans la prédiction de la durée de vie des composants mécaniques. À l'issue du procédé expérimental du §1.3.1, une caractérisation par l'altimètre Altisurf 520 est menée sur la quasi-totalité des plaques en vue de déterminer la topologie des surfaces générées. Ces mesures sont réalisées sans contact par le biais d'une sonde confocale chromatique de dynamique 350 μm associée à un micropalpeur inductif en carbone tungstène. Le déplacement multiaxial de la sonde optique est motorisé à courant continu et effectue des mesures à codeur de 2 μm selon les axes X et Y. Les caractérisations menées par altimétrie s'intéressent à des zones de dimensions 6000 $\times$ 2000 μm^2.

Vu le procédé de préparation, la topologie de l'ensemble des surfaces générées présente des reliefs similaires de type « ondulés » à l'image de l'étude menée par Le Pécheur [78]. Des ondulations quasi-périodiques sont en effet constatées selon l'axe transverse Y, dans lesquelles les extrémas longent l'axe X (Figure 1.30).

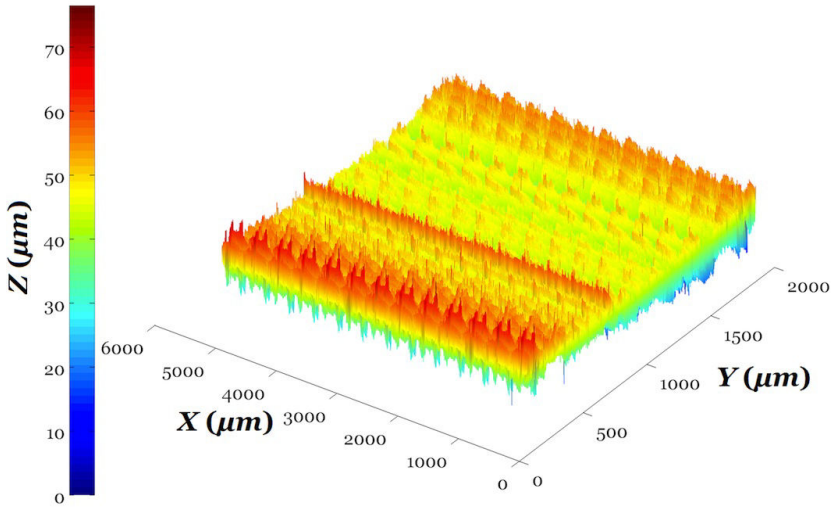


Figure 1.30 – Profil de surface à l'issue du traitement des plaques

Par ailleurs, si les épaisseurs des couches superficielles affectées s'attachent aux efforts d'étirement (Figure 1.27), les caractéristiques du profil de surface sont quasi-identiques pour l'ensemble des plaques, et ce, que ce soit sur les essais de premier ou de second type. La

variation des efforts d'étirement n'a guère affecté les profils des surfaces des zones analysées par altimétrie. Le Tableau 1.10 présente les caractéristiques moyennes liées au caractère rugueux des surfaces de l'ensemble des plaques, à savoir la rugosité totale R_t, la profondeur moyenne R_m, l'amplitude moyenne R_a et l'écart type des hauteurs R_q.

Tableau 1.10 – Caractéristiques moyennes des profils des surfaces de l'ensemble des plaques

R_t (μm)	R_m (μm)	R_a (μm)	R_q (μm)
76,49±4,62	30,09±3,74	12,54±1,27	14,06±1,53

Analyses EBSD. Les analyses EBSD sont menées sur la plaque 3 de premier type. On rappelle que celle-ci présente une épaisseur moyenne des couches superficielles affectées par le procédé de traitement des plaques de près de 65 μm. La zone d'analyses a pour dimensions de 370 × 270 μm^2 et est située près de ces couches superficielles. Celle-ci est balayée avec une résolution de 300 nm. On note également que l'intérêt est porté à l'ensemble des paramètres traités lors des précédentes analyses (cf. §1.2.3.2), notamment la qualité des mesures, la granulométrie mais encore la texture cristallographique.

Qualité des mesures. Comme évoqué précédemment, la qualité des mesures s'illustre comme étant un bon indicateur quant à l'état d'écrouissage au sein de la structure interne du matériau. Dans les présentes analyses, la zone d'intérêt comprend près de 1,1 $Mpixels$ donc chaque pixel est associé à une mesure EBSD. Cependant, près de 21% de ces mesures présentent une très mauvaise indexation voire une indexation inexistante. La Figure 1.31 illustre la répartition spatiale de la netteté des bandes de Kikuchi à l'issue de l'élimination des pixels non indexés.

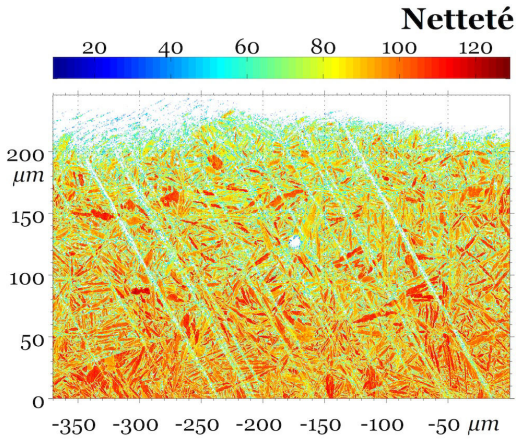
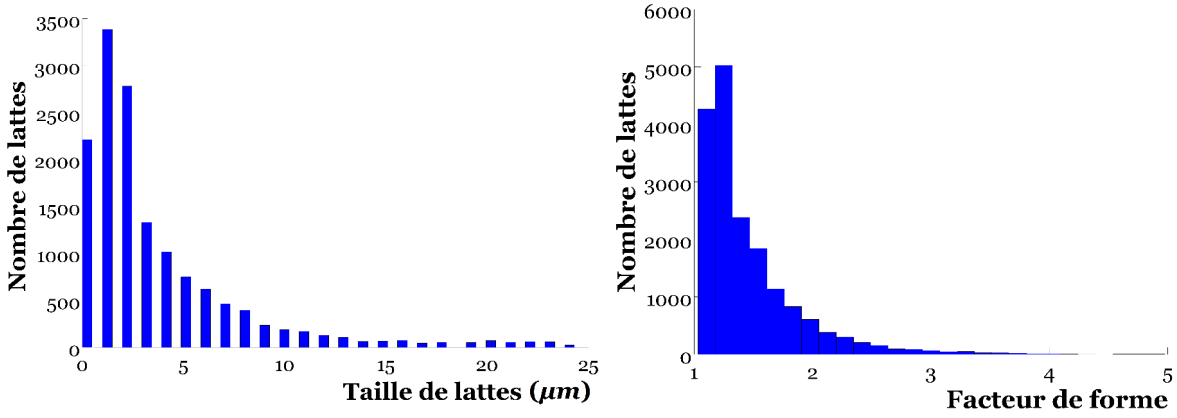


Figure 1.31 – Répartition spatiale de la netteté des bandes de Kikuchi dans la zone d'analyse globale

De par ces analyses, il est évident que la qualité des mesures est bien médiocre au niveau des couches superficielles affectées consolidant l'état fortement écroui de celles-ci.

On peut également constater qu'outre l'absence des pixels non indexés au niveau des joints de lattes et des rayures liées au polissage, les couches superficielles proches du bord ne peuvent être détectées (Figure 1.31). De ce fait, une analyse quantitative en cette zone est quasi-impossible. Néanmoins, un début de gradient de texture morphologique est bel et bien mis en évidence et s'attache bien à une dégradation de la qualité des mesures EBSD.

Granulométrie. Les présentes analyses EBSD font ressortir un ensemble de 15384 lattes martensitiques dans la zone d'intérêt. Le ratio du nombre des lattes martensitiques par rapport à la superficie de la zone d'analyse est un peu supérieur à celui des mesures précédentes (cf. §1.2.3.2). Ceci est assimilé à la qualité médiocre des mesures au niveau des couches superficielles. Le cumul des pixels non indexés associé à des valeurs assez conséquente de désorientation liée à l'écrouissage de la structure interne s'articule autour d'une augmentation fictive du nombre des cristaux. Par ailleurs, selon les analyses statistiques menées, la taille moyenne des lattes martensitiques est de 2,71 ± 1,47 (Figure 1.32a) et le facteur de forme moyen est de 1,88 ± 1,53 μm (Figure 1.32b).



(a) Facteurs de forme

(b) Taille de lattes de martensite

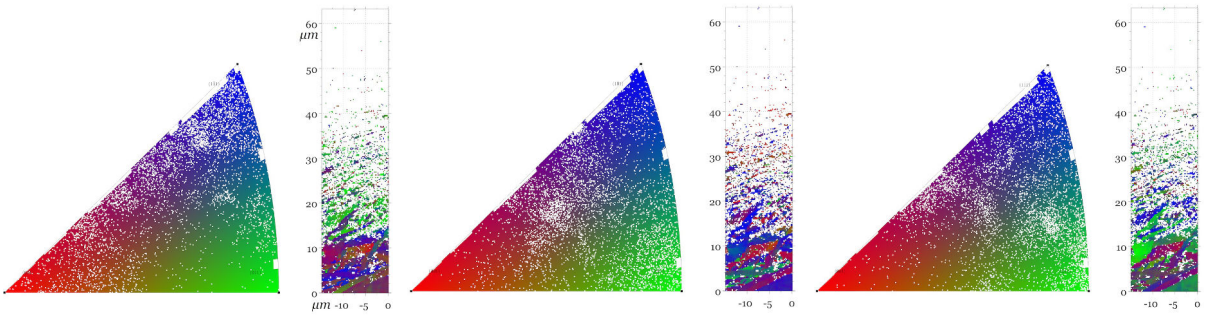
Figure 1.32 – Analyses statistiques des données de la granulométrie globale en surface de l'acier AISI H11

Il est clair que la taille moyenne des lattes martensitiques et le facteur de forme moyen de celles-ci est quasiment équivalent aux analyses précédentes (cf. §1.2.3.2). Cet aspect est essentiellement dû au fait que la superficie de la zone non affectée (cœur du matériau) est assez conséquente. Par ailleurs, en raison de la qualité médiocre des mesures EBSD au niveau des couches superficielles, les valeurs des facteurs de forme n'ont guère tendance à augmenter contrairement à ce qui est prévu. Elles sont mêmes bien plus faibles qu'à cœur de l'acier. Cette constatation permet de consolider l'augmentation fictive du nombre des lattes martensitiques dans les couches superficielles.

Texture cristallographique. Compte tenu des dimensions de la zone d'analyses, *i.e.* de 370 × 270 μm^2, les mesures EBSD ne mettent en évidence aucun caractère anisotrope des orientations cristallographiques. Cet aspect est également consolidé par qualité des

mesures au niveau des couches superficielles même si celles-ci sont difficiles à exploiter. Par conséquent les figures de pôles inverses de la répartition spatiales des orientations cristallographiques illustrent une texture globale isotrope, à l'image des premières analyses (Figure 1.15).

En vue de mettre en évidence l'effet du procédé de traitement des plaques sur les orientations cristallographiques en surface, les analyses actuelles s'attachent à une zone contenant exclusivement les couches superficielles affectées. Celle-ci a pour dimensions $15 \times 65\ \mu m^2$ (Figure 1.33) et comprend 845 lattes martensitiques. On rappelle toutefois que l'analyse de granulométrie n'est guère pertinente et le nombre de lattes inclut une hausse fictive bien conséquente.



(a) Orientations et figure de pôle inverse selon l'axe X

(b) Orientations et figure de pôle inverse selon l'axe Y

(c) Orientations et figure de pôle inverse selon l'axe Z

Figure 1.33 – Répartitions spatiales des orientations dans les couches superficielles selon les directions principales du repère de la plaque et figures de pôles inverses associées

À l'issue du procédé du procédé de traitement des plaques, un caractère anisotrope de la texture cristallographique est assez apparent [13]. Les présentes analyses mettent en évidence que les plans {1 1 1} ont tendance à s'orienter selon l'axe de sollicitation, *i.e.* X (Figure 1.33). Cette constatation est également valable pour les plans {100} mais selon une moindre fréquence.

En résumé...

Bien que l'acier AISI H11 présente une structure interne monophasée de type CC, il constitue bel et bien une architecture assez complexe. L'étude de caractérisation met en évidence une stéréologie interne constituée de lattes martensitiques regroupées en paquets avec des relations d'orientations bien spécifiques. À l'image des aciers martensitiques, l'acier AISI H11 se caractérise par une déconsolidation cyclique à température ambiante. Les mécanismes physiques élémentaires qui s'articulent autour du comportement mécanique

13. En raison de la qualité médiocre des mesures, les orientations cristallographiques tracées sur les figures de pôles inverses sont associées aux pixels des mesures EBSD et non pas aux lattes martensitiques tel que cela a été effectués dans la Figure 1.15. Une telle approche permet la mise en évidence du caractère anisotrope de la texture cristallographique.

découlent directement du traitement thermique et sont également assez complexes à quantifier. Cependant, il est clair que ces phénomènes sont situés à diverses échelles du matériau, à savoir le mouvement des dislocations, la coalescence des carbures voire des lattes et des paquets, mais également à l'orientation des cristaux constitutifs et leurs interactions, d'où le leitmotiv de l'approche multi-échelle de ce travail.

Par ailleurs, afin de mieux d'appréhender le comportement non linéaire en service de l'acier AISI H11, des surfaces caractéristiques du procédé de mise en œuvre des outillages sont générées à l'échelle du laboratoire. La caractérisation de ces surfaces montrent des évolutions microstructurales qui sont à prendre en compte. Celles-ci consistent essentiellement en l'apparition d'un caractère anisotrope morphologique et cristallographique, en une génération d'un profil de surface de type « ondulé », mais aussi en une variation de quelques propriétés mécaniques, à savoir l'augmentation de la dureté et la diminution du module d'Young. L'ensemble de ces paramètres sont à prendre en compte dans la modélisation multi-échelle.

Chapitre 2

Comportement mécanique en surface : investigation expérimentale

"Logic is not a body of doctrine, but a mirror-image of the world. Logic is transcendental."

Ludwig Wittgenstein (1889-1951)

Sommaire

2.1 État de l'art 54
2.1.1 Approches à champs moyens 54
2.1.2 Approches à champs complets 55
2.1.3 Approche retenue 57
2.2 Technique de corrélation d'images numériques 57
2.2.1 Coefficients de corrélation 58
2.2.2 Transformation matérielle 60
2.2.3 Interpolation subpixel 61
2.2.4 Mise en œuvre numérique 62
2.2.5 Calcul des déformations 63
2.3 Essais mécaniques in-situ 65
2.3.1 Dispositif expérimental 65
2.3.2 Procédure expérimentale 66
2.4 Analyse du comportement mécanique 68
2.4.1 Cas du chargement monotone 68
2.4.2 Cas du chargement cyclique 75
2.5 Notion de volume élémentaire représentatif 79
2.5.1 Définition 79
2.5.2 Identification expérimentale 80

Afin de mieux appréhender le comportement mécanique en surface de l'acier AISI H11, des essais mécaniques in-situ, dans lesquels les champs complets de déformations locaux sont mesurés par le biais de la technique de corrélation d'images numériques, sont

menés dans le présent chapitre. La première partie est consacrée à un état de l'art sur les méthodes et les travaux d'investigations expérimentales sur le comportement hétérogène des matériaux métalliques. Cela permet de justifier l'approche retenue. Celle-ci qui n'est qu'autre que la technique de corrélation d'images numériques et fait l'objet de la seconde partie. La troisième partie s'attache au comportement local en surface de l'acier AISI H11, et ce, par la mise en place d'essais mécaniques in-situ et par l'analyse des résultats à différentes échelles. Enfin, la dernière partie se destine à l'identification expérimentale d'un volume élémentaire représentatif (VER).

2.1 État de l'art

En raison de leurs structures internes complexes et hétérogènes, l'appréhension du comportement non linéaire des matériaux métalliques, à l'image de l'acier AISI H11, requiert une analyse approfondie des mécanismes élémentaires à une échelle locale. Dans ce qui suit, deux types d'approches expérimentales sont présentés pour l'étude in-situ du comportement hétérogène et anisotrope des structures métalliques, permettant ainsi des analyses multi-échelles. Le premier, étant basé sur des approches à champs moyens, utilise des analyses statistiques, tandis que le second consiste en des approches à champs complets.

2.1.1 Approches à champs moyens

Les approches à champs moyens utilisent essentiellement des techniques de mesures diffractives, à savoir la diffractométrie des neutrons ou encore celle des rayons X synchrotron [79–81]. Par le biais de ces techniques, il est assez aisé de réaliser des mesures des champs mécaniques moyens à une échelle locale in-situ d'un essai mécanique tandis que le comportement à l'échelle globale est donné par des méthodes plus ou moins classiques notamment l'extensomètre. Les champs mécaniques locaux moyens s'attachent aux pics de diffractions des rayons incidents sur des plans cristallographiques donnés. Les pics de diffraction permettent en effet de fournir des informations exhaustives concernant l'état microstructural des cristaux constitutifs [1] dans la zone d'analyses. À titre d'exemples, l'intensité et l'aspect, notamment l'asymétrie, des pics de diffraction traduisent respectivement des données liées aux orientations des cristaux et aux contraintes résiduelles. Le tenseur de déformations élastiques est articulé autour des positions de ces pics. Le changement de leurs positions en cours d'essai est en effet proportionnel à la déviation des vecteurs normaux à des plans donnés, ce qui permet l'identification d'une composante moyenne du tenseur des déformations élastiques des réseaux des cristaux concernés par leur orientation. Par ailleurs, la largeur du pic est associée à la distance entre deux plans donnés du réseau et procure des informations quant aux hétérogénéités locales affectant le tenseur des déformations.

Ces techniques, bien qu'elles soient destinées à des études statistiques des champs moyens locaux accommodés par des contraintes à une échelle globale, permettent des analyses sur des zones de dimensions assez importantes. Celles-ci peuvent en effet contenir entre 10^5 et 10^6 cristaux [82]. Par ailleurs, ces analyses sont le plus souvent menées sur

1. Les cristaux qui contribuent à l'apparition des pics de diffraction satisfaisant la loi de Bragg.

des volumes permettant ainsi une quantification du comportement en masse du matériau concerné. Les champs mécaniques moyens mesurés dans ce volume peuvent être, à titre d'exemple, présentés sous forme de figures de pôle sphériques d'une composante donnée du tenseur des déformations pour un ensemble de cristaux ayant des orientations particulières par rapport à la direction de chargement (Figure 2.1).

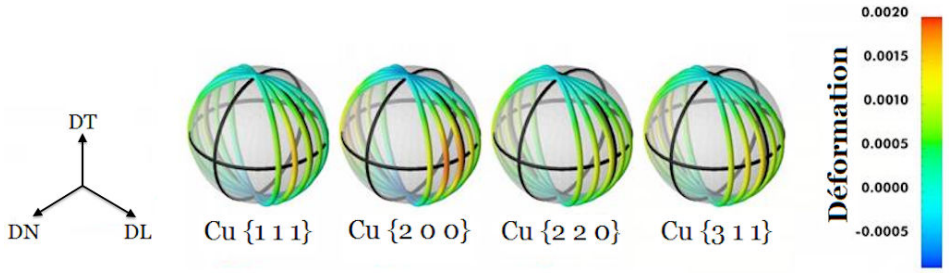


Figure 2.1 – Figures de pôle de déformation de différentes orientations de cristaux de cuivre à un état de chargement donné acquises par diffraction des rayons X synchrotron d'après [12]

Les techniques diffractives ont été récemment utilisées pour des études de comportement quasi-statique hétérogène des structures métalliques, soit de la distribution statistique des champs de déformation en traction uniaxiale [12, 82–86], en flexion [82] ou encore en chargement biaxial [87]. Certains auteurs ont également utilisé ces techniques pour des applications cycliques [88], notamment pour des analyses de la distribution des déformations résiduelles [89, 90]. Les techniques diffractives sont intéressantes à mettre en œuvre pour des matériaux multiphasés puisqu'elles se distinguent aisément la distribution du comportement des différentes phases présentes dans les structures internes [91]. Par ailleurs, l'intérêt de ces techniques concernent aussi certaines applications liées au comportement thermique [92] mais aussi à l'identification des propriétés mécaniques locales des structures métalliques [93] et des mécanismes physiques élémentaires associés [94–96].

2.1.2 Approches à champs complets

Si les techniques diffractives consistent en des analyses statistiques sur une zone de dimensions assez considérables, les approches à champs complets permettent la prise en compte de certaines caractéristiques de la stéréologie des matériaux métalliques, à savoir la morphologie des cristaux constitutifs. Les approches à champs complets utilisent le plus souvent des techniques de très hautes résolutions permettant des mesures à des échelles intragranulaires et prenant en compte certaines hétérogénéités microstructurales. La technique de corrélation d'images numérique (DIC [2]) est en l'occurrence la méthode la plus adéquate pour des mesures de champs mécaniques complets à de telles échelles. Celle-ci considère la comparaison d'une paire d'images prises à des états de chargement distincts. Le champ de déplacement induit entre ces configurations du matériau est évalué via le mouvement d'un certain nombre de repères locaux. Malgré les avancées techniques de cette méthode permettant des mesures de champs en tridimensionnel, il est inhérent de noter qu'à

2. « Digital Images Correlation ».

de telles échelles, seuls les composantes planes du tenseur de déformations sont concernées hormis une utilisation de la stéréoscopie. Le marquage des repères qu'utilise la technique de corrélation d'images numériques peut être réalisé selon deux approches distinctes, à savoir le marquage synthétique et celui lié aux artefacts stéréologiques.

Marquage synthétique. Les méthodes de marquage synthétique utilisent des motifs artificiels que l'on dépose sur la surface du matériau à analyser. Ces motifs sont souvent répartis d'une manière régulière, voire périodique, et constituent des repères locaux permettant les mesures des champs de déplacement et de déformation. Pour ce faire, les marques doivent en effet présenter une intensité de contraste adéquate et lisible au système d'observation utilisé. Selon le contexte d'étude, diverses techniques de marquage sont mises en œuvre pour générer ce contraste nécessaire, à savoir les techniques de peinture, celles de gravage chimique ou mécanique mais également celles de dépôts métalliques. Cette dernière est couramment utilisée dans l'analyse des champs mécaniques des structures métalliques à une échelle locale. Dans ce contexte, les techniques de dépôts métalliques s'attachent surtout à la microlithographie. Celle-ci consiste plus typiquement en des dépôts de microgrilles ayant des motifs périodiques en lignes, voire en points. Elles sont le plus souvent en or, en platine, en argent ou éventuellement en nickel. Le choix du matériau est conditionnée à l'intensité du contraste détecté vis-à-vis de la structure métallique étudiée mais aussi à la température des essais. À noter que différents procédés permettent le dépôt de ce type de repère artificiel [97–101].

Les applications des méthodes de marquage synthétique à des échelles locales consistent essentiellement en la corrélation des champs mécaniques hétérogènes à la stéréologie du matériau en question. Le type de sollicitation concerne le plus souvent des chargements uniaxiaux en raison de la complexité de tels essais in-situ. À titre d'exemple, Padilla et al. [102] ont étudié le comportement hétérogène local d'un alliage de zirconium corrélé à la texture cristallographique en traction uniaxiale. Le marquage de la zone d'analyse est réalisé par un dépôt de particules de silicone ayant une taille de l'ordre du *micron*. Dans ce même contexte, Héripré et al. [103] ont opté pour une microgrille en or ayant des motifs en lignes en vue d'une identification d'un modèle multi-échelle. L'approche numérique associée consiste à utiliser un maillage régulier dans lequel les éléments finis sont superposés à la microgrille concernée. Cette même technique a été également exploitée pour l'étude des champs hétérogènes sous sollicitations cycliques [100]. Par ailleurs, d'autres auteurs ont couplé les méthodes de marquage synthétique à la thermographie infrarouge en vue d'une corrélation des champs de déformation locaux avec la dissipation de chaleur [104].

Marquage lié aux artefacts stéréologiques. À l'inverse du marquage synthétique, le marquage lié aux artefacts stéréologiques utilise des repères aléatoires que l'on appelle mouchetis. Ces motifs s'attachent à des artefacts stéréologiques présentant une intensité de contraste détectable par le système d'observation. Les repères sont souvent liés à l'échelle d'étude et peuvent être constitués, à titre d'exemples, de joints de grains, de particules non dissoutes en solution, ou éventuellement certains défauts microstructuraux... Cependant, en dépit des hautes résolutions des systèmes d'observations actuels, ces artefacts ne présentent pas toujours un contraste lisible. Un complément en marquage artificiel, notamment par

des techniques de peinture, peut s'avérer essentiel dans certains cas. Les repères artificiels générés ne présentent pas de motifs réguliers et viennent en complément des artefacts stéréologiques [105].

Les applications données par ce type de marquage sont bien plus larges que celles qui s'appuient sur le marquage artificiel. Bien qu'elles s'intéressent aux mécanismes de localisation des champs de déformation [106–109], leur intérêt s'étend aux aspects liés aux transformations finies [110]. Contrairement au présent type de marquage, le marquage artificiel par dépôts de grilles n'est guère adapté pour ce type de chargement en raison des risques liés à la rupture aux décohésions avec le matériau support. De ce fait, le marquage lié aux artefacts stéréologiques est également utilisé dans des applications de fatigue et de propagation de fissures corrélés, bien évidemment, aux caractéristiques microstructurales [111, 112]. Il permet en outre des mesures de champs à des échelles locales sur des géométries plus ou moins complexes [113]. Par ailleurs, certains auteurs ont adopté ce type de marquage pour des couplages thermomécaniques [114–116].

2.1.3 Approche retenue

En dépit du fait que les techniques diffractives consistent en des analyses statistiques, les approches à champs moyens permettent d'établir des informations bien plus importantes quant à l'état structural du matériau en question. Certes, la technique de corrélations d'images numériques permet une localisation spatiale des mesures de champs, mais uniquement ceux de déplacement, tandis que les techniques diffractives se destinent à procurer des informations concernant l'état des contraintes internes, à la nature et à la rotation des réseaux cristallins des cristaux constitutifs... Sur ce principe, certains auteurs se sont intéressés à un couplage entre ces deux approches [117]. Cependant, les techniques diffractives, notamment la diffraction des neutrons, sont coûteuses. De plus, elles s'appliquent souvent à des matériaux ayant une taille de grains assez conséquente. Par ailleurs, le couplage entre la technique de corrélation d'images numériques (DIC) avec l'EBSD est également à considérer. Il est bien moins complexe que le précédent [107, 108, 118–120]. Cependant, cette approche est souvent appliquée à des matériaux fortement ductiles soumis à des transformations finies.

Compte tenu du contexte actuel, les techniques diffractives ne sont guère adaptées et seule la technique de corrélation d'images numériques est utilisée. On rappelle que l'intérêt est essentiellement porté à l'hétérogénéité des champs mécaniques locaux en surface. À noter qu'une caractérisation complète en amont des essais à venir du matériau (en surface) a été effectuée au chapitre 1. En raison des paramètres microstucturaux de l'acier AISI H11 associées au système d'observation utilisé, le marquage lié aux artefacts stéréologiques complété par une attaque chimique au nital est adopté.

2.2 Technique de corrélation d'images numériques

Comme évoqué précédemment, la technique de corrélation d'images numériques est fondée sur la comparaison de deux images à des états de chargement distincts. La première

s'attache à une configuration « de référence » du matériau, tandis que la seconde est dite configuration « déformée » (Figure 2.2). Plus concrètement, la corrélation est menée sur un domaine défini par les valeurs des niveaux de gris de chaque pixel constitutif de la zone de corrélation. La recherche d'un domaine semblable à l'état de référence dans la configuration déformée est réalisée par biais d'algorithmes numériques qui s'appuient sur un coefficient de corrélation donné. Celui-ci permet en effet une optimisation quantitative du niveau de ressemblance du domaine de corrélation dans les deux configurations.

La présente partie se destine à certains éléments détaillés de la technique de corrélation d'images numériques utilisée dans ce chapitre.

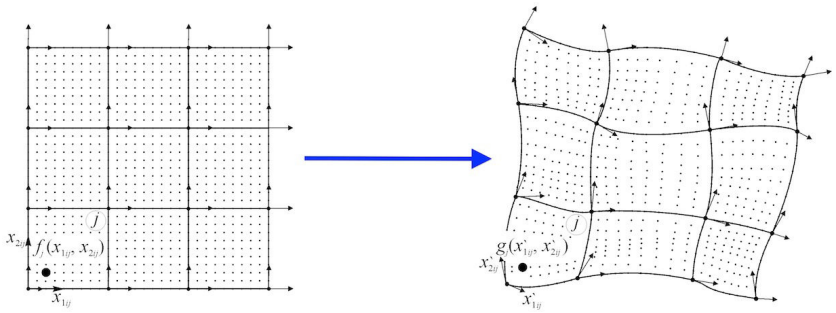


Figure 2.2 – Principe de la technique de corrélation d'images d'après [13]

2.2.1 Coefficients de corrélation

Il est évident que la corrélation d'images numériques s'appuie sur les valeurs des niveaux de gris des pixels constitutifs, d'où l'intérêt de mise en œuvre de techniques de marquage permettant la génération d'un contraste bien détectable au système d'acquisition d'images. L'utilisation de la technique de corrélation d'images suppose que les niveaux de gris sont bien conservés et que le domaine concerné est bien identifiable dans l'ensemble des configurations. Par le biais d'une optimisation d'un coefficient de corrélation, il est alors possible d'identifier ce domaine d'analyses dans la configuration déformée. La littérature distingue essentiellement deux types de coefficients, à savoir ceux qui sont fondés sur les moindres carrés et ceux qui utilisent un produit scalaire. Le logiciel 7D, développé à l'université de Haute-Savoie et utilisé dans le présent travail, intègre ce dernier type de coefficients ayant la forme généralisée [3] :

$$C_1 = \sum_{i \in \mathcal{D}} f\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right) . g\left(\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right) \tag{2.1}$$

$\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}$ et $\Phi(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}})$ étant respectivement les coordonnées des pixels dans le domaine de corrélation $\mathcal{D}$ des configurations de référence et déformée. Les niveaux de gris dans ces configurations sont respectivement donnés par les fonctions f et g. Dans cette expression, l'optimisation du domaine de corrélation $\mathcal{D}$ dans la configuration déformée s'illustre par le maximum du coefficient C_1, *i.e.* une quasi-colinéarité des vecteurs traduit par les fonctions f et g.

3. L'ensemble des coefficients de corrélations sont présentés en données discrètes.

L'optimisation du domaine de corrélation $\mathcal{D}$ peut également être établie en minimisant une formule modifiée et normalisée du coefficient C_1. La valeur de ce coefficient est alors située entre 0 et 1 :

$$C_2 = 1 - \frac{\sum_{i\in\mathcal{D}} f\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right).g\left(\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right)}{\sqrt{\sum_{i\in\mathcal{D}}\left(f\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right)^2 \sum_{i\in D}\left(g\left(\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right)\right)^2}} \tag{2.2}$$

Comme évoqué ci-dessus, la technique de corrélation d'images numériques suppose une conservation des niveaux de gris entre les diverses configurations. Cependant, pour des raisons inhérentes aux conditions expérimentales voire au système d'acquisition d'images, des fluctuations de brillance et d'intensité de contraste associées à un bruit de fond peuvent en effet avoir lieu en cours d'essai et perturber ainsi l'optimisation du domaine de corrélation. Cela engendre alors une mauvaise représentation des mécanismes physiques locaux ainsi qu'une perte d'information dans le domaine de corrélation $\mathcal{D}$. De ce fait, il est nécessaire d'effectuer des vérifications sur les histogrammes des niveaux de gris pour chaque image acquise en cours d'essai (cf. §2.3.2). Or, ces opérations ne sont guère suffisantes pour une conservation « parfaite » de ces valeurs. Afin d'améliorer les caractéristiques des images numériques acquises, les valeurs des niveaux de gris peuvent être approchées selon la fonction affine :

$$g'\left(\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right) = a.g\left(\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right) + b + c \tag{2.3}$$

où a est la variation d'intensité du contraste et b celle de la brillance. c représente le bruit de fond numérique. En vue d'assurer une insensibilité par rapport à la variation de ces paramètres, il est inhérent d'opter pour un coefficient de corrélation dit « calculé sur les fluctuations », qui devient indépendant de g' [121]. Les problèmes de fluctuation peuvent être résolus par l'introduction la fonction affine g' dans l'expression 5.1 et en retranchant à chaque valeur de niveau de gris la moyenne sur le domaine de corrélation $\mathcal{D}$. L'expression du coefficient de corrélation calculé sur les fluctuations est alors donnée par :

$$C_3 = 1 - \frac{\sum_{i\in\mathcal{D}}\left(f\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right) - \bar{f}_{\mathcal{D}}\right).\left(g\left(\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right) - \bar{g}_{\mathcal{D}}\right)}{\sqrt{\sum_{i\in\mathcal{D}}\left(f\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right) - \bar{f}_{\mathcal{D}}\right)^2 \sum_{i\in\mathcal{D}}\left(g\left(\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right) - \bar{g}_{\mathcal{D}}\right)^2}} \tag{2.4}$$

où $\bar{f}_{\mathcal{D}}$ et $\bar{g}_{\mathcal{D}}$ sont les moyennes des niveaux de gris respectivement dans les états de référence et déformée :

$$\bar{f}_{\mathcal{D}} = \frac{1}{N}\sum_{i\in\mathcal{D}} f\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right) \tag{2.5}$$

$$\bar{g}_{\mathcal{D}} = \frac{1}{N}\sum_{i\in\mathcal{D}} f\left(\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}\right)\right) \tag{2.6}$$

N étant le nombre de pixels dans le domaine de corrélation ($1 \leqslant i \leqslant N$). La relation 2.4 met en évidence une indépendance du coefficient de corrélation calculé sur les fluctuations C_3 des paramètres liés aux perturbations des images numériques. Son optimum est compris entre 0, *i.e.* une parfaite corrélation, et 2, *i.e.* une inversion totale du contraste.

2.2.2 Transformation matérielle

L'optimisation du coefficient de corrélation revient à déterminer la fonction Φ qui n'est autre que la transformation mécanique apparente ou matérielle. Cette transformation relie en effet les coordonnées des pixels de la configuration de référence à celles des pixels de la configuration déformée. Cela suppose a priori une forme connue de cette fonction. Cependant, dans un contexte mettant en jeu des mécanismes physiques élémentaires complexes, l'expression de la forme de la transformation matérielle Φ n'est guère évidente. Celle-ci est le plus souvent donnée par une approximation locale.

En notant $\underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}$ les coordonnées du centre du domaine de corrélation $\mathcal{D}$ dans la configuration de référence, un développement de Taylor au voisinage de ce point permet l'obtention d'une expression généralisée de la transformation matérielle Φ qui suit :

$$\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}\right) = \Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right) + \frac{d\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right)}{d\underline{\boldsymbol{x}}}.\left(\underline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right) + \frac{1}{2}\frac{d^2\Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right)}{d^2\underline{\boldsymbol{x}}}.\left(\underline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right)^2 + ... \tag{2.7}$$

où $\frac{d\Phi(\underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}})}{d\underline{\boldsymbol{x}}}$ n'est qu'autre que le gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$ [4]. Selon l'ordre auquel l'expression 2.7 est tronquée, diverses approximations Φ_0 de la transformation matérielle Φ sur le domaine de corrélation $\mathcal{D}$ peuvent être obtenues et donc différentes variantes de la méthode de corrélation. A titre d'exemple, la troncature à l'ordre 0 traduit une simple translation dans laquelle seules deux composantes u et v sont à optimiser :

$$\Phi_0\left(\underline{\boldsymbol{x}}\right) = \underline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{T}}(u, v) \tag{2.8}$$

$\underline{\boldsymbol{T}}$ étant le vecteur de déplacement du centre du domaine de corrélation entre les configurations. de référence et déformée. Dans un contexte où l'approximation est effectuée à l'ordre 1, l'optimisation est menée sur six paramètres, *i.e.* les quatre composantes planes du gradient de transformation et celles de la translation. Cette variante conduit ainsi à l'expression approchée de la transformation matérielle qui suit :

$$\Phi_0\left(\underline{\boldsymbol{x}}\right) = \Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}.\left(\underline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right) = \underline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{T}}(u, v) + \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{I}}\right).\left(\underline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right) \tag{2.9}$$

Par ailleurs, dans le cas où les composantes des déformations pures du gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$ sont négligées, l'optimisation est menée uniquement sur 3 paramètres, à savoir les composantes de la translation et l'angle de rotation. L'approximation de la transformation matérielle se simplifie alors en :

$$\Phi_0\left(\underline{\boldsymbol{x}}\right) = \Phi\left(\underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{R}}.\left(\underline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right) = \underline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{T}}(u, v) + \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{R}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{I}}\right).\left(\underline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}_{\mathbf{0}}\right) \tag{2.10}$$

$\underset{\sim}{\boldsymbol{R}}$ étant le tenseur de rotation propre issu de la décomposition polaire du gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$.

Il est également intéressant de noter que la transformation matérielle Φ peut être approchée en effectuant des éventuelles troncatures à des ordres supérieurs du développement

4. Une présentation détaillée de la théorie des transformations finies est donnée dans le chapitre 5.

de Taylor (équation 5.7). Cependant, pour des raisons liées aux coûts d'optimisation et aux mécanismes physiques élémentaires, les mesures de champs de déplacement et de déformation consistent le plus souvent en des approximations d'ordre 0 et 1. Ces dernières permettent en effet de prendre en compte uniquement des paramètres pertinents pour des applications liées à la mécanique des matériaux hétérogènes, et ce, à des échelles locales. Dans un tel contexte, une approche de premier ordre peut être bien optimisée tant en précision qu'en temps de calcul, outre le fait qu'elle permet des mesures des gradients locaux liés aux mécanismes physiques élémentaires. Ceci est d'autant plus approprié que l'on se contente de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) [100, 121, 122].

2.2.3 Interpolation subpixel

Le caractère discret des images numériques ne permet pas une représentation propre de la fonction de la transformation matérielle Φ. En vue d'une estimation des champs de déplacement en subpixels, des interpolations de ces informations entre les valeurs connues des pixels sont requises. Pour ce faire, deux stratégies d'interpolation peuvent être envisagées.

La première approche consiste en une interpolation polynômiale, usuellement biparabolique, du coefficient de corrélation au voisinage de la translation entière optimale au pixel près. Cette interpolation utilise les valeurs du pixel optimum et celles des huit premiers voisins. Cependant, des fluctuations brutales interviennent fréquemment dans cette approche mettant en cause la précision de l'optimisation du coefficient de corrélation [14]. L'interpolation biparabolique n'est guère suffisante pour une représentation réaliste de cette fonction, et plus typiquement dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations.

La seconde stratégie concerne l'interpolation des niveaux de gris dans la configuration déformée [14]. Dans cette approche les fonctions d'interpolation sont le plus souvent des polynômes bilinéaires et bicubiques [5]. La forme bilinéaire, la plus simple, nécessite l'évaluation de quatre paramètres à partir des niveaux de gris des quatre pixels les plus proches, *i.e.* distants de dx et dy selon les principaux axes du plan de l'image (Figure 2.3).

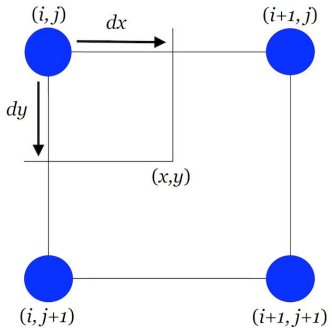


Figure 2.3 – Interpolation bilinéaire des niveaux de gris de par les pixels les plus proches

Plus concrètement, la fonction d'interpolation dans l'état déformé est donnée par :

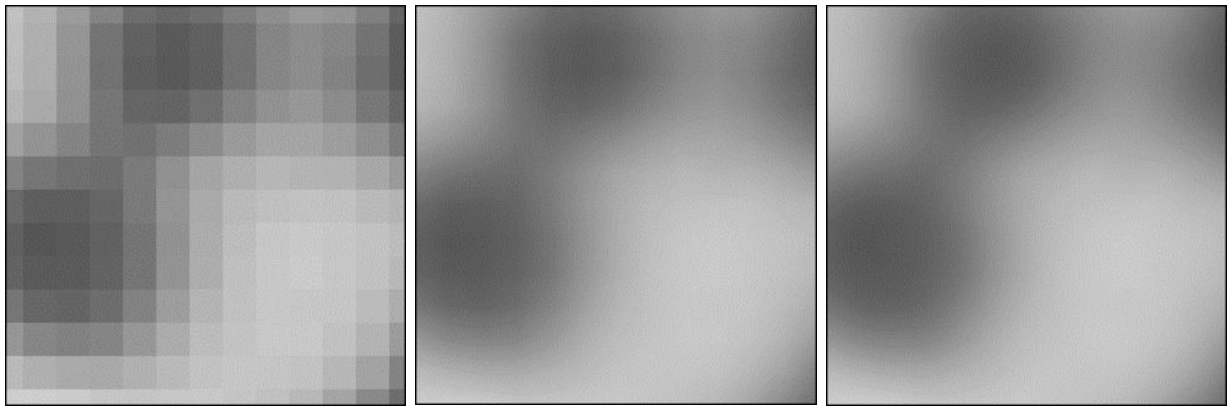
$$g_{kl}(x, y) = a + b\,dx + c\,dy + d\,dx\,dy \tag{2.11}$$

5. Il est également possible d'effectuer des interpolations à des ordres supérieurs.

$(k, l) \in [i, i+1] \times [j, j+1]$ étant respectivement les numéros des lignes et des colonnes de l'image numérique. Les paramètres du polynôme d'interpolation s'attachent aux niveaux de gris des pixels voisins de la manière suivante :

$$a = g(i, j) \tag{2.12}$$
$$b = g(i+1, j) - g(i, j) \tag{2.13}$$
$$c = g(i, j+1) - g(i, j) \tag{2.14}$$
$$d = g(i+1, j+1) - g(i, j+1) - g(i+1, j) + g(i, j) \tag{2.15}$$

À l'inverse de l'interpolation polynômiale bilinéaire, son homologue bicubique présente une forme plus complexe et requiert des ressources informatiques bien plus conséquentes. Celui-ci nécessite en effet l'évaluation de seize coefficients. Ces derniers sont respectivement attachés aux niveaux de gris des pixels les plus proches, à l'image de l'interpolation bilinéaire, aux gradients de ces intensités selon les axes x et y, mais également aux second gradients selon un couplage de ces axes. Par ailleurs, dans un contexte similaire à celui des champs mécaniques locaux hétérogènes, l'information récoltée via une telle interpolation n'est guère plus significative par rapport à une interpolation bilinéaire (Figure 2.4).



(a) Au pixel près (b) Bilinéaire (c) Bicubique

Figure 2.4 – Méthodes d'interpolation (a) interpolation du coefficient de corrélation (b) et (c) interpolation des niveaux de gris [14]

2.2.4 Mise en œuvre numérique

En vue d'apparier les repères locaux dans la configuration déformée, une utilisation d'algorithmes numériques permettant une optimisation du coefficient de corrélation est requise. Selon le contexte étudié, deux types de procédures de calcul peuvent être menés, à savoir une optimisation dans l'espace des réels et l'utilisation de la transformée de Fourier rapide (FFT) [14]. Indépendamment de l'espace d'intégration, ces procédures sont le plus souvent réalisées en deux étapes distinctes. La première consiste en des calculs au pixel près permettant une localisation de l'optimum global de la zone de corrélation, et ce, par

une exploration complète des paramètres de la transformation au sein d'un domaine discret. Quant à la seconde phase de calcul, celle-ci effectue une optimisation subpixel, *i.e.* une optimisation des paramètres de par les solutions obtenues précédemment (conditions initiales). À noter que dans le contexte de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) dans lequel le mouvement est supposé connu a priori, le calcul au pixel près est toutefois omis.

L'optimisation subpixel peut également être menée selon deux approches distinctes, bien évidemment indépendamment de l'espace d'intégration [14]. La première idée consiste à effectuer une optimisation globale de l'ensemble des paramètres de la transformation à l'aide d'un algorithme de type minimisation de premier gradient, couramment utilisé pour les interpolations bilinéaires, ou encore d'une méthode de type Levenberg-Marquardt...La seconde stratégie utilise un processus itératif dans lequel les paramètres de la transformation sont optimisés d'une manière récurrente de par les points les plus proches. Bien que cette approche soit plus stable et plus simple à mettre en œuvre, la méthode itérative est certes moins locale et surtout moins efficace lors d'une perturbation des niveaux de gris, *i.e.* une forte discontinuité du coefficient de corrélation entre les pixels voisins. De ce fait, la première approche est bien souvent privilégiée.

En pratique, la mise en œuvre numérique consiste dans un premier temps en la sélection du domaine à corréler. Dans le logiciel 7D utilisé dans ce travail, les points où la corrélation est effectuée peuvent être repérés aux intersections d'une grille virtuelle que l'on trace sur l'image (cf. §2.4). Cette grille étant le plus souvent rectangulaire, le pré-traitement consiste simplement en la définition de sa taille, de celle des éléments constitutifs (« imagettes »), mais également de leur décalage. L'optimisation numérique est menée par la suite en effectuant des recherches des points homologues en partant d'une estimation du premier point que l'on définit dans la configuration déformée. Cependant, l'optimisation numérique peut parfois aboutir à des mesures peu pertinentes en raison des faibles différences entre diverses intersections des éléments constitutifs. Le contournement de ce problème peut être réalisé en prenant des domaines de corrélation centrées sur les points concernés encadrant la déformation locale, *i.e.* le centre des « imagettes ».

2.2.5 Calcul des déformations

Il est évident que lors des procédures d'optimisation numérique, la technique de corrélation d'images permet exclusivement des mesures de champs de déplacement. Le calcul des champs des déformations est réalisé en post-traitement en utilisant les paramètres de la transformation. Pour ce faire, diverses méthodes peuvent être envisagées [14].

Fonctions de forme des éléments finis. Cette méthode utilise des éléments linéaires ou éventuellement quadratiques dont le maillage s'appuie sur les coordonnées de chaque intersection de grille dans les diverses configurations. Les nœuds ainsi générés et associées aux valeurs du déplacement permettent de calculer les composantes du tenseur de déformation aux points de Gauss selon un formalisme donnée (transformations finies, HPP...). Les valeurs locales sont données par une fonction d'interpolation.

Dérivation de polynômes d'interpolation. La dérivation des fonctions d'interpolation présentées précédemment permet l'obtention du tenseur de déformation en passant par les valeurs de déplacements d'un certain nombre de points de mesure. Cependant, les mesures établies manquent de pertinence lors d'une dérivation avec lissage.

Intégrale de contour. Cette méthode se distingue par l'utilisation d'un schéma de dérivation discret utilisant les déplacements de chaque intersection de grille. Les composantes de déformation en un point donné sont obtenues par la moyenne du gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$ dans un domaine délimité par les intersections de grilles voisines dans les différentes configurations, plus typiquement, par le biais d'une intégrale de contour :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}} \approx \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{F}} \right\rangle_{\mathcal{D}(x,y)} = \frac{1}{\mathcal{D}(x,y)} \int_{\mathcal{D}(x,y)} \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}(u,v)\, du\, dv \tag{2.16}$$

Il est évident que plus le domaine d'intégration est conséquent plus la précision est importante, mais plus la résolution est médiocre. L'ordre de grandeur des incertitudes du gradient de transformation ΔF_{ij} dans le cas unidimensionnel est donnée par :

$$\Delta F_{ij} \approx \frac{2\,\Delta u_i}{\sqrt{N}.L_j} \tag{2.17}$$

Δu_i étant l'incertitude sur le déplacement, L_j la taille du domaine de corrélation et N le nombre de mesures de déplacement indépendantes utilisées.

La méthode de l'intégrale au contour est bien adaptée pour des mesures aisées des composantes planes du tenseur de déformation dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), mais également en transformations finies lors d'une utilisation d'une approximation matérielle de premier ordre. À noter que l'intérêt est essentiellement porté à ces composantes dans le contexte actuel. Les composantes hors plan qui peuvent ainsi être associées à la prise en compte de l'évolution du profil de surface peuvent être négligées. La forme du tenseur de déformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$ dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) est donnée par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^T\right) - \underset{\sim}{\boldsymbol{I}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & ? \end{pmatrix} \tag{2.18}$$

où le symbole $(.)^T$ définit la transposée d'un tenseur donné. Dans le contexte de la théorie des transformations finies, les composantes planes sont celles du tenseur de déformation de Green-Lagrange $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$, *i.e.* :

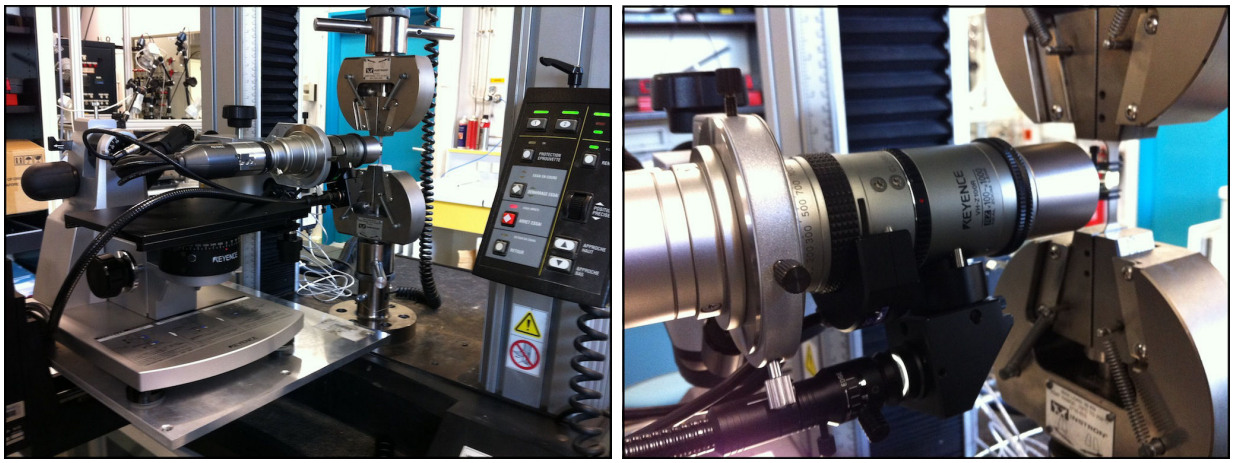
$$\underset{\sim}{\boldsymbol{E}} = \frac{1}{2}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^T \boldsymbol{.}\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{I}}\right) = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & 0 \\ E_{21} & E_{22} & 0 \\ 0 & 0 & ? \end{pmatrix} \tag{2.19}$$

2.3 Essais mécaniques in-situ

La technique de corrélation d'images numériques (DIC) constitue une approche prometteuse pour une investigation des champs de déformations hétérogènes à une échelle locale d'un matériau tel que l'acier AISI H11. Dans ce qui suit, le dispositif et les procédures expérimentaux mis en œuvre permettant une caractérisation multi-échelle du comportement mécanique de ce matériau sont présentés.

2.3.1 Dispositif expérimental

Les présents essais mécaniques in-situ sont menés sur une machine de traction électromécanique de type Instron ayant une capacité de charge de 100 kN. Le montage réalisé consiste en un support sur lequel est placé un microscope optique de type Keyence. Ce dernier utilise un objectif avec un grossissement allant jusqu'à $\times$ 1000. Il permet l'acquisition d'images numériques de dimensions 1600 $\times$ 1200 $pixels^2$ en vue d'une analyse pertinente des champs locaux. Le système d'observation possède une capacité d'effectuer des translations selon trois dégrés de liberté. Celui-ci offre donc une grande souplesse dans le positionnement de l'objectif du microscope vis-à-vis de la surface de l'éprouvette. La zone d'intérêt peut alors être définie avec précision et des réglages correctifs peuvent éventuellement être effectués en vue d'une amélioration de l'acquisition des images (Figure 3.5a).



(a) Vue d'ensemble (b) Partie utile

Figure 2.5 – Dispositif expérimental des essais mécaniques in-situ

Par ailleurs, un extensomètre d'une base de 12,5 mm est placé sur la partie utile de l'éprouvette. Celui-ci permet une mesure globale de la déformation de l'acier AISI H11 au cours de l'essai (Figure 3.5b) qui est reliée aux champs mécaniques locaux. Les éprouvettes [6] utilisées dans ce travail sont prélevées dans des plaques ayant subi le procédé de génération de surfaces similaires à celles issues de l'opération de réalisation des outillages décrit dans

6. Pour rappel, deux type d'éprouvettes sont utilisés, à savoir de premier type ayant une épaisseur de 1 mm et de second type d'épaisseur 0,5 mm.

§1.3.1. Les dimensions de celles-ci sont adaptées de manière à pouvoir réaliser des analyses in-situ (Figure 2.6). On rappelle également qu'un intérêt particulier est porté au comportement des couches superficielles de l'acier AISI H11, ce qui impose d'autres contraintes quant aux dimensions de l'éprouvette. Pour ce faire, cette dernière est par ailleurs montée dans le sens transverse permettant ainsi des observations au niveau de son épaisseur (Figure 3.5b) où les mesures in situ ont tendance à être assez proches du bord. À noter que les tranches des éprouvettes ont été préalablement polies à la pâte diamantée au moyen de broches cylindriques. Cette préparation est assez délicate à mettre en œuvre en raison de la géométrie des éprouvettes, mais surtout du fait que la zone d'intérêt qui se situe essentiellement au niveau du bord (cf. §2.4.2).

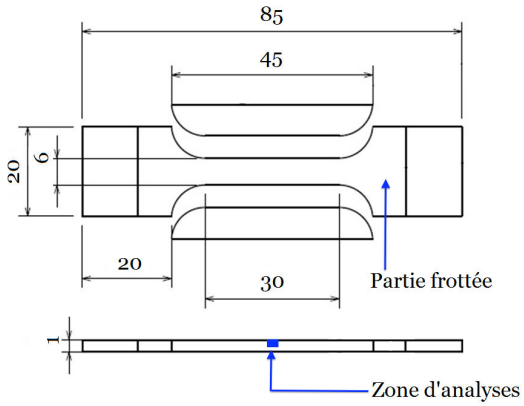


Figure 2.6 – Dimensions des éprouvettes de premier type (1 mm) et position de la zone d'analyses in-situ

2.3.2 Procédure expérimentale

Les essais mécaniques in-situ sont pilotés manuellement en imposant des cycles de déplacement ce qui permet une mise en œuvre des mesures de champs in-situ plus aisée. Il est alors possible d'effectuer d'éventuels réglages ou vérifications liés à l'acquisition d'images en cours d'essai, ce qu'une consigne automatique n'aurait pas permis.

La procédure expérimentale consiste dans un premier temps à effectuer une attaque chimique au nital permettant une génération d'un mouchetis « naturel », *i.e.* un marquage lié aux artefacts stéréologiques. Une zone d'intérêt, qui est de forme rectangulaire, est par la suite repérée à l'aide d'un trusquin. Celle-ci a le plus souvent pour dimensions une zone de 500 × 500 μm^2. Dès lors que l'éprouvette est fixée dans les mors mécaniques, une optimisation de la qualité d'acquisition des images numériques est effectuée. Celle-ci est relative à la netteté, au contraste... mais surtout à la distribution des niveaux de gris (Figure 2.7). Cette optimisation est essentiellement réalisée lors de l'acquisition de la première image d'un essai donné. Seules certaines vérifications sont menées pour les images acquises par la suite en vue de garantir une conservation quasi-optimale de la qualité et des niveaux de gris des images numériques à corréler. À noter également qu'un autre type de correction peut être envisagé en cours d'essai. Celui-ci consiste en des translations du système d'observation

afin de bien conserver le centre du domaine de corrélation dans l'image au cours de la déformation. Cependant, étant donné que les essais actuels sont réalisés dans le domaine des petites perturbations (HPP), cette dernière correction ne s'avère pas nécessaire.

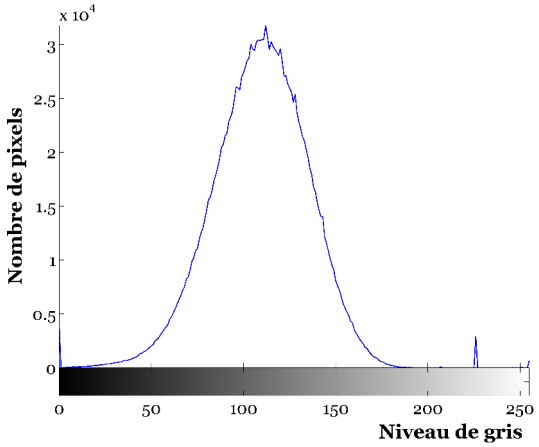


Figure 2.7 – Exemple de distribution des niveaux de gris

Comme évoqué ci-dessus, le pilotage des essais est réalisé manuellement. Par le biais du système de mesure de déformation, les données liées au comportement global sont enregistrées d'une manière incrémentale. À chaque incrément, une acquisition d'image est réalisée, permettant une corrélation des champs mécaniques locaux à un état de chargement global donné. Dans le présent travail, deux types de chargements uniaxiaux sont considérés, quasi-statique et cyclique. Le chargement quasi-statique est imposé aux éprouvettes de premier type, *i.e.* ayant une épaisseur de 1 mm, tandis que le chargement cyclique est appliqué aux éprouvettes de second type, *i.e.* ayant une épaisseur de 0,5 mm.

Si le chargement quasi-statique ne pose a priori aucun problème particulier, certaines précautions sont à mettre en place pour le chargement cyclique. Les géométries plates sont de faibles épaisseurs et peuvent être sujettes à un flambement dès lors que le rapport de charge est négatif voire nul. De ce fait, seul un rapport de charge positif est considéré et divers chargements de type traction-traction sont appliqués à l'ensemble des éprouvettes de second type. La procédure utilisée consiste alors à imposer un déplacement manuel de la traverse de la machine tout en contrôlant l'effort global induit. Dans le contexte actuel, neuf cycles équirépartis en trois blocs différents sont appliqués pour chaque éprouvette en acier AISI H11 de second type (Tableau 2.1).

Tableau 2.1 – Répartition des différents blocs pour le chargement cyclique

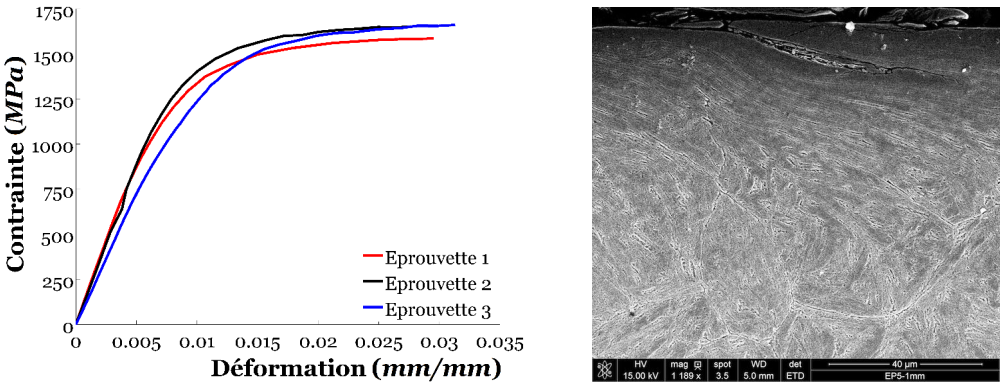
N° d'éprouvette	Bloc 1	Bloc 2	Bloc 3
Éprouvette 1	105−1050 MPa	105−1050 MPa	105−1050 MPa
Éprouvette 2	105−1050 MPa	115−1150 MPa	125−1250 MPa
Éprouvette 3	105−1050 MPa	125−1250 MPa	105−1050 MPa

2.4 Analyse du comportement mécanique

À l'issue des essais mécaniques in-situ, l'ensemble des données sont traitées en vue d'une analyse du comportement multi-échelle de l'acier AISI H11. Comme évoqué précédemment, le comportement est acquis d'une part de manière globale par le biais d'un extensomètre et d'une cellule de force permettant l'obtention des courbes contrainte-déformation macroscopiques. D'autre part, la technique de corrélation d'images numériques est utilisée pour les analyses des champs mécaniques locaux. On note aussi que celle-ci utilise une grille virtuelle dont les éléments constitutifs ont pour taille 10 *pixels* et décalés également de 10 *pixels*. L'approximation de la transformation matérielle est du premier ordre et la fonction d'interpolation des niveaux de gris est de forme bilinéaire. En outre, le schéma d'intégration pour le calcul des déformations, *i.e.* l'intégrale de contour, est d'ordre 1 [122]. De telles configurations permettent l'obtention d'une résolution de 0,01 *pixels* pour le champs de déplacement et de 0.1% pour celui des déformations dans le cas de l'hypothèse des petites perturbations.

2.4.1 Cas du chargement monotone

Échelle globale. À une échelle globale, le comportement quasi-statique monotone des éprouvettes en acier AISI H11 ayant une surface traitée (cf. §1.3) illustre des allongements à la rupture A de l'ordre de 3% (Figure 2.8a[7]). Cette faible valeur est due à des états de surfaces semblables à ceux issus de l'opération de réalisation des outillages, plus typiquement, aux caractéristiques liées au comportement macroscopique, notamment le profil de surface mais également à l'endommagement présent dans cette zone.



(a) Courbes de traction (b) Endommagement en surface

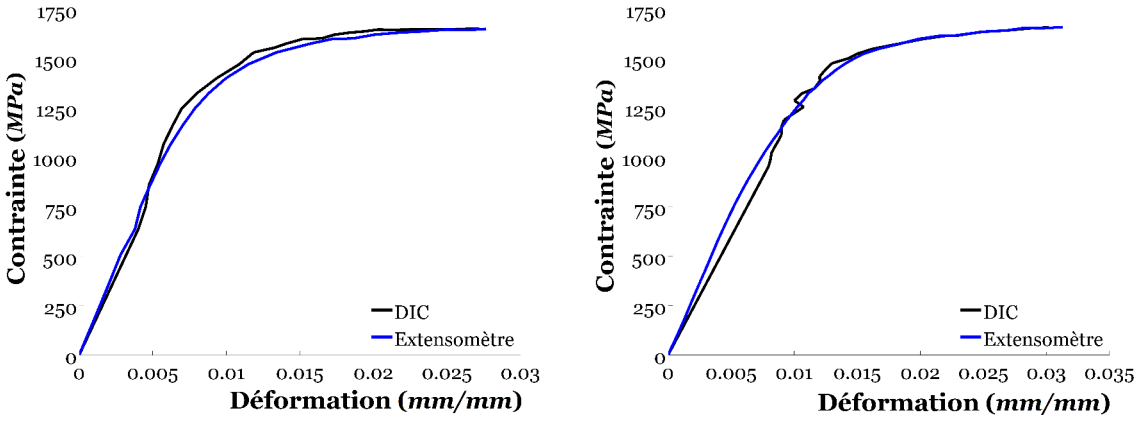
Figure 2.8 – Comportement monotone global des éprouvettes en AISI H11 ayant des surfaces « usinées »

Outre la rupture prématurée, l'ensemble de ces éprouvettes présente un état d'écrouissage plus important que celui d'un acier AISI H11 « sain » (Figure 1.16). Dans les présents

7. La numérotation des éprouvettes correspond à celle des plaques utilisées pour le procédé de génération de surfaces similaires à celles issues de l'opération de réalisation des outillages dans §1.3.1.

essais, les valeurs atteintes par la contrainte sont en effet plus conséquentes dans la partie non linéaire du comportement. Par ailleurs, ayant une surface fortement sollicitée, *i.e.* 65 μm de couches superficielles concernées (cf. §1.3.2), l'éprouvette 3 illustre un module d'Young Λ moins important que ceux des éprouvettes 1 et 2 mais également que celui du matériau sain. Ceci met évidence le fait que la préparation de surface a bel et bien engendré de l'endommagement (Figure 2.8b) mais également des contraintes planes résiduelles affectant le comportement global de l'acier AISI H11.

Le comportement global peut également se déduire via un autre moyen de mesure. Étant donné que la zone d'intérêt a pour dimensions 500 × 500 μm^2, la zone de corrélation, *i.e.* taille de la grille virtuelle, peut être considérée représentative[8] du comportement global de l'acier AISI H11. Pour consolider cette hypothèse, on rappelle que les analyses EBSD effectuées dans §1.2.3.2 illustrent 6056 lattes pour une zone de dimensions 300 × 150 μm^2. De ce fait, la technique de corrélation d'images numériques, destinée à une investigation des champs mécaniques locaux, est également utilisée pour déduire le comportement macroscopique de l'acier AISI H11. La méthode consiste à effectuer la moyenne des déformations de l'ensemble des pixels, *i.e.* des éléments constitutifs de la grille virtuelle, pour tous les états de chargement. Cette approche est menée en vue d'une validation globale de la pertinence des mesures réalisées par la technique de corrélation (Figure 2.9). Dans ce qui suit, seules les mesures des éprouvettes 2 et 3 sont présentées, et ce, en raison des difficultés liées à la distinction des couches superficielles affectées lors du traitement de l'état de surface. Les tailles des zones de corrélation sont respectivement de 450 × 350 μm^2 et de 450 × 300 μm^2 pour les éprouvettes 2 et 3 (Figures 2.10, 2.11, 2.12 et 2.13).



(a) Éprouvette 2 (b) Éprouvette 3

Figure 2.9 – Confrontation des mesures de la déformation uniaxiale globale issues de la corrélation d'images à celles issues de l'extensomètre

Échelle locale. D'un point de vue local, les essais in-situ permettent la mise en évidence d'un comportement mécanique bien hétérogène. Les présentes analyses illustrent des sché-

8. Cette approche introduit la notion de volume élémentaire représentative (VER) qui est abordée dans §2.5.

mas de localisation assez complexes à des échelles distinctes au sein de la structure interne de l'acier AISI H11. Ces dernières concernent essentiellement le réseau des bandes de localisation traversant les cristaux constitutifs, mais également les fortes localisations des champs de déformation autour des artefacts stéréologiques, à savoir les joints de anciens joints de grains austénitiques ou encore les joints de lattes martensitiques.

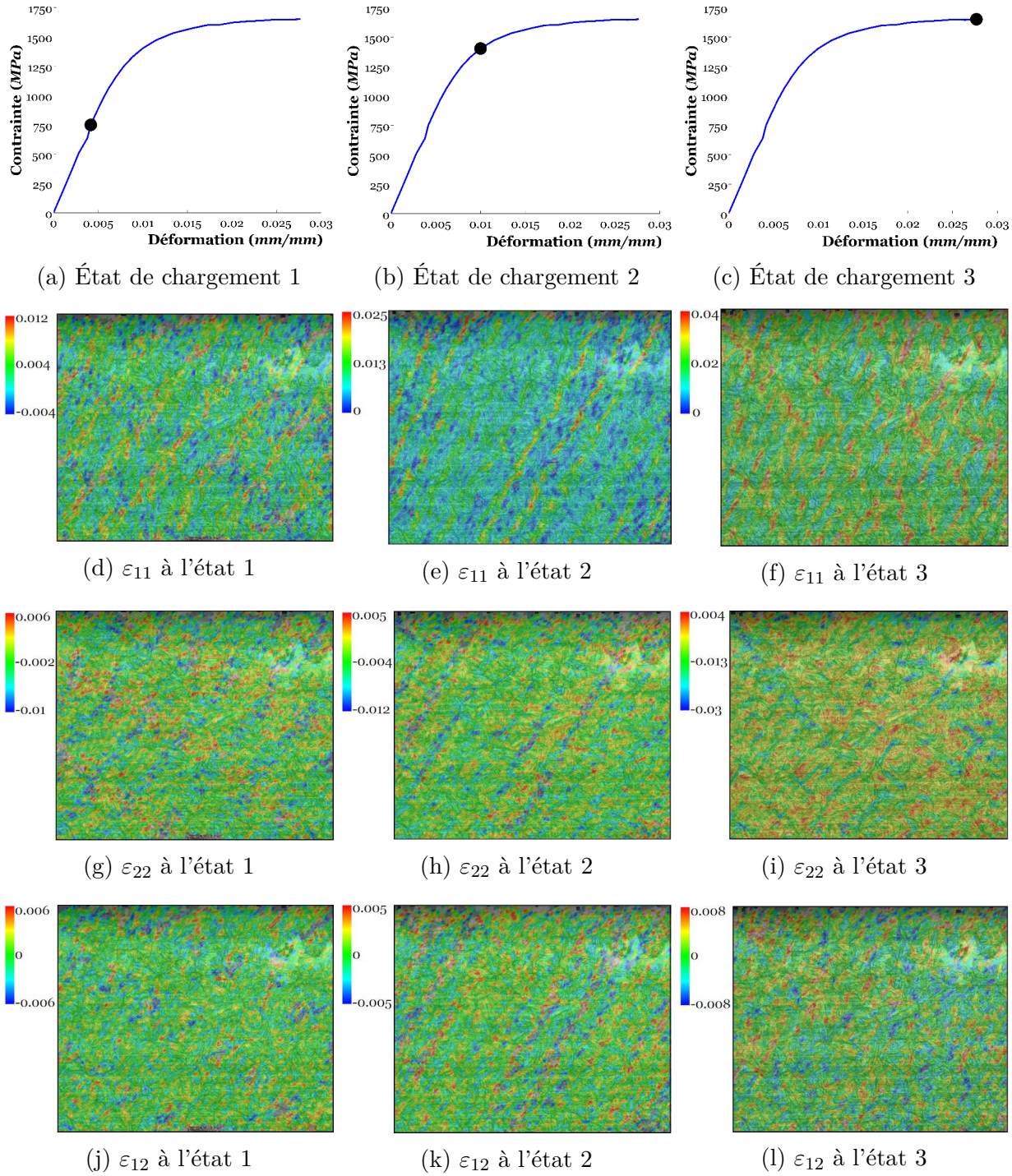
En vue d'une corrélation de ces schémas de localisation au chargement global, les champs des composantes planes du tenseur de déformations sont tracés pour divers états de sollicitation selon la direction 11 (Figures 2.10, 2.11, 2.12 et 2.13). Lors de la réponse linéaire du comportement global de l'acier AISI H11, les analyses in-situ illustrent bel et bien une dispersion de l'ensemble des composantes planes (Figures 2.10 et 2.12). Cet aspect est en effet lié à la stéréologie du matériau, mais également à une orientation des lattes martensitiques. Ces hétérogénéités structurales sont également à l'origine de quelques états de compression ressortis dans certains endroits de la zone d'analyse, et ce, en dépit d'une sollicitation globale en traction. Par ailleurs, les présentes analyses permettent la mise en évidence de phénomènes liés à la micro-plasticité. Plus concrètement, malgré une réponse macroscopique linéaire, certaines régions présentent des valeurs de déformation uniaxiale au-delà de celle associée à la limite d'élasticité $R_{e0,2}$ (Figures 2.10d et 2.12d) illustrant une localisation du comportement non linéaire. À noter que lors de la réponse linéaire du comportement global de l'acier AISI H11, cette dernière localisation est en phase d'initiation au niveau des joints de lattes de martensite et des joints triples (Figures 2.10g et 2.12g).

La transition élasto-plastique se consolide par une intensification du schéma de localisation (Figures 2.10e, 2.10h, 2.12e et 2.12h). Celui-ci en effet tendance présenter des valeurs bien plus conséquentes que lors de l'état de chargement précédent. Malgré une valeur moyenne globale quasi-nulle de la composante non diagonale du tenseur de déformation, cette intensification du schéma localisation se distingue également sur la cartographie des champs de cisaillement (Figures 2.10k et 2.12k). Par ailleurs, à l'image du premier chargement certaines localisations autour des artefacts stéréologiques, notamment les anciens joints austénitiques sont bien présents. La résolution des images numériques étant de près de 2 $Mpixels$, associée à des éléments constitutifs de 10 $pixels$, n'est cependant pas adéquate pour une analyse à une échelle intragranulaire, mais permet un gain de précision dans les mesures. En tenant compte du grossissement de l'objectif du microscope utilisé, la taille des éléments constitutifs est proche de 3 μm.

Lors de la réponse globale non linéaire de l'acier AISI H11, les analyses in-situ font ressortir une forte localisation des composantes planes du tenseur de déformation autours des artefacts stéréologiques (Figures 2.10f, 2.10i, 2.10l, 2.12f, 2.12i et 2.12l). En dépit des « faibles » résolutions des images numériques, il est bien aisé d'identifier une concentration des champs des déformations autours des anciens joints austénitiques contrairement à ceux des lattes martensitiques. À une telle échelle, les présentes analyses permettent uniquement la mise en évidence des petites bandes fortement resserrés et déformées à l'intérieur des anciens grains austénitiques. À noter également, que certaines localisations aux points triples associés aux anciens joints de grains austénitiques sont assez bien distinguées.

En raison des corrections liées à la translation du système d'acquisition d'images en cours des essais, il est intéressant de tracer les composantes du tenseur des déformations principales (Figures 2.11 et 2.13). Cette approche permet en effet de consolider les car-

tographies des mesures des champs locaux. On rappelle que le tenseur des déformations principales est indépendant du repère global. En outre, les expressions des ces composantes



(a) État de chargement 1 (b) État de chargement 2 (c) État de chargement 3

(d) ε_{11} à l'état 1 (e) ε_{11} à l'état 2 (f) ε_{11} à l'état 3

(g) ε_{22} à l'état 1 (h) ε_{22} à l'état 2 (i) ε_{22} à l'état 3

(j) ε_{12} à l'état 1 (k) ε_{12} à l'état 2 (l) ε_{12} à l'état 3

Figure 2.10 – Évolution des champs locaux des différentes composantes planes du tenseur de déformation selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 2

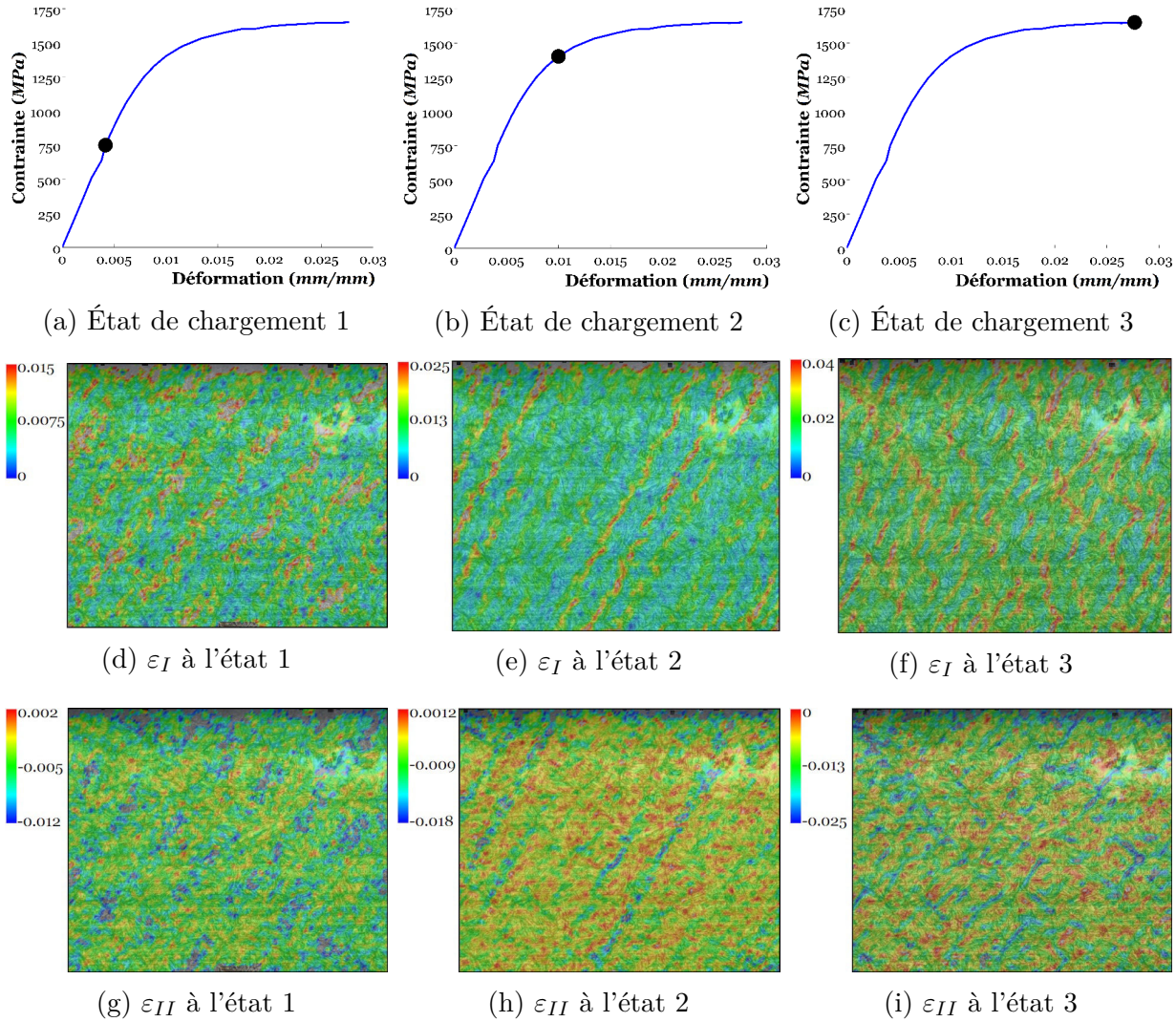
sont données par :

$$\varepsilon_I = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \sqrt{(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})^2 + 4\,\varepsilon_{12}^2}\right) \tag{2.20}$$

$$\varepsilon_{II} = \frac{1}{2}\left(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} - \sqrt{(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})^2 + 4\,\varepsilon_{12}^2}\right) \tag{2.21}$$

Les cartographies des composantes du tenseur des déformations principales sont plus ou moins proches de celles des composantes diagonales ε_{11} et ε_{22} avec quasiment la même évolution du schéma de localisation. On note également les valeurs positives et à dominante négatives respectives de ε_I et ε_{II}.

Par ailleurs, les présentes analyses illustrent un schéma de localisation assez complexe au niveau des couches superficielles. Cependant, une concentration des champs de déforma-



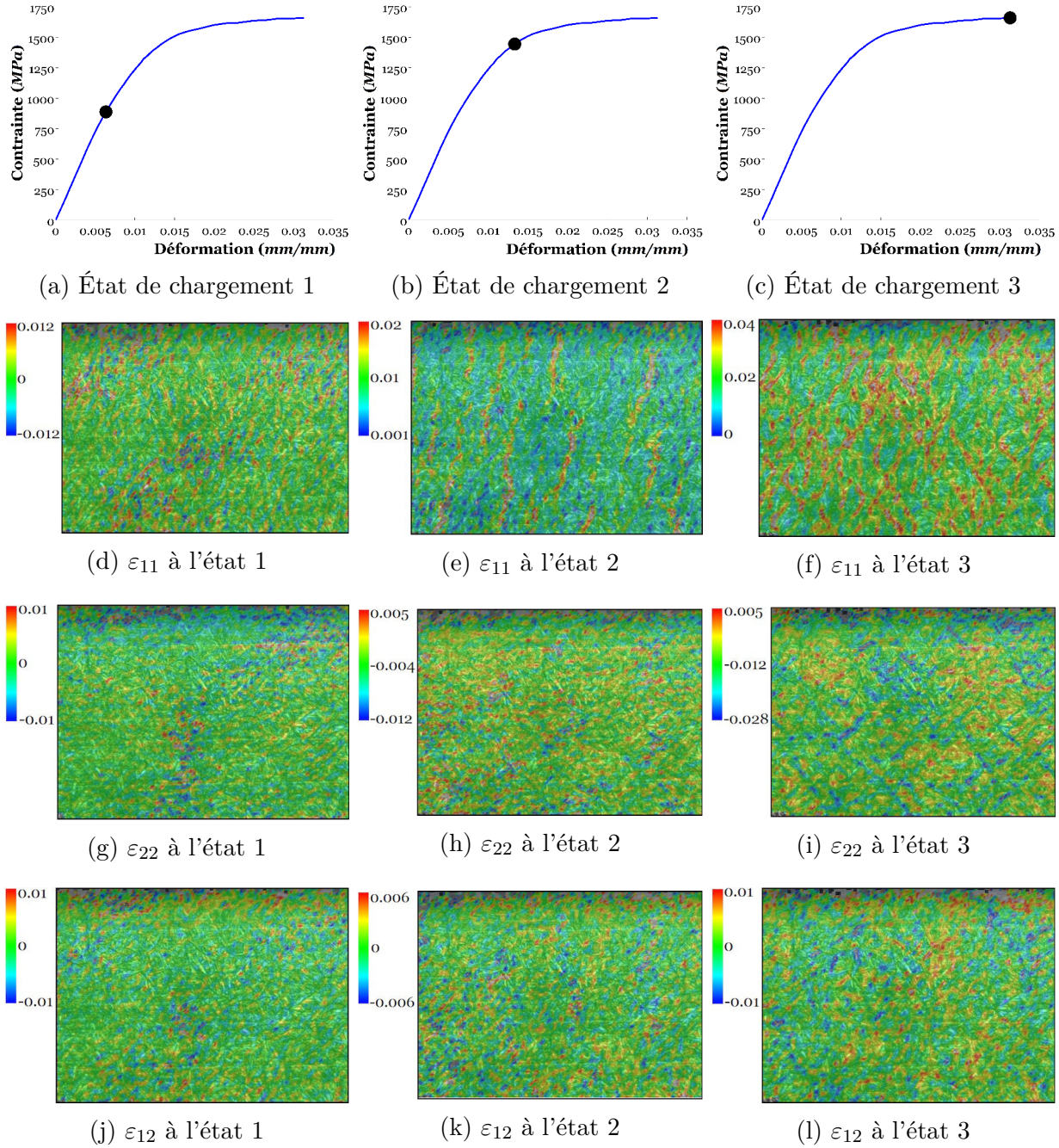
(a) État de chargement 1 (b) État de chargement 2 (c) État de chargement 3

(d) ε_I à l'état 1 (e) ε_I à l'état 2 (f) ε_I à l'état 3

(g) ε_{II} à l'état 1 (h) ε_{II} à l'état 2 (i) ε_{II} à l'état 3

Figure 2.11 – Évolution des champs locaux des différentes composantes du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 2

tion autour des anciens joints de grains austénitiques est assez bien marquée consolidant l'effet de l'anisotropie morphologique. Les composantes du tenseur de déformation ont en effet tendance à dévier selon la forme des lattes martensitiques, et seul un amorçage d'un caractère homogène est à peine constaté (Figure 2.14a), et ce, en raison des difficultés dans



(a) État de chargement 1 (b) État de chargement 2 (c) État de chargement 3

(d) ε_{11} à l'état 1 (e) ε_{11} à l'état 2 (f) ε_{11} à l'état 3

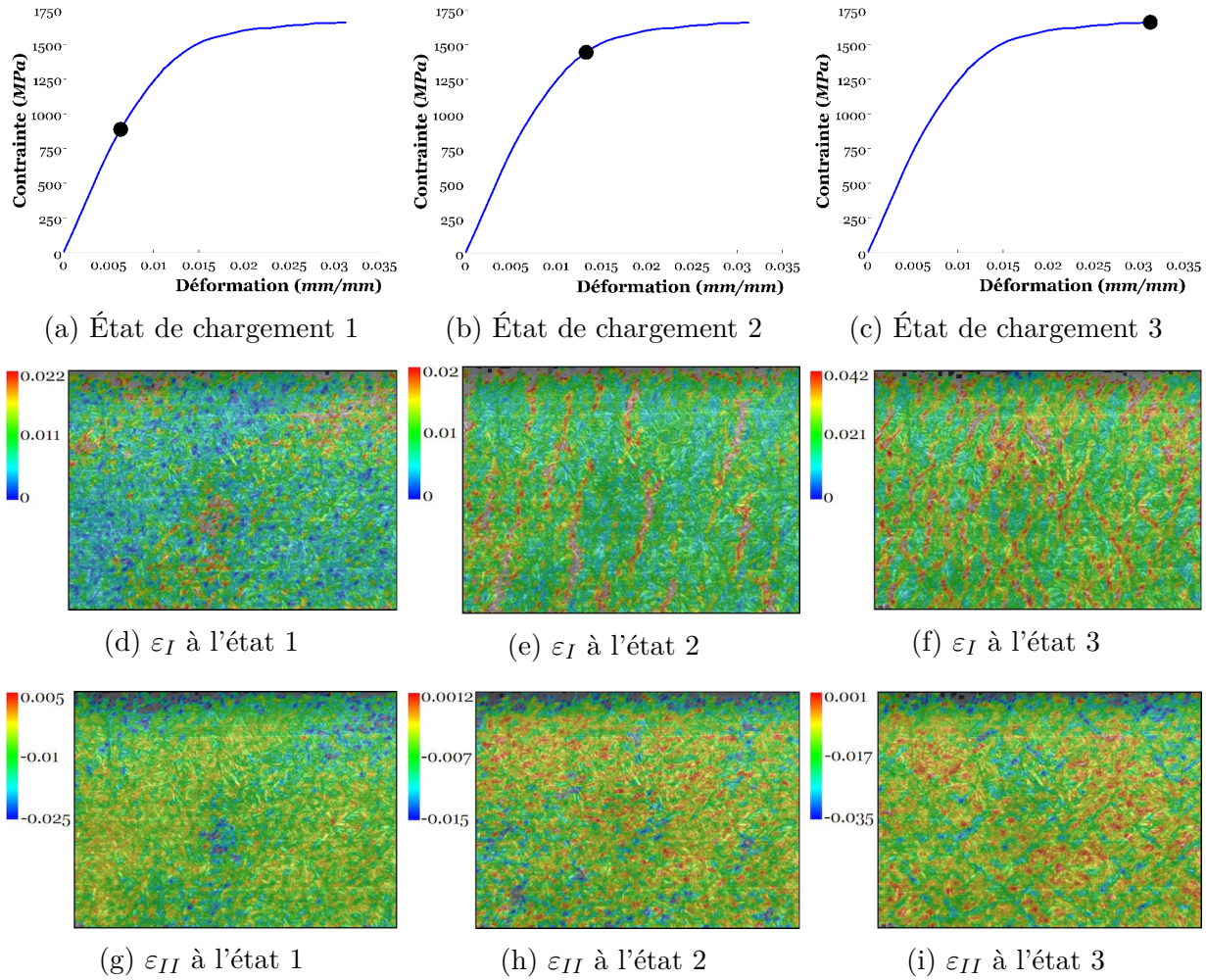
(g) ε_{22} à l'état 1 (h) ε_{22} à l'état 2 (i) ε_{22} à l'état 3

(j) ε_{12} à l'état 1 (k) ε_{12} à l'état 2 (l) ε_{12} à l'état 3

Figure 2.12 – Évolution des champs locaux des différentes composantes planes du tenseur de déformation selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 3

l'application de la technique de corrélation d'images dans les couches superficielles.

Plus concrètement, les couches superficielles présentent une distribution des niveaux de gris inadéquate pour la technique de corrélation d'images numériques. Par ailleurs, le marquage lié aux artefacts stéréologiques ne peut être distingué d'une manière aisée et le niveau de netteté en cette zone est bien médiocre. De ce fait, la fiabilité des mesures des champs locaux est difficile à garantir. La complexité d'utilisation de cette technique s'attache essentiellement au mode de préparation des éprouvettes en acier AISI H11. Lors du polissage des épaisseurs de celles-ci, un profil de surface ondulé est généré au niveau des couches superficielles engendrant ainsi une zone d'analyses non plane, mais surtout une perte d'informations. Cet aspect est en effet bien prouvée par la qualité assez médiocre de la corrélation au niveau de ces couches superficielles. Ce caractère médiocre de la qualité de corrélation se traduit par d'éventuels confusions d'intersections des éléments constitutifs de la grille virtuelle, divergences de l'algorithme d'optimisation des points homologues, mais



(a) État de chargement 1 (b) État de chargement 2 (c) État de chargement 3

(d) ε_I à l'état 1 (e) ε_I à l'état 2 (f) ε_I à l'état 3

(g) ε_{II} à l'état 1 (h) ε_{II} à l'état 2 (i) ε_{II} à l'état 3

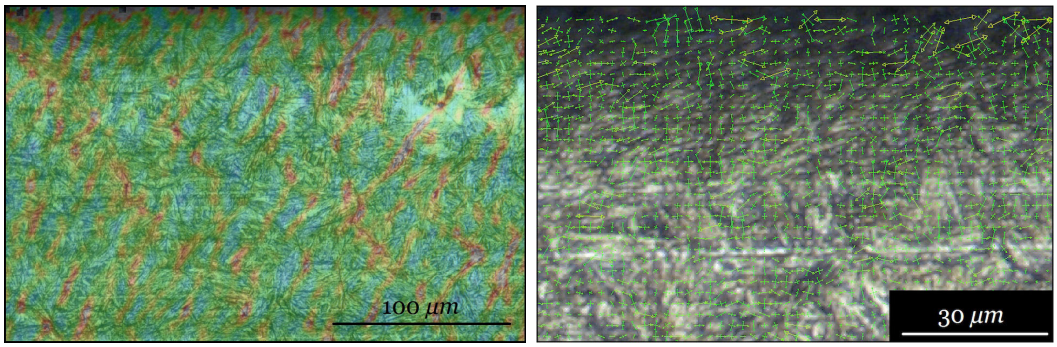
Figure 2.13 – Évolution des champs locaux des différentes composantes du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 3

également par des coefficients de corrélation relativement élevés.

Il aurait été intéressant de corréler les champs locaux de déformation aux orientations cristallographiques des cristaux constitutifs via l'EBSD. Cependant, faute de moyens, la présente corrélation est uniquement effectuée aux artefacts stéréologiques. Par ailleurs, de par le tenseur des déformations principales, l'orientation ϕ du repère de ces composantes principales par rapport à celui des coordonnées du système global peut être déduit en chaque élément constitutif de la grille virtuelle par le biais de la relation qui suit :

$$\phi = \arctan\left(\frac{2\,\varepsilon_{12}}{\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22} + \sqrt{(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})^2 + 4\,\varepsilon_{12}^2}}\right) \tag{2.22}$$

Les couches superficielles illustrent une orientation du repère principal plus ou moins importante selon la morphologie des lattes martensitiques (Figure 2.14b). Des perturbations peuvent également apparaître en raison des défauts de surface. À cœur du matériau, si l'orientation ϕ est particulièrement donnée selon l'axe de sollicitation, certaines perturbations sont présentes et sont liées aux artefacts stéréologiques.



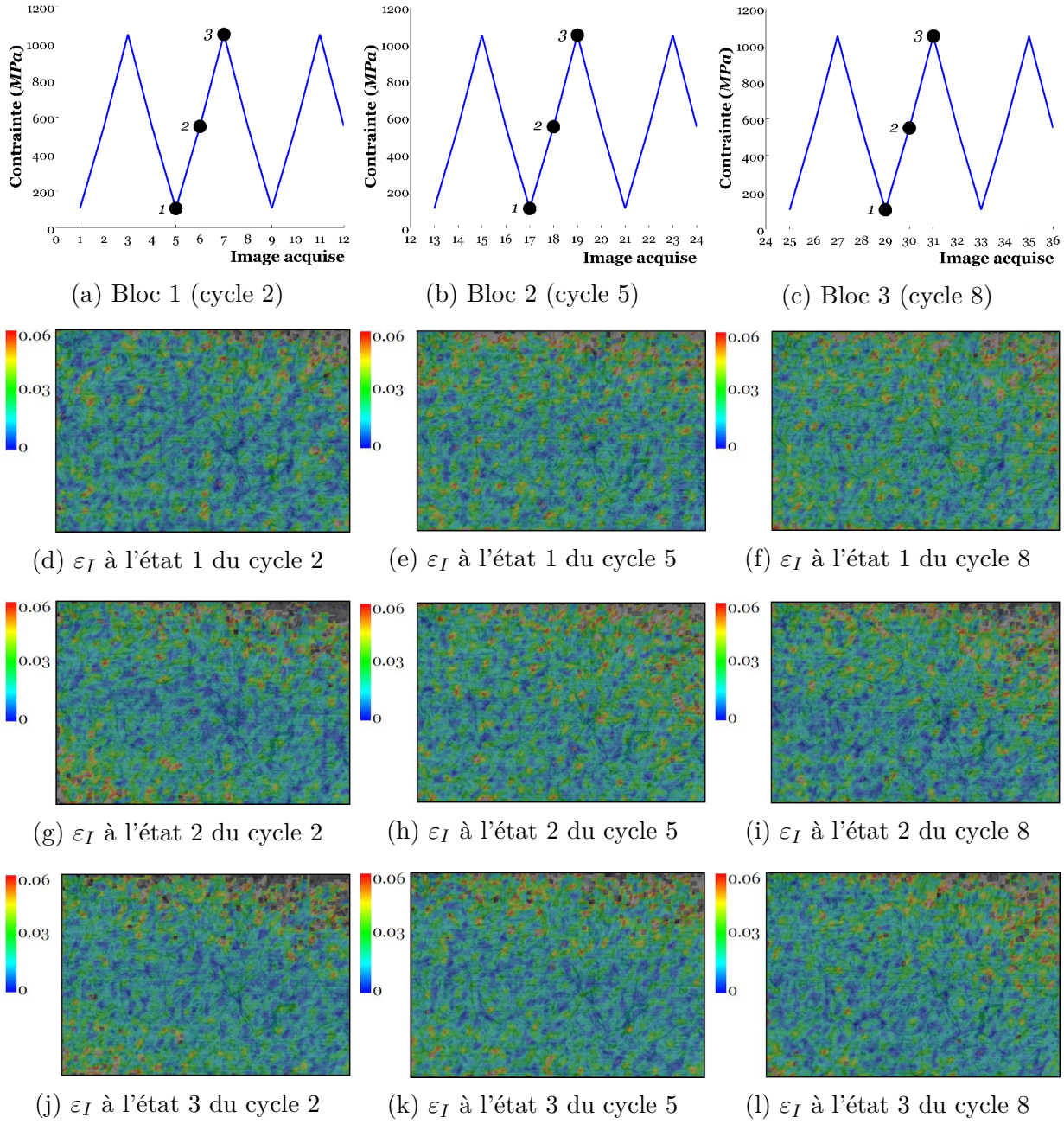
(a) Localisation de ε_I (b) Distribution de ϕ

Figure 2.14 – (a) Localisation de la composante ε_I et (b) orientation ϕ du tenseur des déformations par rapport au repère global dans les couches superficielles

2.4.2 Cas du chargement cyclique

À l'inverse du chargement monotone, la fréquence d'acquisition des données globales est bien moins élevée dans les essais cycliques. Seules cinq acquisitions par cycle sont effectuées pour la prise des images numériques permettant d'associer les champs locaux à un état de comportement global donné. Par ailleurs, on rappelle que les présents essais sont réalisés sur les éprouvettes de second type, *i.e.* ayant une épaisseur de 0,5 mm. Ces dernières ne présentent qu'une épaisseur affectée de l'ordre de 5 μm (cf. §1.3.2). De ce fait, et en raison du mode de polissage des éprouvettes, l'utilisation de la technique de corrélation dans les couches superficielles ne peut être envisagée. Les présentes analyses sont alors menées uniquement à cœur. Les Figures 2.15, 2.16 et 2.17 qui suivent illustrent respectivement les champs locaux de la composante ε_I du tenseur des déformations principales à des états de chargement donnés pour les trois types de sollicitation présentés au Tableau 2.1. On note

également que les tailles des zones de corrélation [9] sont respectivement de 400 × 300 μm^2, 100 × 150 μm^2 et 350 × 300 μm^2 pour les éprouvettes 1, 2 et 3.



(a) Bloc 1 (cycle 2) (b) Bloc 2 (cycle 5) (c) Bloc 3 (cycle 8)

(d) ε_I à l'état 1 du cycle 2 (e) ε_I à l'état 1 du cycle 5 (f) ε_I à l'état 1 du cycle 8

(g) ε_I à l'état 2 du cycle 2 (h) ε_I à l'état 2 du cycle 5 (i) ε_I à l'état 2 du cycle 8

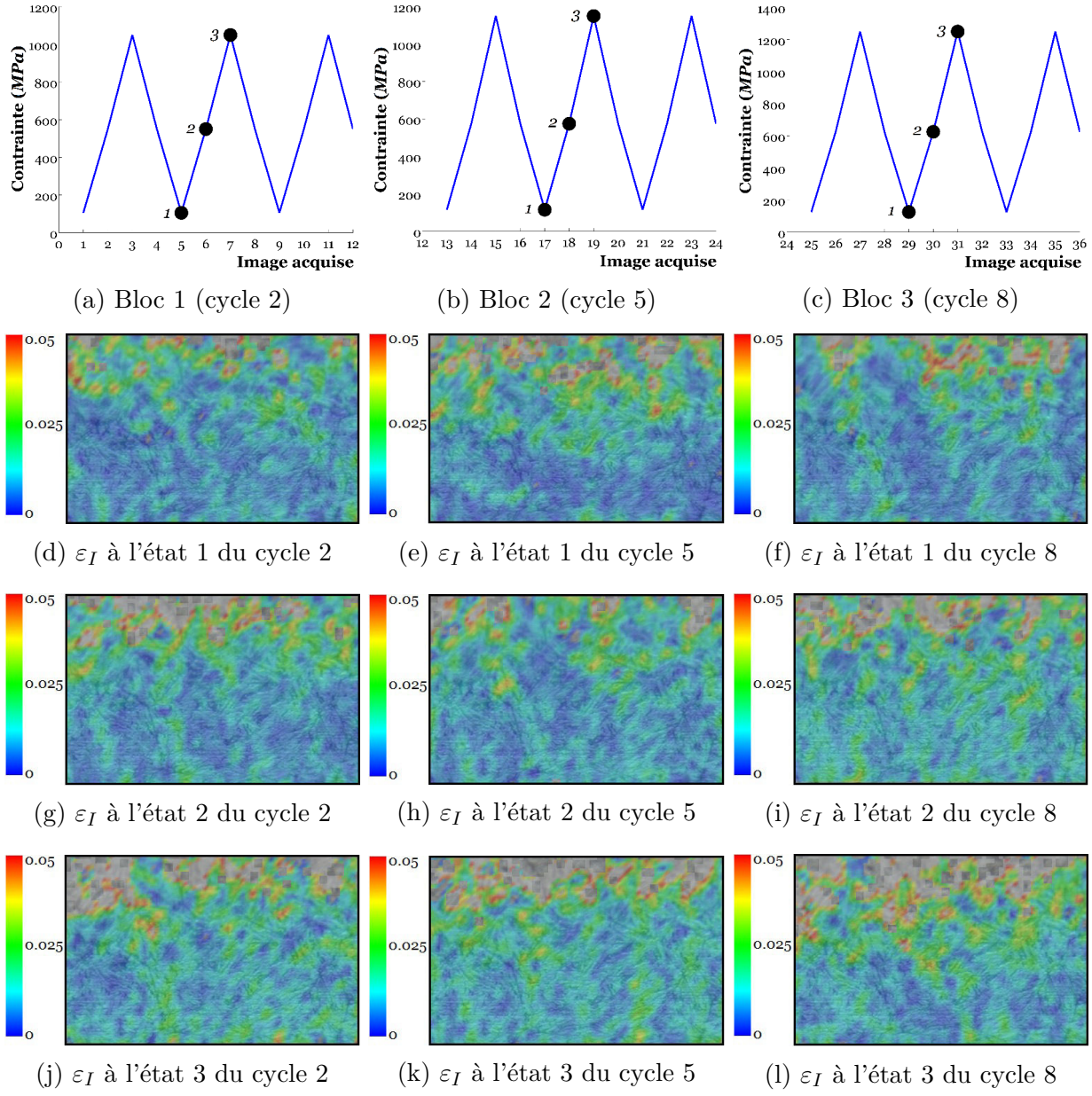
(j) ε_I à l'état 3 du cycle 2 (k) ε_I à l'état 3 du cycle 5 (l) ε_I à l'état 3 du cycle 8

Figure 2.15 – Évolution cyclique des champs locaux de composante ε_I du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 1

À l'image du chargement quasi-statique, des phénomènes liés à la micro-plasticité sont bien mis en évidence dès les premiers cycles appliqués à la première éprouvette, et ce malgré

9. Les tailles des zones de corrélation sont optimisées selon la qualité des images acquises. L'intérêt est porté à la localisation des champs et non pas à une confrontation aux mesures globales.

une contrainte en-dessous de la limite d'élasticité conventionnelle $R_{e0,2}$. Par ailleurs, si le schéma de localisation est quasiment identique en fonction des cycles appliqués, ce premier essai fait ressortir des déformations résiduelles qui sont bien apparentes pour les contraintes minimales (Figures 2.15d, 2.15e et 2.15f). Ce schéma de localisation a tendance à persister et les déformations présentent des intensités à peine plus prononcées pour des cycles avancés en ces niveaux de contraintes. D'une manière analogue, ces constatations s'attachent également aux schémas de concentration des contraintes moyennes (Figures 2.15g, 2.15h et 2.15i) et



(a) Bloc 1 (cycle 2) (b) Bloc 2 (cycle 5) (c) Bloc 3 (cycle 8)

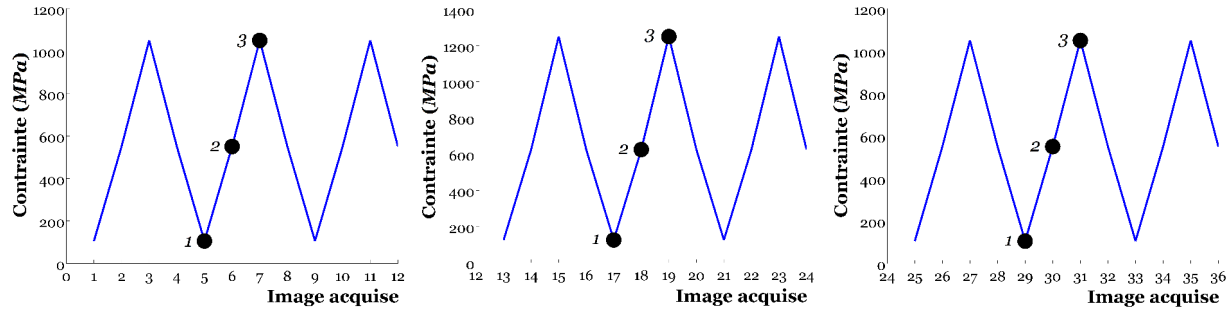
(d) ε_I à l'état 1 du cycle 2 (e) ε_I à l'état 1 du cycle 5 (f) ε_I à l'état 1 du cycle 8

(g) ε_I à l'état 2 du cycle 2 (h) ε_I à l'état 2 du cycle 5 (i) ε_I à l'état 2 du cycle 8

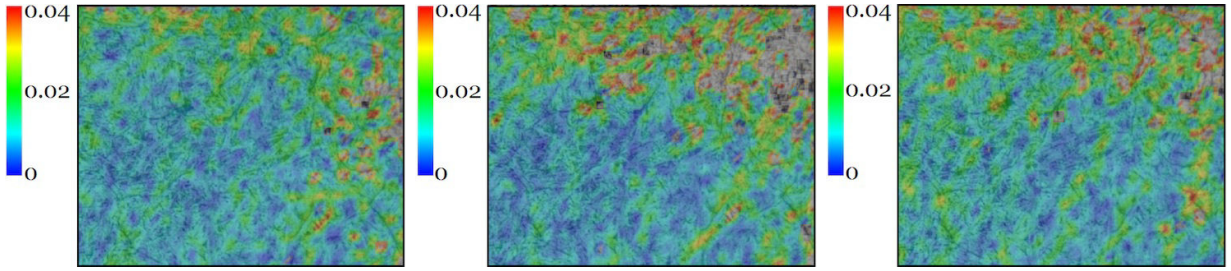
(j) ε_I à l'état 3 du cycle 2 (k) ε_I à l'état 3 du cycle 5 (l) ε_I à l'état 3 du cycle 8

Figure 2.16 – Évolution cyclique des champs locaux de composante ε_I du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 2

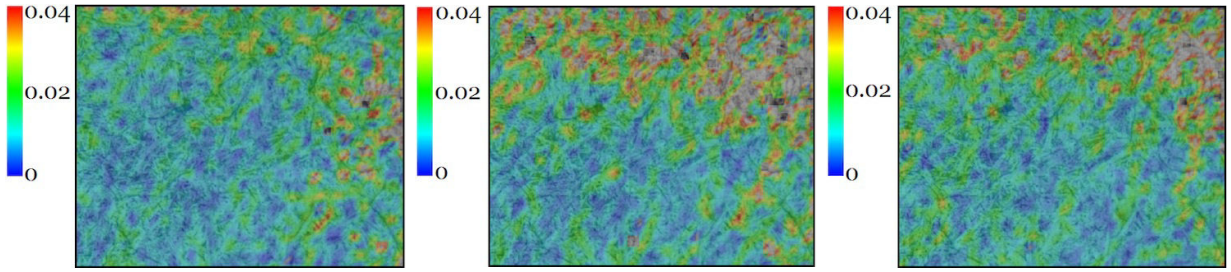
maximales (Figures 2.15j, 2.15k et 2.15l). Cependant, les concentrations des champs de la composante ε_I à ces niveaux de contrainte sont bien plus intenses que les précédents. Les régions concernées ont également une tendance assez faible à s'intensifier, qui peut être



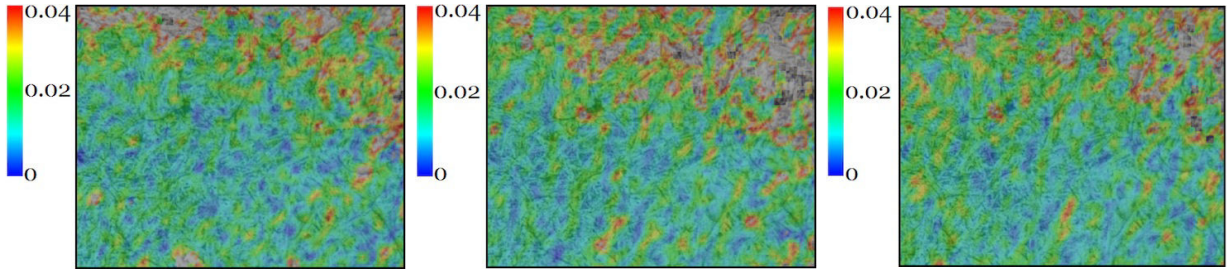
(a) Bloc 1 (cycle 2) (b) Bloc 2 (cycle 5) (c) Bloc 3 (cycle 8)



(d) ε_I à l'état 1 du cycle 2 (e) ε_I à l'état 1 du cycle 5 (f) ε_I à l'état 1 du cycle 8



(g) ε_I à l'état 2 du cycle 2 (h) ε_I à l'état 2 du cycle 5 (i) ε_I à l'état 2 du cycle 8



(j) ε_I à l'état 3 du cycle 2 (k) ε_I à l'état 3 du cycle 5 (l) ε_I à l'état 3 du cycle 8

Figure 2.17 – Évolution cyclique des champs locaux de composante ε_I du tenseur des déformations principales selon l'état de chargement global pour l'éprouvette 3

assimilée aux mécanismes d'écrouissage.

Le second type de chargement appliqué à l'éprouvette 2 se distingue par une meilleure mise en évidence des déformations résiduelles au sein de la structure interne de l'acier AISI H11 (Figure 2.16). Les augmentations successives de la charge dans les blocs 2 et 3 entraînent une intensification des schémas de localisation de la composante ε_I tant en contrainte maximale (Figures 2.15k et 2.15l) qu'en contrainte minimale (Figures 2.15h et 2.15i). Les bandes de $\pm 45^{\circ}$ sont en effet bien plus apparentes dans le dernier blocs permettant une consolidation de l'impact de l'augmentation de la contrainte appliquée. Cependant, en raison de la résolution médiocre des images numériques acquises, la mise en évidence d'une localisation autours des artefacts stéréologiques n'est pas aisée.

Afin d'analyser l'impact de la charge appliquée sur le schéma de localisation, le dernier type de chargement consiste uniquement en l'augmentation de la contrainte maximale du bloc 2 (Tableau 2.1). De ce fait, les présentes analyses mettent en évidence un schéma de localisation bien intense tant en contrainte maximale qu'en contrainte minimale pour le bloc 2 (Figure 2.17). Lors les derniers cycles, ce schéma de localisation des déformations résiduelles est bien plus persistant et intense qu'aux premiers cycles lors de la contrainte minimale et intermédiaire (Figures 2.17f et 2.17i). Cependant, à contrainte maximale, le schéma de localisation à peine plus intense que les premiers cycles (Figure 2.17l). Par ailleurs, on note également une distinction assez aisée d'une localisation autours des artefacts stéréologiques à l'inverse de l'analyse précédente permettant un gain d'information.

2.5 Notion de volume élémentaire représentatif

Comme évoquée dans le paragraphe précédent, les essais mécaniques in-situ permettent une analyse multi-échelle du comportement de l'acier AISI H11. Cependant, la mise en œuvre d'une telle approche nécessite également l'identification d'un volume élémentaire représentatif (VER). Dans ce qui suit, à l'issue d'une définition de cette notion, on se propose une identification d'un VER de l'acier AISI H11 par une approche expérimentale.

2.5.1 Définition

Si l'on considère un domaine $\mathcal{D}$ d'un matériau hétérogène tel que l'acier AISI H11, ce milieu présente une structure interne qui lui est propre et dépendante de son histoire thermomécanique. La caractérisation de celle-ci s'articule bien souvent autour d'une masse d'informations qui pourrait être abondante ou éventuellement insuffisante dans son intégralité pour le comportement global du matériau. Dans ce contexte, la notion de volume élémentaire représentatif (VER) se définit comme étant un domaine du matériau dont la taille L est :

- plus importante que la taille caractéristique d des hétérogénéités et permettant de contenir un nombre et une distribution suffisants de celles-ci pour une représentation statistique de la structure interne du matériau.
- plus petit que la taille caractéristique D d'une structure mécanique globale pour pouvoir être remplacé par un milieu homogène équivalent (MHE) lors d'un calcul de structure.

i.e. $d \ll L \ll D$. À savoir que si $\frac{d}{D} \to 0$, le matériau est considéré comme étant homogène et le comportement global est celui de l'hétérogénéité en question. Par ailleurs, il est important de noter que le comportement global donné par le VER est indépendant des conditions aux limites [123].

Dans le cadre d'une approche issue de la mécanique des milieux continus, les hétérogénéités s'attachent le plus souvent aux cristaux constitutifs d'un agrégat polycristallin. Selon les tailles caractéristiques respectives des constituants et de l'agrégat, le milieu polycristallin considéré s'articule autour d'un VER. La procédure d'identification de celui-ci est bien souvent menée par le bais d'une approche statistique. À savoir que diverses méthodes peuvent être considérées selon le type d'information à traiter, *i.e.* :

- des données liées à la stéréologie, notamment les caractéristiques liées à la morphologie et les orientations cristallographiques des cristaux constitutifs [100,123], ou encore des fonctions de caractérisation d'ordre supérieur [124],
- des données liées aux propriétés et caractéristiques mécaniques, à savoir le tenseur d'élasticité ou celui des contraintes... [15, 125, 126].

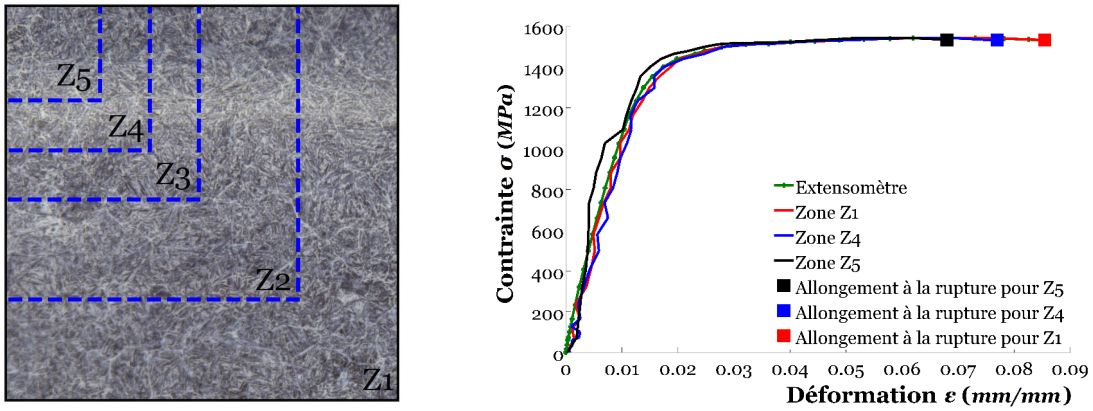
2.5.2 Identification expérimentale

Si l'identification d'un VER par le biais d'une approche statistique est assez intéressante, celle-ci est toutefois coûteuse et requiert un nombre important de réalisations surtout lorsque l'on opte pour la méthode des éléments finis (EF) [100]. Dans ce travail, la procédure d'identification est menée via une approche expérimentale, notamment par le biais de la technique de corrélation d'images numériques (DIC). Cette approche déjà utilisée par Moulart et al. [127] semble être bien pertinente pour le contexte actuel. A contrario des méthodes statistiques, l'approche expérimentale permet une prise en compte d'un ensemble de constituants hétérogènes bien plus considérable, et ce, à des échelles distinctes. Ces hétérogénéités correspondent le plus souvent à des défauts de type carbure ou en des zones à fortes densités de dislocations mais sont également liées à la stéréologie, notamment la morphologie et les orientations cristallographiques des cristaux constitutifs.

Pour ce faire, un essai mécanique in-situ de traction uniaxiale est menée sur une éprouvette de premier type, *i.e.* d'épaisseur 1 mm non frottée. Ceci implique qu'en théorie l'éprouvette ne présente aucun signe d'endommagement. À savoir que dans le cadre de cet essai, l'allongement à la rupture A enregistré est de 8,5%. La procédure d'identification d'un VER de l'acier AISI H11 s'attache à déterminer les dimensions de la zone de corrélation d'images numériques minimale permettant de reproduire les données du comportement global acquises par le biais de l'extensomètre. Dans ce contexte, 5 zones de corrélation situées au cœur du matériau sont considérées (Figure 2.18a). Celles-ci sont issues du même domaine de corrélation et ont respectivement pour dimensions 400×400 μm^2 (Z1), 300×300 μm^2 (Z2), 200×200 μm^2 (Z3), 150×150 μm^2 (Z4) et 100×100 μm^2 (Z5) (Figure 2.18a).

De par la présente procédure, on constate qu'en dépit de quelques bruits numériques l'ensemble des zones de corrélations reproduit plus ou moins correctement le comportement linéaire de l'acier AISI H11 (Figure 2.18b). Ceci implique que la zone Z5 ayant les dimensions plus faibles peut très bien être suffisante si l'on s'attache uniquement à ce comportement. Cette constatation est également cohérente avec les essais de nanoindentation menés dans

§1.3.2. On rappelle toutefois qu'à une profondeur donnée, ces essais n'illustrent guère une dispersion significative du module d'Young A. On peut ainsi supposer que la taille du VER permettant la description du comportement linéaire peut très bien être inférieure à celle de la zone de corrélation Z5.



(a) Zones de corrélation (b) Confrontation (DIC) – extensomètre

Figure 2.18 – Identification d'un VER de l'acier AISI H11 par la méthode de corrélation d'images numériques (DIC)

Cependant, cet aspect ne concerne pas le comportement non linéaire de l'acier AISI H11. Si les zones de corrélation Z1, Z2 et Z3 voire éventuellement Z4 permettent une reproduction d'un tel comportement, ceci n'est guère le cas pour la zone Z5 (Figure 2.18b). Plus concrètement, les zones Z1, Z2 et Z3 présentent des allongements à la rupture A légèrement supérieures à ceux qui sont mesurés par l'extensomètre, *i.e.* une différence de l'ordre de 3% que l'on peut attribuer aux incertitudes de mesures. La zone Z4 affiche un allongement à la rupture A de 7,7%, *i.e.* une différence de 9,41%. Quant à la zone de corrélation Z5, celle-ci présente une valeur de 6.72%, *i.e.* une variation de 20,09%. De par ces diverses confrontations, il est évident que la zone Z5 ne peut être représentative du comportement non linéaire de l'acier AISI H11. Ka zone Z4 peut être acceptable, mais il clair qu'une analyse statistique complémentaire est requise. On peut ainsi conclure que la taille du VER est située aux alentours de celle la zone Z4. Dans le contexte actuel, les dimensions de la zone Z4 sont prises par hypothèse comme étant celles de la taille d'un VER de l'acier AISI H11.

En résumé...

À l'issue des présentes investigations expérimentales, il est bien évident que le comportement de l'acier AISI H11 s'attache à l'état et à l'architecture complexe de la structure interne de celui-ci. À l'échelle globale, le comportement mécanique est lié à l'état microstructural du matériau engendré par le procédé de génération de surfaces similaires à celui issu de l'opération de mise en œuvre des outillages (cf. §1.3.1). Dans un tel contexte, il s'est avéré que l'acier AISI H11 présente un état bien écroui au niveau des couches superficielles associé à un profil de surface ondulée (cf. §1.3.2) et à la présence de contraintes résiduelles,

mais aussi à de l'endommagement. De ce fait, les essais monotones réalisés ont mis en évidence une baisse du module d'Young Λ et de l'allongement à la rupture A mais également une augmentation assez significative de la contrainte lors de l'écoulement non linéaire.

Par ailleurs, par le biais d'analyses in-situ par corrélation d'images numériques (DIC), il a été constaté que le champ mécanique local est bien hétérogène et s'attache à la stéréologie complexe de l'acier AISI H11. Les présentes analyses ont mis en évidence différents schémas de localisation selon diverses échelles, et ce, que ce soit en chargement monotone ou en chargement cyclique. Les schémas de localisation en question concernent essentiellement les réseaux de bandes de localisation, caractéristiques du comportement non linéaire, mais également ceux qui s'attachent aux artefacts stéréologiques, notamment les anciens joints de grains austénitiques voire les divers défauts locaux. De ce fait, compte tenu du caractère anisotrope des cristaux constitutifs en surface, le champ mécanique local suit inéluctablement la morphologie de ces derniers donnant lieu à un gradient de comportement local. On note en outre que les mécanismes liés à la micro-plasticité ont également été mis en évidence. Ils consistent en des localisations bien accentuées du champs de déformation excédant même la limité d'élasticité lors de la sollicitation linéaire globale. Les sollicitations cycliques ont bien mis en évidence ce phénomène lors de la décharge permettant ainsi une analyse des déformations résiduelles locales.

Dans le cadre d'une investigation multi-échelle du comportement de l'acier AISI H11, une identification d'un volume élémentaire représentatif (VER) est bien requise. Dans le contexte actuel, cette identification est menée par le biais d'une approche expérimentale basée sur des essais mécaniques et d'une analyse in-situ par corrélation d'images numériques (DIC). Celle-ci a permis d'effectuer une approximation pertinente de la taille du VER qui, par hypothèse, est considérée comme étant égale à $150 \times 150\ \mu m^2$.

Les investigations expérimentales in-situ menées dans ce chapitre ont bien mis en évidence le caractère hétérogène et anisotrope des champs mécaniques locaux. Cependant, certains aspects demeurent non considérés dans la présente approche. Dans ce contexte, on note essentiellement le lien entre l'écrouissage interne et les orientations cristallographiques avec les champs mécaniques locaux. Il faut noter également que les essais mécaniques in-situ réalisés permettent uniquement l'acquisition des champs de déplacement. Les informations liées entre autres aux champs locaux de contraintes ne sont pas disponibles. Pour ce faire, un traitement numérique via une modélisation multi-échelle constituerait donc une approche complémentaire en vue d'une estimation de ces champs...

Deuxième partie

Traitement numérique

Chapitre 3

Approches multi-échelles

"Les ascensionnistes, se faisant la courte échelle, gravirent sur un espace de cent pieds un talus très raide, et atteignirent un étage supérieur."

Jules Verne (1828-1905) dans l'île mystérieuse (1875)

Sommaire

3.1 Approches phénoménologiques 86
3.2 Équations constitutives à une échelle locale 87
3.2.1 Approches indépendantes du temps 90
3.2.2 Approches dépendantes du temps 91
3.2.3 Quelques modèles de comportement locaux 92
3.2.3.1 Modèles à base de densité de dislocations 93
3.2.3.2 Modèles phénoménologiques 97
3.3 Techniques de transition d'échelles 102
3.3.1 Quelques définitions intuitives 102
3.3.2 Approches en champs moyens 103
3.3.2.1 Modèles d'homogénéisation en linéaire 104
3.3.2.2 Modèles d'homogénéisation en non linéaire 105
3.3.3 Approches en champs complets 113
3.3.4 Couplage de techniques de transition d'échelle 115
3.4 Modèles à gradients 117

Les structures internes des matériaux métalliques, notamment l'acier AISI H11, sont par nature hétérogènes et anisotropes justifiant l'analyse de leurs comportements tant à une échelle locale qu'à une échelle globale. Dans un contexte de simulation et de modélisation numérique des procédés de mise en forme et de comportement en service de telles structures, il est bien nécessaire de s'orienter vers les approches multi-physiques et multi-échelles afin de prendre en compte les effets locaux et les mécanismes physiques élémentaires en lien avec le comportement non linéaire de l'acier AISI H11.

Le présent chapitre s'attache à une revue de modèles répondant à ces critères. La première partie se destine à une discussion de quelques modèles dits « macroscopiques » permettant une description du caractère anisotrope à une échelle globale et mettant en évidence

l'intérêt des approches multi-échelles. Celle-ci est suivie d'une revue d'équations constitutives à une échelle locale en vue d'une description accrue des phénomènes physiques élémentaires. La troisième partie s'attelle aux techniques de transition d'échelle, à savoir les approches à champs moyens et celles à champs complets. Enfin, les modèles dits « à gradients », associés à la prise en compte des longueurs internes, sont brièvement présentés dans la dernière partie.

3.1 Approches phénoménologiques

Bien que le caractère anisotrope et hétérogène des structures métalliques découle directement de phénomènes physiques élémentaires situées à une échelle locale, la quantification et la modélisation de leur comportement non linéaire furent historiquement menées par le biais d'approches phénoménologiques, *i.e.* à une échelle globale. Ces dernières utilisent des critères « anisotropes » permettant une définition mathématique des surfaces de charge ou des potentiels d'écoulement. Les critères d'écoulement anisotropes consistent bien souvent en des extensions de ceux initialement destinés aux structures isotropes, à savoir les critères de Tresca [128], de von Mises [129], de Hencky [130], de Drucker [131], ou encore de Huber [132]. Cependant, en dépit d'une approche phénoménologique, de telles modèles permettent éventuellement des considérations implicites des phénomènes physiques élémentaires associés au caractère anisotrope, notamment la texture cristallographique globale.

Dans un tel contexte, la prise en compte du caractère anisotrope dans les critères d'écoulement non linéaire requiert, outre les composantes du tenseur des contraintes, une introduction de paramètres caractéristiques du matériau considéré. C'est sur cette base que l'un des modèles pionniers destinés aux structures anisotropes, à savoir le modèle de Hill de 1948 [133], a été développé. Celui-ci a été ultérieurement étendu par une incorporation de paramètres supplémentaires en vue d'une prise en compte accrue du caractère anisotrope [134–137].

Si les modèles de type Hill [133–137] dérivent du critère de von Mises, les approches dites de Barlat-Karafillis-Banabic sont développés autour de la fonction d'écoulement de Hershey [1]. Le critère de Barlat [139] YLD87 fut le premier modèle issu d'une telle extension. À l'instar du modèle de type Hill, celui-ci a également été étendu par la suite via une introduction de paramètres caractéristiques supplémentaires [140–143]. Les modèles de Karafillis-Boyce [144] et de Banabic-Balan-Comsa (BBC) [145–147] se distinguent surtout par le nombre de paramètres considérés et concernent d'autres types de sollicitations.

L'ensemble des approches macroscopiques anisotropes s'attachent à un usage et une mise en œuvre. Les bibliothèques des codes de calcul par éléments finis (EF) commerciaux intègrent bon nombre de ces modèles. Ces derniers sont relativement peu coûteux en terme de temps de calcul et de capacité de stockage. Ils présentent bien souvent peu de paramètres à optimiser. Cependant, la prédiction de l'écoulement non linéaire n'est guère précise et des anomalies liées au caractère anisotrope des structures métalliques sont fréquemment présentes [148]. Cet aspect est essentiellement dû au fait que les approches phénoménolo-

1. Le critère de Hershey [138] consiste en la conjonction de deux fonctions de charge permettant de définir deux bornes de la surface d'écoulement : la borne inférieure, *i.e.* Tresca, et la borne supérieure.

giques dépendent constamment du mode et du domaine des sollicitations mécaniques. Par ailleurs, en dépit d'éventuelles considérations de la texture cristallographique globale, la quasi-totalité des paramètres de ces approches ne présentent aucunement de sens physique et leur optimisation peut également ne pas être évidente.

Dans le contexte actuel, le principal inconvénient des approches phénoménologiques réside sur la non considération des mécanismes physiques élémentaires induits par l'écoulement non linéaire anisotrope. Les modèles macroscopiques ont tendance à utiliser la notion de variables internes associées à l'état du matériau lors d'une sollicitation donnée. Cependant, cette notion permet uniquement une description globale de l'état interne de la structure. Les hétérogénéités, notamment celles qui s'attachent à la texture cristallographique locale et à la stéréologie du matériau, ne sont guère prises en compte et ne peuvent être modélisés par de telles approches phénoménologiques.

3.2 Équations constitutives à une échelle locale

En dépit d'un surcoût élevé, il est certain qu'une incorporation explicite de la texture cristallographique associée à une migration des équations constitutives à une échelle locale a pour conséquence une mise en évidence mais surtout une compréhension des phénomènes locaux liés au comportement anisotrope et hétérogène (cf. §1.2.4.3). Grâce à ces équations, la prédiction du comportement non linéaire anisotrope s'effectue alors à une échelle locale (via les variables $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$, $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$), mais également à une échelle globale (les variables $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$, $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$) par le bais de techniques de transitions d'échelles ou d'homogénéisation (Figure 3.1).

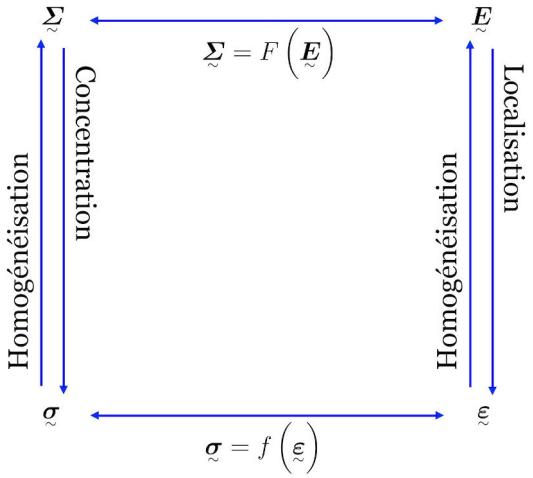


Figure 3.1 – Schématisation du principe des approches multi-échelles d'après [15]

Comme évoqué dans l'introduction de ce manuscrit, cette approche représente le fondement de la modélisation multi-échelle dont l'intérêt ne cesse de s'accroître. Dans le contexte actuel, les équations constitutives à l'échelle locale s'appuient essentiellement sur le mécanisme de mouvement ou de glissement des dislocations [2] au sein des cristaux constitutifs,

2. Les autres mécanismes élémentaires, notamment le maclage, ne sont pas considérés dans le contexte

d'où leur appellation courante « modèles de plasticité cristalline ». Le comportement non linéaire s'attache à l'activation d'un certain nombre de systèmes de glissement selon la structure du matériau concerné. Pour rappel, les systèmes de glissement sont le plus souvent définis respectivement par les plans et les directions les plus compacts du réseau cristallin. Leur orientation est donnée, selon le système de coordonnées de référence, par le biais d'un tenseur d'orientation défini comme étant le produit tensoriel $\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s$, où $\underline{\boldsymbol{n}}^s$ est la normale au plan de glissement s et $\underline{\boldsymbol{l}}^s$ est la direction de glissement, *i.e.* équivalent au vecteur de Burgers $\underline{\boldsymbol{b}}^s$.

Loi de Schmid. L'activation d'un système de glissement s est le plus souvent donnée par loi de Schmid dite généralisée établie en 1935 [149]. Pour ce faire, on définit la cission résolue τ^s comme étant la projection du tenseur des contraintes de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ sur ce système par le biais du tenseur d'orientation correspondant [3] :

$$\tau^s = \underline{\boldsymbol{n}}^s \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,.\, \underline{\boldsymbol{l}}^s \tag{3.1}$$

À noter que cette définition de la cission résolue τ^s (3.1) peut aisément être démontrée via un formalisme thermodynamique de la loi de comportement non linéaire (cf. §4.1.1 et §5.2.1). La loi de Schmid généralisée [16] consiste alors à postuler l'existence d'une cission critique τ_c^s pour laquelle le système de glissement est considéré comme étant activé, *i.e.* :

$$\dot{\gamma}^s > 0, \quad \text{pour} \quad \tau^s = \tau_c^s \tag{3.2}$$

où $\dot{\gamma}^s$ est la vitesse de cisaillement du système s. Le critère de Schmid (3.2) se traduit par une surface d'écoulement non linéaire de type polyèdre convexe de dimensions 5 dans l'espace des contraintes déviatoriques. Chaque hyperplan de ce polyèdre illustre l'activation d'un système de glissement donné.

La loi de Schmid s'illustre également par le fait que les vecteurs des directions des vitesses d'écoulement sont normales à la surface de charge, à l'image des lois de comportement macroscopiques présentées précédemment. Cependant, certaines études remettent en question la règle de normalité des directions des vitesses d'écoulement non linéaire pour certains matériaux métalliques, surtout dans les cas où les équations constitutives sont écrites à une échelle locale [150–156]. Cette violation de la règle de normalité, nommée effet de non-Schmid s'explique essentiellement par des hétérogénéités liées à la structure interne du matériau concernée [154]. Ostoja-Starzewski [157] a en effet étudié la déviation de la direction de la vitesse d'écoulement non linéaire en fonction de la taille des hétérogénéités locales au sein d'un matériau composite à matrice métalliques permettant une éventuelle identification d'un volume élémentaire représentatif (VER). Les mécanismes physiques élémentaires associés à la violation de la règle de normalité sont mis en évidence, à titre d'exemples, dans les structures de type CC dans les études de Vitek et al. [158] et Gröger et al. [159] par le biais de modèles de dynamique moléculaire. Dans un tel contexte, l'usage

actuel. Ces phénomènes ne sont pas mis en évidence expérimentalement.

3. La présente définition est donnée dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Son extension aux transformations finies est présentée dans le chapitre 5.

d'une approche non linéaire non associée s'avère parfois plus adéquate. Plus typiquement, outre la cission résolue τ^s, d'autres contraintes ont tendance à intervenir pour l'activation du mouvement des dislocations. Ces phénomènes élémentaires sont pris en compte via une extension de la loi de Schmid, notamment celle proposée par Qin et Bassani [150] où la nouvelle cission résolue τ_d^s est donnée par :

$$\tau_d^s = \tau^s + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \; : \; \left(\sum_q a_q^s \, . \, \underline{\boldsymbol{n}}_q^s \otimes \underline{\boldsymbol{l}}_q^s \right) \tag{3.3}$$

$\underline{\boldsymbol{n}}_q^s$ et $\underline{\boldsymbol{l}}_q^s$ étant respectivement des vecteurs d'orientation permettant de dévier l'écoulement non linéaire associés aux fonctions constitutives scalaires a_q^s. Cependant, dans le contexte actuel, aucune mise en évidence de l'effet non-Schmid n'a été effectuée sur l'acier AISI H11. Par ailleurs, les études menées sur ce sujet sont encore restreintes à quelques matériaux. De ce fait, la violation de loi de Schmid est négligée dans le présent travail.

La nature polyédrale de la surface d'écoulement [16] présente certaines ambiguïtés quant à la résolution du problème non linéaire, *i.e.* à la détermination des directions des vitesses d'écoulement et des systèmes de glissement activés. La résolution d'un problème dans un contexte où les contraintes appliquées ou les déformations imposés sont données, l'identification des directions des vitesses d'écoulements et des systèmes de glissement n'est guère évidente. Plus concrètement, les directions des vitesses d'écoulements situés aux sommets de la surface de charge, *i.e.* l'intersection d'hyperplans de l'espace des contraintes, sont délimitées par un cône et correspondent à de multiples activations de systèmes de glissement (Figure 3.2).

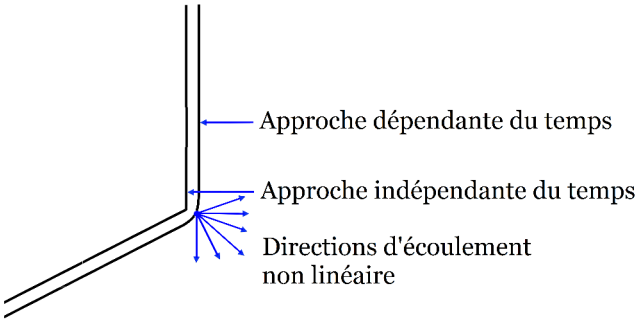


Figure 3.2 – Illustration d'une intersection d'hyperplans dans l'espace des contraintes via une projection 2D de la surface d'écoulement et mise en évidence des écoulements multiples d'après [16]

L'identification des systèmes de glissement activés et des directions des vitesses d'écoulement non linéaire se confronte alors, le plus souvent, à un système d'équations redondant ou linéairement dépendantes, plus concrètement au problème de l'unicité de la solution (cf. §3.2.1 et §4.2.1) Par conséquent, deux types d'approches peuvent être envisagés, à savoir les approches indépendantes du temps et celles dépendantes du temps.

3.2.1 Approches indépendantes du temps

L'une des premières théories pionnières des approches indépendantes du temps est celle de Taylor établie en 1938 [160]. Celle-ci est développée en utilisant une approche énergétique, *i.e.* le principe du travail minimum. Dans cette approche, Taylor [160] tente de lever l'indétermination des systèmes de glissement activées en s'appuyant sur le fait que l'écoulement non linéaire s'effectue sur une combinaison de cinq systèmes minimisant la puissance dissipée interne $\mathcal{P}$:

$$\mathcal{P} = \sum_{s=1}^{N} \tau_c^s \left|\dot{\gamma}^s\right| = \min \tag{3.4}$$

où N est le nombre de systèmes de glissement ayant le potentiel d'être activés et $\dot{\gamma}^s$, le vecteur des vitesses de cisaillement d'un plan donné s, est l'inconnue du problème. La résolution de celui-ci est effectuée par le biais de méthodes algébriques, notamment celles développées par Van Houtte [161]. Cependant, l'auteur révèle une persistance de ces indéterminations surtout dans le contexte où l'ensemble des systèmes de glissement possède la même cission critique τ_c^s. Les diverses solutions ainsi trouvées amènent à un même minimum de la puissance dissipée P, mais également à des contraintes appliquées équivalentes.

De même, Bishop et Hill [162] proposent une formulation alternative fondée également sur une approche énergétique. Cependant, à l'inverse de l'approche de Taylor [160], cette formulation consiste en la construction d'une surface de charge par le biais de la loi de Schmid généralisée et en l'application du principe du travail maximum en vue d'identifier les composantes du tenseur des contraintes déviatoriques $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}'$:

$$\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}' - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^*\right) : \underset{\approx}{\varepsilon} \geq 0 \tag{3.5}$$

$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^*$ étant un des possibles tenseurs contraintes permettant l'écoulement d'au moins cinq systèmes de glissement. Les composantes solutions du problème sont le plus souvent proches des intersections des hyperplans, ou sommets du polyèdre de charge, associées à un certain nombre d'activation de système de glissement. Toutefois, il a été démontré que l'approche de Taylor [160] et celle de Bishop et Hill [162] sont bien équivalents en terme de solutions mais aussi en terme d'ambiguïtés [163, 164]. À noter que cette dernière équivalence est à l'origine de l'appellation de la théorie de Taylor-Bishop-Hill (TBH).

Il est évident que les approches indépendantes du temps requièrent des traitements numériques robustes pour remédier au problème d'unicité des solutions articulées autours de l'identification des systèmes activés [165]. Dans un tel contexte, Anand et Kothari [166] utilisent une approche itérative où la résolution du système d'équations redondant est réalisée par le biais d'une inversion de la matrice jacobienne des critères d'écoulements activés (3.2) via une factorisation de type décomposition en valeurs singulières. Ce dernier schéma de résolution est assez proche de celui d'une optimisation de type des moindres carrées. Par ailleurs, l'approche de Schröder et Miehe [167] consiste également en l'inversion de la matrice jacobienne des critères d'écoulements activés mais dans un espace réduit. Cette opération est effectuée via une factorisation standard de type LU et une élimination des colonnes de la matrice jacobienne locale ayant des diagonales nulles. L'algorithme développé

par ces auteurs s'appuie sur la condition de consistance de Kuhn-Tucker :

$$\lambda^s > 0, \qquad f^s < 0, \qquad \lambda^s f^s = 0 \tag{3.6}$$

où λ^s est le multiplicateur plastique associé à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ et f^s la fonction de charge du système s. En outre, McGinty et McDowell [17] utilisent un schéma de résolution itératif de type semi-implicite, dit séquentiel (« sequential shooting algorithm »). L'algorithme consiste, pour un pas temporel donné, en une subincrémentation du tenseur des contraintes selon l'identification des systèmes de glissement activés menée « par récurrence » (Figure 3.3). Cette subincrémentation est par ailleurs effectuée via le schéma de résolution des problèmes non linéaires de type prédiction élastique - correction plastique développé par Simo et Hughes [168] (cf. §4.2.2 et §5.3.2). Le calcul des vitesses de cisaillement de plans des systèmes activés est réalisé par un système d'équations algébriques similaire à celui d'Anand et Kothari [166] mais en une version plus simplifiée. Bien que l'approche de McGinty et McDowell [17] semble être numériquement assez robuste, celle-ci présente en effet quelques ambiguïtés, notamment lors de l'utilisation de la théorie des transformations finies, plus précisément lors de la procédure d'identification des systèmes de glissement activés où la rotation n'est pas prise en compte.

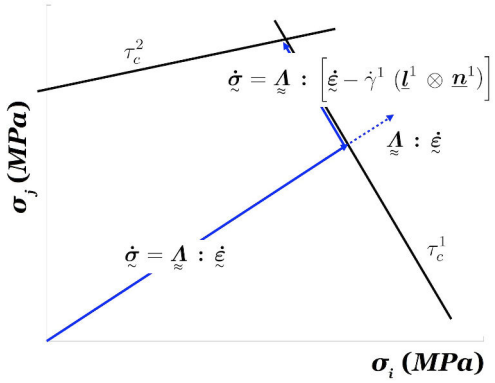


Figure 3.3 – Illustration du schéma de résolution itératif séquentiel (« sequential shooting algorithm ») d'après [17]

3.2.2 Approches dépendantes du temps

Les approches dépendantes du temps suggèrent que le mouvement des dislocations présentent plus ou moins un caractère visqueux. Celles-ci s'illustrent par ailleurs comme étant une alternative à celles indépendantes du temps [169, 170]. Si l'intérêt de l'utilisation des approches dépendantes du temps est porté sur les phénomènes de localisation au sein des matériaux sensibles à la vitesse de sollicitation, celles-ci permettent également le contournement des ambiguïtés d'identification des systèmes de glissement activés présentées ci-dessus. Les approches dépendantes du temps consistent en un traitement d'un système d'équations (non linéaires) non redondant contournant alors les singularités liés aux solu-

tions multiples [4]. Cet aspect est nettement mis en évidence dans l'allure de la surface de charge (Figure 3.2) où les éventuelles ambiguïtés liés aux intersections des hyperplans sont éliminés via un lissage « arrondi ».

Les approches dépendantes du temps consistent essentiellement en des modèles viscoplastiques d'évolution de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ comme des fonctions puissance ou hyperbolique de la cission résolue τ_s. Dans ce contexte, l'un des modèles pionniers est celui proposé par Hutchinson en 1977 [171] :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_s}{\tau_c^s} \right|^n \text{sign}\left(\tau_s\right) \tag{3.7}$$

où $\dot{\gamma}_0$ est une vitesse de cisaillement de référence et n est un paramètre de viscosité. Ce modèle suppose que l'ensemble des systèmes de glissement sont activés, *i.e.* une absence totale d'une fonction d'écoulement non linéaire [5]. À noter qu'à température ambiante, le paramètre n tend le plus souvent vers l'infini, ce qui revient à traiter un problème assez équivalent à un modèle indépendant du temps. Dans un tel contexte, le modèle viscoplastique est considéré comme étant une limite d'une approche indépendante du temps où la prédiction du comportement local est quasi-identique. Cependant, selon la valeur du paramètre n, la convergence du schéma numérique n'est guère évidente et son coût peut en effet être bien plus conséquent qu'un traitement via une approche indépendante du temps.

3.2.3 Quelques modèles de comportement locaux

Dans le contexte actuel, les approches dépendantes du temps sont bien privilégiées. Outre le fait qu'elles contournent les singularités des approches dépendantes du temps, celles-ci permettent la prise en compte de phénomènes associés à des phénomènes physiques élémentaires, à savoir l'effet Bauschinger ou encore la relaxation locale... Ces phénomènes sont le plus souvent négligés dans les approches indépendantes du temps pour des raisons liés au traitement numérique de celles-ci [17,166,167]. Par ailleurs, certaines études illustrent le fait que les approches dépendantes du temps permettent la mise en évidence des schémas de localisation des champs mécaniques d'une manière bien plus aisée et à moindre coût [172].

Le présent paragraphe se consacre à une revue simplifiée de quelques modèles de comportement locaux, traitant uniquement les formulations permettant d'effectuer des calculs in fine de structures. Ces modèles se distinguent en deux types d'équations constitutives, à savoir les modèles quasi-physiques et les modèles phénoménologiques. L'approche quasi-physique présente des équations constitutives explicitement fondées sur des mécanismes physiques élémentaires. Celle-ci admet comme variable interne prépondérante la densité de dislocations. Cependant, les équations constitutives de type phénoménologique sont essentiellement fondées sur une approche thermodynamique des milieux continus. À noter que l'ensemble de ces modèles est le plus souvent écrit dans un formalisme tensoriel tridimensionnel.

4. Bon nombre d'études s'attachent aux algorithmes de résolution numérique des approches dépendantes du temps. Une revue rapide de celles-ci est traitée dans §4.2.1.

5. D'autres modèles peuvent considérer une surface de charge (cf. §3.2.3).

3.2.3.1 Modèles à base de densité de dislocations

Les modèles à base de densité de dislocations ou quasi-physiques sont essentiellement issus de la dynamique des dislocations, mais également de la théorie de l'activation thermique de celles-ci, *i.e.* les mécanismes physiques élémentaires. L'archétype de la plupart de ces approches considère la loi d'Orowan permettant de relier la vitesse de cisaillement d'un système donné $\dot{\gamma}^s$ à la densité des dislocations mobiles ρ_m^s :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s \, b \, \bar{v} \tag{3.8}$$

b étant la norme du vecteur de Burgers et $\bar{v}$ la vitesse moyenne de toutes les dislocations mobiles du système s.

Modèle de Kocks-Mecking. Par le biais d'une approche thermique de l'activation du mouvement des dislocations, le modèle de Kocks-Mecking [173,174] suppose dans un premier temps que l'expression de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ est de type d'Arrhénius :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \, \exp\left(\frac{-\Delta G}{k\,T}\right) \tag{3.9}$$

ΔG, k et T étant respectivement l'enthalpie libre d'activation, la constante de Boltzmann et la température. Cependant, les auteurs lui préfèrent la relation de type puissance (3.7). Le modèle de Kocks-Mecking [173,174] considère uniquement un écrouissage isotrope donné par l'évolution de la cission critique τ_c^s en fonction de la densité de dislocations :

$$\tau_c^s = \alpha \, \mu \, b \, \sqrt{\rho} \tag{3.10}$$

où α est un paramètre du matériau de l'ordre de 0,3, μ le module de cisaillement transverse (module de Coulomb) et ρ la densité de dislocations totale. L'évolution temporelle de la densité de dislocations $\dot{\rho}$ est fonction de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$:

$$\dot{\rho}^s = \dot{\gamma}^s \, \left(K_1 \, \sqrt{\rho} - K_2 \, \rho\right) \tag{3.11}$$

où K_1 et K_2 sont des paramètres du matériau représentant respectivement le stockage et le recouvrement dynamique de dislocations. Le terme $K_1 \, \sqrt{\rho}$ décrit la production de dislocations, tandis que le terme $K_2 \, \rho$ est associé aux mécanismes d'annihilations. Par conséquent, la relation (3.11) traduit un durcissement lié aux interactions entre dislocations mais aussi une diminution du taux d'écrouissage selon la déformation.

Les équations constitutives de Kocks-Mecking [173, 174] sont étendues par Dunlop et al. [175] en vue d'une prise en compte de certains mécanismes physiques élémentaires, notamment au sein d'un alliage de zirconium. Ces mécanismes consistent surtout en l'effet Bauschinger, mais également en des phénomènes de Peierls-Nabarro. Pour ce faire, Dunlop et al. [175] introduisent une variable d'écrouissage cinématique liée aux sollicitations cycliques dans la relation de vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ de la manière qui suit :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left|\frac{\tau_s - \chi^s}{\tau_c^s}\right|^n \mathrm{sign}\left(\tau_s\right) \tag{3.12}$$

χ^s étant la variable d'écrouissage cinématique du système de glissement s. Celle-ci est donnée par la relation non linéaire :

$$\dot{\chi^s} = K - \left(Q + \frac{L}{\dot{\gamma}^s} \right) \chi^s \tag{3.13}$$

où K, Q et L sont des paramètres du matériau. La prise en compte des mécanismes de Peierls-Nabarro est réalisée par le biais d'une contrainte dite de « friction » τ_f^s incorporée dans la relation d'écrouissage isotrope :

$$\tau_c^s = \tau_f^s + \alpha \, \mu \, b \, \sqrt{\rho} \tag{3.14}$$

L'évolution temporelle de densité de dislocations dans l'extension de Dunlop et al. [175] est fournie par la relation :

$$\dot{\rho}^s = (\rho^s)^{\frac{3}{2}} \; \bar{v} \tag{3.15}$$

Modèle de Tabourot et al.. Si le modèle de Kocks-Mecking [173, 174] postule une expression de type puissance (3.7) de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$, Tabourot et al. [176] développent une approche mathématique qui consiste en une combinaison d'une relation de la vitesse d'une dislocation au sein d'un système donnée s et de la loi d'Orowan (3.8). L'expression de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ alors établie est :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s \, b^2 \, \nu_D \, \exp\left(\frac{-\Delta G}{k \, T} \right) \left| \frac{\tau_s}{\tau_c^s} \right|^{\frac{\tau_c^s \, \Delta V^*}{k \, T}} \operatorname{sign}(\tau_s) \tag{3.16}$$

ν_D et ΔV^* étant respectivement la fréquence de Debye et le volume d'activation. Il est évident que la relation (3.16) est équivalente à celle (3.7). Pour ce faire, il convient simplement d'admettre les égalités suivantes :

$$\dot{\gamma}_0 = \rho_m^s \, b^2 \, \nu_D \, \exp\left(\frac{-\Delta G}{k \, T} \right) \tag{3.17}$$

$$n = \frac{\tau_c^s \, \Delta V^*}{k \, T} \tag{3.18}$$

Par ailleurs, la loi d'écrouissage isotrope du modèle de Tabourot et al. [176] consiste en une généralisation de celle du modèle de Kocks-Mecking [173, 174] (3.10) par le biais des approches de Franciosi [177]. La cission critique τ_c^s est alors donnée selon les densités de dislocations de l'ensemble des systèmes de glissement mais également selon une matrice d'interaction $\underset{\sim}{\boldsymbol{d}}$:

$$\tau_c^s = \alpha \, \mu \, b \, \sqrt{\sum_{r=1}^{N} d^{sr} \, \rho^r} \tag{3.19}$$

où N est le nombre de systèmes de glissement potentiellement activés. Plus concrètement, la matrice d'interaction d^{sr} permet une prise en compte de l'effet de la densité de dislocations

de chaque système r sur la cission critique τ_c^s du système s. L'évolution temporelle de la densité de dislocations totale d'un système s est à l'image de celle du modèle de Kocks-Mecking [173, 174] (3.11), *i.e.* fonction de la vitesse de cisaillement mais surtout provient du bilan d'un terme de production et d'un terme d'annihilation :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left(\frac{\sqrt{\sum_{r=1}^{N} d^{sr} \, \rho^r}}{K} - 2 \, y_c \, \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s| \tag{3.20}$$

où y_c est la distance moyenne entre les dislocations et K un paramètre matériau. D'une manière similaire à la relation (3.11), l'expression (3.20) implique que la densité de dislocations a tendance à saturer selon les densités stockées au cours des sollicitations sur tous les systèmes de glissement. On note également que l'équation (3.20) implique une relation d'évolution temporelle de l'écrouissage isotrope $\dot{\tau}_c^s$ selon les vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ via une matrice d'écrouissage ou d'interaction $\underset{\sim}{\boldsymbol{h}}$. Pour ce faire, il convient de dériver la relation (3.19) et d'y introduire l'expression (3.20) :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_{r=1}^{N} h^{sr} \, \dot{\gamma}^r \tag{3.21}$$

À l'instar des équations constitutives de Kocks-Mecking [173, 174], une extension du modèle de Tabourot et al. [176] est également proposée en vue d'une prise en compte des sollicitations plus complexes, notamment les chargements cycliques. Pour ce faire, il convient d'introduire des variables internes associés à des mécanismes physiques élémentaires bien spécifiques, à savoir l'effet Bauschinger. Les équations constitutives de la version modifiée du modèle de Tabourot et al. sont écrites par Le Pécheur [78] et utilisées par Li et al. [178] en vue d'étudier le comportement cyclique local de l'acier 304L. Dans ce contexte, la relation de vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ considère un écrouissage cinématique χ^s d'une manière équivalente à l'expression utilisée par Dunlop et al. [175] (3.12). La variable d'écrouissage cinématique χ^s est donnée par l'équation non linéaire de type Frederick-Armstrong [179] et Chaboche [180] destiné le plus souvent aux modèles de comportement global :

$$\dot{\chi^s} = C \, \dot{\gamma}^s - D \, |\dot{\gamma}^s| \, \chi^s \tag{3.22}$$

où C et D sont deux paramètres associées à la capacité et à la vitesse d'écrouissage cinématique. À noter également que les expressions d'évolution de l'écrouissage isotrope et celle de la densité de dislocations sont identiques à celles du modèle de Tabourot et al. [176] initial.

Modèle de Cuitiño-Ortiz. À la différence des équations constitutives précédentes, le modèle de Cuitiño-Ortiz [181] introduit une surface d'écoulement non linéaire, *i.e.* seul un certain nombre de systèmes de glissement potentiels peuvent être activé. Ce modèle propose alors une version assez distincte de celle donnée par Hutchinson [171] (3.7) de la relation de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$:

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left\langle \left| \frac{\tau_s}{\tau_c^s} \right|^n - 1 \right\rangle \operatorname{sign}(\tau_s) \tag{3.23}$$

où l'opérateur $\langle . \rangle$ représente la fonction de Macaulay. Par ailleurs, si le fondement de l'écoulement non linéaire est basé la loi d'Orowan (3.8), celui-ci s'appuie sur des fonctions de distribution des dislocations. Dans ce contexte, l'expression de la variable d'écrouissage isotrope est proche de celle du modèle de Tabourot et al. [176] (3.19) et son évolution temporelle est équivalente à la relation (3.19). Les coefficients h^{sp} prennent des formes plus ou moins complexes selon l'historique de la déformation :

$$h^{sr} = \left(\frac{\tau_c^s}{2\,n^s}\right)\, d^{sr} \left(\frac{L_0}{b}\right) \left(1 - \frac{\rho^s\,\kappa}{L_0}\right) \tag{3.24}$$

où n^s est la densité des obstacles engendrés par les dislocations de forêts. Par ailleurs, l'évolution de la densité de dislocation $\dot{\rho}^s$ dans le modèle de Cuitiño-Ortiz [181] est donnée par la relation proposée par Essmann et Rapp [182] :

$$\dot{\rho}^s = \left(\frac{L_0}{b}\right) \left(1 - \frac{\rho^s\,\kappa}{L_0}\right) |\dot{\gamma}^s| \tag{3.25}$$

L_0 étant le libre parcours moyen et κ le rayon moyen des segments d'annihilation. À noter que l'expression (3.25) fait intervenir la notion de densité de dislocations à saturation $\rho^{sat} = \frac{L_0}{\kappa}$ qui établit un équilibre entre la production et l'annihilation des dislocations.

Modèle de Fournier et al.. L'intérêt du modèle de Fournier et al. [183] porte essentiellement sur son application au comportement cyclique d'un acier martensitique dont la structure interne est proche de celle de l'acier AISI H11. Le fondement de ces équations constitutives utilise les mécanismes de l'angle de déviation minimum « low angle boundaries » (LAB) proposés par Sauzay et al. [184]. Par ailleurs, le modèle permet une distinction entre les dislocations vis et coin respectivement associées aux vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}_v^s$ et $\dot{\gamma}_c^s$. Celles-ci sont données par des relations de type sinus hyperbolique et font intervenir des surfaces d'écoulement :

$$\dot{\gamma}_v^s = \rho_{mv}^s\, H_0\, \exp\left(\frac{-\Delta G}{k\,T}\right) \sinh\left\langle \frac{-\Delta V^*\, f^s}{k\,T} \right\rangle \tag{3.26}$$

$$\dot{\gamma}_c^s = \left(\sum_{r=1}^{N} \rho_{mc}^r\right)\, H_0\, \exp\left(\frac{-\Delta G}{k\,T}\right) \sinh\left\langle \frac{-\Delta V^*\, f^s}{k\,T} \right\rangle \tag{3.27}$$

H_0 étant un paramètre fonction de la norme du vecteur de Burgers b. ρ_{mv}^s et ρ_{mc}^s sont respectivement les densités de dislocations mobiles vis et coin. A contrario des approches précédentes, le modèle de Fournier et al. [183] est de type additif, *i.e.* la fonction d'écoulement non linéaire f^s est donnée par :

$$f^s = |\tau_s - \chi^s| - \tau_c^s - \tau_0^s \tag{3.28}$$

où τ_0^s est une cission critique de référence. L'expression de l'écrouissage isotrope est équivalente à celle du modèle de Tabourot [176] (3.19). Cependant, les relations d'évolutions temporelles des diverses densités de dislocations présentent des formes plus ou moins complexes en dépit du fait qu'elles sont fondées sur un équilibre entre les mécanismes de production et

d'annihilation. Dans le modèle de Fournier et al. [183], elles dépendent d'un certain nombre de variables, notamment, la taille de grain d^s [6] :

$$\dot{\rho}^s_{mv} = \frac{\dot{\gamma}^s_v}{b}\left(\frac{r^0_v}{L_0} - y_v\,\rho^s_{mv} - \xi\,\frac{y_v}{b}\frac{\theta^s_v}{d^s}\right) \tag{3.29}$$

$$\dot{\rho}^s_{mc} = \frac{\dot{\gamma}^s_c}{b}\frac{r^0_c}{L_0} - y_c\,\rho^s_{mc} - \frac{y_c}{b^2}\left(b\sum_{r=1}^{N}\rho^p_{mc} - \xi\sum_{r=1}^{N}\frac{\theta^r_c}{d^r}\dot{\gamma}^r_c\right) \tag{3.30}$$

où y_v et y_c sont respectivement les distances moyennes entre les dislocations vis et coin, r^0_v et r^0_c des coefficients associés à la production de dislocations. On note que ξ est un paramètre situé entre 0 et 1. θ^s_v et θ^s_c sont les désorientations associées aux dislocations respectives vis et coins et sont fonctions des vitesses de cisaillement. Par ailleurs, le modèle de Fournier et al. [183] utilise une variable d'écrouissage cinématique de type Frederick-Armstrong [179] et Chaboche [180] :

$$\dot{\chi^s} = C\left(\text{sign}\,(\tau^s - \chi^s) - \frac{\chi^s}{\chi^s_{max}}\right)|\dot{\gamma}^s_v + \dot{\gamma}^s_c| \tag{3.31}$$

χ^s_{max} est l'écrouissage cinématique à saturation et est donné selon la taille et la désorientation des blocs de lattes martensitiques (cf. §1.2.3.1).

Discussion des modèles à base de densité de dislocations. Comme évoqué précédemment, l'ensemble des modèles à base de densités de dislocations sont fondés sur des phénomènes physiques locaux qui ne sont guère évidents à considérer. Un certain nombre d'hypothèses est toujours nécessaire pour la pertinence de la prédiction du comportement non linéaire. De ce fait, les études de développement des approches à base de densités de dislocations sont bien conséquentes [185–187]... avec une tendance actuelle de la prise en compte des longueurs internes (cf. §3.4).

Par ailleurs, les modèles à base de densité de dislocations présentent le plus souvent un nombre de paramètres assez conséquent dont l'identification n'est pas évidente. La procédure d'identification se veut toujours pertinente en attribuant un sens physique à chaque paramètre. Pour ce faire, celle-ci utilise des modèles à une échelle inférieure, notamment des modèles de dynamique de dislocations pour valider sa pertinence [1]. Cependant, cette voie est assez complexe pour certains matériaux, tel que l'acier AISI H11 dont les caractérisations expérimentales à une échelle locale ne sont pas aisées.

3.2.3.2 Modèles phénoménologiques

Outre les équations à base de densité de dislocations, des approches phénoménologiques peuvent également être utilisées pour prédire le comportement non linéaire local anisotrope des structures métalliques. Si le fondement des équations constitutives phénoménologiques est le plus souvent basé sur un formalisme thermodynamique des milieux continus, celles-ci sont quasi-équivalentes aux modèles issues de la métallurgie physique. Ces modèles ont

6. L'incorporation de la taille de grain comme variables a inciter bon nombre d'études à développer des modèles dits de longueurs internes ou à gradients (cf. §3.4).

tendance à s'appuyer sur les mécanismes élémentaires des systèmes de glissement comme étant un archétype de l'écoulement non linéaire. Le présent paragraphe se destine à une présentation de quelques modèles phénoménologiques développés dans un formalisme tridimensionnel.

Modèle de Peirce-Asaro-Needleman (PAN). Le modèle de Peirce-Asaro-Needleman (PAN) [188–191] s'illustre certainement comme étant l'un des pionniers des approches phénoménologiques locales. La relation de la vitesse de cisaillement est celle de Hutchinson [171] (3.7), *i.e.* de type multiplicative ne prenant pas en compte une surface de charge. Ce modèle considère uniquement un écrouissage isotrope dont l'évolution temporelle est à l'image de quasiment l'ensemble des équations constitutives locales donné par la relation (3.21). Cependant, le modèle PAN [188–191] permet une distinction entre les mécanismes d'auto-écrouissage et d'écrouissage latent via la matrice d'interaction $\underset{\sim}{\boldsymbol{h}}$:

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{h}} = h^{sr} = h(\upsilon)\,[q + (1-q)\,\delta^{sr}] \tag{3.32}$$

où δ^{sp} est le symbole de Kronecker et υ représente le glissement cumulé de l'ensemble des systèmes de glissement (3.49). q est un paramètre caractéristique de cette distinction le plus souvent compris entre 1 et 1,4. À noter que dès lors que q est égal à l'unité, seul l'écrouissage isotrope de Taylor [160] est considéré. Dans le présent contexte, l'expression des coefficients d'interaction est donnée par :

$$h(\upsilon) = h_0\ \mathrm{sech}^2\left(\frac{h_0\,\upsilon}{\tau^s_{sat} - \tau^s_c}\right) \tag{3.33}$$

$$\upsilon = \sum_s \int_0^t |\dot{\gamma}^s|\,dt \tag{3.34}$$

$$\mathrm{sech}(x) = \cosh^{-1}(x) \tag{3.35}$$

h_0 étant le module d'écrouissage de référence. Il est par ailleurs intéressant de noter que d'autres expressions simplifiés des coefficients d'interactions sont couramment notamment la modélisation des procédés de mise en forme [192].

Modèle de Bassani-Wu. Bien que le modèle de Bassani-Wu [193, 194] utilise une approche viscoplastique équivalente à celle du modèle PAN [188–191] (3.7) et effectue une distinction entre les mécanismes d'auto-écrouissage et d'écrouissage latent, celui-ci opte pour une forme plus ou moins complexe des coefficients de la matrice d'interaction $\underset{\sim}{\boldsymbol{h}}$ (3.32) articulée autours des différentes étapes d'écrouissage :

$$h(\upsilon) = \left[(h_0 - h_I)\ sech^2\left(\frac{(h_0 - h_I)\ \upsilon^s}{\tau^s_I - \tau^s_c}\right) + h_I\right]\left[1 + \sum_{s\neq r} d_{sr}\ \tanh\left(\frac{\upsilon^s}{\upsilon_0}\right)\right] \tag{3.36}$$

où τ^s_I et h_I sont respectivement la cission critique et le module d'écrouissage associés à la première étape d'écoulement, *i.e.* « easy glide ». υ^s et υ_0 représentent respectivement les glissements cumulés et de référence du système s, associé à une valeur critique d'écrouissage

liée à l'interaction entre les divers systèmes concernés. Par ailleurs, le modèle de Bassani-Wu [193, 194] se distingue de l'approche PAN [188–191] par de faibles valeurs de q, *i.e.* les mécanismes d'auto-écrouissage sont plus conséquents que ceux de l'écrouissage latent.

Modèle de Méric-Cailletaud. Les équations constitutives de Méric-Cailletaud [20, 21] sont initialement développées pour des applications aéronautiques, plus typiquement pour les superalliages de type AM1 utilisées dans les aubes de turbines. À la différence des modèles précédents qui se destinent essentiellement aux sollicitations quasi-statiques monotones, l'approche de Méric-Cailletaud [20, 21] permet une prise en compte des sollicitations complexes notamment les chargements cycliques. La vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ utilisée est donnée sous la forme d'une fonction puissance de la cission résolue τ_s, *i.e.* de type Norton. Elle considère une fonction d'écoulement non linéaire de type additive équivalente à celle utilisée dans le modèle de Fournier et al. [183] (3.28) :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\upsilon^s}\ \mathrm{sign}\,(\tau_s - \chi^s) \tag{3.37}$$

$$\dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{|\tau_s - \chi^s| - r^s - \tau_0^s}{K} \right\rangle^n \tag{3.38}$$

où K est un paramètre du matériau et r^s la variable d'écrouissage isotrope. L'évolution temporelle de r^s est donnée selon une variable ρ^s thermodynamique associée à l'écrouissage isotrope de la manière qui suit :

$$r^s = b\,Q \sum_r h^{sr}\,\rho^r \tag{3.39}$$

$$\dot{\rho}^s = (1 - b\,\rho^s)\ \dot{\upsilon}^s \tag{3.40}$$

où Q et b sont des paramètres du matériau liés respectivement à la capacité et la vitesse d'écrouissage isotrope. Il est par ailleurs intéressant de noter qu'à partir des relations (3.39) et (3.55), la variable d'écrouissage isotrope r^s peut se réécrire sous forme intégrée indépendamment de la variable associée ρ^s :

$$r^s = Q \sum_r h^{sr}\ (1 - \exp\,(-b\,\upsilon^r)) \tag{3.41}$$

Le présent modèle considère également une variable d'écrouissage cinématique χ^s qui est de type Frederick-Armstrong [179] et Chaboche [180], *i.e.* équivalente à celle utilisée dans le modèle de Tabourot et al. modifié [78] (3.22). Cette dernière relation peut être étendue pour prendre en compte des mécanismes liés à des phénomènes de fluage et de restauration :

$$\dot{\chi^s} = C\,\dot{\gamma}^s - D\,\dot{\upsilon}^s\,\chi^s - \left(\left|\frac{\chi^s}{M}\right|\right)^m \mathrm{sign}\,(\chi^s) \tag{3.42}$$

où M et m sont des paramètres matériau liés à des phénomènes de restauration statique. Le paramètre m peut être fonction du glissement cumulé υ^s d'un système donné.

Il est par ailleurs utile de mentionner qu'une modification récente du modèle de Méric-Cailletaud est proposé par Fournier Dit Chabert et al. [195], où une fonction de type sinus

hyperbolique est introduite dans la relation de vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ initiale (3.37), *i.e.* :

$$\dot{\gamma}^s = \sinh\left[\left\langle \frac{|\tau_s - \chi^s| - r^s - \tau_0^s}{K} \right\rangle^n\right] \operatorname{sign}\left(\tau_s - \chi^s\right) \tag{3.43}$$

Une telle modification permet d'établir un seuil de la contrainte visqueuse à des vitesses de sollicitations très élevées, et à haute température.

Modèle de Xu-Jiang. Si le modèle de Xu-Jiang [196] utilise une fonction d'écoulement proche de celle de Méric-Cailletaud [20, 21] (3.37), celle-ci se restreint essentiellement à l'écrouissage cinématique en raison de son application exclusive aux sollicitations cycliques :

$$f = |\tau_s - \chi^s| - \tau_0^s \tag{3.44}$$

La variable d'écrouissage cinématique est de type Frederick-Armstrong [179] et Chaboche [180]. Cependant, elle utilise une approche de multi-mécanismes et considère en outre les interactions entre les différents systèmes de glissement :

$$\chi^s = \sum_{i=1}^{N} \chi_i^s \tag{3.45}$$

$$\dot{\chi}_i^s = C_i\, k_i^s \sum_r h^{sr}\, \dot{\gamma}^s - C_i\, \chi_i^s \sum_r \dot{v}^r \tag{3.46}$$

N étant le nombre de mécanismes pris en compte. Le premier terme de la relation (3.61) est similaire à une évolution temporelle d'un écrouissage isotrope évoqué dans les modèles précédents (3.21). Dans le présent contexte, la matrice d'interaction $\underset{\sim}{\boldsymbol{h}}$ s'inspire du modèle de Bassani-Wu [193, 194], *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{h}} = h^{sr} = q^{sr}\, \left[1 + \sum_{r \neq s} d_{sr}\, \tanh\left(\frac{v^s}{v_0}\right)\right] \tag{3.47}$$

Par ailleurs, la variable k_i^s utilisée dans la relation (3.61) est associée à l'effet de mémoire. Son incorporation est effectuée via une définition d'une surface de mémoire convexe de type Lemaitre-Chaboche [197] équivalente à celle utilisée pour l'écoulement non linéaire. Par le biais d'une approche thermodynamique, Xu et Jiang [196] définissent son expression selon :

$$\dot{k}_i = b\, (Q_i - k_i) \left|1 - \frac{k_i}{Q_i}\right|^m \sqrt{\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^p : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^p} \tag{3.48}$$

où $\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^p$ est le tenseur des vitesses de déformations plastiques. b, Q_i et m étant des paramètres du matériau liés à l'effet de mémoire, qui peuvent être identifiés via des essais de traction quasi-statiques.

Modèle de Cazacu-Ionescu. L'approche de Cazacu-Ionescu [198, 199] se distingue de l'ensemble des équations constitutives précédentes par une relation de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ de type Peryzna :

$$\dot{\gamma}^s = \frac{1}{\eta^s} \left\langle |\tau_s| - r^s - \tau_0^s \right\rangle sign\left(\tau_s\right) \tag{3.49}$$

où η^s est le paramètre de viscosité. La relation (3.49) peut être perçue comme étant une généralisation d'une loi de type Norton. Par ailleurs, la relation de vitesse de cisaillement de Hutchinson [171] (3.7) est aisément déduite de celle-ci pour η^s donné :

$$\eta^s = \frac{\tau_0^s}{\dot{\gamma}_0^s} \left| \frac{\dot{\gamma}^s}{\dot{\gamma}_0^s} \right|^{\frac{1}{n-1}} \tag{3.50}$$

La relation (3.49) peut se transformer en une loi de type Prandtl-Eyring dès lors que η^s a pour expression :

$$\eta^s = A \frac{\operatorname{argsinh}\left(\left|\dot{\gamma}^s\right| / \dot{\gamma}_0^s\right)}{\left|\dot{\gamma}^s\right|} \tag{3.51}$$

où A est une constante. L'usage d'une loi d'écoulement non linéaire de type Peryzna est dû au fait que, selon Cazacu et Ionescu [198, 199], les relations de type Norton surestiment les valeurs de vitesse de cisaillement dès lors que la valeur de la cission résolue τ^s est supérieure à la cission critique τ_c^s. Par ailleurs, pour des valeurs proches de celles-ci, *i.e.* un rapport dans la limite de l'unité, la relation de type Norton illustre de fortes variations des modules associés ce qui requiert des traitements numériques particuliers (cf. §4.2.1).

Discussion des modèles phénoménologiques. Si les approches phénoménologiques sont issues de formalismes thermodynamiques des processus irréversibles, celles-ci s'apparentent plus ou moins aux modèles à base de densité de dislocations. Cette quasi-équivalence est due au fait que les modèles phénoménologiques considèrent le mouvement de dislocation comme étant le mécanisme physique élémentaire de la non linéarité du comportement des structures métalliques. Cependant, les présentes approches sont mieux adaptés pour les sollicitations complexes, notamment le modèle de Bassani-Wu [193, 194] qui considère les différents stades de déformation non linéaire ou encore celui de Xu-Jiang [196] qui intègre l'effet de mémoire... Il est évident que les études de développement des modèles phénoménologiques s'orientent vers les mécanismes locaux et pour des sollicitations de plus en plus complexes. Le présent paragraphe s'est contenté de quelques exemples marquants d'équations phénoménologiques. À noter que la liste n'est pas encore exhaustive, on peut faire notamment référence au modèle de McDowell [154, 155] qui se destine au comportement cyclique des alliages de titane ou encore celui de Khotari-Anand [200] qui intègre les effets thermiques, voire également d'autres modèles, notamment dans les références [201–206]...

Par ailleurs, si les approches phénoménologiques présentent un nombre de paramètres équivalent à celui des modèles à base de densité de dislocations, leur identification est désormais bien plus aisée. À l'inverse des modèles quasi-physiques, le processus d'identification ne font pas appel à des modèles à une échelle inférieure, *i.e.* dynamique des dislocations. Celui-ci peut en effet se contenter des réponses globales du matériau et s'appuyer sur les techniques de transitions d'échelles.

3.3 Techniques de transition d'échelles

Les approches multi-échelles sont fondées, comme évoqué précédemment, sur des techniques de transitions d'échelles. En considérant un élément de base du matériau étudié, soumis à des sollicitations globales, les techniques de transition d'échelles consistent, dans un premier temps, en la localisation ou la concentration des champs de chargements induits (Figure 3.1). De par cette incursion à une échelle de comportement local, les champs mécaniques résultants permettent l'obtention des champs globaux par le biais de techniques d'homogénéisation (Figure 3.1). De ce fait, il est évident que la démarche multi-échelle repose sur deux types de relations [15, 125, 126, 207] :

- Les relations d'homogénéisation permettant l'obtention des champs mécaniques globaux « effectifs » ou « moyens ».
- Les relations de localisation ou de concentration permettant une incursion plus ou moins complexe des champs globaux à ceux des hétérogénéités locales.

La présente partie se destine à une revue des techniques de transitions d'échelles. À l'issue de quelques définitions intuitives de l'homogénéisation et de la localisation (ou concentration) des champs mécaniques, des approches dites respectivement à champs moyens et à champs complets sont traitées d'une manière quasi-explicite en vue d'ébaucher les méthodes utilisées dans ce travail. On note également que les formulations des techniques de transition d'échelles traitées s'attachent essentiellement aux matériaux ayant un comportement non linéaire dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP).

3.3.1 Quelques définitions intuitives

Homogénéisation. L'opération d'homogénéisation s'articule autour de la mise en place d'un milieu dit homogène équivalent (MHE) sur une structure entièrement hétérogène. Pour ce faire, il est le plus souvent nécessaire d'effectuer l'hypothèse d'ergodicité qui se vérifie lors d'un chargement uniforme sur un VER [207]. Dans un tel contexte, les moyennes spatiales des champs de déformations cinématiquement admissible (CA) $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^*$ et de contrainte statistiquement admissible (SA) $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^*$ dans un volume Ω sont respectivement données par des intégrales de surface :

$$\left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \right\rangle = \frac{1}{\Omega} \int_\Omega \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \, d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \mathrm{sym}\left(\underline{\boldsymbol{u}} \otimes \underline{\boldsymbol{n}}\right) dS \tag{3.52}$$

$$\left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^* \right\rangle = \frac{1}{\Omega} \int_\Omega \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^* \, d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \mathrm{sym}\left(\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^* \cdot \underline{\boldsymbol{n}}\right) \otimes \underline{\boldsymbol{x}}\right) dS \tag{3.53}$$

où $\underline{\boldsymbol{n}}$ est la normale sortante en un point courant de $\partial\Omega$, x et S sont respectivement les coordonnées et les surfaces des hétérogénéités locales et $\underline{\boldsymbol{u}}$ est le champ de déplacement.

Par ailleurs, un problème aux limites quelconque ayant des sollicitations homogènes au bord, *i.e.* de type déformation, contrainte ou encore de périodicité [207], induit un équilibre du bilan énergétique. Cet aspect se traduit par le fait que les champs $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^*$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^*$ vérifient respectivement les conditions de contraintes homogènes au contour et de déformation au contour, voire également les conditions de périodicité. Dans un tel contexte, l'équilibre

énergétique traduit le lemme de Hill-Mandel :

$$\left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^* \right\rangle = \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \right\rangle \,:\, \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^* \right\rangle \tag{3.54}$$

En tenant compte de l'unicité de la solution du problème aux limites ayant de sollicitations homogènes aux bords, l'application du lemme de Hill-Mandel mène à :

$$\left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \right\rangle = \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} \right\rangle \,:\, \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \right\rangle \tag{3.55}$$

De par l'égalité (3.55), les champs mécaniques globaux, $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$ peuvent être données selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{E}} = \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} \right\rangle \tag{3.56}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} = \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \right\rangle \tag{3.57}$$

Localisation ou concentration. Si la transition des champs à une échelle globale ne présente aucune difficulté particulière, l'opération inverse de localisation ou de concentration n'est guère aisée. La complexité de cette opération est due au fait que l'accès à l'information locale dépend fortement de la loi de comportement à l'échelle concernée. Dans un contexte où le comportement local du matériau est considéré comme linéaire, les localisations des champs mécaniques, associées à un problème aux limites ayant des sollicitations homogènes aux bords, peuvent être données par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}(\underline{\boldsymbol{x}}) = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}}(\underline{\boldsymbol{x}}) \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} \tag{3.58}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}(\underline{\boldsymbol{x}}) = \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}(\underline{\boldsymbol{x}}) \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} \tag{3.59}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}$ et $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}$ sont des tenseurs d'ordre 4 dits de localisation. On note que de par les relations (3.58) et (3.74), les moyennes des tenseurs $\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}$ et $\underset{\approx}{\boldsymbol{B}}$ sont égales au tenseur identité $\underset{\approx}{\boldsymbol{I}}$. Leur identification, ainsi que celle des tenseurs de modules $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff}$ et de complaisances $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Upsilon}}^{eff}$ effectifs d'élasticité à l'échelle globale peut être effectuée par le biais de formulations dites « ad-hoc », variationnelles ou encore d'autres approches en champs moyens [15, 125, 126, 207].

3.3.2 Approches en champs moyens

Via un raisonnement équivalent à l'approche expérimentale (cf. §2.1.1), les méthodes en champs moyens permettent la prédiction du comportement mécanique des structures hétérogènes et anisotrope d'une manière statistique. Ces méthodes ne permettent aucunement l'accès aux détails de la localisation spatiale des hétérogénéités des champs mécaniques. Dans ce contexte, les constituants ayant quasiment le même comportement mécanique sont définis comme étant une phase. À noter que la distribution des phases constitutives est réalisée, bien évidemment, d'une manière statistique. Les avantages des approches en champs moyens consistent essentiellement en la prise en compte uniquement des informations mesurables sur la microstructure en vue d'une estimation du comportement global effectif. Leur

traitement numérique est le plus souvent peu coûteux permettant leur éventuelle utilisation d'une manière inverse pour identifier les paramètres de la loi de comportement locale. Dans ce qui suit, les techniques de transitions d'échelle dans le cadre d'un comportement linéaire sont brièvement présentés au préalable d'une extension vers le comportement non linéaire.

3.3.2.1 Modèles d'homogénéisation en linéaire

Bornes de Voigt et de Reuss. Les modèles de Voigt [208] et de Reuss [209] constituent les premiers modèles de transition d'échelle pour les matériaux ayant un comportement linéaire. Ces modèles considèrent respectivement l'hypothèse de l'uniformité des champs de déformation et de contrainte au sein du matériau concerné. De ce fait, ces approches permettent d'établir respectivement des bornes supérieures et inférieures du comportement linéaire baptisés bornes de Voigt [208] et de Reuss [209].

Schémas auto-cohérents. Perçues comme étant des techniques d'homogénéisation plus pertinentes, les approches auto-cohérentes reposent essentiellement sur le problème d'Eshelby [210] en élasticité linéaire. Celui-ci suppose qu'une phase φ peut être donnée comme une inclusion ellipsoïdale immergée dans une matrice représentant le milieu environnant, ce dernier étant un milieu homogène virtuel soumis à des conditions aux limites homogènes à l'infini. Par définition, une phase φ est donnée par un ensemble de cristaux constitutifs ayant des orientations cristallographiques assez proches.

Les premiers schémas auto-cohérents sont développés par Hershey [138] et Kröner [211]. Dans ce contexte, le matériau est constitué d'un ensemble N de phases de fraction volumique f_φ et la matrice environnante est représentée par le milieu homogène équivalent (MHE) dont les caractéristiques mécaniques sont les inconnues du problèmes. On note également que l'interaction inclusion-matrice est supposée parfaite.

Les schémas auto-cohérents reviennent à traiter N problèmes d'Eshelby (Figure 3.4). L'état de contrainte moyenne d'une inclusion hétérogène est donné par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\varphi} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff} \,:\, \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1}\right) \,:\, \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi} - \underset{\sim}{\boldsymbol{E}}\right) \tag{3.60}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}$ est le tenseur d'Eshelbly et $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$ la déformation de la matrice à l'infini donnée par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{E}} = \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} \right\rangle = \sum_{\varphi} f_\varphi \, \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi} \tag{3.61}$$

où $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi}$ est la déformation de l'inclusion. En introduisant un module d'élasticité d'un milieu de référence [211] et tenant compte de la linéarité du comportement local, la relation de localisation s'écrit :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} \,:\, \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff} \,:\, \delta\underset{\approx}{\boldsymbol{\lambda}}\right)^{-1} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} \tag{3.62}$$

où $\delta\underset{\approx}{\boldsymbol{\lambda}}$ est issue de la décomposition du module d'élasticité du milieu de référence. Le premier terme du membre à droite de la relation (3.62) est équivalent au tenseur de localisation

$\underset{\sim}{\boldsymbol{A}}$ dont la moyenne est égale au tenseur d'identité $\underset{\approx}{\boldsymbol{I}}$. Compte tenu de la linéarité du comportement global, le module d'élasticité effectif est donné selon :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff} = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{\lambda}} : \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{S}} : \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff} : \delta\underset{\approx}{\boldsymbol{\lambda}} \right)^{-1} \right\rangle \tag{3.63}$$

$\underset{\approx}{\boldsymbol{\lambda}}$ étant le module d'élasticité local d'une inclusion.

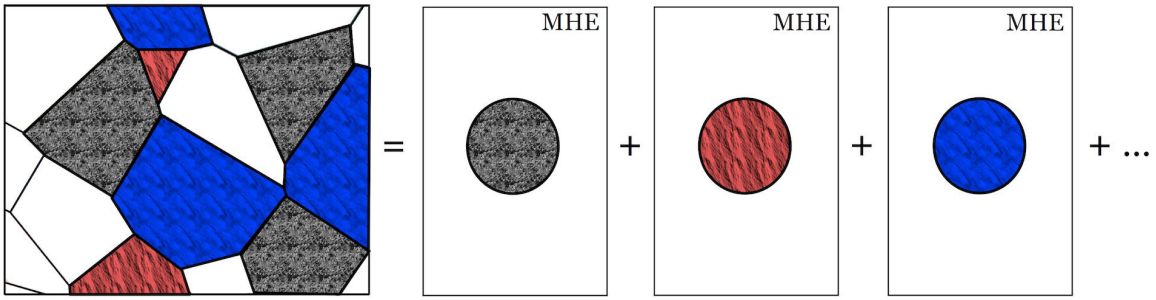


Figure 3.4 – Schématisation du principe du modèle auto-cohérent.

3.3.2.2 Modèles d'homogénéisation en non linéaire

Comme suite à un bref exposé de quelques modèles d'homogénéisation en élasticité linéaire, le présent paragraphe s'attache à des extensions de ces approches aux matériaux ayant un comportement non linéaire. Le traitement de ces extensions représentent un domaine de recherche en plein essor et la validité de celles-ci n'est guère évidente. Un grand nombre de modèles d'homogénéisation est développé dans le cadre d'extensions des approches en élasticité linéaire. Dans ce qui suit, on se consacre à une présentation de ces modèles en s'attachant essentiellement aux formulations permettant in fine des calculs de structures. On renvoie le lecteur aux références citées pour les développements complets.

Modèle de Lin-Taylor et modèle statique. Dans une première approche, Taylor [160] postule l'uniformité des champs de déformation plastique $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ de chaque phase φ. Celle-ci est égale au tenseur de déformation à l'échelle globale $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$. Cette approche, équivalente à la borne de Voigt [208] en élasticité linéaire, est étendue par Lin [212] en vue d'une prise en compte des champs de déformations élastiques. De par cette extension le tenseur des contraintes localisées est donné par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\varphi} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\,\mu \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{\varphi,p} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p} \right) \tag{3.64}$$

où μ est le module de cisaillement. En raison d'une surestimation de la prédiction du comportement non linéaire, bon nombre de versions dérivées de l'approche de Lin-Taylor [212] ont été proposées par la suite. Celles-ci s'attachent essentiellement à une « relaxation » de certaines composantes du tenseur de déformation. Dans un tel contexte, on peut citer

entre autres les modèles « Relaxed Constraints », les modèles « LAMEL » et « ALAMEL » ou encore l'approche « Constrained Hybrid » [161, 213–216].

Si le modèle de Lin-Taylor [212] postule l'uniformité des champs de déformation, le modèle statique est une approche duale proposée dans un premier temps par Sachs [217] et est généralisée ultérieurement par Batdorf et Budiansky [218]. À noter que le modèle statique est équivalent à la borne de Reuss [209] en élasticité linéaire.

Modèle de Kröner. Le modèle de Kröner [219] s'illustre comme étant une première extension du schéma auto-cohérent au comportement non linéaire. Pour rappel, celui-ci consiste en la résolution d'un problème auxiliaire qui assimile chaque phase φ à une inclusion ellipsoïdale immergée dans une matrice, dont les propriétés sont celles d'un milieu homogène équivalent (MHE). Dans le contexte du schéma de Kröner [219], un comportement non linéaire de type élastoplastique est attribué au milieu homogène équivalent (MHE). Le champ de déformation plastique au sein de la matrice est celui qui est donné à l'échelle globale $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^p$, *i.e.* moyenne des déformations plastiques à l'échelle des inclusions $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi,p}$. De ce fait, le tenseur des contraintes localisées dans le modèle de Kröner [219] est donné via les méthodes d'Eshelby [210], ainsi selon la différence entre les tenseurs $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^p$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi,p}$, *i.e.* source de contraintes internes :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\varphi} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}\right) : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^p - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi,p}\right) \tag{3.65}$$

Il est évident que la relation (3.65) fait intervenir une accommodation élastique L^K car donnée par le terme $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{I}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{S}}\right)$. Dès lors qu'une inclusion sphérique est considérée, la relation (3.65) se ramène à :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\varphi} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\,\mu\,(1-\beta) : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^p - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi,p}\right) \tag{3.66}$$

$$\beta = \frac{2\,(4-5\,\nu)}{15\,(1-\nu)} \tag{3.67}$$

β étant un paramètre d'élasticité fonction du coefficient de Poisson ν de la matrice. Cependant, pour un coefficient de Poisson $\nu = 0,3$; la relation (3.66) devient quasi-équivalente à la loi de localisation du modèle de Lin-Taylor [212] (3.64). Plus concrètement, celle-ci ne diffère que d'un terme $(1-\beta)$, *i.e.* d'une valeur de 0,5. Les interactions locales inclusions-matrice sont, à l'image du modèle de Lin-Taylor [212], bien surestimés et conduisent à une prédiction du comportement global trop raide. Par ailleurs, le manque de rigueur du modèle de Kröner [219] est dû au fait que la déformation plastique st considérée comme étant libre au sens d'Eshelby [210], son évolution n'est donc pas liée aux incréments du tenseur de contrainte. De ce fait, le modèle de Kröner [219] se traduit en un problème équivalent à celui d'un comportement élastique de la matrice en dépit d'une attribution d'une déformation non linéaire.

Modèle incrémental de Hill. Comme suite au modèle de Kröner [219], Hill [220] propose une formulation alternative permettant une extension du schéma auto-cohérent au

comportement non linéaire. Le fondement du modèle de Hill [220] consiste en l'affectation d'un comportement non linéaire de type élastoplastique d'une manière concrète au milieu homogène équivalent (MHE). Le traitement du modèle de Hill [220] est mené d'une manière incrémentale, *i.e.* une linéarisation de la loi de comportement à l'échelle locale et à l'échelle globale exprimée en vitesse selon :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} \tag{3.68}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}} \tag{3.69}$$

$\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}$ et $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff}$ étant les modules instantanés tangents de type non linéaires respectivement associés à l'échelle locale et et l'échelle globale. La loi de localisation de Hill [220] du tenseur des contraintes au sein d'une phase φ prend une forme quasi-équivalente à celle de Kröner [219] (3.65). Dans le présent contexte, la vitesse de contrainte moyenne au sein d'une inclusion $\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\varphi}$ a pour expression :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{\varphi} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{H} \,:\, \left(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}} - \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{\varphi}\right) \tag{3.70}$$

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{H} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff} \,:\, \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{S}}^{-1} - \underset{\approx}{\boldsymbol{I}}\right) \tag{3.71}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{H}$ est un tenseur d'accommodation élastoplastique. En adoptant les méthodes de calcul d'Eshelby [210], il s'ensuit par homogénéisation que le module tangent effectif $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff}$ est donné par :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff} = \left\langle \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{H}\right)^{-1} \,:\, \left(\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff} + \underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{H}\right) \right\rangle \tag{3.72}$$

Il est clair que le modèle « incrémental » de Hill [220] permet une meilleure prise en compte de l'accommodation plastique que le modèle de Kröner [219]. La prédiction du comportement à l'échelle globale est bien réaliste. Or, le traitement numérique du modèle de Hill est assez complexe. Celui-ci consiste en la résolution « d'équation intégrale » outre l'estimation du tenseur d'accommodation $\underset{\approx}{\boldsymbol{L}}^{H}$ et du module tangent effectif $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{eff}$. Cependant, on peut noter qu'en dépit de la complexité de la mise en œuvre numérique, le modèle de Hill [220] est assez intéressant du fait qu'il s'attache à linéariser d'une manière incrémentale un problème d'homogénéisation en non linéaire.

Extension de Hutchinson. Le modèle de Hutchinson [221] consiste en une extension de l'approche incrémentale élastoplastique de Hill [220] à un comportement viscoplastique. Dans ce contexte, la linéarisation de loi de comportement locale utilise des modules de complaisances tangents $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Upsilon}}^{tg,\varphi}$ permettant une définition d'un milieu dit homogène de comparaison linéarisé. La loi de comportement locale linéarisée est donnée par :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Upsilon}}^{tg,\varphi} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} \tag{3.73}$$

La réponse globale du matériau est caractérisée par un module de complaisances tangent $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Upsilon}}^{tg}$. Par ailleurs, Hutchinson [221] propose une formulation alternative à la relation incrémentale (3.73). Celle-ci est donnée sous forme intégrée et s'attache au cas particulier dans lequel l'ensemble des phases φ est caractérisé par le même coefficient de viscosité n correspondant à loi d'écoulement non linéaire locale (3.7). Cette formulation alternative utilise des modules de complaisances sécants $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Upsilon}}^{sct,\,\varphi}$ au lieu du module tangent $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Upsilon}}^{tg,\,\varphi}$. La loi de comportement locale ainsi linéarisée a pour relation :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Upsilon}}^{sct,\,\varphi} \;:\; \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} \tag{3.74}$$

De par son aspect non incrémental, la formulation (3.74) permet une détermination assez aisée des réponses mécaniques instantanées. Cependant, Hutchinson [221] met en évidence l'équivalence du comportement mécanique non linéaire prédit par les formulations incrémentales et tangentes. Par ailleurs, la réponse mécanique à l'échelle globale n'est guère réaliste et est quasiment proche du modèle de Lin-Taylor (3.64).

Modèle sécant de Berveiller-Zaoui. La formulation sécante de Berveiller-Zaoui [222] découle d'une formulation intégrée du modèle incrémental de Hill [220]. Il est valide pour les matériaux globalement isotropes, pour des sollicitations quasi-statiques monotones et radiales. Si l'on considère une inclusion sphérique immergée dans une matrice caractérisée par un module tangent non linéaire, la loi de localisation du tenseur des contraintes du modèle de Berveiller-Zaoui [222] est donnée par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\varphi} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\,\mu\,\alpha\;(1-\beta) : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{p} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi,\,p}\right) \tag{3.75}$$

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2}\,\mu\,\frac{E^{p}_{éq}}{\Sigma_{éq}} \tag{3.76}$$

Il est évident que la relation (3.75) s'apparente à la loi de localisation du modèle de Kröner (3.66). On rappelle que β est un paramètre fonction du coefficient de Poisson ν de la matrice. Cependant, la présente relation de concentration du tenseur des contraintes (3.75) fait intervenir une variable scalaire α qui traduit l'accommodation non linéaire. Son expression est donnée en fonction des tenseurs équivalents au sens de von Mises des tenseurs de déformation et de contrainte à l'échelle globale, notés respectivement $E^{p}_{éq}$ et $\Sigma_{éq}$ (3.91).

En dépit de sa restriction aux sollicitations de chargement simple, le modèle de Berveiller-Zaoui [222] a le mérite de combiner une loi de localisation de type Kröner (3.66) et d'une accommodation non linéaire. Cette accommodation permet une prise en compte des mécanismes élémentaires, notamment ceux d'écrouissage, via la variable α. Celle-ci est égale à l'unité dans le cadre de l'élasticité linéaire et a tendance à diminuer lors de l'écoulement non linéaire. On note également que cette tendance a pour conséquence une diminution des niveaux des contraintes internes, permettant ainsi une prédiction assez réaliste du comportement global.

Modèle en β de Cailletaud-Pilvin. Si l'extension de Berveiller-Zaoui [222] permet une prise en compte de la non linéarité du comportement de la matrice via l'introduction d'une

variable scalaire α (3.91) dans la relation de localisation de Kröner (3.65), le modèle dit de « la règle en β » de Cailletaud-Pilvin [223, 224] écrit la loi de concentration à l'aide d'une variable tensorielle phénoménologique $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}$ permettant une considération de l'accommodation non linéaire. La variable d'accommodation non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}$ permet une réduction des sources de contraintes internes, *i.e.* interphases. À l'inverse du modèle de Berveiller-Zaoui [222], celle-ci est introduite de manière à conserver le terme d'accommodation linéaire de Kröner [219] L^K. Plus concrètement, au lieu de multiplier ce dernier par un terme non linéaire, la présente loi de localisation substitue le tenseur de déformation non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi,\,p}$ dans la relation de Kröner (3.65) par la variable $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}$. Si l'on considère une inclusion sphérique immergée dans une matrice ayant un comportement non linéaire, la loi de concentration du tenseur de contrainte est donnée par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\varphi} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\,\mu\,(1-\beta) : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{B}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi}\right) \tag{3.77}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{B}} = \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi} \right\rangle = \sum_{\varphi} f_{\varphi}\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi} \tag{3.78}$$

β étant le même paramètre élastique utilisé dans le modèle de Kröner (3.65) et $\underset{\sim}{\boldsymbol{B}}$ le tenseur d'accommodation à l'échelle globale. Par ailleurs, la variable d'accommodation non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}$ peut évoluer selon un certain nombre de relations, le plus souvent de type Frederick-Armstrong [179] et Chaboche [180] :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^{\varphi} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{p,\,\varphi} - D\,\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi} - \delta\,\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p,\,\varphi}\right)\,\dot{\varepsilon}_{\text{éq}}^{p,\,\varphi} \tag{3.79}$$

$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{éq}}^{p,\,\varphi}$ étant la déformation non linéaire au sens de von Mises d'une φ donnée. D et δ sont deux paramètres du matériau. À noter que dès lors le paramètre δ est égal à l'unité, ou éventuellement D est nul, le modèle en β [223, 224] est équivalent à celui de Kröner [219] et considère uniquement une accommodation élastique. Par ailleurs, une valeur nulle du paramètre δ permet une évolution non linéaire de la variable d'accommodation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}$. La relation (3.79) permet également d'introduire des effets supplémentaires liés à des phénomènes de fluage et de restauration globale [207], *i.e.* :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^{\varphi} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{p,\,\varphi} - D\,\varepsilon_{\text{éq}}^{p,\,\varphi}\,\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi} - \left(\frac{\beta_{\text{éq}}^{\varphi}}{M}\right)^{m}\,\frac{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi}}{\beta_{\text{éq}}^{\varphi}} \tag{3.80}$$

où M et m sont des paramètres du matériau liés à la restauration dynamique globale de celui-ci. $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}_{\text{éq}}$ est la variable d'accommodation non linéaire au sens de von Mises de $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}$.

En outre, de récentes généralisations et extensions du modèle en β ont été récemment proposées, notamment dans les références [225, 226]. Une des extensions intéressantes se destine aux matériaux à solidification dirigée proposée initialement par Saï et al. [227] et par Martin et al. [228]. La version modifiée du modèle consiste en l'utilisation d'un variable tensorielle D au lieu d'un scalaire dans la relation (3.79) en vue d'une prise en

compte de l'orientation géométrique anisotrope des grains, considérés comme des inclusions cylindriques. À noter que dans ce cas, l'évolution de la variable $\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}$ est donnée selon le tenseur de déformations totales $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et non plus selon le tenseur de déformations non linéaires $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$.

En dépit de son aspect phénoménologique, le modèle en β permet une prédiction bien réaliste du comportement non linéaire global, tant en sollicitations monotones que complexes, *i.e.* cycliques. Il est évident que le modèle en β est bien intéressant du point de vue de l'étendue de son applicabilité. Cependant, celui-ci nécessite une identification de paramètres supplémentaires, notamment D ou éventuellement δ, M et m, en vue d'un recalage du comportement global. Dans ce contexte, la procédure d'identification peut être menée en comparant celle-ci à d'autres techniques de transitions d'échelles.

Modèle tangent de Molinari et al.. Le modèle de Molinari et al. [229] est, à l'instar du modèle de Berveiller-Zaoui [222], issu d'une extension de l'approche de Hill [220], *i.e.* une forme intégrée non incrémentale de celle-ci. Cependant, la linéarisation du problème non linéaire tant à l'échelle globale qu'à une échelle locale est effectuée d'une manière équivalente à la première extension de Hutchinson, *i.e.* par le biais d'un module tangent $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{tg}$. Dans ce contexte, la transition d'échelle s'appuie sur les relations d'homogénéisation en thermo-élasticité impliquant une prise compte des contraintes résiduelles [207]. Les relations des lois de comportement linéarisées respectivement à une échelle locale et à l'échelle globale sont données selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{tg,\varphi} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^r \tag{3.81}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{tg} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}^r \tag{3.82}$$

où $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^r$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}^r$ sont les tenseurs de contraintes respectivement à l'échelle locale à l'échelle globale. Si le modèle tangent de Molinari et al. [229] est introduit pour des structures isotropes, Lebensohn et Tomé [230] l'étendent aux matériaux globalement anisotropes. Par ailleurs, une extension de ce modèle aux transformations finies a été ultérieurement mise en œuvre par Molinari et al. [231].

Cependant, la compatibilité des formulations tangentes aux échelles locales (3.81) et globales (3.97) est bien souvent remise en question [232]. Le modèle tangent nécessite de se donner au préalable la forme du module global. Cet aspect limite ainsi son utilisation aux lois en puissance ayant le même coefficient de viscosité n à l'échelle locale. Par ailleurs, la prédiction du comportement non linéaire global via la formulation tangente est le plus souvent bien souple et a tendance à converger vers la borne de Reuss [230].

Modèle affine de Masson et al.. Si le domaine d'application du modèle de Molinari et al. [229] est assez restrictif, la formulation affine de Masson et al. [232] vient étendre celui-ci en utilisant également une linéarisation tangente à l'échelle locale, mais surtout en s'appuyant sur la notion du milieu hétérogène linéaire de comparaison introduite par Ponte Castañeda [233]. Cette dernière permet une utilisation des relations d'homogénéisation courantes en thermo-élasticité en vue d'une caractérisation du comportement du matériau à l'échelle globale. Si le comportement global linéarisé présente une relation équivalente à

celle donnée par Molinari et al. [229] (3.97), celui-ci n'a aucune raison d'être tangent au comportement non linéaire à cette échelle, ce qui vaut au modèle de Masson et al. [232] le caractère d'affine. Dans ce contexte, la relation de comportement global est donnée par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{aff} \; : \; \underset{\sim}{\boldsymbol{E}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}^{r} \tag{3.83}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{aff}$ est le module affine global. À l'inverse du modèle de Molinari et al. [229], la formulation affine permet une bien meilleure prise en compte des hétérogénéités locales. Le comportement des diverses phases locales ne se restreint pas à des lois en puissance ayant le même coefficient de viscosité n. Il est également intéréssant de noter que des extensions du modèle affine de Masson et al. [232] permettent une prise en compte des hétérogénéités intragranulaires sont proposées [234, 235]. Par ailleurs, bon nombre d'études récentes utilisent la formulation affine de Masson et al. [232] notamment dans la modélisation des procédés de mise en forme [236].

Formulations variationnelles de Talbot-Willis et de Ponte Castañeda. Les approches respectives de Talbot-Willis [237] et Ponte Castañeda [233] constituent une extension du principe variationnel de Hashin-Shtrikman [238] au comportement non linéaire. Les présentes formulations variationnelles s'attachent à une estimation de nouvelles bornes plus restrictives que celles données par le modèle de Lin-Taylor [212] ou éventuellement par le modèle statique [218]. Pour ce faire, Talbot et Willis [237] suivis de Ponte Castañeda [233] utilisent une approche thermodynamique permettant une caractérisation du comportement local des phases par le biais d'un potentiel énergétique convexe, le plus souvent de type quadratique. Si la formulation de Talbot-Willis [237] fait appel à un milieu linéaire homogène, celle de Ponte Castañeda introduit la notion de milieu linéaire hétérogène de comparaison tenant compte d'informations microstructurales bien plus conséquentes. À savoir que l'estimation de nouvelles bornes supérieures se fait par minimisation de la différence entre un potentiel effectif associé au milieu hétérogène non linéaire et celui du milieu de comparaison.

Le statut de borne supérieure de la formulation variationnelle de Ponte Castañeda [233] permet de mener une confrontation entre les diverses extensions du schéma auto-cohérent au comportement non linéaire. Il est évident que, dans le cadre de l'élasticité linéaire, l'ensemble des modèles auto-cohérents sont bien équivalents. Cependant, dès lors qu'une non linéarité est introduite, la prédiction du comportement effectif varie en raison des divers traitements de la localisation. Par ailleurs, selon les études menées par Gilormini et Bornert [126, 239, 240], certaines extensions auto-cohérentes peuvent ne pas respecter cette nouvelle borne et sont donc à proscrire. Plus concrètement, la violation de la borne variationnelle s'attache essentiellement à la non linéarité locale et au contraste entre phases. À savoir que cet aspect intervient dans l'ensemble des méthodes de linéarisation, notamment les formulations incrémentales, sécantes, tangentes ou encore affines.

Modèle de second ordre de Ponte Castañeda. La quasi-totalité des modèles présentés ci-dessus présentent une estimation des modules de linéarisation via les moyennes des champs locaux de déformation par phase, *i.e.* via un calcul de premier ordre. La présente formulation de Ponte Castañeda [241] permet l'extension de celle-ci en vue d'une

prise en compte accrue des hétérogénéités intraphases. Cet aspect vaut au modèle de Ponte Castañeda [241] l ?appellation de procédure de second ordre. Cette procédure utilise un potentiel thermo-élastique de référence, *i.e.* la notion d'un milieu hétérogène linéaire de comparaison. Ce dernier est donné selon les contraintes et les déformations locales qui ne sont pas nécessairement homogènes. Dans ce contexte, l'estimation du module est effectué par le biais de la minimisation de la densité énergétique effective du matériau homogénéisé obtenu via les potentiels locaux non linéaires. Par ailleurs, contrairement aux formulations variationnelles présentées ci-dessus, le modèle de second ordre ne se destine pas à l'obtention de nouvelles bornes, mais permet le plus souvent une orientation du choix de méthode de linéarisation à utiliser.

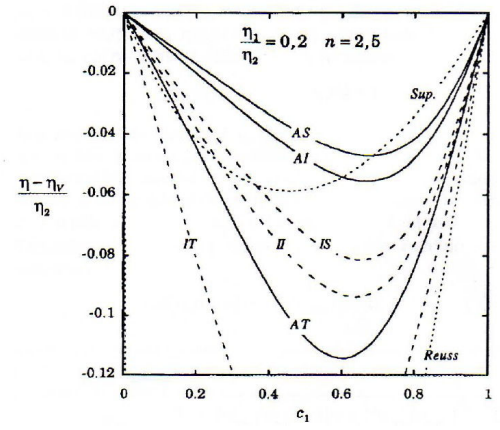
Du fait d'une prise en compte d'informations microstructurales assez conséquentes, le traitement numérique de la procédure de second ordre de Ponte Castañeda [241] n'est guère aisée. Ceci est mis en évidence dans l'optimisation de la densité d'énergie globale. Dans une première approche, l'utilisation d'un module tangent, désigné sous le terme de second ordre tangent, peut ne pas respecter la borne variationnelle [242]. Bien que cette méthode permette le plus souvent une prédiction correcte du comportement non linéaire global, la violation de la borne variationnelle est fréquemment constatée lorsque le matériau présente des phénomènes de percolation, *i.e.* d'importantes fluctuations des champs locaux en intraphases [242]. Cette première formulation de second ordre ne permet pas une prise en compte de ces phénomènes locaux. De ce fait, celle-ci est reformulée de manière à intégrer les phénomènes de fluctuations pour ne pas violer la borne variationnelle [243, 244].

Il est évident que le modèle de second ordre de Ponte Castañeda [241] permet une prise en compte accrue d'informations microstructurales, notamment celles qui sont liées aux hétérogénéités intraphases. De ce fait, la prédiction du comportement non linéaire global est le plus souvent assez correcte, mais surtout plus souple que celle des modèles de premier ordre présentés précédemment. Toutefois, le traitement numérique du modèle de Ponte Castañeda [241] est complexe, et le choix de la méthode de linéarisation au comportement local n'est guère évident [15].

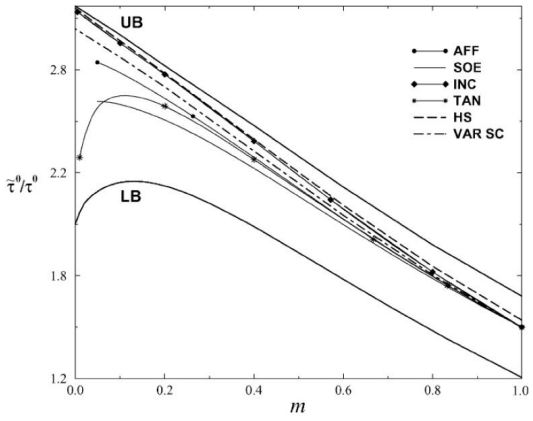
Discussion des modèles en champs moyens. Il est évident que bon nombre de méthodes de linéarisation peuvent être employées dans le cadre des extensions du schéma auto-cohérent au comportement non linéaire. Si le traitement numérique des schémas de second ordre est le plus souvent assez complexe [15], les formulations de premier ordre considèrent des modules de linéarisation homogènes par phase constitutive. La microstructure du matériau linéarisé est prise identique à celle du matériau non linéaire de base. De ce fait, les formulations de premier ordre peuvent très bien être adaptées au contexte du travail actuel. Celles-ci peuvent être utilisées dans la procédure d'identification des paramètres des équations constitutives à une échelle locale.

Cependant, il certain que la réponse du matériau global effectif dépend du modèle d'homogénéisation, ou plus concrètement de la méthode de linéarisation utilisée. On rappelle également certaines études antérieures menées notamment par Gilormini et Bornert [126, 239,240] mettent en évidence que selon la nature du matériau et du contraste local, certaines approches auto-cohérentes peuvent en effet violer les bornes variationnelles (Figure 3.5). Par conséquent, le choix du modèle de transition d'échelle en champs moyens doit tenir

compte de la répartition statistique disponible au sein du matériau et de la pertinence des interactions vis-à-vis des phénomènes physiques élémentaires.



(a) Confrontation des modèles sécant, intermédiaire et tangent à complaisances anisotropes (AS, AI, AT) et isotropes (IS, II, IT) avec la borne variationnelle supérieure (Sup.) de Ponte Castañeda et avec la borne inférieure de Reuss [240]



(b) Évolution de la contrainte d'écoulement non linéaire normalisée d'un matériau de type CFC isotrope selon sa sensibilité à la vitesse. Estimations auto-cohérentes utilisant différentes formulations : second ordre (SOE), affine (AFF), incrémentale (INC), tangent (TAN) et variationnelle (VAR SC). Les bornes de Hashin-Shtrikman (HS), de Voigt (UB) et de Reuss (LB) sont également tracées [126]

Figure 3.5 – Confrontation de diverses approches auto-cohérentes.

3.3.3 Approches en champs complets

À l'inverse des modèles en champs moyens, les techniques de transitions d'échelles en champs complets requièrent une caractérisation complète de la stéréologie de la structure interne du matériau considéré. Ces approches permettent une localisation spatiale des champs mécaniques en tout point du matériau [18, 154, 155, 207, 245–247]. Il est évident que les informations sur les mécanismes physiques élémentaires, notamment les phénomènes d'interaction locales, sont bien plus conséquents que ceux donnés via les modèles en champs moyens. Par conséquent, la prédiction du comportement non linéaire est bien plus pertinente. Cependant, il est clair que le coût des techniques de transitions d'échelles en champs complets est bien plus élevé que celui des techniques en champs moyens [245].

En dépit du surcoût des présentes techniques, l'avènement de la puissance des ordinateurs, mais également le développement des techniques de calculs parallèles, ont bien contribué au déploiement de ces approches. Dans ce contexte, la méthode des éléments finis (EF) est inéluctablement une technique de transition d'échelle bien adéquate. Son utilisation dans le cadre de la modélisation multi-échelle des matériaux hétérogènes ne requiert aucune loi de localisation ou de concentration des tenseurs mécaniques globaux. Par ailleurs, l'équilibre et la compatibilité entre cristaux constitutifs sont bien respectés au sens faible des éléments finis [245].

Dans le contexte de la modélisation multi-échelle des matériaux hétérogènes, la méthode des éléments finis (EF) est fondée sur le même concept que la résolution d'un problème aux limites macroscopique classique, *i.e.* calcul de structures mais associé à un savoir-faire en science des matériaux. Celle-ci est le plus souvent couplée à un modèle de structure interne (agrégat de cristaux constitutifs) virtuel [207, 245–247], voire issue d'une caractérisation expérimentale [154,155], représentative d'un VER du matériau. Les équations constitutives à l'échelle locale sont écrites en chaque point d'intégration (de Gauss) des éléments finis discrétisant le VER. À noter que les propriétés locales, notamment les orientations cristallographiques ou encore le tenseur d'élasticité, sont bien évidemment associées à chaque constituant, plus précisément aux éléments finis de chaque constituant (Figure 3.6).

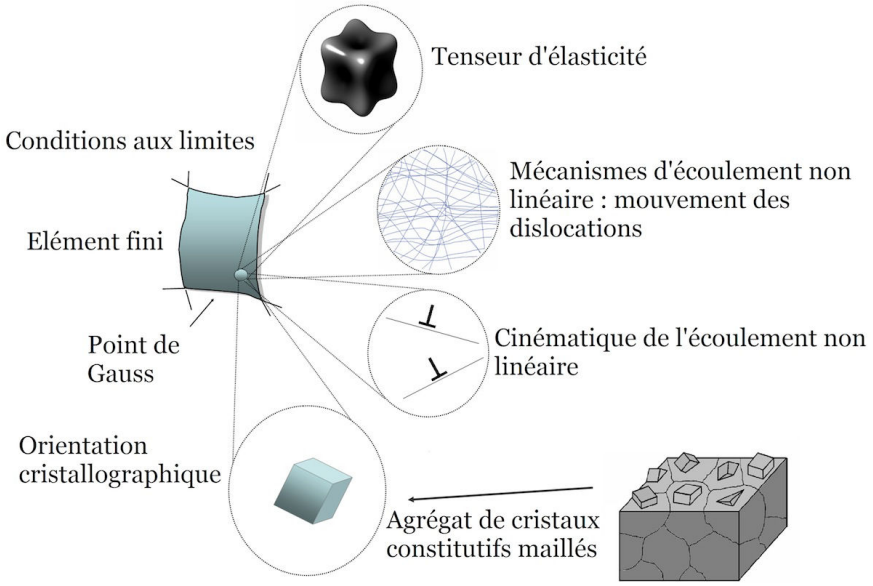


Figure 3.6 – Transition d'échelle via la méthode des éléments finis (EF) d'après [18]

Dans cette approche, le traitement numérique des structures hétérogènes permet un accès aisé aux mécanismes physiques élémentaires locaux. Plus concrètement, la méthode des éléments finis (EF) permet, à titre d'exemple, une compréhension des mécanismes locaux de déformation [154, 155], mais également de l'endommagement [18, 248]. Comme illustré dans la première partie de ce manuscrit, ces mécanismes sont bien à l'œuvre au sein des matériaux hétérogènes tels que l'acier AISI H11, notamment au niveau de l'incompatibilité entre cristaux voisins où les champs mécaniques locaux atteignent le plus souvent des valeurs bien conséquentes (cf. §2.4). En outre, la présente technique de transition d'échelle permet également une estimation des propriétés globales effectives du matériau homogénéisé à l'image des méthodes en champs moyens [207, 245, 246]. La prédiction des champs globaux effectifs via les méthodes en champs complets peut s'avérer bien plus pertinente que celle en champs moyens, essentiellement dès lors que l'intérêt est porté aux sollicitations complexes [100].

Par ailleurs, il est intéressant de noter que bon nombre d'études utilisent la méthode des éléments finis (EF) dans le cadre de la modélisation multi-échelle des matériaux hé-

térogènes. À titre d'exemples, Héripré et al. [103] et Gérard et al. [249] utilisent cette méthode en vue de confronter une modélisation multi-échelle à des mesures de champs par corrélation d'images, et ce, respectivement dans le cadre de sollicitations monotones et cycliques. Une confrontation du comportement effectif global aux résultats obtenus via les approches en champs moyens a également fait l'objet d'une étude assez récente menée par Gérard [100]. La présente approche a été utilisé par Guilhem [250] pour étudier l'effet des orientations cristallographiques sur les champs mécaniques locaux et l'apparition des bandes de glissement persistantes en surface de l'acier AISI 316L pour des sollicitations cycliques. L'auteur s'intéresse aussi à l'impact de la rugosité de surface sur les mécanismes élémentaires locaux. Contrairement à l'approche de Guilhem [250], Rossiter et al. [251] mènent une étude numérique afin d'établir un lien entre les orientations cristallographiques des cristaux constitutifs en surface et le profil de rugosité engendrée lors de la sollicitation du matériau. Par ailleurs, l'effet d'interaction entre les cristaux en surface et en sous-surface sur les champs mécaniques locaux a été étudié par Zeghadi [252]. La méthode des éléments finis (EF) a également été utilisé dans le cadre de sollicitations thermomécaniques en vue d'une confrontation aux mesures de champs locaux thermiques et mécaniques réalisées respectivement par infrarouge et corrélations d'images [104].

Cette méthode semble donc adaptée aux diverses applications présentées ci-dessus. Cependant, le coût de résolution d'un problème aux limites d'un matériau hétérogène est assez élevé, et ce, malgré l'avènement des techniques de parallélisation [253]. De ce fait, des études récentes s'attachent au développement de la méthode de transformée de Fourier rapide (FFT) appliquée au contexte de la modélisation multi-échelle des matériaux hétérogènes en vue d'une investigation des champs complets des mécanismes physiques élémentaires [254–256]. Cette méthode présente de meilleures performances en terme de temps de calcul par rapport à la méthode des éléments finis (EF). Elle est a priori réservée à l'étude des structures périodiques [254–256]. De ce fait, étant donné que le contexte du travail actuel s'attache au comportement en surface, la méthode de transformée de Fourier rapide (FFT) ne peut être envisagée.

3.3.4 Couplage de techniques de transition d'échelle

Dans un contexte où l'intérêt est porté au comportement global anisotrope d'une structure entière avec prise en compte des mécanismes physiques élémentaires, il convient d'effectuer un couplage de technique de transition d'échelle. Cette stratégie est bien souvent employée lors de la simulation ou modélisation numérique des procédés de mise en forme (laminage, forgeage...) [236, 257]ou d'impact [258], *i.e.* utilisant la théorie des transformations finies, où l'on s'attache, non pas à la localisation des mécanismes physiques élémentaires, mais essentiellement au caractère anisotrope et à l'évolution et à la génération de la texture cristallographique globale. Dans cette optique, la validation de telles approches est communément effectués par la biais de confrontations à l'évolution de figures de pôles finales mesurées par diffraction des rayons X, mais également via une dialectique calcul et essais mécaniques [259].

Bon de nombre de couplages de techniques de transition peuvent être envisagés. Dans le cas des applications telles que les procédés de mise en forme, la méthode des éléments

finis (EF) est couramment employée à l'échelle structurale [236,257,259]. À chaque point de Gauss d'un élément discrétisant la structure métallique est affecté un agrégat de cristaux constitutifs (Figure 3.7). Les tenseurs mécaniques en ces points d'intégration sont calculés selon une technique d'homogénéisation donnée. Celle-ci est le plus souvent menée en champs moyens, notamment avec des modèles de type Lin-Taylor [257,259], ou encore des extensions sophistiquées du schéma auto-cohérent en non linéaire [259].

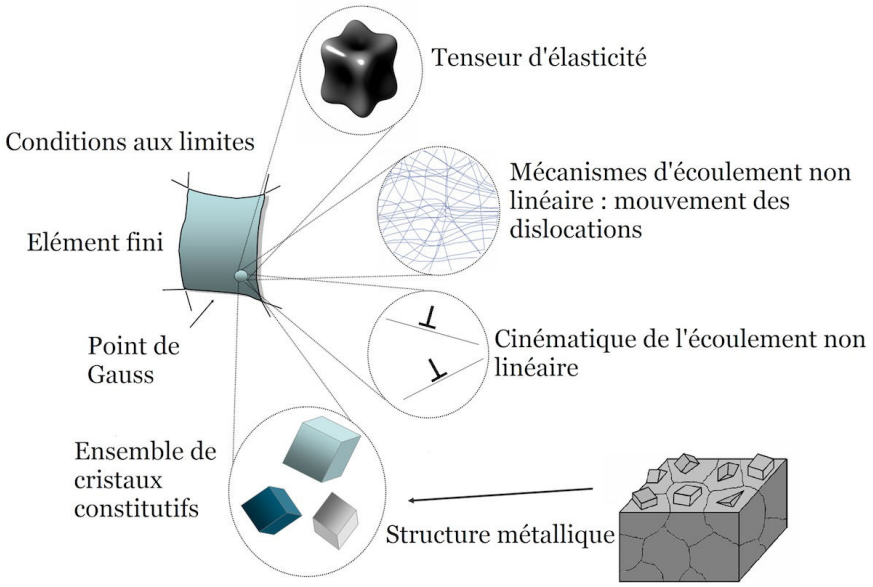


Figure 3.7 – Couplage de la méthode des éléments finis (EF) à une technique de transition d'échelle d'après [18]

Si les modèles en champs moyens ne permettent pas une prise en compte de la stéréologie de la structure interne du matériau, une approche en champs complets peut éventuellement être utilisé aux points de Gauss. Il est possible d'affecter un maillage « élémentaire » en chaque point d'intégration et d'effectuer une seconde homogénéisation par éléments finis (EF) [260–263]. Cette approche est connue sous l'appellation de la méthode EF^2. Dans ce contexte, l'étude menée par Han [263] confirme qu'au contraire de la méthode EF^2, une homogénéisation de type Lin-Taylor [212] a tendance à se rapprocher de la borne de Voigt [208] même dans une stratégie de couplage.

En terme de temps de calcul, il est évident que le coût du couplage de techniques de transition d'échelle est bien élevé. Celui-ci dépend essentiellement du nombre de cristaux constitutifs par point de Gauss qui est souvent de l'ordre de de quelques centaines .À noter également que d'autres paramètres sont liés au temps de calcul, comme le nombre d'éléments finis, la méthode d'homogénéisation, la loi de comportement locale ou encore le type de chargement... Peu d'études se sont penchées sur le temps de calcul pour des problèmes de couplage. Dans ce contexte, on peut citer l'investigation menée par Mellbin et al. [264] qui illustre la proportionnalité du temps de calcul par rapport au nombre de cristaux constitutifs affectés dans le cadre d'une transition d'échelle effectuée par un modèle de type Lin-Taylor [212]. Par ailleurs, cette étude [264] s'attache également à la comparaison

du temps de calcul selon l'algorithme de résolution numérique de la loi de comportement à l'échelle locale.

Malgré l'intérêt porté par le couplage de techniques de transition d'échelles, celui-ci n'est guère nécessaire dans le présent travail. On rappelle que le contexte s'attache à la localisation des champs mécaniques en surface de l'acier AISI H11. Par conséquent, à l'exception de la méthode EF^2, les couplages utilisant un modèle en champs moyen ne peuvent répondre à la problématique actuelle. Cependant, en raison du coût élevé et la mise en œuvre numérique assez complexe de la méthode EF^2 , il est judicieux d'opter pour une approche plus aisée pour la résolution du problème aux limites.

3.4 Modèles à gradients

Il est bien évident que les approches multi-physiques et multi-échelles se destinent à une prise compte des mécanismes élémentaires. Cependant, certains phénomènes physiques articulés autour du comportement non linéaire ne sont pas pris en compte dans quasiment l'ensemble des équations constitutives, phénoménologiques ou à base de densité de dislocations (cf. §3.2). Il s'agit de mécanismes de gradient de la déformation non linéaire, liés surtout aux longueurs internes, *i.e.* taille des cristaux constitutifs [247]. Selon la loi de Hall-Petch, un lien entre les longueurs internes et le comportement d'une structure métallique est bien mis en évidence. Celui-ci se traduit par un durcissement structural assez conséquent pour des cristaux constitutifs de faible taille, ce qui vaut à cet aspect l'effet de taille ou de longueurs internes. De ce fait, bon nombre de phénomènes élémentaires liés au gradient de la déformation non linéaire, *i.e.* l'effet de longueurs internes, peuvent affecter le comportement non linéaire global [247]. À titre d'exemple, l'effet de longueurs internes s'attache bien souvent aux mécanismes de micro-rotation du réseau cristallin, à l'origine de la génération des sous-joints de grains mais à certaines mécanismes de l'écrouissage isotrope. On note également que cet effet est bien présent dans la mécanique de la rupture des structures métalliques [265]. Selon Jones et Ashby [40], les phénomènes physiques élémentaires liés aux mécanismes de gradient du champ de déformation non linéaire s'attachent essentiellement à un type de dislocations dites « géométriquement nécessaires » ou encore « d'accommodation géométrique » opérant le plus souvent au niveau des joints de grains.

Si le fondement des équations constitutives dans §3.2 s'appuie essentiellement sur le mécanisme de mouvement ou de glissement des dislocations, celles-ci ne considèrent guère les dislocations d'accommodation géométrique [265]. Il s'agit de défauts relatifs à des dislocations statistiquement distribuées issues du processus d'accumulation d'interaction des dislocations lors de la déformation non linéaire. Celles-ci sont associées à un champs de déformation localement homogène et ne s'attachent aucunement aux mécanismes élémentaires tels que la micro-rotation du réseau. Par conséquent, le développement mathématique de ces modèles est effectué dans le milieu continu de Cauchy. Dans le contexte des modèles à gradients, *i.e.* prise en compte des longueurs internes, une extension voire une généralisation du milieu de Cauchy est nécessaire. On parle alors de milieux continus généralisés dans ce dernier cas [247].

L'extension du milieu continu de premier ordre, *i.e* de Cauchy, consiste en une simple

intégration de variables internes supplémentaires destinées à prendre en compte de l'effet de longueurs internes. Cette approche est utilisée dans un certain nombre de modèles, notamment dans celui de Fournier et al. [183] où une variable liée à la taille des blocs de lattes martensitiques est intégrée dans l'écrouissage cinématique. Par ailleurs, cette approche peut également être adoptée dans les modèles à base de densité de dislocations, où l'on peut citer le modèle ECP qui consiste en une extension du modèle de Tabourot et al. [176] en intégrant une variable de taille de grain dans l'écrouissage isotrope. À noter également que d'autres concepts peuvent être adoptés dans le cadre de l'extension du milieu de Cauchy, à savoir en intégrant explicitement une variable liée à densité de dislocations d'accommodation géométrique. Cette démarche est utilisée dans un certain nombre de modèles, notamment dans les références. Cependant, lors de l'utilisation de méthode des éléments finis (EF), ces modèles reviennent à traiter le milieu de Cauchy de base en raison d'une absence de degrés de liberté supplémentaires liés à l'accommodation géométrique des dislocations. De par ces limitations, la généralisation du milieu continu de Cauchy est souvent privilégiée [247].

La théorie des milieux continus généralisés consistent le plus souvent en l'apport de degrés de liberté supplémentaires indépendants par rapport de ceux du milieu de Cauchy [247]. Dans cette approche, les modèles à gradients se distinguent essentiellement en :

- milieux d'ordre supérieurs, notamment le milieu micromorphe.
- milieux de degrés supérieurs, à savoir les milieux de Cosserat et de second gradient.
- milieux à gradients de variables internes.

Les modèles de la théorie des milieux continus généralisés ne sont pas traités dans le présent travail. Le lecteur intéressé peut se référer aux études de Forest [247] pour une revue théorique détaillée de ces modèles et du développement de la théorie des milieux continus généralisés. À noter que les degrés de liberté rajoutés dans cette théorie s'attachent essentiellement à la micro-rotation ou encore au gradient de la déformation non linéaire du réseau cristallin permettant une prise en compte des effets de longueurs internes et ainsi de l'accommodation géométrique des dislocations [247]. De par la théorie des milieux continus généralisés, les effets d'échelles sont bien considérés. Les modèles à gradients se destinent essentiellement aux phénomènes de localisation que les modèles du milieu de Cauchy ne prévoient pas correctement [183]. Par ailleurs, selon Besson et al. [207], leur utilisation est bien pertinente dans le cadre de la théorie des transformations finies et surtout pour les structures à « gros » grains. Les modèles à gradients présentent toujours un domaine de recherche bien ouvert.

Dans le contexte de ce travail, étant donné à la taille assez faible des lattes martensitiques, l'accommodation géométrique des dislocations, *i.e.* l'effet des longueurs internes, est négligée. En outre, l'investigation expérimentale menée au préalable n'a pas permis de mettre en évidence de telles phénomènes. Par conséquent, le traitement numérique est effectué dans le cadre du milieu de Cauchy.

En résumé...

Le présent chapitre s'est consacré à une revue de modèles traitant le comportement anisotrope et hétérogène des structures métalliques. Dans le contexte actuel, il est évident que les approches phénoménologiques globales, notamment les modèles de type Hill [133–137]

ou de Barlat-Karafillis-Banabic [139–147] ne sont guère adéquats. Ces approches ne permettent pas une prise en compte du caractère hétérogène et anisotrope local et présentent bien souvent des anomalies quant à la prédiction du comportement non linéaire global. Le schéma permettant de contourner l'ensemble de ces anomalies consiste en une approche multi-physique et multi-échelle en vue d'une considération des mécanismes physiques élémentaires, *i.e.* mouvement des dislocations. Dans une telle approche, les équations constitutives sont écrites à une échelle locale, tandis que le comportement non linéaire global est déduit par le biais d'une technique de transition d'échelle.

Les équations constitutives à l'échelle locale se distinguent en celles qui sont fondées à partir des approches phénoménologiques et en celles qui s'appuient explicitement sur la densité de dislocations. Ces dernières, dites encore quasi-physiques, s'attachent à une prise en compte explicite des phénomènes physiques élémentaires, leurs valant une procédure d'identification des paramètres assez complexe à l'inverse des approches phénoménologiques. De même, les techniques de transition d'échelle peuvent également se distinguer en des approches en champs moyens et celles en champs complets. Si les approches en champs moyens se contentent uniquement de quelques informations nécessaires sur la structure interne du matériau, celles-ci peuvent être utilisées dans les procédures d'identification des paramètres du modèle multi-échelle. Cependant, bon nombre de modèles d'homogénéisation en champs moyens sont développés et diffèrent selon les techniques de linéarisation du comportement à l'échelle locale et globale. Les approches pouvant être utiles dans le présent contexte doivent tenir compte de certains aspects, à savoir le type de sollicitations.

La prise en compte de stéréologie de la structure interne du matériau et des hétérogénéités locales est bien évidente dans les modèles en champs complets. Dans de telles approches, la transformée de Fourier rapide (FFT) ne peut répondre au présent contexte. Celle-ci s'attache à des milieux et conditions aux limites périodiques. De ce fait, seul la méthode des éléments finis (EF) peut être envisagée en dépit de son coût. À noter également, qu'aucun couplage de techniques de transitions d'échelle n'est nécessaire dans le présent contexte.

Par ailleurs, bien que la tendance actuelle s'attache à une prise en compte de l'effet des longueurs internes traduit par les dislocations d'accommodation géométriques, celui-ci est par hypothèse négligé dans le présent contexte . À rappeler également que les modèles à gradients s'articulent le plus souvent autour de l'utilisation de la théorie des transformations finies.

Dans le contexte actuel, l'intérêt est essentiellement porté aux équations constitutives de Méric-Cailletaud [20, 21] à une échelle locale. Celles-ci s'apparentent bien aux modèles macroscopiques utilisés antérieurement par Velay [10], notamment les modèles 2M1C et de l'Onera [207]. Le modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] se destine en outre aux sollicitations complexes, *i.e.* quasi-statiques et cycliques. La procédure d'identification peut éventuellement être menée par le biais de techniques de champs moyens à partir de données macroscopiques. Cependant, en vue d'une investigation des champs mécaniques locaux, les approches en champs complets, notamment la méthode des éléments finies (EF), sont bien privilégiées.

Chapitre 4

Modélisation numérique des champs mécaniques locaux en surface

" Présentée sous forme mathématique, l'erreur acquiert un grand prestige. Le sceptique le plus endurci attribue volontiers aux équations de mystérieuses vertus."

Gustave Le Bon (1841-1931)

Sommaire

4.1 Modèles de comportement : approche thermodynamique . . . 122
4.1.1 Quelques aspects fondamentaux . . . 123
4.1.2 Formalisme thermodynamique des équations constitutives . . . 128
4.1.2.1 Potentiels énergie libre d'Helmholtz et lois d'état . . . 128
4.1.2.2 Potentiels des dissipations et équations d'évolution . . . 130
4.2 Intégration numérique des modèles . . . 133
4.2.1 Quelques aspects généraux : revue des schémas d'intégration numérique . . . 133
4.2.2 Algorithme d'intégration numérique . . . 136
4.2.3 Validation de l'algorithme d'intégration numérique . . . 142
4.3 Identification des paramètres du matériau . . . 144
4.3.1 Base de données expérimentales . . . 145
4.3.2 Procédure d'identification . . . 145
4.3.3 Résultats de l'identification . . . 148
4.4 Pré-traitement des calculs par éléments finis . . . 149
4.4.1 Génération de microstructure virtuelle . . . 149
4.4.2 Génération des orientations cristallographiques . . . 153
4.4.3 Procédure de maillage . . . 153
4.4.4 Définition des chargements . . . 155
4.4.5 Parallélisation des calculs . . . 156
4.5 Investigation des champs mécaniques locaux . . . 156
4.5.1 Cas du chargement monotone . . . 157

4.5.1.1 Effet de la morphologie des lattes en surface 157
4.5.1.2 Effet de la texture cristallographique en surface 164
4.5.1.3 Effet de l'écrouissage en surface 171
4.5.1.4 Effet du profil de surface 175
4.5.1.5 Effet de la forme des équations constitutives 180
4.5.2 Cas du chargement cyclique 182
4.5.2.1 Effet de la morphologie des lattes en surface 182
4.5.2.2 Effet de la texture cristallographique en surface 184
4.5.2.3 Effet de l'écrouissage en surface 186
4.5.2.4 Effet du profil de surface 188

En dépit de l'avènement de moyens expérimentaux bien avancés, la modélisation numérique constitue inéluctablement une voie complémentaire voire alternative à l'approche expérimentale permettant une quantification de certains mécanismes « non mesurables » par de tels moyens. Le présent chapitre se destine à une investigation numérique des champs mécaniques locaux en surface de l'acier AISI H11 via une modélisation multi-échelle dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations. Dans un premier point, le formalisme thermodynamique des modèles de comportement utilisés est présenté. La seconde partie s'attache au schéma d'intégration numérique de ces modèles et à sa validité. Celle-ci est suivie par l'identification des paramètres du matériau. La quatrième partie se consacre à la mise en place des calculs par éléments finis (EF), plus typiquement à la génération de microstructures virtuelles, des orientations cristallographiques, mais également à la procédure de maillage et la parallélisation des calculs. Enfin, dans un dernier point, les impacts d'un certain nombre de paramètres, à savoir la morphologie, les orientations cristallographiques des lattes, l'écrouissage ou encore le profil de surface, sur les champs mécaniques locaux en surface sont traités, et ce, lors de sollicitations quasi-statiques monotones et cycliques.

4.1 Modèles de comportement : approche thermodynamique

Dans le cadre d'un traitement numérique multi-échelle, il a été constaté au chapitre 3 que les équations constitutives locales à base de densité de dislocations requièrent une prise en compte explicite des phénomènes physiques élémentaires, leur valant une procédure d'identification des paramètres assez complexe. L'intérêt est alors porté aux approches phénoménologiques permettant également de rendre compte des mécanismes élémentaires articulés autour des mouvements de dislocations. À rappeler qu'à l'inverse des approches quasi-physiques, les modèles phénoménologiques résultent bien souvent de la théorie de la thermodynamique des processus irréversibles. Dans le présent contexte, on s'attache au formalisme thermodynamique du modèle dépendant du temps de Méric-Cailletaud [20, 21] et d'une version modifiée de celui-ci explicitant la signification physique de l'ensemble des variables thermodynamiques considérées.

Même si les équations constitutives de Méric-Cailletaud [20, 21] constituent un modèle de comportement local, les variables d'état interne, ou encore les équations de potentiels

thermodynamiques peuvent être écrites à diverses échelles. Cet aspect requiert une définition bien précise des échelles à considérer, qui est longuement restée assez « floue » jusqu'à présent. Partant du principe que de telles équations régissent les mécanismes articulés autour du mouvement de dislocations, il semble cohérent de définir l'échelle d'un système de glissement donnée s comme étant une échelle *micro*. En se basant sur le lemme de Hill-Mandel, le comportement global d'un matériau homogénéisé ne peut être obtenu qu'à une échelle *macro*. De ce fait, il convient d'attribuer cette définition à l'échelle du volume élémentaire représentative (VER). Enfin, une échelle intermédiaire *méso* est souvent attribuée à un cristal ou à un groupement d'un certain nombre de cristaux constitutifs proches. Dans le contexte actuel, on définit l'échelle d'une latte martensitique donnée comme étant une échelle *méso*[1]. Pour conclure, trois échelles $micro - méso - macro$ distinctes sont considérées pour la modélisation multi-échelle (Figure 5.1), liées par des techniques de transitions d'échelle.

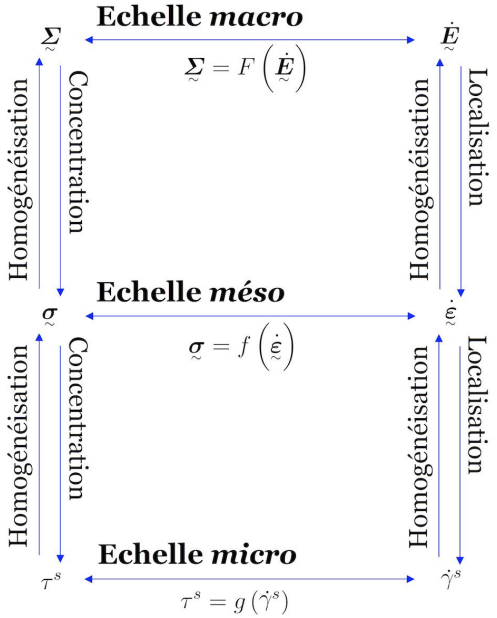


Figure 4.1 – Définition des diverses échelles concernées dans le traitement numérique

Dans ce qui suit, comme suite à quelques aspects fondamentaux pré-requis pour la mécanique des milieux continus, on se destine au formalisme thermodynamique multi-échelle dans le cadre d'une homogénéisation en champs complets (cf. §3.3.3) des équations constitutives du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée.

4.1.1 Quelques aspects fondamentaux

La présente discussion de la mécanique des milieux continus de Cauchy suit inéluctablement bon nombre d'ouvrages détaillant la théorie de la thermodynamique des processus

1. Aucune définition n'est attribuée aux échelles des paquets de lattes martensitiques et des anciens grains austénitiques. Celles-ci se situent entre les échelles *méso* et *macro*.

irréversibles, à savoir Germain [266], Truesdell [267], Nguyen, Lemaitre et Chaboche [197] ou encore Gurtin et al. [268]. Les études se destinent essentiellement au comportement non linéaire globale à l'échelle *macro*. Dans le contexte actuel, le formalisme thermodynamique à l'échelle *macro* intègre les variables d'état interne locales à l'échelle *méso* et peut éventuellement permettre une prise en compte de celles à l'échelle *micro*. On rappelle, en outre, que l'on se restreint à l'hypothèse des petites perturbations (HPP), *i.e.* une décomposition additive du tenseur de déformation totale :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{él} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in} \tag{4.1}$$

où $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{él}$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in}$ sont respectivement les tenseurs de déformation linéaire et non linéaire.

Principe des puissances virtuelles. Si l'on considère un domaine $\mathcal{D}$ d'un solide de référence Ω de vecteur unitaire normal $\underline{\boldsymbol{n}}$ à la surface $S = \partial\mathcal{D}$, la puissance virtuelle des efforts extérieurs $\mathcal{P}_{ext}$ appliqués à ce domaine résulte d'un terme volumique et d'un terme surfacique :

$$\mathcal{P}_{ext} = \int_{\mathcal{D}} \underline{\boldsymbol{f}} \cdot \underline{\boldsymbol{v}}' \, d\Omega + \int_{\partial\mathcal{D}} \underline{\boldsymbol{F}} \cdot \underline{\boldsymbol{v}}' \, dS \tag{4.2}$$

$\underline{\boldsymbol{f}}$ et $\underline{\boldsymbol{F}}$ étant respectivement les efforts extérieurs de volume et de surface. $\underline{\boldsymbol{v}}'$ représente le champs de vitesses virtuelles arbitraires continûment dérivables dans le domaine $\mathcal{D}$. Par ailleurs, la puissance virtuelle dissipée des efforts intérieurs $\mathcal{P}_{int}$ est donnée selon :

$$\mathcal{P}_{int} = -\int_{\mathcal{D}} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}' \, d\Omega \tag{4.3}$$

où $\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}'$ est le champs de vitesses virtuelles de déformations. En appliquant le théorème de Green-Ostrogradski, la relation (5.3) peut se transformer en :

$$\mathcal{P}_{int} = \int_{\mathcal{D}} \left(\underline{\operatorname{div}} \, \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \right) \cdot \underline{\boldsymbol{v}}' \, d\Omega - \int_{\partial\mathcal{D}} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} \right) : \underline{\boldsymbol{v}}' \, dS \tag{4.4}$$

Le principe des puissance virtuelles postule que dans un référentiel donné, la puissance virtuelle de l'ensemble des efforts extérieurs et intérieurs appliqués est nulle à chaque instant, et ce, pour tout mouvement virtuel considéré. De par ce postulat, les relations (4.1), (4.2) et (4.3) donnent l'égalité qui suit :

$$\int_{\mathcal{D}} \left(\underline{\operatorname{div}} \, \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\boldsymbol{f}} \right) \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{v}}' \, d\Omega - \int_{\partial\mathcal{D}} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} - \underline{\boldsymbol{F}} \right) \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{v}}' \, dS = 0 \tag{4.5}$$

À savoir que l'égalité (4.5) traduit l'équilibre mécanique local dans le solide de référence Ω, *i.e.* :

$$\underline{\operatorname{div}} \, \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\boldsymbol{f}} = 0 \tag{4.6}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} = \underline{\boldsymbol{F}} \tag{4.7}$$

Il est évident que le principe des puissances virtuelles ci-dessus est analogue à une formulation à une échelle *macro*. Cependant, dans le présent contexte, il également possible d'apporter une contribution des efforts à l'échelle *micro* dans la définition de la puissance virtuelle des efforts intérieurs $\mathcal{P}_{int}$ [268,269]. Si l'on suppose qu'on se place dans le contexte d'une élasticité *méso* linéaire, la puissance virtuelle $\mathcal{P}_{int}$ est donnée selon :

$$\mathcal{P}_{int} = -\int_{\mathcal{D}} \left\{ \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,:\, \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{e'} + \sum_{s=1}^{N_i} \pi^s \, \dot{\gamma}^{s'} \right\} d\Omega \tag{4.8}$$

où N_i est le nombre de système de glissement potentiellement activés et $\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{e'}$ le champs virtuel de déformation linéaire . π^s représente l'effort à l'échelle *micro* associée à la vitesse de cisaillement virtuelle d'un système s donnée $\dot{\gamma}^{s'}$. Considérant que la puissance des efforts extérieurs $\mathcal{P}_{ext}$ est inexistante et que le champs de déformation virtuelle totale $\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}'$ est nul, l'application du principe des puissances virtuelles conduit à l'annulation de celle des efforts intérieures $\mathcal{P}_{int}$ (4.8). Par ailleurs, de par les équations de la cinématique des systèmes de glissement permettant d'écrire (cf. §4.1.2.2) :

$$\underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{e'} = -\sum_{s=1}^{N_i} \dot{\gamma}^{s'} \, \mathrm{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) \tag{4.9}$$

il est en effet possible de donner une définition consistante de la cission résolue τ^s déjà présentée dans §3.2, *i.e.* :

$$\tau^s = \underline{\boldsymbol{n}}^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}^s = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,:\, \mathrm{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) \tag{4.10}$$

Plus typiquement, l'introduction des relations (4.9) et (4.10) dans (4.8) permet d'établir l'égalité qui suit :

$$\tau^s = \pi^s \tag{4.11}$$

De par la relation (4.11), il est évident que définition de la cission résolue est bien consolidée. Celle-ci qui n'est qu'autre que l'effort à l'échelle *micro* associé à la vitesse de cisaillement d'un système de glissement s donné. Dans ce qui suit, compte tenu du nombre de variables internes dans les modèles de comportement, la contribution de l'effort *micro* dans le principe des puissances virtuelles n'est pas considérée. Cependant, il est inhérent de noter qu'on postule bien la définition de la cission résolue τ^s donnée selon (4.10).

Premier et second principe de la thermodynamique des milieux continus de Cauchy. Outre la conservation de masse [2] et les équations d'équilibre, la troisième loi de la mécanique des milieux continus concerne la conservation de l'énergie. Celle-ci postule que la variation temporelle de l'énergie interne $\dot{\mathcal{E}}$ et celle de l'énergie cinétique (non considérée

2. Ce point n'est pas présenté ici et est considéré comme étant pré-requis à l'image des aspects fondamentaux traités dans ce paragraphe.

ici) dans le domaine $\mathcal{D}$ est donnée par la somme de la puissance des efforts extérieurs $\mathcal{P}_{ext}$ et la quantité de chaleur instantanée reçue $\dot{\mathcal{Q}}$:

$$\dot{\mathcal{E}} = \int_{\mathcal{D}} \varrho\, \dot{e}\, d\Omega = \mathcal{P}_{ext} + \dot{\mathcal{Q}} \tag{4.12}$$

ϱ étant la masse volumique du matériau et e l'énergie interne locale. À savoir que l'expression du taux de chaleur reçue $\dot{\mathcal{Q}}$ comporte deux termes associés respectivement aux chaleurs surfacique et volumique :

$$\dot{\mathcal{Q}} = \int_{\mathcal{D}} r\, d\Omega - \int_{\partial\mathcal{D}} \underline{\boldsymbol{q}} \,:\, \underline{\boldsymbol{n}}\, dS = \int_{\mathcal{D}} \left(r - \operatorname{div} \underline{\boldsymbol{q}}\right)\, d\Omega \tag{4.13}$$

r et $\underline{\boldsymbol{q}}$ étant respectivement la source de chaleur volumique et le vecteur de transfert de chaleur. En tenant compte du principe des puissances virtuelles, la variation temporelle de l'énergie interne $\dot{\mathcal{E}}$ (4.12) peut se transformer en une somme du taux de chaleur reçue et celui de l'énergie spécifique aux forces intérieures, *i.e.* :

$$\dot{\mathcal{E}} = \int_{\mathcal{D}} \varrho\, \dot{e}\, d\Omega = \int_{\mathcal{D}} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,:\, \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}} + r - \operatorname{div} \underline{\boldsymbol{q}}\right)\, d\Omega \tag{4.14}$$

Le second principe de la thermodynamique des milieux continus de Cauchy postule que la variation temporelle de l'entropie interne $\dot{\mathcal{S}}$ dans le domaine $\mathcal{D}$ à une température T donnée représente une borne supérieure de la chaleur instantanée reçue $\dot{\mathcal{Q}}$:

$$\dot{\mathcal{S}} = \int_{\mathcal{D}} \varrho\, \dot{\mathfrak{s}}\, d\Omega \geq \frac{\dot{\mathcal{Q}}}{T} \tag{4.15}$$

À savoir qu'en utilisant le théorème de divergence de Green-Ostrogradski, la relation (4.15) se transforme en :

$$\int_{\mathcal{D}} \left(\varrho\, \dot{\mathfrak{s}} - \frac{r}{T} + \operatorname{div}\left(\frac{\underline{\boldsymbol{q}}}{T}\right)\right)\, d\Omega \geq\, 0 \tag{4.16}$$

Considérant l'énergie libre d'Helmholtz $\psi = e - T\mathfrak{s}$, la combinaison du premier (4.14) et du second principe (4.16) de la thermodynamique des milieux continus permet l'inégalité locale de Clausius-Duhem :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,:\, \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}} - \varrho\, \left(\dot{\psi} + \mathfrak{s}\dot{T}\right) - \frac{1}{T}\, \underline{\boldsymbol{q}} \,.\, \underline{\boldsymbol{\nabla}}\,(T) \geq\, 0 \tag{4.17}$$

Méthode de l'état local du processus irréversible de la thermodynamique des milieux continus. La méthode de l'état local postule que la réponse du milieu continu, à un instant t donné, s'attache à un ensemble de paires de variables thermodynamiques correspondant aux éléments de matière du domaine $\mathcal{D}$. À savoir que chaque paire de ces variables est définie par un couple de variables d'état interne et force associée duale. De ce fait, l'ensemble des fonctions d'état, notamment l'énergie libre d'Helmholtz ou tout autre potentiel thermodynamique, sont des fonctions convexes de ces variables internes. Si l'on considère que l'énergie libre d'Helmholtz ψ est fonction de la déformation linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{él}$, des

variables d'état ς_I caractérisant le système du milieu continu et la température T, l'évolution temporelle dans l'espace des déformations [3] de celle-ci est donnée selon :

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{él} \; : \; \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{él} + \frac{\partial \psi}{\partial \varsigma_I} \dot{\varsigma}_I + \frac{\partial \psi}{\partial T} \dot{T} \tag{4.18}$$

Tenant compte du caractère additif du tenseur de déformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$ (4.1), l'intégration de la relation (4.18) dans (4.17) permet d'écrire l'inégalité de Clausius-Duhem selon :

$$\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \varrho \frac{\partial \psi}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} \right) \; : \; \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{él} - \varrho \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} + \mathfrak{s} \right) \dot{T} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \; : \; \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{in} - \varrho \frac{\partial \psi}{\partial \varsigma_I} \dot{\varsigma}_I - \frac{1}{T} \underline{\boldsymbol{q}} \, . \, \nabla (T) \geq 0 \tag{4.19}$$

Pour une compatibilité du processus thermodynamique avec les lois d'équilibre de la mécanique des milieux continus, les coefficients associés aux dérivées temporelles $\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{él}$ et $\dot{T}$ doivent être nuls, *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} = \varrho \frac{\partial \psi}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} \tag{4.20}$$

$$\mathfrak{s} = - \frac{\partial \psi}{\partial T} \tag{4.21}$$

La relation (4.19) permet en outre l'introduction de variables forces A_I duales aux variables d'état interne ς_I et homogènes à une contrainte. Celles-ci sont données selon :

$$A_I = \varrho \frac{\partial \psi}{\partial \varsigma_I} \tag{4.22}$$

Par ailleurs, dès lors qu'un élément de matière du domaine $\mathcal{D}$ se retrouve en dehors du domaine de réversibilité linéaire, l'inégalité résiduelle de Clausius-Duhem donne la puissance dissipée transformée en chaleur Θ. À savoir que celle-ci est toujours définie positive et s'articule bien souvent autour d'une origine mécanique intrinsèque et d'une source thermique :

$$\Theta = \underbrace{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \; : \; \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{in} - A_I \dot{\varsigma}_I}_{\text{Dissipation intrinsèque}} \quad \underbrace{- \frac{1}{T} \underline{\boldsymbol{q}} \, . \, \nabla (T)}_{\text{Dissipation thermique}} \geq 0 \tag{4.23}$$

Il est bien évident que l'approche thermodynamique des processus irréversibles est assez intéressante par son caractère inverse, elle permet d'associer un certain nombre de mécanismes physiques élémentaires aux phénomènes de dissipation. En pratique, ces mécanismes élémentaires sont à incorporer dans le formalisme thermodynamique via des variables d'état interne ς_I. Les équations d'évolution du modèle sont données par les potentiels d'énergie libre, *i.e.* d'Helmholtz, et éventuellement ceux des phénomènes de dissipation. L'incorporation de ces variables d'état interne associées aux mécanismes élémentaires considérés dans les diverses équations traités précédemment permet la définition d'un cadre thermodynamique admissible du modèle.

3. Si l'on considère l'espace des contraintes, le formalisme thermodynamique est donnée selon l'énergie libre de Gibbs déduite de celle d'Helmholtz par la transformation de Legendre-Fenchel.

4.1.2 Formalisme thermodynamique des équations constitutives

À l'issue de ces quelques aspects fondamentaux, le présent paragraphe est consacré au formalisme thermodynamique multi-échelle du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] suivie d'une formulation modifiée. L'incorporation des variables d'état interne est effectuée aux échelles appropriées $micro-méso-macro$ dans les potentiels énergie libre d'Helmholtz, de dissipation et éventuellement dans les fonctions d'écoulement non linéaire. On rappelle que ces modèles s'inscrivent dans le cadre des approches dépendantes du temps (cf. §3.2.2), en vue d'un contournement des artefacts numériques. Les évolutions temporelles des diverses variables d'état interne sont issues des relations de potentiels thermodynamiques. Les mécanismes élémentaires considérés s'attachent essentiellement aux phénomènes d'écrouissage isotrope, *i.e.* évolution de la densité de dislocations, mais également à l'effet de Bauschinger, conséquence de l'interaction avec les carbures (cf. §1.2.4.3).

4.1.2.1 Potentiels énergie libre d'Helmholtz et lois d'état

Si l'on considère l'échelle *macro*, l'énergie libre d'Helmholtz peut être prise comme un potentiel donné selon la somme des énergies libres à l'échelle *méso*, *i.e.* :

$$\varrho\,\hat{\psi}\left(\left\langle \underset{\sim}{\varepsilon}^{él}\right\rangle_{\Omega},\varsigma_I\right)=\varrho\,\hat{\psi}_{él}\left(\left\langle \underset{\sim}{\varepsilon}^{él}\right\rangle_{\Omega}\right)+\varrho\,\hat{\psi}_{in}\left(\varsigma_I\right) \tag{4.24}$$

$$=\sum_{i=1}^{N}\left\{\varrho\,\hat{\psi}^{i}_{él}\left(\underset{\sim}{\varepsilon}^{él}\right)+\varrho\,\hat{\psi}^{i}_{in}\left(\rho^s,\,\alpha^s\right)\right\} \tag{4.25}$$

N étant le nombre de lattes martensitiques dans le volume Ω. Compte tenu des mécanismes physiques élémentaires pris en compte, les variables ς_I comportent celles de l'écrouissage isotrope ρ^s et cinématique α^s. Un indice s leur est affecté pour noter que celles-ci sont écrites à l'échelle *micro*, *i.e.* au niveau du système de glissement considéré. $\left\langle \underset{\sim}{\varepsilon}^{él}\right\rangle_{\Omega}$ est la moyenne des tenseurs de déformation élastique $\underset{\sim}{\varepsilon}^{él}$ dans le volume Ω. Par ailleurs, on rappelle que l'acier AISI H11 est de structure cubique centrée CC. Le tenseur d'élasticité $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}$ d'une telle structure est alors donné selon :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}=\Lambda_{ijkl}=\begin{pmatrix}\Lambda_{1111} & \Lambda_{1122} & \Lambda_{1122} & 0 & 0 & 0\\ \Lambda_{1122} & \Lambda_{1111} & \Lambda_{1122} & 0 & 0 & 0\\ \Lambda_{1122} & \Lambda_{1122} & \Lambda_{1111} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \Lambda_{1212} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda_{1212} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda_{1212}\end{pmatrix} \tag{4.26}$$

Le caractère anisotrope du tenseur d'élasticité $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}$ est mis en évidence par une valeur bien plus importante que l'unité du paramètre $\mathfrak{a}$ qui est donnée par :

$$\mathfrak{a}=\frac{2\,\Lambda_{1212}}{\Lambda_{1111}-\Lambda_{1122}} \tag{4.27}$$

Dans le contexte actuel, l'hypothèse du comportement linéaire isotrope est considérée, *i.e.* une valeur de $\mathfrak{a}$ égale à l'unité. Celle-ci est justifiée par l'incapacité des essais de nanoindentation menés dans §1.3.2 à mettre en évidence le caractère anisotrope du comportement linéaire local. De par cette hypothèse, le tenseur d'élasticité (4.26) peut être réduit à un scalaire, plus typiquement au module d'Young à l'échelle *macro* Λ. Par ailleurs, la relation (4.24) peut être réécrite de la manière qui suit :

$$\varrho\,\hat{\psi}\left(\left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\acute{e}l}\right\rangle_{\Omega},\,\rho^s,\,\alpha^s\right)=\varrho\,\hat{\psi}_{\acute{e}l}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\acute{e}l}\right)+\sum_{i=1}^{N_i}\varrho\,\hat{\psi}^i_{in}\,(\rho^s,\,\alpha^s) \tag{4.28}$$

Les potentiels énergie libre d'Helmholtz ψ^i_{in} associés au comportement non linéaire, écrits à l'échelle *méso* dans la relation (4.28), incluent les mécanismes d'écrouissage isotrope et cinématique à l'échelle *micro* selon :

$$\hat{\psi}^i_{in}\,(\rho^s,\,\alpha^s)=\frac{1}{2}\,C\sum_{s=1}^{N_s}(\alpha^s)^2+\frac{1}{2}\,b\,Q\sum_{s=1}^{N_s}\sum_{r=1}^{N_s}h^{sr}\,\rho^r\,\rho^s \tag{4.29}$$

C et Q étant des paramètres du matériau associés respectivement aux capacités d'écrouissage cinématique et isotrope. À rappeler également que b caractérise la vitesse d'écrouissage isotrope et N est le nombre de systèmes de glissement potentiellement activés. Dans le contexte actuel, il a été décidé considérer deux familles de systèmes associés aux mécanismes « easy glide » et « pencil glide » (cf. §1.2.4.3), *i.e.* $\{1\,1\,0\}\,\langle 1\,1\,1\rangle$ et $\{1\,1\,2\}\,\langle 1\,1\,1\rangle$. La matrice d'interaction $[h]$ est donc de dimensions 24×24 contenant huit coefficients h_i répartis symétriquement selon $[177, 252, 270]$:

$$[h]=\begin{pmatrix}
 & A1 & B1 & C1 & G1 & H1 & I1 & D2 & E2 & C2 & J2 & K2 & L2 & D3 & B3 & F3 & M3 & N3 & O3 & A4 & E4 & F4 & P4 & Q4 & R4\\
A1 & h_8 & h_2 & h_2 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
B1 & h_2 & h_8 & h_2 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
C1 & h_2 & h_2 & h_8 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
G1 & h_3 & h_3 & h_3 & h_1 & h_6 & h_6 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
H1 & h_3 & h_3 & h_3 & h_6 & h_1 & h_6 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
I1 & h_3 & h_3 & h_3 & h_6 & h_6 & h_1 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
D2 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_8 & h_2 & h_2 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
E2 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_2 & h_8 & h_2 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
C2 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_2 & h_2 & h_8 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
J2 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_1 & h_6 & h_6 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
K2 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_6 & h_1 & h_6 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
L2 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_6 & h_6 & h_1 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
D3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_8 & h_2 & h_2 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
B3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_2 & h_8 & h_2 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
F3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_2 & h_2 & h_8 & h_3 & h_3 & h_3 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5\\
M3 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_1 & h_6 & h_6 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
N3 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_6 & h_1 & h_6 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
O3 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_6 & h_6 & h_1 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7\\
A4 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_8 & h_2 & h_2 & h_3 & h_3 & h_3\\
E4 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_2 & h_8 & h_2 & h_3 & h_3 & h_3\\
F4 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_4 & h_4 & h_4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_2 & h_2 & h_8 & h_3 & h_3 & h_3\\
P4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_1 & h_6 & h_6\\
Q4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_6 & h_1 & h_6\\
R4 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_5 & h_5 & h_5 & h_7 & h_7 & h_7 & h_3 & h_3 & h_3 & h_6 & h_6 & h_1
\end{pmatrix} \tag{4.30}$$

où l'ensemble des systèmes de glissement des familles $\{1\,1\,0\}\,\langle 1\,1\,1\rangle$ et $\{1\,1\,2\}\,\langle 1\,1\,1\rangle$ sont donnés via les notations de Schmid-Boas dans la relation (4.30). Le Tableau 4.1 présente l'équivalence des notations de Schmid-Boas et celles de Miller des systèmes considérés.

Tableau 4.1 – Équivalence des notations de Schmid-Boas et celles de Miller

Schmid-Boas	A1	B1	C1	G1	H1	I1	D2	E2	C2	J2	K2	L2
Plan $\underline{\boldsymbol{l}}^s$	$(1\bar{1}0)$	$(10\bar{1})$	$(01\bar{1})$	$(11\bar{2})$	$(1\bar{2}1)$	$(\bar{2}11)$	(110)	(101)	$(01\bar{1})$	$(1\bar{1}2)$	$(12\bar{1})$	(211)
Direction $\underline{\boldsymbol{n}}^s$	$[111]$	$[111]$	$[111]$	$[111]$	$[111]$	$[111]$	$[\bar{1}11]$	$[\bar{1}11]$	$[\bar{1}11]$	$[\bar{1}11]$	$[\bar{1}11]$	$[\bar{1}11]$
Schmid-Boas	D3	B3	F3	M3	N3	O3	A4	E4	F4	P4	Q4	R4
Plan $\underline{\boldsymbol{l}}^s$	(110)	$(10\bar{1})$	(011)	$(1\bar{1}\bar{2})$	(112)	$(\bar{2}\bar{1}1)$	$(1\bar{1}0)$	(101)	(011)	$(\bar{1}\bar{1}\bar{2})$	$(\bar{1}21)$	$(2\bar{1}1)$
Direction $\underline{\boldsymbol{n}}^s$	$[1\bar{1}1]$	$[1\bar{1}1]$	$[1\bar{1}1]$	$[1\bar{1}1]$	$[1\bar{1}1]$	$[1\bar{1}1]$	$[11\bar{1}]$	$[11\bar{1}]$	$[11\bar{1}]$	$[11\bar{1}]$	$[11\bar{1}]$	$[11\bar{1}]$

De par les relations des potentiels énergie libre d'Helmholtz (4.28) et (4.29), il est assez aisé de dériver les expressions des variables forces thermodynamiques associées. Compte tenu de l'hypothèse du caractère isotrope du comportement linéaire, l'expression du tenseur de contrainte de Cauchy à l'échelle *macro* $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}}$ est donnée selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} = \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \right\rangle_\Omega = \frac{\varrho\, \partial \hat{\psi}_{él} \left(\left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{él} \right\rangle_\Omega \right)}{\partial \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{él} \right\rangle_\Omega} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} \,:\, \left\langle \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{él} \right\rangle_\Omega \tag{4.31}$$

D'une manière analogue, les variables forces thermodynamiques associées aux mécanismes d'écrouissage r^s isotrope et cinématique χ^s à l'échelle *micro* ont pour expressions :

$$r^s = \varrho \frac{\partial \hat{\psi}^i_{in}\ (\rho^s,\, \alpha^s)}{\partial \rho^s} = b\, Q \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr}\, \rho^r \tag{4.32}$$

$$\chi s = \varrho \frac{\partial \hat{\psi}^i_{in}\ (\rho^s,\, \alpha^s)}{\partial \alpha^s} = C\, \alpha^s \tag{4.33}$$

Les relations (4.32) et (4.33) mettent en évidence que la matrice d'interaction $\underset{\sim}{\boldsymbol{h}}$ possède uniquement un impact sur l'écrouissage isotrope. Les mécanismes d'écrouissage cinématique considérés sont en effet localisés à l'échelle du système de glissement (coalescence des carbures) et ne sont guère affectés par l'interaction des divers systèmes.

4.1.2.2 Potentiels des dissipations et équations d'évolution

En vue d'obtenir la loi d'écoulement non linéaire du modèle de Méric-Cailletaud [20,21], il convient de poser un potentiel viscoplastique Ω de type de Norton à l'échelle *méso* comme étant une somme de l'ensemble des potentiels Ω_s à l'échelle *micro* :

$$\Omega = \sum_{s=1}^{N_s} \Omega_s = \sum_{s=1}^{N_s} \frac{K}{n+1} \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^{n+1} \tag{4.34}$$

où K et n sont des paramètres de viscosité. f^s est la fonction de charge du système de glissement s. Dans le cas du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21], celle-ci est donnée selon :

$$f^s = |\tau^s - \chi^s| - r^s - \tau_0^s \tag{4.35}$$

Par ailleurs, en vue de compléter le modèle, on admet également le potentiel d'écoulement non linéaire qui suit :

$$F^s = f^s + b\,\rho^s\,r^s + d\,\alpha^s\,\chi^s \tag{4.36}$$

d étant un paramètre associé à la vitesse d'écrouissage cinématique. De par les relations (4.34) et (4.35), les équations d'évolution des variables d'état internes articulés autour des mécanismes élémentaires à l'échelle *micro* peuvent être déduites assez aisément. À noter que la non linéarité d'évolution des variables liés aux phénomènes d'écrouissage $\dot{\rho}^s$ et $\dot{\alpha}^s$ fait appel à la théorie de la plasticité non associée [4]. De ce fait, les équations d'évolution des variables d'état internes du modèle de Méric-Cailletaud sont données selon :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\lambda}^s\,\frac{\partial F^s}{\partial \tau^s} = \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^n\,(\tau^s - \chi^s) = \dot{v}^s\,sign\,(\tau^s - \chi^s) \tag{4.37}$$

$$\dot{\rho}^s = -\dot{\lambda}^s\,\frac{\partial F^s}{\partial r^s} = (1 - b\,\rho^s)\;\dot{v}^s \tag{4.38}$$

$$\dot{\alpha}^s = -\dot{\lambda}^s\,\frac{\partial F^s}{\partial \chi^s} = (\mathrm{sign}\,(\tau^s - \chi^s) - d\,\alpha^s)\;\dot{v}^s \tag{4.39}$$

où $\dot{\lambda}^s$ est définie comme étant un « multiplicateur viscoplastique » et peut être dérivée d'un potentiel viscoplastique Ω_s à l'échelle *micro*, *i.e.* :

$$\dot{\lambda}^s = \frac{\partial \Omega_s}{\partial f^s} \tag{4.40}$$

De même, tenant compte de la définition de la cission résolue τ^s (4.10), le taux d'évolution de la déformation non linéaire à l'échelle *méso* est donnée par :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{in} = \sum_{s=1}^{N_i} \dot{\lambda}^s\,\frac{\partial f^s}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s\;\mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s) \tag{4.41}$$

Compte tenu du fait qu'aucune sollicitation thermique n'est considérée, la puissance dissipé Θ (4.23) est réduite aux termes de la dissipation mécanique intrinsèque. De par les équations d'évolutions des variables d'état internes et variables (4.37), (4.38) et (4.39) et celles des forces thermodynamiques associées (4.10), (4.32) et (4.33), la dissipation intrinsèque peut être réécrite :

$$\Theta = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \;:\; \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{in} - \sum_{s=1}^{N_s} \chi^s\,\dot{\alpha}^s - \sum_{s=1}^{N_s} r^s\,\dot{\rho}^s \tag{4.42}$$

$$= \sum_{s=1}^{N_s} (\tau^s\,\dot{\gamma}^s - \chi^s\;(\mathrm{sign}\,(\tau^s - \chi^s) - d\,\alpha^s)\;\dot{v}^s - r^s\;(1 - b\,\rho^s)\;\dot{v}^s) \tag{4.43}$$

$$= \sum_{s=1}^{N_s} \left(f^s + \tau_0^s + \frac{d}{C}\;(\chi^s)^2 + b\,r^s\,\rho^s \right)\;\dot{v}^s \tag{4.44}$$

4. Dans le présent contexte, l'usage de la théorie des matériaux standards généralisés peut éventuellement être envisagé. Pour ce faire, il convient d'utiliser le potentiel d'écoulement non linéaire F^s (4.36) au lieu de la surface de charge f^s dans l'expression de Ω_s (4.34).

Selon Besson et al., la relation (4.44) met en évidence certains phénomènes physiques élémentaires associés à chaque terme constitutif du membre à droite. Ces derniers termes s'articulent respectivement autour de la dissipation visqueuse, des mécanismes de frottement, mais également autour des phénomènes de non-linéarité de l'écrouissage cinématique et isotrope.

Si le modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] est fondé sur une approche additive de la loi d'écoulement non linéaire (4.35) et (4.36), la version modifiée propose une approche multiplicative de celle-ci en l'absence totale d'une surface de charge. Pour ce faire, il convient de postuler la loi d'écoulement non linéaire de type de Hutchinson [171] évoquée dans §3.2.2 en tant que multiplicateur viscoplastique, *i.e.* :

$$\dot{\lambda}^s = \left| \frac{\tau^s - \chi^s}{\tau_0^s + r^s} \right|^n = \dot{\upsilon}^s \tag{4.45}$$

La fonction de charge f^s qui sert de paramètre dans le potentiel d'écoulement non linéaire F^s est adaptée en vue d'une prise en compte du caractère multiplicatif de la version modifiée, *i.e.* :

$$f^s = \text{sign}\left(\frac{\tau^s - \chi^s}{\tau_0^s + r^s}\right)(\tau^s - \chi^s) - r^s - \tau_0^s \tag{4.46}$$

L'absence de la surface d'écoulement non linéaire est traduite par l'élimination de la fonction de Macaulay. Ceci implique que l'on suppose que l'ensemble des systèmes de glissement sont initialement activés. Le Tableau 4.2 récapitule l'ensemble des équations constitutives de base du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée.

Tableau 4.2 – Récapitulatif des équations constitutives du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée

Modèle de Méric-Cailletaud	Modèle de Méric-Cailletaud modifié
$\dot{\gamma}^s = \dot{\upsilon}^s \ \text{sign}\,(\tau^s - \chi^s)$	$\dot{\gamma}^s = \dot{\upsilon}^s \ sign\left(\frac{\tau^s - \chi^s}{\tau_0^s + r^s}\right)$
$\dot{\upsilon}^s = \left\langle \frac{\lvert\tau^s - \chi^s\rvert - r^s - \tau_0^s}{K} \right\rangle^n$	$\dot{\upsilon}^s = \left\lvert \frac{\tau^s - \chi^s}{\tau_0^s + r^s} \right\rvert^n$
$\tau^s = \underline{\boldsymbol{n}}^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}^s$	$\tau^s = \underline{\boldsymbol{n}}^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}^s$
$r^s = b\,Q \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr}\,\rho^r$	$r^s = b\,Q \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr}\,\rho^r$
$\chi^s = C\,\alpha^s$	$\chi^s = C\,\alpha^s$
$\dot{\rho}^s = (1 - b\,\rho^s)\ \dot{\upsilon}^s$	$\dot{\rho}^s = (1 - b\,\rho^s)\ \dot{\upsilon}^s$
$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\,\alpha^s\,\dot{\upsilon}^s$	$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\,\alpha^s\,\dot{\upsilon}^s$
$\Theta = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{in} - \sum_{s=1}^{N_s} \chi^s\,\dot{\alpha}^s - \sum_{s=1}^{N_s} r^s\,\dot{\rho}^s$	$\Theta = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{in} - \sum_{s=1}^{N_s} \chi^s\,\dot{\alpha}^s - \sum_{s=1}^{N_s} r^s\,\dot{\rho}^s$

Il est en outre intéressant de rappeler que la variable d'écrouissage isotrope , r^s peut

être réécrite sous forme intégrée de par la combinaison des relations (4.32) et (4.38), *i.e.* :

$$r^s = Q \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr} \left(1 - \exp\left(-b\, v^r\right)\right) \tag{4.47}$$

$$v^s = \int_0^t \dot{v}^s \, dt \tag{4.48}$$

L'usage d'une telle forme intégrée peut être lié à sa résolution numérique assez aisée. Cependant, du fait qu'elle soit indépendante de la variable d'état interne ρ^s, le calcul de la dissipation intrinsèque et de la contribution des mécanismes élémentaires associés ne peut être effectué d'une manière directe et des approximations sont alors à mettre en place. Ce point est traité dans ce qui suit.

4.2 Intégration numérique des modèles

La présente partie est dédiée au traitement numérique des équations constitutives formulées ci-dessus (Tableau 4.2). À l'issue de quelques aspects généraux où l'on traite une revue rapide des schémas d'intégration numérique [5], on s'attache à décrire l'algorithme d'intégration de ces équations dans un formalisme tensoriel tridimensionnel. Cette analyse permet le développement de ces modèles dans une routine utilisateur UMAT au sein du code de calcul par éléments finis (EF) Abaqus/Standard en considérant l'hypothèse des petites perturbations (HPP). La validation de l'algorithme numérique est effectuée par une confrontation des résultats obtenus avec ceux fournis par la librairie Z-MAT du code Z-Set/Zébulon pour des cas de simulations similaires.

4.2.1 Quelques aspects généraux : revue des schémas d'intégration numérique

Si l'usage du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] permet le contournement des ambiguïtés numériques liées aux approches indépendantes du temps (cf. §3.2.2), celui-ci peut également être articulé autour de certains artefacts numériques lorsque l'on s'intéresse au comportement non linéaire à température ambiante. Plus typiquement, si l'on traite un modèle multi-échelle élasto-viscoplastique comme étant une limite d'une approche indépendante du temps, le schéma numérique est le plus souvent mal conditionné et le processus de recherche des solutions les plus pertinents est très instable. De ce fait, une tendance actuelle accrue s'attache à la réduction du coût de résolution des modèles multi-échelles mais surtout à rendre robuste les algorithmes de traitement numérique.

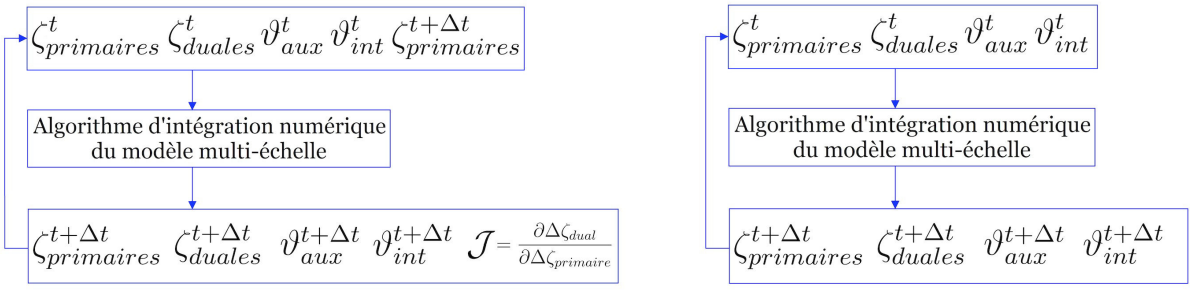
Un schéma d'intégration numérique d'un modèle multi-échelle se destine essentiellement au calcul des variables d'intégration ϑ^{int}, auxiliaires [6] ϑ^{aux} et duales ζ^{duales} liées à celles d'état internes $\zeta^{primaires}$, dites également primaires, à l'instant t considéré (Figure 4.2). À noter que dans un contexte où l'on utilise la méthode des éléments finis (EF) basé sur le

5. La présente revue des schémas d'intégration numérique traite essentiellement les modèles formulées dans le cadre de la théorie des transformations finies.

6. Les variables auxiliaires ϑ^{aux} sont l'ensemble des variables traitées en post-traitement.

champs de déplacement [7], la variable duale consiste le plus souvent à considérer le tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ associé au tenseur de déformation donné $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Par ailleurs, dès lors un schéma implicite du code de calcul par éléments finis est utilisé pour la résolution des équations d'équilibre mécanique global, le calcul de la matrice jacobienne $\mathcal{J}$ est alors nécessaire (Figure 4.2a) contrairement à un schéma explicite (Figure 4.2b). Celle-ci est donnée selon :

$$\mathcal{J} = \frac{\partial \Delta \zeta^{dual}}{\partial \Delta \zeta^{primaire}} \tag{4.49}$$



(a) Résolution implicite par EF

(b) Résolution explicite par EF

Figure 4.2 – Schématisation des données d'entrée et de sortie d'un algorithme d'intégration d'un modèle multi-échelle selon le type du solveur du code de calcul par éléments finis (EF)

Il est assez évident que bon nombre de variables d'état interne, ou éventuellement duales peuvent être utilisées en tant que variables d'intégration ϑ_{int}. Dans le contexte de la modélisation multi-échelle, certains algorithmes utilisent le tenseur des contraintes de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ [274–276], voire éventuellement le tenseur des contraintes de Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}$ [257, 259, 277] ou le tenseur des secondes contraintes de Piola-Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{T}}$ [201], comme principal inconnu. D'autres schémas de résolution numérique, notamment celui de Sarma et Zacharia [278], utilisent le tenseur de gradient de transformation linéaire [8] $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e$, mais également le tenseur de gradient de transformation plastique $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$, notamment dans l'algorithme proposé par Maniatty et al. [279, 280], comme variable d'intégration. En outre, certains algorithmes optent essentiellement pour les vitesses de cisaillement des systèmes de glissement $\dot{\gamma}^s$ comme inconnues [21, 181].

Si l'ensemble de ces algorithmes s'appuient sur des méthodes itératives de type Newton-Raphson, l'usage de variables d'intégrations ϑ_{int} autres que les vitesses de cisaillement se justifie le plus souvent par les dimensions de la matrice jacobienne à inverser. À noter que celle-ci a pour dimensions 9×9 lorsqu'un tenseur de gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e$, ou éventuellement $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ est utilisé, et 6×6 pour tout type de tenseur de contrainte. Dans le contexte où la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ est utilisée, les dimensions de la matrice jacobienne

7. On renvoie le lecteur intéressé par la résolution de problèmes aux limites non linéaires par la méthode des éléments finis aux références [271–273].

8. Les notions de gradient des transformations élastique et plastique sont traités dans le §5.1.

sont alors bien plus importantes et peuvent être bien au-delà de 48×48, si l'on considère des mécanismes élémentaires tel que le maclage pour certaines structures. Cependant, en dépit des dimensions réduites de la matrice jacobienne, la convergence du schéma numérique n'est guère évidente en raison de non linéarités conséquentes des équations constitutives, et plus typiquement des équations d'écoulement non linéaire viscoplastique [9] (4.37). Plus concrètement, de telles équations sont sensibles aux valeurs des contraintes calculées ou des tenseurs de gradient de transformation : de faibles perturbations de ces valeurs entraînent le plus souvent des variations conséquentes des vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$. Par conséquent, en vue de consolider la pertinence des solutions recherchées, l'usage de variables d'intégrations ϑ_{int} autres que les vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ oblige alors à effectuer une seconde procédure itérative de type Newton-Raphson. La seconde résolution numérique s'attache bien souvent à des variables internes aux équations d'écoulement non linéaire, notamment les vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ ou éventuellement les variables d'écrouissage isotrope r^s. Il est donc assez évident qu'outre la complexité de leur mise en œuvre, le coût de telles approches est bien conséquent.

À l'inverse de ces dernières approches, l'intégration des équations constitutives par le biais des vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ en tant que variables d'intégration ϑ_{int} n'a guère besoin d'une seconde procédure itérative. Cependant, en raison des non linéarités bien conséquentes des relations (4.37), (4.38) et (4.39), l'assurance de la convergence du schéma numérique est assez délicate. Pour ce faire, certaines modifications, notamment celles proposées par Méric et Cailletaud [20, 21] ou encore Cuitiño et Ortiz [181], peuvent être menées sur le système d'équations à résoudre (cf. §4.2.2). Un autre algorithme, développé par Li et al. [281], consiste à coupler la procédure itérative de Newton-Raphson à une méthode d'homotopie ce qui permet bien souvent d'assurer la convergence du schéma en terme des variables d'intégration ϑ_{int}.

Par ailleurs, il également bien pertinent d'opter pour un schéma de résolution explicite des équations constitutives. Dans un tel contexte, l'intégration numérique peut être effectuée selon le schéma de Runge-Kutta, telle que dans l'étude de Zikry [282] ou celle de Raphanel et al. [283]. Kuchnicki et al. [284, 285] utilisent la méthode d'Euler explicite pour la résolution des équations constitutives de Cuitiño-Ortiz [181]. En outre, Peirce et al. [190, 191] développent une méthode de résolution directe dite « rate tangent modulus » (cf. §4.2.2) également utilisée dans certains algorithmes assez récents [286, 287].

Si les schémas de résolution explicites requièrent une discrétisation temporelle bien importante, leur performance en terme de temps de calcul peut être bien supérieure à celle des schémas de résolution implicite [288]. Cependant, il est évident que la pertinence des solutions des équations constitutives est bien souvent remise en question du fait que leur admissibilité n'est guère vérifiée. Cet aspect est encore bien consolidé dès lors un solveur explicite du code de calcul par éléments finis (EF) est utilisé, et ce, en dépit de leur performance vis-à-vis des solveurs implicites [264]. Un compromis peut alors être envisagé en optant pour une approche semi-implicite. Celle-ci consiste à utiliser un schéma d'intégration numérique implicite couplé à un solveur explicite ou éventuellement l'inverse. Dans ce contexte, le tenseur des contraintes de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ est optimisé via la procédure itérative

9. On note que quasiment l'ensemble des algorithmes cités dans ce paragraphe utilisent les équations d'écoulement non linéaire de type de Hutchinson [171].

du schéma de résolution implicite du code de calcul de manière à assurer la convergence des solutions des équations d'équilibres mécaniques. A contrario, le traitement numérique explicite des équations constitutives s'attache uniquement à mettre à jour les variables d'intégrations ϑ_{int} sans pour autant vérifier l'admissibilité des solutions. En dépit des erreurs pouvant être engendrées, la pertinence d'une telle approche est souvent consolidée par une discrétisation temporelle plus ou moins importante, et ce qui, comme évoquée précédemment, ne remet pas en question les performances en terme de temps de calcul.

4.2.2 Algorithme d'intégration numérique

Dans le contexte actuel, l'intérêt se porte sur une approche semi-implicite pour le traitement numérique du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée. Les équations constitutives sont écrites en Fortran dans une routine UMAT du code de calcul Abaqus/Standard utilisant un schéma de résolution implicite par éléments finis (EF). L'intérêt d'une telle approche est justifié par la dialectique coût−pertinence de l'intégration numérique du modèle outre l'aisance de son extension aux transformations finies (cf. §5.3). L'algorithme d'intégration des équations, présenté ici, utilise un schéma de résolution directe de Peirce et al. [190,191] « rate tangent modulus » mais aussi une procédure itérative de type Newton-Raphson. On note également que cet algorithme se destine bien aux deux types de modèles de comportement.

Méthode « rate tangent modulus ». Compte tenu du comportement non linéaire de l'acier AISI H11, le traitement numérique revient à utiliser un schéma de type prédiction élastique - correction plastique de Simo et Hughes [168] où le tenseur des contraintes de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ est donné à l'échelle *méso* selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in} \right) \tag{4.50}$$

Si l'on considère la dérivée temporelle de la relation (4.50) et tenant compte de l'expression du tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in}$ (4.41), le problème constitutif (4.50) peut se réécrire selon :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} - \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \, \mathrm{sym} \left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s \right) \right) \tag{4.51}$$

On rappelle que les vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ sont les variables d'intégration, *i.e.* les principales inconnues à chaque point de Gauss. La loi d'écoulement non linéaire utilisée est donnée par les variables d'état internes respectivement aux instants t et $t + \Delta t$ de la manière suivante :

$$\dot{\gamma}^s_t = \hat{\dot{\gamma}}^s \left(\tau^s_t, \, r^s_t, \, \chi^s_t, \right) \tag{4.52}$$

$$\dot{\gamma}^s_{t+\Delta t} = \hat{\dot{\gamma}}^s \left(\tau^s_{t+\Delta t}, \, r^s_{t+\Delta t}, \, \chi^s_{t+\Delta t}, \right) \tag{4.53}$$

$$= \hat{\dot{\gamma}}^s \left(\tau^s_t + \Delta\tau^s, \, r^s_t + \Delta r^s, \, \chi^s_t + \Delta\chi^s, \right) \tag{4.54}$$

$\Delta\tau^s$, Δr^s et $\Delta\chi^s$ étant respectivement les incréments des cissions résolues, des variables d'écrouissage isotrope, et celles d'écrouissage cinématique. Un développement de Taylor du premier ordre par rapport à ces variables permet de formuler les vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s_{t+\Delta t}$ selon :

$$\dot{\gamma}^s_{t+\Delta t} = \dot{\gamma}^s_t + \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\tau^s}\right|_t \Delta\tau^s + \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t \Delta r^s + \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\chi^s}\right|_t \Delta\chi^s \tag{4.55}$$

Par ailleurs, une intégration numérique basée sur la méthode-θ de trapèze généralisée est considérée :

$$\frac{1}{\Delta t}\left(\gamma^s_{t+\Delta t} - \gamma^s_t\right) = \frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t} = (1-\theta)\ \dot{\gamma}^s_t + \theta\,\dot{\gamma}^s_{t+\Delta t} \tag{4.56}$$

Les valeurs $\theta = 0$ et $\theta = 1$ correspondent respectivement aux schémas d'Euler explicite et d'Euler implicite, l'incorporation de la relation (4.55) dans (4.56) permet d'écrire les incréments des vitesses de cisaillement $\frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t}$ selon :

$$\frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t} = \dot{\gamma}^s_t + \theta\ \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\tau^s}\right|_t \Delta\tau^s + \theta\ \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t \Delta r^s + \theta\ \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\chi^s}\right|_t \Delta\chi^s \tag{4.57}$$

Il reste maintenant à incorporer les relations des incréments des cissions résolues $\Delta\tau^s$, des variables d'écrouissage isotrope Δr^s et cinématique $\Delta\chi^s$.

Tenant compte de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), la dérivée temporelle de la définition des cissions résolues τ^s (4.10) est donnée par :

$$\dot{\tau^s} = \dot{\underline{\boldsymbol{n}}}^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}^s + \underline{\boldsymbol{n}}^s \cdot \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}^s + \underline{\boldsymbol{n}}^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\underline{\boldsymbol{l}}}^s = \underline{\boldsymbol{n}}^s \cdot \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}^s \tag{4.58}$$

Par le biais de l'incorporation de la relation du problème constitutif (4.51) dans (4.58), la dérivée temporelle des cissions résolues $\dot{\tau^s}$ (4.58) devient :

$$\dot{\tau^s} = \left(\underline{\boldsymbol{n}}^s \cdot \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}^s\right) \ : \ \left(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} - \sum_{r=1}^{N_s} \dot{\gamma}^r\ \mathrm{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r\right)\right) \tag{4.59}$$

$$= \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} \ : \ \mathrm{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right)\right] \ : \ \left[\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} - \sum_{r=1}^{N_s} \dot{\gamma}^r\ \mathrm{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r\right)\right] \tag{4.60}$$

Considérant les expressions des variables d'écrouissage isotrope r^s (4.32) et celles des évolutions temporelles des variables d'état internes associés respectives $\dot{\rho}^s$, les dérivées temporelles $\dot{r}^s$ sont données selon :

$$\dot{r^s} = b\,Q \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr}\,\dot{\rho}^r \tag{4.61}$$

$$= b\,Q \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr}\ (1 - b\,\rho^r)\ \dot{\gamma}^r\ \mathrm{sign}\left(\xi^r\right) \tag{4.62}$$

De même, les dérivées temporelles de variables d'écrouissage cinématiques $\dot{\chi}^s$ ont pour expression :

$$\dot{\chi}^s = C\,\dot{\alpha}^s \tag{4.63}$$
$$= C\,\dot{\gamma}^s - C\,d\,\alpha^s\,\dot{\gamma}^s\,sign\,(\xi^s) \tag{4.64}$$

À noter que ξ^s dépend du modèle à intégrer :

$$\xi^s = \begin{cases} (\tau^s - \chi^s)\,, & \text{pour le modèle de Méric-Cailletaud} \\ \left(\dfrac{\tau^s - \chi^s}{\tau_0^s + r^s}\right), & \text{pour la version modifiée} \end{cases} \tag{4.65}$$

Compte tenu que les incréments des variables concernées par l'intégration numérique sont définis de la manière qui suit :

$$\Delta\vartheta_{int} = \dot{\vartheta}_{int}\,\Delta t,\ \Delta\vartheta_{aux} = \dot{\vartheta}_{aux}\,\Delta t \tag{4.66}$$
$$\Delta\zeta_{primaires} = \dot{\zeta}_{primaires}\,\Delta t,\ \Delta\zeta_{duales} = \dot{\zeta}_{duales}\,\Delta t \tag{4.67}$$

les incréments des cissions résolues $\Delta\tau^s$, des variables d'écrouissage isotrope Δr^s et cinématique $\Delta\chi^s$ sont données selon :

$$\Delta\tau^s = \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right] : \left[\Delta\underset{\approx}{\boldsymbol{\varepsilon}} - \sum_{r=1}^{N_s} \Delta\gamma^r\ \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r)\right] \tag{4.68}$$

$$\Delta r^s = b\,Q \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr}\ (1 - b\,\rho^r)\ \Delta\gamma^r\ \mathrm{sign}\,(\xi^r) \tag{4.69}$$

$$\Delta\chi^s = C\,\Delta\gamma^s - C\,d\,\alpha^s\,\Delta\gamma^s\ \mathrm{sign}\,(\xi^s) \tag{4.70}$$

L'incorporation des relations (4.68), (4.69) et (4.70) dans celle des incréments des vitesses de cisaillements $\frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t}$ (4.57) permet de réécrire celle-ci de la manière qui suit :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t} = \dot{\gamma}_t^s &+ \theta\ \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\tau^s}\right|_t \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right] : \left[\Delta\underset{\approx}{\boldsymbol{\varepsilon}} - \sum_{r=1}^{N_s} \Delta\gamma^r\ \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r)\right] \\ &+ \theta\ \left[\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t b\,Q \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr}\ (1 - b\,\rho_t^r)\ \Delta\gamma^r\ \mathrm{sign}\,(\xi^r)\right] \\ &+ \theta\ \left[\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\chi^s}\right|_t C\,\Delta\gamma^s - C\,d\,\alpha_t^s\,\Delta\gamma^s\ \mathrm{sign}\,(\xi^s)\right] \end{aligned} \tag{4.71}$$

La factorisation de la relation (4.71) mène à un système d'équations linéarisés ayant comme inconnues les incréments des glissements des systèmes r $\Delta\gamma^r$, *i.e.* :

$$\underset{\approx}{\boldsymbol{A}}.\,\underline{\boldsymbol{\Delta\gamma}} = \underline{\boldsymbol{b}} \tag{4.72}$$

où l'on pose :

$$\begin{aligned}\underset{\sim}{\boldsymbol{A}} = A^{sr} = \delta^{sr} + \Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\tau^s}\right|_t \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right] : sym\,(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r) \\ - \Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t b\,Q\,h^{sr}\,(1 - b\,\rho^r)\,\mathrm{sign}\,(\xi^s) \\ - \Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\chi^s}\right|_t [\delta^{sr}\,C - \delta^{sr}\,C\,d\,\alpha^s\,\mathrm{sign}\,(\xi^s)]\end{aligned} \tag{4.73}$$

$$\underline{\boldsymbol{\Delta\gamma}} = \Delta\gamma^r \tag{4.74}$$

$$\underline{\boldsymbol{b}} = b^s = \Delta t\,\dot{\gamma}^s + \Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\tau^s}\right|_t \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right] : \Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} \tag{4.75}$$

δ^{sr} étant le symbole de Kronecker. En vue de résoudre le système (4.72), il convient, en outre, d'incorporer les expressions de $\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\tau^s}\right|_t$, $\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t$ et $\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\chi^s}\right|_t$ dans la relation (4.73). Celles-ci dépendent du modèle utilisé. Dans le contexte des équations de Méric-Cailletaud [20, 21], ces dérivées sont données selon :

$$\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\tau^s}\right|_t = \frac{n}{K^n}\,\left(|\xi^s| - r^s - \tau_0^s\right)^{n-1} \tag{4.76}$$

$$\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t = -\frac{n}{K^n}\,\left(|\xi^s| - r^s - \tau_0^s\right)^{n-1}\,\mathrm{sign}\,(\xi^s) \tag{4.77}$$

$$\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\chi^s}\right|_t = -\frac{n}{K^n}\,\left(|\xi^s| - r^s - \tau_0^s\right)^{n-1} \tag{4.78}$$

Pour la version modifiée du modèle, ces dérivées deviennent :

$$\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\tau^s}\right|_t = \frac{n\,\dot{\gamma}^s}{(\tau^s - \chi^s)} \tag{4.79}$$

$$\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t = -\frac{n\,\dot{\gamma}^s}{(\tau_0^s + r^s)} \tag{4.80}$$

$$\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^s}{\partial\chi^s}\right|_t = -\frac{n\,\dot{\gamma}^s}{(\tau_0^s + r^s)} \tag{4.81}$$

De par l'incorporation de l'ensemble de ces relations associés au modèle de Méric-Cailletaud [20, 21], ou celles de sa version modifiée, les incréments de glissements des systèmes r $\Delta\gamma^r$ peuvent aisément être déterminés via l'inversion de la matrice $\underset{\sim}{\boldsymbol{A}}$:

$$\underline{\boldsymbol{\Delta\gamma}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{A}}^{-1} \,.\, \underline{\boldsymbol{b}} \tag{4.82}$$

Les vitesses de cisaillement des systèmes de glissement $\dot{\gamma}^s$ sont directement déduites via les solutions $\Delta\gamma^s$ trouvées :

$$\dot{\gamma}^s = \frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t} \tag{4.83}$$

Procédure itérative de Newton-Raphson. Si la méthode « rate tangent modulus » consiste en une résolution directe, celle-ci ne peut assurer l'admissibilité des solutions trouvées dès lors la discrétisation temporelle n'est guère importante. De ce fait, une procédure itérative de type Newton-Raphson vient en complément de la méthode précédentes et utilise les solutions $\Delta\gamma^s$ trouvées en tant qu'une première approximation des valeurs permettant une éventuelle convergence du schéma numérique locale. Dans ce contexte, on s'intéresse également à une intégration numérique basée sur la méthode-θ du trapèze généralisée (4.56). Le système d'équations de base à résoudre est présenté selon la forme qui suit :

$$\Delta\gamma^s - \Delta t\,\dot{\gamma}_t^s - \Delta t\,\theta\,\left(\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^s - \dot{\gamma}_t^s\right) = o_+ \tag{4.84}$$

o_+ étant la tolérance dont la norme $\|o_+\| \simeq 0$. Cependant, comme évoqué dans §4.2.1, le fait de traiter le modèle de Méric-Cailletaud [20, 21], ou éventuellement la version modifiée de celui-ci, comme étant une limite d'une approche indépendante du temps engendre de mauvais conditionnements du système d'équations (4.84) à résoudre.

En vue de contourner de telles artefacts numériques, Méric et Cailletaud [20, 21] ou encore Cuitiño et Ortiz [181] proposent de modifier la forme du système (4.84) à résoudre. Dans le contexte du modèle de Méric-Cailletaud [21], si l'on considère que l'intégration numérique utilise le schéma d'Euler implicite ($\theta = 1$), le système (4.84) à résoudre devient :

$$K\left|\frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t}\right|^{\frac{1}{n}} - (|\xi^s + \Delta\xi^s| - r^s - \Delta r^s - \tau_0^s) = o_+ \tag{4.85}$$

Il est évident qu'une telle modification ne peut être utilisée en dehors du schéma d'Euler implicite. Pour avoir des valeurs de θ autres que l'unité, il convient d'opter pour la méthode-θ du point milieu généralisée (cf. Annexe C). Si le traitement numérique du système (4.85) permet le plus souvent une convergence du schéma, une telle forme de système ne peut améliorer le conditionnement de celui-ci dans le contexte où la version modifiée est utilisée, et ce, en raison de l'absence d'une surface de charge [289]. Par ailleurs, Musienko [248] évoque que certaines erreurs de signe peuvent éventuellement apparaître lors de la résolution du système (4.85). Le contournement de ces quelques ambiguïtés est effectué par le biais de corrections sur ce dernier système, *i.e.* :

$$K\left[\left(\frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t} + 1\right)^{\frac{1}{n}} - 1\right] - (|\xi^s + \Delta\xi^s| - r^s - \Delta r^s - \tau_0^s) = o_+ \tag{4.86}$$

Dans le contexte actuel, la procédure de Newton-Raphson est menée sur le système d'équations (4.84). Cependant, du fait que la convergence du schéma n'est guère assurée, la résolution du système est effectuée avec un nombre d'itérations bien limité, à savoir trois itérations. À noter également que l'intégration numérique est associée à une discrétisation temporelle assez importante pour assurer la convergence du schéma. Comme évoqué ci-dessus, la procédure actuelle consiste à prendre comme solution initiale celle qui est issue de la méthode « rate tangent modulus ». À l'issue du nombre d'itérations imposé, la solution initiale peut être conservée dans la mesure où la convergence de la procédure de Newton-Raphson n'est guère atteinte (Tableau 5.1).

Par ailleurs, en vue de tenter d'assurer, voire éventuellement d'accélérer la convergence du schéma de Newton-Raphson, une correction mineure telle que proposée par Anand [166], est apportée sur l'incrémentation des solutions $\Delta\gamma^s$ recherchées :

$$\Delta\gamma^{s,(i+1)} = \Delta\gamma^{s,(i)} + \epsilon\,\delta\Delta\gamma^{s,(i)} \tag{4.87}$$

i étant l'incrément et ϵ le coefficient de correction fonction de i $\left(\epsilon = 1 + \frac{0{,}25}{i}\right)$. On rappelle en outre qu'à un incrément i donné, $\delta\Delta\gamma^{s,(i)}$ sont solutions de l'équation qui suit :

$$\underset{\sim}{J}^{(i)} \boldsymbol{.}\, \underline{\boldsymbol{\delta\Delta\gamma}}^{(i)} = -\underline{\mathcal{R}}^{(i)} \tag{4.88}$$

$\mathcal{R}$ étant les résidus et $\underset{\sim}{\boldsymbol{J}}$ la matrice jacobienne. Cette dernière dépend du modèle à intégrer et est donnée selon :

$$\begin{aligned}
\underset{\sim}{\boldsymbol{J}} = J^{sr} = -\delta^{sr} &- \Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot\gamma^s}{\partial\tau^s}\right|_{t+\Delta t}\left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right] : \mathrm{sym}\,[\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r] \\
&- \Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot\gamma^s}{\partial r^s}\right|_{t+\Delta t} b\,Q\,h^{sr}\,(1 - b\,\rho^r)\,\mathrm{sign}\,(\xi^s) \\
&- \Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot\gamma^s}{\partial\chi^s}\right|_{t+\Delta t}[\delta^{sr}\,C - \delta^{sr}\,C\,d\,\alpha^s\,\mathrm{sign}\,(\xi^s)]
\end{aligned} \tag{4.89}$$

Calcul de la Jacobienne. Comme évoqué précédemment, l'intégration numérique des équations constitutives est menée dans le code Abaqus/Standard basé sur une résolution implicite des équations d'équilibre mécanique. En vue d'optimiser le tenseur de déformation totale $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}_{t+\Delta t}$, il est nécessaire de calculer la matrice jacobienne $\mathcal{J}$ (4.49). Dans le contexte actuel, celle-ci est déduite directement via l'équation du problème (4.51), *i.e.* :

$$\mathcal{J} = \frac{\partial\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{\partial\left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left(\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}} - \sum_{s=1}^{N_s}\Delta\gamma^s\,\mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right)\right]}{\partial\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} \tag{4.90}$$

$$= \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left[\sum_{s=1}^{N_s}\frac{\partial\Delta\gamma^s}{\partial\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} \otimes sym\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right] \tag{4.91}$$

À savoir que l'expression de $\frac{\Delta\gamma^s}{\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}$ peut être aisément obtenue en dérivant le système d'équations résolu via la méthode « rate tangent modulus » (4.72), *i.e.* :

$$\frac{\partial\Delta\gamma^r}{\partial\Delta\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{A}}^{-1}\boldsymbol{.}\left[\Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot\gamma^s}{\partial\tau^s}\right|_t \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right] \tag{4.92}$$

Ce qui donne :

$$\mathcal{J} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} - \sum_{r=1}^{N_s}\sum_{s=1}^{N_s} A^{rs,-1}\,\Delta t\,\theta\,\left.\frac{\partial\dot\gamma^r}{\partial\tau^r}\right|_t \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r)\right] \otimes \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s)\right] \tag{4.93}$$

En dépit d'une discrétisation temporelle plus ou moins importante, le présent algorithme se destine bien à conserver l'ensemble des variables d'état internes primaires $\zeta_{primaires}$ et duales ζ_{duales}. Plus typiquement, nul besoin d'utiliser une forme intégrée de l'écrouissage isotrope r^s (4.47). Pour rappel, celle-ci est indépendante de la variable d'état interne ρ^s. À savoir que dans le traitement numérique effectué par Méric et Cailletaud [21], les deux derniers termes de la relation (4.42) sont souvent assimilés à $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$ [170]. Or, dans le contexte actuel, le calcul de la dissipation intrinsèque Θ est menée d'une manière assez aisée via la relation (4.42). Celle-ci est traitée en tant que variable auxiliaire ϑ_{aux} à l'image d'un certain nombre d'autres variables (cf. §4.5). Par ailleurs, en vue d'optimiser l'erreur d'intégration numérique, une valeur de $\theta = 0,5$ est bien souvent recommandée malgré une convergence probablement plus lente qu'une intégration basée sur le schéma d'Euler implicite ($\theta = 1$) [290]. De ce fait, l'ensemble des calculs menés dans le présent travail utilisent la valeur $\theta = 0,5$ pour la résolution directe « rate tangent modulus » mais également pour la procédure itérative de Newton-Raphson. Le Tableau 5.1 présente un récapitulatif de l'algorithme d'intégration numérique utilisé.

Tableau 4.3 – Récapitulatif du schéma d'intégration numérique dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP)

1. Étant donné : $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}_t$, $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}_{t+\Delta t}$, ϑ_t^{int}, ζ_t^{duales}, ϑ_t^{aux}.
2. Calcul des cissions résolues τ_t^s et des vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}_t^s$.
3. Assemblage de la matrice $\underset{\sim}{\boldsymbol{A}}$ et du vecteur $\underline{\boldsymbol{b}}$.
4. Résolution du système (4.82) $\left(\text{calcul des valeurs } \Delta\gamma^{s,(i=0)}\right)$.
5. Calcul des variables d'état internes $\left(\alpha_{t+\Delta t}^{s,(i)}, \rho_{t+\Delta t}^{s,(i)}\right)$ et des variables duales $\left(\tau_{t+\Delta t}^{s,(i)}, r_{t+\Delta t}^{s,(i)}, \chi_{t+\Delta t}^{s,(i)}\right)$.
6. Calcul des vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{s,(i)}$ via les variables de l'étape 5.
7. Résolution du système (4.84).
   If $\left|\mathcal{R}^{(i)}\right| \leq \|o_+\|$ Then $\Delta\gamma^s = \Delta\gamma^{s,(i)}$, $\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^s = \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{s,(i)}$, $\alpha_{t+\Delta t}^s = \alpha_{t+\Delta t}^{s,(i)}$, $\rho_{t+\Delta t}^s = \rho_{t+\Delta t}^{s,(i)}$
   $\tau_{t+\Delta t}^s = \tau_{t+\Delta t}^{s,(i)}$, $r_{t+\Delta t}^s = r_{t+\Delta t}^{s,(i)}$ et $\chi_{t+\Delta t}^s = \chi_{t+\Delta t}^{s,(i)}$ & Go To étape 8.
   Else If $i \geq 3$ Then $\Delta\gamma^s = \Delta\gamma^{s,(i=0)}$, $\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^s = \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$, $\alpha_{t+\Delta t}^s = \alpha_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$, $\rho_{t+\Delta t}^s = \rho_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$
   $\tau_{t+\Delta t}^s = \tau_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$, $r_{t+\Delta t}^s = r_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$ et $\chi_{t+\Delta t}^s = \chi_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$ & Go To étape 8.
   Else Résolution du système (4.88).
   Incrémentation des solutions $\Delta\gamma^{s,(i)}$ via (4.87) & Go To étape 5.
8. Calcul du tenseur de contrainte $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}_{t+\Delta t}$ (4.51) et les variables auxiliaires $\vartheta_{t+\Delta t}^{aux}$.
9. Calcul de la matrice jacobienne $\mathcal{J}$ (4.93).

4.2.3 Validation de l'algorithme d'intégration numérique

À l'issue de l'intégration des équations constitutives, une validation du schéma numérique est effectuée. Celle-ci est réalisée par le biais d'une confrontation de l'algorithme décrit ci-dessus (Tableau 5.1) avec celui disponible dans la librairie Z-MAT du code Z-Set/Zébulon [10] en faisant l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Ce dernier utilise

10. Les présents calculs sont menés avec le code Abaqus en utilisant Z-MAT en tant que routine utilisateur.

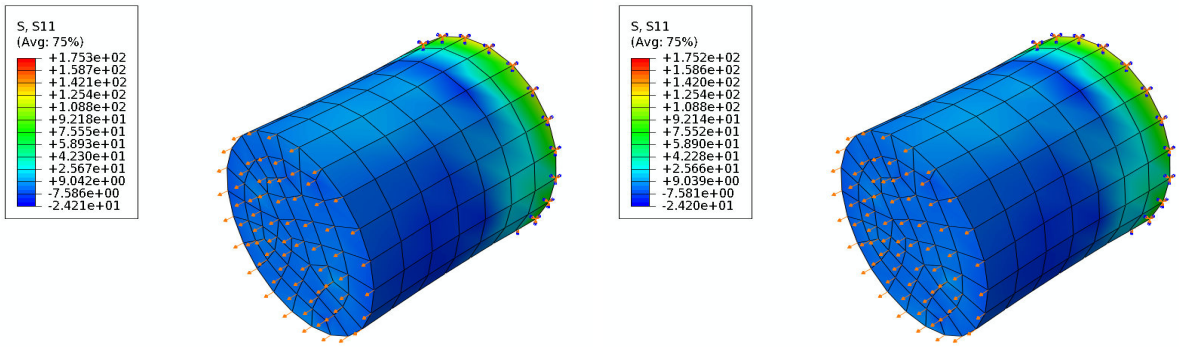
également une intégration implicite mais basée sur la méthode-θ du point milieu généralisée [11].

Dans le contexte actuel, la confrontation est menée sur un monocristal, dit « de référence », dont l'orientation est donnée par les relations de parallélisme $[100] \parallel X$, $[010] \parallel Y$ et $[001] \parallel Z$, *i.e.* des angles d'Euler selon la définition de Bunge $(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = (0, 90, 0)$. Le monocristal considéré est un cylindre de diamètre de 10 mm et de hauteur de 20 mm, soumis à une sollicitation uniaxiale monotone. Les conditions aux limites consistent en un encastrement de la face Z_0 et en une déformation imposée $\varepsilon_{33} = 4\%$ de la face Z_1. Un ensemble de 406 éléments cubiques de premier ordre et d'intégration complète (C3D8 dans Abaqus) sont utilisés pour un maillage régulier de la géométrie. Par ailleurs, les paramètres du matériau utilisés sont ceux de l'acier 316L identifiés par Guilhem [250], à l'exception de la matrice d'interaction $\underset{\sim}{\boldsymbol{h}}$ qui est donnée selon (4.30) pour une structure CC et est prise égale à l'unité (Tableau 4.4).

Tableau 4.4 – Paramètres du matériau utilisés pour la validation de l'algorithme d'intégration numérique

Λ_{1111} (MPa)	Λ_{1122} (MPa)	Λ_{1212} (MPa)	n	K $(MPa.s^{-n})$
197000	125000	122000	11	12
τ_0^s (MPa)	Q (MPa)	b	C (MPa)	d
40	10	3	40000	1500

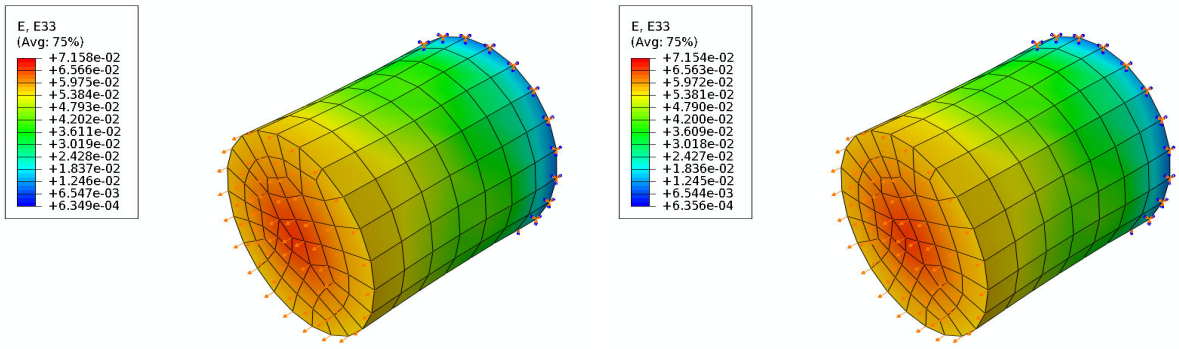
La présente confrontation d'un certain nombre de variables illustrée dans ce paragraphe (Figures 4.3, 4.4, 4.5 et 4.6) permet de valider le schéma d'intégration numérique actuel (Tableau 5.1). En effet, les résultats obtenus sont bien identiques à ceux fournis par l'algorithme utilisé par Méric et Cailletaud [21] pour les mêmes types de sollicitations et paramètres du matériau.



(a) UMAT (b) Z-MAT

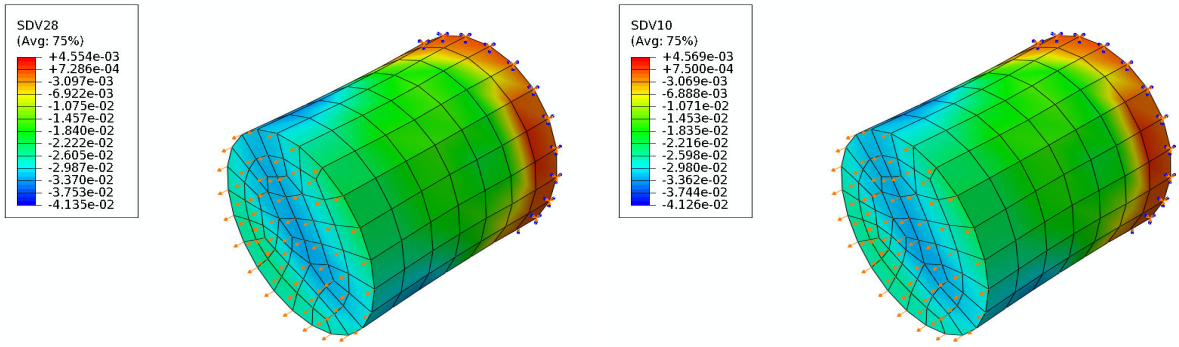
Figure 4.3 – Confrontation des champs de la composante de contrainte σ_{11}

11. L'algorithme d'intégration numérique de la librairie Z-MAT est présenté dans l'Annexe C.



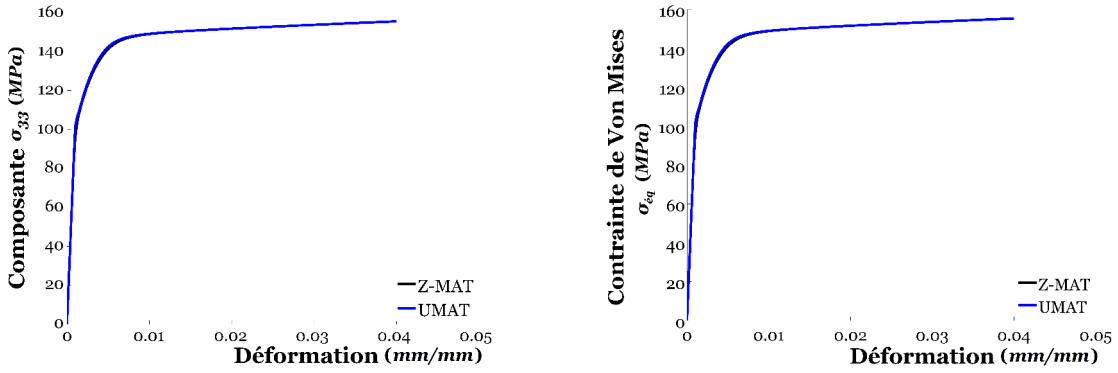
(a) UMAT (b) Z-MAT

Figure 4.4 – Confrontation des champs de la composante de déformation ε_{33}



(a) UMAT (b) Z-MAT

Figure 4.5 – Confrontation des champs de cisaillement du système de glissement $G1$



(a) Courbe $\sigma_{33} - \varepsilon_{33}$ (b) Courbe $\sigma_{éq} - \varepsilon_{33}$

Figure 4.6 – Confrontation des évolutions des contraintes selon la déformation ε_{33}

4.3 Identification des paramètres du matériau

Étant donné que l'actuel algorithme d'intégration numérique est validé par confrontation à celui implanté dans la librairie Z-MAT, il est bien pertinent d'utiliser celle-ci associée au

module Z-OPT du code Z-Set/Zébulon pour l'identification des paramètres du matériau. L'utilisation du code de calcul Z-Set/Zébulon est justifiée par le contenu bien conséquent de la librairie Z-MAT en terme de modèles de transition d'échelle. Dans ce qui suit, à l'issue d'un rappel de la base de donnée expérimentale, cette partie s'attache à décrire la méthodologie et les résultats d'identification des paramètres du matériau. Par ailleurs, la version modifiée du modèle multi-échelle n'étant pas implémentée dans la librairie Z-MAT, la présente procédure d'identification est menée uniquement sur les équations constitutives de Méric-Cailletaud [20, 21].

4.3.1 Base de données expérimentales

Si les essais mécaniques quasi-statiques et cycliques in-situ par corrélations d'images menés dans §2.3 mettent en évidence le caractère hétérogène des champs mécaniques locaux en surface, ceux-ci ne peuvent guère être utilisés pour l'identification des paramètres du matériau. Pour rappel, les lacunes de tels essais proviennent essentiellement du fait que ces derniers ne sont pas corrélés à des mesures EBSD. En outre, l'usage de la base de données des essais in-situ requiert la génération d'une microstructure réelle, ce qui n'est pas une opération aisée. Une telle approche signifie également que l'identification doit être nécessairement menée en champs complets. Or, une optimisation via les modèles en champs complets est trop coûteuse en terme de temps de calcul, mais requiert surtout une résolution des images numériques bien plus importante que celles acquises lors des essais mécaniques menés dans §2.3.

Dans le contexte actuel, la base de données expérimentales considère des essais mécaniques monotones quasi-statiques et cycliques uniaxiaux à température ambiante à l'échelle *macro*. Ces derniers ayant déjà été présentés dans §1.2.4.1 et §1.2.4.2), le Tableau 4.5 récapitule l'ensemble des essais mécaniques utilisés dans la procédure d'identification.

Tableau 4.5 – Base de données expérimentales

Essai 1	Essai 2	Essai 3	Essai 4	Essai 5
monotone	cyclique	cyclique	cyclique	cyclique
$\varepsilon \simeq 8\%$	$\varepsilon = \pm 0,8\%$	$\varepsilon = \pm 0,9\%$	$\varepsilon = \pm 1,1\%$	$\varepsilon = 0,0 - 1,5\%$

4.3.2 Procédure d'identification

Compte tenu du coût exhaustif d'une identification des paramètres du matériau par la méthode des éléments finis (EF), la présente procédure s'appuie essentiellement sur des approches en champs moyens. À l'issue de l'exposé des équations de transition d'échelle mené dans §3.3.2.2, il est évident que bon nombre modèles de comportement non linéaire en champs moyens ne sont guère adéquats pour des sollicitations complexes, notamment cycliques. Ce constat présente néanmoins quelques exceptions, tels que le modèle en β de Cailletaud-Pilvin [223] (cf. §3.3.2.2). Celui-ci est bien souvent utilisé en tant que modèle de transition d'échelle en vue d'identifier les paramètres des équations constitutives locales.

Cependant, comme évoqué précédemment, il requiert l'identification de paramètres outre ceux des équations constitutives, *i.e.* liés à la transition d'échelle. De ce fait, une validation des paramètres du matériau optimisés est bien souvent requise.

Une telle validation peut éventuellement être menée par le biais de la méthode des éléments finis (EF). Une approche plus aisée consiste à opter pour un autre modèle de transition d'échelle en champs moyens. Dans le contexte actuel, la validation des paramètres du matériau est réalisée par le biais du modèle sécant de Berveiller-Zaoui [222] (cf. §3.3.2.2). Celui-ci ne requiert aucune identification de paramètre lié à la transition d'échelle. Cependant, ce modèle se destine uniquement aux sollicitations monotones. Le Tableau 4.6 résume les équations de transition d'échelle en champs moyens utilisées. À noter que dans le cas du modèle en en β, le paramètre δ est considéré comme étant nul, et ce, en raison des non linéarités conséquentes induites par les écrouissages isotrope et cinématique. De ce fait, les paramètres de transition d'échelle se réduisent à D, définissant les interactions entre inclusions φ au sein de la matrice.

Tableau 4.6 – Modèles de transition d'échelle utilisés dans la procédure de l'identification

Modèle en β de Cailletaud-Pilvin [223]	Modèle de Berveiller-Zaoui [222]
$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\varphi} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\,\mu\,(1-\beta) : \left[\left(\sum_{\varphi} f_{\varphi}\,\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi}\right) - \underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi}\right]$	$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\varphi} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\Sigma}} + 2\,\mu\,\alpha\,(1-\beta) : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^{p} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\varphi,\,p}\right)$
$\beta = \dfrac{2\,(4-5\,\nu)}{15\,(1-\nu)}$	$\beta = \dfrac{2\,(4-5\,\nu)}{15\,(1-\nu)}$
$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}}^{\varphi} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}}^{p,\,\varphi} - D\,\varepsilon_{éq}^{p,\,\varphi}\,\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi}$	$\dfrac{1}{\alpha} = 1 + \dfrac{3}{2}\,\mu\,\dfrac{\boldsymbol{E}_{éq}^{p}}{\Sigma_{éq}}$

Si l'on considère les équations constitutives de Méric-Cailletaud [20, 21], les paramètres du matériau à identifier sont les paramètres :

- d'élasticité : $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}$ ou éventuellement Λ,
- de viscosité : n et K,
- d'écrouissage isotrope : τ_0^s, Q, b et les coefficients de la matrice d'interaction $\underset{\sim}{\boldsymbol{h}}$ (4.30),
- et d'écrouissage cinématique C et d.

Comme évoqué dans la formulation thermodynamique du modèle (cf. §4.1.2), le comportement linéaire de l'acier AISI H11 est supposé être isotrope. De ce fait, le tenseur d'élasticité $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}$ est équivalent au module d'Young à l'échelle *macro* [12], *i.e.* $\Lambda = 208\ GPa$. Par ailleurs, compte tenu du fait que l'acier AISI H11 ne présente aucune sensibilité à la vitesse de sollicitation à température ambiante (cf. §1.2.4.1), les paramètres de viscosité sont données de manière à traiter le modèle comme étant une limite d'une approche indépendante du temps, *i.e.* $n = 15$ et $K = 4\ MPa.s^{-n}$ (cf. §4.3.3).

Avec ces hypothèses, la procédure d'identification s'attache uniquement aux paramètres des écrouissages isotrope et cinématique, outre le paramètre de transition d'échelle D. Si l'optimisation des paramètres, tels que la cission critique τ_0^s, d'écrouissage isotrope Q, b ou

12. Une écriture tensorielle selon la relation (5.31) par les coefficients de Lamé est également possible (cf. Tableau 4.7).

encore d'écrouissage cinématique C et d, s'effectue d'une manière plus ou moins « standard », celles des coefficients de la matrice d'interaction n'est guère aisée. Dans le contexte actuel, on s'appuie essentiellement sur les hypothèses de Hoc et Forest [270]. Plus concrètement, on suppose que le potentiel d'interaction de deux systèmes identiques ou colinéaires de la famille $\{1\,1\,0\}\ \langle 1\,1\,1\rangle$ est plus important que celui de deux systèmes colinéaires mais n'appartenant pas à la même famille. Le potentiel de ce type d'interaction est considéré légèrement plus important que celui d'une interaction entre deux systèmes non colinéaires n'appartenant pas à la même famille, qui lui même est supérieure à une collision de deux systèmes non colinéaires de la famille $\{1\,1\,0\}\ \langle 1\,1\,1\rangle$. Quant aux interactions de systèmes au sein de la famille $\{1\,1\,2\}\ \langle 1\,1\,1\rangle$, celles-ci possèdent toutes des potentiels d'interaction inférieurs à ceux cités précédemment. Ces mécanismes ont tendance à se manifester plus facilement sur les systèmes colinéaires. Ces considérations physiques élémentaires permettent de contraindre les valeurs des coefficients de la matrice d'interaction $[h]$, *i.e.* :

$$h_8 \leq h_2 \leq h_3 \leq h_5 \leq h_4 \leq h_1 \leq h_6 \leq h_7 \tag{4.94}$$

La Figure 4.7 présente la procédure d'identification menée avec l'algorithme d'optimisation de Levenberg-Marquardt.

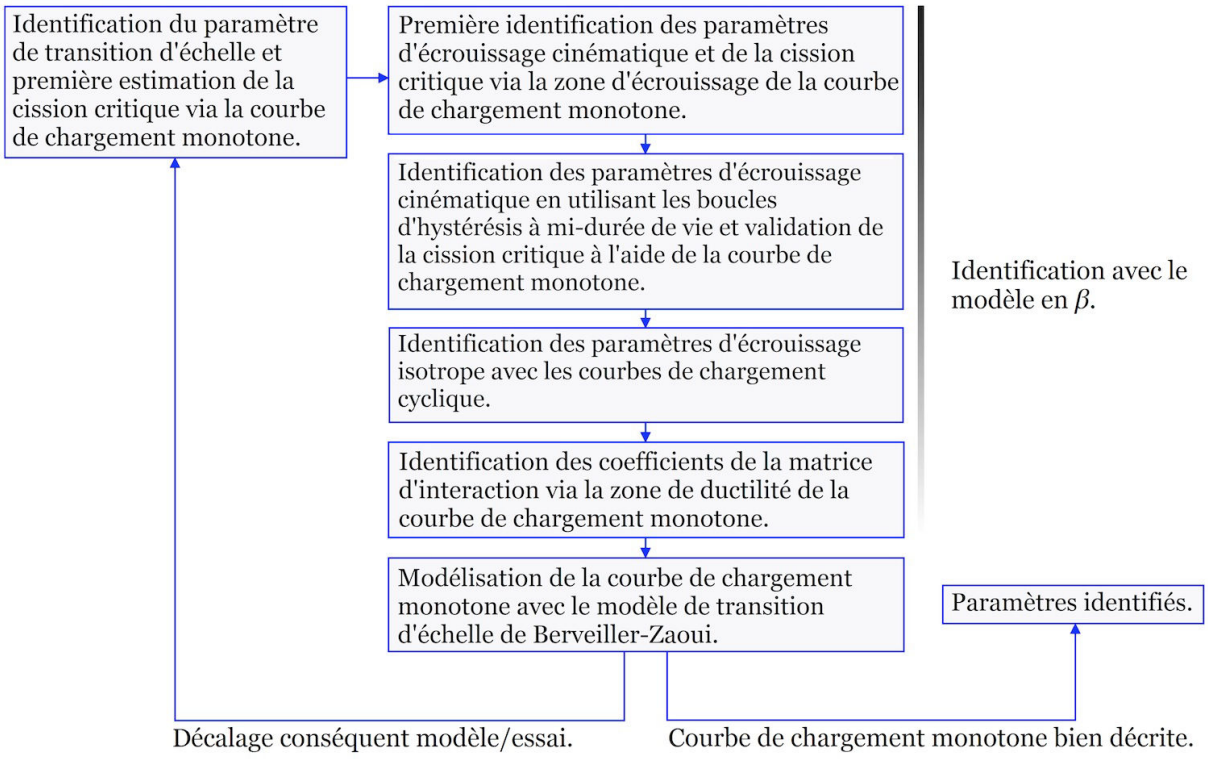


Figure 4.7 – Procédure d'identification des paramètres du matériau

4.3.3 Résultats de l'identification

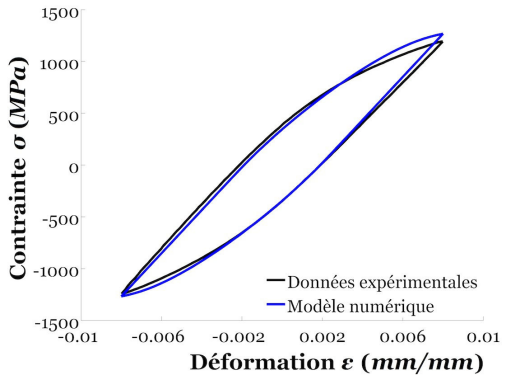
Les paramètres de l'acier AISI H11 identifiés par la procédure décrite précédemment sont donnés dans le Tableau 4.7. À noter que la valeur négative de Q traduit l'adoucissement cyclique caractéristique de l'acier AISI H11.

Tableau 4.7 – Paramètres de l'acier AISI H11 issus de la procédure d'identification

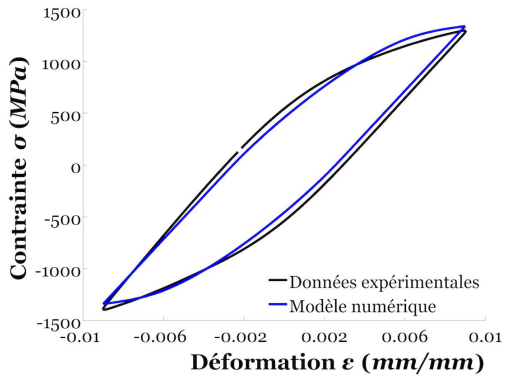
Élasticité			Viscosité	Écrouissage isotrope		
$\Lambda\ (MPa)$	υ	n	$K\ (MPa.s^{-n})$	$\tau_0^s\ (MPa)$	$Q\ (MPa)$	b
208000	0,3	15	4	372	-10	1,05

Écrouissage cinématique		Transition d'échelle			Matrice d'interaction							
$C\ (MPa)$	d	D	$\mu\ (MPa)$	ν	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	h_7	h_8
495000	1700	15	85000	0,3	1,1	0,7	0,9	1,0	0,9	1,2	1,3	0,7

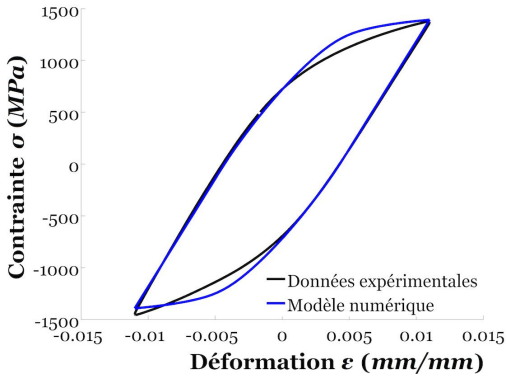
Les diverses boucles d'hystérésis à demi-durée de vie sont présentés Figure 4.8. Il est clair que l'optimisation des paramètres de l'acier AISI H11 permet une bonne prédiction du comportement cyclique du matériau.



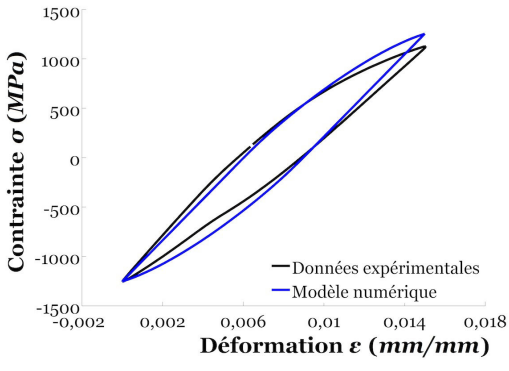
(a) Essai 2 ($\Delta\varepsilon = \pm 0,8\%$)



(b) Essai 3 ($\Delta\varepsilon = \pm 0,9\%$)



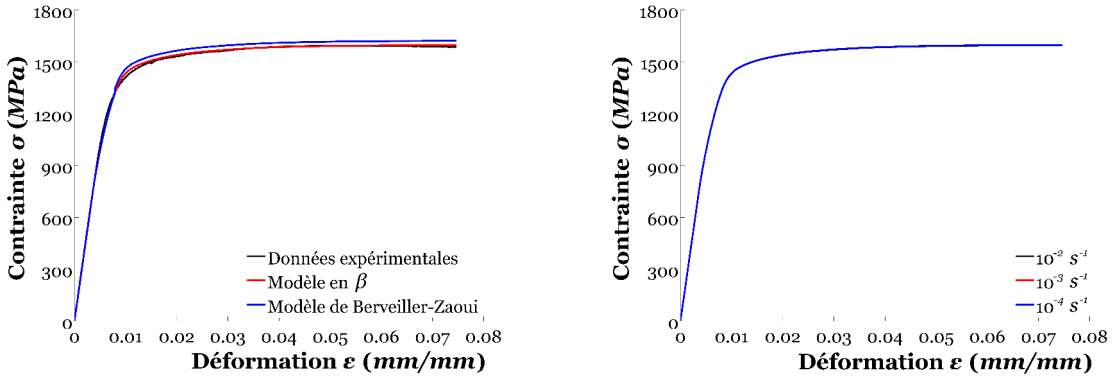
(c) Essai 4 ($\Delta\varepsilon = \pm 1,1\%$)



(d) Essai 5 ($\Delta\varepsilon = 0,0 - 1,5\%$)

Figure 4.8 – Confrontation modèle/essais boucles d'hystérésis de demi durée de vie

Ces paramètres sont également valables pour le comportement monotone quasi-statique (Figure 4.9a). Comme attendu, la Figure 4.9b permet de mettre en évidence que le comportement à l'échelle *macro* prédit par le modèle multi-échelle ne présente pas d'aspect visqueux, *i.e.* le comportement prédit demeure indépendant de la vitesse de sollicitation.



(a) Essai 1 monotone

(b) Simulation de la réponse du matériau pour différentes vitesses de sollicitation

Figure 4.9 – Confrontation modèle/essai de traction monotone (essai 1) et mise en évidence du caractère indépendant du temps du comportement prédit à l'échelle *macro*

4.4 Pré-traitement des calculs par éléments finis

En vue de mener une investigation numérique des champs mécaniques locaux en surface de l'acier AISI H11, la présente partie se destine au pré-traitement des calculs en champs complets. Dans un premier point, celle-ci illustre la génération de microstructures virtuelles représentatives de l'acier AISI H11. Le second paragraphe se consacre aux orientations cristallographiques caractéristiques des structures martensitiques (cf. §1.2.3.1). Celui-ci est suivi par la procédure de maillage des microstructures virtuelles, mais également à la définition des chargements, *i.e.* conditions aux limites. Enfin, le dernier point s'attache essentiellement à la parallélisation des calculs par éléments finis (EF) et à la méthode de résolution utilisée.

4.4.1 Génération de microstructure virtuelle

Le comportement mécanique hétérogène est lié à la stéréologie de la structure interne de l'acier AISI H11 (cf. §2.4), il est donc nécessaire de générer une microstructure réaliste, *i.e.* représentative voire statistiquement équivalente du matériau en question, en vue d'une investigation pertinente des champs locaux. Pour ce faire, diverses approches peuvent être considérés, à savoir celles qui utilisent des caractérisations expérimentales et celles qui s'appuient sur des fondements probabilistes numériques.

La caractérisation expérimentale des structures métalliques, telle que l'acier AISI H11, permet l'obtention d'informations fondamentales quant à la stéréologie de la structure in-

terne considérée. En vue d'une reconstruction de microstructures « réelles » d'un matériau donnée, une telle approche peut éventuellement considérer la technique de tomographie [291]. Cependant, celle-ci se destinent essentiellement aux matériaux à forts contraste, notamment les structures poreuses. En vue d'une reconstruction de microstructures réelles de matériaux métalliques, certaines études s'attachent à l'utilisation de la microscopie optique (MO) [292], voire la microscopie électronique à balayage (MEB) [293, 294], bien souvent couplée à des mesures EBSD. Or, de telles techniques se limitent à une caractérisation bidimensionnelle de la structure interne. Pour une reconstruction de celle-ci dans un cadre tridimensionnel, certaines études utilisent une extension virtuelle basée sur des approches probabilistes numériques et ne considèrent aucune information quant à la stéréologie de la structure interne dans le volume [295–297]. D'autres optent pour des approches expérimentales. Dans ce dernier contexte, les techniques les plus fréquentes consistent en des polissages mécaniques successifs des couches superficielles du matériau considéré [78, 298], ou éventuellement en la technique de la sonde ionique focalisée (FIB) [299–303], couplés à des mesures EBSD. Cependant, ces techniques sont entièrement destructives et ne permettent guère de mener des essais mécaniques a postériori de la caractérisation effectuée. Des études assez récentes ont permis une reconstruction de microstructures réelles de structures métalliques dans un cadre tridimensionnel en utilisant des techniques expérimentales non destructives. Celles-ci consistent essentiellement en la microtomographie à haute énergie [81]. Or, en dépit de son caractère non destructif, cette technique ne peut effectuer une caractérisation au delà de quelques *microns* de couches superficielles, outre le fait qu'elle nécessite des sources de synchrotron à très forte intensité qui sont difficilement accessibles.

Si les approches fondées sur la caractérisation expérimentale du matériau requièrent des techniques assez complexes, les modèles numériques permettent le plus souvent une génération de microstructures virtuelles assez réalistes d'une manière bien plus aisée. Les algorithmes associés sont plus ou moins proches de ceux utilisés dans les approches fondées sur la caractérisation expérimentales lors de la reconstruction des structures internes, hormis le fait que quasiment « aucune » information microstructurale issue de ces techniques n'est considérée [13]. En dépit de cet aspect, la génération de microstructures virtuelles par le biais d'approches probabilistes numériques tient compte des caractéristiques prépondérantes de la stéréologie de la structure interne, notamment la topologie, la morphologie et les orientations cristallographiques du matériau considéré. Pour ce faire, deux techniques peuvent être envisagées, notamment la méthode des ellipses et la tesselation ou décomposition de Voronoï, ou éventuellement un couplage de celles-ci [304].

À l'inverse de la méthode des ellipses qui est bien souvent privilégiée en tant qu'algorithme de reconstitution de microstructures réelles [294,295,300,301,303,305], la tesselation de Voronoï, que l'on considère dans le contexte actuel, constitue une méthode numérique bien plus aisée et se destine essentiellement aux structures internes virtuelles. Cette méthode est considérée dans bon nombre d'études, notamment dans celle de Barbe et al. [306, 307], Guilhem et al. [308] ou encore Gérard [100] dans le cadre d'investigations numériques des champs mécaniques complets au sein d'agrégats polycristallins.

Si l'on considère un domaine $\mathcal{D}$ de l'espace tridimensionnel euclidien et un ensemble

13. Certaines informations telles que les orientations cristallographiques sont considérées dans le présent travail (cf. §4.5.1.2 et §4.5.2.2).

de points $P = \{\underline{\boldsymbol{x}}_k \in \mathcal{D} : k = 1, ..., n\}$, la tesselation de Voronoï est définie comme étant l'union de n polyèdres convexes (cellules de Voronoï) $\mathcal{V}_k$ donnés selon :

$$\mathcal{V}_k = \left\{\underline{\boldsymbol{y}} \in \mathcal{D} : \left\|\underline{\boldsymbol{y}} - \underline{\boldsymbol{x}}_k\right\| < \left\|\underline{\boldsymbol{y}} - \underline{\boldsymbol{x}}_j\right\| \; \forall\, k \neq j\right\} \tag{4.95}$$

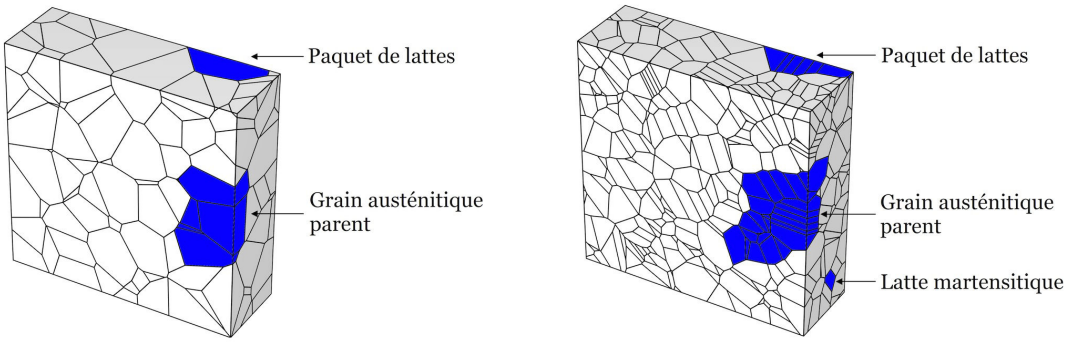
La tesselation de Voronoï est quasiment analogue à un processus de solidification dans les structures métalliques. Les points de l'ensemble P, *i.e.* centres des cellules, sont également représentatifs de sites de nucléation ou de germination fixes dans l'espace domaine $\mathcal{D}$ considéré. Le processus de solidification est alors mené d'une manière isotrope en terme de vitesse et de direction de germination ou de nucléation. Celui-ci a tendance à s'arrêter lors d'un croisement de l'ensemble des joints de grains dans le domaine $\mathcal{D}$. La topologie de la structure interne virtuelle est donc définie par la position des centres des cellules de Voronoï données selon (5.94).

Par ailleurs, certaines études assez récentes s'intéressent aux algorithmes de tesselation de Voronoï dans le cadre de reconstitution de structures internes bien équivalentes à celles des matériaux métalliques. Dans ce contexte, Fritzen et al. [309] se consacrent au développement de structures périodiques. Zhang et al. [310] se destinent à générer des structures internes virtuelles en contrôlant un paramètre de régularité de la tesselation de Voronoï. Benedetti et Aliabadi [311] utilisent celle-ci pour une formulation dite « intégrale » du comportement intragranulaire. Quey et al. [312] se consacrent aux structures ayant un nombre conséquent de cristaux constitutifs.

Dans le contexte actuel, les structures périodiques ou éventuellement semi-périodiques ne peuvent être considérées du fait que l'intérêt est porté à la morphologie des lattes et au comportement mécanique en surface. En outre, les cellules de Voronoï se destinent bien souvent à des matériaux ayant des grains équiaxes. À noter que peu d'études se consacrent à la génération de microstructures martensitiques ou équivalentes par le biais de la tesselation de Voronoï. Pour ce faire, Osipov et al. [313] utilisent une double tesselation de Voronoï de manière à positionner les centres des cellules sur les anciens joints de grains austénitiques également conservés. Par ailleurs, Hatem et Zikry [314, 315] s'attachent à un algorithme basé sur la norme L_∞.

La présente génération de microstructure virtuelle de l'acier AISI H11 utilise également une tesselation de Voronoï de norme L_1 à deux niveaux réalisée avec le package Neper [312] (Figure 4.10). Tenant compte des aspects microstucturaux relatifs à l'acier AISI H11, la première étape permet la génération d'une tesselation de Voronoï un agrégat de 173 cristaux constitutifs représentatifs de sites potentiels de paquets de lattes martensitiques (Figure 4.10a). Dzns cet agrégat, des droites de directions aléatoires passant par les premiers centres de cellules de Voronoï sont générés. Une seconde tesselation est menée a posteriori via des points positionnés de manière équidistantes sur ces droites. Un ensemble de six points est considéré pour chaque droite générée en vue d'une prise en compte des relations d'orientations cristallographiques (cf. §4.4.2), et ce, à l'exception d'une droite qui en contient que deux permettant l'obtention de 1034 cellules de Voronoï (Figure 4.10b). Une telle approche permet l'obtention d'une microstructure virtuelle assez équivalente à une structure interne martensitique en terme de morphologie des cristaux constitutifs. Les lattes martensitiques données par les cellules de Voronoï issues de la tesselation du second niveau sont regroupés par paquet d'une manière quasi-parallèle et orientées selon des di-

rections aléatoires [14] (cf. §1.2.3). À savoir que les anciens grains austénitiques sont donnés par le biais d'un regroupement d'un ensemble de quatre paquets de lattes les plus proches, *i.e.* 44 grains considérés dont un contenant uniquement deux lattes martensitiques. Dans la procédure actuelle, celles-ci ne sont guère convexes. Par ailleurs, on note que les dimensions de microstructure virtuelle sont de $150 \times 50 \times 150$ μm, ce qui est équivalent à la taille du VER identifiée dans §2.5.



(a) Tesselation de premier niveau (b) Tesselation de second niveau

Figure 4.10 – Génération de microstructures virtuelles par tesselation de Voronoï

Dans cette approche, les lattes martensitiques possèdent une taille moyenne de 8,43 μm (Figure 4.11), *i.e.* près de trois fois supérieure à la taille mesurée lors de la caractérisation expérimentale (cf. §1.2.3.2). À savoir que cet écart est essentiellement dû à la sous-estimation du nombre de lattes martensitiques et éventuellement de paquets au sein d'un grain austénitique dont la taille est aux alentours de 30 μm.

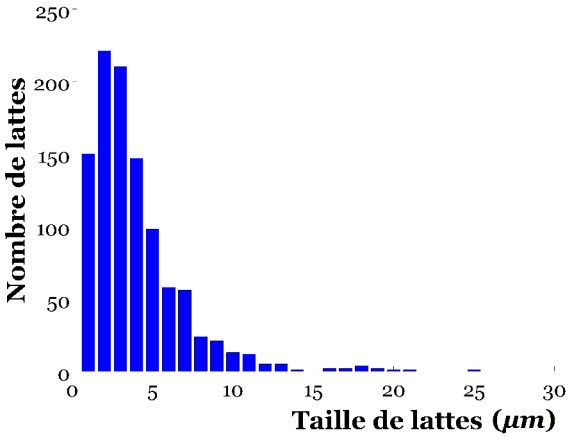
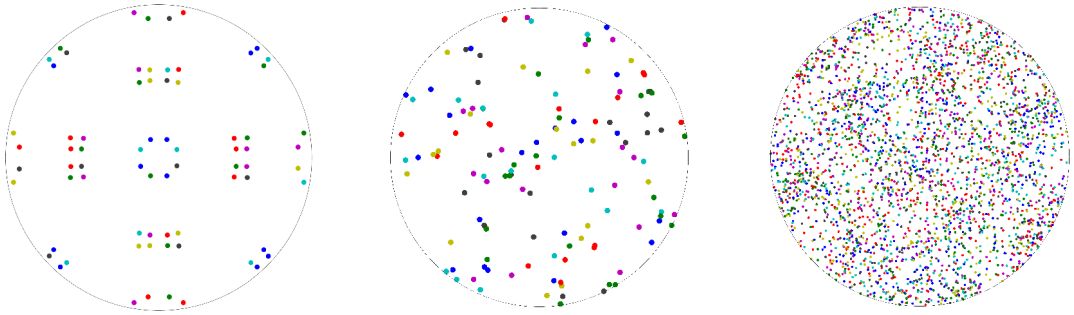


Figure 4.11 – Répartition de la taille des lattes martensitiques

14. Ces directions dépendent des relations d'orientations (cf. §1.2.3.1) ce qui n'est pas pris en compte dans la présente microstructure virtuelle.

4.4.2 Génération des orientations cristallographiques

Le processus de la transformation martensitique induit toujours certaines relations d'orientation entre la structure martensitique et celle de l'austénite (cf. §1.2.3.1). Dans le contexte actuel, la structure de l'acier AISI H11 est équivalente à celles des aciers martensitiques à faible teneurs en carbone étudiés par Morito et al. [8, 44]en terme de composition chimique mais également en terme de stéréologie (cf. §1.2.3.1) De par ce constat, la relation d'orientations de Kurdjumov-Sachs (KS) [49] est par hypothèse considérée. On rappelle que celle-ci est définie par 24 variants permettant de constituer des bases de rotation selon les relations de parallélisme [15] $\{1\,1\,1\}_\gamma||\{1\,1\,0\}_{\alpha'}$ et $\langle 1\,1\,0\rangle_\gamma||\langle 1\,1\,1\rangle_{\alpha'}$ (Figure 4.12a). Si l'on considère des orientations aléatoires des anciens grains austénitiques (Figure 4.12b), la génération des orientations des lattes martensitiques [16] est réalisée d'une manière assez limpide, plus concrètement par le biais d'une rotation de celles de la structure austénitique autour des variants de la relation KS (Figure 4.12c).



(a) Relation d'orientations KS

(b) Orientations de la structure austénitique

(c) Orientations de la structure martensitique

Figure 4.12 – Figures de pôle (100) de la relation d'orientations KS, des orientations de la structure austénitique et celle de la martensite.

4.4.3 Procédure de maillage

La procédure de maillage des cellules de Voronoï constitue une opération assez délicate, et ce, en raison de la topologie complexe de celles-ci. Si une technique de maillage multiphasé, ne tenant pas compte du caractère complexe de la topologie, peut éventuellement être envisagée, celle-ci ne permet guère d'étudier d'une manière concrète l'incompatibilité des champs mécanique locaux entre les lattes martensitiques. Dans le contexte actuel, la procédure de maillage est menée selon l'approche proposée par Quey et al. [312] dans Neper en vue d'obtenir une discrétisation spatiale de « haute qualité » tenant compte des joints de lattes martensitiques.

Pour ce faire, la procédure de maillage requiert des modifications de la topologie de la microstructure virtuelle. Celles-ci s'attachent plus précisément à éliminer les arêtes des

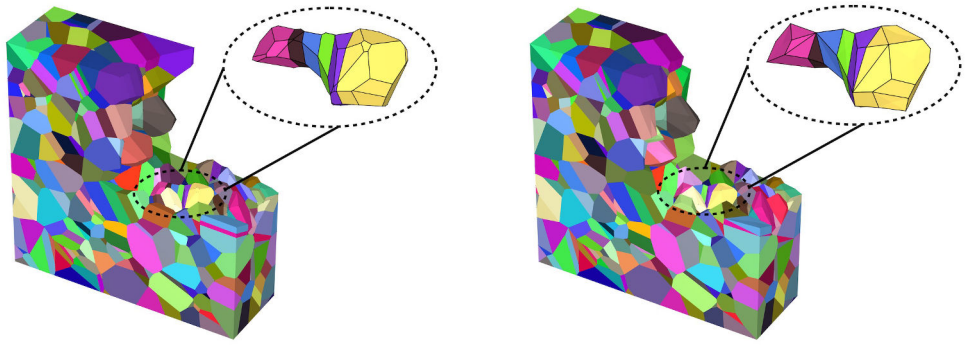
15. Les orientations des 24 variants de la relation KS sont données dans l'Annexe B.

16. On note que les orientations des lattes martensitiques sont données par les angles d'Euler selon la définition de Bunge [16].

polyèdres de Voronoï ayant une longueur inférieure à un certain seuil l_c donné par :

$$l_c = 0,5\, r_c\, (V_k)^{\frac{1}{3}} \tag{4.96}$$

où V_k est le volume de la cellule k et r_c un paramètre permettant de définir la taille des éléments finis ($r_c = 1,15$ dans ce contexte). L'élimination des arêtes induit également celle de bon nombre de sommets et de faces de cellules de Voronoï. Une telle opération implique des interpolations des arêtes concernés par l'élimination effectuée permettant la reconstruction de la microstructure virtuelle en question (Figure 4.13).



(a) Avant l'élimination et l'interpolation des arêtes

(b) Après l'élimination et l'interpolation des arêtes

Figure 4.13 – Modifications de la topologie des cellules de Voronoï. Ces dernières sont colorées selon les orientations cristallographiques générées

La discrétisation spatiale est menée de manière à positionner les divers nœuds des éléments finis sur l'ensemble des sommets, arêtes, faces, ou encore au sein de l'espace volumique des cellules de Voronoï de la microstructure modifiée. À noter que les éléments finis utilisés sont des éléments tétraédriques de second ordre et d'intégration complète (C3D10 dans Abaqus). Ces deniers sont adaptés à une technique de maillage libre (4.14).

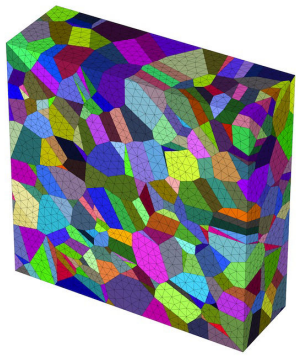
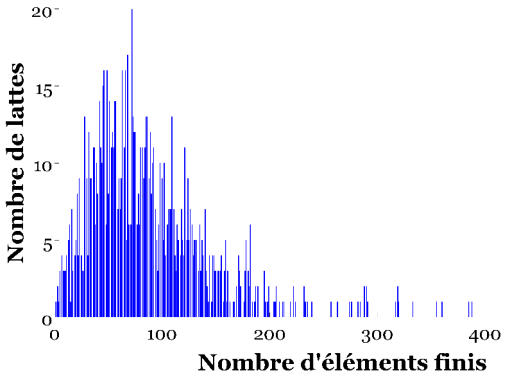


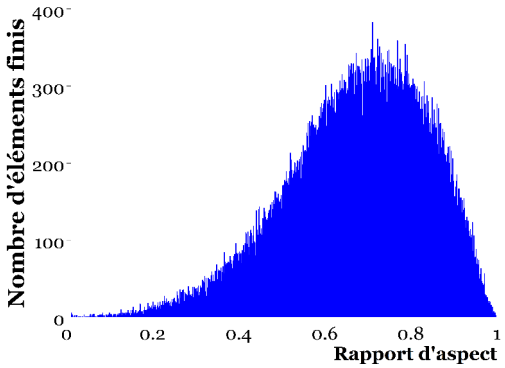
Figure 4.14 – Discrétisation spatiale de la microstructure virtuelle

En l'état actuel, le paramètre r_c donné dans la relation (5.95) fournit une densité de 84177 éléments, *i.e.* près 82 par cellule (Figure 4.15a). Une telle densité est bien souvent

assez adéquate pour une analyse multi-échelle [312]. Par ailleurs, la Figure 4.15b illustre la qualité du maillage donnée selon le rapport d'aspect. Par définition, le rapport d'aspect est le rapport entre la plus longue arête et la plus courte hauteur, le tout rapporté à un tétraèdre parfait un rapport d'aspect égal à l'unité. Autrement dit, plus ce paramètre tend vers zéro, plus la qualité de l'élément concerné est médiocre. À l'issue de la procédure de maillage, 502 éléments présentent quelques distorsions, *i.e.* près de 0,59% de l'ensemble des éléments, ce qui n'a quasiment aucune influence sur les calculs numériques.



(a) Répartition du nombre d'éléments finis par cellule de Voronoï

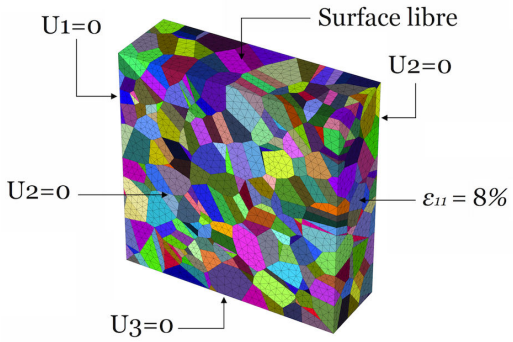


(b) Répartition du rapport d'aspect des éléments finis

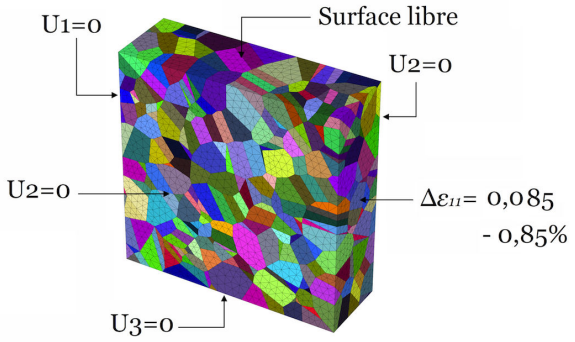
Figure 4.15 – Illustration de la répartition du nombre d'éléments finis par cellule de Voronoï et de la qualité du maillage

4.4.4 Définition des chargements

Dans le contexte où l'on s'attache au comportement non linéaire en surface de l'acier AISI H11, les conditions aux limites sont établies de manière à considérer une surface libre (Figure 4.16).



(a) Chargement monotone



(b) Chargement cyclique (9 cycles)

Figure 4.16 – Conditions aux limites

Les conditions aux limites expérimentales, *i.e.* issues des essais mécaniques par le bais de la technique de corrélation d'images (DIC), ne peuvent être considérées. Ceci est essentiellement dû au fait que l'investigation numérique est menée sur une microstructure virtuelle. Par ailleurs, on note que les conditions de chargement cyclique (Figure 4.16b) sont à peu près équivalentes à celles du premier essai (éprouvette 1) mené dans §2.4.2, *i.e.* de type traction-traction avec un rapport de charge de 10%. Elles sont restreintes à 9 cycles en raison du coût important des calculs par éléments finis (EF).

4.4.5 Parallélisation des calculs

De par la procédure de discrétisation spatiale de la microstructure virtuelle (cf. §4.4.3), il est bien évident qu'un tel maillage comporte un nombre conséquent de degrés de liberté. En l'état actuel, le calcul numérique s'attache à traiter un système d'environs 361095 équations en chaque incrément de temps. La résolution d'un tel système requiert ainsi des capacités de mémoire vive et de stockage assez importantes. Par ailleurs, l'intégration numérique des équations constitutives (cf. §4.2.2) est bien coûteuse en terme de temps de calcul, et ce, en raison du caractère fortement non linéaire de celles-ci.

La parallélisation des calculs par éléments finis (EF) est une technique assez récente et quasi-indispensable pour passer outre de telles restrictions. Dans le contexte actuel, le code Abaqus permet d'effectuer des calculs parallèles selon la méthode FETI (« Finite Element Tearing and Interconnecting ») [253]. Celle-ci consiste à décomposer le maillage en sous-domaines dont les intersections sont données uniquement par des interfaces d'éléments. Chaque sous-domaine s'attache à un processeur donné où la résolution des équations d'équilibre mécanique globales est effectuée d'une manière itérative dans l'espace de Krylov. Cette méthode est bien adaptée pour les calculs parallèles et consomme beaucoup moins de mémoire vive que la méthode de résolution directe de type LU. La méthode FETI se destine à optimiser les déplacements et forces duales aux niveaux des interfaces des sous-domaines en vue d'obtenir des champs mécaniques plus ou moins continue au sein de la microstructure virtuelle.

Par ailleurs, la décomposition de la microstructure virtuelle peut être menée selon bon nombre de techniques. Dans le contexte actuel, cette opération est effectuée de manière quasi-automatique permettant d'obtenir des sous-domaines assez équilibrés en terme du nombre de degrés de liberté. Au total, 8 processeurs cadencés à 2,8 Ghz et 30 Go de mémoire vive par noœud sont utilisés pour chaque calcul par éléments finis (EF). L'ensemble des calculs est mené à l'aide du supercalculateur de type clusters Eos à l'Institut de Mathématiques de Toulouse (IMT).

4.5 Investigation des champs mécaniques locaux

Comme évoqué précédemment, la modélisation numérique multi-échelle vient en complément de l'investigation expérimentale menée au chapitre 2. Dans le contexte actuel, elle se destine à une analyse d'un certain nombre de variables non quantifiées lors des essais mécaniques in-situ avec la corrélation d'images numériques (DIC) (cf §2.4). Celles-ci s'articulent autour du caractère hétérogène et anisotrope du comportement local de l'acier AISI

H11 et concernent, outre les composantes des tenseurs de contraintes $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ et de déformations $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$, essentiellement :

- la contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$,
- la déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$,
- le nombre de systèmes de glissement activés N_s,
- la somme des glissements cumulés dans le temps $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$,
- la dissipation intrinsèque cumulée dans le temps Θ, *i.e.* l'intégrale dans le temps de la relation (4.42),
- le facteur de Taylor-Quinney ι donnée par le rapport de l'intégrale dans le temps de la dissipation intrinsèque Θ sur la puissance des efforts internes articulés autour du comportement non linéaire, *i.e.* $\int_0^t \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} : \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}^p \, dt$.

Dans ce qui suit, l'investigation numérique est menée dans le cadre de sollicitations monotones et cycliques dont les conditions aux limites sont données dans §4.4.4.

4.5.1 Cas du chargement monotone

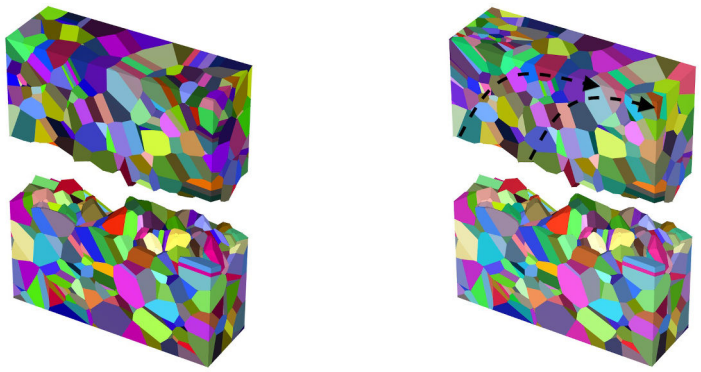
Dans le cadre de sollicitations quasi-statiques, la présente investigation numérique s'intéresse à l'ensemble des paramètres issus de la caractérisation expérimentale réalisée dans §1.3.2, et ce, essentiellement par le biais du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21]. Celles-ci concerne la morphologie des lattes en surface, la texture cristallographique, l'écrouissage interne mais encore le profil de surface. Leur introduction dans la modélisation numérique est effectuée successivement et présentée dans ce qui suit. Dans un dernier point, un intérêt est accordé à la forme du modèle multi-échelle où l'on traite une confrontation entre le modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et sa version modifiée (cf. Tableau 4.2). On note toutefois que l'analyse actuelle s'attache à diverses échelles, *i.e.* l'échelle intragranulaire, des lattes de martensite, des paquets, des anciens grains austénitiques mais également du VER.

4.5.1.1 Effet de la morphologie des lattes en surface

Le traitement de l'effet de la morphologie des lattes de martensite en surface suggère une génération d'une seconde microstructure virtuelle. Celle-ci a pour idée d'engendrer un caractère anisotrope de la morphologie des lattes martensitiques dans les couches superficielles à l'instar de celles générées par le procédé expérimental du traitement des plaques en acier AISI H11 (cf. §1.3.2). Pour ce faire, il convient de reprendre la microstructure générée dans §4.4.1 (Figure 4.17a) et d'effectuer une translation des centres des cellules de Voronoï dans les couches superficielles supérieures, *i.e.* proches de la surface libre dans la direction de sollicitation (Figure 4.17b). Dans le cadre de la procédure actuelle, une profondeur de 75 μm est concernée, *i.e.* la moitié de la hauteur du VER. La translation des centres des cellules de Voronoï suit une évolution non linéaire avec la profondeur étudiée. Ainsi, plus les cellules sont proches de la surface plus elles sont translatées, et ce, en vue d'assimiler les observations expérimentales menées dans §1.3.2. Cette procédure de translation des polyèdres de Voronoï déplace un certain de nombre de cellules en dehors du domaine définissant le VER, *i.e.* engendrant des coordonnées selon la direction X supérieures à 150 μm. Celles-ci sont alors réinjectées sur le côté opposé du VER. Par conséquent, les lattes de martensites

dans les couches superficielles extrêmes ne sont pas nécessairement regroupés en paquets (Figure 4.17b).

La procédure de maillage est identique à celle présentée dans §4.4.3. La nouvelle microstructure virtuelle comporte une densité de 86679 éléments dont l'indice de qualité, *i.e.* le rapport d'aspect est quasiment similaire à la Figure 4.15b. À noter que seul 587 éléments illustrent quelques distorsions, *i.e.* 0,68% de l'ensemble des éléments.



(a) Morphologie isotrope (b) Morphologie anisotrope

Figure 4.17 – Génération d'une microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope des lattes martensitiques en surface

Analyse du comportement mécanique à diverses échelles. À l'échelle *macro* du VER, les réponses mécaniques des deux microstructures virtuelles données par la composante uniaxiale de la contrainte σ_{11} selon ε_{11} sont quasiment identiques (Figure 4.18). Elles reflètent bien la réponse du comportement macroscopique fournie par la mesure d'effort et de déformation par un extensomètre (cf. §1.2.4.1). On note également que les déformations globales sont de l'ordre de 8%, ce qui permet de consolider la taille du VER (cf. §2.5.2).

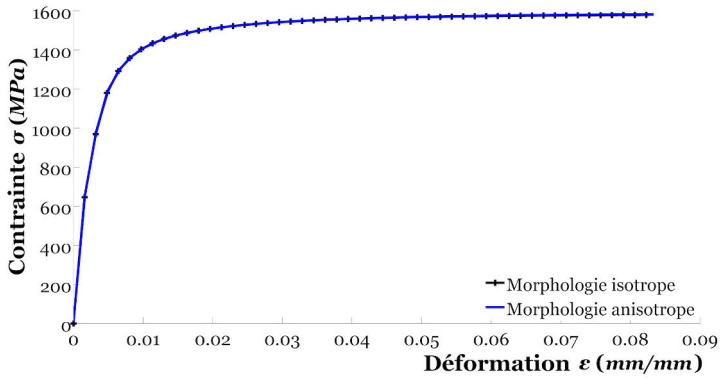
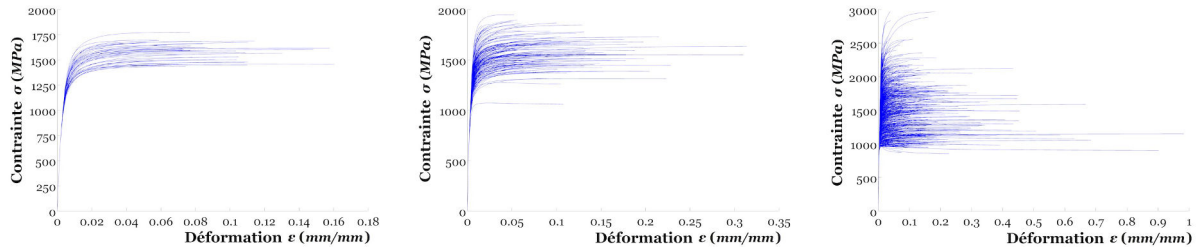


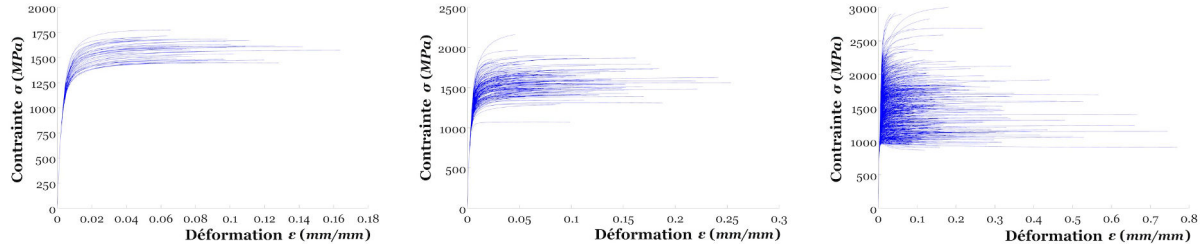
Figure 4.18 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la morphologie des couches superficielles

Si le comportement global provient d'une homogénéisation des composantes de la structure interne de l'acier AISI H11, une analyse locale permet en revanche de mettre en évidence l'effet de la morphologie des lattes de martensite en surface. Les Figures 4.19 et 4.20 illustrent les courbes de comportement uniaxiale monotone de l'acier AISI H11 aux échelles des anciens grains austénitiques, des paquets, mais encore des lattes de martensite respectives des microstructures virtuelles ayant une morphologie isotrope et anisotrope.



(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

Figure 4.19 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface



(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

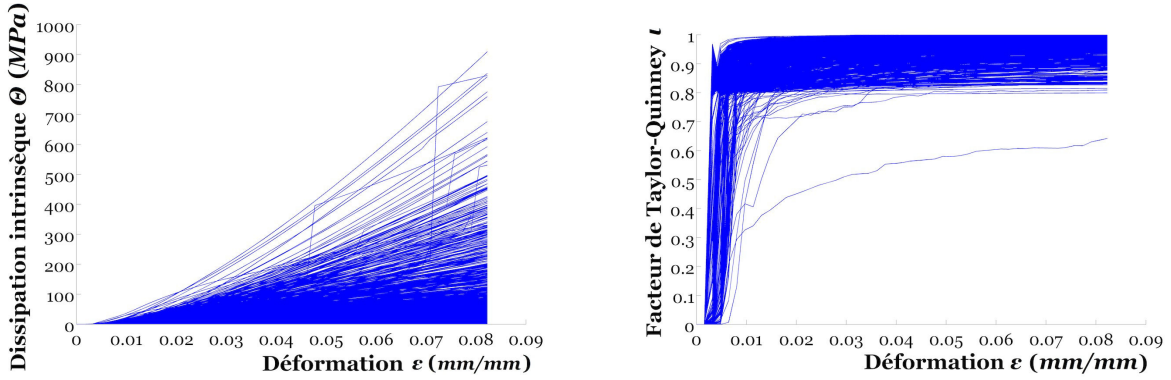
Figure 4.20 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface

Il est clair qu'à de telles échelles, le caractère hétérogène du comportement local de l'acier AISI H11 est bien mis en évidence. Dans une première approche, on constate que cette hétérogénéité a tendance à s'accentuer à des échelles assez fines, notamment celles des lattes martensitiques (Figures 4.19c et 4.20c). Les déformations uniaxiales ε_{11} peuvent atteindre des valeurs assez conséquentes, *i.e.* aux alentours de 1000% de la déformation à l'échelle *macro* du VER pour certaines lattes. Cette constatation est bien cohérente avec les essais mécaniques in-situ réalisés dans §2.4.1. Par ailleurs, les résultats numériques illustrent également une importante dispersion des contraintes uniaxiales locales σ_{11}, notamment à l'échelle des lattes martensitiques (Figures 4.19c et 4.20c). À ce niveau, les contraintes uniaxiales σ_{11} atteignent des valeurs proches de 200% mais aussi de 60% de la contrainte à l'échelle *macro* du VER. Cependant, il intéressant de noter que l'évolution des contraintes à une échelle locale ne suit pas nécessairement celles des déformations. Si l'écoulement

non linéaire d'une latte martensitique donne naissance à une contrainte de près de 1000 MPa, la déformation associée n'est pas nécessairement plus conséquente que celle d'une latte dont la contrainte d'écoulement est de l'ordre de 2000 MPa. Cet aspect s'explique essentiellement par le nombre de systèmes de glissement activés N_s et des glissements cumulés $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$ selon l'orientation cristallographique et géométrique de la latte en question.

L'apport d'une morphologie anisotrope a pour conséquence une perturbation du comportement mécanique local. Si cette perturbation n'est guère mise en évidence à l'échelle *macro* (Figure 4.18), elle est bien ressortie aux diverses échelles locales (Figures 4.19 et 4.20), surtout celle des lattes de martensites (Figures 4.19c et 4.20c). La microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface affiche des valeurs de déformations locales maximales ε_{11} inférieures à celles de la microstructure virtuelle ayant une morphologie superficielle isotrope à l'échelle des lattes et des paquets (Figures 4.19b et 4.20b). Cet aspect a tendance à s'inverser à l'échelle des grains austénitiques parents (Figures 4.19a et 4.20a). Dans ce même contexte, la morphologie anisotrope induit dans certaines lattes martensitiques et paquets des déformations ε_{11} plus conséquentes que celles observées pour la morphologie isotrope. On note toutefois que ces aspects concernent également les contraintes locales σ_{11}. Ces constatations sont surtout liées à des effets géométriques et d'interaction. Plus concrètement, l'apport d'une morphologie anisotrope modifie l'orientation géométrique des joints de lattes par rapport à la direction de sollicitation mais également par rapport aux cristaux constitutifs voisins.

Par ailleurs, un autre phénomène ressort lors de l'investigation expérimentale concerne la micro-plasticité. Pour rappel, la micro-plasticité se traduit par un écoulement non linéaire local présent avant celui qui est observé à l'échelle *macro*. En vue de mettre en évidence cet aspect, il convient de tracer l'évolution de la dissipation intrinsèque Θ ou éventuellement du facteur de Taylor-Quinney ι à l'échelle des lattes de martensite selon la déformation uniaxiale ε_{11} à l'échelle *macro* du VER (Figure 4.21).



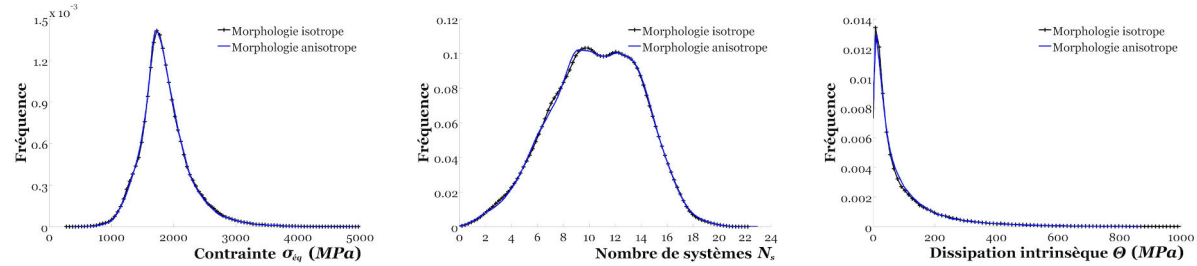
(a) Dissipation intrinsèque Θ (b) Facteur de Taylor-Quinney ι

Figure 4.21 – Évolution de la dissipation intrinsèque Θ et du facteur de Taylor-Quinney ι à l'échelle des lattes martensitiques selon la déformation uniaxiale à l'échelle *macro*.

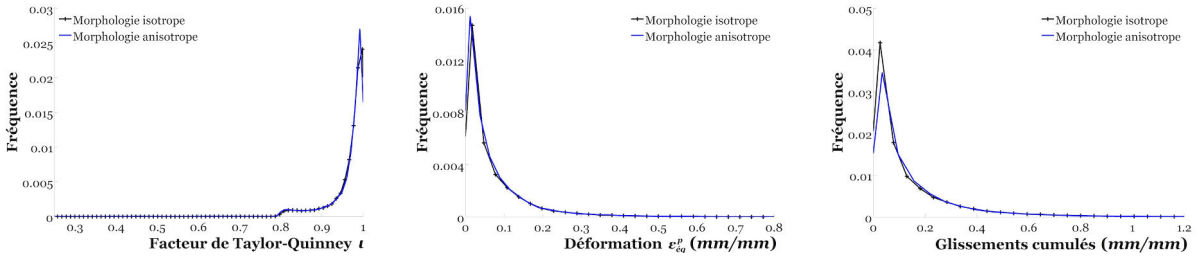
Il apparaît clairement que bon nombre de lattes martensitiques présentent des dissipations intrinsèque Θ bien avant l'écoulement non linéaire à l'échelle *macro* (Figure 4.21).

Cet aspect est bien cohérent avec l'investigation expérimentale menée dans §2.4.1 où l'on constate que les déformations locales peuvent dépasser le seuil d'élasticité dans la partie linéaire du chargement. À noter que le phénomène de micro-plasticité est présent quelques soit la morphologie utilisée.

Analyse des distributions des variables. D'un point de vue statistique, les distributions de l'ensemble des variables considérées à l'issue du chargement n'illustrent guère de différences significatives entre les deux types de morphologies (Figure 4.22 et Tableau 4.8). Si les distributions des contraintes équivalentes au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ et du nombre de systèmes activés N_s sont quasiment identiques entre les deux microstructures virtuelles, de faibles variations sont constatées sur les variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ



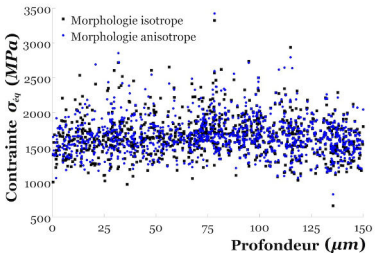
(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.22 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement

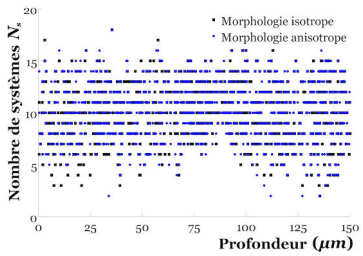
Tableau 4.8 – Moyennes des variables étudiées à l'issue du chargement

Variable	$\sigma_{éq}$ (MPa)	N_s	Θ (MPa)	ι	$\varepsilon^{in}_{éq}$ (%)	$\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} \lvert\dot{\gamma}^s\rvert \, dt$
Morphologie isotrope	1859,00	11,00	100,04	0,96	0,07	0,15
Morphologie anisotrope	1858,30	11,00	118,33	0,97	0,07	0,14

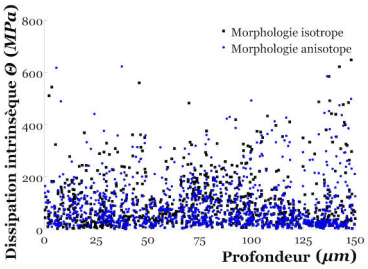
En vue d'une meilleure investigation de l'effet de la morphologie des lattes superficielles dans les microstructures virtuelles, il est bien plus pertinent de mener une analyse sur les distributions spatiales des variables étudiées. Pour ce faire, celles-ci sont données à l'échelle des lattes de martensite selon leur profondeur (Figure 4.23).



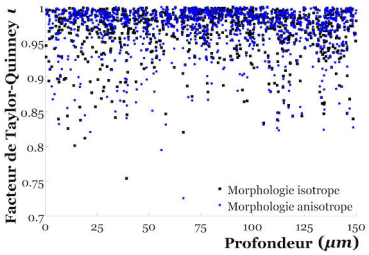
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



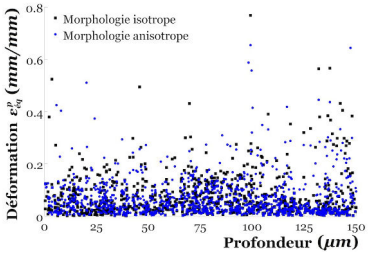
(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



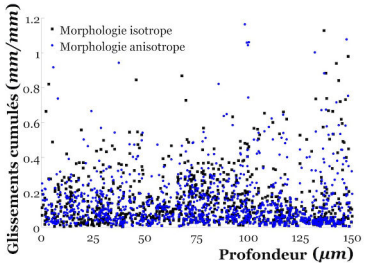
(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι



(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$



(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

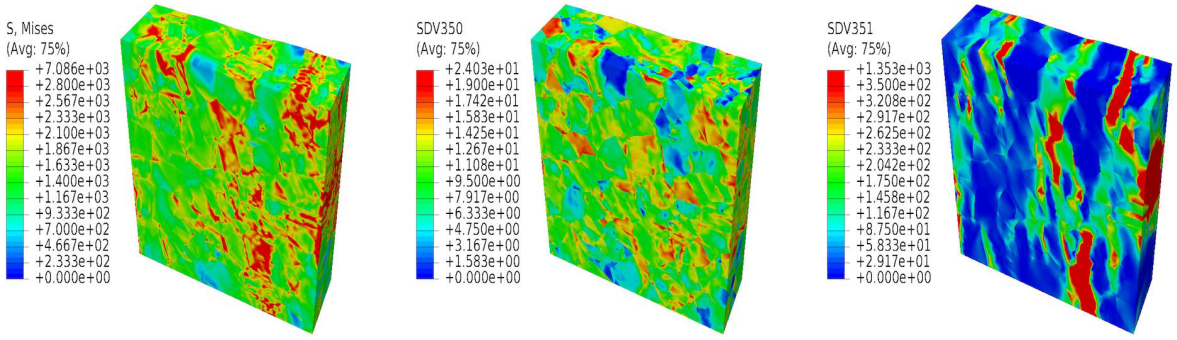
Figure 4.23 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement

Dans un tel contexte, l'effet d'interaction évoqué précédemment est bien apparent. Plus concrètement, les deux types de morphologie illustrent quelques dispersions de l'ensemble des variables pour une même profondeur. Cet aspect est également observé dans la partie inférieure des microstructures virtuelles (Figure 4.17). Pourtant, celle-ci ne subit aucune modification morphologique. Un effet d'interaction des couches superficielles sur la partie inférieure des microstructures virtuelles semble donc bien exister.

À l'issue de la transformation morphologique, une latte martensitique quelconque, ayant une orientation cristallographique et à une profondeur donnée, peut se voir subir une contrainte de von Mises modifiée. Bien que cette modification ne soit pas conséquente, elle impacte l'écoulement non linéaire via une activation potentielle d'un certain nombre de systèmes de glissement N_s, mais de glissements cumulées $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$ qui sont liés à la déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ et à l'état structural interne de l'acier AISI H11. De ce fait la distribution spatiale de la dissipation intrinsèque Θ et celle du facteur de Taylor-Quinney ι sont également perturbés. Outre les phénomènes d'interaction, ces aspects s'attachent également à l'orientation des joints de lattes par rapport à la direction de sollicitation mais aussi à la distance des lattes martensitiques de la surface sollicitée.

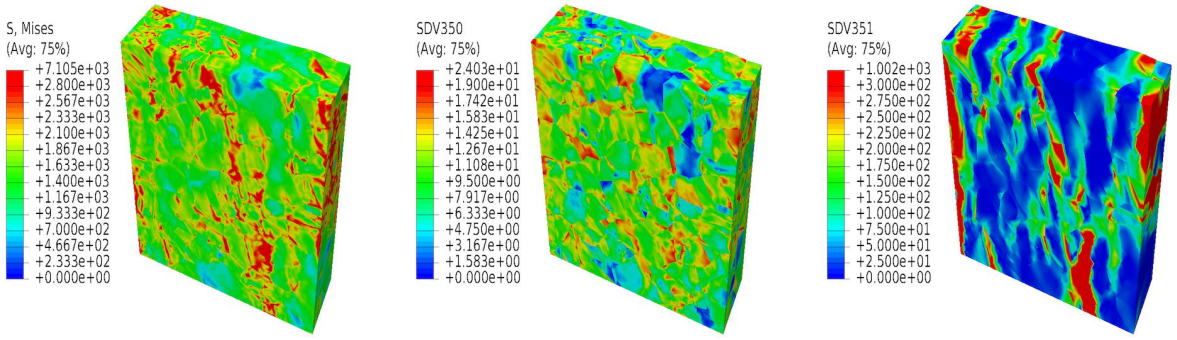
Analyse des cartographies des isovaleurs. L'analyse des cartographies des isovaleurs a surtout pour objectif une investigation des schémas de localisation mis en évidence dans §2.4.1, ou plus précisément, une analyse de l'impact de la morphologie des lattes de martensite superficielles sur ces schémas. Cependant, l'intérêt est porté aux variables non traités dans l'approche expérimentale, à savoir la contrainte de von Mises $\sigma_{éq}$, le nombre de système

de glissement activés N_s et la dissipation intrinsèque Θ (Figures 4.24 et 4.25).



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 4.24 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface à l'issue du chargement



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 4.25 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface à l'issue du chargement

À l'inverse des distributions spatiales des variables étudiées, la mise en évidence de l'effet d'interaction n'est guère aisée. Quelle que soit la variable considérée, les cartographies des isovaleurs présentent quasiment les mêmes champs pour la moitié inférieure des deux microstructures virtuelles. Cependant, la translation des champs de l'ensemble des variables considérées selon la morphologie anisotrope des lattes de martensite dans les couches superficielles ne fait aucun doute. Ceci est bien cohérent avec l'investigation expérimentale menée dans §2.4.1 où l'on constate un tel phénomène au niveau des couches superficielles pour le champs de de déformation. Il est clair que les zones à forte localisation ou inversement ont tendance à translater vers la surface de sollicitation (Figure 4.25). Celles-ci s'adaptent à la morphologie anisotrope des couches superficielles et suivent également les lattes de martensite placées dans le côté opposé de la surface de sollicitation.

Les cartographies des isovaleurs de la contrainte équivalente de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figures 4.24a et 4.25a), montrent une concentration de celle-ci autour des joints de lattes martensitiques, voire des paquets ou encore des anciens grains austénitiques. Le fait qu'une localisation marquée apparaisse entre deux lattes de martensite au sein d'un même paquet est due à leurs orientations cristallographiques (cf. §4.5.1.2), *i.e.* à une désorientation conséquente entre celles-ci. Cet aspect est également valable aux schémas de concentration aux joints des paquets et des anciens grains austénitiques. Autrement dit, les orientations cristallographiques, ou encore les désorientations cristallographiques, constituent bien un paramètre prépondérant dans les zones de concentration des contraintes équivalentes au sens de von Mises $\sigma_{éq}$. L'ajout d'une morphologie anisotrope des lattes martensitique en surface ne fait que translater de telles zones.

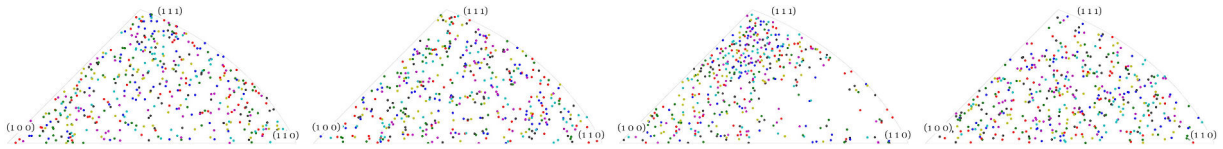
Le nombre des systèmes de glissement activés N_s (Figures 4.24b et 4.25b) ne présentent guère de localisations marquées au niveau des joints des cristaux constitutifs. Au sein des lattes de martensite, celui-ci est quasiment homogène et s'attache essentiellement à leurs orientations cristallographiques. Il est également intéressant de noter que les lattes martensitiques présentant peu de systèmes de glissement activés illustrent le plus souvent une faible contrainte équivalente de von Mises $\sigma_{éq}$.

Par ailleurs, la localisation de la dissipation intrinsèque Θ au niveau des joints des lattes de martensite n'est guère marquée (Figures 4.24c et 4.25c). Cependant, on peut constater des réseaux de bandes de localisation (cf. §2.4.1) étant donné que le calcul de la dissipation intrinsèque Θ fait intervenir la déformation inélastique équivalente de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$. À noter également que, d'un point de vue global, celle-ci s'attache aux zones de concentration bien conséquentes des contraintes de von Mises $\sigma_{éq}$.

En outre, une ondulation du profil de la surface libre est mise en évidence à l'issue du chargement (Figures 4.24 et 4.25), *i.e.* l'effet de surface. À savoir que l'apport d'une morphologie anisotrope impacte bel et bien le profil de surface engendré.

4.5.1.2 Effet de la texture cristallographique en surface

L'investigation de l'effet de la texture cristallographique des couches superficielles requiert le traitement d'un certain nombre de groupements d'orientations (Figure 4.26a).



(a) Texture T1 (b) Texture T2 (c) Texture Texp (d) Partie inférieure

Figure 4.26 – Figures de pôles inverses selon la direction de sollicitation des diverses textures traitées

Dans le contexte actuel, outre les orientations cristallographiques utilisées dans §4.5.1.1 (Figure 4.26a) que l'on nomme « T1 », deux autres groupements d'orientations cristallographiques sont considérés. Si le premier (« T2 ») (Figure 4.26b) s'attache à des orientations virtuelles, *i.e.* à l'instar de Texture T1 utilisant les relations d'orientations de type KS

(cf. §4.4.2), le second groupement (« Texp ») (Figure 4.26c) utilise les orientations cristallographiques issues des analyses EBSD [17] menées dans §1.3.2. À savoir que la prise en compte de l'ensemble des groupements s'attachent uniquement aux couches superficielles supérieures des microstructures virtuelles (Figure 4.17). La partie inférieure conserve les mêmes orientations cristallographiques que dans §4.5.1.1 (Figure 4.26d). Par ailleurs, la présente investigation traite uniquement la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface (Figure 4.17b).

Analyse du comportement mécanique à diverses échelles. Le comportement mécanique à l'échelle *macro* de la microstructure virtuelle est quasiment identique pour l'ensemble des groupements d'orientations cristallographiques (Figure 4.27). Celui-ci est bien cohérent avec le comportement macroscopique acquis par un extensomètre (cf.§1.2.4.1). Cependant, il apparaît que le groupement « Texp » issu de la caractérisation expérimentale présente à l'issue du chargement une déformation globale légèrement supérieure à celles des orientations « T1 » et « T2 ». Ceci peut éventuellement être lié à la tendance à un caractère anisotrope plus marqué des orientations cristallographique en surface.

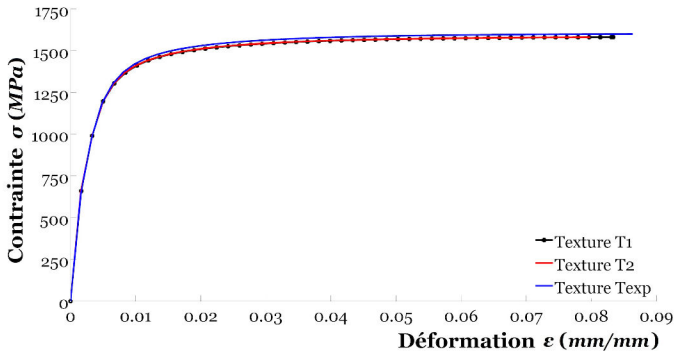
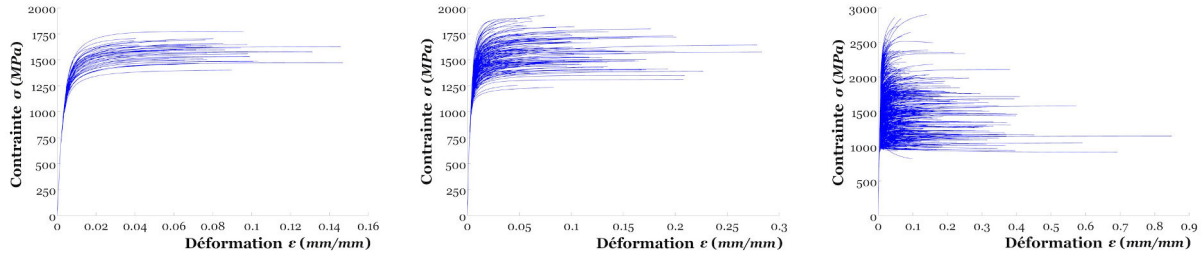


Figure 4.27 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la texture cristallographique des couches superficielles

Par ailleurs, le caractère hétérogène du comportement local est bien présent [18] (Figures 4.28 et 4.29). Il est clair que les orientations cristallographiques des couches superficielles ont tendance à perturber celui-ci, et ce, essentiellement à l'échelle des lattes de martensite (Figures 4.28c et 4.29c). En effet, la modification des orientations cristallographiques des couches superficielles peut induire un changement dans le comportement mécanique local des lattes martensitiques concernées. Ceci peut éventuellement avoir pour conséquence un effet d'interaction, notamment avec la partie inférieure de la microstructure virtuelle, à l'image de l'impact de la morphologie des couches superficielles (cf. §4.5.1.1). Ces aspects sont communs à l'ensemble des groupements d'orientations « T1 », « T2 » et « Texp ».

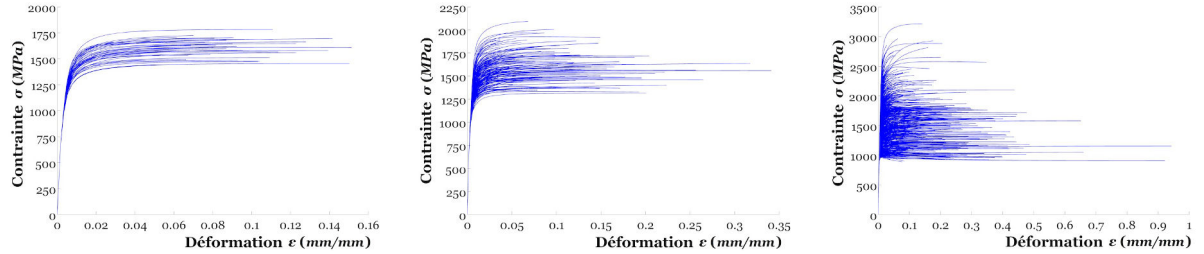
En dépit du caractère assez anisotrope des orientations « Texp », le niveau d'hétérogénéités du comportement local dans l'ensemble du domaine de la microstructure virtuelle

17. Pour rappel, ces analyses sont effectuées à postériori du procédé de traitement des plaques (cf. §1.3.1).
18. Les courbes de comportement locales associées à la texture « T1 » sont traitées dans §4.5.1.1 (Figure 4.20).



(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

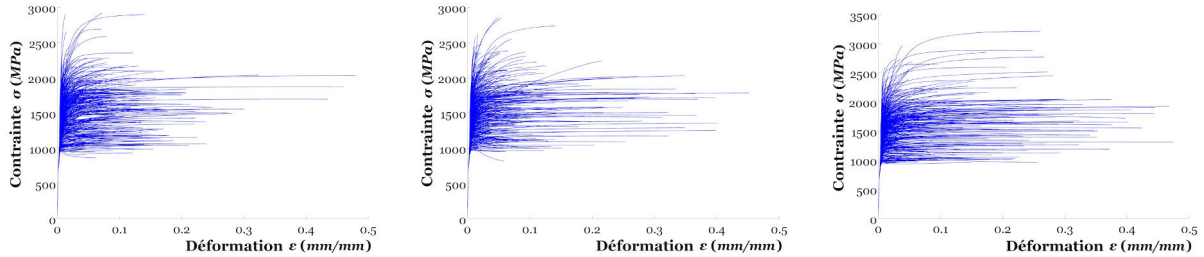
Figure 4.28 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant la texture « T2 » des couches superficielles



(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

Figure 4.29 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant la texture « Texp » des couches superficielles

reste proche de celui des textures « T1 » et « T2 » (Figures 4.28 et 4.29). En vue de mettre en évidence la particularité du comportement local liée à de telles orientations, il convient de représenter celui-ci uniquement pour les couches superficielles (Figure 4.30).



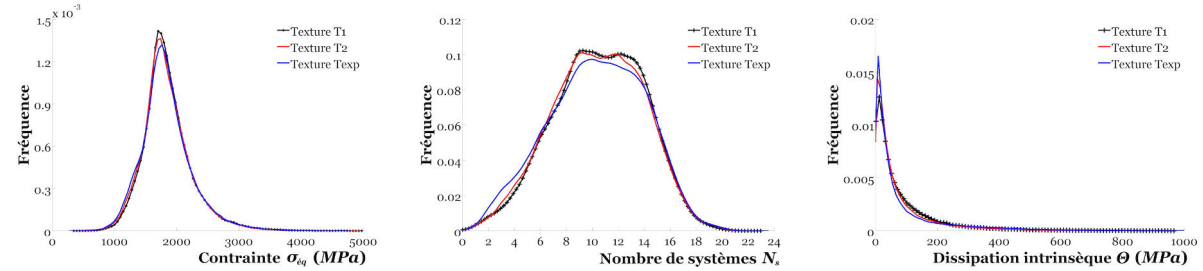
(a) Texture T1 (b) Texture T2 (c) Texture Texp

Figure 4.30 – Courbes de comportement monotone uniaxiale des couches superficielles à l'échelle des lattes martensitiques pour diverses orientations cristallographiques

De par une telle approche, il est clair que le niveau relatif de l'hétérogénéité du comportement local du groupement des orientations « Texp » demeure assez équivalent à celui des textures « T1 » et « T2 ». Cependant, la déformation non linéaire cumulée donnée par

les orientations « Texp » est bien plus conséquente que celles des groupements « T1 » et « T2 ». Cet aspect est en effet lié au fait que bon nombre de lattes de martensite possèdent des plans (1 1 1) dans la direction de sollicitation. De ce fait, les systèmes de glissement liés aux plans (1 1 0) se retrouvent favorablement orientés pour un cumul d'écoulement non linéaire, *i.e.* à 45° de la direction de sollicitation pour un mécanisme « easy glide ».

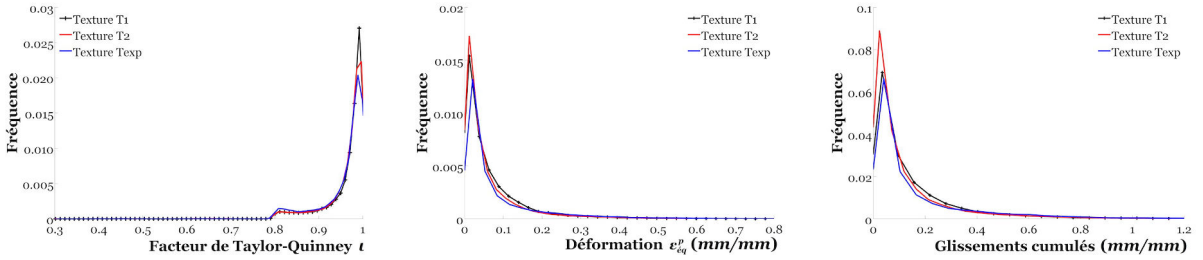
Analyse des distributions des variables. À l'exception des contrainte équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 4.31a), les distributions statistiques des variables étudiées illustrent une certaine différence entre le groupement d'orientations « Texp » d'une part et ceux « T1 » et « T2 » d'autre part (Figure 4.31). En dépit d'un écoulement non linéaire plus conséquent des couches superficielles pour les orientations « Texp » (Figure 4.30), celles-ci s'attachent à un nombre de systèmes de glissements activés global N_s moindre que « T1 » et « T2 » (Figure 4.31b). Par conséquent, les distributions des autres variables, à savoir la dissipation intrinsèque Θ, le facteur de Taylor-Quinney ι et la déformation inélastique équivalente suivent plus ou moins la même tendance que les glissements cumulés $\varepsilon^{in}_{éq}$. Ces constatations permettent de conclure qu'un écoulement non linéaire assez important n'est pas nécessairement lié au nombre de systèmes de glissement activés N_s. À savoir que dans le contexte des orientations « Texp », bon nombre de plans (1 1 1) sont orientés selon la direction de sollicitation. De ce fait, le glissement selon cette direction des systèmes concernés rencontrent peu d'obstacles, d'où la différence des glissements cumulés.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$

(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι

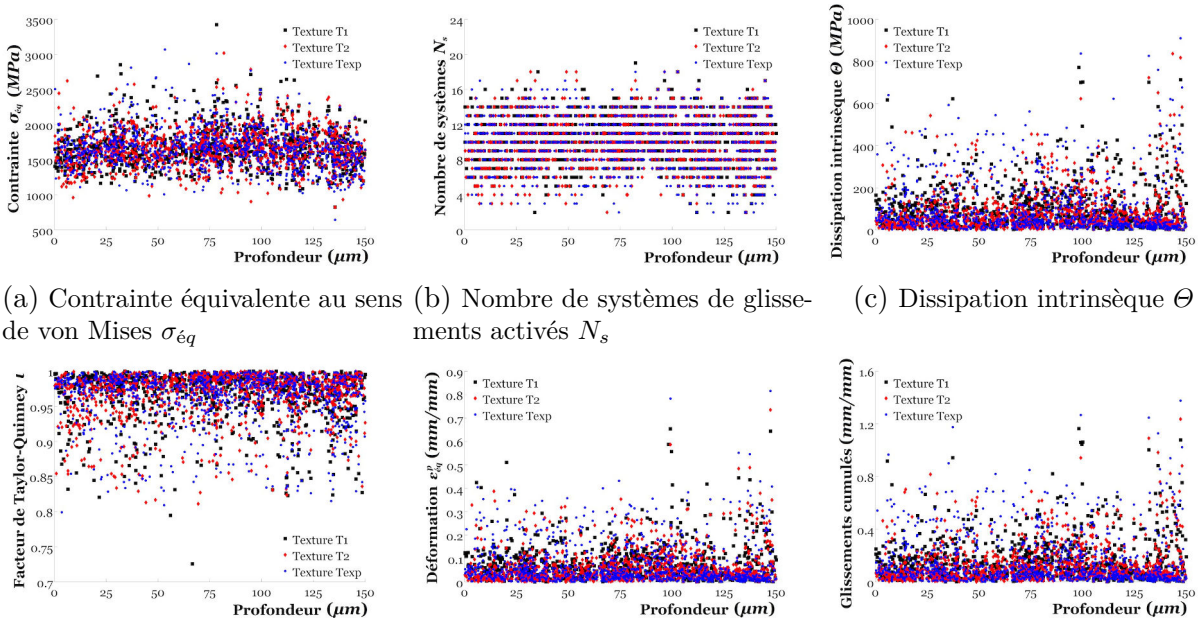
(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$

(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.31 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement

Les distributions spatiales n'illustrent guère de variation significative de l'ensemble des variables étudiées entre les couches superficielles et la partie inférieure de la microstructure

virtuelle (Figure 4.32). Seules quelques augmentations assez faibles des variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ sont à peine constatées pour le groupement d'orientations « Texp ». Cet aspect confirme que le caractère hétérogène du comportement local demeure bien présent pour ces orientations. Par ailleurs, il est clair que l'apport de nouvelles orientations cristallographiques dans les couches superficielles amplifie l'effet d'interaction vis-à-vis d'une variation morphologique. L'ensemble des variables présentent une dispersion bien plus importante dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle que celle constatée dans §4.5.1.1 (Figure 4.23). De ce fait, il est limpide de conclure que les orientations cristallographiques sont un paramètre de premier ordre par rapport à la morphologie des cristaux constitutifs influençant le comportement local.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$

(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

(c) Dissipation intrinsèque Θ

(d) Facteur de Taylor-Quinney ι

(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$

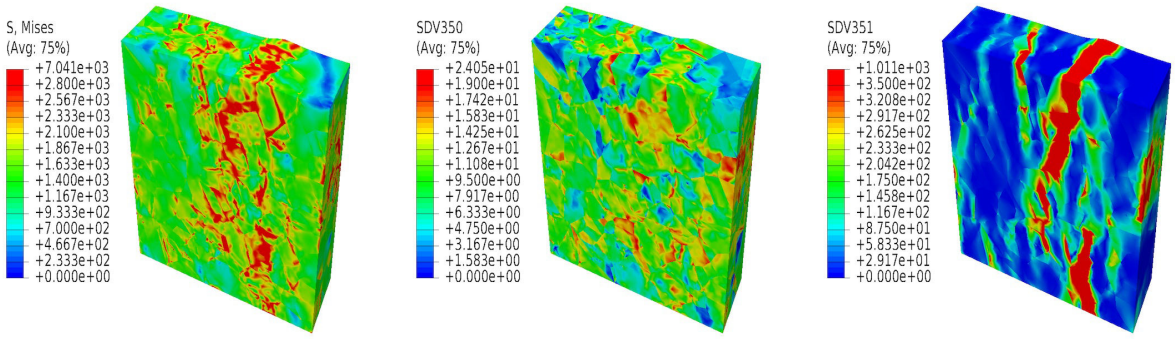
(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.32 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement

Analyse des cartographies des isovaleurs. Les cartographies des isovaleurs des textures « T2 » et « Texp » (Figures 4.33 et 4.34) s'apparentent à celle de « T1 » établie dans §4.5.1.1 (Figure 4.25). Les champs mécaniques locaux dans la partie inférieure des microstructures virtuelles sont quasiment identiques et la mise en évidence de leur perturbation via la présente analyse n'est guère aisée. Cependant, les couches superficielles illustrent clairement une variation du comportement mécanique local. Il évident que les zones de concentration des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$, *i.e.* les joints de lattes de martensite, dépendent des orientations cristallographiques de celles-ci. Par ailleurs, en dépit d'un caractère anisotrope assez marqué du groupement d'orientations « Texp », une homogénéisation du comportement local dans les couches superficielles n'est guère constatée

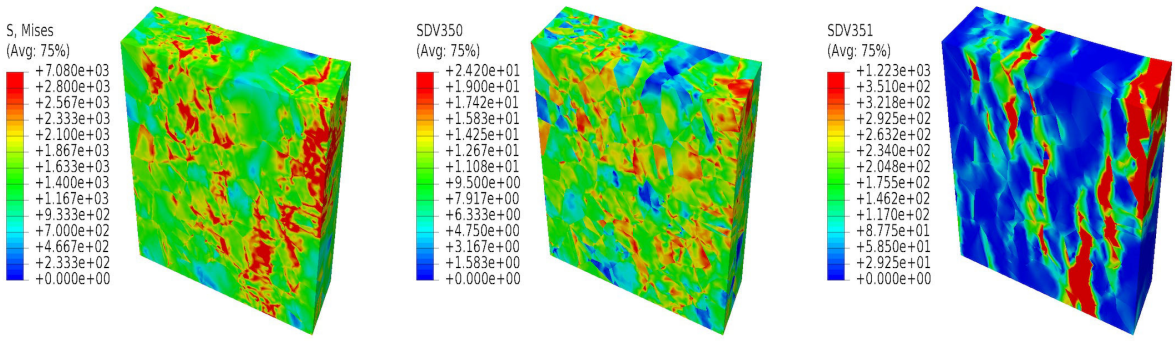
(Figure 4.34). Une dispersion de désorientations entre les lattes de martensite en surface demeure toujours présente, d'où l'hétérogénéité des champs mécaniques.

Les cartographies des dissipations intrinsèques Θ présentent des schémas de localisation représentatives de l'écoulement non linéaire à l'échelle *macro*. On rappelle que ce phénomène est bien mis en évidence dans l'investigation expérimentale (cf. §2.4.1). À noter également que les zones à fortes localisation suivent quasiment les mêmes tendances que celles des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 4.33 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle avec une texture T2 des couches superficielles à l'issue du chargement

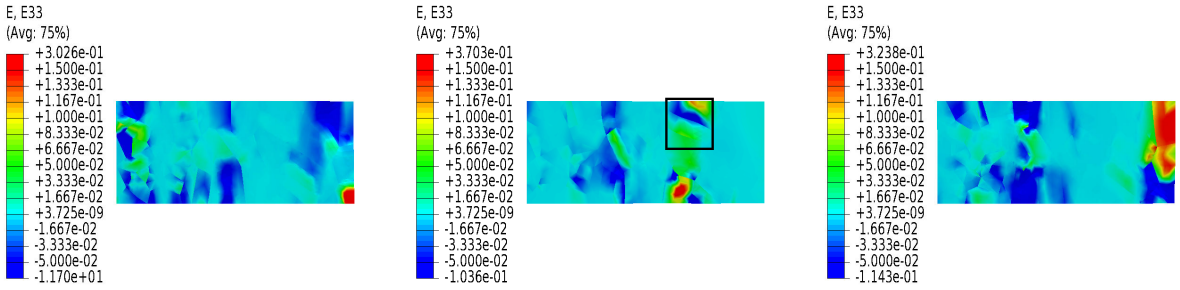


(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 4.34 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle avec une texture Texp des couches superficielles à l'issue du chargement

L'analyse des cartographies des isovaleurs permet également une quantification des profils de surfaces libres à l'issue du chargement (Figure 4.35). Si l'apport d'une morphologie anisotrope des lattes de martensite en surface se contente d'une translation des ondulations du profil de surface (cf. §4.5.1.1), la modification des orientations cristallographiques s'attache à de fortes perturbations de ces reliefs. Plus typiquement, des zones ayant des coordonnées positives selon la direction Z normale à la surface libre peuvent éventuellement

se voir attribuer des valeurs négatives et vice versa (Figure 4.35).

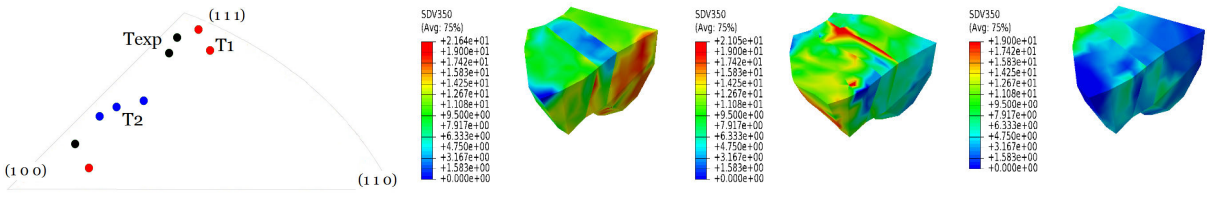


(a) Texture T1 (b) Texture T2 (c) Texture Texp

Figure 4.35 – Cartographies des isovaleurs des déformation ε_{33} selon les orientations cristallographiques des couches superficielles à l'issue du chargement

Il est certain que le comportement local de l'acier AISI H11 est assez complexe, et plus particulièrement au niveau de la surface libre. Celui-ci est influencé par les phénomènes locaux évoqués précédemment, à savoir les effets d'interaction et de surface. Pour mettre en évidence de tels effets, il convient de s'intéresser à un groupe de lattes de martensite situé au niveau de la surface libre, *i.e.* de la zone encadrée de la Figure 4.35b.

Si les orientations des lattes martensitiques issue de la texture « Texp » s'attachent à un nombre réduit d'activation de systèmes de glissement N_s (Figure 4.36d), les lattes ayant des orientations du groupement « T1 » affiche des valeurs de N_s bien plus conséquentes (Figure 4.36b). Pourtant, l'ensemble des orientations cristallographiques sont plus ou moins proches (Figure 4.36a). Les valeurs de N_s données par les lattes martensitiques de la texture « T1 » sont quasiment équivalentes à celles de la texture « T2 » (Figure 4.36c). À savoir que les orientations de ces dernières permettent une activation assez aisée de bon nombre de systèmes de glissement, *i.e.* des directions entre $\langle 1\,1\,1 \rangle$ et $\langle 1\,0\,0 \rangle$ parallèles à l'axe de sollicitation. Le fait que les lattes martensitiques du groupement « T1 » affichent des valeurs conséquentes de N_s est essentiellement due à la complexité des mécanismes internes, notamment une multiaxialité locale du chargement mais également une surface libre.



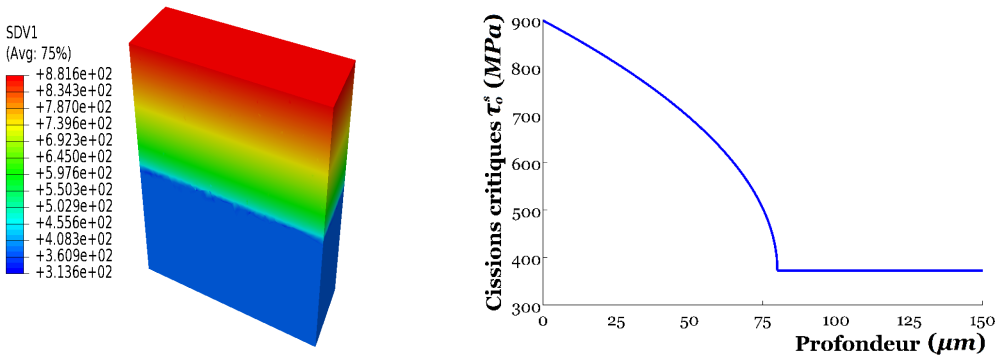
(a) Orientations cristallographiques (b) Texture T1 (c) Texture T2 (d) Texture Texp

Figure 4.36 – Nombre de systèmes activés N_s selon les orientations cristallographiques des couches superficielles pour une sélection de lattes martensitiques situées au niveau de la surface libre

4.5.1.3 Effet de l'écrouissage en surface

La prise en compte de l'écrouissage des couches superficielles induit par le procédé de traitement des plaques en acier AISI H11 (cf. §1.3.2) s'attache, par hypothèse, à un gradient des cissions critiques τ_0^s de l'ensemble des systèmes de glissement s 4.37. Celui-ci est introduit par le biais d'une fonction de type puissance des coordonnées des points de Gauss selon la direction Z normale à la surface libre. À savoir que l'attribution des nouvelles valeurs des cissions critiques τ_0^s est effectuée indépendamment des orientations ou des positions globales des lattes de martensite dans les couches superficielles. Autrement dit, le gradient des cissions critiques τ_0^s est également présent à l'échelle intragranulaire, *i.e.* au sein même des lattes martensitiques.

En outre, il est également important de noter que les valeurs des cissions critiques sont assez largement amplifiées, *i.e.* près de 300% au niveau de la surface libre. Le profil de leur évolution ne suit pas exactement la même tendance que celui de la dureté acquise par nanoindentation (Figure 1.29a). Ces aspects sont considérés en vue d'une meilleure appréhension de l'effet de l'écrouissage en surface.



(a) Cartographie des isovaleurs (b) Profil d'évolution

Figure 4.37 – Introduction d'un gradient de cissions critiques τ_0^s dans les couches superficielles de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope

La présente investigation s'attache à la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope des couches superficielles (Figure 4.17b). Les orientations cristallographiques considérées de celles-ci sont données par le groupement « Texp » (Figure 4.26c).

Analyse du comportement mécanique à diverses échelles. L'apport d'un écrouissage des couches superficielles augmente d'une manière significative le niveau de contrainte lors de l'écoulement non linéaire à l'échelle *macro* (Figure 4.38). Cet aspect, bien qu'il soit observé dans l'investigation expérimentale (cf. §2.4.1), est bien plus prononcé dans le présent contexte en raison de l'amplification volontaire des cissions critiques τ_0^s dans les couches superficielles.

Par ailleurs, du fait qu'un tel apport s'articule autour de l'activation de bon nombre de systèmes de glissement, la déformation uniaxiale linéaire à l'échelle *macro* ε_{11}^e, *i.e.* liée à l'écoulement non linéaire, est bien affectée par l'écrouissage des couches superficielles.

Cependant, cette constatation n'est guère valable pour la déformation totale globale ε_{11} qui demeure légèrement supérieure à 8%.

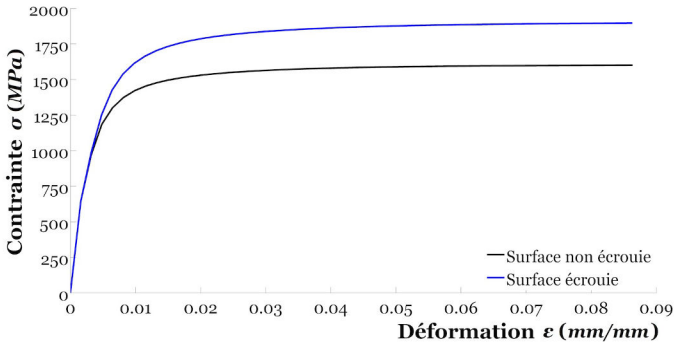
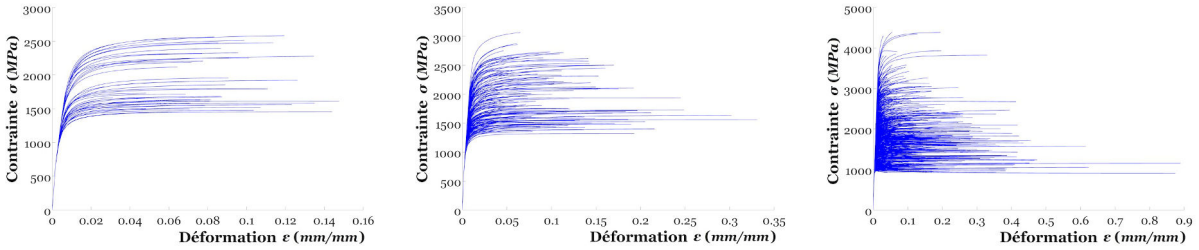


Figure 4.38 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon l'écrouissage des couches superficielles

À l'échelle locale, notamment à celles des lattes de martensites (Figure 4.39c), le niveau d'hétérogénéité du comportement obtenu pour la surface écrouie est bien accru comparé à la microstructure virtuelle de surface non écrouie (Figure 4.29c). Les niveaux des contraintes locales ont tendance à augmenter du fait que le comportement local demeure linéaire plus longtemps pour la microstructure virtuelle ayant une surface écrouie. Par ailleurs, à l'échelle des anciens grains austénitiques (Figure 4.39a) et celle des paquets (Figure 4.39b), il apparaît assez clairement une distinction des comportement des couches superficielles et ceux de la partie inférieure de la microstructure virtuelle. Ces aspects sont essentiellement liés à l'homogénéisation locale.

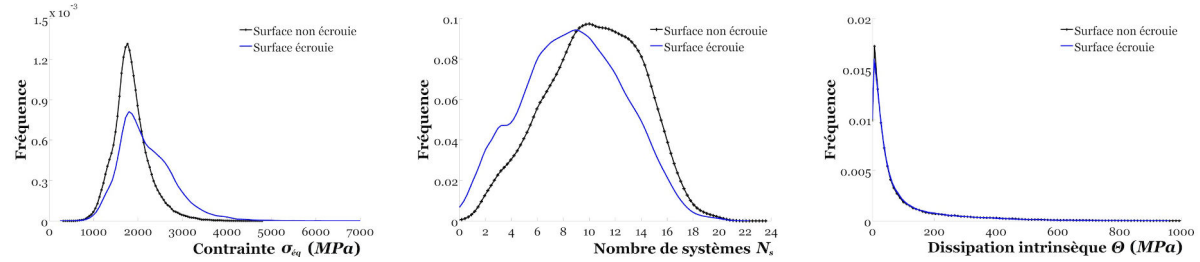


(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

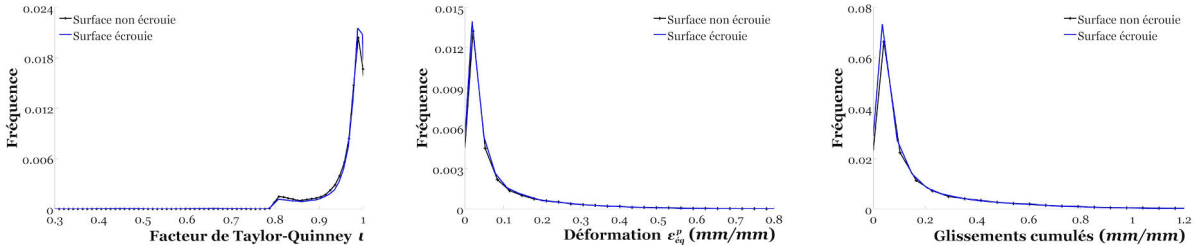
Figure 4.39 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant des couches superficielles écrouies

Analyse des distributions des variables. La perturbation du comportement global de l'acier AISI H11 est bien mise en évidence par le biais des distributions statistiques des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 4.40a) et du nombre de systèmes de glissement activés N_s (Figure 4.40c). L'introduction d'une surface écrouie a pour conséquence une augmentation de la valeur moyenne de $\sigma_{éq}$ et une diminution de celle de N_s. Cependant,

les distributions des variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ sont relativement très peu perturbées (Figure 4.40). Cet aspect s'explique par le fait que les systèmes favorablement orientés en surface ont tendance à cumuler des glissements bien plus conséquents dans les couches superficielles écrouies, et ce, en raison de la forte concentration des contraintes équivalentes dans cette zone.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

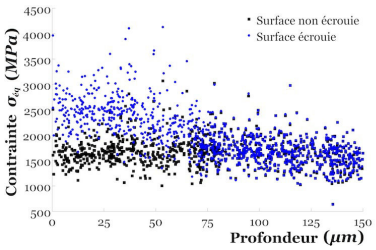


(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

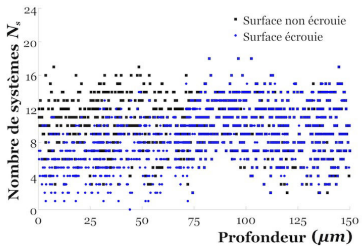
Figure 4.40 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement

Les distributions spatiales des variables étudiées confirment bien les constatations évoquées ci-dessus. Il est en effet assez clair que l'intensité des contraintes équivalentes au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ a bien tendance à prendre de l'ampleur au niveau des couches superficielles (Figure 4.41a). Les distributions spatiales permettent également de mettre en évidence une diminution du nombre de systèmes de glissement activés N_s dans les couches superficielles (Figure 4.41b). Cependant, en dépit de sa présence, une distinction de l'effet d'interaction pour $\sigma_{éq}$ et N_s dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle n'est guère aisée. À savoir que cet effet est bel et bien apparent dans l'ensemble des variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ (Figure 4.41). Or, leur évolution dans les couches superficielles est quasiment identiques pour les microstructures virtuelles de surfaces écrouie et non écrouie.

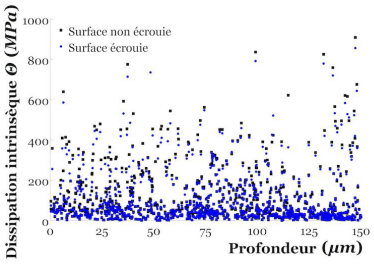
Analyse des cartographies des isovaleurs. À l'inverse des distributions spatiales des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ et du nombre de systèmes de glissement activés N_s, les cartographies des isovaleurs de ces variables (Figures 4.42a et 4.42b) permettent bien une mise en évidence de l'effet d'interaction apporté par l'écrouissage des couches superficielles sur la partie inférieure de la microstructure virtuelle. Dans ces mêmes cartographies, on constate également une forte concentration des contraintes équivalentes $\sigma_{éq}$ dans les couches superficielles de manière à illustrer un champs quasiment homogène dans



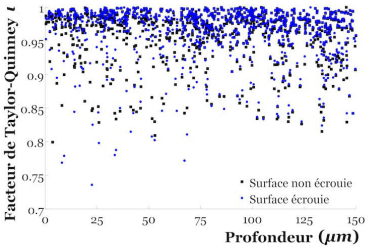
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



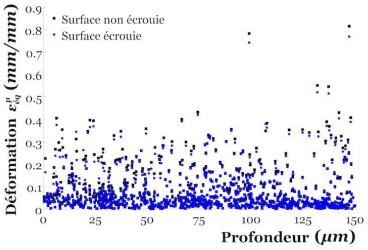
(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



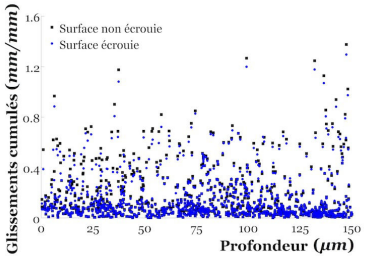
(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι



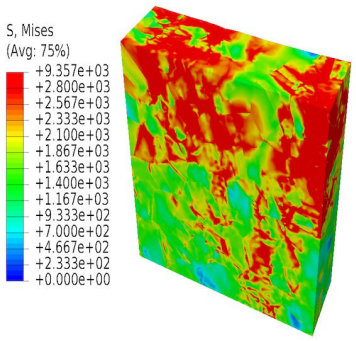
(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon_{éq}^{in}$



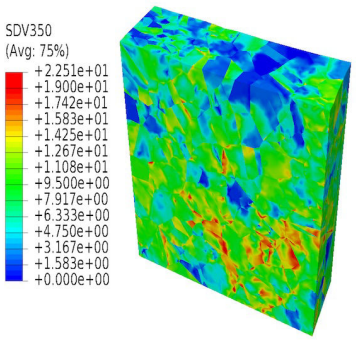
(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.41 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement

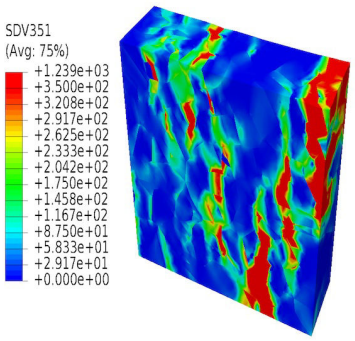
cette zone. De ce fait, la localisation des contraintes équivalentes dans les joints de lattes de martensite n'est plus évidente. Cette concentration s'accompagne en outre d'une diminution de N_s, et ce, essentiellement au niveau de la surface libre où l'on trouve des valeurs proches de zéro. Cependant, comme évoqué précédemment, ces aspects n'affectent pas nécessairement le champ de dissipation intrinsèque (Figure 4.42c) qui reste quasiment proche à la microstructure virtuelle de surface non écrouie (Figure 4.35c).



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



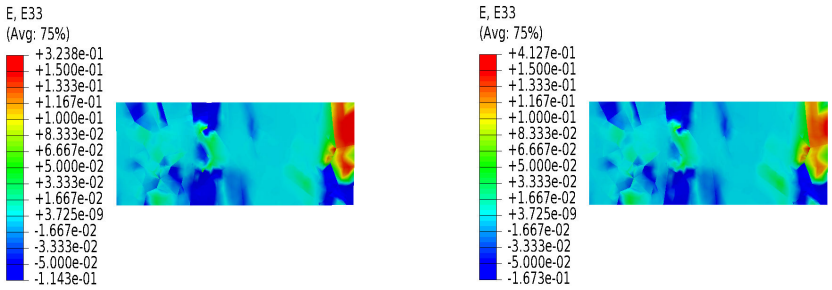
(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



(c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 4.42 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant des couches superficielles écrouies à l'issue du chargement

Par ailleurs, on note que l'apport d'un écrouissage n'a pas énormément affecté le profil de surface engendré par rapport à la microstructure virtuelle non écrouie (Figure 4.43).

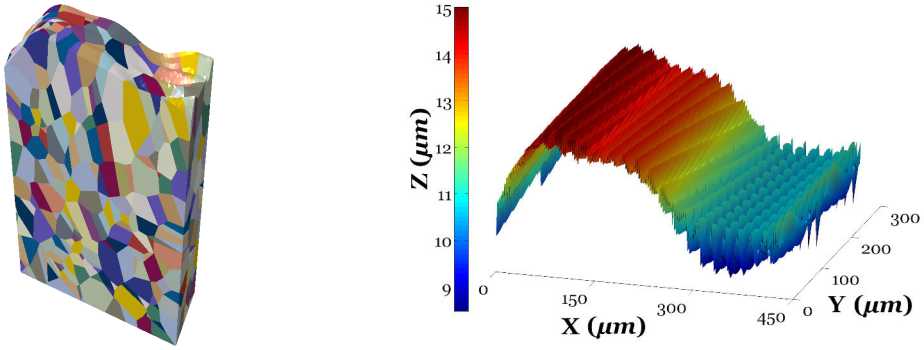


(a) Surface non écrouie (b) Surface écrouie

Figure 4.43 – Cartographies des isovaleurs des déformation ε_{33} selon l'écrouissage des couches superficielles à l'issue du chargement

4.5.1.4 Effet du profil de surface

Le profil de surface constitue le dernier paramètre à considérer dans le traitement numérique actuel. On rappelle qu'à l'issue du procédé de traitement de plaques en acier AISI H11, la surface présente des reliefs ondulés (cf §1.3.2). La prise en compte de ceux-ci est effectué par une méthode des translations des nœuds, *i.e.* a posteriori du maillage des cellules de Voronoï de la microstructure virtuelle [250]. La méthode considère une extrapolation des coordonnées des nœuds des couches superficielles selon l'axe Z vers les points de mesures des reliefs acquis par altimétrie (cf. §1.3.2) (Figure 4.44a). Par ailleurs, en vue d'une meilleure appréhension de l'effet de profil de surface, une zone assez étendue selon la direction de sollicitation X et transverses Y est mise à échelle. Cette technique permet ainsi l'obtention diverses types d'ondulation, *i.e.* des ondulations fines selon la direction transverse Y et des ondulations grossières selon X (Figure 4.44b).



(a) Microstructure virtuelle (b) Profil de surface expérimental

Figure 4.44 – Introduction d'une ondulation de surface de la microstructure virtuelle

On note toutefois que les paramètres W_t et W_m des ondulations de surface utilisés sont bien réduits en comparaison des mesures expérimentales réalisées dans §1.3.2 (Figure 4.44b). Ils ont respectivement pour valeurs 7,35 μm et 3,92 μm. Cette réduction est effectuée afin d'adapter les reliefs au maillage de la microstructure virtuelle [19] dont les couches superficielles sont écrouies (Figure 4.37). À l'issue de l'incorporation de ce profil, la discrétisation spatiale présente une qualité de maillage proche des microstructures virtuelles de surfaces planes (Figure 4.15b), le taux de distorsion des éléments finis étant de l'ordre de 0,72%.

Analyse du comportement mécanique à diverses échelles. L'apport d'une surface ondulée à tendance à diminuer la limite d'élasticité mais aussi la déformation totale à l'échelle *macro* (Figure 4.45). Ces aspects sont éventuellement liés aux interactions locales et l'effet de surface accrus par les reliefs de celle-ci.

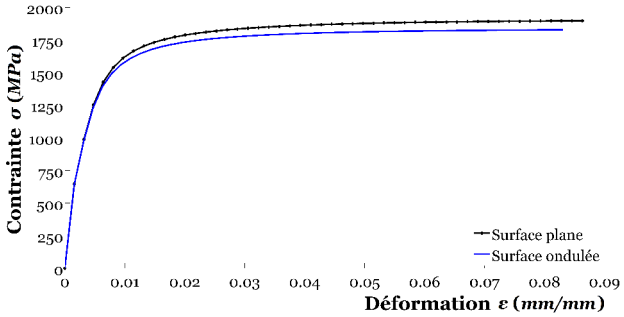
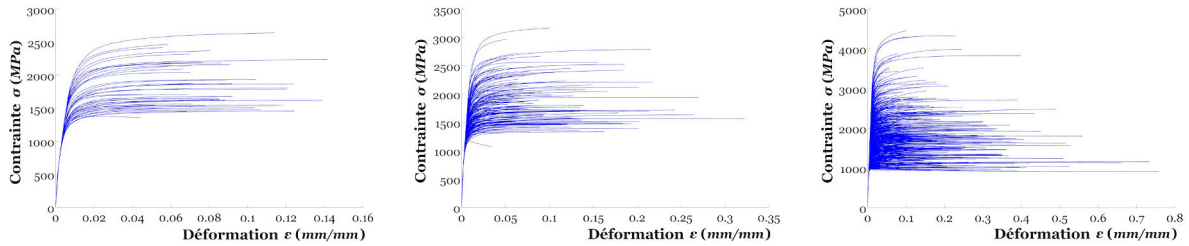


Figure 4.45 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon le profil de surface

Les effets d'interactions sont bien mis en évidence dans le contexte actuel (Figure 4.46). En dépit de son caractère hétérogène, le comportement local se distinguent de celui de la microstructure ayant une surface plane (Figure 4.39). Cependant, la distinction du comportement des couches superficielle n'est guère évidente.



(a) Échelle des anciens grains austénitiques

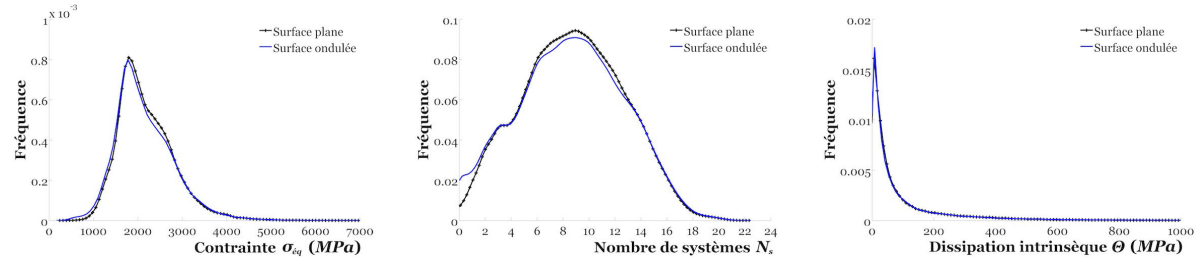
(b) Échelle des paquets

(c) Échelle des lattes de martensite

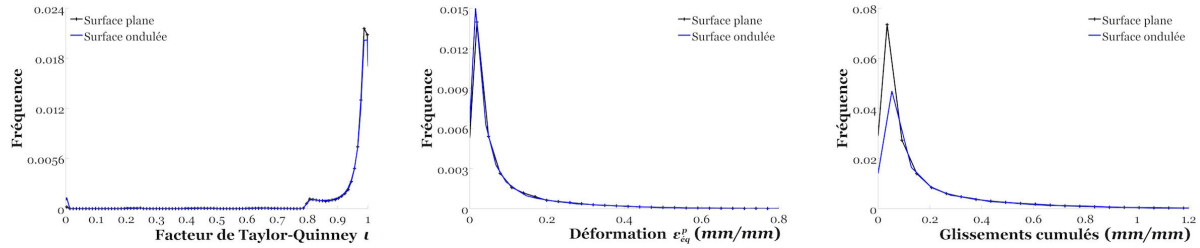
Figure 4.46 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé

19. Pour rappel, celle-ci présente une morphologie anisotrope des lattes de martensite dans les couches superficielles (Figure 4.17b) et utilise les orientations cristallographiques « Texp » (Figure 4.26c).

Analyse des distributions des variables. Les distributions statistiques illustrent quelques perturbations des répartitions des contraintes équivalentes au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 4.47a) et du nombre de système de glissement activés N_s (Figure 4.47b). Il est clair que dans l'ensemble de la microstructure virtuelle, l'apport d'une ondulation de surface s'attache à une diminution de N_s. Certaines zones n'activent guère de systèmes de glissement. Cet aspect est peu constaté pour la microstructure virtuelle ayant une surface plane. Contrairement aux analyses menées dans §4.5.1.3, la diminution du nombre de systèmes de glissement N_s s'accompagne d'une baisse des valeurs de $\sigma_{éq}$. De ce fait, il évident que la limite d'élasticité à l'échelle *macro* a également tendance à diminuer (Figure 4.45). Cet aspect est consolidé si l'on considère que, d'un point de vue statistique, l'ensemble des variables rattaché à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ est peu affecté [20] (Figure 4.47), notamment la déformation inélastique équivalente au sens de von Mises (Figure 4.47e).



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ



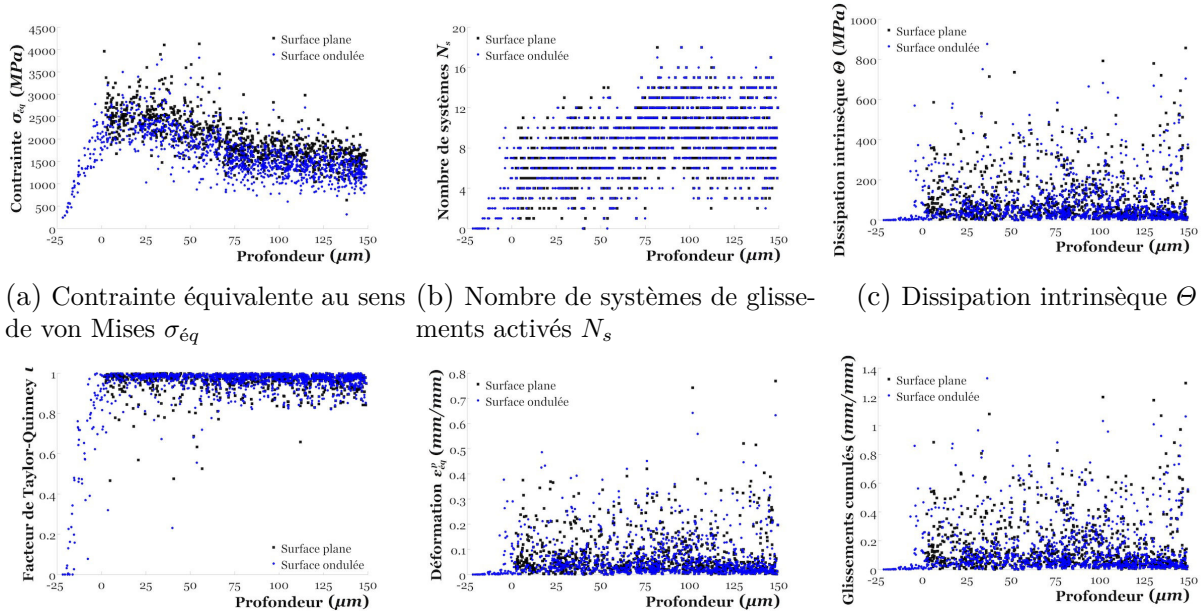
(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.47 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement

Les distributions spatiales des variables étudiées permettent une mise en évidence des effets d'interaction locaux et de surface (Figure 4.47). À l'instar des analyses menées dans §4.5.1.3, la translation entre la partie inférieure et les premières couches superficielles s'accompagnent respectivement d'une augmentation des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 4.47a) et du nombre de système de glissement activés N_s (Figure 4.47b), et ce, en raison de l'écrouissage introduit. Cependant, des augmentations par rapport à la microstructure virtuelle de surface plane de ces variables sont constatées pour des profondeurs de quelques *microns* au préalable d'une tendance vers des valeurs nulles dès lors que la

20. À l'exception des glissements cumulés $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$ (Figure 4.47f) où l'on observe une présence plus médiocre de faibles valeurs pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé.

profondeur est négative. À noter que ces constatations sont également valables pour l'ensemble des variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ (Figure 4.47). On peut ainsi considérer que les lattes de martensite situé au niveau des sommets des reliefs de la surface libre obéissent à un comportement linéaire. Ceci a pour conséquence une forte localisation de l'ensemble des variables étudiées dans les creux de ces reliefs, d'où l'augmentation de celles-ci pour des profondeurs de quelques *microns*, *i.e.* l'effet d'interaction. Celui-ci est bien présent dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle d'une manière assez conséquente, notamment dans les distributions spatiales de $\sigma_{éq}$ (Figure 4.47a) où l'on constate une baisse quasiment systématique de celles-ci.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$

(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

(c) Dissipation intrinsèque Θ

(d) Facteur de Taylor-Quinney ι

(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$

(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

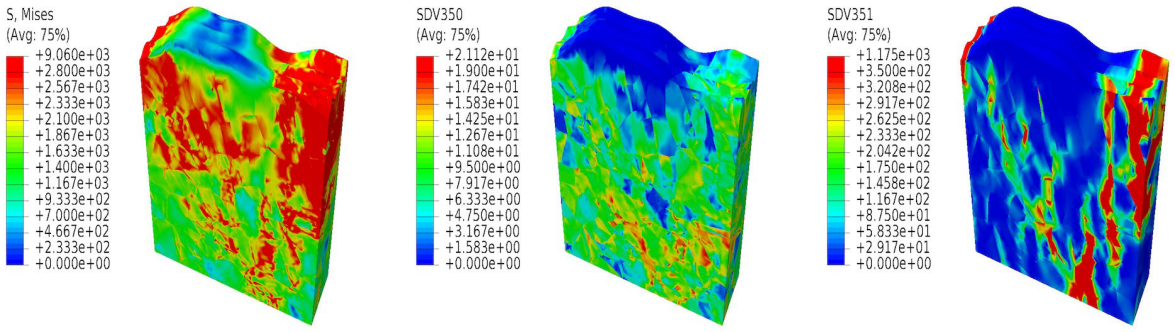
Figure 4.48 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement

Analyse des cartographies des isovaleurs. Les cartographies des isovaleurs des diverses variables étudiées (Figure 4.49) consolident les analyses ci-dessus. Il apparaît clairement que les sommets des reliefs de la surface libre s'attachent à des concentrations des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ bien médiocres (Figure 4.49a). Pour rappel, cette zone de la surface libre présente une forte concentration des contraintes équivalentes $\sigma_{éq}$ dans la microstructure virtuelle ayant une surface plane (Figure 4.42a). Pourtant, les lattes de martensite dans cette zone utilisent les mêmes orientations cristallographiques. En outre, à l'issue du chargement il n'existe quasiment aucun système de glissement activé dans cette même zone (Figure 4.49b). Il est évident que celle-ci est régit par un comportement linéaire étant donné qu'elle ne dissipe guère de puissance intrinsèque Θ (Figure 4.49c).

Par ailleurs, une augmentation significative des concentration des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 4.49a) est observée pour les creux des ondulations de la

surface libre en comparaison de celles obtenues pour la microstructure virtuelle ayant une surface plane (Figure 4.42a). Ceci a pour conséquence une accentuation des incompatibilités entre les lattes voisines, et ce, par de fortes localisations de déformation non linéaire locale, *i.e.* dissipation intrinsèque Θ (Figure 4.49c). Ces localisations pourraient être à l'origine de modes d'endommagement tels que la génération de cavités locales. Ainsi, l'amorçage de l'endommagement pourrait provenir des couches superficielles et non pas de la surface libre.

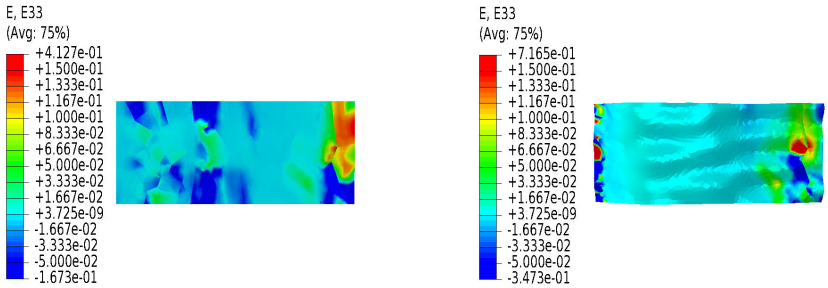
À la lumière de ces constatations, il est pertinent de conclure que le profil de surface vient perturber l'effet des orientations cristallographiques. Il existe donc un conflit entre ces deux paramètres.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 4.49 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé à l'issue du chargement

Le conflit entre les deux paramètres est illustré par la cartographie des déformations normales à la surface libre ε_{33} (Figure 4.50). On peut effectivement constater que des zones dans les creux des ondulations peuvent être soit en traction soit en compression selon les orientations cristallographiques locales.



(a) Surface plane (b) Surface ondulée

Figure 4.50 – Cartographies des isovaleurs des déformation ε_{33} selon le profil de surface à l'issue du chargement

4.5.1.5 Effet de la forme des équations constitutives

Le présent paragraphe se destine à une confrontation qualitative entre le modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et sa version modifiée (cf. §4.1). Si les paramètres du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] sont identifiés par le bais de techniques de transition d'échelle en champs moyens (cf. §4.3), la procédure d'identification n'a pas été menée pour sa version modifiée. Par conséquent, l'utilisation des mêmes paramètres du matériau amène donc à un décalage de la réponse mécanique de celui-ci même à l'échelle *macro* (Figure 4.51).

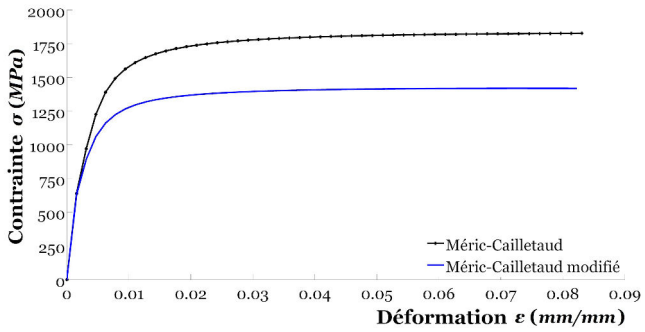


Figure 4.51 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon le modèle multi-échelle utilisé pour les mêmes paramètres du matériau

Le décalage constaté est de l'ordre de la cission critique τ_0^s, *i.e.* près de 370 MPa. À savoir que cette constatation est bien cohérente étant donné que la résolue τ^s peut éventuellement être donnée respectivement dans le cas du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et sa version modifiée selon :

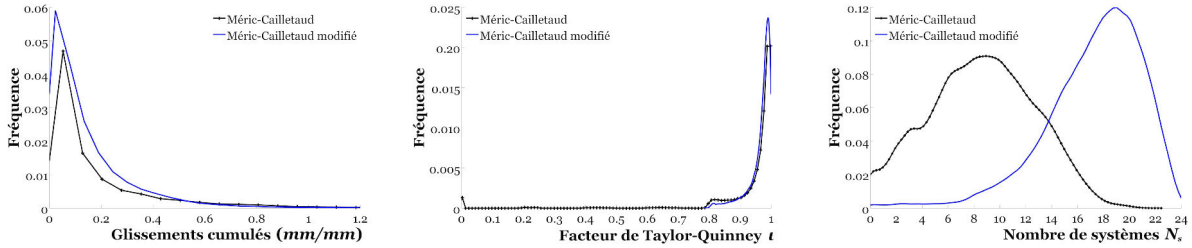
$$\tau^s = K\ (\dot{\gamma}^s)^{\frac{1}{n}} + \tau_0^s + r^s + \chi^s \tag{4.97}$$

$$\tau^s = (\tau_0^s + r^s)\ (\dot{\gamma}^s)^{\frac{1}{n}} + \chi^s \tag{4.98}$$

Compte tenu du fait que les premiers termes des membres à droite sont quasiment nuls, le décalage entre les deux modèles est bien de $\tau_0^s + r^s$. Cela n'implique pas pour autant que le problème peut être résolu en multipliant par deux les cissions critiques τ_0^s dans le modèle modifié. Une telle démarche n'aboutirait guère à une réponse globale correcte. De plus, la cission critique est un paramètre qui est le plus souvent déterminé expérimentalement. Autrement, sa modification n'aurait aucunement de sens physique.

Cependant, si la réponse du matériau en terme de contrainte est bien distincte entre les deux modèles, une confrontation peut être menée pour l'écoulement non linéaire. Les distributions statistiques des variables liées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$, à savoir les glissements cumulés (Figure 4.52a) ou encore le Facteur de Taylor-Quinney ι (Figure 4.52b) illustrent une même tendance de répartition statistique. Les différences constatées peuvent être liées à la réponse globale en terme de contrainte mais également à l'absence d'une surface d'écoulement non linéaire pour le modèle modifié. Pour évaluer le nombre de systèmes de glissement activés N_s dans le cas du modèle modifié, il convient de poser une définition empirique qui consiste à admettre que l'activation d'un système considéré est donnée pour

un glissement cumulé supérieur à 10^{-5}. De ce fait, il est clair que les valeurs de N_s sont bien plus conséquentes pour la version modifiée du modèle de Méric-Cailletaud (Figure 4.52c).



(a) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$ (b) Facteur de Taylor-Quinney ι (c) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

Figure 4.52 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement

Une analyse plus pertinente consiste à une confrontation des glissements cumulés moyens de chaque système de glissement (Figure 4.53). Il est clair que par le biais d'une telle approche, l'écoulement non linéaire à l'échelle du système de glissement est quasiment identique entre les deux modèles multi-échelles.

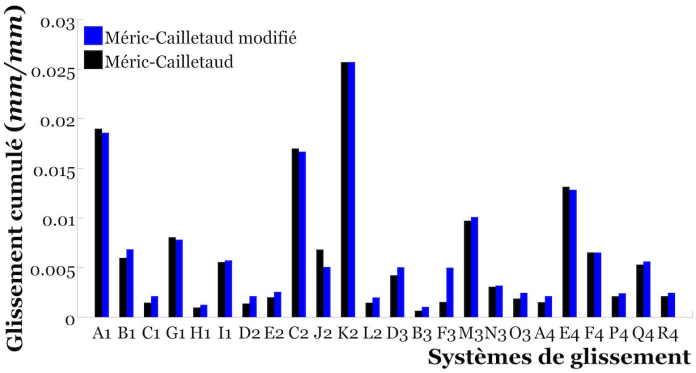


Figure 4.53 – Glissement cumulé moyen pour chaque système de glissement selon le modèle multi-échelle

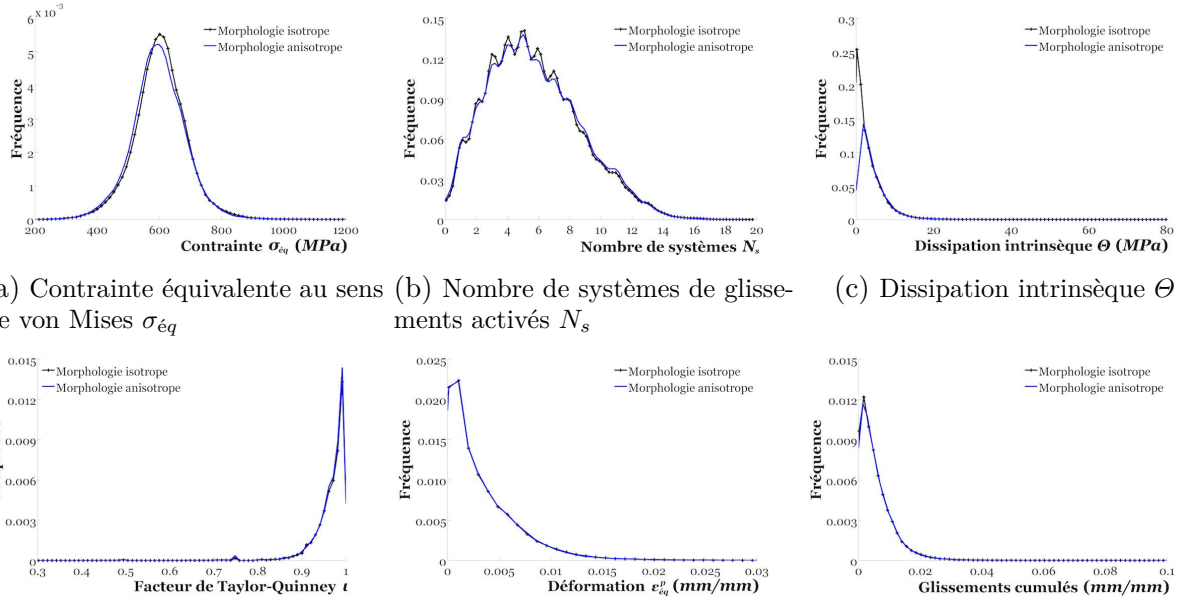
En dépit d'une procédure d'identification requise, il est évident qu'à l'issue de cette confrontation, l'absence de surface de charge n'entraîne guère de changement significatif dans la réponse du modèle multi-échelle. Le modèle de type multiplicatif, *i.e.* la version modifiée de Méric-Cailletaud, pourrait fournir une bonne prédiction du comportement élasto-viscoplastique multi-échelle. Cependant, comme évoqué dans §4.2.2, ce modèle présente quelques inconvénients quant à la procédure itérative de Newton-Raphson qu'il conviendrait d'améliorer. Étant donné que la procédure d'identification n'a pas été effectuée pour la version modifié du modèle de Méric-Cailletaud, la suite de l'investigation numérique du comportement mécanique en surface de l'acier AISI H11 est menée avec la version initiale du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21].

4.5.2 Cas du chargement cyclique

L'investigation des champs mécaniques locaux est uniquement menée à l'issue du 9e cycle. Cette approche s'attache à l'analyse des champs résiduels après décharge. De ce fait, seules les distributions statistiques et spatiales d'un certain nombre de variables et les cartographies des isovaleurs sont traitées. Les courbes de comportement à diverses échelles ne sont pas considérées. On note également que l'ensemble des paramètres traité suit inéluctablement celui du cas chargement monotone quasi-statique (cf. §4.5.1).

4.5.2.1 Effet de la morphologie des lattes en surface

Analyse des distributions des variables. À l'issue du 9e cycle de chargement, *i.e.* à une déformation globale imposée de 0,085%, il apparaît qu'à l'échelle locale, des contraintes résiduelles conséquentes persistent au sein la structure interne de l'acier AISI H11. Les distributions statistiques des contraintes équivalente de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 4.54a) illustrent que celles-ci peuvent éventuellement atteindre des valeurs bien au-delà de 1000 MPa. Par ailleurs, on constate également que les déformations non linéaires locales $\varepsilon^{in}_{éq}$ peuvent afficher des valeurs proches de 2,5% (Figure 4.54e) .



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$

(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

(c) Dissipation intrinsèque Θ

(d) Facteur de Taylor-Quinney ι

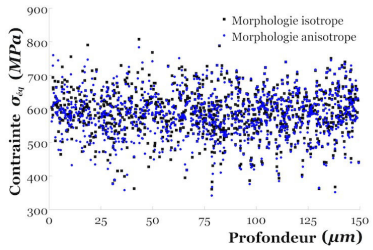
(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$

(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

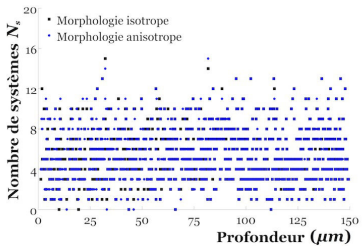
Figure 4.54 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du 9e cycle

D'un point de vue global, la morphologie anisotrope des lattes de martensite en surface ne perturbe pas de manière significative les distributions statistiques de l'ensemble des variables étudiées (Figure 4.55). Les quelques différences constatées sont essentiellement liées à la variation des orientations des joints de lattes mais également à l'effet d'interaction apporté par la morphologie anisotrope des couches superficielles (cf. §4.5.1.1). Il est clair que pour les distributions spatiales des variables considérées (Figure 4.55), l'écart entre

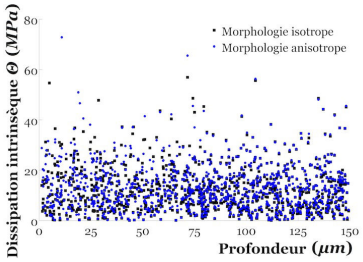
les valeurs obtenues est plutôt situé dans les couches superficielles, notamment pour les contraintes équivalentes $\sigma_{éq}$ (Figure 4.55a) ou la dissipation intrinsèque Θ (Figure 4.55c). La morphologie anisotrope a tendance à diminuer le niveau des contraintes et déformations résiduelles à l'issue du chargement.



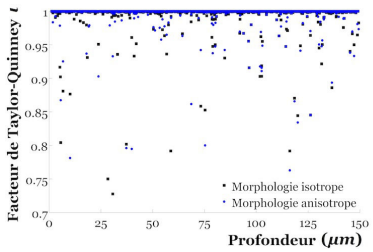
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



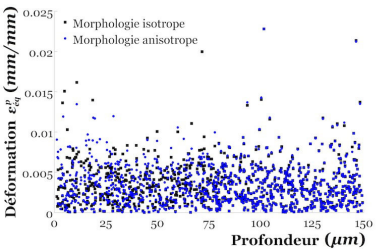
(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



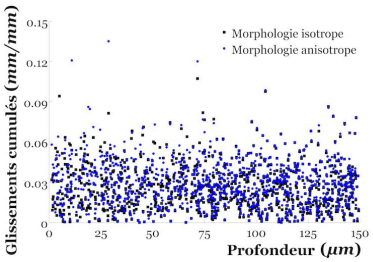
(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι



(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$



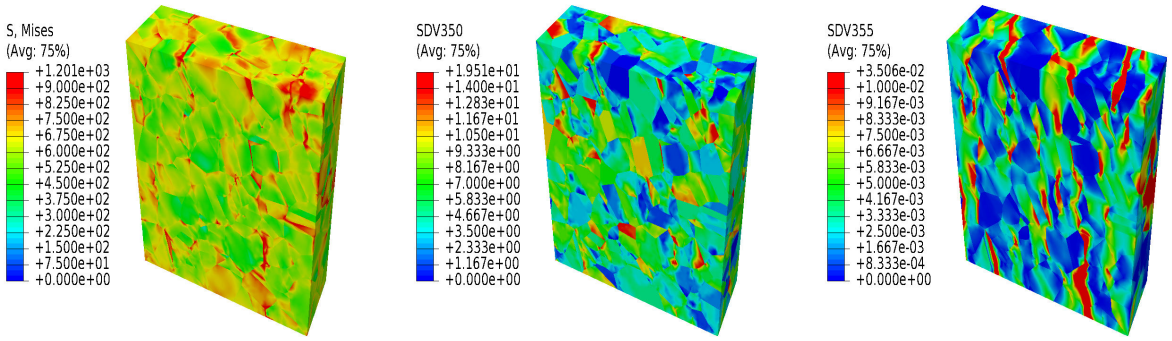
(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.55 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du 9^{e} cycle

Par ailleurs, à l'inverse du cas de chargement monotone (cf. §4.5.1.1), un facteur de Taylor-Quinney ι égal à l'unité (Figure 4.55d) est obtenu pour la quasi-totalité des lattes martensitiques. Ainsi, dans le cas du chargement cyclique, la puissance des efforts internes articulée autour du comportement non linéaire des lattes de martensite concernées est entièrement dissipée. Cela implique également que plus le chargement global imposé est important plus la structure interne de l'acier AISI H11 a tendance à dissiper de l'énergie cinématique.

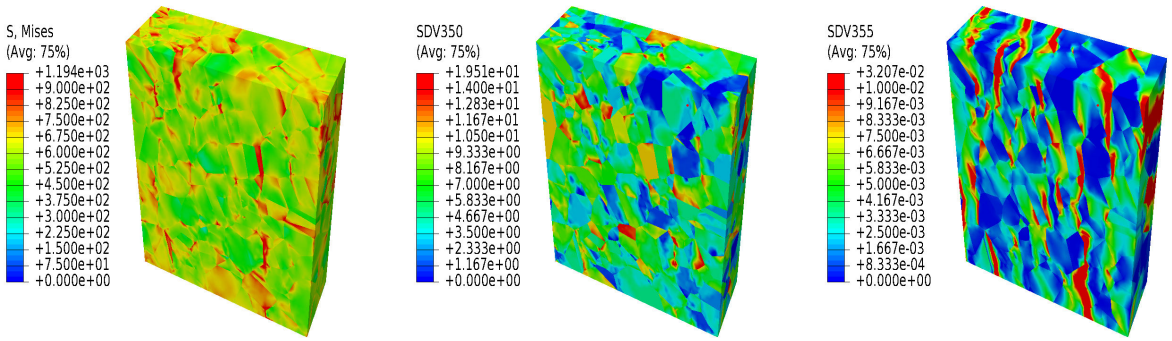
Analyse des cartographies des isovaleurs. L'analyse précédente des contraintes et déformations non linéaires résiduelles est consolidée par les diverses cartographies des isovaleurs (Figures 4.56 et 4.57). Il apparaît qu'à l'image du chargement monotone, les contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ sont bien concentrées dans les joints de lattes de martensite. Celles-ci ont tendance à se translater selon le direction de sollicitation pour le cas de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope des couches superficielles. Cet aspect est reste valable pour les nombres de systèmes de glissement activés N_s et la déformation inélastique équivalente $\varepsilon_{éq}$. Pour cette dernière variable, on constate que l'intensité des réseaux de bandes de localisation est moins évident que dans le cas du

chargement monotone. À noter qu'une telle intensité a été bien mise en évidence lors de l'investigation expérimentale (cf. §2.4.2).



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon_{éq}$

Figure 4.56 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface à l'issue du 9^{e} cycle



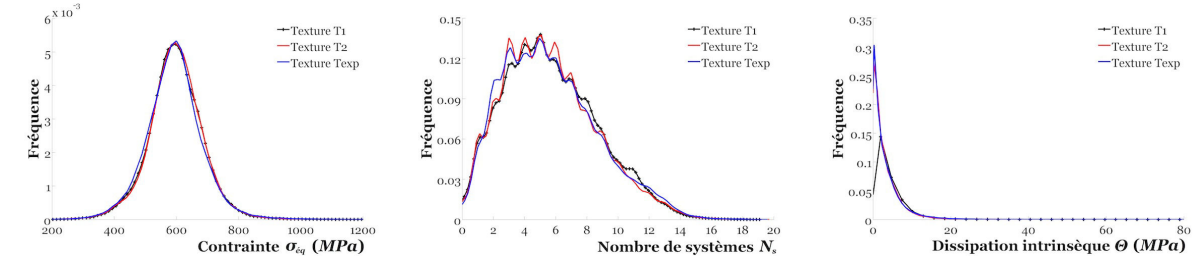
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon_{éq}$

Figure 4.57 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface à l'issue du 9^{e} cycle

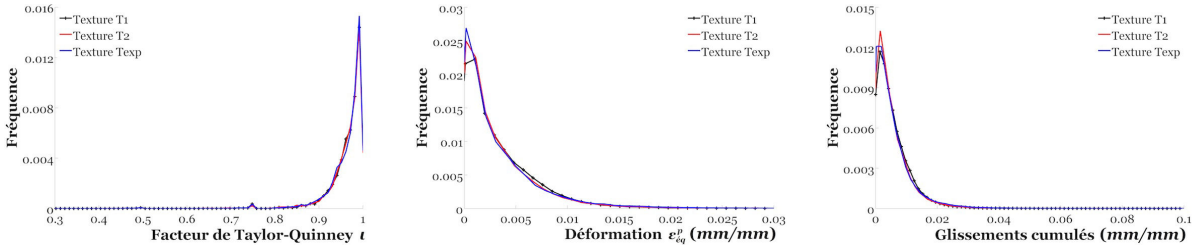
4.5.2.2 Effet de la texture cristallographique en surface

Analyse des distributions des variables. L'analyse des distributions statistique des variables étudiées (Figure 4.58) illustrent l'influence de l'attribution de diverses orientations cristallographiques aux lattes martensitiques des couches superficielles (Figure 4.26). Il s'agit des orientations définies précédemment (Figure 4.26) pour des textures dénommées « T1 », « T2 » et « Texp ». Il apparaît que la texture cristallographique n'apporte que de légères perturbations au comportement local de l'acier AISI H11, mais qui semblent plus significatives que celles engendrées par la morphologie anisotrope. Dans le contexte actuel, Il est clair que le groupement d'orientations « Texp », *i.e.* à caractère anisotrope, illustre des

valeurs des variables considérées à peine plus médiocre que les groupements « T1 » et « T2 ». Cet aspect vient du fait que les orientations cristallographiques du groupement « Texp » s'articulent autour d'activation d'un nombre limité de systèmes de glissement (cf. §4.5.2.2). Par conséquent, compte tenu du niveau de sollicitation imposé, le niveau des contraintes et déformations locales est moins important que les orientations « T1 » et « T2 ».



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

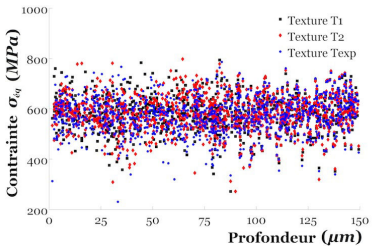


(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

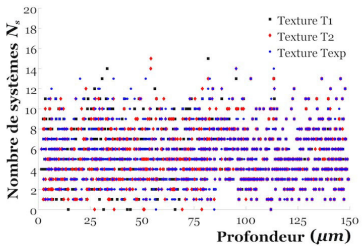
Figure 4.58 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du 9e cycle

Par ailleurs, l'effet des orientations cristallographiques des lattes de martensite en surface est essentiellement localisé au niveau des couches superficielles (Figure 4.59). Cet effet reste toutefois relativement faible dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle en comparaison au chargement quasi-statique monotone. À noter également, qu'en dépit de ces perturbations, le facteur de Taylor-Quinney ι demeure très proche de l'unité pour l'ensemble des groupements d'orientations cristallographiques (Figure 4.59d).

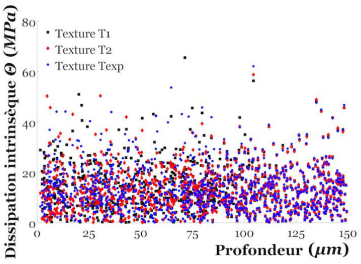
Analyse des cartographies des isovaleurs. Les cartographies des isovaleurs des champs mécaniques locaux données par le groupement d'orientations « Texp » (Figure 4.60) ne fournit pas de différences significatives par rapport à celles de « T1 » (Figure 4.57). On constate effectivement qu'à l'image du groupement « T1 », le champ du nombre de systèmes de glissement activés N_s (Figure 4.60b) est bien plus homogène au sein des lattes de martensite que dans le cas du chargement quasi-statique monotone (Figure 4.34b). Par ailleurs, les déformations inélastiques au sens de von Mises locales $\varepsilon^{in}_{éq}$ (Figure 4.60c) présentent des réseaux de bandes localisation assez faibles en intensité, et ce, à l'instar des résultats issus de l'investigation expérimentale menée dans §2.4.2. La localisation des déformations résiduelles au niveau des joints de lattes est également présente et s'attache le plus souvent à celles des contraintes équivalentes de von Mises (Figure 4.60a).



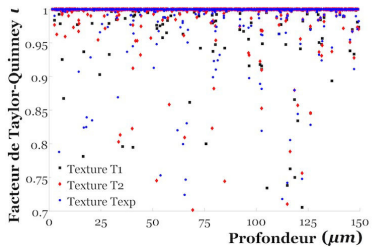
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



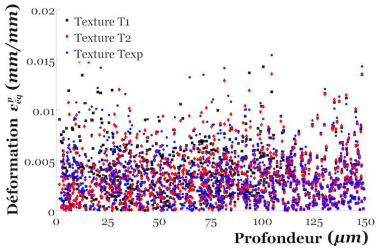
(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



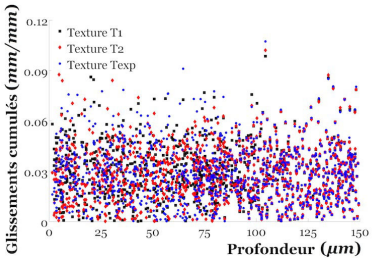
(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι

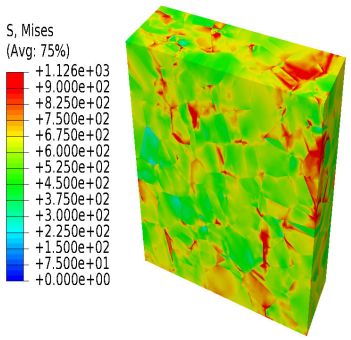


(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$

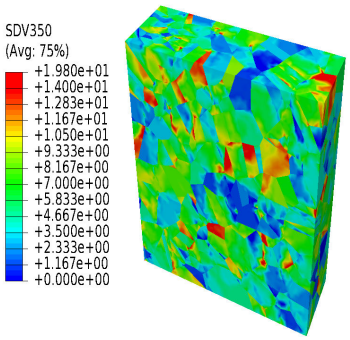


(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

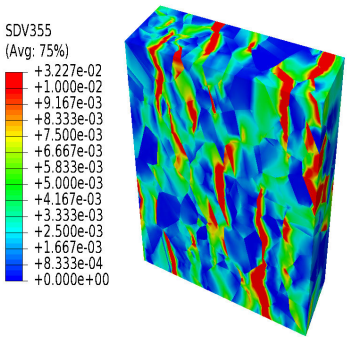
Figure 4.59 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du 9e cycle



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



(c) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon_{éq}$

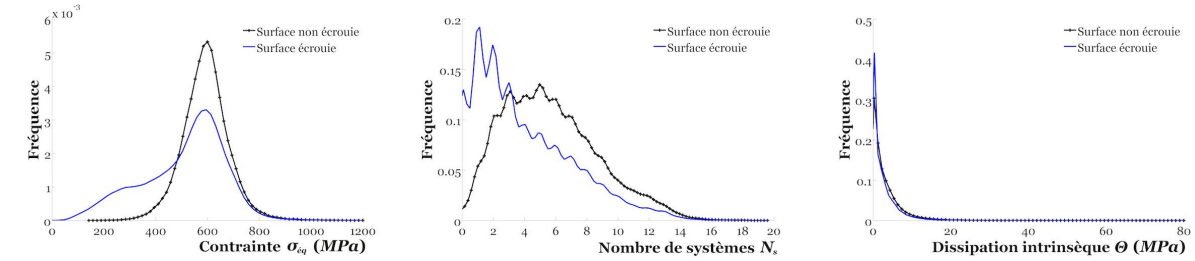
Figure 4.60 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle avec une texture Texp des couches superficielles à l'issue du 9e cycle

4.5.2.3 Effet de l'écrouissage en surface

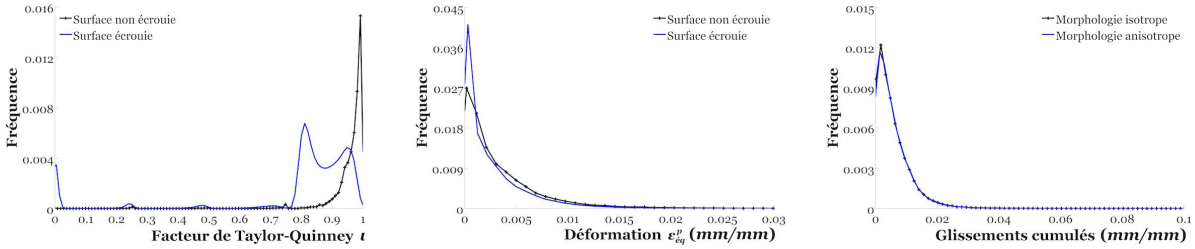
Dans le contexte actuel, on rappelle que la notion d'écrouissage en surface est introduite par le biais d'un gradient des cissions critiques τ_0^s (cf. §4.5.1.3). Par conséquent, l'ensemble des variables liées aux contraintes et déformations résiduelles s'attachent uniquement au chargement cyclique. Autrement, la présente investigation suggère que le matériau dans son état actuel ne présente pas de contraintes ou déformations résiduelles.

Analyse des distributions des variables. L'introduction d'un gradient de cissions critiques τ_0^s dans les couches superficielles a pour conséquence une diminution globale de l'ensemble des valeurs des variables étudiées (Figure 4.61). Il est évident que l'écoulement non linéaire n'a pas eu lieu dans bon nombre de lattes de martensite comparé à la microstructure virtuelle ayant une surface non écrouie. Certaines zones de la microstructure virtuelle ayant une surface écrouie n'activent que peu de systèmes de glissement (Figure 4.61b) et ne dissipent aucunement de puissance intrinsèque Θ (Figure 4.61c).

Par ailleurs, les distributions statistiques du facteur de Taylor-Quinney ι sont très différents pour les deux types de surfaces considérés (Figure 4.61d). Plus concrètement, pour la surface écrouie, très peu de zones présentent un facteur de Taylor-Quinney ι égal à l'unité. Dès lors qu'un écoulement non linéaire a lieu, celui est le plus souvent inférieur à l'unité. Cet aspect est bien à l'opposé des constatations effectuées dans §4.5.2.1. Ce phénomène peut être expliqué par l'évolution du facteur de Taylor-Quinney ι donnée par la Figure 4.21b. Celle-ci illustre clairement que le facteur de Taylor-Quinney ι présente un pic maximal lors de la transition élasto-plastique au préalable d'une diminution rapide suivie d'une évolution vers asymptotique unitaire.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

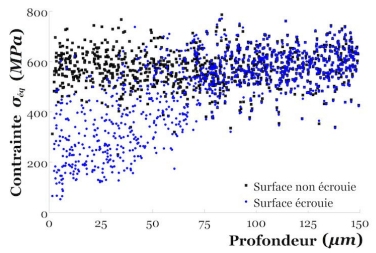


(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

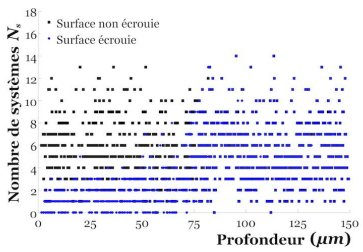
Figure 4.61 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du 9^{e} cycle

Les distributions spatiales des variables étudiées (Figure 4.62) montrent qu'à l'image de l'effet des textures cristallographiques (cf. §4.5.2.2), l'effet d'interaction dans la partie inférieure de la microstructure n'est pas conséquent. Celui-ci est essentiellement localisé dans les couches superficielles. Par ailleurs, à l'inverse du cas du chargement monotone quasi-statique (cf. §4.5.1.3), l'apport d'une surface écrouie s'attache à de faibles contraintes équivalentes au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 4.62a). Il est évident que bon nombre lattes de martensite dans les couches superficielles subissent un comportement linéaire. Par consé-

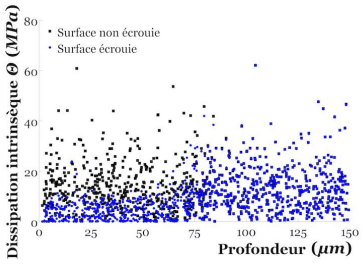
quent, peu de systèmes de glissement sont activés (Figure 4.62b) et les déformations non linéaire résiduelles ne sont guère conséquentes (Figure 4.62e). À noter que les lattes de martensites concernées par un écoulement non linéaire dissipent peu de puissance intrinsèque Θ (Figure 4.62c).



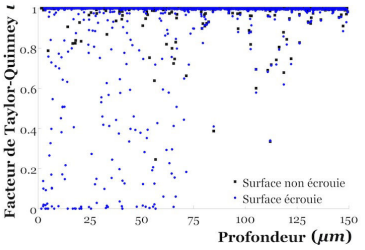
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



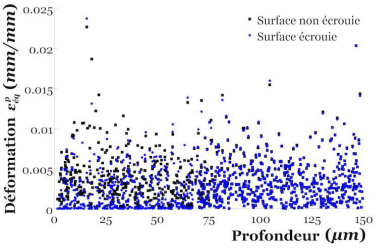
(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



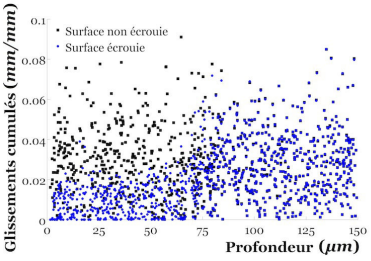
(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι



(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$



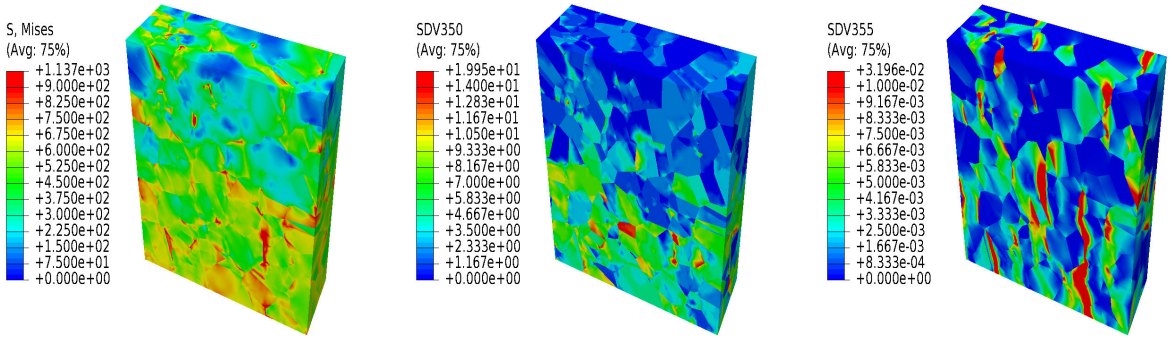
(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.62 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du 9^e cycle

Analyse des cartographies des isovaleurs. Les cartographies des isovaleurs des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$, du nombre de systèmes de glissement activés N_s et de la déformation inélastique équivalente $\varepsilon_{éq}$ (Figure 4.63) complètent les analyses précédentes. Les champs de contraintes $\sigma_{éq}$ sont quasiment nuls dans certaines zones des couches superficielles (Figure 4.63a). Le nombre de systèmes de glissement activés N_s (Figure 4.63b), est assez homogènes en surface et présente des valeurs bien médiocres. Quant aux déformations inélastiques équivalentes $\varepsilon_{éq}$ (Figure 4.63c), outre quelques localisations aux joints de lattes martensitiques, celle-ci n'illustrent guère de réseaux de bandes localisation dans les couches superficielles.

4.5.2.4 Effet du profil de surface

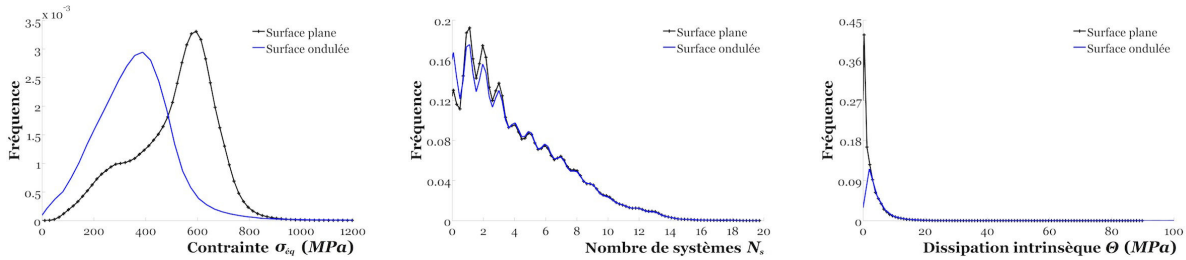
Analyse des distributions des variables. L'apport d'un profil de surface ondulée (Figure 4.44) a tendance a diminuer les champs de contraintes et déformations non linéaires résiduels au sein de la microstructure virtuelle (Figure 4.64). Les répartitions du nombre de systèmes de glissement activés N_s (Figure 4.64b) et le facteur de Taylor-Quinney ι (Figure 4.64d) sont quasiment identiques à ceux de la microstructure virtuelle ayant une sur-



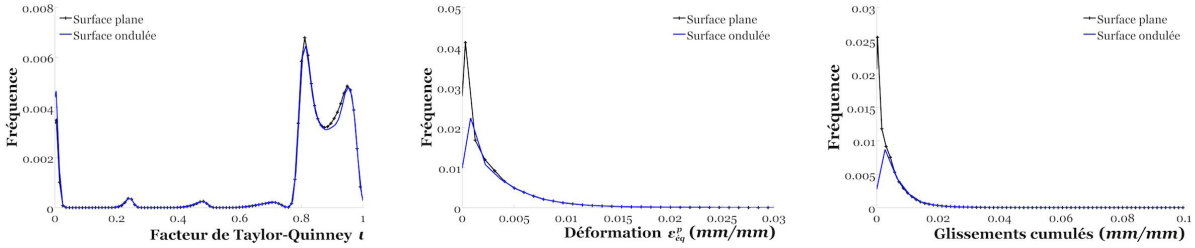
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon_{éq}$

Figure 4.63 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant des couches superficielles écrouies à l'issue du 9e cycle

face plane, certaines zones peuvent éventuellement faire apparaître des localisations conséquentes du champs de déformation non linéaire résiduel.



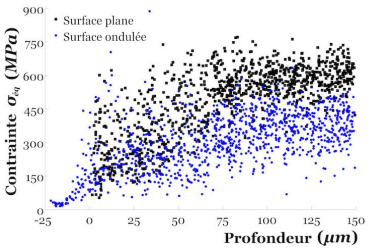
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ



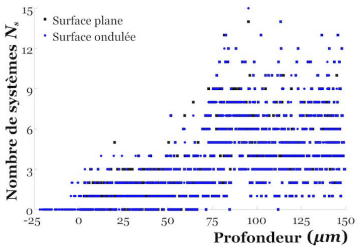
(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.64 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du 9e cycle

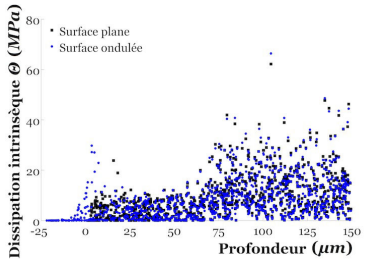
Par ailleurs, les distributions spatiales de l'ensemble des variables étudiées (Figure 4.65) mettent en évidence les effets d'interaction et de surface apportés par les ondulations de la surface libre, et ce, également dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle. À l'image du chargement monotone quasi-statique (cf §4.5.1.4), l'ensemble des variables étudiées présentent de légères augmentations pour des profondeurs de quelques *microns* et tendent à s'annuler au niveau des sommets des reliefs de la surface libre.



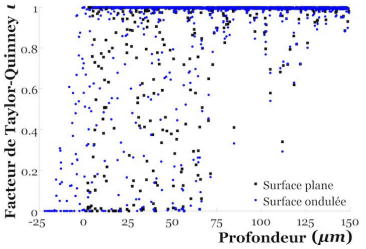
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



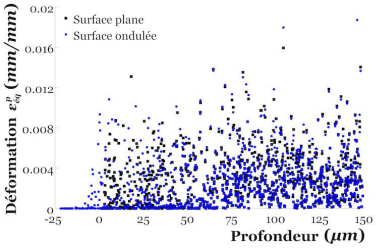
(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



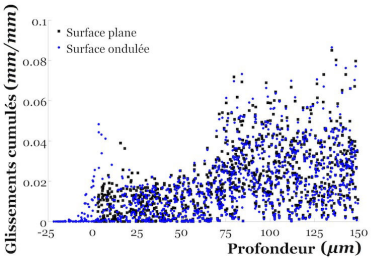
(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι



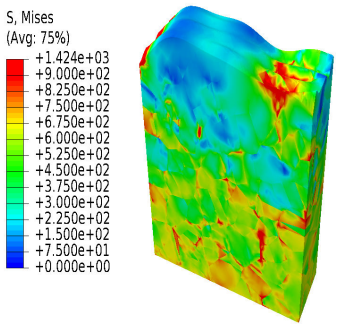
(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$



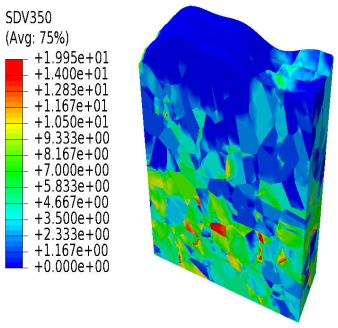
(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 4.65 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du 9e cycle

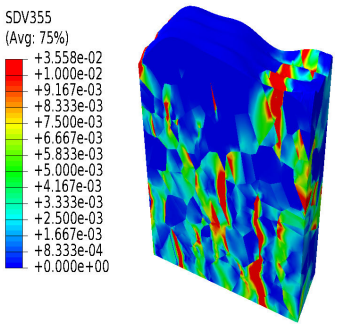
Analyse des cartographiques des isovaleurs. De par les cartographies des isovaleurs des variables considérés (Figure 4.66), les constatations ci-dessus sont bien consolidés.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



(c) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon_{éq}$

Figure 4.66 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé à l'issue du 9e cycle

La Figure 4.66a montre clairement que les sommets des reliefs de la surface libre ne présentent guère de contrainte résiduelles significatives. Il s'agit essentiellement d'un comportement linéaire. Très peu de systèmes de glissement sont donc activés dans ces zones (Figure 4.66b) et les déformations inélastiques équivalentes sont quasiment nulles (Figure 4.66c). Cependant, si dans l'ensemble de la microstructure virtuelle, les réseaux de bandes

de localisation sont de faibles intensités à l'instar des cas précédents (cf. §4.5.2.1, §4.5.2.2 et §4.5.2.3), une amplification de la localisation des déformations non linéaires résiduelles est bien constatée au niveau de certains creux des ondulations de la surface libre. Cet aspect conforte ainsi l'idée d'un conflit entre l'effet du profil géométrique de la surface avec celui des orientations cristallographiques.

En résumé...

Une approche multi-échelle mettant en œuvre les équations constitutives de type phénoménologique de Méric-Cailletaud [20, 21] a été utilisée dans le cadre d'une étude numérique du comportement mécanique en surface de l'acier AISI H11. À l'issue des formulations thermodynamiques de ces équations, celles-ci sont implantées dans le code de calcul par éléments finis (EF) Abaqus/Standard dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). L'algorithme d'intégration numérique est basé sur une approche semi-implicite. Le traitement numérique des équations constitutives locales s'appuie sur la méthode-θ du trapèze généralisée. Celle-ci utilise une méthode de résolution directe, *i.e.* « rate tangent modulus » initialement développée par Peirce et al. [190, 191], au préalable d'une procédure itérative de type Newton-Raphson. Le schéma d'intégration numérique du modèle est validé via une confrontation à l'algorithme disponible dans la librairie ZMAT du code de calcul Z-Set/Zébulon.

L'identification des paramètres de l'acier AISI H11 a été menée par le biais de techniques de transition d'échelle en champs moyens, notamment le modèle de Berveiller-Zaoui [222] et celui en β de Cailletaud-Pilvin [223]. La procédure actuelle a utilisé directement les réponses quasi-statiques et cycliques de l'acier AISI H11 à l'échelle *macro*, et ce, en accordant un sens physique concret à la matrice d'interaction $[h]$.

En vue d'une investigation numérique des champs mécanique locaux complets en surface de l'acier AISI H11, deux microstructures virtuelles sont générées par tesselations de Voronoï. On note que les centres des cellules de Voronoï ont été placés de manière assez particulière afin de considérer la morphologie des lattes de martensite. Cette procédure tient également compte des paquets et des anciens grains austénitiques, et ce, par l'emplacement des centres des cellules, mais surtout par les orientations cristallographiques considérées par les relations d'orientations de Kurdjumov-Sachs (KS).

Dans le cadre du traitement numérique mené dans ce chapitre, quatre paramètres prépondérants issus de la caractérisation expérimentale sont traités pour des types de chargements monotones quasi-statiques mais également cycliques de type traction-traction. Ces paramètres sont liés à l'état de surface généré par le procédé de mise en œuvre des outillages. Il s'agit de la morphologie des lattes de martensite, de la texture cristallographique, de l'écrouissage des couches superficielles et du profil de la surface. Ces analyses ont permis de mettre en évidence :

- le caractère hétérogène du comportement local qui tend à s'amplifier à l'échelle des lattes de martensite et à s'homogénéiser à l'échelle des anciens grains austénitiques. Le comportement à l'échelle *macro* est donné à l'aide d'une homogénéisation du comportement local.
- Les reliefs au niveau de la surface libre sont souvent induits par le chargement quel

que le soit le paramètre traité.

- La morphologie anisotrope des couches superficielles a tendance à translater les champs mécaniques locaux selon la direction de sollicitation pour les deux types de chargement. Elle induit également un effet d'interaction local dû à l'orientation des joints de lattes martensitiques par rapport à la direction de sollicitation.
- La texture cristallographique met en évidence certaines perturbations des champs locaux. La texture anisotrope induit un nombre de systèmes de glissement moins important que les groupements d'orientations « isotropes » mais présente un écoulement non linéaire plus conséquent.
- L'écrouissage en surface provoque une « linéarisation » du comportement local dans les couches superficielles. Il s'accompagne également d'une amplification de la localisation des champs mécaniques.
- La prise en compte d'une surface ondulée est à l'origine d'un conflit avec la texture cristallographique. Cependant, il apparaît le plus souvent que les sommets des reliefs de la surface libre obéissent à un comportement élastique, tandis que les creux sont sources de fortes localisations de déformations non linéaires.

Il est évident que le comportement local en surface est assez complexe. Une approche numérique multi-échelle est donc bien adéquate pour une appréhension de certains mécanismes élémentaires liés à un tel comportement.

Enfin, on rappelle que l'investigation numérique menée dans le présent chapitre s'est uniquement intéressé à l'hypothèse des petites perturbations. Or, il est clair que des niveaux de déformation de l'ordre de 8% à l'échelle globale peuvent engendrer des niveaux de déformation bien plus importants à l'échelle locale pouvant atteindre 80%. De ce fait, il semble approprié de compléter l'analyse précédente en incorporant pour la théorie des transformations finies où les rotations des réseaux cristallins sont prises en compte.

Chapitre 5

Extension vers les transformations finies : formulations et applications

"Il n'y a point d'art mécanique si petit et si méprisable qui ne puisse fournir quelques observations ou considérations remarquables."

Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716)

Sommaire

5.1 Cinématique des transformations finies 194
5.2 Thermodynamique des équations constitutives en transformations finies 198
5.2.1 Revue des aspects fondamentaux en transformations finies 198
5.2.2 Formalisme thermodynamique en transformations finies 203
5.3 Intégration numérique des modèles multi-échelles 205
5.3.1 Description spatiale : notion de dérivée objective 205
5.3.2 Algorithme d'intégration numérique 207
5.4 Investigation des champs mécaniques locaux 212
5.4.1 Effet de la morphologie des lattes en surface 212
5.4.2 Effet de la texture cristallographique en surface 217
5.4.3 Effet de l'écrouissage en surface 221
5.4.4 Effet du profil de surface 225

Certaines considérations cinématiques, comme la rotation des cristaux constitutifs peuvent impacter le comportement local en surface de l'acier AISI H11. Si celle-ci n'est guère considérée dans ce qui précède, le présent chapitre se consacre à l'extension des modèles multi-échelles dans le cadre de la théorie des transformations finies. Dans ce contexte, l'intérêt est porté à deux types de formulations basées sur la notion de dérivés objectives, notamment celle de Truesdell et celle de Jaumann-Zaremba. La première partie de ce chapitre rappelle les bases de la cinématique des transformations finies traitant la notion de décomposition multiplicative du gradient de transformation. La seconde et la troisièmes partie consistent respectivement à adapter le formalisme thermodynamique et le schéma d"intégration numérique des modèles multi-échelles au contexte de la théorie des transformations

finies. Enfin, le dernier point se consacre à une investigation numérique du comportement en surface de l'acier AISI H11 en réalisant une approche analogue au chapitre 4. Afin de limiter les cas d'études, cette investigation s'attache essentiellement à la formulation de Truesdell et se restreint aux sollicitations monotones quasi-statiques.

5.1 Cinématique des transformations finies

A contrario de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) qui suppose une décomposition additive du tenseur des déformations, la théorie des transformations finies comprend bon nombre de méthodes basé sur des décompositions multiplicatives [316]. Dans le contexte actuel, on s'attache surtout à décrire la cinématique de transformations finies permettant de déduire d'une manière assez aisée celle des petites perturbations (HPP).

La cinématique des transformations finies décrit le processus de déformation d'un cristal constitutif formé d'un ensemble de points matérielles, et ce, d'une configuration de référence $C_0 \subset \boldsymbol{R}^3$ vers une configuration courante ou actuelle $C_c \subset \boldsymbol{R}^3$ par le biais d'une combinaison d'efforts extérieures (Figure 5.1). Pour cela, on considère les coordonnées d'un point matériel quelconque données par le vecteur $\underline{\boldsymbol{x}}$ par rapport à une origine dans la configuration de référence C_0. Celui-ci est distant d'une particule voisine de $d\underline{\boldsymbol{x}}$. Le processus de déformation consiste à générer l'image de ces points matériels $\underline{\boldsymbol{y}} + d\underline{\boldsymbol{y}}$ dans la configuration courante C_c par le biais de la relation :

$$\underline{\boldsymbol{y}} + d\underline{\boldsymbol{y}} = \underline{\boldsymbol{x}} + d\underline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{u}}\left(\underline{\boldsymbol{x}} + d\underline{\boldsymbol{x}}\right) \tag{5.1}$$

où $\underline{\boldsymbol{u}}$ est le vecteur de déplacement. En s'appuyant sur la définition de ce dernier, la relation (5.1) permet de donner l'expression des coordonnées du point matériel considéré dans la configuration courante C_c selon :

$$\underline{\boldsymbol{y}} = \underline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{u}}\left(\underline{\boldsymbol{x}} + d\underline{\boldsymbol{x}}\right) - \underline{\boldsymbol{u}}\left(d\underline{\boldsymbol{x}}\right) \tag{5.2}$$

Compte tenu que l'on s'attache aux milieux continus de Cauchy, le terme $\underline{\boldsymbol{u}}\left(\underline{\boldsymbol{x}} + d\underline{\boldsymbol{x}}\right)$ est reformulé selon un développement de Taylor de premier ordre, *i.e.* :

$$\underline{\boldsymbol{u}}\left(\underline{\boldsymbol{x}} + d\underline{\boldsymbol{x}}\right) = \underline{\boldsymbol{u}}\left(\underline{\boldsymbol{x}}\right) + \nabla\underline{\boldsymbol{u}}\left(\underline{\boldsymbol{x}}\right) \cdot d\underline{\boldsymbol{x}} + o\left(\|d\underline{\boldsymbol{x}}\|\right) \tag{5.3}$$

Les relations (5.2) et (5.3) permettent la définition du tenseur de gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$, où seul le premier gradient de déplacement est pris en compte, selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}} = \underset{\sim}{\nabla}\underline{\boldsymbol{y}} = \frac{\partial \underline{\boldsymbol{y}}}{\partial \underline{\boldsymbol{x}}} = \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{I}} + \frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial \underline{\boldsymbol{x}}}\right) \tag{5.4}$$

$\underset{\sim}{\boldsymbol{I}}$ étant le tenseur d'identité de second ordre. On note également que le tenseur de second ordre donné par le terme $\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial \underline{\boldsymbol{x}}}$ représente celui de distorsion géométrique.

Dans le contexte des milieux continus de Cauchy [1], bon nombre de décompositions peuvent être utilisées pour le tenseur gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$, par exemple la décomposition polaire donnée selon le tenseur orthogonal de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{R}}$:

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{R}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{U}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{V}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{R}} \tag{5.5}$$

$\underset{\sim}{\boldsymbol{U}}$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{V}}$ étant respectivement les tenseurs de second ordre symétriques et positifs de déformations pures droit et gauche reliés par le tenseur de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{R}}$ selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{V}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{R}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{U}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{R}}^T \tag{5.6}$$

La décomposition spectrale des tenseurs $\underset{\sim}{\boldsymbol{U}}$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{V}}$ permet de définir par le biais de leurs valeurs propres les trièdres dits respectivement de Lagrange et d'Euler.

Si l'on considère le caractère non linéaire, *i.e.* élasto-viscoplastique du matériau solide, il est possible d'effectuer une décomposition dite multiplicative [317], ou de Kröner [318], permettant de tenir compte d'une manière explicite des aspects linéaires et non linéaires du processus de déformation. Une telle décomposition permet d'associer le comportement élasto-viscoplastique à la structure interne à l'échelle *micro* du matériau concerné, à savoir le réseau cristallin. Outre la rotation et la déformation pure du réseau cristallin, cette approche permet de prendre en compte les mécanismes élémentaires liés à la cinématique des transformations finies, notamment le mouvement des dislocations, ce qui lui vaut des considérations bien plus conséquentes de la structure interne par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Dans le contexte de la décomposition multiplicative (Figure 5.1), le tenseur de gradient de déformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$ est donné par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p \tag{5.7}$$

où $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ sont respectivement les tenseurs de gradient de transformation linéaire et non linéaire. La partie linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e$ du tenseur de gradient de déformation traduit le comportement réversible du matériau, elle inclut également la rotation rigide du réseau cristallin. Par ailleurs, la partie non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ considère le cisaillement des plans cristallins selon le mouvement des dislocations.

La décomposition multiplicative du tenseur de gradient de transformation permet en outre de définir une configuration intermédiaire C_i considérée comme étant relâchée de toute sollicitation extérieure [2] (Figure 5.1). Celle-ci peut être aisément obtenue par le biais de la partie $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ depuis la configuration initiale C_0, ou éventuellement via l'inverse de la partie linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1}$ depuis la configuration courante C_c. Compte tenu du fait que le tenseur

1. Ceci est également valable pour la théorie des milieux continus généralisés.

2. Le fait que la configuration intermédiaire C_i est donnée par un processus de déformation irréversible, les états thermodynamiques des configuration intermédiaire C_i et initiale C_0 sont identiques. Le caractère irréversible de la déformation engendre une dissipation intrinsèque transformée en chaleur qui suppose qu'aucune sollicitation extérieure n'est nécessaire pour le maintien de la configuration intermédiaire C_i à l'inverse de la configuration courante C_c .

$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ ne considère aucune rotation, l'orientation du cristal constitutif dans la configuration intermédiaire C_i reste inchangée par rapport à celle de la configuration initiale C_0, *i.e.* pour un système de glissement s donné, $(\underline{\boldsymbol{l}}_i^s, \underline{\boldsymbol{n}}_i^s) \parallel (\underline{\boldsymbol{l}}_0^s, \underline{\boldsymbol{n}}_0^s)$. Par ailleurs, dans le cadre de la théorie des transformations finies, le processus de transformation non linéaire n'engendre aucune variation volumique à l'image de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), et ce, à l'inverse de la transformation linéaire. Si l'on pose J le déterminant du tenseur de gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$, celui-ci est donnée par la formule de Nanson selon :

$$J = \frac{\varrho_0}{\varrho_c} = \det \underset{\sim}{\boldsymbol{F}} = \det \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e > 0 \tag{5.8}$$

$$\det \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p = 1 \tag{5.9}$$

où ϱ_c et ϱ_0 sont respectivement les densités du matériau dans les configurations courante C_c et initiale C_0. On note toutefois qu'un couplage de la décomposition multiplicative et polaire peut éventuellement être utilisé pour générer d'autres configurations intermédiaires que celle présentée ci-dessus [257, 259, 277]. En outre, certaines études proposent des extensions de la décomposition multiplicative pour incorporer des configurations intermédiaires associées à des phénomènes physiques élémentaires donnés, comme les mécanismes de gradients de déformation [319] (cf. §3.4) et les phénomènes de transformation de phase (TRIP [3]) [320], ou encore aux sollicitations thermiques [276].

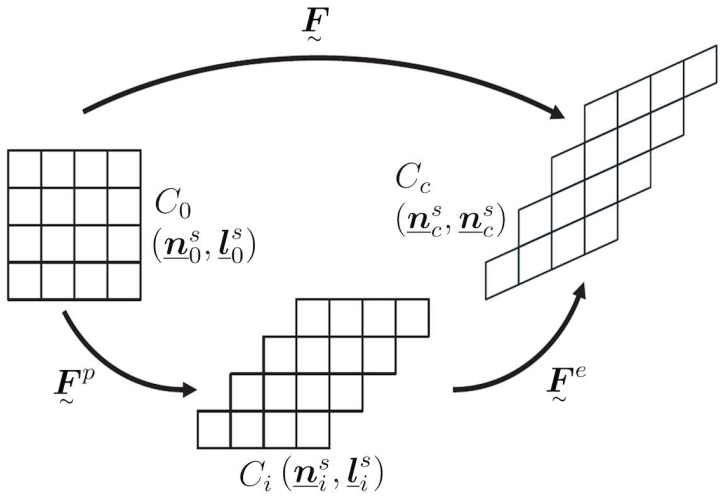


Figure 5.1 – Décomposition multiplicative du tenseur de gradient de transformation

Les tenseurs gradient de transformation linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e$ et non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ peuvent être formulés selon des relations équivalentes à (5.2), *i.e.* une somme du tenseur d'identité $\underset{\sim}{\boldsymbol{I}}$ et celui d'une distorsion géométrique. Compte tenu que les mécanismes physiques élémentaires correspondant au comportement non linéaire consistent essentiellement en les mouvements

3. « Transformation Induced Plasticity ».

de dislocations, le tenseur de gradient de transformation non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ est donné selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p = \underset{\sim}{\boldsymbol{I}} + \sum_{s=1}^{N_s} \gamma^s \, \underline{\boldsymbol{l}}_i^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}_i^s \tag{5.10}$$

Le mise en place des équations de la cinématique des transformations finies requiert les expressions liées à l'évolution temporelle du tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$. Pour ce faire, on considère $\underline{\dot{\boldsymbol{y}}}$, la vitesse d'un point matériel donné dans la configuration courante C_c. Le gradient de celle-ci par rapport aux coordonnées du point matériel concerné est défini par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}} = \underline{\nabla} \underline{\dot{\boldsymbol{y}}} \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-1} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}} \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-1} \tag{5.11}$$

D'une manière équivalente, les évolutions temporelles des parties linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e$ et non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ du tenseur de gradient de transformation sont données selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^e \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} \tag{5.12}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^p \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{p-1} \tag{5.13}$$

Celles-ci sont reliées au tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}$ (5.7) de la manière qui suit :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^e \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} + \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \,.\, \left(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^p \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{p-1} \right) \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} = \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e + \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} = \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e + \underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p \tag{5.14}$$

L'évolution temporelle de la partie linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e$ du tenseur de gradient de transformation est donnée dans la configuration courante C_c, tandis que celle de la partie non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p$ est écrite dans la configuration intermédiaire C_i. Pour formuler le tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p$ dans la configuration courante C_c, *i.e.* $\underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p$, il convient de multiplier celui-ci par $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e$ à gauche et $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1}$ à droite dans la relation (5.10). En outre, si l'on tient compte de l'expression du tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$ donné par la relation (5.6), l'évolution temporelle $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}$ du tenseur de gradient de transformation devient :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e + \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \,.\, \left(\sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \, \underline{\boldsymbol{l}}_i^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}_i^s \right) \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} = \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e + \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \, \underline{\boldsymbol{l}}_c^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}_c^s \tag{5.15}$$

où $\underline{\boldsymbol{n}}_c^s$ et $\underline{\boldsymbol{l}}_c^s$ représentent respectivement la normale au plan de glissement et la direction de glissement d'un système s donné dans la configuration courante C_c. Par ailleurs, la décomposition du tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}$ en parties symétrique et antisymétrique permet les définitions respectives de la vitesse de déformation pure totale $\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}$ et celle de la rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{W}}$ dans la configuration courante C_c, *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}} = \mathrm{sym}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{L}} \right) + \mathrm{asym}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{L}} \right) = \underset{\sim}{\boldsymbol{D}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{W}} \tag{5.16}$$

Cette décomposition s'applique également aux parties linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e$ et non linéaire $\underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p$ de l'évolution temporelle du tenseur de gradient de transformation (5.8) et (5.11) de la manière qui suit :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e = \mathrm{sym}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e\right) + \mathrm{asym}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e\right) = \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e + \underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^e \tag{5.17}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p = \mathrm{sym}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p\right) + \mathrm{asym}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p\right) = \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^p + \underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^p \tag{5.18}$$

tel que :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e + \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^p \tag{5.19}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{W}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^e + \underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^p \tag{5.20}$$

5.2 Thermodynamique des équations constitutives en transformations finies

Les bases des équations de la cinématique posées, on s'intéresse désormais à l'extension de la théorie de la thermodynamique des processus irréversibles, présentée dans §4.1, aux transformations finies. Les aspects fondamentaux de la thermodynamique et le formalisme associé de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) sont repris en utilisant des formulations eulériennes et lagrangiennes.

5.2.1 Revue des aspects fondamentaux en transformations finies

Principe des puissances virtuelles. Comme évoqué dans §4.1.1, le principe des puissances virtuelles postule que pour tout mouvement virtuel considéré, la puissance virtuelle des efforts extérieures est égale à celle des efforts intérieures appliqués. Dans le cadre de la théorie des transformations finies, ce postulat constitue également celui du principe d'objectivité. Plus concrètement, la puissance virtuelle des efforts intérieures $\mathcal{P}_{int}$ d'un domaine $\mathcal{D}$ dans un solide Ω quelconque est inéluctablement invariante, et ce, quelque soit l'espace euclidien .

Si l'on considère une description spatiale, *i.e.* équivalent à un formalisme eulérien, le principe des puissances virtuelles, attaché à la configuration courante C_c, s'apparente à celui donné dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). À savoir que la puissance virtuelle des efforts intérieurs $\mathcal{P}_{int}$ utilise le tenseur des contraintes de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$. Cependant, en vue de conserver l'objectivité de celle-ci, il est commode d'utiliser le tenseur de vitesse de déformation pure totale $\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}$ au lieu de $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}$, et ce, pour son caractère invariant. De par cette approche, le principe des puissances virtuelles dans le contexte eulérien est donné selon :

$$-\int_{\mathcal{D}} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}\, d\Omega + \int_{\mathcal{D}} \underline{\boldsymbol{f}} \cdot \underline{\boldsymbol{V}}'\, d\Omega + \int_{\partial\mathcal{D}} \underline{\boldsymbol{F}} \cdot \underline{\boldsymbol{V}}'\, dS = 0 \tag{5.21}$$

$\underline{\boldsymbol{f}}$ et $\underline{\boldsymbol{F}}$ étant respectivement les efforts extérieurs de volume et de surface appliqués au domaine $\mathcal{D}$ du solide Ω dans la configuration courante C_c. $\underline{\boldsymbol{V}}'$ représente le champs de vitesses virtuelles arbitraires continûment dérivables dans le domaine $\mathcal{D}$. L'utilisation du théorème de divergence de Green-Ostrogradski permet l'écriture des équations d'équilibre local qui sont équivalentes à celles données dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), *i.e.* :

$$\underline{\mathrm{div}}\,\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\boldsymbol{f}} = 0 \tag{5.22}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} = \underline{\boldsymbol{F}} \tag{5.23}$$

Compte tenu du fait que la configuration courante C_c ne cesse d'évoluer au cours du processus de transformation, il est bien fréquent d'opter pour une description matérielle, *i.e.* un formalisme lagrangien. Cette dernière consiste à écrire l'ensemble des équations constitutives et d'équilibre dans une configuration fixe telle la configuration intermédiaire C_i (qui est fixe en terme de rotation), ou encore la configuration initiale C_0. Pour ce faire, il convient, dans un premier temps, de transformer l'ensemble des charges extérieures de volume $\underline{\boldsymbol{f}}$ et de surface $\underline{\boldsymbol{F}}$ dans la configuration initiale. Cette opération est effectuée d'une manière assez aisée par un simple changement de repère. Si l'on considère l'effort de volume $\underline{\boldsymbol{f}}_{\mathbf{0}}$ dans la configuration initiale C_0, celui-ci est donné selon :

$$\underline{\boldsymbol{f}}_{\mathbf{0}} = J\,\underline{\boldsymbol{f}} \tag{5.24}$$

D'une manière équivalente, cette même transformation permet d'écrire l'effort de surface $\underline{\boldsymbol{F}}_{\mathbf{0}}$ dans la configuration initiale C_0 selon :

$$\underline{\boldsymbol{F}}_{\mathbf{0}} = J\,\|\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{p} \cdot \underline{\boldsymbol{N}}\|\,\underline{\boldsymbol{F}} \tag{5.25}$$

où $\underline{\boldsymbol{N}}$ est le vecteur unitaire normal à la surface S_0 dans la configuration C_0. Par ailleurs, la transformation du tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ dans la configuration initiale C_0 permet de définir le premier tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{P}}$ [316] selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{P}} = J\,\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-T} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-T} \tag{5.26}$$

où l'on introduit également le tenseur de contrainte de Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}$ [316]. Tenant compte de la conservation de la densité massique de la puissance virtuelle des efforts intérieurs, celle-ci est donnée selon la configuration considérée, *i.e.* :

$$\frac{1}{\varrho_c}\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{D}} = \frac{1}{\varrho_0}\underset{\sim}{\boldsymbol{P}} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}} \tag{5.27}$$

De par ces considérations, le principe des puissances virtuelles dans le cadre d'une description matérielle est donnée selon :

$$-\int_{\mathcal{D}_0} \underset{\sim}{\boldsymbol{P}} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}\, d\Omega_0 + \int_{\mathcal{D}_0} \underline{\boldsymbol{f}}_{\mathbf{0}} \cdot \underline{\boldsymbol{V}}'\, d\Omega_0 + \int_{\partial\mathcal{D}_0} \underline{\boldsymbol{F}}_{\mathbf{0}} \cdot \underline{\boldsymbol{V}}'\, dS_0 = 0 \tag{5.28}$$

Le théorème de divergence de Green-Ostrogradski permet d'écrire les équations d'équilibre local de la manière qui suit :

$$\underline{\mathrm{Div}}\ \underset{\sim}{\boldsymbol{P}} + \underline{\boldsymbol{f}_{\mathbf{0}}} = 0 \tag{5.29}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{P}} \cdot \underline{\boldsymbol{N}} = \underline{\boldsymbol{F}_{\mathbf{0}}} \tag{5.30}$$

À noter que, dans le cadre d'un formalisme lagrangien, une autre forme du principe des puissances virtuelles est bien souvent utilisée. Celle-ci s'appuie sur le second tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}$ [316] défini selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{S}} = J\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-1} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-T} = \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-1} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-T} \tag{5.31}$$

Une telle transformation induit également une définition d'un tenseur de déformation associé, celui de Green-Lagrange $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$, permettant une conservation de la densité massique de la puissance virtuelle des efforts intérieurs, *i.e.* :

$$\frac{1}{\varrho_c} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{D}} = \frac{1}{\varrho_0} \underset{\sim}{\boldsymbol{P}} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}} = \frac{1}{\varrho_0} \underset{\sim}{\boldsymbol{S}} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}} \tag{5.32}$$

où le tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$ est donné par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{E}} = \frac{1}{2} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{C}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{I}} \right) = \frac{1}{2} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^T \underset{\sim}{\boldsymbol{F}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{I}} \right) \tag{5.33}$$

$\underset{\sim}{\boldsymbol{C}}$ étant le tenseur de Green-Lagrange à droite. Par conséquent, le principe des puissances virtuelles dans le cadre d'une description matérielle peut également s'écrire selon :

$$-\int_{\mathcal{D}_0} \underset{\sim}{\boldsymbol{S}} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}\, d\Omega_0 + \int_{\mathcal{D}_0} \underline{\boldsymbol{f}_{\mathbf{0}}} \cdot \underline{\boldsymbol{V}'}\, d\Omega + \int_{\partial\mathcal{D}_0} \underline{\boldsymbol{F}_{\mathbf{0}}} \cdot \underline{\boldsymbol{V}'}\, dS_0 = 0 \tag{5.34}$$

Par ailleurs, si l'on considère l'approche proposée par Gurtin et al. [268, 269] qui admet une contribution des efforts à l'échelle *micro* dans la puissance des efforts intérieurs $\mathcal{P}_{int}$ (cf. §4.1.1), celle-ci se reformule dans le contexte d'une description matérielle, plus concrètement dans la configuration intermédiaire C_i et d'un comportement élastique selon :

$$\mathcal{P}_{int} = -\int_{\mathcal{D}_0} \left\{ \underset{\sim}{\boldsymbol{P}}^e \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^{e'} + \sum_{s=1}^{N_s} \pi^s\, \dot{\gamma}^{s'} \right\} d\Omega_0 \tag{5.35}$$

où $\underset{\sim}{\boldsymbol{P}}^e$ est le premier tenseur de Piola-Kirchhoff dans la configuration intermédiaire C_i :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{P}}^e = J \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-T} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-T} \tag{5.36}$$

En admettant que les vitesses de déplacement des points matériels $\underline{\dot{\boldsymbol{y}}}$ du domaine $\mathcal{D}_0$ sont nulles, la puissance des efforts extérieurs $\mathcal{P}_{ext}$ devient inexistante. De par la relation d'évolution temporelle du gradient de transformation $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}$, et en tenant compte de l'expression du second tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e = J \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-T} = \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-T} \tag{5.37}$$

Une définition [4] consistante de la cission résolue τ^s dans le cadre de la théorie des transformations finies peut être donnée par :

$$\tau^s = \underline{\boldsymbol{n}}_i^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e \cdot \underline{\boldsymbol{l}}_i^s = \underline{\boldsymbol{n}}_i^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^e \cdot \underline{\boldsymbol{l}}_i^s \tag{5.38}$$

où l'on introduit le tenseur de contrainte de Mandel $\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^e$ [322]. Si la relation (5.38) est donnée dans le cadre d'un formalisme lagrangien, son expression dans le contexte d'une description spatiale peut être aisément déduite par le biais de transformation des vecteurs $\underline{\boldsymbol{n}}_i^s$ et $\underline{\boldsymbol{l}}_i^s$ dans la configuration courante C_c, *i.e.* :

$$\tau^s = \underline{\boldsymbol{n}}_c^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{P}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}_c^s = J\, \underline{\boldsymbol{n}}_c^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}_c^s = \underline{\boldsymbol{n}}_c^s \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underline{\boldsymbol{l}}_c^s \tag{5.39}$$

D'une manière équivalente à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.1.1), il est évident que la présente définition de la cission résolue s'attache bien à l'effort à l'échelle *micro* π associé à la vitesse de cisaillement d'un système de glissement s donné. Dans ce qui suit, en vue de tenir compte des variables d'état internes liées aux écrouissages isotropes et cinématiques, la contribution de l'effort π n'est guère considérée. Cependant, on postule bien la définition de la cission résolue donnée par les relations (5.38) et (5.39).

Premier et second principe de la thermodynamique des milieux continus de Cauchy. Dans le contexte d'un formalisme eulérien, le premier principe de la thermodynamique des milieux continus de Cauchy est bien analogue à celui considéré par l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.1.1). L'évolution temporelle de l'énergie interne $\dot{\mathcal{E}}$ dans le domaine $\mathcal{D}$ de la configuration courante C_c est donnée selon :

$$\dot{\mathcal{E}} = \int_{\mathcal{D}} \varrho_c\, \dot{e}\, d\Omega = \int_{\mathcal{D}} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{D}} + r - \operatorname{div} \underline{\boldsymbol{q}} \right) d\Omega \tag{5.40}$$

On rappelle toutefois qu'en vue de respecter le principe d'objectivité, le tenseur de vitesse de déformation pure totale $\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}$ est utilisé au lieu de $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}$. La formulation du premier principe de la thermodynamique des milieux continus dans le cadre d'une description matérielle s'appuie sur la conservation de la densité massique de la puissance des efforts intérieurs (5.32), mais requiert en outre l'introduction d'un vecteur flux de chaleur lagrangien $\underline{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{0}}$, *i.e.* :

$$\underline{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{0}} = J\, \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{-1} \cdot \underline{\boldsymbol{q}} \tag{5.41}$$

L'évolution temporelle de l'énergie interne $\dot{\mathcal{E}}$ dans le contexte d'un formalisme lagrangien peut éventuellement s'écrire selon :

$$\dot{\mathcal{E}} = \int_{\mathcal{D}_0} \varrho_0\, \dot{e}\, d\Omega_0 = \int_{\mathcal{D}_0} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{P}} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}} + \varrho_0\, r - \operatorname{div} \underline{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{0}} \right) d\Omega_0 \tag{5.42}$$

$$= \int_{\mathcal{D}_0} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{S}} \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}} + \varrho_0\, r - \operatorname{div} \underline{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{0}} \right) d\Omega_0 \tag{5.43}$$

4. On note que d'autres définitions de la cission résolue sont proposés notamment dans [321].

Le second principe de la thermodynamique des milieux continus de Cauchy dans le cadre d'une description spatiale est également équivalent à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.1.1), *i.e.* :

$$\int_{\mathcal{D}} \left(\varrho_c \, \dot{\mathfrak{s}} - \frac{\varrho_c \, r}{T} + \operatorname{div} \left(\frac{\underline{\underline{\boldsymbol{q}}}}{T} \right) \right) \, d\Omega \geq 0 \tag{5.44}$$

La formulation lagrangienne associée est donnée selon :

$$\int_{\mathcal{D}_0} \left(\varrho_0 \, \dot{\mathfrak{s}} - \frac{\varrho_0 \, r}{T} + \operatorname{div} \left(\frac{\underline{\underline{\boldsymbol{q_0}}}}{T} \right) \right) \, d\Omega_0 \geq 0 \tag{5.45}$$

La combinaison des premier et second principes de la thermodynamique et l'introduction de l'énergie libre d'Helmholtz $\psi = e - T\,\mathfrak{s}$ permettent d'écrire l'inégalité de Clausius-Duhem. Dans le contexte d'une description spatiale, la formulation locale de celle-ci est obtenue par la combinaison des relations (5.40) et (5.44), *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \, : \, \underset{\sim}{\boldsymbol{D}} - \varrho_c \left(\dot{\psi} + \mathfrak{s} \dot{T} \right) - \frac{1}{T} \, \underline{\boldsymbol{q}} \cdot \underline{\nabla} \, (T) \geq 0 \tag{5.46}$$

Si l'on considère une description matérielle, l'inégalité locale de Clausius-Duhem peut éventuellement être donnée par les relations (5.42) et (5.45) ou encore (5.41) et (5.45) :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{P}} \, : \, \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{F}}} - \varrho_0 \left(\dot{\psi} + \mathfrak{s} \dot{T} \right) - \frac{1}{T} \, \underline{\boldsymbol{q_0}} \cdot \underline{\nabla} \, (T) \geq 0 \tag{5.47}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{S}} \, : \, \underset{\sim}{\dot{\boldsymbol{E}}} - \varrho_0 \left(\dot{\psi} + \mathfrak{s} \dot{T} \right) - \frac{1}{T} \, \underline{\boldsymbol{q_0}} \cdot \underline{\nabla} \, (T) \geq 0 \tag{5.48}$$

Méthode de l'état local du processus irréversible de la thermodynamique des milieux continus. Comme évoqué dans §4.1.1, la méthode de l'état local postule que la réponse de chaque particule du milieu continu s'attache à un ensemble de paires de variables thermodynamiques. À noter que celles-ci sont définies par un couple de variables d'état internes et forces associées duales. Si l'on considère que l'énergie libre d'Helmholtz ψ est fonction de la déformation linéaire, de variables caractérisant l'état de la structure interne ς_I et de la température T (cf. §4.1.1), l'inégalité de Clausius-Duhem dans le cadre d'une description spatiale est donnée selon :

$$\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \varrho_c \, \frac{\partial \psi}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} \right) \, : \, \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e - \varrho_c \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} + \mathfrak{s} \right) \dot{T} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \, : \, \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^p - \varrho_c \, \frac{\partial \psi}{\partial \varsigma_I} \, \dot{\varsigma}_I - \frac{1}{T} \, \underline{\boldsymbol{q}} \cdot \underline{\nabla} \, (T) \geq 0 \tag{5.49}$$

où $\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}$ est le tenseur de déformation associé au tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ dans la description spatiale. La compatibilité du processus irréversible avec les lois d'équilibre de la mécanique des milieux continus implique une dualité des variables d'état internes et les variables forces thermodynamiques associées. La puissance dissipée Θ peut aisément être déduite de l'inégalité de Clausius-Duhem et comporte une dissipation intrinsèque et une dissipation thermique (cf. §4.1.1) :

$$\Theta = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \, : \, \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^p - A_I \, \dot{\varsigma}_I - \frac{1}{T} \, \underline{\boldsymbol{q}} \cdot \underline{\nabla} \, (T) \geq 0 \tag{5.50}$$

Dans le contexte d'une description matérielle, l'inégalité de Clausius-Duhem est bien souvent ramenée en configuration intermédiaire C_i. Pour ce faire, la conservation de la densité massique de la puissance des efforts intérieurs permet d'écrire :

$$\frac{1}{\varrho_c}\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{D}} = \frac{1}{\varrho_0}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^e + \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e\right) \,:\, \left(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^p \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{p-1}\right)\right) \tag{5.51}$$

L'introduction de la relation (5.51) dans (5.46) permet l'obtention d'une approche lagrangienne de l'inégalité de Clausius-Duhem :

$$\begin{aligned}\varrho_c\left(\frac{\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e}{\varrho_0} - \frac{\partial\psi}{\partial\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^e\right) \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^e + \varrho_c\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \cdot \frac{\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e}{\varrho_0}\right) \,:\, \left(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^p \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{p-1}\right) \\ -\varrho_c\left(\frac{\partial\psi}{\partial T} + \mathfrak{s}\right)\dot{T} - \varrho_c\frac{\partial\psi}{\partial\varsigma_I}\dot{\varsigma}_I - \frac{1}{T}\underline{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{0}} \cdot \nabla(T) \geq 0\end{aligned} \tag{5.52}$$

À noter que la procédure de Coleman et Noll [323] induit une dualité de variables d'état internes et de variables forces thermodynamiques associées. Par ailleurs, dans le contexte actuel, la puissance dissipée Θ est donnée selon le tenseur de contrainte de Mandel $\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^e$:

$$\Theta = \frac{1}{\varrho_0}\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^e \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p - A_I\,\dot{\varsigma}_I - \frac{1}{T}\underline{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{0}} \cdot \nabla(T) \geq 0 \tag{5.53}$$

5.2.2 Formalisme thermodynamique en transformations finies

Le formalisme thermodynamique du modèle de Méric-Cailletaud [20,21] et de sa version modifiée est inéluctablement équivalent à celui de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.1.2). Le potentiel d'état donnée par l'énergie libre d'Helmholtz ψ peut être écrit à l'échelle *macro* comme étant une somme des énergies libres à l'échelle *méso* (4.24) et (4.25). Cependant, la particularité d'un tel formalisme thermodynamique dans le cadre de la théorie des transformations finies s'attache à l'utilisation des couples de variables d'état internes et de variables forces thermodynamiques associées selon la procédure de Coleman et Noll [323]. Si l'on considère une approche lagrangienne, *i.e.* dans la configuration intermédiaire C_i, l'énergie libre d'Helmholtz lié au comportement linéaire est bien souvent donné selon le tenseur de déformation élastique de Green-Lagrange $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e$. À noter que ce dernier représente la variable d'état interne associée à la variable force thermodynamique du second tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e$, *i.e.* :

$$\hat{\psi}_e^i\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e\right) = \frac{1}{2}\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e \,:\, \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e \tag{5.54}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e = \frac{\varrho_0\,\partial\hat{\psi}_e^i\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e\right)}{\partial\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e \tag{5.55}$$

On rappelle que l'hypothèse du caractère isotrope du tenseur d'élasticité $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}$ permet de formuler aisément l'énergie libre d'Helmholtz (5.54) à l'échelle *macro* (cf. §4.1.2).

Par ailleurs, les lois d'états liés aux mécanismes élémentaires internes, à savoir l'écrouissage isotrope ou cinématique, sont également analogues à celles données dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (4.32) et (4.33), voire identique dans le cadre d'une description spatiale. Si l'on considère un formalisme lagrangien, celles-ci sont données dans la configurations intermédiaire C_i, *i.e.* :

$$r^s = \frac{\varrho_0 \, \partial \hat{\psi}^i_{in} \, (\rho^s, \, \alpha^s)}{\partial \rho^s} = b \, Q \, \sum_{r=1}^{N_s} h^{sr} \, \rho^r \tag{5.56}$$

$$\chi s = \frac{\varrho_0 \, \partial \hat{\psi}^i_{in} \, (\rho^s, \, \alpha^s)}{\partial \alpha^s} = C \, \alpha^s \tag{5.57}$$

Les constatations ci-dessus s'appliquent également aux potentiels de dissipation et aux équations d'évolution des variables d'états internes. Pour celles qui concernent les mécanismes élémentaires, notamment les vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ ou encore les variables d'états $\dot{\rho}^s$ et $\dot{\alpha}^s$ respectivement liées à l'écrouissage isotrope et cinématique, il convient de formuler un potentiel d'écoulement non linéaire F^s (4.36) et de déduire les équations d'évolution (4.37), (4.38) et (4,39) par le biais de la théorie de plasticité associée (cf. §4.1.2.1).

En vue de compléter les équations d'évolution par la théorie de plasticité associée, il est bien nécessaire de formuler un potentiel viscoplastique Ω (4.34), mais également une fonction de charge f^s (4.35) permettant l'obtention d'un « multiplicateur viscoplastique » $\dot{\lambda}^s$ (4.40). Il est alors aisé de retrouver les équations d'évolution temporelle de la partie non linéaire du gradient de transformation dans le contexte d'une formulation lagrangienne $\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p$, *i.e.* configuration courante C_i, mais également eulérienne $\underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p$, *i.e.* configuration courante C_c :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\lambda}^s \, \frac{\partial f^s}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^e} = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \, \underline{\boldsymbol{l}}^s_i \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s_i \tag{5.58}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\lambda}^s \, \frac{\partial f^s}{\partial \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \, \underline{\boldsymbol{l}}^s_c \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s_c \tag{5.59}$$

Tenant compte des équations d'évolution, la dissipation intrinsèque considérée dans le contexte actuel est respectivement donnée selon la description matérielle et spatiale par :

$$\Theta = \frac{1}{\varrho_0} \underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^e : \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p - \sum_{s=1}^{N_s} \chi^s \, \dot{\alpha}^s - \sum_{s=1}^{N_s} r^s \, \dot{\rho}^s \tag{5.60}$$

$$\Theta = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^p - \sum_{s=1}^{N_s} \chi^s \, \dot{\alpha}^s - \sum_{s=1}^{N_s} r^s \, \dot{\rho}^s \tag{5.61}$$

On renvoie le lecteur au Tableau 4.2 pour un récapitulatif des équations constitutives du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée avec pour seules différences la définition de la cission résolue τ^s donnée par les relations (5.38) et (5.38) et de la dissipation intrinsèque Θ (5.60) et (5.61).

5.3 Intégration numérique des modèles multi-échelles

Il est bien évident que les formulations thermodynamiques des équations constitutives du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée peuvent être données selon un formalisme lagrangien mais également eulérien. Dans la présente partie, l'intérêt est porté à l'intégration numérique de ces équations, mais essentiellement dans le contexte d'une description spatiale. En effet, si l'approche lagrangienne présente l'avantage de fournir l'ensemble des variables internes sous une forme plus simples dans la configuration intermédiaire C_i [207], la description spatiale permet d'utiliser ces critères selon le tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$. Par ailleurs, l'approche eulérienne fournit bien souvent des vecteurs de charge interne $\underline{\boldsymbol{f}}$ et des modules tangents $\mathcal{J}$ plus creux que ceux utilisés dans l'approche lagrangienne [290]. Néanmoins, l'utilisation d'une description spatiale n'est guère aisée et requiert l'utilisation de la notion de dérivée objective, présentée dans ce qui suit, en vue de respecter le principe d'objectivité. Le schéma d'intégration numérique est basé sur la méthode du « rate tangent modulus » utilisé dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.2.2) suivie d'une procédure itérative de type Newton-Raphson. Celui-ci est présenté dans le second paragraphe de cette partie.

5.3.1 Description spatiale : notion de dérivée objective

Dans un formalisme lagrangien, les lois de comportement prennent bien souvent des formes assez simples, et ce, du fait que la configuration intermédiaire C_i n'est guère concernée par les rotations induites par les sollicitations extérieures. Si l'on considère un comportement linéaire de type loi de Hooke [5], celui-ci est donnée dans la configuration intermédiaire C_i par le second tenseur de Piola-Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}$ et le tenseur de déformation linéaire de Green-Lagrange $\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e$ via :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_i \,:\, \underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e \tag{5.62}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_i$ est le tenseur d'élasticité dans la configuration intermédiaire C_i. Dans le cadre d'un traitement numérique par la méthode des éléments finis (EF), la résolution de la relation (5.62) concerne essentiellement la dérivée temporelle de celle-ci, *i.e.* :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}}^e = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_i \,:\, \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^e \tag{5.63}$$

La description spatiale de ce modèle s'attache à formuler la relation (5.62) selon le tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ ou éventuellement celui de Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}$ associé au tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e$ dans la configuration courante C_c. Pour ce faire, il convient dans un premier temps d'exprimer respectivement les dérivés temporelles du second tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff $\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}}$ et celui de la déformation de Green-Lagrange $\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^e$ selon le tenseur de contrainte

5. Dans le contexte actuel, *i.e.* la théorie des transformations finies, ce modèle est dit de Saint-Venant-Kirchhoff.

de Kirchhoff et $\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e$. Tenant compte compte des relations (5.37) et (5.33), celles-ci sont données selon :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}}^e = \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} \cdot \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-T} - \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} \cdot \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-T} - \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-1} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-T} \cdot \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}^{eT} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{e-T} \tag{5.64}$$

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}}^e = \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \tag{5.65}$$

Par le biais d'une transformation dans la configuration courante C_c, la relation (5.64) permet d'exprimer la dérivé particulaire $\mathcal{L}_v\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}\right)$ de Lie du tenseur de contrainte de Kirchhoff $\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}$, qui correspond bien à la dérivée objective d'Oldroyd de celui-ci $\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Od}$ donnée par [316] :

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Od} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^{eT} \tag{5.66}$$

De par ces considérations, la loi de comportement linéaire (5.63) donnée dans le cadre d'une description spatiale devient :

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Od} = \left[\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e\right) : \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_i : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT}\right)\right] : \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \tag{5.67}$$

D'une manière équivalente, si l'on considère le tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$, cette même démarche conduit à la dérivée objective de Truesdell de celui-ci $\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr}$ [316] définie selon :

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^{eT} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e\right) = \overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Od} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e\right) \tag{5.68}$$

Le modèle de comportement de Hooke (5.63) se reformule de la manière qui suit :

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr} = \left[J^{-1}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e\right) : \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_i : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT}\right)\right] : \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_c : \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \tag{5.69}$$

où $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_c$ est le tenseur d'élasticité dans la configuration courante C_c et est considéré dans le contexte actuel comme étant égal à $\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}$.

Par ailleurs, il est également intéressant de noter que d'autres dérivées objectives courantes, notamment celle de Jaumann-Zaremba du tenseur de contrainte de Kirchhoff $\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Jm}$ [316], sont assez souvent utilisées dans la modélisation multi-échelle bien que celle-ci présente quelques ambiguïtés quant à la prédiction du comportement non linéaire [290]. Par définition, la dérivée de Jaumann-Zaremba peut être perçue comme étant une simplification de celle d'Oldroyd du tenseur de contrainte de Kirchhoff $\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Od}$, et ce, en négligeant les termes liés à la déformation pure $\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e$ de la relation (5.19), *i.e.* :

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Jm} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^e \tag{5.70}$$

ce qui permet de réécrire le modèle de comportement de Hooke (5.63) de la manière qui suit :

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Jm} = \left[\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e\right) : \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_i : \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^{eT}\right)\right] : \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \tag{5.71}$$

Si l'on considère le tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$, la loi de Hooke (5.63) est donnée selon :

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \right) = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}_c \text{ : } \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \tag{5.72}$$

De par ces considérations, il est évident qu'un modèle de comportement « simple », notamment de type de Hooke présente un aspect déjà complexe à traiter en comparaison de celui défini dans le cadre de l'hypothèse de petites perturbations (HPP). Comme évoqué précédemment, l'usage des dérivées objectives s'attache essentiellement au respect du principe d'objectivité. Dans le cadre de la théorie des transformations finies des milieux continus de Cauchy, une infinité de dérivés objectives peuvent éventuellement être développée. Dans le contexte actuel, l'intérêt se porte sur celle qui ne présente aucune ambiguïté vis-à-vis d'une formulation lagrangienne, *i.e.* la dérivée de Truesdell, mais également à celle qui est historiquement courante, à savoir la dérivée de Jaumann-Zaremba.

5.3.2 Algorithme d'intégration numérique

L'algorithme d'intégration numérique consiste en une extension de celui utilisé dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) à la théorie des transformations finies. Pour rappel, celui-ci s'attache à un schéma d'intégration semi-implicite. La résolution des équations constitutives de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée utilise une approche directe par la méthode « rate tangent modulus » de Peirce et al. [190, 191] suivie d'une procédure itérative de type Newton-Raphson. Ces équations sont écrites en Fortran dans une routine UMAT du code de calcul Abaqus/Standard articulées autour d'une résolution implicite par la méthode des éléments finis (EF). Si l'intérêt d'un tel solveur est essentiellement dû à la dialectique coût-pertinence de l'intégration numérique (cf. §4.2.1), celui-ci permet également une extension aisée aux transformations finies, et ce, par l'usage d'une dérivée objective adéquate que l'on illustre dans ce paragraphe. Dans ce qui suit, l'extension de l'algorithme d'intégration numérique dans §4.2.2 est menée dans le cadre d'une description spatiale en utilisant les deux dérivées objectives présentées ci-dessus, à savoir celle de Truesdell du tenseur de contrainte de Cauchy $\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr}$ (5.68) (équivalente à celle d'Oldroyd du tenseur de contrainte de Kirchhoff $\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Od}$ (5.66)) et celle de Jaumann-Zaremba du tenseur de contrainte de Kirchhoff $\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}}^{Jm}$ (5.70).

Problèmes constitutives. Dans le cadre de la théorie des transformations finies, le schéma de type prédiction élastique - correction plastique de Simo et Hughes [168] permet la résolution des problèmes qui suivent, selon que l'on considère la dérivée objective de Truesdell ou celle de Jaumann-Zaremba :

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} \text{ : } \left[\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} - \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \text{ sym} \left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s \right) \right] \tag{5.73}$$

$$\overset{\circ}{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} \right) = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} \text{ : } \left[\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} - \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \text{ sym} \left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s \right) \right] \tag{5.74}$$

Par ailleurs, il est inhérent de considérer en outre la dérivée objective du tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$ utilisée par le code de calcul par éléments finis (EF). La version explicite du solveur, *i.e.* Abaqus/explicit, utilise à la dérivée objective de Green-Naghdi $\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{GN}_{Abq}$ donnée par :

$$\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{GN}_{Abq} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\Omega}} \tag{5.75}$$

tel que $\underset{\sim}{\boldsymbol{\Omega}} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{R}}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{R}}^T$, où $\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{R}}}$ est le tenseur de rotation issue de la décomposition polaire (5.5). Cependant, l'incorporation de la dérivée de Green-Naghdi dans l'algorithme de résolution (5.73) et (5.74) n'est guère aisée et requiert des hypothèses de calcul plus ou moins fortes. Néanmoins, pour des applications liées aux procédés de mise en forme, les études de Belytschko et al. [273] montrent que l'utilisation de la dérivée objective de Green-Naghdi est assez pertinente étant donné que les déformations élastiques sont bien négligeables par rapport aux processus non linéaires. Dans le contexte actuel, l'intérêt se porte au solveur implicite Abaqus/Standard du fait qu'il utilise la dérivée objective de Jaumann-Zaremba du tenseur de contrainte de Cauchy $\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}_{Abq}$. Celle-ci est donnée par :

$$\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}_{Abq} = \dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{W}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{W}} \tag{5.76}$$

En vue d'incorporer la dérivée objective de Jaumann-Zaremba $\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}_{Abq}$ (5.76) dans les problèmes constitutives (5.73) et (5.74), il convient dans un premier temps de soustraire les expressions des dérivées objectives respectives de Truesdell $\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr}$ et de Jaumann-Zaremba [6] $\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}$ par la relation (5.76), *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr} - \underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}_{Abq} = -\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{\Xi}} \tag{5.77}$$

$$\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}\right) - \underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}_{Abq} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{\Xi}} \tag{5.78}$$

où l'on pose :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\Xi}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^p \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^p = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \left[\text{asym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \text{asym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right)\right] \tag{5.79}$$

Les problèmes (5.73) et (5.74) sont ainsi reformulés en incorporant les expressions des dérivées objectives respectives d'Oldroyd $\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\tau}}}^{Od}$ et de Jaumann-Zaremba $\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}$ données par celles-ci dans (5.77) et (5.78), *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}_{Abq} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left[\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} + \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{-1} : \underset{\sim}{\boldsymbol{Z}}\right] - \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \text{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{\Pi}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{Q}}\right] \tag{5.80}$$

$$\underset{\sim}{\mathring{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}_{Abq} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left[\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} - \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}^{-1} : \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}\right)\right] - \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \text{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{Q}}\right] \tag{5.81}$$

6. Les dérivées objectives de Truesdell et de Jaumann-Zaremba sont celles utilisées dans les problèmes constitutives (5.73) et (5.74) et peuvent donc être attribuées à un comportement « linéaire ».

tels que :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{Z}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{D}} \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{D}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} \right) \tag{5.82}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\Pi}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{.} \text{ sym} \left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s \right) + \text{sym} \left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s \right) \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \tag{5.83}$$

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{Q}} = \text{asym} \left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s \right) \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{.} \text{ asym} \left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s \right) \tag{5.84}$$

Les équations (5.80) et (5.81) représentent les problèmes auxquels s'attache le schéma de type prédiction élastique - correction plastique de Simo et Hughes [168]. Les principales inconnues sont, à l'image de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), les vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ des systèmes de glissement.

Méthode « rate tangent modulus ». Considérant une intégration numérique basée sur la θ-méthode de trapèze généralisée (4.56), la méthode « rate tangent modulus » revient à traiter les incréments des vitesses de cisaillement $\frac{\Delta \gamma^s}{\Delta t}$ selon (cf. §4.2.2) :

$$\frac{\Delta \gamma^s}{\Delta t} = \dot{\gamma}_t^s + \theta \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \right|_t \Delta \tau^s + \theta \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial r^s} \right|_t \Delta r^s + \theta \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \chi^s} \right|_t \Delta \chi^s \tag{5.85}$$

où le paramètre θ est pris égal à 0,5 en vue de minimiser les erreurs d'intégration (cf. §4.2.2). À noter que les relations des incréments des variables d'écrouissage isotrope Δr^s et cinématique $\Delta \chi^s$ sont bien identiques à celles utilisées dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), *i.e.* (4.69) et (4.70), alors que celle de la cission résolue $\Delta \tau^s$ requiert une extension vers les transformations finies.

Pour ce faire, il convient de développer la dérivée temporelle de la cission résolue τ^s définie par la relation (5.39). Compte tenu du fait que les évolutions temporelles du vecteur normal au plan de glissement $\dot{\underline{\boldsymbol{n}}}^s$ et celui de direction de glissement $\dot{\underline{\boldsymbol{l}}}^s$ sont données par :

$$\dot{\underline{\boldsymbol{n}}}^s = \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e \boldsymbol{.} \underline{\boldsymbol{n}}^s \tag{5.86}$$

$$\dot{\underline{\boldsymbol{l}}}^s = -\underline{\boldsymbol{l}}^s \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e \tag{5.87}$$

l'évolution temporelle de la cission résolue $\dot{\tau}^s$ peut être donnée dans un premier temps de la manière qui suit :

$$\dot{\tau}^s = J \, \underline{\boldsymbol{n}}^s \boldsymbol{.} \left[\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} \right) - \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{sigma}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e \right] \boldsymbol{.} \underline{\boldsymbol{l}}^s \tag{5.88}$$

Selon que l'on considère la dérivée objective de Truesdell ou celle de Jaumann-Zaremba, la relation (5.88) devient :

$$\dot{\tau}^s = J \, \underline{\boldsymbol{n}}^s \boldsymbol{.} \left[\mathring{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr} + 2 \, \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \right] \boldsymbol{.} \underline{\boldsymbol{l}}^s \tag{5.89}$$

$$\dot{\tau}^s = J \, \underline{\boldsymbol{n}}^s \boldsymbol{.} \left[\mathring{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \text{ trace} \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} \right) - \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{.} \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e \right] \boldsymbol{.} \underline{\boldsymbol{l}}^s \tag{5.90}$$

Les évolutions temporelles de la cission résolue $\dot{\tau}^s$ basée sur la dérivée objective de Truesdell (5.89) ou celle de Jaumann-Zaremba (5.90) peuvent être formulées aisément par le biais de quelques manipulations mathématiques selon :

$$\dot{\tau}^s = J \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \operatorname{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{G}} \right] : \left[\underset{\sim}{\boldsymbol{D}} - \sum_{r=1}^{N_r} \dot{\gamma}^r \operatorname{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r\right) \right] \tag{5.91}$$

tel que :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{G}} = \begin{cases} 2\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \operatorname{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right), \text{ pour la dérivée objective de Truesdell} \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{Q}}, \text{ pour la dérivée objective de Jaumann-Zaremba} \end{cases} \tag{5.92}$$

La méthode « rate tangent modulus » se destine par la suite à incorporer les relations (4.69), (4.70) ainsi que la forme discrétisée de (5.91) dans (5.85) en vue d'obtenir un système linéarisé ayant comme inconnues les incréments des glissements des systèmes r, $\Delta\gamma^r$, *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{A}} . \underline{\boldsymbol{\Delta\gamma}} = \underline{\boldsymbol{b}} \tag{5.93}$$

tels que :

$$\begin{aligned} \underset{\sim}{\boldsymbol{A}} = A^{sr} = \delta^{sr} &+ \Delta t\, \theta \left.\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s}\right|_t \det\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}\right) \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \operatorname{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{G}} \right] : \operatorname{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r\right) \\ &- \Delta t\, \theta \left.\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t b\, Q\, h^{sr}\, \left(1 - b\, \rho^r\right) \operatorname{sign}\left(\xi^s\right) \\ &- \Delta t\, \theta \left.\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \chi^s}\right|_t \left[\delta^{sr}\, C - \delta^{sr}\, C\, d\, \alpha^s \operatorname{sign}\left(\xi^s\right)\right] \end{aligned} \tag{5.94}$$

$$\underline{\boldsymbol{\Delta\gamma}} = \Delta\gamma^r \tag{5.95}$$

$$\underline{\boldsymbol{b}} = b^s = \Delta t\, \dot{\gamma}^s + \Delta t\, \theta \left.\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s}\right|_t \det\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}\right) \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \operatorname{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) + \underset{\sim}{\boldsymbol{G}} \right] : \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}\, \Delta t \tag{5.96}$$

Les expressions de $\left.\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s}\right|_t$, $\left.\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial r^s}\right|_t$ et $\left.\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \chi^s}\right|_t$ sont bien identiques à celles dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations et dépendent du modèle utilisé (cf. §4.2.2). De par la résolution du système (5.93), les vitesses de cisaillement des systèmes de glissement $\dot{\gamma}^s$ sont déduites selon :

$$\dot{\gamma}^s = \frac{\Delta\gamma^s}{\Delta t} \tag{5.97}$$

Procédure itérative de Newton-Raphson. La procédure itérative de Newton-Raphson suit inéluctablement celle déjà mise en place dans le cadre l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf.§4.2.2), *i.e.* aucune modification n'est requise pour la théorie des transformations finies.

Calcul de la Jacobienne. Le calcul de la matrice Jacobienne $\mathcal{J}$ est effectuée de la même manière que dans le cadre l'hypothèse des petites perturbations (HPP), *i.e.* :

$$\mathcal{J} = \frac{\partial \Delta \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{Jm}_{Abq}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}} \tag{5.98}$$

Cependant, il est évident que celle-ci dépend de la dérivée objective utilisée. Si l'on considère la dérivée objective de Truesdell $\mathring{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Tr}$, la matrice jacobienne $\mathcal{J}$ peut être donnée selon :

$$\begin{aligned}\mathcal{J} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \underline{\otimes} \underset{\sim}{\boldsymbol{I}} + \underset{\sim}{\boldsymbol{I}} \underline{\otimes} \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{I}} - \sum_{r=1}^{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} A^{rs,-1}\, \Delta t\, \theta \left.\frac{\partial \dot{\gamma}^r}{\partial \tau^r}\right|_t \\ \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r) + \underset{\sim}{\boldsymbol{G}}\right] \otimes \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s) + \underset{\sim}{\boldsymbol{G}}\right]\end{aligned} \tag{5.99}$$

Par ailleurs, dans le contexte de la dérivée objective de Jaumann-Zaremba $\mathring{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}}^{Jm}$, la matrice jacobienne $\mathcal{J}$ devient :

$$\begin{aligned}\mathcal{J} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} - \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{I}} - \sum_{r=1}^{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} A^{rs,-1}\, \Delta t\, \theta \left.\frac{\partial \dot{\gamma}^r}{\partial \tau^r}\right|_t \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^r \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^r) + \underset{\sim}{\boldsymbol{G}}\right] \\ \otimes \left[\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \mathrm{sym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s) + \underset{\sim}{\boldsymbol{G}}\right]\end{aligned} \tag{5.100}$$

À noter que les relations (5.99) et (5.100) de la matrice jacobienne $\mathcal{J}$ ne considèrent guère les dérivées des incréments des vecteurs $\underline{\boldsymbol{l}}^s$ et $\underline{\boldsymbol{n}}^s$ par rapport à ceux du tenseur $\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}$. Ces relations constituent en effet des approximations des matrices jacobiennes « exactes » dans le cadre de la théorie des transformations finies.

Si dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), le présent algorithme se destine à intégrer un certain nombre de variables, notamment celles liées à la dissipation intrinsèque Θ, en tant que variables auxiliaires ϑ_{aux}, la théorie des transformations finies requiert en outre un intérêt à l'évolution des rotations des réseaux cristallins. Celles-ci peuvent être traduites par les relations (5.86) et (5.87) permettant d'incrémenter les vecteurs normaux aux plans des systèmes de glissement $\underline{\boldsymbol{n}}^s$ et ceux des directions de glissement $\underline{\boldsymbol{l}}^s$. L'évolution des rotations des réseaux cristallins sont données par les incréments des angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ selon les formules de Bunge [16] :

$$\dot{\varphi}_1 = \frac{\sin(\varphi_2)}{\sin(\phi)} W^e_{23} + \frac{\cos(\varphi_2)}{\sin(\phi)} W^e_{31} \tag{5.101}$$

$$\dot{\phi} = \cos(\varphi_2)\, W^e_{23} - \sin(\varphi_2)\, W^e_{31} \tag{5.102}$$

$$\dot{\varphi}_2 = -\frac{\cos(\phi)\, \sin(\varphi_2)}{\sin(\phi)} W^e_{23} - \frac{\cos(\phi)\, \cos(\varphi_2)}{\sin(\phi)} W^e_{31} + W^e_{12} \tag{5.103}$$

où W^e_{ij} sont les composantes de la partie linéaire du tenseur vitesse de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{W}}$ du cristal constitutif en question, *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^e = \underset{\sim}{\boldsymbol{W}} - \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s\, \mathrm{asym}\,(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s) \tag{5.104}$$

À noter que l'on fait appel à l'algorithme de Hughes et Winget [324] qui utilise la relation :

$$\Delta \underset{\sim}{\boldsymbol{R}} = \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{I}} - \frac{1}{2} \Delta \underset{\sim}{\boldsymbol{W}} \right)^{-1} \cdot \left(\underset{\sim}{\boldsymbol{I}} + \frac{1}{2} \Delta \underset{\sim}{\boldsymbol{W}} \right) \tag{5.105}$$

Le Tableau 5.1 présente un récapitulatif de l'algorithme d'intégration numérique utilisé.

Tableau 5.1 – Récapitulatif du schéma d'intégration numérique dans le cadre de la théorie des transformations finies.

1. Étant donné : $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}_t$, $\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}_{t+\Delta t}$, ϑ_t^{int}, ζ_t^{duales}, ϑ_t^{aux}.
2. Calcul des cissions résolues τ_t^s et des vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}_t^s$.
3. Assemblage de la matrice $\underset{\sim}{\boldsymbol{A}}$ et du vecteur $\underline{\boldsymbol{b}}$.
4. Résolution du système (5.93) $\left(\text{calcul des valeurs } \Delta\gamma^{s,(i=0)}\right)$.
5. Calcul des variables d'état internes $\left(\alpha_{t+\Delta t}^{s,(i)}, \rho_{t+\Delta t}^{s,(i)}\right)$ et des variables duales $\left(\tau_{t+\Delta t}^{s,(i)}, r_{t+\Delta t}^{s,(i)}, \chi_{t+\Delta t}^{s,(i)}\right)$.
6. Calcul des vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{s,(i)}$ via les variables de l'étape 5.
7. Résolution du système (4.84).
   If $\left|\mathcal{R}^{(i)}\right| \leq \|o_+\|$ Then $\Delta\gamma^s = \Delta\gamma^{s,(i)}$, $\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^s = \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{s,(i)}$, $\alpha_{t+\Delta t}^s = \alpha_{t+\Delta t}^{s,(i)}$, $\rho_{t+\Delta t}^s = \rho_{t+\Delta t}^{s,(i)}$
   $\tau_{t+\Delta t}^s = \tau_{t+\Delta t}^{s,(i)}$, $r_{t+\Delta t}^s = r_{t+\Delta t}^{s,(i)}$ et $\chi_{t+\Delta t}^s = \chi_{t+\Delta t}^{s,(i)}$ & Go To étape 8.
   Else If $i \geq 3$ Then $\Delta\gamma^s = \Delta\gamma^{s,(i=0)}$, $\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^s = \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$, $\alpha_{t+\Delta t}^s = \alpha_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$, $\rho_{t+\Delta t}^s = \rho_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$
   $\tau_{t+\Delta t}^s = \tau_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$, $r_{t+\Delta t}^s = r_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$ et $\chi_{t+\Delta t}^s = \chi_{t+\Delta t}^{s,(i=0)}$ & Go To étape 8.
   Else Résolution du système (5.86).
   Incrémentation des solutions $\Delta\gamma^{s,(i)}$ via (5.85) & Go To étape 5.
8. Calcul du tenseur de contrainte $\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}_{t+\Delta t}$ (5.80) et (5.81) et les variables auxiliaires $\vartheta_{t+\Delta t}^{aux}$ à savoir les nouvelles orientations cristallographiques.
9. Calcul de la matrice jacobienne $\mathcal{J}$ (5.91).

5.4 Investigation des champs mécaniques locaux

Comme évoqué précédemment, l'investigation numérique actuelle est restreinte aux sollicitations monotones quasi-statiques dont les conditions aux limites sont données dans §4.4.4. En outre, seul le modèle multi-échelle de Méric-Cailletaud [20, 21] utilisant la dérivée objective de Truesdell est considéré. La présente investigation numérique considère à l'ensemble des variables traitées dans §4.5 selon les paramètres issus de la caractérisation expérimentale (cf. §4.5.1). Par ailleurs, des confrontations entre la théorie des transformations finies et l'hypothèse des petites perturbations sont également traitées dans ce qui suit.

5.4.1 Effet de la morphologie des lattes en surface

Analyse du comportement à diverses échelles. À l'échelle *macro* du VER, la morphologie anisotrope des lattes de martensite en surface n'a guère d'influence sur le comportement global de l'acier AISI H11, et ce, quelle que soit la formulation du modèle utilisée

(Figure 5.2). Cependant, il est évident que l'usage de la théorie des transformations finies engendre une augmentation de la contrainte uniaxiale σ_{11} lors de l'écoulement non linéaire. Cet aspect est cohérent avec des études antérieures qui illustrent que les non linéarités géométriques sont bien souvent sources d'une surévaluation de la contrainte [248].

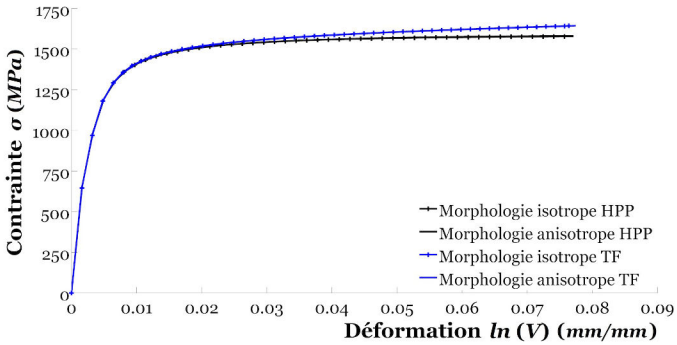
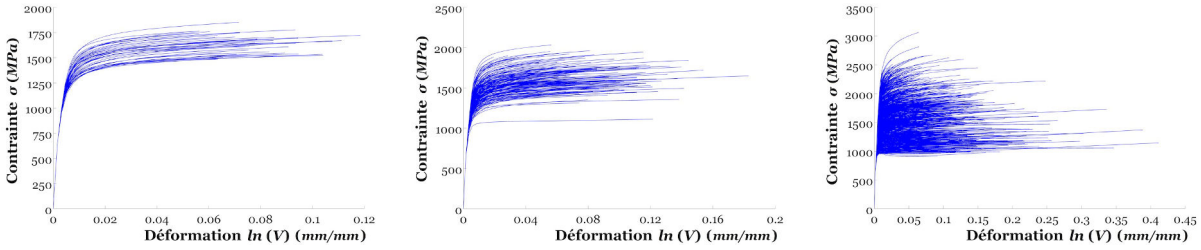


Figure 5.2 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la morphologie des couches superficielles et la formulation du modèle multi-échelle

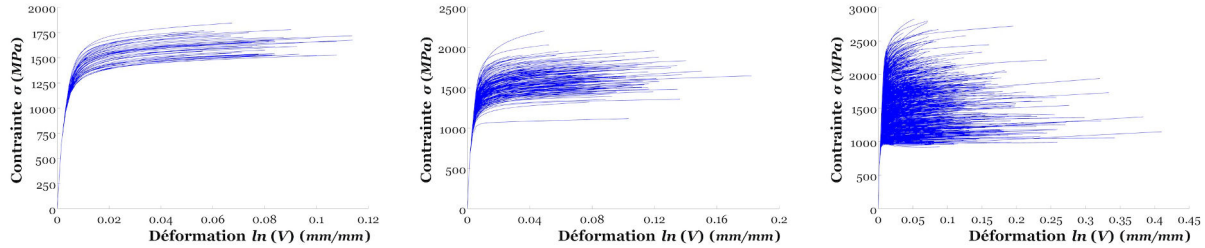
Si l'effet de la morphologie anisotrope n'est guère constaté à l'échelle *macro*, celui-ci apparaît évident à l'échelle locale (Figures 5.3 et 5.4). En effet, le comportement local est perturbé par l'apport d'une telle morphologie, et ce, essentiellement à l'échelle des lattes martensitiques (Figure 5.4c). Cet aspect est éventuellement lié à l'effet d'interaction. À l'instar de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.1), le niveau d'hétérogénéité du comportement local a bien tendance à augmenter à l'échelle des lattes martensitiques (Figures 5.3c et 5.4c) et à s'homogénéiser à l'échelle des anciens grains austénitiques (Figures 5.3a et 5.4a).



(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

Figure 5.3 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface

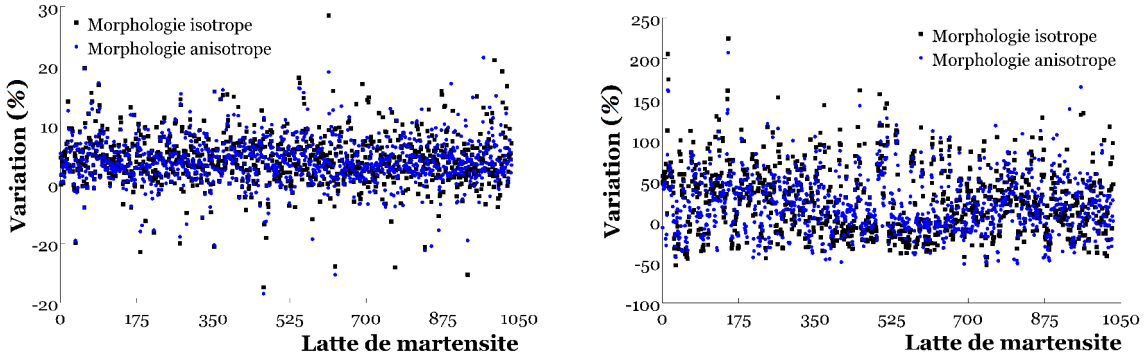
Par ailleurs, l'utilisation de la théorie des transformations finies met en évidence des variations conséquentes du comportement à l'échelle locale, notamment à celle des lattes de martensite (Figure 5.5). Bien que cet aspect ne soit pas si évident à l'échelle *macro* (Figure 5.2), des variations de l'ordre de 25% peuvent avoir lieu pour les contraintes σ_{11}



(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

Figure 5.4 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface

locales (Figure 5.5a). Tandis que les variations des déformations [7] peuvent même atteindre 200% (Figure 5.5b). Ceci peut être lié aux non linéarités géométriques et aux rotations des réseaux cristallins donnant ainsi une réponse locale de chaque latte de martensite différente dans le cadre de la théorie des transformations finies. En outre, on peut également constater que l'apport d'une morphologie anisotrope impacte les variations des réponses mécaniques locales. Une telle morphologie peut affecter les orientations des joints de lattes de martensite par rapport à la direction de sollicitation, modifier les rotations et par conséquent le comportement local des lattes martensitiques.



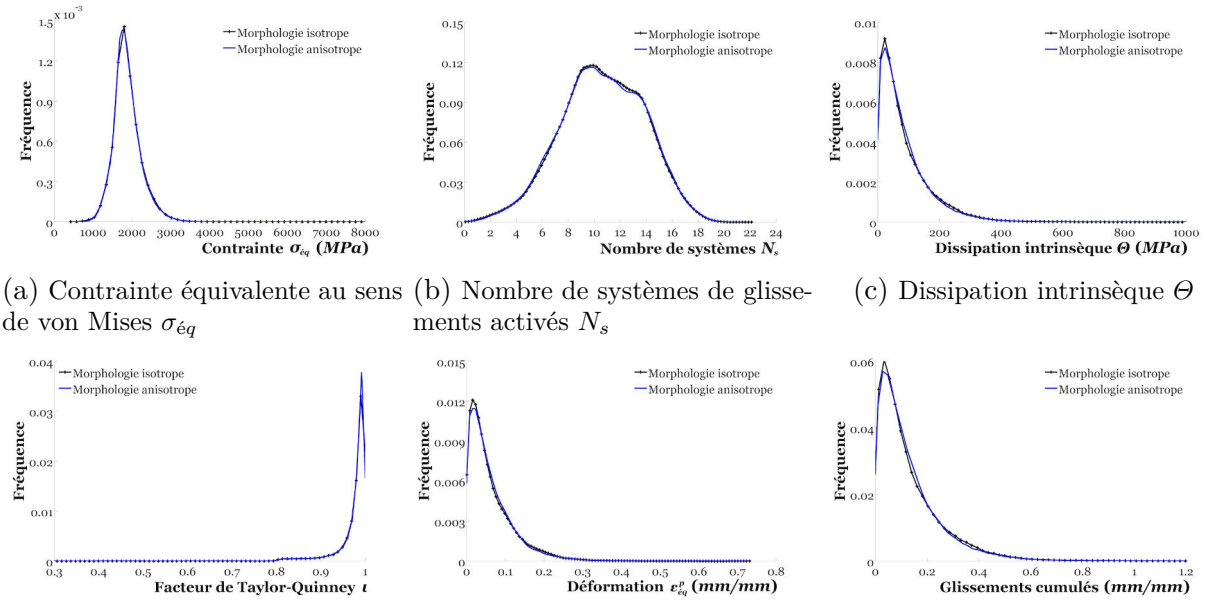
(a) Contrainte σ_{11} (b) Déformation $\ln(V_{11})$

Figure 5.5 – Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) à l'échelle des lattes de martensite

Analyse des distributions des variables. D'une manière globale la morphologie anisotrope n'induit pas de perturbations significatives sur les distributions statistiques de l'ensemble des variables étudiées (Figure 5.6). Par conséquent, l'effet d'interaction ne peut pas être mise en évidence par une telle approche. Cependant, si l'on se réfère aux distributions

7. En vue d'une confrontation concrète entre les deux formulations, les déformations issues de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) sont converties en déformations logarithmiques $\ln(V)$.

statistiques dans le cas de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (Figure 4.22), on s'aperçoit que la théorie des transformations finies fournit des contraintes équivalentes au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ à peine plus conséquentes et un nombre de systèmes de glissement activés N_s légèrement inférieur. Ceci est lié aux rotations induites par la présente formulation. Par ailleurs, on constate également que les déformations plastiques équivalentes[8] maximales $\varepsilon_{éq}^{in}$ (Figure 5.6e) sont également inférieures à celles qui sont données dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). De ce fait, on peut éventuellement prévoir des schémas de localisation moins intenses.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$

(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

(c) Dissipation intrinsèque Θ

(d) Facteur de Taylor-Quinney ι

(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon_{éq}^{in}$

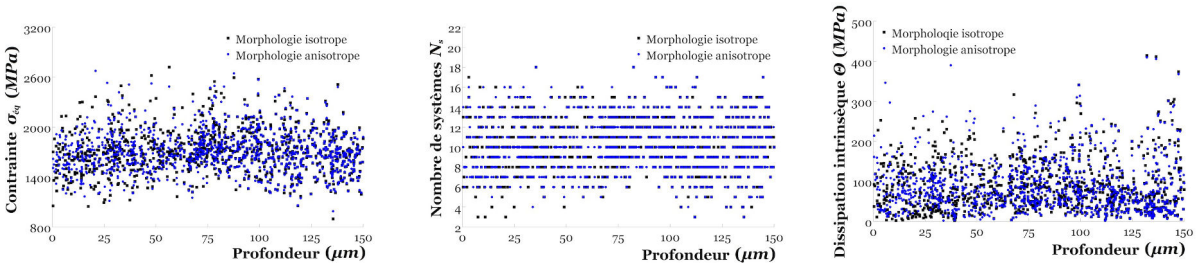
(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 5.6 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement

Les distributions spatiales des variables considérées (Figure 5.7) confirment, dans un premier temps, les constatations ci-dessus. Les valeurs maximales de l'ensemble des variables étudiées sont bel et bien inférieures à celles calculées dans le cas de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (Figure 4.23). La prise en compte des rotations des réseaux cristallins induit une évolution de la structure interne du matériau et ainsi de son comportement local. Par ailleurs, à l'image de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), l'effet d'interaction reste bien présent. L'apport d'une morphologie anisotrope des lattes de martensite en surface implique une perturbation des champs mécaniques locaux. Cependant, bien que cet effet soit constaté dans la partie inférieure des microstructures virtuelles, celui-ci est bien plus conséquent dans les couches superficielles que dans le cadre de l'hypo-

8. Dans le contexte actuel, on conserve la même notation de la déformation inélastique équivalente au sens de von Mises que dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), *i.e.* $\varepsilon_{éq}^{in}$. Celle-ci utilise la même définition que dans §4.5. Autrement dit, dans le cadre de la théorie des transformations finies, cela correspond à $\sqrt{\frac{2}{3} \int_0^t \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^p \, dt : \int_0^t \underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^p \, dt}$.

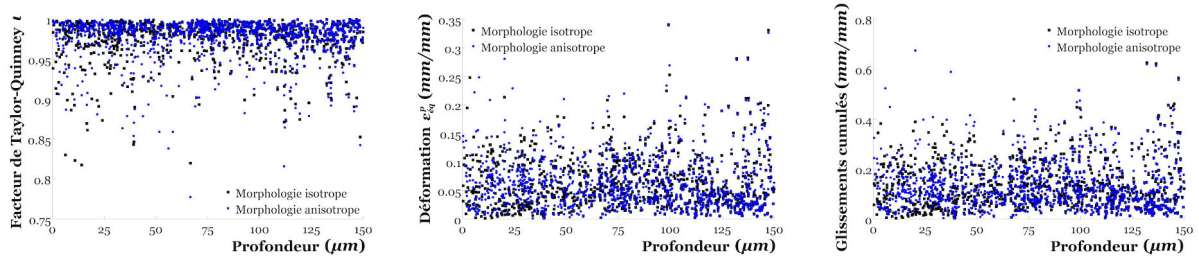
thèse des petites perturbations. Ceci consolide l'impact des non linéarités géométriques de la théorie des transformations finies.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$

(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι

(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$

(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

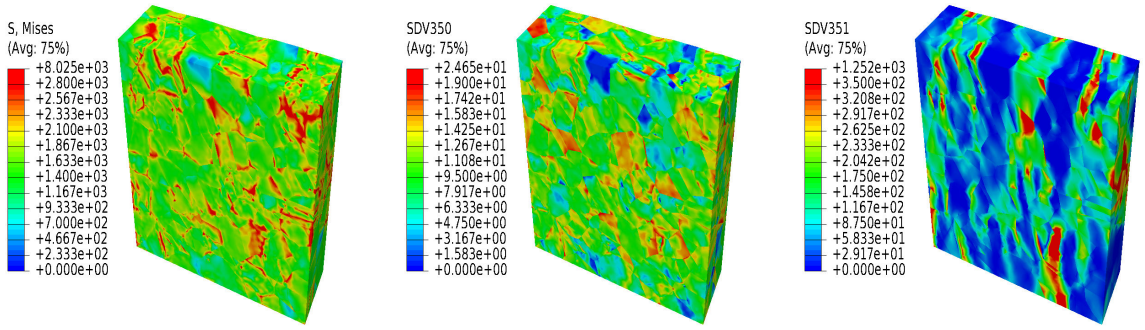
Figure 5.7 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement

Analyse des cartographies des isovaleurs. À l'image de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.1), les cartographies des variables considérées (Figures 5.8 et 5.9) illustrent une translation des champs mécaniques locaux dans la direction de sollicitation. Cependant, cet aspect est bien moins évident dans le contexte actuel. Comme évoqué ci-dessus, l'évolution microstructurale qui inclut les rotations des réseaux cristallins fait que le comportement des lattes de martensite dans les couches superficielles est bien plus affecté par la morphologie anisotrope de celles-ci que dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP).

En outre, si les champs d'activation des systèmes de glissements N_s données par les deux formulations sont assez proches, les cartographies des dissipations intrinsèques Θ (Figures 5.8c et 5.9c) montrent respectivement que les schémas de localisations présents autours des joints de lattes de martensite sont moins intenses que dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Cependant, les réseaux de bandes de localisation sont bien évidents dans le contexte actuel.

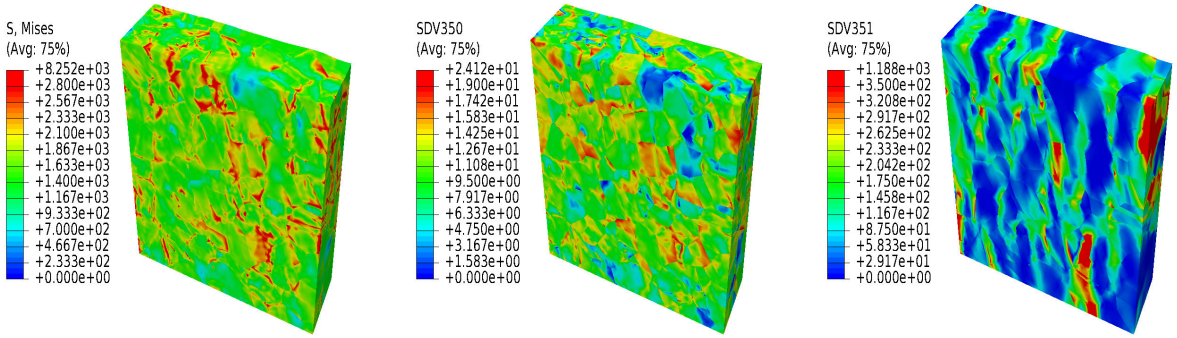
La théorie des transformations finies permet de contourner des « singularités »des champs mécaniques locaux liés à des localisations provoquées par les artefacts stéréologiques (notamment les joints de lattes martensitiques). Celle-ci provoque cependant l'intensification des schémas de localisation. Ce phénomène essentiellement dû au fait que la théorie des

transformations finies adapte le comportement local selon la morphologie des lattes de martensite en surface.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 5.8 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie isotrope en surface à l'issue du chargement



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 5.9 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant une morphologie anisotrope en surface à l'issue du chargement

5.4.2 Effet de la texture cristallographique en surface

Analyse du comportement à diverses échelles. La dépendance du comportement mécanique à l'échelle *macro* des orientations cristallographiques des lattes de martensite en surface n'est guère évidente (Figure 5.10). À une telle échelle, l'ensemble des groupements d'orientations considérées illustrent des comportements quasiment identiques. Pour rappel, cet aspect est constaté lors de l'investigation expérimentale (cf. §1.2.4.1), mais également dans le cadre de l'hypothèse de petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.2). On note toutefois qu'à l'image de cette dernière configuration, les orientations « Texp » présentent une

déformation globale à peine supérieure à celles de « T1 » et « T2 ».

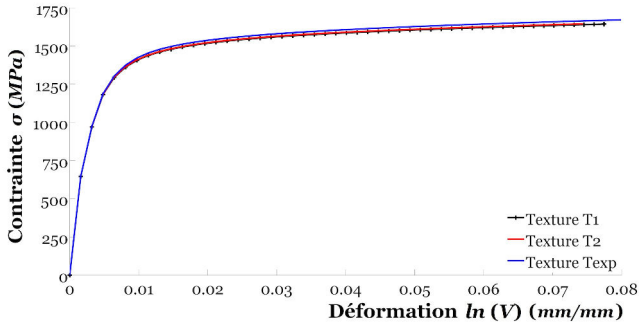
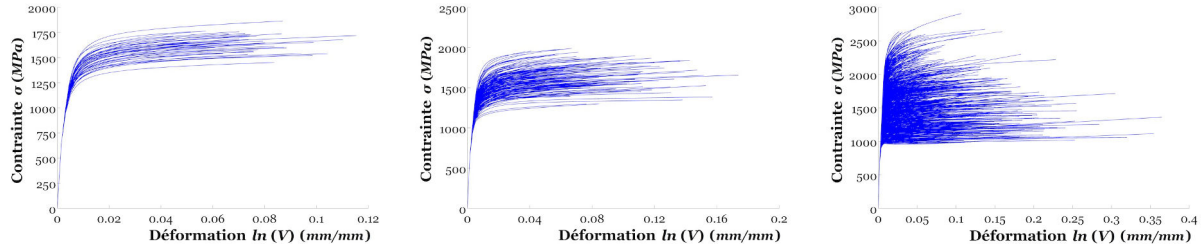


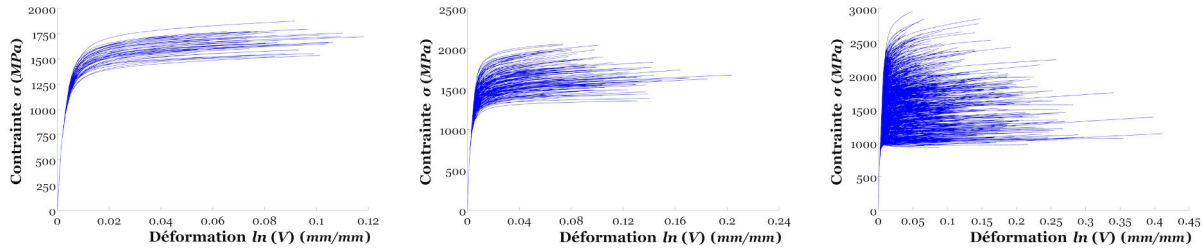
Figure 5.10 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la texture cristallographique des couches superficielles

De même, cette constatation est bien consolidée à l'échelle locale (Figures 5.12 et 5.12), et ce, essentiellement à celle des lattes de martensite (Figure 5.11c). Ceci est effectivement lié à une anisotropie assez marquée des orientations des couches superficielles (cf. §4.5.1.2).



(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

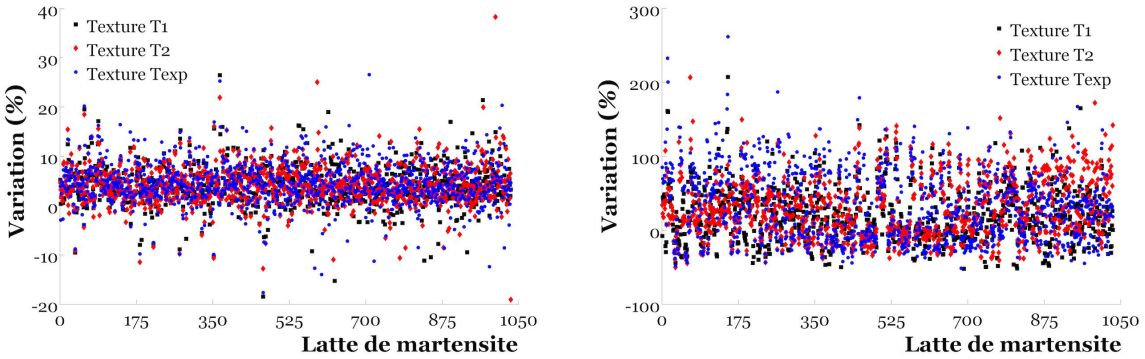
Figure 5.11 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant la texture « T2 » des couches superficielles



(a) Échelle des anciens grains austénitiques (b) Échelle des paquets (c) Échelle des lattes de martensite

Figure 5.12 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant la texture « Texp » des couches superficielles

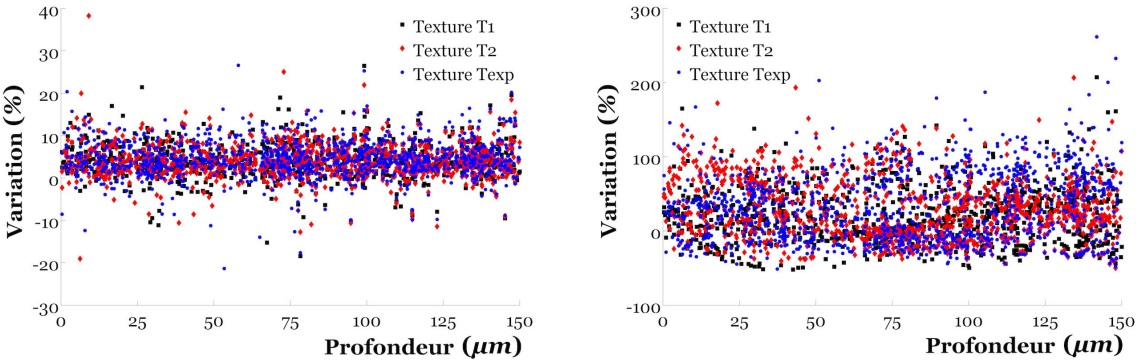
Par ailleurs, il est intéressant de noter que les variations du comportement local par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) sont assez conséquentes, et ce, pour l'ensemble des groupements d'orientations considérés (Figure 5.13).



(a) Contrainte σ_{11} (b) Déformation $\ln(V_{11})$

Figure 5.13 – Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) à l'échelle des lattes de martensite

Afin de mettre en évidence l'effet de la texture cristallographique en surface sur de telles variations, il convient de tracer celles-ci selon la profondeur des lattes martensitiques au sein de la microstructure virtuelle (Figure 5.14).



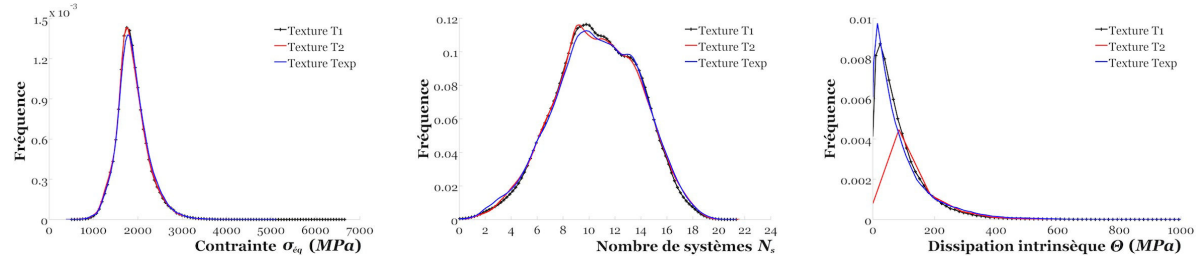
(a) Contrainte σ_{11} (b) Déformation $\ln(V_{11})$

Figure 5.14 – Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) selon la profondeur à l'échelle des lattes de martensite

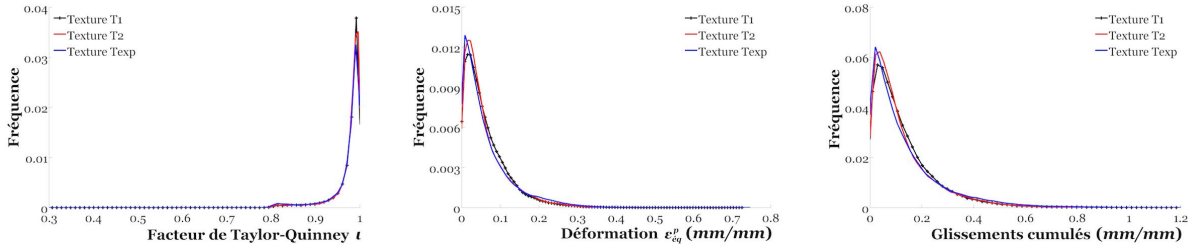
Cette approche montre que les variations des contraintes σ_{11} locales n'illustrent aucune évolution selon la profondeur pour l'ensemble des textures cristallographiques considérées (Figure 5.14a). Cependant, si des variations de déformations moindres dans les couches superficielles sont constatées pour les orientations « Texp » vis-à-vis de « T1 » et « T2 », celles-ci ont tendance à être bien plus conséquentes dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle (Figure 5.14). Ceci peut éventuellement être lié au fait que les couches

superficielles peuvent se déformer d'une manière assez aisée dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) pour les orientations « Texp » (cf. §4.5.1.2). Dans ce dernier contexte, les fortes interactions avec la partie inférieure de la microstructure virtuelle s'attachent ainsi à une augmentation des variations du comportement local dans celle-ci. En outre, on peut également constater que les groupement d'orientations « T2 » présentent une augmentation des variations des déformation locales dans les couches superficielles (Figure 5.14b). Cet effet est bien cohérent étant donnée que la microstructure virtuelle ayant la texture « T2 » en surface affiche une déformation globale à l'échelle *macro* moindre que « T1 » et « Texp ». Dans un tel contexte, l'utilisation de la théorie des transformations finies a pour conséquence une « relaxation » plus importante des déformations locales.

Analyse des distributions des variables. De manière globale, les distributions statistiques ne présentent guère de différences significatives entre les diverses orientations cristallographiques considérées (Figure 5.15). Cependant, il intéressant de noter que le nombre de système de glissement activés N_s est quasiment équivalent pour l'ensemble des textures cristallographiques (Figure 5.15b). Ainsi, la prise en compte des rotations cristallins dans la théorie des transformations finies engendre une augmentation de N_s dans le cas du groupement d'orientations « Texp » en comparaison des résultats fournies dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP).



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

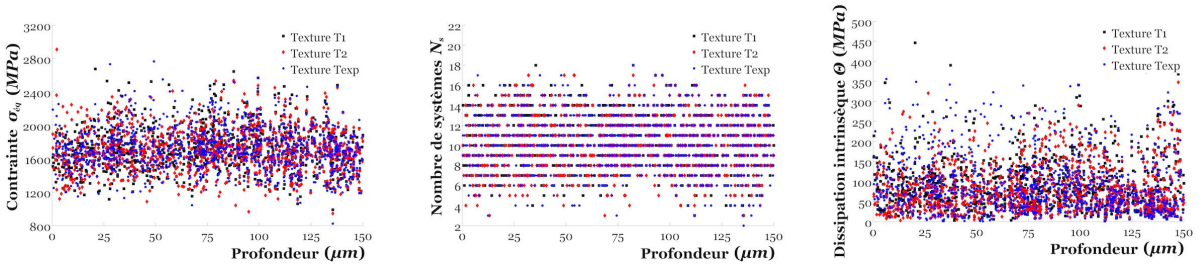


(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

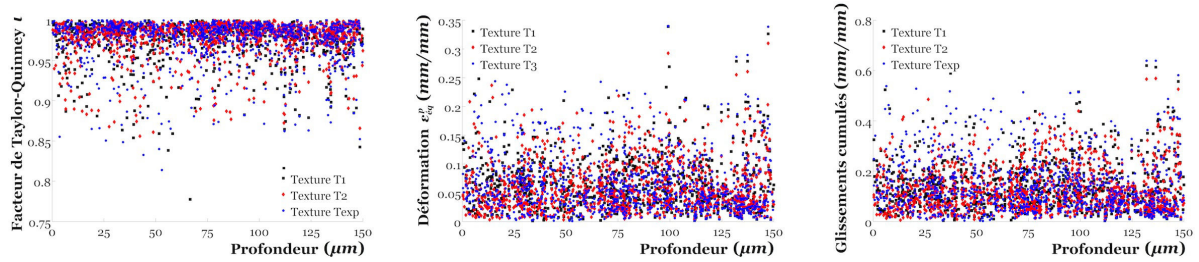
Figure 5.15 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement

À l'instar de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.2), l'effet d'interaction est bien mis en évidence par les distributions spatiales des variables étudiées, et ce, également dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle (Figure 5.16). Les variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ sont à peine plus considérables pour les

orientations « Texp » bien que cette différence ait tendance à diminuer dans le contexte actuel du fait de la prise en compte des rotations des réseaux cristallins.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

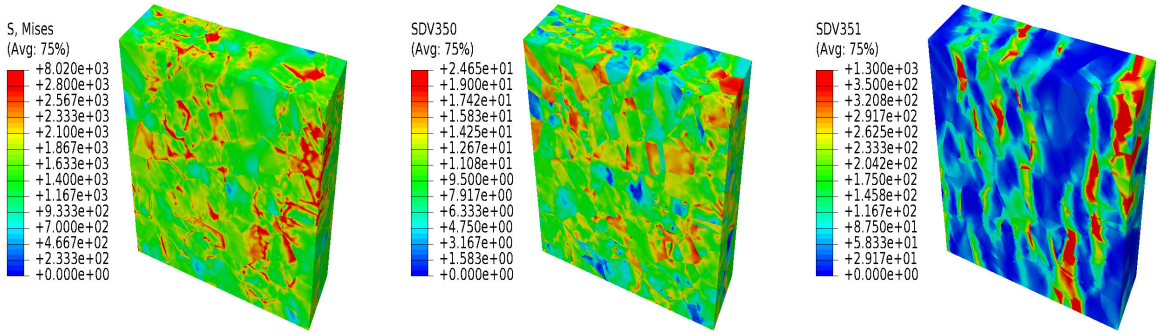
Figure 5.16 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement

Analyse des cartographies des isovaleurs. Les cartographies des isovaleurs des variables considérés (Figure 5.17), l'apport d'une texture plus ou moins anisotrope en surface fournit des champs mécaniques locaux hétérogènes. Cependant, il est évident que ces derniers sont bien perturbés en comparaison de la texture « T1 » (Figure 5.9).

Par ailleurs, si la cartographie des isovaleurs des contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 5.17a) présentent des localisations autour des joints de lattes de martensite, celles-ci sont moins intenses que dans le cas de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.2). Cet aspect est également valable pour la dissipation intrinsèque Θ (Figure 5.17c) qui, en outre, met en évidence une augmentation de l'intensité des réseaux de bandes de localisation. De plus, de par la présente analyse, il apparaît que le nombre de systèmes de glissement activés N_s (Figure 5.17b) est plus conséquent dans le contexte actuel, ce qui consolide les constatations ci-dessus.

5.4.3 Effet de l'écrouissage en surface

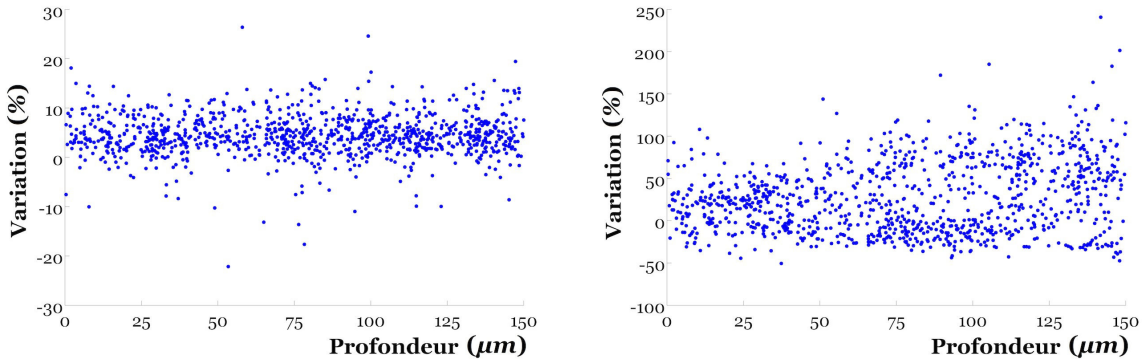
Analyse du comportement à diverses échelles. L'investigation de l'effet de l'écrouissage en surface ne traite pas les courbes de comportement à diverses échelles. Lors du calcul par éléments finis (EF), les données ont été acquises uniquement à l'issue du chargement.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 5.17 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle avec une texture Texp des couches superficielles à l'issue du chargement

De ce fait, seuls les variations des contraintes et déformations uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations sont traitées (Figure 5.18).

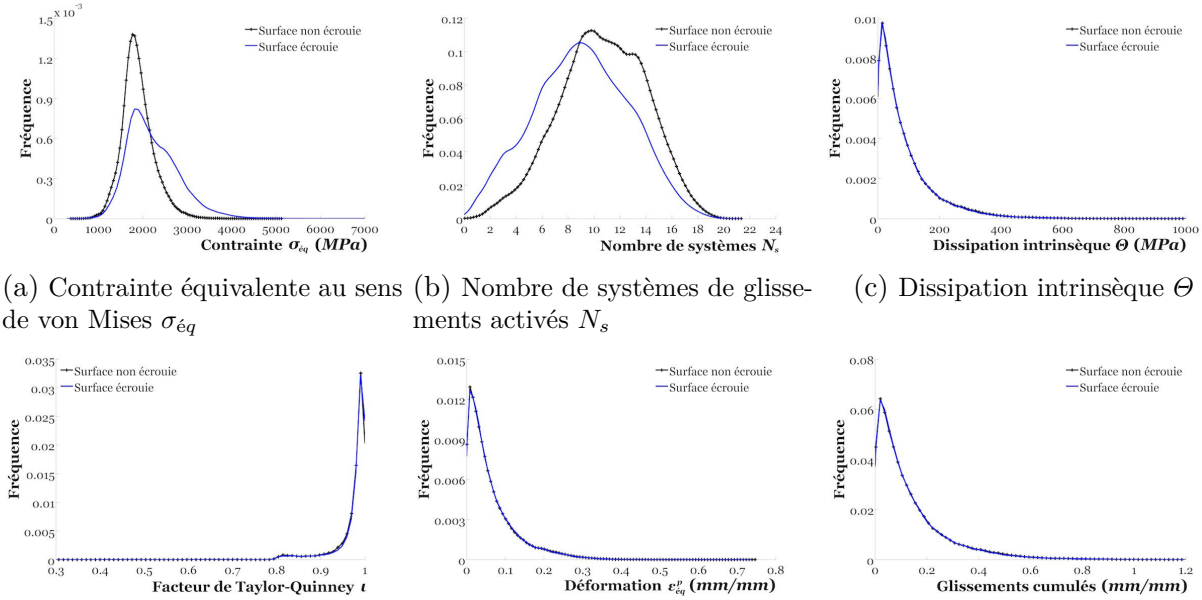


(a) Contrainte σ_{11} (b) Déformation $\ln(V_{11})$

Figure 5.18 – Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) selon la profondeur à l'échelle des lattes de martensite pour la microstructure virtuelle de surface écrouie

Cette approche montre que les variations des contraintes σ_{11} sont quasiment identiques entre les couches superficielles et la partie inférieure de la microstructure virtuelle (Figure 5.18a). Cependant, les variations des déformations locales (Figure 5.18b) ont bien tendance à augmenter dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle. Ceci vient du fait que l'introduction d'un gradient de cissions critiques τ_0^s dans les couches superficielles engendre des niveaux de déformations locales relativement faibles. Autrement, les variations induites par la théorie des transformations finies s'attachent, outre aux rotations des réseaux cristallins, à l'effet d'interaction entre les couches superficielles et la partie inférieure de la microstructure virtuelle.

Analyse des distributions des variables. Les distributions statistiques données par la Figure 5.19 montrent que l'ensemble des variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ ne présentent pas de différences significatives entre la microstructure virtuelle de surface non écrouie et celle ayant une surface écrouie. Cependant, il évident que l'apport d'un gradient de cissions critiques τ_0^s entraîne une augmentation des contraintes équivalentes au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 5.19a), mais également une diminution du nombre de systèmes de glissement activés N_s (Figure 5.19b). Ces constatations sont équivalentes à celles obtenues dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.3).



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$

(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

(c) Dissipation intrinsèque Θ

(d) Facteur de Taylor-Quinney ι

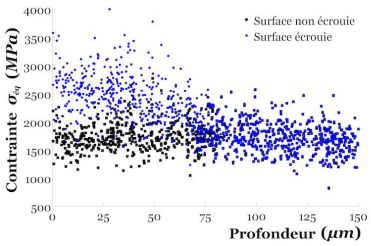
(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$

(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

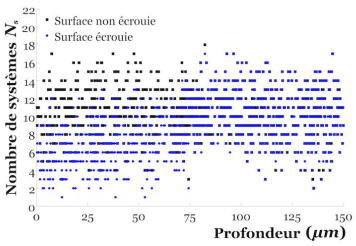
Figure 5.19 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement

Les distributions spatiales des variables étudiées (Figure 5.20) confirment bien les constatations ci-dessus. Par ailleurs, l'introduction d'un gradient de cissions critiques τ_0^s n'entraîne pas de variation des variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ mais une augmentation conséquente des contraintes locales. Ainsi, si l'apport d'un écrouissage superficiel s'accompagne d'une diminution de N_s, les systèmes de glissements activés affichent des valeurs de cisaillement bien plus conséquentes que dans le cas de la microstructure virtuelle de surface non écrouie. De ce fait, l'ensemble des variations des variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ n'illustrent guère de variations significatives.

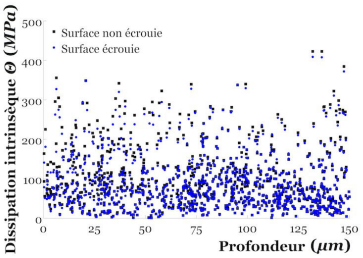
Analyse des cartographies des isovaleurs. À l'instar de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.3), la cartographie des isovaleurs de contraintes équivalentes de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 5.21a) illustre une concentration globale dans les couches superficielles. Comme évoqué ci-dessus, cet aspect s'accompagne d'une diminution de N_s (Figure 5.21b), tandis que le champs de dissipation intrinsèque Θ (Figure 5.21c) est peu perturbé dans cette zone. Cependant, il est clair que l'utilisation de la théorie des transformations



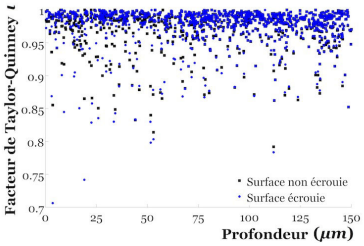
(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



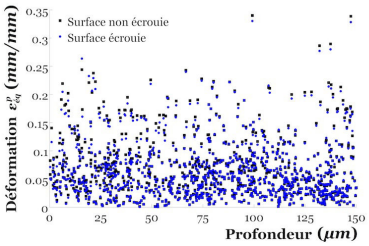
(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



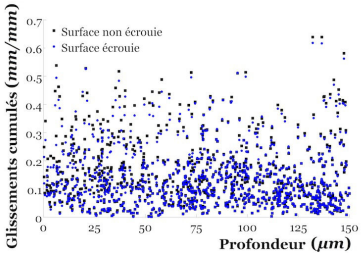
(c) Dissipation intrinsèque Θ



(d) Facteur de Taylor-Quinney ι



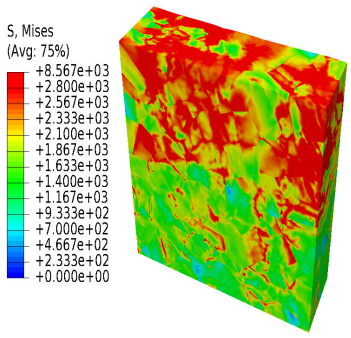
(e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$



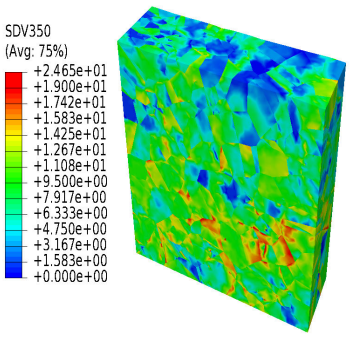
(f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 5.20 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement

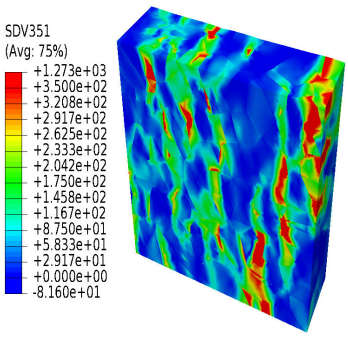
finies a pour conséquence une atténuation des schémas de localisations autour des joints de lattes de martensite. On peut également constater que la prise en compte des rotations des réseaux cristallins n'entraîne qu'une légère augmentation du nombre de systèmes de glissement activés N_s pour les lattes de martensite par rapport au cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP).



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$



(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s



(c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 5.21 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant des couches superficielles écrouies à l'issue du chargement

5.4.4 Effet du profil de surface

Analyse du comportement à diverses échelles. Étant donné que les diverses courbes de comportement n'ont pas été acquises dans §5.4.3, la présente analyse est menée essentiellement par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.4).

Dans le contexte actuel, bien que le niveau de contrainte à l'échelle *macro* soit bien plus conséquent que pour une microstructure virtuelle non écrouie (Figure 5.2), l'écart entre les formulations considérées demeure quasiment identique (Figure 5.22). La théorie des transformations finies conduit à un niveau de contrainte légèrement supérieur en raison des non linéarités géométriques.

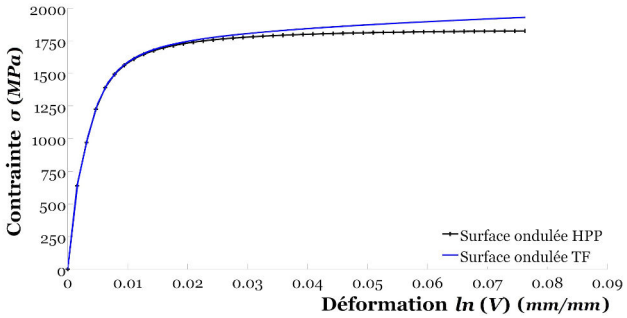
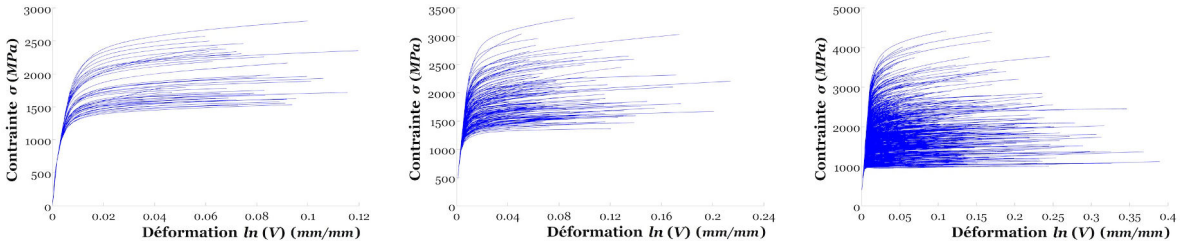


Figure 5.22 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à l'échelle *macro* du VER selon la formulation du modèle multi-échelle pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé

À l'échelle locale, le niveau d'hétérogénéité du comportement mécanique est assez proche de celui de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.4). Néanmoins, il est clair que des perturbations de celui-ci sont bien présentes, et ce, pour l'ensemble des échelles considérées (Figure 5.23).



(a) Échelle des anciens grains austénitiques

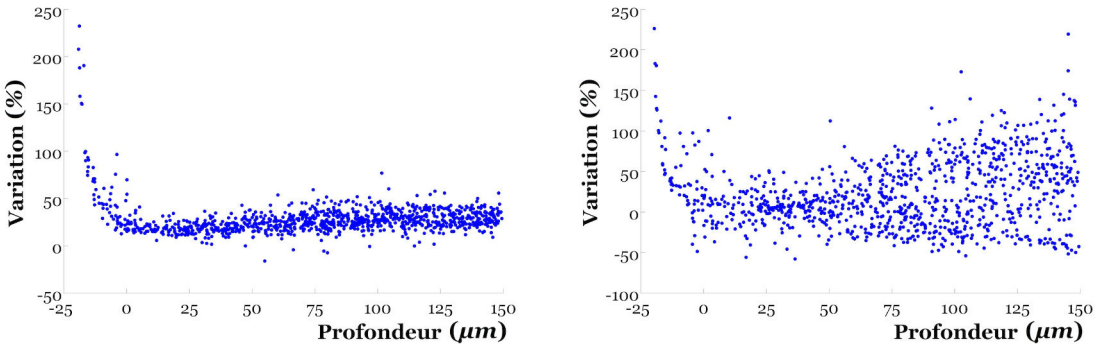
(b) Échelle des paquets

(c) Échelle des lattes de martensite

Figure 5.23 – Courbes de comportement monotone uniaxiale à diverses échelles pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé

Afin de mettre en évidence l'impact du profil de surface sur de telles perturbations issues des formulations du modèle multi-échelle, il convient de tracer les variations des contraintes et déformations logarithmiques uniaxiales selon la profondeur des lattes de martensite (Fi-

gure 5.24). De par cette approche, il apparaît que dans la partie inférieure de la microstructure virtuelle, les variations des déformations sont bien conséquentes (Figure 5.24b), ce qui est essentiellement lié à l'apport d'un écrouissage en surface (cf. §5.4.3). Cependant, si l'ensemble des variations tend à diminuer pour des profondeurs de quelques *microns*, celles-ci présentent un saut bien marqué pour des coordonnées selon la direction Z positives, *i.e.* des « profondeurs négatives ». Il est clair que, de par ces constatations, la prise en compte des rotations des réseaux cristallins engendre une sollicitation des couches superficielles ayant subi peu de chargement dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP).

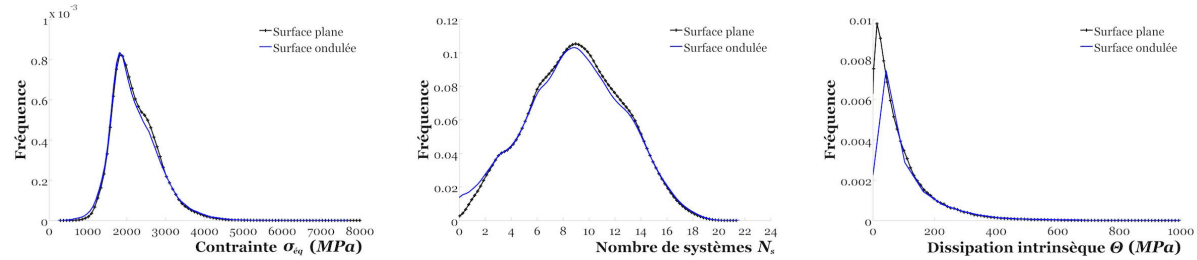


(a) Contrainte σ_{11} (b) Déformation $\ln(V_{11})$

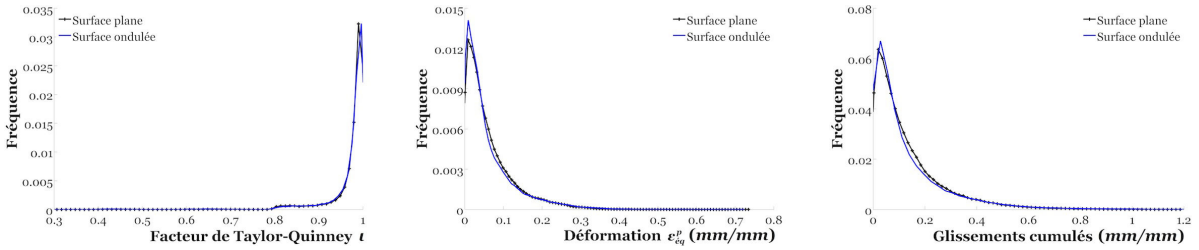
Figure 5.24 – Variations des contraintes et des déformations logarithmiques uniaxiales par rapport à l'hypothèse des petites perturbations (HPP) selon la profondeur à l'échelle des lattes de martensite pour la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé

Analyse des distributions des variables. L'apport d'un profil de surface ondulé perturbe les distributions des contraintes équivalentes $\sigma_{éq}$ (Figure 5.25a) et de N_s (Figure 5.25b). De manière globale, celles-ci présentent des diminutions assez faibles vis-à-vis à la microstructure virtuelle de surface plane. Il est clair qu'à l'image de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.4), certaines zones en surface obéissent à un comportement linéaire. Par ailleurs, on note également que les variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ ne présentent guère de variations significatives (Figure 5.25).

Les distributions spatiales des variables considérées (Figure 5.26) montrent clairement qu'il n'ya as d'écoulement non linéaire dans les lattes de martensite situées dans les sommets des reliefs de la surface libre. Les contraintes équivalentes au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (Figure 5.26a) ont bien tendance à s'annuler en ces zones, et ce, a posteriori d'une nette augmentation dans les couches superficielles liée au gradient de cissions critiques τ_0^s. Cependant, bien que le nombre de systèmes de glissement N_s (Figure 5.26b) tende à s'annuler pour des profondeurs de quelques *microns*, les variables rattachées à la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ (Figure 5.26) présentent des valeurs assez conséquentes pour certaines lattes de martensite en comparaison des résultats obtenus dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.4). Les distributions spatiales actuelles confirment bien les constatations précédentes concernant le fait que la théorie des transformations finies conduit à une sollicitation accrue de certaines lattes martensitiques dans cette zone.

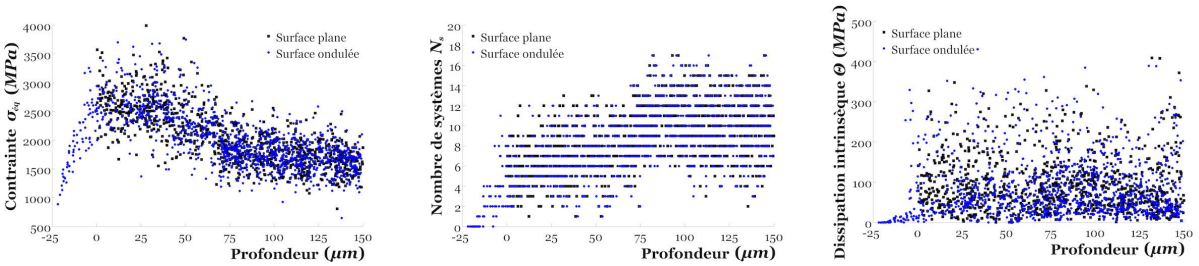


(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

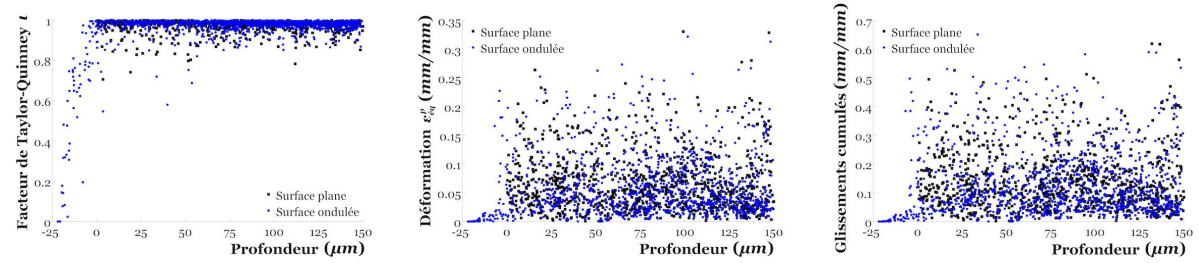


(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 5.25 – Distributions statistiques des variables considérées à l'issue du chargement



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ (b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s (c) Dissipation intrinsèque Θ

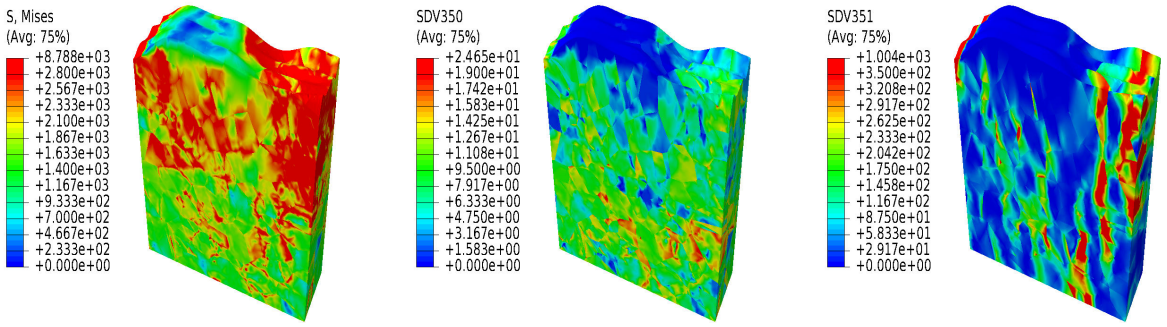


(d) Facteur de Taylor-Quinney ι (e) Déformation inélastique au sens de von Mises $\varepsilon^{in}_{éq}$ (f) Glissements cumulés des systèmes $\int_0^t \sum_{s=1}^{N_s} |\dot{\gamma}^s| \, dt$

Figure 5.26 – Distributions spatiales selon la profondeur des diverses variables étudiées à l'issue du chargement

Analyse des cartographies des isovaleurs. Les cartographies des diverses variables considérées (Figure 5.27) mettent bien en évidence que l'utilisation de la théorie des trans-

formations finies a pour conséquence une perturbation des champs mécaniques locaux en surface. À l'inverse de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) (cf. §4.5.1.4), certains sommets du relief de la surface libre se retrouvent ainsi sollicités. Cet aspect vient du fait que la prise en compte des rotations des réseaux cristallins produisent une diminution de l'intensité des localisations autour des joints de lattes de martensite. Les champs mécaniques locaux ont ainsi tendance à être propagés davantage, ce qui fait que l'effet de surface est atténué.



(a) Contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$

(b) Nombre de systèmes de glissements activés N_s

(c) Dissipation intrinsèque Θ

Figure 5.27 – Cartographies des isovaleurs des variables étudiées au sein de la microstructure virtuelle ayant un profil de surface ondulé à l'issue du chargement

En résumé...

L'extension des modèles multi-échelles de Méric-Cailletud [20, 21] et de sa version modifiée vers les transformations finies est effectuée dans le cadre d'une description spatiale basée sur la notion de dérivée objective du tenseur des contraintes considéré. Si la dérivée objective de Jaumann-Zaremba est obtenue directement de celle de Truesdell, ou éventuellement d'Oldroyd, en négligeant les termes liés aux déformations pures, cette dernière est bien équivalente au formalisme Lagrangien des transformations finies. Par conséquent, associée au modèle de Méric-Cailletaud, celle-ci a été privilégiée pour l'investigation numérique des champs mécaniques locaux en surface de l'acier AISI H11.

Dans ce contexte, les effets des divers paramètres considérés sont globalement identiques à ceux de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Cependant, la présente investigation numérique a permis de mettre en évidence que l'utilisation de la théorie des transformations finies a pour effet de relâcher les champs mécaniques locaux. Les schémas de localisation autour des joints de lattes martensitiques sont bien souvent plus atténués que dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). De plus, la présente formulation renforce la compétition entre l'effet de surface et les orientations cristallographiques, et ce, en raison de la prise en compte des rotations des réseaux cristallins.

Conclusions et perspectives

"Galilée a été le premier scientifique moderne, qui réalisa l'importance de l'observation ; et Einstein était le plus grand, mais ce qui est rassurant, c'est qu'il a eu quand même un certain nombre de "d'angles morts" (blind spots), comme la mécanique quantique et l'effondrement gravitationnel."

Stephen Hawking

Conclusions générales

L'industrie de la forge et de la fonderie se confronte aujourd'hui à de fortes concurrences en matière de performances des outillages de mise en forme. Dans un tel contexte concurrentiel où les enjeux socio-économiques sont majeurs, les acteurs de cette industrie ont bien pris conscience de l'intérêt fondamental de la recherche et de l'innovation. Celui-ci s'attache à un challenge technico-économique mais aussi à une politique de développement durable, et ce, par le biais d'une optimisation des performances des outillages de mise en forme.

Le travail mené dans cette thèse s'inscrit dans cette stratégie d'innovation. Il contribue à l'optimisation des performances mécaniques des outillages en acier AISI H11 via une approche multi-échelles. Il s'attache, en outre, à une dialectique de type investigation expérimentale fortement complétée par un traitement numérique.

Investigation expérimentale

L'investigation expérimentale comporte trois points fondamentaux, à savoir la génération et la caractérisation de surfaces caractéristiques du procédé de mise en œuvre des outillages de mise en forme d'une part, l'investigation des champs mécaniques locaux d'autre part et l'identification d'un volume élémentaire représentatif (VER).

Surface : génération et caractérisation. En vue d'une appréhension du comportement en service des outillages de mise en forme en acier AISI H11, des surfaces équivalentes à celles issues du procédé de mise en œuvre de ces pièces mécaniques sont dans un premier temps générées par le biais d'un procédé expérimental à l'échelle du laboratoire. Les examens micrographiques menées au MEB présentent bien une morphologie des lattes martensitiques à caractère anisotrope dans les couches superficielles. Cet aspect est équivalent à des études

antérieures, notamment celle de Barrau [3]. Cependant, le procédé utilisé dans le présent travail offre la possibilité de générer des surfaces avec un gradient de la structure interne dans les couches superficielles.

Le caractère anisotrope est également présent dans les orientations cristallographiques. Mis en évidence par le biais d'analyses EBSD, celui-ci se caractérise surtout par des orientations préférentielles des plans {1 1 1} et, éventuellement, {1 0 0} (à moindre fréquence) selon l'axe de sollicitation. Les essais de nanoindentation ont permis de constater une augmentation de la dureté dans les couches superficielles, *i.e.* de l'écrouissage interne. Par ailleurs, un profil de surface de type ondulé, conséquence du procédé de génération de surface, a été mis en évidence par des mesures d'altimétrie.

Investigation des champs mécaniques locaux. Si les essais mécaniques in-situ menées dans ce travail ont permis de mettre en évidence quelques mécanismes à l'échelle globale, ceux-ci ont également permis une appréhension de certains phénomènes élémentaires liés aux schémas de localisation des champs de déformation à l'échelle locale. Les essais mécaniques in-situ ont été effectués avec la technique de corrélation d'images numériques (DIC) dans le cadre de deux types de chargements uniaxiaux, *i.e.* monotones quasi-statiques et cycliques. Ils ont fait apparaître des schémas de localisation assez complexes, et ce, à diverses échelles. Ces schémas consistent essentiellement en réseaux de bandes de localisation de $\pm 45^{\circ}$ mais aussi ceux qui s'articulent autour des anciens joints de grains austénitiques, voire éventuellement les joints de lattes de martensite. Au niveau des couches superficielles, les champs de déformation ont tendance à se localiser dans les anciens joints de grains austénitiques déformés selon la direction de sollicitation. Cependant, aucune homogénéisation marquée de ces champs n'est constatée dans les couches superficielles extrêmes. Il faut toutefois noter que la résolution des images numériques reste assez médiocre dans ces zones.

Par ailleurs, certains phénomènes tels que la micro-plasticité ont été bien mis en évidence, et ce, que ce soit pour les chargements monotones quasi-statiques ou cycliques de type traction-traction. L'effet du niveau de sollicitation a également fait l'objet d'une investigation. Si les schémas de localisation des champs de déformations résiduelles aux sommets des boucles d'hystérésis sont quasiment identiques à ceux du chargement monotone, l'intensité de ces schémas s'attache au niveau de sollicitation. Ces derniers ont tendance à augmenter selon le niveau de sollicitation et seules les schémas de localisation de déformations non linéaires persistent à l'issue d'une baisse du chargement imposé.

Identification d'un volume élémentaire représentatif (VER). Outre l'investigation des champs de déformation locaux, les essais mécaniques in-situ ont été utilisés pour identifier un volume élémentaire représentatif (VER) de l'acier AISI H11. L'approche expérimentale menée consiste à optimiser au mieux la zone de corrélation permettant une reproduction du comportement global caractérisé par des mesures données par l'extensomètre. Bien que des essais supplémentaires soient à envisager voire à valider par des approches statistiques, la présente démarche a permis de fournir une approximation pertinente de la taille du VER. Celle-ci est évaluée par une zone de $150 \times 150\ \mu m^2$ dans le cadre du comportement non linéaire.

Traitement numérique

À l'issue d'une revue assez extensive sur les approches multi-échelles, l'intérêt s'est essentiellement porté aux équations constitutives phénoménologiques du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21]. Celles-ci ont été développées dans le code calcul par éléments finis (EF) Abaqus/Standard en vue d'une investigation des champs mécaniques locaux complets dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) mais également dans le contexte des transformations finies.

Pré-traitement de l'investigation numérique. Les équations constitutives du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] ont été implantées dans le code calcul par éléments finis (EF) Abaqus/Standard en s'appuyant sur un schéma d'intégration numérique semi-implicite. À l'échelle locale, la résolution de celles-ci utilise la méthode-θ de trapèze généralisée. Elle a été menée par une méthode de résolution directe dite « rate tangent modulus » [190, 191] au préalable d'une procédure itérative de type Newton-Raphson, tandis que la résolution des équations d'équilibre global est effectuée par une approche implicite. La validation de cet algorithme a été réalisée par confrontation des résultats obtenus avec ceux données par l'algorithme de la librairie Z-MAT du code Z-Set/Zébulon. Par la même occasion, une formulation modifiée, *i.e.* multiplicative, du modèle de Méric-Cailletaud a été également introduite et utilise le même algorithme d'intégration numérique. La particularité de cette version est qu'elle ne considère pas de surface d'écoulement.

La procédure d'identification des paramètres de l'acier AISI H11 a été menée uniquement pour le modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] à partir de données à l'échelle *macro*. Celle-ci a été effectuée par le biais de modèles de transition d'échelles en champs moyens, à savoir le modèle en β de Cailletaud-Pilvin [223] et le modèle de Berveiller-Zaoui [222]. La procédure d'identification s'est également efforcée d'attribuer un sens physique à l'ensemble des paramètres considérés, et plus particulièrement à la matrice d'interaction $[h]$.

Le traitement numérique des champs mécaniques locaux complets en surface requiert en outre une génération de microstructures virtuelles. Cette opération a été effectuée par tesselation de Voronoï adaptée à la stéréologie des structures martensitiques. Elle tient compte des relations d'orientations de type KS entre les grains austénitiques parents et les lattes de martensite, mais aussi de la morphologie de ces dernières dans les couches superficielles.

Investigation numérique dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Dans une première approche, le modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] a été formulé dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Les sollicitations traitées concernent, un chargement monotone quasi-statique et un chargement cyclique de type traction-traction. Cette investigation numérique, qui vient en complément de l'approche expérimentale pour une appréhension des phénomènes élémentaires de champs mécaniques locaux, s'est articulée autour de paramètres stéréologiques issus de la caractérisation expérimentale. Ces paramètres considèrent la morphologie des lattes de martensite dans les couches superficielles, les orientations cristallographiques, l'écrouissage interne mais aussi le profil de surface. Les analyses des résultats numériques ont été effectués par le traitement

des courbes de comportement à diverses échelles [9], des distributions statistiques et spatiales d'une certain nombre de variables étudiés, mais encore des cartographies des isovaleurs.

Toutes ces analyses permettent une meilleure appréhension du comportement local en surface de l'acier AISI H11. Celles-ci s'intéressent essentiellement aux effets des paramètres stéréologiques considérés. La simulation numérique du caractère hétérogène et anisotrope du comportement local a été ainsi effectuée et mise en évidence les divers schémas de localisation de déformation observées lors de l'investigation expérimentale. Dans le cadre du traitement numérique, ces schémas ont été complétés par ceux d'autres variables, entre autres la contrainte équivalente au sens de von Mises $\sigma_{éq}$ et le nombre de systèmes de glissement activé N_s, ce qui permet une compréhension des phénomènes élémentaires liés à la localisation. Il a été en outre constaté que des reliefs de la surface libre sont engendrés en raison de l'hétérogénéité des champs mécaniques locaux, et ce, pour tout type de chargement.

L'ensemble des aspects est bien perturbé selon le paramètre stéréologique considéré. Des effets de surface libre et d'interaction ont été souvent présents par l'apport de ces paramètres, notamment entre lattes de martensite voisines, voire éventuellement entre les couches superficielles et la partie inférieure de la microstructure virtuelle. Dans ce même contexte, il a été également constaté que des compétitions entre certains paramètres stéréologiques a souvent lieu dans la réponse mécanique de l'acier à l'échelle locale, et ce, que ce soit pour le chargement monotone quasi-statique ou cyclique.

Extension vers les transformations finies. L'investigation numérique ci-dessus a été étendue, dans une seconde approche, aux transformations finies. La formulation des équations constitutives de Méric-Cailletaud [20, 21] et de sa version modifiée a été effectuée dans le cadre d'une description spatiale. Dans ce contexte, l'intérêt s'est porté aux dérivée objectives de Jaumann-Zaremba et celle de Truesdell (ou éventuellement d'Oldroyd). Du fait de son équivalence à une description matérielle, la formalisation de Truesdell a été utilisée pour l'investigation numérique des champs mécaniques locaux. De par cette approche, bon nombre de constatations qualitatives similaires au cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) a été mise en évidence. Cependant, en dépit de ces similarités, la confrontation quantitative entre les deux approches a permis de constater que la prise en compte des rotations entraîne à des phénomènes de « relaxation » des champs mécaniques locaux, et plus particulièrement dans les couches superficielles.

Perspectives

La prise en compte accrue des phénomènes physiques élémentaires dans le domaine de la mécanique des matériaux hétérogènes est, depuis quelques années, en pleine évolution. Compte tenu de l'avènement d'outils numériques et de techniques expérimentales assez avancés, certaines perspectives peuvent se dégager dans le domaine de la mécanique des matériaux hétérogènes, et plus particulièrement dans le cadre de la continuité de ce travail.

9. À 'exception du chargement cyclique.

Approches expérimentales multi-échelles

Les approches expérimentales ont souvent été le pilier de l'investigation du comportement hétérogène des structures métalliques et phénomènes physiques élémentaires associées. L'avènement de la puissance des ordinateurs a consolidé cette idée par le déploiement de nouvelles techniques, comme l'EBSD. Cependant, celle-ci n'a guère été entièrement exploitée dans le cadre de ce travail, notamment en raison de la l'architecture complexe de la microstructure de l'acier AISI H11, mais surtout en raison des contraintes géométriques liées aux essais mécaniques in-situ. Il est évident qu'une démarche plus appropriée pour l'analyse des champs mécaniques locaux dans l'acier AISI H11 consisterait à mener de tels essais in-situ sous MEB. Il serait ainsi plus pertinent d'associer les champs de déformation aux orientations cristallographiques individuelles des lattes de martensite.

Si les essais mécaniques in-situ avec la corrélation d'images numériques (DIC), voire éventuellement l'EBSD, celles-ci se destinent surtout à des mesures surfaciques. Les approches volumiques sont essentiellement restreintes au champs moyens pour le moment. L'extension de celles-ci aux champs complets n'est guère évidente mais leur développement pourrait donner de bons espoirs...

Modélisation multi-physique et multi-échelles

Dans le contexte de la modélisation multi-échelles, il est évident qu'une prédiction pertinente des champs mécaniques locaux requiert une reconstruction de microstructures réelles. Si diverses techniques mathématiques permettent d'effectuer une telle opération, celle-ci n'a pas été considérée dans ce travail, et ce, en raison de l'architecture complexe des structures martensitiques. À noter que la reconstruction de microstructures réelles s'est souvent limitée à des structures internes plus ou moins « simples ». En vue d'une dialectique bien concrète entre les approches expérimentales et le traitement numériques, il est nécessaire d'investir dans une telle stratégie dans le cadre des structures martensitiques.

Par ailleurs, comme évoqué ci-dessus, la prise en compte des phénomènes physiques élémentaires est en pleine évolution depuis quelques temps. Cet aspect consiste en leur incorporation dans les modèles mathématiques décrivant les systèmes complexes. Si dans le cadre de ce travail, seul l'écoulement non linéaire donné par l'activation d'un certain nombre de systèmes de glissements est considéré, d'autres phénomènes élémentaires peuvent éventuellement être pris en compte, notamment :

- le maclage,
- les transformations de phase,
- les longueurs internes,
- le transfert thermique,
- l'endommagement...

Bien que la liste soit encore exhaustive, les développements effectués dans ce travail s'orientent surtout vers une incorporation du transfert thermique. Pour rappel, l'algorithme utilisé a permis le calcul de la dissipation intrinsèque. De par une telle variable, il est bien aisé d'avoir une estimation de la variation de température au sein de la structure interne. L'extension du modèle de Méric-Cailletaud [20, 21] ou éventuellement de sa version

modifiée aux sollicitations anisothermes peut être effectué en incorporant, par exemple, la température en tant que paramètre dans les coefficients liés à la viscosité.

En outre, diverses approches pour incorporer l'endommagement dans les approches multi-échelles peuvent être considérées. Dans un tel contexte, on pourrait effectivement s'appuyer sur le modèle « DOS » (« Damage Opening Sliding ») développé par Musienko [248] ou éventuellement le modèle de Boudifa-Saanouni-Chaboche « BSC » [325]. Quel que soit le mode d'endommagement considéré, il convient d'y mettre un obstacle à l'échelle locale... ou pas... *pour un autre challenge...*

Références

[1] M. Fivel et S. Forest : Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du monocristal. *Techniques de l'ingénieur*, 2004.

[2] K. Lange, L. Cser, M. Geiger et J.A.G. Kals : Tool life and tool quality in bulk metal forming. *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, 41:667 – 675, 1992.

[3] O. Barrau : *Etude du frottement et de l'usure d'acier à outils de travail à chaud*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2004.

[4] J.R.C. Guimaraes et R.P. Rios : Quantitative interpretation of martensite microstructure. *Materials Research*, 14(1):97 – 101, 2011.

[5] T. Maki : *Phase transformations in steels : diffusionless transformations, high strength steels, modelling and advanced analytical techniques*, chapitre Morphology and substructure of martensite in steels. Woodhead Publishing, 2012.

[6] T. Maki, K. Tsuzaki et I. Tamura : The morphology of microstructure composed of lath martensite in steels. *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, pages 207 – 214, 1980.

[7] M.X. Zhang et P.M. Kelly : Crystallographic features of phase transformations in solids. *Progress in Materials Science*, 54(8):1101 – 1170, 2009.

[8] S. Morito, X. Huang, T. Furuhara, T. Maki et N. Hansen : The morphology and crystallography of lath martensite in alloy steels. *Acta Materialia*, 54(19):5323 – 5331, 2006.

[9] E.C. Bain : The nature of martensite. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, 70:25 – 35, 1924.

[10] V. Velay : *Modélisation du comportement cyclique et de la durée de vie d'aciers à outils martensitiques*. Thèse de doctorat,
'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2003.

[11] Tribology Laboratory at Lehigh University : The Tribology Laboratory at Lehigh University.

[12] M.P. Miller, J.S. Park, P.R. Dawson et T.S. Han : Measuring and modeling distributions of stress state in deforming polycrystals. *Acta Materialia*, 56(15):3927 – 3939, 2008.

[13] M. Langerholc, J. Slavič et M. Boltežar : Absolute nodal coordinates in digital image correlation. *Experimental Mechanics*, 53(5):807 – 818, 2013.

[14] M. Bornert et F. Hild : Mesure des champs cinématiques par corrélation d'images numériques. *In* M.A. Baker, éditeur : *Atelier photomécanique*, Saint-Étienne, 2004.

[15] M. Bornert, T. Bretheau et P. Gilormini : *Homogénéisation en mécanique des matériaux, Tome 2 : Comportements non linéaires et problèmes ouverts (Traité MIM, série alliages métalliques)*. Hermes Science Publications, 2000.

[16] U.F. Kocks, C.N. Tomé et H.-R. Wenk : *Texture and Anisotropy : Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties*. Cambridge University Press, 2000.

[17] R.D. McGinty et D.L. McDowell : A semi-implicit integration scheme for rate independent finite crystal plasticity. *International Journal of Plasticity*, 22(6):996 – 1025, 2006.

[18] F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D. D. Tjahjanto, T. R. Bieler et D. Raabe : Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling : Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 58(4):1152 – 1211, 2010.

[19] R. Quey : *Suivi de microtextures dans l'aluminium en grande déformation à chaud*. Thèse de doctorat, 'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne, 2009.

[20] L. Méric, , P. Poubanne et G. Cailletaud : Single crystal modeling for structural calculations : Part 1-model presentation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113(1):162 – 170, 1991.

[21] L. Méric et G. Cailletaud : Single crystal modeling for structural calculations : Part 2-finite element implementation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113(1):171 – 182, 1991.

[22] F. Abraham : The embedded-atom method : a review theory and applications. *Materials Science Report*, 2002.

[23] Les fondeurs de France : Rapport d'activité 2011/2012. Rapport technique, Association Française de Forge, 2012.

[24] C. Bournicon : Sollicitations et modes d'endommagememt des outillages de forge à chaud : Stresses and damage modes in forging tools. *Traitement thermique*, (246):70 – 77, 1991.

[25] M. Colomb : *Matériaux métalliques : propriétés, mise en forme et applications industrielles des métaux et alliages*. Dunod, 2^{e} édition, 2012.

[26] A. Medvedeva, J. Bergsträm, S. Gunnarsson et Andersson J. : High-temperature properties and microstrural stability of hot-work tool steels. *Materials Science and Engineering : A*, 523(1-2):39 – 46, 2009.

[27] P. Michaud, D. Delagnes, P. Lamesle, M.H. Mathon et C. Levaillant : The effect of the addition of alloying elements on carbide precipitation and mechanical properties in 5% chromium martensitic steels. *Acta Materialia*, 55(14):4877 – 4889, 2007.

[28] C. Lerchbacher, S. Zinner et H. Leitner : Atom probe study of the carbon distribution in a hardened martensitic hot-work tool steel X38CrMoV5-1. *Micron*, 43(7):818 – 826, 2012.

[29] R.C. Thomson : Characterization of carbides in steels using atom probe field-ion microscopy. *Materials Characterization*, 44(1 - 2):219 – 233, 2000.

[30] P.C. Sharma : *A textbook of production technology : manufacturing processes*. S. Chand, 2007.

[31] F. Cardarelli : *Materials handbook : a concise desktop reference*. Springer, 2008.

[32] C. Scandian, C. Boher, J.D.B. De Mello et F. Rézaï-Aria : Effect of molybdenum and chromium contents in sliding wear of high-chromium white cast iron : the relationship between microstructure and wear. *Wear*, 267(1 - 4):401 – 408, 2009.

[33] S. Wang, K. Chen, X. Cui, Q. Jiang et B. Hong : Effect of alloying elements on thermal wear of cast hot-forging die steels. *Journal of Iron and Steel Research, International*, 13(5):53 – 59, 2006.

[34] D. Delagnes, P. Lamesle, M.H. Mathon, N. Mebarki et C. Levaillant : Influence of silicon content on the precipitation of secondary carbides and fatigue properties of a 5%Cr tempered martensitic steel. *Materials Science and Engineering : A*, 394(1 - 2):435 – 444, 2005.

[35] R. Lévêque : Traitements thermiques dans la masse des aciers à outils. 2013.

[36] W.H. Zhou, X.L. Wang, P.K.C. Venkatsurya, H. Guo, C.J. Shang et R.D.K. Misra : Structure-mechanical property relationship in a high strength low carbon alloy steel processed by two-step intercritical annealing and intercritical tempering. *Materials Science and Engineering : A*, 607:569 – 577, 2014.

[37] V. Leskovšek, B. Šuštaršič et G. Jutriša : The influence of austenitizing and tempering temperature on the hardness and fracture toughness of hot-worked H11 tool steel. *Journal of Materials Processing Technology*, 178:328 – 334, 2006.

[38] I. Souki, D. Delagnes et P. Lours : Influence of heat treatment on the fracture toughness and crack propagation in 5% Cr martensitic steel. *Procedia Engineering*, 10:631 – 637, 2011.

[39] J.E. Krzanowski : Electron microscopy observations of precipitation during tempering of vasco X-2M steel and its relation to impact toughness. *Materials Research Society*, 62:273 – 280, 1985.

[40] D.R.H. Jones et M.F. Ashby : *Engineering materials 2 : an introduction to microstructures, processing and design*. Butterworth-Heinemann, 2005.

[41] Z. Nishiyama : *Martensitic transformation*. Academic Press, INC, 1978.

[42] P.M. Kelly : *Phase transformations in steels : diffusionless transformations, high strength steels, modelling and advanced analytical techniques*, chapitre Crystallography of martensite transfromations in steels. Woodhead Publishing, 2012.

[43] JG.V. Kurdjumov : Phenomena occurring in the quenching and tempering of steels. *Institute of Materials, 1 Carlton House Terrace, London, SW 1 Y 5 DB, UK*, pages 117 – 162, 2001.

[44] S. Morito, H. Tanaka, R. Konishi, T. Furuhara et T. Maki : The morphology and crystallography of lath martensite in Fe-C alloys. *Acta Materialia*, 51(6):1789 – 1799, 2003.

[45] M. Yaso, S. Morito, T. Ohba et K. Kubota : Microstructure of martensite in Fe-C-Cr steel. *Materials Science and Engineering : A*, 481 - 482(25):770 – 773, 2008.

[46] N. Mebarki, D. Delagnes, P. Lamesle, F. Delmas et C. Levaillant : Relationship between microstructure and mechanical properties of a 5% Cr tempered martensitic tool steel. *Materials Science and Engineering : A*, 387 - 389(15):171 – 175, 2004.

[47] B.P.J. Sandvik et C.M. Wayman : Crystallography and substructure of lath martensite formed in carbon steels. *Metallography*, 16(2):199 – 227, 1983.

[48] J.W. Christian : *The theory of transformations in metals and alloys*. Elsevier Science Ltd, Oxford, 3$^{\text{ème}}$ édition, 2002.

[49] G. Kurdjumov et G. Sachs : Über den Mechanismus der Stahlhartung. *Zeitschrift für Physique*, 74:325 – 343, 1930.

[50] Z. Nishiyama : X-ray investigation on the mechanism of the transformation from facecentered cubic lattice to body-centered cubic lattice. *Science Reports of the Research Institutes, Tohoku University*, 23:637 – 664, 1934.

[51] A.B. Greninger et A.R. Troiano : The mechanism of martensite formation. *Metallurgical and Materials Transactions*, 185:590 – 598, 1949.

[52] W. Pitsch : Der Orientierungszusammenhang zwischen Zementit und Austenit. *Acta Metallurgica*, 10(9):897 – 900, 1962.

[53] A.F. Gourgues-Lorenzon : Application of electron backscatter diffraction to the study of phase transformations. *International Materials Reviews*, 52(2):65 – 128, 2007.

[54] S. Morito, Y. Adachi et T. Ohba : Morphology and crystallography of sub-blocks in ultra-low carbon lath martensite steel. *Materials Transactions*, pages 1919 – 1923, 2009.

[55] H. Beladi, G.S. Rohrer, A.D. Rollett, V. Tari et P.D. Hodgson : The distribution of intervariant crystallographic planes in a lath martensite using five macroscopic parameters. *Acta Materialia*, 63:86 – 98, 2014.

[56] P.P. Suikkanen, C. Cayron, A.J. DeArdo et L.P. Karjalainen : Crystallographic analysis of martensite in 0.2C-2.0Mn-1.5Si-0.6Cr steel using EBSD. *Journal of Materials Science and Technology*, 27(10):920 – 930, 2011.

[57] H. Réglé, N. Maruyama et N. Yoshinaga : Texture of multiphased steel sheets. *In* M.A. Baker, éditeur : *Advanced high strength sheet steels for automotive applications*, pages 239 – 246, Warrendale, PA, 2004. Association for Iron and Steel Technology.

[58] F. Bachmann, R. Hielscher et H. Schaeben : Grain detection from 2d and 3d EBSD data - specification of the MTEX algorithm. *Ultramicroscopy*, 111:1720 – 1733., 2011.

[59] A.J. Wilkinson et D.J. Dingley : Quantitative deformation studies using electron back scatter patterns. *Acta Metallurgica et Materialia*, 39(12):3047 – 3055, 1991.

[60] S.I. Wright et M.M. Nowell : EBSD Image quality mapping. *Microscopy and Microanalysis*, 12(01):72 – 84, 2006.

[61] C. Cayron, B. Artaud et L. Briottet : Reconstruction of parent grains from EBSD data. *Materials characterization*, 57(4 - 5):386 – 401, 2006.

[62] Z. Zhang : *Modélisation du comportement cyclique anisotherme d'un acier martensitique 55NiCrMoV7 avec prise en compte du vieillissement.* Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2002.

[63] D. Delagnes : *Comportement et tenue en fatigue isotherme d'aciers à outils Z 38 CDV 5 autour de la transition fatigue oligocylique-endurance.* Thèse de doctorat, 'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1998.

[64] G.I. Taylor et C.F. Elam : The distortion of iron crystals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 112(761):337 – 361, 1926.

[65] H. Gough : The behaviour of a single crystal of α-iron subjected to alternating torsional stresses. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 118(780):498 – 534, 1928.

[66] C.S. Barret, G. Ansel et R. F. Mehl : Slip, twinning and cleavage in iron and silicon ferrite. *Transactions : American Society for Metals*, 25:702 – 733, 1937.

[67] E. Schmid et W. Boas : *Kristallplastizität.* Springer, 1935.

[68] J. Pelleg : *Mechanical Properties of Materials.* Springer, 2012.

[69] B. Fournier, M. Sauzay, F. Barcelo, E. Rauch, A. Renault, T. Cozzika, L. Dupuy et A. Pineau : Creep-fatigue interactions in a 9% Cr-1% Mo martensitic steel : Part II. microstructural evolutions. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 40(2):330 – 341, 2009.

[70] B. Fournier, M. Sauzay, F. Barcelo, E. Rauch, A. Renault, T. Cozzika, L. Dupuy et A. Pineau : Creep-fatigue interactions in a 9-12% martensitic steel : Part II. microstructural evolutions. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 40(2):330 – 341, 2009.

[71] J.P. Mathieu, K. Inal, S. Berveiller et O. Diard : A micromechanical interpretation of the temperature dependence of Beremin model parameters for french RVP steel. *Journal of Nuclear Materials*, 406, 2010.

[72] M. Kimura, K. Yamaguchi, M. Hayakawa, K. Kobayashi et K. Kanazawa : Microstructures of creep-fatigued 9-12% Cr ferritic heat-resisting steels. *International Journal of Fatigue*, 28:300 – 308, 2006.

[73] B. Fournier, M. Salvi, C. Caës, J. Malaplate, F. Dalle, M. Sauzay, Y. De Carlan et A. Pineau : High temperature mechanical strength and microstructural stability of advanced 9-12% Cr steels and ODS steels. *In International conference on fracture*, Ottawa, Canada, 2009.

[74] A. Kostka, K. Tak, R. Hellmig, Y. Estrin et G. Eggeler : On the contribution of carbides and micrograin boundaries to the creep strength of tempered martensite ferritic steels. *Acta Materialia*, 55, 2007.

[75] G.T. Beilby : *Aggregation and Flow of Solids*. Cambridge Scholars Publishing, 2009.

[76] M. Cheikh et A. Fermy : Appareil polyvalent de recherche des propriétés mécaniques d'une éprouvette, 2012.

[77] W.C. Oliver et G.M. Pharr : Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation : advances in understanding and refinements to methodology. *Journal of Materials Research*, 19(01):3 – 20, 2004.

[78] A. Le Pécheur : *Fatigue thermique d'un acier inoxydable austénitique : influence de l'état de surface par une approche multi-échelles*. Thèse de doctorat, 'Ecole Centrale Paris, 2008.

[79] A.D. Krawitz : *Introduction to diffraction in materials science and engineering*. Wiley, New York, 2001.

[80] J. Als-Nielsen et D. McMorrow : *Elements of modern X-ray physics*. Wiley, Hoboken, 2^{e} édition, 2011.

[81] H.F. Poulsen : *Three-dimensional X-ray diffraction microscopy. Mapping polycrystals and their dynamics*. Springer Tracts in Modern Physics, v. 205. Springer, 2004.

[82] P.R. Dawson, D.E. Boyce et R. Rogge : Issues in modeling heterogeneous deformations in polycrystalline metals using multiscale approaches. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 10(2), 2005.

[83] D.W. Brown, M.A.M. Bourke, C.N. Tomé, R. Varma, T.M. Holden et B. Clausen : A neutron diffraction and modeling study of uniaxial deformation in polycrystalline beryllium. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 34(7):1439 – 1449, 2003.

[84] B. Clausen et M.A.M. Bourke : Lattice plane response during tensile loading of an aluminum 2% magnesium alloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 32(3):691– 694, 2001.

[85] B. Clausen, T. Lorentzen, M.A.M. Bourke et M.R. Daymond : Lattice strain evolution during uniaxial tensile loading of stainless steel. *Materials Science and Engineering : A*, 259(1):17 – 24, 1999.

[86] M.R. Daymond, C.N. Tomé et M.A.M. Bourke : Measured and predicted intergranular strains in textured austenitic steel. *Acta Materialia*, 48(2):553 – 564, 2000.

[87] T. Marin, P.R. Dawson, M.A. Gharghouri et R.B. Rogge : Diffraction measurements of elastic strains in stainless steel subjected to in situ biaxial loading. *Acta Materialia*, 56(16): 4183 – 4199, 2008.

[88] S.L. Wong et P.R. Dawson : Evolution of the crystal stress distributions in face-centered cubic polycrystals subjected to cyclic loading. *Acta Materialia*, 59(18):6901 – 6916, 2011.

[89] S. Cheng, J. Xie, A.D. Stoica, X.L. Wang, J.A. Horton, D.W. Brown, H. Choo et P.K. Liaw : Cyclic deformation of nanocrystalline and ultrafine-grained nickel. *Acta Materialia*, 57(4):1272 – 1280, 2009.

[90] X.L. Wang, Y.D. Wang, A.D. Stoica, D.J. Horton, H. Tian, P.K. Liaw, H. Choo, J.W. Richardson et E. Maxey : Inter- and intragranular stresses in cyclically-deformed 316 stainless steel. *Materials Science and Engineering : A*, 399(1 - 2):114 – 119, 2005.

[91] T.S. Han et P.R. Dawson : Lattice strain partitioning in a two-phase alloy and its redistribution upon yielding. *Materials Science and Engineering : A*, 405(1 - 2):18 – 33, 2005.

[92] D. Mari, B. Clausen, M.A.M. Bourke et K. Buss : Measurement of residual thermal stress in WC-Co by neutron diffraction. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 27(2):282 – 287, 2009.

[93] C. Efstathiou, D.E. Boyce, J.-S. Park, U. Lienert, P.R. Dawson et M.P. Miller : A method for measuring single-crystal elastic moduli using high-energy x-ray diffraction and a crystal-based finite element model. *Acta Materialia*, 58(17):5806 – 5819, 2010.

[94] C.C. Aydiner, J.V. Bernier, B. Clausen, U. Lienert, C.N. Tomé et D.W. Brown : Evolution of stress in individual grains and twins in a magnesium alloy aggregate. *Physical Review B*, 80(2):024113, 2009.

[95] B. Clausen, C.N. Tomé, D.W. Brown et S.R. Agnew : Reorientation and stress relaxation due to twinning : Modeling and experimental characterization for mg. *Acta Materialia*, 56(11):2456 – 2468, 2008.

[96] O. Muránsky, M.R. Barnett, D.G. Carr, S.C. Vogel et E.C. Oliver : Investigation of deformation twinning in a fine-grained and coarse-grained ZM20 mg alloy : Combined in situ neutron diffraction and acoustic emission. *Acta Materialia*, 58(5):1503 – 1517, 2010.

[97] L. Allais, M. Bornert, T. Bretheau et D. Caldemaison : Experimental characterization of the local strain field in a heterogeneous elastoplastic material. *Acta Metallurgica et Materialia*, 42(11):3865 – 3880, 1994.

[98] B.M. Schroeter et D.L. McDowell : Measurement of deformation fields in polycrystalline OFHC copper. *International Journal of Plasticity*, 19(9):1355 – 1376, 2003.

[99] C. Badulescu, M. Grédiac et J.D. Mathias : Investigation of the grid method for accurate in-plane strain measurement. *Measurement Science and Technology*, 20(9):095102, 2009.

[100] C. Gérard : *Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2008.

[101] F. Di Gioacchino et J.Q. Da Fonseca : Plastic strain mapping with sub-micron resolution using digital image correlation. *Experimental mechanics*, 53:743 – 754, 2013.

[102] H.A. Padilla, J. Lambros, A.J. Beaudoin et I.M. Robertson : Relating inhomogeneous deformation to local texture in zirconium through grain-scale digital image correlation strain mapping experiments. *International Journal of Solids and Structures*, 49(1):18 – 31, 2012.

[103] E. Héripré, M. Dexet, J. Crépin, L. Gélébart, A. Roos, M. Bornert et D. Caldemaison : Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials. *International Journal of Plasticity*, 23(9):1512 – 1539, 2007.

[104] C. Badulescu, M. Grédia, H. Haddadi, J.D. Mathias, X. Balandraud et H. S. Tran : Applying the grid method and infrared thermography to investigate plastic deformation in aluminium multicrystall. *Mechanics of Materials*, 43(1):36 – 53, 2011.

[105] C.C. Aydiner et M.A. Telemez : Multiscale deformation heterogeneity in twinning magnesium investigated with in situ image correlation. *International Journal of Plasticity*, 56:203 – 218, 2014.

[106] A. El Bartali, P. Evrard, V. Aubin, S. Herenú, I. Alvarez-Armas, A.F. Armas et S. Degallaix-Moreuil : Strain heterogeneities between phases in a duplex stainless steel. comparison between measures and simulation. *Procedia Engineering*, 2(1):2229 – 2237, 2010.

[107] J.C. Kuo, D. Chen, S.H. Tung et M. H. Shih : Prediction of the orientation spread in an aluminum bicrystal during plane strain compression using a DIC-based taylor model. *Computational Materials Science*, 42(4):564 – 569, 2008.

[108] H. Lim, J.D. Carroll, C.C. Battaile, T.E. Buchheit, B.L. Boyce et C.R. Weinberger : Grain-scale experimental validation of crystal plasticity finite element simulations of tantalum oligocrystals. *International Journal of Plasticity*, 60:1 – 18, 2014.

[109] S.H. Tung, M.H. Shih et J.C. Kuo : Application of digital image correlation for anisotropic plastic deformation during tension testing. *Optics and Lasers in Engineering*, 48(5):636 – 641, 2010.

[110] C. Rehrl, S. Kleber, T. Antretter et R. Pippan : A methodology to study crystal plasticity inside a compression test sample based on image correlation and EBSD. *Materials Characterization*, 62(8):793 – 800, 2011.

[111] J.D. Carroll, W.Z. Abuzaid, J. Lambros et H. Sehitoglu : On the interactions between strain accumulation, microstructure, and fatigue crack behavior. *International Journal of Fracture*, 180(2):223 – 241, 2013.

[112] J.D. Carroll, W. Abuzaid, J. Lambros et H. Sehitoglu : High resolution digital image correlation measurements of strain accumulation in fatigue crack growth. *International Journal of Fatigue*, 57:140 – 150, 2013.

[113] F. Latourte, N. Rupin, M. He, A. Parrot et S. Leclercq : Full field measurements used for assessing industrial issues-two examples. *Procedia IUTAM*, 4:92 – 105, 2012.

[114] L. Bodelot, E. Charkaluk, L. Sabatier et P. Dufrénoy : Experimental study of heterogeneities in strain and temperature fields at the microstructural level of polycrystalline metals through fully-coupled full-field measurements by digital image correlation and infrared thermography. *Mechanics of Materials*, 43(11):654 – 670, 2011.

[115] A. Saai, H. Louche, L. Tabourot et H.J. Chang : Experimental and numerical study of the thermo-mechanical behavior of al bi-crystal in tension using full field measurements and micromechanical modeling. *Mechanics of Materials*, 42(3):275 – 292, 2010.

[116] R. Seghir, J.F. Witz, L. Bodelot, E. Charkaluk et P. Dufrenoy : A thermomechanical analysis of the localization process at the microstructure scale of a 316L stainless steel. *Procedia Engineering*, 10:3596 – 3601, 2011.

[117] F. Eberl, S. Forest, G. Cailletaud, T. Wroblewski et J.L. Lebrun : Finite-element calculations of the lattice rotation field of a tensile-loaded nickel-based alloy multicrystal and comparison with topographical x-ray diffraction measurements. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 33(9):2825 – 2833, 2002.

[118] A. Bhattacharyya, E. El-Danaf, S.R. Kalidindi et R.D. Doherty : Evolution of grain-scale microstructure during large strain simple compression of polycrystalline aluminum with quasi-columnar grains : OIM measurements and numerical simulations. *International Journal of Plasticity*, 17(6):861 – 883, 2001.

[119] F. Delaire, J.L. Raphanel et C. Rey : Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension : experimental study and finite element simulations. *Acta Materialia*, 48(5):1075 – 1087, 2000.

[120] C. Rehrl, B. Völker, S. Kleber, T. Antretter et R. Pippan : Crystal orientation changes : A comparison between a crystal plasticity finite element study and experimental results. *Acta Materialia*, 60(5):2379 – 2386, 2012.

[121] P. Doumalin : *Microextensomètrie locale par corrélation d'images numériques : Application aux études micromécaniques par microscopie par balayage électronique*. Thèse de doctorat, École Polytechnique, 2000.

[122] P. Doumalin, M. Bornert et J. Crépin : Caractérisation de la répartition de la déformation dans les matériaux hétérogènes. *Mécanique et Industries*, 4(6):607 – 617, 2003.

[123] T. Kanit : *Notion de volume élémentaire représentatif pour les matériaux hétérogènes : Approche statistique et numérique*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2003.

[124] S. Torquato : *Random heterogeneous materials : Microstructure and macroscopic properties*. Springer-Verlag New York Inc., 2013.

[125] T.I. Zohdi et P. Wriggers : *An Introduction to Computational Micromechanics*. Springer, 2008.

[126] M. Bornert, T. Bretheau et P. Gilormini : Homogénéisation en mécanique des matériaux, tome 1 : matériaux aléatoires éastiques et milieux périodiques (traité mim, série alliages métalliques). *Hermes Science, Paris*, pages 252–pages, 2001.

[127] R. Moulart, R. Rotinat et F. Pierron : Full-field evaluation of the onset of microplasticity in a steel specimen. *Mechanics of Materials*, 41(11):1207 – 1222, 2009.

[128] R. Tresca : Sur i'écoulement des corps solids soumis à de fortes pression. *Comptes Rendus Academie des Sciences*, Rend 59:754 – 758, 1864.

[129] R. Von Mises : Mechanics of the ductile form changes of crystals. *Zeitschrift Für Angewandte Mathematik Und Mechanik*, 8:161 – 185, 1928.

[130] H. Hencky : Zur theorie plastischer deformationen und der hierdurch im material hervorgerufenen nachspannungen. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 4(4):323 – 334, 1924.

[131] D.C. Drucker : Relations of experiments to mathematical theories of plasticity. *Journal of Applied Mechanics*, 16:349 ? 357, 1949.

[132] D.C. Huber : Przyczynek do podstaw wytorymalosci. *Czasopismo Techniczne*, 22:34 – 81, 1904.

[133] R. Hill : A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic metals. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 193(1033): 281 – 297, mai 1948.

[134] R. Hill : Theoretical plasticity of textured aggregates. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 85(01):179 – 191, 1979.

[135] R. Hill : Constitutive modelling of orthotropic plasticity in sheet metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(3):405 – 417, 1990.

[136] R. Hill : A user-friendly theory of orthotropic plasticity in sheet metals. *International Journal of Mechanical Sciences*, 35(1):19 – 25, 1993.

[137] S.B. Lin et J.L. Ding : A modified form of hill's orientationdashdependent yield criterion for orthotropic sheet metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(11):1739 – 1764, 1996.

[138] A.V. Hershey : The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *Journal of Applied mechanics, Transactions of the ASME*, 21(3):236 – 240, 1954.

[139] F. Barlat et O. Richmond : Prediction of tricomponent plane stress yield surfaces and associated flow and failure behavior of strongly textured f.c.c. polycrystalline sheets. *Materials Science and Engineering*, 95:15 – 29, 1987.

[140] F. Barlat et K. Lian : Plastic behavior and stretchability of sheet metals. part I : A yield function for orthotropic sheets under plane stress conditions. *International Journal of Plasticity*, 5(1):51 – 66, 1989.

[141] F. Barlat, R.C. Becker, Y. Hayashida, Y. Maeda, M. Yanagawa, K. Chung, J.C. Brem, D.J. Lege, K. Matsui, S.J. Murtha et S. Hattori : Yielding description for solution strengthened aluminum alloys. *International Journal of Plasticity*, 13(4):385 – 401, 1997.

[142] H. Aretz et F. Barlat : General orthotropic yield functions based on linear stress deviator transformations. *AIP Conference Proceedings*, 712(1), 2004.

[143] H. Aretz et F. Barlat : New convex yield functions for orthotropic metal plasticity. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 51:97 – 111, mai 2013.

[144] A.P. Karafillis et M.C. Boyce : A general anisotropic yield criterion using bounds and a transformation weighting tensor. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(12): 1859 – 1886, 1993.

[145] D. Banabic, T. Balan et D.S. Comsa : A new yield criterion for orthotropic sheet metals under plane-stress conditions. *In Proceedings of the 7th Conference ?TPR2000 ?, Cluj Napoca, Romania*, pages 217 – 224, 2000.

[146] D. Banabic, T. Kuwabara, T. Balan, D.S. Comsa et D. Julean : Non-quadratic yield criterion for orthotropic sheet metals under plane-stress conditions. *International Journal of Mechanical Sciences*, 45(5):797 – 811, 2003.

[147] D.S. Comsa et D. Banabic : Numerical simulation of sheet metal forming processes using a new yield criterion. *Key Engineering Materials*, 344:833 – 840, 2007.

[148] J. Woodthorpe et R. Pearce : The anomalous behaviour of aluminium sheet under balanced biaxial tension. *International Journal of Mechanical Sciences*, 12(4):341 – 347, 1970.

[149] E. Schmid et W. Boas : *Kristallplastizität - Mit Besonderer Berücksichtigung der Metalle*.

[150] Q. Qin et J.L. Bassani : Non-schmid yield behavior in single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40(4):813 – 833, 1992.

[151] M. Dao et R.J. Asaro : Non-schmid effects and localized plastic flow in intermetallic alloys. *Materials Science and Engineering : A*, 170(1-2):143 – 160, 1993.

[152] M. Dao et R.J. Asaro : Localized deformation modes and non-schmid effects in crystalline solids. part i. critical conditions of localization. *Mechanics of Materials*, 23(2):71 – 102, 1996.

[153] M. Dao et R.J. Asaro : Localized deformation modes and non-schmid effects in crystalline solids. part II. deformation patterns. *Mechanics of Materials*, 23(2):103 – 132, 1996.

[154] D.L. McDowell : Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials. *Materials Science and Engineering : R : Reports*, 62(3):67 – 123, 2008.

[155] D.L. McDowell : A perspective on trends in multiscale plasticity. *International Journal of Plasticity*, 26(9):1280 – 1309, 2010.

[156] S.C. Soare : Plasticity and non-schmid effects. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Science*, 470(2161):20130440, 2014.

[157] M. Ostoja-Starzewski : Material spatial randomness : From statistical to representative volume element. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 21(2):112 – 132, 2006.

[158] V. Vitek, M. Mrovec et J.L. Bassani : Influence of non-glide stresses on plastic flow : from atomistic to continuum modeling. *Materials Science and Engineering : A*, 365(1-2):31 – 37, 2004.

[159] R. Gröger, V. Racherla, J.L. Bassani et V. Vitek : Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten : II. yield criterion for single crystals based on atomistic studies of glide of screw dislocations. *Acta Materialia*, 56(19):5412 – 5425, 2008.

[160] G.I. Taylor : Plastic strain in metals. *Journal of the Institute of Metals*, 62:307 – 324, 1938.

[161] P. Van Houtte, S. Li et O. Engler : Taylor-type homogenization methods for texture and anisotropy. *In* D. Raabe, F. Roters, F. Barlat et L.-Q. Chen, éditeurs : *Continuum Scale Simulation of Engineering Materials*, pages 459 – 472. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004.

[162] J.F.W. Bishop et R. Hill : A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses. *Philosophical Magazine Series 7*, 42(327):414 – 427, 1951.

[163] G.Y. Chin et W.L. Mammel : Generalization and equivalence of the minimum work (taylor) and maximum workd (bishop-hill) principles for cystal plasticity. *Trans Met Soc AIME*, 245(6):1211–1214, 1969.

[164] P. Van Houtte : On the equivalence of the relaxed taylor theory and the bishop-hill theory for partially constrained plastic deformation of crystals. *Materials Science and Engineering*, 55(1):69 – 77, 1982.

[165] M. Schmidt-Baldassari : Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(11-12):1261 – 1280, 2003.

[166] L. Anand et M. Kothari : A computational procedure for rate-independent crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(4):525 – 558, 1996.

[167] J. Schröder et C. Miehe : Aspects of computational rate-independent crystal plasticity. *Computational Materials Science*, 9(1 ? 2):168 – 176, 1997.

[168] J.C. Simo et T.J.R. Hughes : *Computational inelasticity*. Springer-Verlag, New-York, 1998.

[169] C. Miehe et J. Schröder : A comparative study of stress update algorithms for rate-independent and rate-dependent crystal plasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50(2):273 – 298, 2001.

[170] E.P. Busso et G. Cailletaud : On the selection of active slip systems in crystal plasticity. *International Journal of Plasticity*, 21(11):2212 – 2231, 2005.

[171]

[172] F. J. Harewood et P.E. McHugh : Investigation of finite element mesh independence in rate dependent materials. *Computational Materials Science*, 37(4):442–453, 2006.

[173] U.F. Kocks : Laws for work-hardening and low-temperature creep. *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME.*, 98 Ser H(1):76 – 85, 1976.

[174] H. Mecking et U.F. Kocks : Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metallurgica*, 29(11):1865 – 1875, novembre 1981.

[175] J.W. Dunlop, Y.J. M. Bréchet, L. Legras et Y. Estrin : Dislocation density-based modelling of plastic deformation of zircaloy-4. *Materials Science and Engineering : A*, 443(1 - 2):77 – 86, 2007.

[176] L. Tabourot, M. Fivel et E. Rauch : Generalised constitutive laws for f.c.c. single crystals. *Materials Science and Engineering : A*, 234 ?236:639 – 642, août 1997.

[177] P. Franciosi : The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metallurgica*, 33(9):1601 – 1612, 1985.

[178] Y. Li, V. Aubin, C. Rey et P. Bompard : Polycrystalline numerical simulation of variable amplitude loading effects on cyclic plasticity and microcrack initiation in austenitic steel 304l. 42:71 – 81, 2012.

[179] C.O. Frederick et P.J. Armstrong : A mathematical representation of the multiaxial bauschinger effect. *Materials at High Temperatures*, 24(1):1 – 26, 2007.

[180] J.-L. Chaboche : Description thermodynamique et phénoménologique de la viscoplasticité cyclique avec endommagement. Rapport technique 1978-3, ONERA, Châtillon, 1978.

[181] A. M. Cuitino et M. Ortiz : Computational modelling of single crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1(3):225 – 263, 1993.

[182] U. Essmann et M. Rapp : Slip in copper crystals following weak neutron bombardment. *Acta Metallurgica*, 21(9):1305 – 1317, 1973.

[183] B. Fournier, M. Sauzay et A. Pineau : Micromechanical model of the high temperature cyclic behavior of 9-12% Cr martensitic steels. *International Journal of Plasticity*, 27(11):1803 – 1816, 2011.

[184] M. Sauzay, H. Brillet, I. Monnet, M. Mottot, F. Barcelo, B. Fournier et A. Pineau : Cyclically induced softening due to low-angle boundary annihilation in a martensitic steel. *Materials Science and Engineering : A*, 400 ?401:241 – 244, 2005.

[185] Y. Aoyagi, T. Tsuru et T. Shimokawa : Crystal plasticity modeling and simulation considering the behavior of the dislocation source of ultrafine-grained metal. *International Journal of Plasticity*, 55:43 – 57, 2014.

[186] M. Ardeljan, I.J. Beyerlein et M. Knezevic : A dislocation density based crystal plasticity finite element model : Application to a two-phase polycrystalline HCP/BCC composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 66:16 – 31, mai 2014.

[187] M. Knezevic, B. Drach, M. Ardeljan et I.J. Beyerlein : Three dimensional predictions of grain scale plasticity and grain boundaries using crystal plasticity finite element models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 277:239 – 259, août 2014.

[188] R.J. Asaro : Crystal plasticity. *Journal of Applied Mechanics*, 50(4b):921 – 934, 1983.

[189] R.J. Asaro : Micromechanics of crystals and polycrystals. *In* John W. Hutchinson and Theodore Y. Wu, éditeur : *Advances in Applied Mechanics*, volume 23, pages 1 – 115. Elsevier, 1983.

[190] D. Peirce, R.J. Asaro et A. Needleman : An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metallurgica*, 30(6):1087 – 1119, 1982.

[191] D. Peirce, R.J. Asaro et A. Needleman : Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metallurgica*, 31(12):1951 – 1976, 1983.

[192] S.R. Kalidindi et L. Anand : Macroscopic shape change and evolution of crystallographic texture in pre-textured FCC metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42(3): 459 – 490, 1994.

[193] T.-Y. Wu, J.L. Bassani et C. Laird : Latent hardening in single crystals i. theory and experiments. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 435(1893):1 – 19, 1991.

[194] J.L. Bassani et T.-Y. Wu : Latent hardening in single crystals II. analytical characterization and predictions. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 435(1893):21 – 41, 1991.

[195] F. Fournier Dit Chabert, A. Gaubert, A. Longuet et S. Quilici : Calibration and validation of a constitutive model for single crystal nickel based superalloys. ODAS 2013 - 13th ONERA-DLR Aerospace Symposium, 2013.

[196] B. Xu et Y. Jiang : A cyclic plasticity model for single crystals. *International Journal of Plasticity*, 20(12):2161 – 2178, 2004.

[197] J. Lemaitre et J.-L Chaboche : *Mécanique des matériaux solides*. 1ère édition, 1985.

[198] O. Cazacu et I.R. Ionescu : Dynamic crystal plasticity : An eulerian approach. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58(6):844 – 859, 2010.

[199] O. Cazacu et I.R. Ionescu : Augmented lagrangian method for eulerian modeling of visco-plastic crystals. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:689 – 699, 2010.

[200] M. Kothari et L. Anand : Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline metals : Application to tantalum. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(1):51 – 83, 1998.

[201] S.R. Kalidindi, C.A. Bronkhorst et L. Anand : Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40(3):537 – 569, 1992.

[202] S. Balasubramanian et L. Anand : Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline fcc materials at low homologous temperatures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(1):101 – 126, 2002.

[203] S. Ganapathysubramanian et N. Zabaras : Modeling the thermoelastic-viscoplastic response of polycrystals using a continuum representation over the orientation space. *International Journal of Plasticity*, 21(1):119 – 144, 2005.

[204] A. Izadbakhsh, K. Inal, R. K. Mishra et M. Niewczas : New crystal plasticity constitutive model for large strain deformation in single crystals of magnesium. *Computational Materials Science*, 50(7):2185 – 2202, 2011.

[205] J.H. Kim, D. Kim, F. Barlat et M.-G. Lee : Crystal plasticity approach for predicting the bauschinger effect in dual-phase steels. *Materials Science and Engineering : A*, 539:259 – 270, 2012.

[206] C. Yu, G. Kang et Q. Kan : Crystal plasticity based constitutive model for uniaxial ratchetting of polycrystalline magnesium alloy. *Computational Materials Science*, 84:63 – 73, 2014.

[207] J. Besson, G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, S. Forest et M. Blétry : *Non-linear mechanics of materials*, volume 167. Springer, 2009.

[208] W. Voigt : Ueber die beziehung zwischen den beiden elasticitätsconstanten isotroper körper. *Annalen der Physik*, 274(12):573 – 587, 1889.

[209] A. Reuss : Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle . *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9(1):49 – 58, 1929.

[210] J.D. Eshelby : The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 241(1226):376 – 396, 1957.

[211] E. Kröner : Berechnung der elastischen konstanten des vielkristalls aus den konstanten des einkristalls. *Zeitschrift für Physik*, 151(4):504 – 518, 1958.

[212] T.H. Lin : Analysis of elastic and plastic strains of a fcc crystal. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 5:143 – 149, 1957.

[213] P. Van Houtte, L. Delannay et S.R. Kalidindi : Comparison of two grain interaction models for polycrystal plasticity and deformation texture prediction. *International Journal of Plasticity*, 18(3):359 – 377, 2002.

[214] Y.S. Liu, L. Delannay et P. Van Houtte : Application of the lamel model for simulating cold rolling texture in molybdenum sheet. *Acta Materialia*, 50(7):1849 – 1856, 2002.

[215] A. Ma, F. Roters et D. Raabe : Numerical study of textures and lankford values for FCC polycrystals by use of a modified taylor model. *Computational materials science*, 29(3):353 – 361, 2004.

[216] P. Van Houtte, A.K. Kanjarla, A. Van Bael, M. Seefeldt et L. Delannay : Multiscale modelling of the plastic anisotropy and deformation texture of polycrystalline materials. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 25(4):634 – 648, 2006.

[217] G. Sachs : Zur ableitung einer fliessbedingung. *Zeitschrift Des Vereines Deutscher Ingenieure*, 28:734 – 736, 1928.

[218] S.B. Batdorf et B. Budiansky : A mathematical theory of plasticity based on the concept of slip. Rapport technique NACA-TN-1871, NASA, 1949.

[219] E. Kröner : Zur plastischen verformung des vielkristalls. *Acta Metallurgica*, 9(2):155 – 161, 1961.

[220] R. Hill : Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(2):89 – 101, 1965.

[221] J.W. Hutchinson : Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 348(1652):101 – 127, 1976.

[222] M. Berveiller et A. Zaoui : An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 26(5 ?6):325 – 344, 1978.

[223] G. Cailletaud et P. Pilvin : Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Éléments*, 3(4):515 – 541, 1994.

[224] P. Pilvin : The contribution of micromechanical approaches to the modelling of inelastic behaviour. *In* G. Pineau, A. andCailletaud et T. Lindley, éditeurs : *4th International Conference on Biaxial/Multiaxial Fatigue*, volume 1, pages 31 – 46, Paris, France, 1994,.

[225] D. Abdeljaoued, I. Ben Naceur, K. Saï et G. Cailletaud : A new polycrystalline plasticity model to improve ratchetting strain prediction. *Mechanics Research Communications*, 36(3): 309 – 315, 2009.

[226] A. Hlilou, I. Ben Naceur, K. Saï, C. Gérard, S. Forest et G. Cailletaud : Generalization of the polycrystalline β-model : Finite element assessment and application to softening material behavior. *Computational Materials Science*, 45(4):1104 – 1112, juin 2009.

[227] K. Sai, G. Cailletaud et S. Forest : Micro-mechanical modeling of the inelastic behavior of directionally solidified materials. *Mechanics of Materials*, 38(3):203 – 217, 2006.

[228] G. Martin, N. Ochoa, K. Saï, E. Hervé-Luanco et G. Cailletaud : A multiscale model for the elastoviscoplastic behavior of directionally solidified alloys : Application to FE structural computations. *International Journal of Solids and Structures*, 51(5):1175 – 1187, 2014.

[229] A. Molinari, G.R. Canova et S. Ahzi : A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metallurgica*, 35(12):2983 – 2994, 1987.

[230] R.A. Lebensohn et C.N. Tomé : A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : Application to zirconium alloys. *Acta Metallurgica et Materialia*, 41(9):2611 – 2624, 1993.

[231] A. Molinari, S. Ahzi et R. Kouddane : On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals. *Mechanics of Materials*, 26(1):43 – 62, 1997.

[232] R. Masson, M. Bornert, P. Suquet et A. Zaoui : An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(6-7):1203 – 1227, 2000.

[233] P. Ponte Castañeda : The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 39(1):45 – 71, 1991.

[234] R. Brenner, O. Castelnau et P. Gilormini : A modified affine theory for the overall properties of nonlinear composites. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics*, 329(9):649 – 654, 2001.

[235] R. Brenner et R. Masson : Improved affine estimates for nonlinear viscoelastic composites. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 24(6):1002 – 1015, 2005.

[236] J. Segurado, R. A. Lebensohn, J. LLorca et C.N. Tomé : Multiscale modeling of plasticity based on embedding the viscoplastic self-consistent formulation in implicit finite elements. *International Journal of Plasticity*, 28(1):124 – 140, 2012.

[237] D.R.S. Talbot et J.R. Willis : Variational principles for inhomogeneous non-linear media. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 35(1):39 – 54, 1985.

[238] Z. Hashin et S. Shtrikman : A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10(4):343 – 352, 1962.

[239] P. Gilormini : A critical evaluation for various nonlinear extensions of the self-consistent model. *In* Prof André Pineau et Prof André Zaoui, éditeurs : *IUTAM Symposium on Micromechanics of Plasticity and Damage of Multiphase Materials*, numéro 46 de Solid Mechanics and its Applications, pages 67 – 74. Springer Netherlands, 1996.

[240] P. Gilormini : Une insuffisance de plusieurs extensions du modèle autocohérent au comportement des milieux hétérogènes non linéaires. *Revue de Métallurgie : Cahiers d'Informations Techqniues*, 94:1081 – 1088, 1997.

[241] P. Ponte Castañeda : Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(6):827 – 862, 1996.

[242] Y. Leroy et P. Ponte Castañeda : Bounds on the self-consistent approximation for nonlinear media and implications for the second-order method. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics*, 329(8):571 – 577, 2001.

[243] P. Ponte Castañeda : Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : I-theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(4):737 – 757, 2002.

[244] P. Ponte Castañeda : Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : II-applications. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(4):759 – 782, 2002.

[245] G. Cailletaud, S. Forest, D. Jeulin, F. Feyel, I. Galliet, V. Mounoury et S. Leroy : Some elements of microstructural mechanics. *Computational Materials Science*, 27(3):351 – 374, mai 2003.

[246] O. Diard, S. Leclercq, G. Rousselier et G. Cailletaud : Evaluation of finite element based analysis of 3d multicrystalline aggregates plasticity : Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries. *International Journal of Plasticity*, 21(4):691 – 722, 2005.

[247] S. Forest : *Milieux continus généralisés et matériaux hétérogènes*. Presses de l'École des Mines, 2006.

[248] A. Musienko : *Plasticité cristalline en présence de grandes déformations et d'endommagement*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2005.

[249] C. Gérard, F. N'Guyen, N. Osipov, G. Cailletaud, M. Bornert et D. Caldemaison : Comparison of experimental results and finite element simulation of strain localization scheme under cyclic loading. *Computational Materials Science*, 46(3):755 – 760, 2009.

[250] Y. Guilhem : *Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, novembre 2011.

[251] J. Rossiter, A. Brahme, K. Inal et R. Mishra : Numerical analyses of surface roughness during bending of FCC single crystals and polycrystals. *International Journal of Plasticity*, 46:82 – 93, 2013.

[252] A. Zeghadi : *Effet de la morphologie tri-dimensionnelle et de la taille de grain sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, décembre 2005.

[253] C. Farhat et F.-X Roux : A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32(6):1205 – 1227, 1991.

[254] R.A. Lebensohn : N-site modeling of a 3d viscoplastic polycrystal using fast fourier transform. *Acta Materialia*, 49(14):2723 – 2737, 2001.

[255] S.-B. Lee, R.A. Lebensohn et A.D. Rollett : Modeling the viscoplastic micromechanical response of two-phase materials using fast fourier transforms. *International Journal of Plasticity*, 27(5):707 – 727, mai 2011.

[256] R.A. Lebensohn, A.K. Kanjarla et P. Eisenlohr : An elasto-viscoplastic formulation based on fast fourier transforms for the prediction of micromechanical fields in polycrystalline materials. *International Journal of Plasticity*, 32-33:59 – 69, mai 2012.

[257] E.B. Marin et P.R. Dawson : On modelling the elasto-viscoplastic response of metals using polycrystal plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 165(1-4):1 – 21, 1998.

[258] A. Najafi, E.B. Marin et M. Rais-Rohani : Concurrent multi-scale crush simulations with a crystal plasticity model. *Thin-Walled Structures*, 53:176 – 187, 2012.

[259] E.B. Marin : On the formulation of a crystal plasticity model. Rapport technique SAND2006-4170, Sandia National Laboratories, 2006.

[260] C. Miehe, J. Schröder et J. Schotte : Computational homogenization analysis in finite plasticity simulation of texture development in polycrystalline materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 171(3 ?4):387 – 418, avril 1999.

[261] F. Feyel et J.-L. Chaboche : FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183(3-4):309 – 330, 2000.

[262] T.-S. Han et P.R. Dawson : A two-scale deformation model for polycrystalline solids using a strongly-coupled finite element methodology. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(13 ?16):2029 – 2043, 2007.

[263] T.-S. Han : Performance of volume average scale linking in a strongly-coupled two-scale finite element methodology for polycrystalline solids. *Computational Materials Science*, 50(6):1894 – 1907, 2011.

[264] Y. Mellbin, H. Hallberg et M. Ristinmaa : Accelerating crystal plasticity simulations using GPU multiprocessors. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 100(2): 111 – 135, 2014.

[265] G. Cailletaud, O. Diard, F. Feyel et S. Forest : Computational crystal plastiticy : from single crystal to homogenized polycrystals. *Technische Mechanik*, 23:130 – 145, 2003.

[266] P. Germain et P. Muller : *Introduction à la mécanique des milieux continus*. Masson, 1980.

[267] C. Truesdell : *A first course in rational continuum mechanics*. Numéro vol. 1 de Pure and Applied Mathematics. Elsevier Science, 1992.

[268] M.E. Gurtin, E. Fried et L. Anand : *The Mechanics and Thermodynamics of Continua*. Cambridge University Press, 2010.

[269] L. Anand : Single-crystal elasto-viscoplasticity : application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(48-51):5359 – 5383, décembre 2004.

[270] T. Hoc et S. Forest : Polycrystal modelling of IF-ti steel under complex loading path. *International Journal of Plasticity*, 17(1):65 – 85, 2001.

[271] O.C. Zienkiewicz et R.L. Taylor : *The Finite Element Method for Solid and Structural Mechanics, Sixth Edition*. Butterworth-Heinemann, 6$^{\text{ème}}$ édition, septembre 2005.

[272] K.-J. Bathe : *Finite Element Procedures*. Prentice Hall, 1$^{\text{ère}}$ édition, juin 1995.

[273] T. Belytschko, W.K. Liu, B. Moran et K. Elkhodary : *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. Wiley Desktop Editions. Wiley, 2ème édition, 2013.

[274] L. Delannay, P.J. Jacques et S.R. Kalidindi : Finite element modeling of crystal plasticity with grains shaped as truncated octahedrons. *International Journal of Plasticity*, 22(10): 1879 – 1898, 2006.

[275] L. Delannay, M.A. Melchior, A.K. Anand, P. Van Houtte et J.W. Signorelli, : CPFEM Investigation of the effect of grain shape on the planar anisotropy and the shear banding of textured metal sheets. *In* Rollett, AD, éditeur : *Applications of texture analysis*, volume 201 de *Ceramic Transactions*, pages 745 – 756. Natl Sci Fdn ; Air Force Off Sci Res ; Alcoa Technical Ctr, 2009. 15th International Conference on Textures of Materials, Pittsburgh, PA, 2008.

[276] F.T. Meissonnier, E.P. Busso et N.P. O'Dowd : Finite element implementation of a generalised non-local rate-dependent crystallographic formulation for finite strains. *International Journal of Plasticity*, 17(4):601 – 640, 2001.

[277] E.B. Marin et P.R. Dawson : Elastoplastic finite element analyses of metal deformations using polycrystal constitutive models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 165(1-4):23 – 41, 1998.

[278] G. Sarma et T. Zacharia : Integration algorithm for modeling the elasto-viscoplastic response of polycrystalline materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47(3):1219 – 1238, 1999.

[279] A.M. Maniatty, P.R. Dawson et Y.-S. Lee : A time integration algorithm for elasto-viscoplastic cubic crystals applied to modelling polycrystalline deformation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 35(8):1565 – 1588, 1992.

[280] A.M. Maniatty et J.-S. Yu : Effect of elasticity on slip system activity in face-centered cubic crystals : A numerical study. *International Journal of Solids and Structures*, 33(8):1219 – 1238, 1999.

[281] H.W. Li, H Yang et Z.C Sun : A robust integration algorithm for implementing rate dependent crystal plasticity into explicit finite element method. *International Journal of Plasticity*, 24(2):267 – 288, 2008.

[282] M.A. Zikry : An accurate and stable algorithm for high strain-rate finite strain plasticity. *Computers & Structures*, 50(3):337 – 350, 1994.

[283] J.L. Raphanel, G. Ravichandran et Y.M. Leroy : Three-dimensional rate-dependent crystal plasticity based on runge-kutta algorithms for update and consistent linearization. *International Journal of Solids and Structuress*, 41(22-23):5995 – 6021, 2004.

[284] S.N. Kuchnicki, A.M. Cuitiño et R.A. Radovitzky : Efficient and robust constitutive integrators for single-crystal plasticity modeling. *International Journal of Plasticity*, 22(10):1988 – 2011, 2006.

[285] S.N. Kuchnicki, R.A. Radovitzky et A.M. Cuitiño : An explicit formulation for multiscale modeling of bcc metals. *International Journal of Plasticity*, 24(12):2173 – 2191, 2008.

[286] J. Rossiter, A. Brahme, M.H. Simha, K. Inal et R. Mishra : A new crystal plasticity scheme for explicit time integration codes to simulate deformation in 3d microstructures : Effects of strain path, strain rate and thermal softening on localized deformation in the aluminum alloy 5754 during simple shear. *International Journal of Plasticity*, 26(12):1702 – 1725, 2010.

[287] H. Zhang, X. Dong, Q. Wang et Z. Zeng : An effective semi-implicit integration scheme for rate dependent crystal plasticity using explicit finite element codes. *Computational Materials Science*, 54:208 – 218, 2012.

[288] S. Dumoulin, O.S. Hopperstad et T. Berstad : Investigation of integration algorithms for rate-dependent crystal plasticity using explicit finite element codes. *Computational Materials Science*, 46(4):785 – 799, 2009.

[289] P. Steinmann et E. Stein : On the numerical treatment and analysis of finite deformation ductile single crystal plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 129(3):235 – 254, 1996.

[290] A. Ibrahimbegovic : *Nonlinear Solid Mechanics : Theoretical Formulations and Finite Element Solution Methods*. Springer Publishing Company, Incorporated, 1ère édition, 2009.

[291] K. Madi : *Influence de la morphologie tridimensionnelle des phases sur le comportement mécanique de réfractaires électrofondus*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2006.

[292] L. Rauch et L. Madej : Application of the automatic image processing in modeling of the deformation mechanisms based on the digital representation of microstructure. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 8(3):343 – 356, 2010.

[293] D. Raabe, M. Sachtleber, Z. Zhao, F. Roters et F. Zaefferer : Micromechanical and macromechanical effects in grain scale polycrystal plasticity experimentation and simulation. *Acta Materialia*, 49(17):3433 – 3441, 2001.

[294] G. Bertolino, N. Bilger et J. Crépin : Modeling microstructures and microstructural effects on macroscopic and intragranular mechanical behavior. *Computational Materials Sciencee*, 40, 2007.

[295] L. St-Pierre, E. Héripré, M. Dexet, J. Crépin, G. Bertolino et N. Bilger : 3D simulations of microstructure and comparison with experimental microstructure coming from OIM analysis. *International Journal of Plasticity*, 24(9):1516 – 1532, 2008.

[296] A. Zeghadi, F. N'guyen, S. Forest, A.-F. Gourgues et O. Bouaziz : Ensemble averaging stress-strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained surface microstructure - Part 1 : anisotropic elastic behaviour. *Philosophical Magazine*, 87(8-9):1401 – 1424, 2007.

[297] A. Zeghadi, S. Forest, A.-F. Gourgues et O. Bouaziz : Ensemble averaging stress-strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained surface microstructure - Part 2 : crystal plasticity. *Philosophical Magazine*, 87(8-9):1425 – 1446, 2007.

[298] J. Alkemper et P.W. Voorhees : Quantitative serial sectioning analysis. *Journal of Microscopy*, 201(3):388 – 394, 2001.

[299] M. Groeber, M.D. Uchic, D.M. Dimiduk, Y. Bhandari et S. Ghosh : A framework for automated 3D microstructure analysis & representation. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 14(1):63 – 74, 2007.

[300] Y. Bhandari, S. Sarkar, M. Groeber, M.D. Uchic, D.M. Dimiduk et S. Ghosh : 3D polycrystalline microstructure reconstruction from FIB generated serial sections for FE analysis. *Computational Materials Science*, 41(2):222 – 235, 2007.

[301] M. Groeber, B.K. Haley, M.D. Uchic, D.M. Dimiduk et S. Ghosh : 3D reconstruction and characterization of polycristalline microstructures using a FIB-SEM system. *Materials Characterization*, (4).

[302] M. Groeber, S. Ghosh, M.D. Uchic et D.M. Dimiduk : A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 1 : Statistical characterization. *Acta Materialia*, 56(6):1257 – 1273, 2008.

[303] S. Ghosh, Y. Bhandari et M. Groeber : CAD-based reconstruction of 3D polycrystalline alloy microstructures from FIB generated serial sections. *Computer-Aided Design*, 40(3):293–310, 2008.

[304] A. Brahme, M.H. Alvi, D. Saylor, J. Fridy et A.D. Rollett : 3D reconstruction of microstructure in a commercial purity aluminum. *Scripta Materialia*, 55(1):75 – 80, 2006.

[305] M. Groeber, S. Ghosh, M.D. Uchic et D.M. Dimiduk : A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. part 2 : Synthetic structure generation. *Acta Materialia*, 56(6):1274 – 1287, 2008.

[306] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin et G. Cailletaud : Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 1 : F.E. model. *International Journal of Plasticity*, 17(4):513 – 536, 2001.

[307] F. Barbe, S. Forest et G. Cailletaud : Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates.part 2 : Results. *International Journal of Plasticity*, 17(4):537 – 563, 2001.

[308] Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J.-M Stéphan et G. Cailletaud : Numerical investigations of the free surface effect in three-dimensional polycrystalline aggregates. *Computational Materials Science*, 70:150 – 162, 2013.

[309] F. Fritzen, T. Böhlke et E. Schnack : Periodic three-dimensional mesh generation for crystalline aggregates based on voronoi tessellations. *Computational Mechanics*, 43(5):701–713, 2009.

[310] P. Zhang, M. Karimpour, D. Balint et J. Lin : Three-dimensional virtual grain structure generation with grain size control. *Mechanics of Materials*, 55:89–101, décembre 2012.

[311] I. Benedetti et M.H. Aliabadi : A three-dimensional grain boundary formulation for microstructural modeling of polycrystalline materials. *Computational Materials Science*, 67:249, 2013.

[312] R. Quey, P. R. Dawson et F. Barbe : Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(17 ?20):1729 – 1745, 2011.

[313] N. Osipov, A.-F. Gourgues-Lorenzon, B. Marini, V. Mounoury, F. Nguyen et G. Cailletaud : FE modelling of bainitic steels using crystal plasticity. *Philosophical Magazine*, 88(30-32): 3757–3777, 2008.

[314] T. M. Hatem et M.A. Zikry : Shear pipe effects and dynamic shear-strain localization in martensitic steels. *Acta Materialia*, 57(15):4558 – 4567, 2009.

[315] T.M. Hatem et M.A. Zikry : Dynamic shear-strain localization and inclusion effects in lath martensitic steels subjected to high pressure loads. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58(8):1057 – 1072, 2010.

[316] K. Hashiguchi et Y. Yamakawa : *Introduction to Finite Strain Theory for Continuum Elasto-Plasticity*. Wiley, 2012.

[317] E.H. Lee : Elastic-plastic deformation at finite strains. *ASME Journal of Applied Mechanics*, 36:1 – 6, 1969.

[318] E. Kröner : Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 4:273 – 334, 1960.

[319] J.M. Gerken et P.R. Dawson : A crystal plasticity model that incorporates stresses and strains due to slip gradients. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56(4):1651 – 1672, 2008.

[320] S. Turteltaub et A.S. J. Suiker : A multiscale thermomechanical model for cubic to tetragonal martensitic phase transformations. *International Journal of Solids and Structures*, 43(14-15):4509 – 4545, 2006.

[321] C. Teodosiu : A dynamic theory of dislocations and its applications to the theory of the elastic-plastic continuum. *In* J.A. Simmons, éditeur : *Proceedings of the Conference on fundamental Aspects of Dislocation Theory*, pages 837 – 876. US National Bureau of Standards, 1970.

[322] J. Mandel : *Plasticité Classique et Viscoplasticité*, volume 167. Springer, 1972.

[323] B.D. Coleman et W. Noll : The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 13(1):167 – 178, 1963.

[324] T.J.R. Hughes et J. Winget : Finite rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large-deformation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 15(12):1862 – 1867, 1980.

[325] M. Boudifa, K. Saanouni et J.-L Chaboche : A micromechanical model for inelastic ductile damage prediction in polycrystalline metals for metal forming. *International Journal of Mechanical Sciences*, 51(6):453 – 464, 2009.

Annexe A

Notations

Cette annexe détaille l'ensemble des notations tensorielles, paramètres et variables utilisées dans ce manuscrit. On note toutefois que si certaines notations ne figurent pas dans ce qui suit, celle-ci sont alors présentées dans le corps du texte.

A.1 Notation tensorielles

x	Tenseur d'ordre 0 (scalaire)
$\underline{\boldsymbol{x}}$	Tenseur d'ordre 1 (vecteur)
$\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}$	Tenseur d'ordre 2 (matrice)
$\underset{\approx}{\boldsymbol{X}}$	Tenseur d'ordre 4

A.2 Opérations tensorielles

Opérations de type produits contractés et en croix

$x = \underline{\boldsymbol{a}} \cdot \underline{\boldsymbol{b}}$	$x = a_i\, b_i$
$\underline{\boldsymbol{x}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{A}} \cdot \underline{\boldsymbol{b}}$	$x_i = a_{ij}\, b_j$
$\underset{\sim}{\boldsymbol{X}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{A}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{B}}$	$X_{ij} = A_{ik}\, B_{kj}$
$x = \underset{\sim}{\boldsymbol{A}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{B}}$	$x = A_{ij}\, B_{ij}$
$\underset{\sim}{\boldsymbol{X}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}} : \underset{\sim}{\boldsymbol{B}}$	$X_{ij} = A_{ijkl}\, B_{kl}$
$x = \underset{\approx}{\boldsymbol{A}} :: \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}$	$x = A_{ijkl}\, B_{ijkl}$
$\underset{\sim}{\boldsymbol{X}} = \underline{\boldsymbol{a}} \otimes \underline{\boldsymbol{b}}$	$X_{ij} = a_i\, b_j$
$\underset{\approx}{\boldsymbol{X}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{A}} \otimes \underset{\sim}{\boldsymbol{B}}$	$X_{ijkl} = A_{ij}\, B_{kl}$
$\underset{\approx}{\boldsymbol{X}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{A}} \underline{\otimes} \underset{\approx}{\boldsymbol{B}}$	$X_{ijkl} = A_{ik}\, B_{jl}$
$\underset{\approx}{\boldsymbol{X}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{A}} \bar{\otimes} \underset{\sim}{\boldsymbol{B}}$	$X_{ijkl} = A_{il}\, B_{kj}$

Quelques fonctions usuelles

$\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}^T$	Transposé de $\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}$
$\text{trace}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}\right)$	Trace de $\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}$
$\text{sym}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}\right)$	Partie symétrique de $\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}$
$\text{asym}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}\right)$	Partie antisymétrique de $\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}$
$\det\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}\right)$	Déterminant de $\underset{\sim}{\boldsymbol{X}}$

A.3 Variables et paramètres

A_I	Variables forces thermodynamiques duales à ς_I
b	Paramètre lié à la capacité d'écrouissage isotrope
C	Paramètre lié à la vitesse d'écrouissage cinématique
C_0	Configuration initiale
C_c	Configuration courante
C_i	Configuration intermédiaire
$\underset{\sim}{\boldsymbol{C}}$	Tenseur de Green-Lagrange droit
d	Paramètre lié à la capacité d'écrouissage cinématique
$\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}$	Tenseur de vitesse de déformation pure
$\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^e$	Partie linéaire du tenseur de vitesse de déformation pure
$\underset{\sim}{\boldsymbol{D}}^p$	Partie non linéaire du tenseur de vitesse de déformation pure
e	Énergie locale spécifique aux efforts intérieurs
$\mathcal{E}$	Énergie spécifique aux efforts intérieurs dans le domaine considéré
$\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}$	Tenseur de déformation pure de déformation de Green-Lagrange
$\underset{\sim}{\boldsymbol{E}}^e$	Partie linéaire du tenseur de déformation pure de déformation de Green-Lagrange
f^s	Fonction d'écoulement du système s
F^s	Potentiel de dissipation du système s
$\underline{\boldsymbol{f}}$	Efforts extérieurs de volume
$\underline{\boldsymbol{f}}_0$	Efforts extérieurs de volume (description matérielle)
$\underline{\boldsymbol{f}}_\varphi$	fraction volumique des phases φ
$\underline{\boldsymbol{F}}$	Efforts extérieurs de surface
$\underline{\boldsymbol{F}}_0$	Efforts extérieurs de surface (description matérielle)
$\underline{\boldsymbol{l}}_c^s$	Vecteur de direction de glissement du système s dans la configuration C_c
$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}$	Tenseur gradient de transformation

$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^e$	Partie linéaire du tenseur gradient de transformation
$\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^p$	Partie non linéaire du tenseur gradient de transformation
$\underset{\sim}{\boldsymbol{h}}$	Matrice d'interaction
$\underset{\sim}{\boldsymbol{I}}$, $\underset{\approx}{\boldsymbol{I}}$	Tenseurs identité
J	Variation volumique entre la configuration C_0 et la configuration C_c
$\mathcal{J}$	Matrice jacobienne
K	Paramètre de viscosité
$\underline{\boldsymbol{l}}_c^s$	Vecteur de direction de glissement du système s dans la configuration C_c
$\underline{\boldsymbol{l}}_i^s$	Vecteur de direction de glissement du système s dans la configuration C_i
$\underset{\sim}{\boldsymbol{l}}^p$	Tenseur de vitesse de transformation non linéaire dans la configuration C_c
$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}$	Tenseur de vitesse de transformation dans la configuration C_c
$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e$	Tenseur de vitesse de transformation linéaire dans la configuration C_c
$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p$	Tenseur de vitesse de transformation non linéaire dans la configuration C_i
$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^e$	Tenseur de vitesse de transformation linéaire dans la configuration C_c
$\underset{\sim}{\boldsymbol{L}}^p$	Tenseur de vitesse de transformation non linéaire dans la configuration C_i
$\underset{\sim}{\boldsymbol{M}}^e$	Tenseur de contrainte de Mandel
n	Paramètre de viscosité
N_s	Nombre de systèmes de glissement activés
$\underline{\boldsymbol{n}}$	Vecteur normal au de domaine considéré
$\underline{\boldsymbol{n}}_c^s$	Vecteur normal au de glissement du système s dans la configuration C_c
$\underline{\boldsymbol{n}}_i^s$	Vecteur normal au de glissement du système s dans la configuration C_i
$\underline{\boldsymbol{N}}$	Vecteur normal au de domaine considéré (description matérielle)
$\mathcal{P}_{ext}$	Puissance des efforts extérieurs
$\mathcal{P}_{int}$	Puissance des efforts intérieurs
$\underset{\sim}{\boldsymbol{P}}$	Premier tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff dans la configuration C_0
$\underset{\sim}{\boldsymbol{P}}^e$	Premier tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff dans la configuration C_i
Q	Paramètre lié à la vitesse d'écrouissage isotrope
$\underline{\boldsymbol{q}}$	Vecteur flux de chaleur
$\underline{\boldsymbol{q}}_0$	Vecteur flux de chaleur (description matérielle)
$\mathcal{Q}$	Chaleur reçue par le domaine considéré
r	Source de chaleur
r^s	variable d'écrouissage isotrope du système s
$\underset{\sim}{\boldsymbol{R}}$	Tenseur de rotation issu de la décomposition polaire
$\mathcal{S}$	Entropie interne dans le domaine considéré
$\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}$	Second tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff dans la configuration C_0
$\underset{\sim}{\boldsymbol{S}}^e$	Second tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff dans la configuration C_i
T	Température
$\underline{\boldsymbol{u}}$	Vecteur déplacement

$\underset{\sim}{\boldsymbol{U}}$	Tenseur de déformation pure droit $\underset{\sim}{\boldsymbol{U}} = \sqrt{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}} \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^T}$
$\underset{\sim}{\boldsymbol{V}}$	Tenseur de déformation pure gauche $\underset{\sim}{\boldsymbol{V}} = \sqrt{\underset{\sim}{\boldsymbol{F}}^T \cdot \underset{\sim}{\boldsymbol{F}}}$
$\underset{\sim}{\boldsymbol{W}}$	Tenseur de vitesse rotation
$\underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^e$	Partie linéaire du tenseur de vitesse de rotation
$\underset{\sim}{\boldsymbol{W}}^p$	Partie non linéaire du tenseur de vitesse de rotation
$\underline{\boldsymbol{x}}$	Coordonnées d'un point matériel dans la configuration C_0
$\underline{\boldsymbol{y}}$	Coordonnées d'un point matériel dans la configuration C_c
α^s	Variable d'état interne associée à l'écrouissage cinématique
β	Paramètre élastique pour les techniques de transitions d'échelles
$\underset{\sim}{\boldsymbol{\beta}}^{\varphi}$	Paramètre d'accommodation non linéaire
γ^s	Cisaillement du système s
$\varepsilon^{in}_{éq}$	Déformation non linéaire équivalente au sens de Von Mises (HPP)
$\underset{\approx}{\boldsymbol{\varepsilon}}$	Tenseur de déformation (HPP)
$\underset{\approx}{\boldsymbol{\varepsilon}}^e$	Partie linéaire du tenseur de déformation $\underset{\approx}{\boldsymbol{\varepsilon}}$
$\underset{\approx}{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in}$	Partie non linéaire du tenseur de déformation $\underset{\approx}{\boldsymbol{\varepsilon}}$
ζ	Variables thermodynamiques d'état internes et forces duales
θ	Paramètre d'intégration numérique
ϑ	Variables d'intégration et auxiliaires
ι	Facteur de Taylor-Quinney
ζ	Variables thermodynamiques d'état internes et forces duales
λ	Multiplicateur viscoplastique
ρ^s	Variables d'état interne associé à l'écrouissage isotrope
ϱ_0	Masse volumique dans la configuration C_0
ϱ_c	Masse volumique dans la configuration C_c
$\sigma_{éq}$	Contrainte équivalente au sens de Von Mises
$\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}$	Tenseur de contrainte de Cauchy
ς_I	Variables d'état interne associées aux forces A_I
τ^s	Cission résolue
τ^s_c	Cission critique
$\underset{\sim}{\boldsymbol{\tau}}$	Tenseur de contrainte de Kirchhoff
υ^s	Glissement cumulé du système s
χ^s	Variable d'écrouissage cinématique du système s
ψ	Énergie libre d'Helmholtz
Θ	Dissipation intrinsèque
$\underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}}$	Tenseur d'élasticité
$\underset{\approx}{\boldsymbol{\Upsilon}}$	Tenseur de complaisance

Annexe B

Orientations et désorientations cristallographiques

Les diverses définitions des orientations et désorientations cristallographiques sont rappelées dans cette annexe. Quelques éléments concernant les représentations des figures de pôles directes et inverses sont également traités. La relation d'orientation KS entre les divers variants des lattes de martensite et un grain austénitique parent est présentée dans un dernier point.

B.1 Orientations cristallographiques

Par définition, l'orientation cristallographique d'un cristal constitutif consiste en une rotation $\mathcal{G}$ d'un repère de référence R_s à l'échelle de l'échantillon ou du laboratoire à un repère local R_c rattaché au cristal constitutif considéré, *i.e.* :

$$R_c = \mathcal{G}\, R_s \tag{B.1}$$

À noter que les repères R_s et R_c sont le plus souvent orthonormés et rattachés aux directions principales, *i.e.* les directions de laminage DL, transverse DT et normal DN pour R_s, et les directions $[1\,0\,0]$, $[0\,1\,0]$ et $[0\,0\,1]$ pour R_c.

La rotation $\mathcal{G}$ peut être paramétré au moyen de diverses approches que l'on traite brièvement ici. Ces approches sont plus ou moins équivalentes et souvent interchangeables par le biais de formules de transformations appropriées.

Matrice de rotation

L'orientation $\mathcal{G}$ peut être donnée par une matrice de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$. Celle-ci représente l'inverse d'une matrice de passage du repère R_s au repère R_c et est orthonormal, *i.e.* :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}^{-1} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}^{T} \tag{B.2}$$

La matrice de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$ contient neuf composantes. Ses lignes contiennent les coordonnées des vecteurs liés au repère R_c et ses colonnes s'attachent aux vecteurs liés au repère R_s.

Indices de Miller

Les indices de Miller sont communément utilisés pour décrire certaines orientations particulières, notamment les composantes de texture. Leur notation est donné par les indices entiers pour définir un système de glissement, *i.e.* $(h\,k\,l)$ $[u\,v\,w]$. Dans ce cas, la matrice de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$ peut être aisément donnée selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}} = \begin{pmatrix} \dfrac{u}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}} & \dfrac{(k\,w-l\,v)}{\sqrt{(u^2+v^2+w^2)\,\left(\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)}} & \dfrac{h}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \\ \dfrac{v}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}} & \dfrac{(l\,u-h\,w)}{\sqrt{(u^2+v^2+w^2)\,\left(\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)}} & \dfrac{k}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \\ \dfrac{w}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}} & \dfrac{(h\,v-k\,u)}{\sqrt{(u^2+v^2+w^2)\,\left(\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)}} & \dfrac{l}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \end{pmatrix} \tag{B.3}$$

Cependant, l'extraction des indices de Miller d'une matrice de rotation n'est guère évidente. Cette opération mène le plus souvent à diverses possibilités d'indices de Miller $(h\,k\,l)$ $[u\,v\,w]$.

Angles d'Euler

Les angles d'Euler permettent de définir une orientation cristallographique selon trois paramètres indépendants, plus particulièrement par trois rotations successives autour de différents axes donnés à priori. Si une telle approche provient du théorème des rotations d'Euler, bon nombre de conventions peuvent éventuellement être envisagées pour définir une orientation donnée. En science des matériaux, la convention de Bunge [16] constitue l'approche la plus commune. Celle-ci est donnée selon les angles $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ définies respectivement dans les intervalles $[0,\, 2\pi[$, $[0,\, \pi]$ et $[0,\, 2\pi[$. La séquence d'axes utilisée est donnée selon la combinaison $Z-Y-Z$.

Si l'on considère $(X_s\,Y_s\,Z_s)$ et $(X_c\,Y_c\,Z_c)$ respectivement les systèmes d'axes associés au repères R_s et R_c, les rotations successives sont données selon (Figure B.1) :

- une première rotation d'angle φ_1 autour de Z_s de manière à ce que X_s' soit normal au plan contenant Z_s et Z_c,
- une seconde rotation d'angle ϕ autour de X_s' de manière à ce que l'axe Z_s'' coïncide avec Z_c,
- une troisième rotation d'angle φ_2 autour de Z_s'' de manière à ce que le repère R_s coïncide avec R_c.

De par les angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$, la matrice de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$ est donnée par :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}} = \begin{pmatrix} c_1\,c_2 - s_1\,c_p\,s_2 & s_1\,c_2 + c_1\,c_p\,s_2 & s_p\,s_2 \\ -c_1\,c_2 - s_1\,c_p\,s_2 & c_1\,c_p\,c_2 - s_1\,s_2 & s_p\,c_2 \\ s_1\,s_p & -c_1\,s_p & c_p \end{pmatrix} \tag{B.4}$$

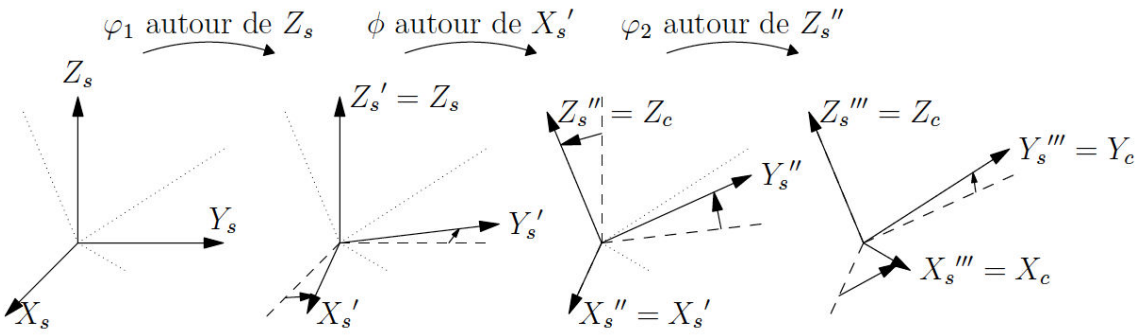


Figure B.1 – Définition des angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ selon la convention de Bunge [19]

tels que :

$$\begin{cases} c_1 = \cos(\varphi_1) & s_1 = \sin(\varphi_1) \\ c_p = \cos(\phi) & s_p = \sin(\phi) \\ c_2 = \cos(\varphi_2) & s_2 = \sin(\varphi_2) \end{cases} \tag{B.5}$$

Par ailleurs, l'extraction des angles d'Euler d'une matrice de rotation est effectuée de la manière qui suit :

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \tan^{-1}\left(-\frac{\mathcal{G}_{31}\,\mathcal{G}_{32}}{s_p^2}\right) \\ \phi &= \arccos(c_p) \\ \varphi_2 &= \tan^{-1}\left(-\frac{\mathcal{G}_{13}\,\mathcal{G}_{23}}{s_p^2}\right) \end{aligned} \tag{B.6}$$

À noter que si $c_p = 1$, *i.e.* $\phi = 0$, alors :

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \frac{\tan^{-1}\left(\frac{\mathcal{G}_{12}}{\mathcal{G}_{11}}\right)}{2} \\ \phi &= \arccos(c_p) \\ \varphi_2 &= -\varphi_1 \end{aligned} \tag{B.7}$$

Axe / angle de rotation

L'orientation d'un cristal constitutif peut également être donnée par un axe / angle de rotation (r, θ) tel que θ est défini dans $[0, \pi]$. Dans ce contexte, la matrice de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$ est définie selon :

$$\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}} = \begin{pmatrix} r_1\,r_1\,(1-c)+c & r_1\,r_2\,(1-c)+r_3\,s & r_1\,r_3\,(1-c)-r_2\,s \\ r_2\,r_1\,(1-c)-r_3\,s & r_2\,r_2\,(1-c)+c & r_2\,r_3\,(1-c)+r_1\,s \\ r_3\,r_1\,(1-c)+r_2\,s & r_3\,r_2\,(1-c)-r_1\,s & r_3\,r_3\,(1-c)+c \end{pmatrix} \tag{B.8}$$

r_i étant les composantes du vecteur $\underline{\boldsymbol{r}}$. On note :

$$\begin{cases} c = \cos(\theta) \\ s = \sin(\theta) \end{cases} \tag{B.9}$$

De par la matrice de rotation $\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$, la détermination des composantes du vecteur $\underline{\boldsymbol{r}}$ et de l'angle de rotation θ est effectuée de la manière qui suit :

$$\begin{aligned} \theta &= \arccos\left[\frac{(\mathcal{G}_{11} + \mathcal{G}_{22} + \mathcal{G}_{11} - 1)}{2}\right] \\ r_1 &= \frac{(\mathcal{G}_{23} - \mathcal{G}_{32})}{2\sin\theta} \\ r_2 &= \frac{(\mathcal{G}_{31} - \mathcal{G}_{13})}{2\sin\theta} \\ r_3 &= \frac{(\mathcal{G}_{12} - \mathcal{G}_{21})}{2\sin\theta} \end{aligned} \tag{B.10}$$

À noter que si $\theta = \pi$, donc :

$$\begin{aligned} r_1 &= \sqrt{\frac{(\mathcal{G}_{11} + 1)}{2}} \\ r_2 &= \sqrt{\frac{(\mathcal{G}_{22} + 1)}{2}} \\ r_3 &= \sqrt{\frac{(\mathcal{G}_{33} + 1)}{2}} \end{aligned} \tag{B.11}$$

Dans le cas où $\theta = \pi$, les composantes du vecteur $\underline{\boldsymbol{r}}$ deviennent :

$$\begin{aligned} r_1 &= 1 \\ r_2 &= 0 \\ r_3 &= 0 \end{aligned} \tag{B.12}$$

Quaternions

Les quaternions consistent en une extension des nombres complexes. Ils constituent un outil mathématique pour la définition des orientations et les rotations dans un espace tridimensionnel. En science des matériaux, les quaternions sont le plus souvent utilisé pour décrire les orientations cristallographiques en raison de leur manipulation algébrique assez aisée.

Un quaternion q est constitué d'un quadruplet de nombres réels. Le premier étant un scalaire, les trois suivants constituent les composantes d'un vecteur $\underline{\boldsymbol{q}}$. Un quaternion est le plus souvent unitaire. Dans un tel contexte, il peut être donné selon les composantes du

vecteur $\underline{\boldsymbol{r}}$ et l'angle θ, *i.e.* :

$$\begin{aligned} q_0 &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_1 &= r_1 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_2 &= r_2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_3 &= r_3 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \tag{B.13}$$

B.2 Désorientations cristallographiques

Si l'on considère deux orientations $\mathcal{G}_A$ et $\mathcal{G}_B$ associées à deux cristaux constitutifs distincts A et B, la désorientation $\mathcal{G}_{A/B}$ entre celles-ci consiste en une rotation qui fait passer l'orientation de référence $\mathcal{G}_A$ à $\mathcal{G}_B$. Dans le cas où l'orientation $\mathcal{G}_B$ est considérée comme étant une orientation de référence, la désorientation entre $\mathcal{G}_A$ et $\mathcal{G}_B$ est alors $\mathcal{G}_{B/A}$. Les tenseurs de désorientations $\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{A/B}$ et $\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{B/A}$ sont respectivement donnés selon :

$$\begin{aligned} \underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{A/B} &= \underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{B} \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{A}^{-1} \\ \underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{B/A} &= \underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{A} \,.\, \underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{B}^{-1} \end{aligned} \tag{B.14}$$

La matrice de désorientation donnée peut être également exprimé selon l'approche axe / angle de rotation permettant le plus souvent meilleur appréhension de la désorientation :

$$\begin{aligned} \theta &= \arccos\left(\frac{\mathrm{trace}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\mathcal{G}}}_{A/B}\right) - 1}{2}\right) \\ r_1 &= \mathcal{G}_{A/B\,23} - \mathcal{G}_{A/B\,32} \\ r_2 &= \mathcal{G}_{A/B\,31} - \mathcal{G}_{A/B\,13} \\ r_3 &= \mathcal{G}_{A/B\,12} - \mathcal{G}_{A/B\,21} \end{aligned} \tag{B.15}$$

Cependant, compte tenu des symétries cristallines, bon nombre de désorientations peuvent être engendrées en remplaçant une orientation $\mathcal{G}_A$, ou éventuellement $\mathcal{G}_B$, par une orientation équivalente d'un point de vue cristallographique. De ce fait, la prise en compte des symétrie cristallines est bien nécessaire pour calculer l'angle de désorientation minimum donné par $\mathcal{G}_{A/B}$ ou $\mathcal{G}_{B/A}$. À savoir que dans le cas des structure cubiques centrées CC ou cubiques à faces centrés CFC, il existe 24 opérations de symétrie associées :

- à l'identité,
- aux neuf rotations de 90° autour des axes de famille $\langle 1\,0\,0\rangle$, *i.e.* [1 0 0], [0 1 0] et [0 0 1],

- aux six rotations de 180° autour des axes de famille $\langle 1\,1\,0 \rangle$, *i.e.* $[1\,1\,0]$, $[1\,0\,1]$, $[0\,1\,1]$, $\left[\bar{1}\,0\,1\right]$, $\left[1\,0\,\bar{1}\right]$ et $\left[0\,\bar{1}\,1\right]$
- aux huit rotations de 120° autour des axes de famille $\langle 1\,1\,1 \rangle$, *i.e.* $[1\,1\,1]$, $\left[\bar{1}\,1\,1\right]$, $\left[1\,\bar{1}\,1\right]$ et $\left[1\,1\,\bar{1}\right]$.

Le lecteur intéressé peut se référer aux références [16, 19] pour le calcul de l'angle de désorientation minimum en tenant des diverses opérations de symétrie.

B.3 Représentation graphique des orientations cristallographiques

La visualisation des orientations et textures cristallographiques peut considérer certaines approches qui s'appuient essentiellement sur la projection stéréographique. Celle-ci permet d'illustrer une représentation plane d'une orientation donnée dans un espace tridimensionnel. Dans un tel contexte, on distingue les figures de pôles directes et figures de pôles inverses.

Figures de pôles directes

La figure de pôles directe [1] consiste en une projection stéréographique plane de certains pôles, par exemple $\{1\,0\,0\}$ des cristaux constitutifs en question. Si l'on considère une sphère rattachée au repère R_s ayant un rayon égal à l'unité, la représentation du pôle $(1\,0\,0)$ est donné par la projection p sur le plan équatorial de l'intersection P entre la direction $\langle 1\,0\,0 \rangle$ et la sphère (Figure B.2).

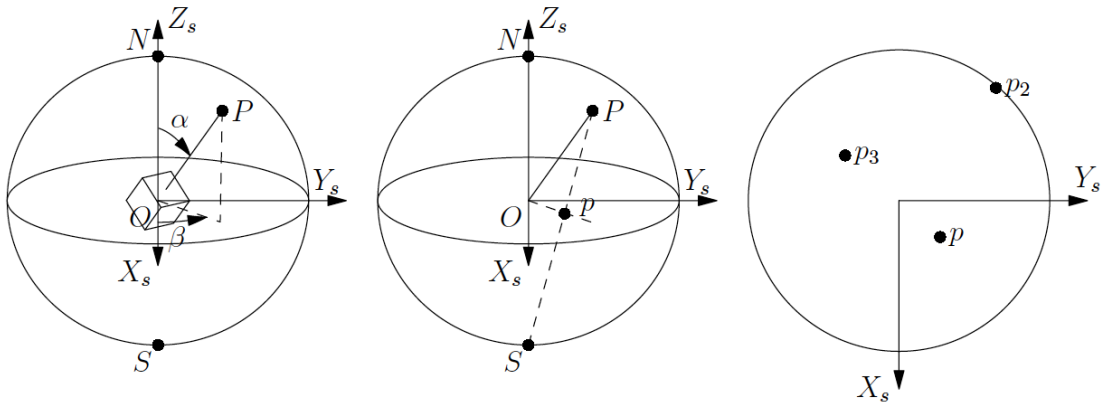


Figure B.2 – Définition d'une orientation par une figure de pôles : principe de construction d'une figure de pôles $\{1\,0\,0\}$: (gauche) Intersection du pôle avec la sphère. (milieu) Projection stéréographique sur le plan équatorial. (droite) Figure de pôles $\{1\,0\,0\}$ [19]

1. dite le plus souvent figure de pôle.

La position de P peut être donnée par des coordonnées sphériques (α, β). α est l'angle polaire de $[OP]$ par rapport à l'axe Z_s, tel que $\alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$, et β est l'angle d'azimut de $[OP]$ dans le plan de normale Z_s depuis l'axe X_s, avec $\beta \in [0, \pi[$.

Figures de pôles inverses

À contrario des figures de pôles directes, les figures de pôles inverses s'attachent à représenter certaines directions du repère R_s dans celui du cristal constitutif R_c. Autrement dit, cette approche consiste en une projection stéréographique d'une certaine direction propre à l'échantillon, notamment la direction de sollicitation, sur le plan équatorial défini par les axes [1 0 0] et [0 1 0] du cristal constitutif considéré.

Compte tenu des symétries des structures cristallines, il convient de procéder à une division de la figure de pôles inverse en un certain nombre de région équivalentes appelées triangles standards. La Figure B.3 illustre la définition d'une figure de pôles inverse et du triangle standard.

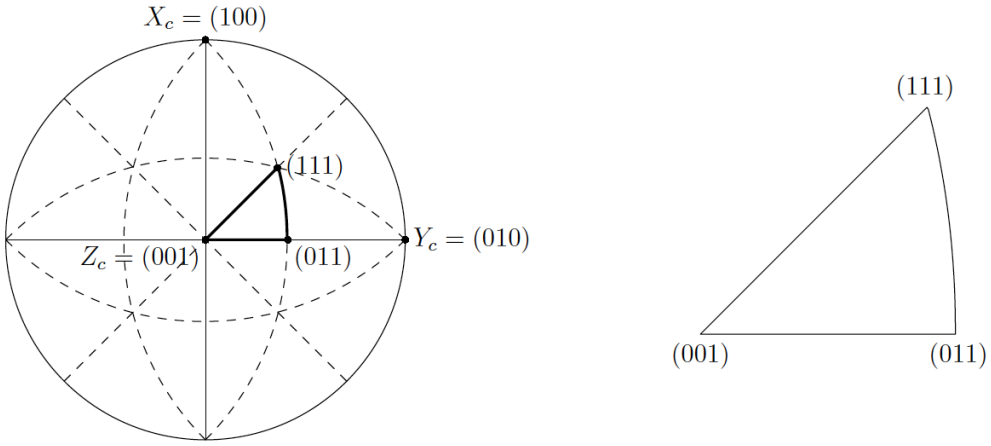


Figure B.3 – Définition d'une orientation par une figure de pôles inverse : (gauche) plan équatorial complet. Les lignes pointillées délimitent les parties équivalentes dans le cas d'un cristal de symétrie cubique. Les lignes épaisses délimitent la partie suffisante, *i.e.* (droite) le triangle standard [19]

B.4 Relation d'orientations KS

Par hypothèse, la génération des microstructures virtuelles (cf.§4.4.1 et §4.4.2) est effectuée de manière à ce que chaque grain austénitique parent comporte uniquement 24 lattes martensitiques et quatre paquets, *i.e.* six lattes de martensite par paquet. Dans le cadre de la relation KS, un paquet est défini par une relation de parallélisme entre deux plans cristallographiques donnés de la phase α' des lattes martensitiques et de la phase γ du grain austénitique parent considéré. Quant aux orientations des divers variants, celles-ci

sont données par une relation de parallélisme entre deux directions cristallographiques des phases en question (Tableau B.1).

Tableau B.1 – Orientations des divers variants au sein d'un grain austénitique parent selon la relation d'orientations KS

Paquet	Parallélisme	Variant	Parallélisme
1	$(1\,1\,1)_\gamma \parallel (0\,1\,1)_{\alpha'}$	1	$[\bar{1}\,0\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		2	$[\bar{1}\,0\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
		3	$[0\,\bar{1}\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		4	$[0\,\bar{1}\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
		5	$[1\,\bar{1}\,0]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		6	$[1\,\bar{1}\,0]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
2	$(1\,\bar{1}\,1)_\gamma \parallel (0\,1\,1)_{\alpha'}$	7	$[1\,0\,\bar{1}]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		8	$[1\,0\,\bar{1}]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
		9	$[\bar{1}\,\bar{1}\,0]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		10	$[\bar{1}\,\bar{1}\,0]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
		11	$[0\,1\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		12	$[0\,1\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
3	$(\bar{1}\,1\,1)_\gamma \parallel (0\,1\,1)_{\alpha'}$	13	$[0\,\bar{1}\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		14	$[0\,\bar{1}\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
		15	$[\bar{1}\,0\,\bar{1}]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		16	$[\bar{1}\,0\,\bar{1}]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
		17	$[1\,1\,0]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		18	$[1\,1\,0]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
4	$(1\,1\,\bar{1})_\gamma \parallel (0\,1\,1)_{\alpha'}$	19	$[\bar{1}\,1\,0]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		20	$[\bar{1}\,1\,0]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
		21	$[0\,\bar{1}\,\bar{1}]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		22	$[0\,\bar{1}\,\bar{1}]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$
		23	$[1\,0\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,\bar{1}\,1]_{\alpha'}$
		24	$[1\,0\,1]_\gamma \parallel [\bar{1}\,1\,\bar{1}]_{\alpha'}$

Annexe C

Intégration numérique du modèle de Méric-Cailletaud dans la librairie Z-MAT

Qulques éléments du schéma d'intégration numérique du modèle de Méric-Cailletaud [20,21] dans la librairie Z-MAT sont présentés dans cette annexe. Celui-ci s'attache à la méthode-θ du point milieu généralisé que l'on rappelle dans un premier temps. Dans un second point, l'algorithme d'intégration numérique est brièvement présenté dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), et ce, en illustrant les principales différences par rapport à l'approche utilisée dans ce travail.

C.1 Méthode-θ d'intégration numérique

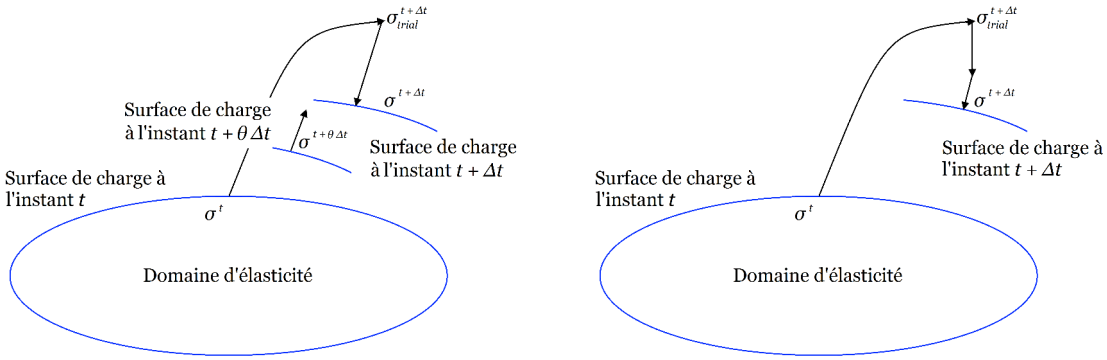
La méthode-θ d'intégration numérique se distingue en deux approches [207], à savoir la méthode-θ de point milieu généralisée et la méthode-θ de trapèze généralisé [168]. Si l'on considère une variable ϑ_{int}, la forme discrétisée de celle-ci peut être donnée respectivement par la méthode-θ de point milieu généralisée ou la méthode-θ de trapèze généralisé selon :

$$\begin{aligned} \Delta\vartheta_{int} &= \Delta t\, \dot{\vartheta}_{int}^{t+\theta\,\Delta t} \\ \Delta\vartheta_{int} &= \Delta t \left[(1-\theta)\ \dot{\vartheta}_{int}^{t} + \theta\, \dot{\vartheta}_{int}^{t+\Delta t}\right] \end{aligned} \tag{C.1}$$

Ces deux approches constituent des schémas d'intégration implicite. À noter que pour $\theta = 0$, on retrouve le schéma explicite d'Euler. Bien que certaines études s'intéressent à la stabilité et performance numérique de ces méthodes, l'erreur de troncature et la dialectique coût−pertinence du calcul sont souvent optimisées pour $\theta = 0,5$ [290].

La différence entre ces deux méthodes peut être interprétée géométrique. Si l'on considère l'algorithme basé sur le schéma de type prédiction élastique - correction plastique de Simo et Hughes [168], la correction non linéaire est effectuée selon une direction parallèle à la normale à la surface de charge à l'instant $t + \theta\,\Delta t$ pour la méthode-θ de point milieu généralisée (Figure C.1a). Dans le cas de la méthode-θ de trapèze généralisé, cette correc-

tion est effectuée selon une combinaison linéaire des normales aux surface de charge aux instants t et $t + \Delta t$ (Figure C.1b).



(a) Méthode-θ du point milieu généralisé (b) Méthode-θ de trapèze généralisé

Figure C.1 – Représentation graphique des méthodes-θ du point milieu généralisé et de trapèze généralisé

C.2 Éléments d'intégration numérique du modèle dans la librairie Z-MAT

À la différence de l'approche utilisée dans ce travail, l'algorithme d'intégration numérique du modèle de Méric-Cailletaud dans la librairie Z-MAT s'articule autour de la méthode-θ de point milieu généralisé. Le schéma de type prédiction élastique - prédiction plastique de Simo et Hughes [168] s'applique au même problème constitutif que celui utilisé dans §4.2.2, *i.e.* :

$$\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}} = \underset{\approx}{\boldsymbol{\Lambda}} : \left(\dot{\underset{\sim}{\boldsymbol{\varepsilon}}} - \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \, \mathrm{sym}\left(\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s \right) \right) \tag{C.2}$$

où les vitesses de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ représentent également les variables d'intégration. Celles-ci sont obtenues par le biais d'une procédure itérative de type Newton-Raphson (cf. §4.2.2) qui consiste à résoudre le système qui suit :

$$K \left| \frac{\Delta \gamma^s}{\Delta t} \right|^{\frac{1}{n}} - \left(\left| \tau^{s,\, t+\theta\,\Delta t} - \chi^{s,\, t+\theta\,\Delta t} \right| - r^{s,\, t+\theta\,\Delta t} - \tau_0^s \right) = o_+ \tag{C.3}$$

À l'inverse de la méthode-θ de trapèze généralisé, il est clair que le système d'équations (C.3) peut être résolu pour des valeurs de θ différentes de l'unité. Celui-ci étant de dimension inférieure au système d'équation traité dans §4.2.2, il requiert une opération supplémentaire qui consiste à trier les systèmes de glissement activés N_s. Par ailleurs, les variables forces

thermodynamiques sont données selon :

$$\tau^{s,\,t+\theta\,\Delta t} = \tau^{s,\,t} + \theta\,\Delta\tau^{s} \tag{C.4}$$

$$\chi^{s,\,t+\theta\,\Delta t} = \chi^{s,\,t} + \theta\,\Delta\chi^{s} \tag{C.5}$$

$$r^{s,\,t+\theta\,\Delta t} = Q\sum_{r=1}^{N_s} h^{sr}\,\left[1-\exp\left(-b\,\left(v^{r\,t}+\theta\,\Delta v^{r}\right)\right)\right] \tag{C.6}$$

On peut remarquer que la variable d'écrouissage isotrope à l'instant $t+\theta\,\Delta t$ $r^{s,\,t+\theta\,\Delta t}$ ne dépend pas la variable d'état associée ρ^{s}.

Concernant l'expression de la matrice jacobienne $\mathcal{J}$, celle-ci présente une forme équivalente à celle obtenue dans §4.2.2. Cependant, son obtention n'est guère aisée. on fait alors abstraction de détailler son calcul. Le lecteur intéressé peut se référer à l'étude de Musienko [248] qui illustre son calcul dans la libraire Z-MAT.

Multi-scale modelling of the nonlinear and heterogeneous behaviour of AISI H11 steel surface

Abstract

AISI H11 martensitic tool steels are critical mechanical components that behaviour during service is drastically linked to their internal structures and their possible evolution. Their manufacture processes are often at the origin of microstructural changes at the surface, namely the morphology of martensitic laths, the crystallographic orientations, the internal hardening state and the surface profile These aspects can potentially alter the mechanical performance of AISI H11 martensitic steel. In order to get better insight into and optimize its mechanical behaviour, a multi-scale approach involving an experimental investigation and a numerical treatment is taken in this work.

The experimental investigation focuses to reproduce, at the laboratory scale, equivalent surfaces to those resulting from tool steels manufacture processes. Specific characterization techniques, namely SEM, EBSD, nanoindentation and altimetry enable to highlight a stereology gradient of the material in surface and sub-surface. The induced local heterogeneities consist in morphology of martensitic laths and crystallographic orientations, internal hardening state and surface profile. In-situ mechanical tests with digital image correlation technique (DIC) are carried out for monotonous quasi-static and tension-tension cyclic loads. An investigation of the local mechanical fields at the surface is thus performed and allows to analyze the localizations schemes of nonlinear strains which are related to stereological artifacts.

The numerical treatment is focused on a multi-scale modelling, and more particularly on finite element calculations on virtual microstructures which are generated by Voronoi tesselations. The latters are carried out such that to reproduce martensitic structures and consider a specific orietentation relationship between martensitic laths and parent austenitic grains (i.e. Kurdjumov-Sachs) after the heat treatment. The constitutive equations of the (elasto-viscoplastic) crystal plasticity of Méric-Cailletaud are implemented in the finite element code Abaqus in the context of the small strain assumption and the finite strain theory. The formulation of the model in the context of finite strain theory is is given a spatial description where the notion of objective derivative, namely the so called one of Oldroyd or Truesdell, is used in such a way that such formulation is equivalent to a Lagrangian description.

The numerical treatment has allowed to qualitatively reproduce the localization patterns at the surface which have been highlighted in the experimental investigation. The influence of the different stereological parameters mentioned above on the local mechanical fields was analyzed. By this approach, it was possible to highlight some elementary mechanisms including interaction and surface effects. Finally, it was found that the inclusion of lattice rotations via the theory of finite strain allows to release certain areas of mechanical fields localization that are related to stereological artifacts.

Keywords : Multi-scale modelling, Finite element method (FEM), Crystal plasticity, Finite strain theory, Martensitic steel, Digital image correlation (DIC).

Modélisation multi-échelle du comportement non linéaire et hétérogène en surface de l'acier AISI H11

Résumé

Les outillages de mise en forme en acier martensitique de type AISI H11 sont des pièces critiques dont le comportement en service est étroitement lié à leurs structures internes et à leur évolution. Les conditions des sollicitations lors de la mise en œuvre du procédé est souvent à l'origine de modifications microstructurales en surface, à savoir la morphologie des lattes de martensite, les orientations cristallographiques, l'état d'écrouissage interne ou encore le profil de surface. Ces aspects peuvent éventuellement altérer les performances mécaniques de l'acier AISI H11. Afin d'appréhender et d'optimiser le comportement mécanique de celui-ci, une approche multi-échelle est mise en œuvre dans ce travail. Celle-ci s'articule autour d'une investigation expérimentale et d'un traitement numérique.

L'étude expérimentale s'attache à reproduire, à l'échelle du laboratoire, des surfaces équivalentes à celles issues lors des procédés de mise en œuvre des outillages. Des techniques de caractérisation spécifiques, à savoir le MEB, l'EBSD, la nanoindentation ou encore l'altimétrie permettent de mettre en évidence un gradient de la stéréologie du matériau en surface et sous-surface. Les hétérogénéités locales induites concernent la morphologie des lattes de martensite, les orientations cristallographiques, l'état d'écrouissage interne mais également le profil de surface. Des essais mécaniques in-situ associés à la technique de corrélation d'images numériques sont réalisés pour des chargements monotones quasi-statiques et cycliques de type traction-traction. Une investigation des champs mécaniques locaux en surface est ainsi effectuée, elle permet d'analyser les schémas de localisations des déformations non linéaires liés aux artéfacts stéréologiques.

Le traitement numérique s'intéresse à une modélisation multi-échelle, et plus particulièrement à des calculs par la méthode des éléments finis sur des microstructures virtuelles générées par tesselations de Voronoï. Celles-ci sont effectuées de manière à reproduire les structures martensitiques et considèrent des relations d'orientations spécifiques (Kurdjumov-Sachs) à l'issue du traitement thermique entre les lattes de martensite et le grain austénitique parent. Les équations constitutives du modèle de plasticité cristalline (élasto-viscoplastique) de Méric-Cailletaud sont implantées dans le code de calcul par éléments finis Abaqus dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP) et de la théorie des transformations finies. La formulation du modèle dans le contexte de la théorie des transformations finies est effectuée dans le cadre d'une description spatiale où la notion de dérivée objective est considérée. Celle-ci consiste en celle d'Oldroyd ou de Truesdell de manière à ce qu'une telle formulation soit équivalente à une description lagrangienne.

Le traitement numérique a permis de reproduire de manière qualitative les schémas de localisation en surface mise en évidence lors de l'investigation expérimentale. L'influence des divers paramètres stéréologiques, évoqués ci-dessus, sur les champs mécaniques locaux a été analysée. De par cette approche, il a été possible de mettre en évidence certains mécanismes élémentaires, notamment les effets d'interaction et de surface. Enfin, il a été constaté que la prise en compte des rotations des réseaux cristallins par la théorie des transformations finies permet de relâcher certaines zones de localisation des champs mécaniques autour d'artéfacts stéréologiques.

Mots-clés : Modélisation multi-échelle, Méthode des éléments finis (MEF), Plasticité cristalline, Théorie des transformations finies, Acier martensitique, Corrélation d'images numériques.