HAL
open science

Etude numérique statistique des champs locaux de contraintes en surface de polycristaux cubiques et hexagonaux en élasticité

van Truong Dang

To cite this version:

van Truong Dang. Etude numérique statistique des champs locaux de contraintes en surface de polycristaux cubiques et hexagonaux en élasticité. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechique - Poitiers, 2016. Français. NNT : 2016ESMA0003 . tel-01319944

HAL Id: tel-01319944

https://theses.hal.science/tel-01319944

Submitted on 23 May 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.

THÈSE

Pour l'obtention du Grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DE MÉCANIQUE ET D'AÉROTECHNIQUE

(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

École Doctorale :

Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Énergétique et Aéronautique

Secteur de Recherche :

Mécanique des Solides, des Matériaux, des Structures et des Surfaces

Présentée par :

Van Truong DANG

****

ETUDE NUMERIQUE STATISTIQUE DES CHAMPS LOCAUX DE CONTRAINTES EN SURFACE DE POLYCRISTAUX CUBIQUES ET HEXAGONAUX EN ELASTICITE

****

Directeur de thèse : **P. VILLECHAISE**

Co-encadrant : **L. SIGNOR**

****

soutenue le 7 avril 2016

****

JURY

E. CHARKALUK	Directeur de Recherche CNRS, Laboratoire de Mécanique de Lille	Rapporteur
M. SAUZAY	Chercheur HDR, CEA de Saclay	Rapporteur
J.-Y. BUFFIERE	Professeur, INSA de Lyon, Laboratoire MATEIS	Examinateur
F. CURTIT	Ingénieur-Docteur, EDF R&D	Examinateur
P. VILLECHAISE	Directeur de Recherche CNRS, Institut Pprime	Examinateur
L. SIGNOR	Maître de Conférences, ISAE-ENSMA, Institut Pprime	Examinateur

Table des matières

Introduction **1**

Chapitre 1 Contexte et état de l'art **5**

1.1 Introduction 6

1.2 Contexte de l'étude : Fatigue des matériaux métalliques 6
1.2.1 Introduction au phénomène de fatigue 6
1.2.2 Mécanismes d'endommagement par fatigue des matériaux métalliques 8

1.3 Microplasticité et comportement en fatigue des 2 matériaux étudiés 10
1.3.1 Aciers inoxydables austénitiques de type 316L 10
1.3.2 Alliages de Titane TA6V 20

1.4 Modélisation et simulation micromécanique d'agrégats polycristallins 31
1.4.1 Généralités 31
1.4.2 Simulation EF d'agrégats polycristallins 33

1.5 Bilan et objectifs 45

Chapitre 2 Description générale de la méthodologie de simulation **49**

2.1 Introduction 50

2.2 Définitions et notations 51
2.2.1 Opérateurs de moyennes et variances spatiales 51
2.2.2 Post-traitement d'une série de N simulations 52

2.3 Description de la série de simulations 54

2.4 Analyse de la distribution des contraintes 56
2.4.1 Analyse des contraintes à l'échelle de l'agrégat 56
2.4.2 Analyse des contraintes à l'échelle du grain central 61

2.5 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 65
2.5.1 Définition des grandeurs post-traitées 65
2.5.2 Résultats 67

2.6 Analyse d'un indicateur d'amorçage tenant compte de la contrainte normale au plan de glissement 70
2.6.1 Définition des quantités post-traitées 70
2.6.2 Résultats 74

2.7 Etude de l'influence de certains paramètres de simulations 78
2.7.1 Sensibilité à la densité de maillage 78
2.7.2 Sensibilité à la dimension de l'agrégat et au nombre de grains 79
2.7.3 Sensibilité au nombre de réalisations 80

2.8 Bilan 82

Chapitre 3 Simulations appliquées au cas des aciers austénitiques 316L 85

3.1 Introduction 87

3.2 Présentation des simulations réalisées 88
3.2.1 Orientations étudiées 88
3.2.2 Morphologies étudiées 90
3.2.3 Bilan 91

3.3 Résultats de la campagne principale de simulations 92
3.3.1 Analyse des contraintes 92
3.3.2 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 108
3.3.3 Analyse de l'indicateur d'amorçage 113

3.4 Etude des réalisations extrémales et configurations cristallographiques locales associées 116
3.4.1 Facteurs de Schmid effectif extrémaux 116
3.4.2 Analyse des configurations de voisinage 119
3.4.3 Etude de clusters de grains spécifiques 126

3.5 Analyse des champs par sous-domaines du grain central 129
3.5.1 Introduction et démarche 129
3.5.2 Analyse des contraintes 130
3.5.3 Analyse du facteur de Schmid effectif 134
3.5.4 Configurations extrémales 137
3.5.5 Analyse de l'indicateur d'amorçage 139
3.5.6 Analyse des fluctuations des champs en un point 140

3.6 Etude de l'influence de la morphologie 143
3.6.1 Description de la morphologie des agrégats 143
3.6.2 Résultats obtenus 147

3.7 Bilan 153

Chapitre 4 Simulations appliquées au cas des alliages de titane TA6V 157

4.1 Introduction 158

4.2 Simulations sur agrégats non-texturés 160
4.2.1 Présentation des simulations réalisées 160
4.2.2 Analyse des contraintes 162
4.2.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 175
4.2.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage 180
4.2.5 Etude des réalisations extrémales et configurations cristallographiques locales associées 185

4.3 Simulations sur agrégats texturés 192
4.3.1 Présentation des simulations réalisées et définition des textures 192
4.3.2 Analyse des contraintes 194

4.3.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 202
4.3.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage 204

4.4 Influence des textures sous forme de macrozones 206
4.4.1 Prise en compte simplifiée des macrozones 206
4.4.2 Analyse des contraintes au sein des grains centraux 208
4.4.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 210
4.4.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage 212

4.5 Bilan 214

Chapitre 5 Etude expérimentale de l'activation du glissement plastique du TA6V en traction monotone 219

5.1 Introduction 220

5.2 Description générale de l'essai 222

5.3 Choix et description des zones d'observation 223
5.3.1 Caractérisation de la microstructure en surface de l'éprouvette 223
5.3.2 Choix des zones d'observation 227
5.3.3 Description des 2 zones d'observations 230

5.4 Identification des systèmes de glissement activés 234

5.5 Analyse des systèmes de glissement activés à la fin de l'essai 237
5.5.1 Résultats obtenus à fort grandissement (x1000) 237
5.5.2 Résultats obtenus à faible grandissement (x150) 241
5.5.3 Influence du grandissement 243
5.5.4 Effet de la taille des nodules 244

5.6 Analyse de la chronologie d'activation du glissement en relation avec l'orientation cristallographique 245
5.6.1 Résultats obtenus à fort grandissement (x1000) 245
5.6.2 Résultats obtenus à faible grandissement (x150) 251
5.6.3 Synthèse 260

5.7 Analyse de configurations de voisinages 262

5.8 Identification de la cission résolue critique 264
5.8.1 Méthode 1 basée sur le facteur de Schmid 264
5.8.2 Méthode 2 basée sur le facteur de Schmid effectif 266
5.8.3 Méthode 3 basée sur la distribution de la cission résolue 270

5.9 Bilan 273

Conclusion 275

Annexes 280

A. Notions de cristallographie 280

A.1 Structure cristallographique, directions et plans cristallographiques 280

A.2 Description de l'orientation cristalline, angles d'Euler 281

A.2.1 Description de trois rotations successives, angles d'Euler 281

A.2.2 Matrice de passage et matrice d'orientation 281

A.2.3 Désorientation 282

A.3 Orientation des systèmes de glissement par rapport à la surface 283

A.4 Représentation graphique des orientations 284

A.4.1 Projection stéréographique 284

A.4.2 Figure de pôles directe 284

A.4.3 Figure de pôles inverse et triangle standard 285

A.5 Orientations étudiées 286

A.5.1 Orientations étudiées pour les CFC 286

A.5.2 Orientations étudiées pour les HC 288

B. Morphologies étudiées 291

C. Etude de voisinage pour les cas de texture répartie uniformément 293

D. Glissement pyramidal observé dans le chapitre 5 295

E. Aide -mémoire ……..296

Bibliographie.....298

Introduction

Les premiers stades d'endommagement par fatigue au sein des matériaux métalliques polycristallins sont pilotés entre autres par les champs mécaniques locaux se développant à l'échelle des grains en surface. La microplasticité cyclique, localisée sous forme de bandes de glissement persistantes (BGP), y joue souvent un rôle essentiel. Les premiers sites d'activation de la plasticité, et donc les sites potentiels d'amorçage de fissures, résultent de l'hétérogénéité des contraintes dues à l'anisotropie élastique cristalline et à la microstructure polycristalline.

La majeure partie de ce travail de thèse est consacrée à évaluer puis à analyser statistiquement les champs de contraintes qui se développent au sein des grains de surface de polycristaux chargés mécaniquement. Le choix réalisé dans ce travail a consisté à se concentrer uniquement sur la réponse élastique des matériaux considérés afin d'étudier les conditions d'activation du glissement plastique et leur variabilité. De façon un peu moins directe, les conséquences vis-à-vis de la formation des fissures de fatigue sont envisagées. La méthodologie retenue est basée sur la simulation numérique par éléments-finis de la réponse élastique d'un ensemble d'agrégats polycristallins dont les orientations cristallographiques sont tirées aléatoirement. Les premiers travaux de la littérature dans ce domaine, en particulier ceux de Sauzay (Sauzay 2006 et 2007) qui tiennent une place particulière pour la présente étude, ont apporté un éclairage nouveau sur l'activation de la plasticité en surface des polycristaux. En particulier, les distributions de la cission résolue au sein d'ensembles de grains de surface, par classe d'orientation, seront analysées en relation avec les configurations cristallographiques locales afin d'identifier celles qui favorisent - ou au contraire inhibent - l'activation du glissement plastique et la formation de fissures.

Ce travail sera appliqué à deux matériaux qui présentent des caractéristiques et des différenciations intéressantes du point de vue de l'étude proposée. Le premier matériau est un acier inoxydable austénitique de type 316L à structure cristalline cubique à faces centrées (CFC). Celui-ci présente un niveau d'anisotropie élastique relativement élevé, caractérisé par le rapport du module d'Young maximal et minimal du cristal environ égal à 3. En revanche, son anisotropie plastique est relativement faible compte-tenu du nombre important des systèmes de glissement équivalents potentiellement activables. Le second matériau est un alliage de titane TA6V à structure cristalline hexagonale compacte (HC) pour lequel la situation est un peu inversée. En effet, son niveau d'anisotropie élastique est plus faible (le rapport des modules vaut environ 1.5) et son anisotropie plastique est plus élevée car il existe plusieurs familles de systèmes de glissement dont les domaines d'activation, en termes d'orientation et potentiellement de cission critique, sont différents.

Ce travail comporte également une étude expérimentale de l'activation du glissement plastique au sein du TA6V. La méthodologie est basée sur l'observation des traces de glissement, lors d'un essai de traction monotone in-situ sous microscope électronique à balayage (MEB) et l'identification des systèmes de glissement activés à l'aide de l'orientation

cristallographique mesurée par la technique de diffraction des électrons rétro-diffusés (EBSD). Lors de précédents travaux réalisés sur le même matériau (Bridier 2005), il avait été montré que le glissement plastique était activé principalement suivant le plan de glissement de base et les plans prismatiques. En revanche, la caractérisation et la compréhension de l'importance relative de l'activité de glissement basal et prismatique restait incomplète. Pour le matériau considéré, l'activation du glissement plastique est significativement influencée par la présence de fines bandes, appelées « macrozones », présentant une forte texture cristallographique. Les macrozones ont également un rôle important, encore mal compris à ce jour, sur les modes d'amorçage et la durabilité en fatigue de ce matériau. Le travail réalisé vise à enrichir les données expérimentales et à les analyser à la lumière des champs mécaniques simulés.

Ce mémoire se structure en 5 chapitres.

Une revue bibliographique est présentée dans le premier chapitre. Les principaux aspects relatifs aux premiers stades d'endommagement en fatigue, qui ont motivé le présent travail, sont tout d'abord rappelés. Les informations générales sur les deux matériaux étudiés et leur microstructure polycristalline sont données. Les notions et outils de description des orientations cristallographiques, nécessaires à la compréhension des résultats présentés, sont introduits en parallèle. Ensuite, pour chaque matériau, une synthèse des résultats expérimentaux relatifs à l'activation de la plasticité et à l'amorçage des fissures de fatigue est proposée en insistant sur quelques résultats marquants introduisant les principales questions ouvertes auxquelles ce travail tentera de répondre. Enfin, une revue des approches de modélisation et de simulation des champs mécaniques au sein des polycristaux est présentée.

Dans le deuxième chapitre, la stratégie de simulation est présentée à travers un exemple détaillé. Celui-ci permet de décrire les post-traitements effectués, ainsi que certains résultats de portée générale sur la distribution des contraintes au sein des grains de surface.

Cette méthodologie est tout d'abord appliquée à l'acier austénitique 316L présentant une structure cristalline CFC (chapitre 3). Ce choix est motivé par le nombre important de travaux expérimentaux et numériques consacrés à cette classe de matériaux, ce qui permettra de mieux confronter les résultats obtenus à ceux reportés dans la littérature. Une campagne de simulations est définie afin de caractériser et analyser la distribution des champs mécaniques par classe d'orientation. L'activation de la plasticité est discutée à travers la distribution de la cission résolue, décrite par un facteur de Schmid effectif introduit par (Sauzay 2007). Parmi les différents paramètres microstructuraux étudiés, une attention particulière sera apportée aux configurations de voisinage les plus favorables ou défavorables à l'activation du glissement.

Au chapitre 4, la même approche est appliquée à la phase α de l'alliage de titane TA6V présentant une structure cristalline HC. La spécificité des matériaux hexagonaux, en termes d'anisotropie élastique et en termes de systèmes de glissement, sur les distributions des champs de cission résolue sera analysée en lien avec les résultats du chapitre précédent. La présence de textures cristallographiques sous forme de « macrozones » est également étudiée

pour comprendre leur influence sur l'activité de glissement plastique observée en surface et également sur les modes d'amorçage constatés.

Le dernier chapitre porte sur l'analyse des traces de glissement, observées en microscopie électronique à balayage lors d'un essai de traction sur l'alliage TA6V, en relation avec l'orientation cristallographique déterminée par des mesures EBSD. En particulier, les zones d'observation ont été choisies de façon à étudier le rôle de la texture, qui peut être localement très marquée pour l'alliage étudié, sur l'activation de la plasticité. L'importance du glissement basal et prismatique est caractérisée et analysée. L'identification inverse des cissions résolues critiques est réalisée en confrontant les données expérimentales relatives à l'activation du glissement aux statistiques de champs de cissions résolues simulées issues du chapitre 4.

Chapitre 1
Contexte et état de l'art

Sommaire

1.1 Introduction 6

1.2 Contexte de l'étude : Fatigue des matériaux métalliques 6
1.2.1 Introduction au phénomène de fatigue 6
1.2.2 Mécanismes d'endommagement par fatigue des matériaux métalliques..... 8

1.3 Microplasticité et comportement en fatigue des 2 matériaux étudiés 10
1.3.1 Aciers inoxydables austénitiques de type 316L 10
1.3.2 Alliages de Titane TA6V 20

1.4 Modélisation et simulation micromécanique d'agrégats polycristallins 31
1.4.1 Généralités..... 31
1.4.2 Simulation EF d'agrégats polycristallins 33

1.5 Bilan et objectifs 45

1.1 Introduction

Ce travail est consacré à l'évaluation - par simulations éléments finis en champs complets - et à l'analyse statistique des champs de contraintes qui se développent à la surface de matériaux métalliques polycristallins. Le présent travail se concentrera uniquement sur la réponse élastique du matériau. Plus précisément, l'objectif visé est d'étudier le rôle de l'hétérogénéité des contraintes, due à l'anisotropie élastique du matériau considéré et à sa microstructure polycristalline (morphologie et orientation cristallographique des grains) sur l'activation de la microplasticité et sa variabilité. Ces aspects sont notamment bien connus pour être de première importance vis-à-vis des premiers stades d'endommagement en fatigue. Comme cette dernière problématique, et plus précisément la phase d'amorçage des microfissures de fatigue, a motivé le présent travail, cette revue bibliographique commence par une brève présentation de la fatigue des matériaux métalliques (paragraphe 1.2).

Il a été choisi au cours de ce travail de s'intéresser à 2 types d'alliages très différents: d'une part, les aciers inoxydables austénitiques de type 316L et, d'autre part, les alliages de titane α/β de type TA6V. Les raisons de ce choix sont liées à des différenciations et des complémentarités portant sur:

- certaines constatations expérimentales relatives à la micro-plasticité et à la formation de fissure de fatigue en surface dans ces 2 matériaux,
- l'état de l'art actuel des approches de modélisation basées sur la simulation numérique de la réponse à différentes échelles d'agrégats polycristallins en fatigue.

Le premier aspect est présenté au paragraphe 1.3, au cours duquel on introduit également les informations et notions relatives aux 2 matériaux d'étude nécessaires pour la compréhension des travaux présentés. Le second aspect est discuté au paragraphe 1.4 où l'on décrit brièvement les outils de base des approches utilisées. Une synthèse des travaux orientés spécifiquement vers l'étude du rôle de l'anisotropie élastique cristalline est ensuite proposée.

A l'issue de cette revue bibliographique, les objectifs de cette étude seront précisés (paragraphe 1.5). Le choix des 2 matériaux sera justifié et la démarche de travail sera présentée.

1.2 Contexte de l'étude : Fatigue des matériaux métalliques

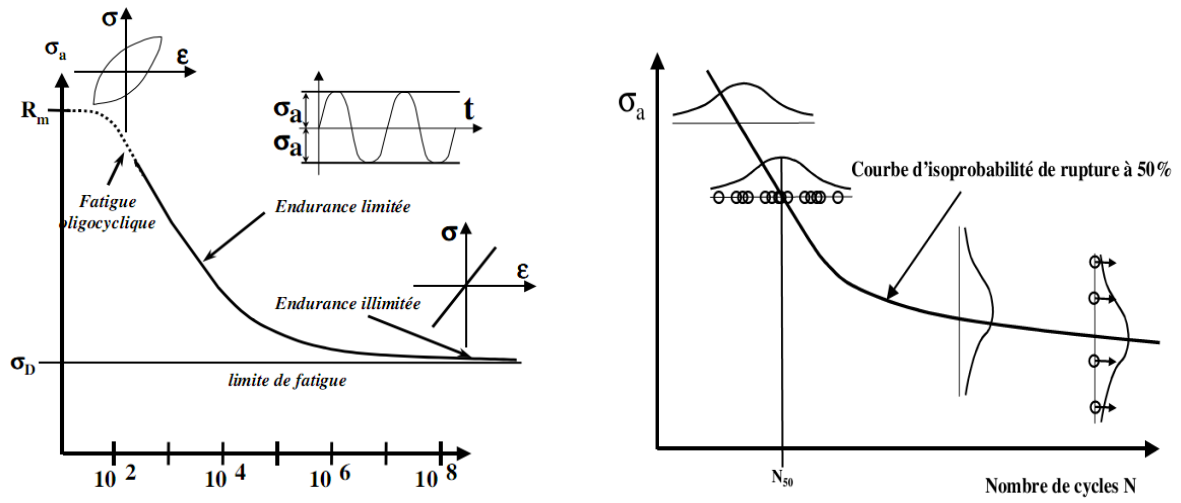
1.2.1 Introduction au phénomène de fatigue

La fatigue est un phénomène d'endommagement des matériaux soumis à un chargement mécanique et/ou thermique cyclique. La résistance en fatigue ou durabilité du matériau est souvent représentée par le diagramme de Wöhler également appelé courbe S-N, qui donne le

nombre de cycles à rupture N_f en fonction de l'amplitude de la contrainte appliquée σ_a (Figure 1-1.a). On y distingue les trois domaines usuels de fatigue :

- Le domaine de fatigue oligocyclique correspondant à un fort niveau de sollicitation. Dans ce domaine, la rupture survient rapidement et le matériau présente généralement une déformation plastique macroscopique significative.
- Le domaine d'endurance limitée (fatigue à grand nombre de cycles) où le nombre de cycles à rupture augmente rapidement lorsque le niveau de sollicitation diminue. Dans ce domaine le comportement du matériau est macroscopiquement élastique.
- Le domaine d'endurance « illimitée », pour lequel la rupture par fatigue n'a pas lieu si le niveau de sollicitation est inférieur à la limite de fatigue σ_D.

Pour certains matériaux, il n'existe pas réellement de domaine d'endurance illimitée, i.e. la limite de fatigue est nulle. De plus, en accédant à un très grand nombre de cycles (fatigue gigacyclique), la rupture peut être observée en dessous de la limite de fatigue conventionnelle.



a. b.

Figure 1-1 : Diagramme de Wöhler (Hénaff 2005).

La durée de vie en fatigue se décompose de la manière suivante. La première phase correspond au glissement plastique cyclique qui opère sous la forme d'une micro-plasticité concentrée au sein de quelques grains seulement (dans le cas de la fatigue à grand nombre de cycles) ou d'une proportion plus importante (dans le cas de la fatigue oligocyclique). Cette phase est suivie des phases d'amorçage puis de micro-propagation des fissures courtes, sur lesquelles la microstructure a une influence notable. Enfin, on entre dans la phase de propagation des fissures longues lorsque la longueur de celles-ci permet de décrire leur avancée par la mécanique de la rupture. Il est difficile de définir sans ambiguïté la transition entre ces différentes phases. Certains auteurs regroupent sous le terme de formation de fissures l'amorçage et les premiers stades de propagation. Les approches de dimensionnement en fatigue de type tolérance au dommage sont basées principalement sur la

prédiction de la phase de propagation de fissures longues lorsque celle-ci représente une proportion de la durée de vie prépondérante. Mais, pour certains matériaux, notamment à hautes caractéristiques comme les alliages de titane, et pour certaines applications à haut niveau de sécurité, le dimensionnement est basé au contraire sur le non-amorçage.

A un niveau de chargement donné, le nombre de cycles à rupture peut présenter une dispersion importante (Figure 1-1.b). Celle-ci est généralement d'autant plus marquée que le niveau de chargement est faible. Un des enjeux de ce travail est d'apporter des éléments de compréhension et de quantification du rôle de la microstructure polycristalline sur la variabilité des conditions d'activation du glissement plastique cyclique, et dans une moindre mesure sur la variabilité des conditions de création de fissures.

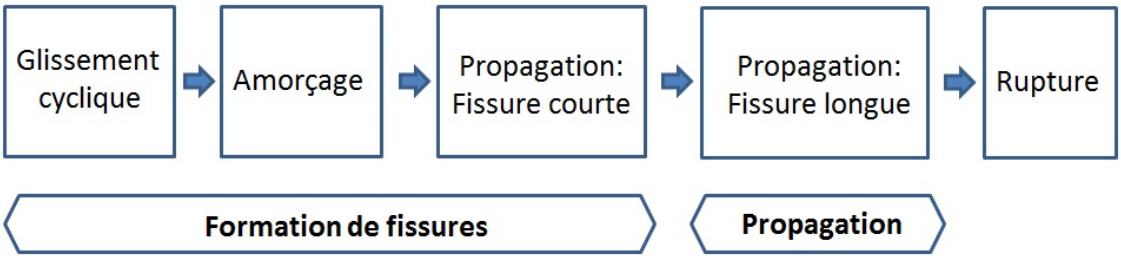


Figure 1-2 : Les différentes phases de la durée de vie en fatigue.

1.2.2 Mécanismes d'endommagement par fatigue des matériaux métalliques

Les principaux modes d'amorçage observés au sein des alliages métalliques en fonction des conditions de sollicitation et de la microstructure du matériau sont illustrés par la Figure 1-3.a. Les fissures peuvent résulter: (i) d'un amorçage transgranulaire au sein d'un grain de surface le long d'une bande de glissement, (ii) d'un amorçage intergranulaire le long de joints de grains ou de macles, ou (iii) d'un amorçage à partir de défauts comme une inclusion ou un pore.

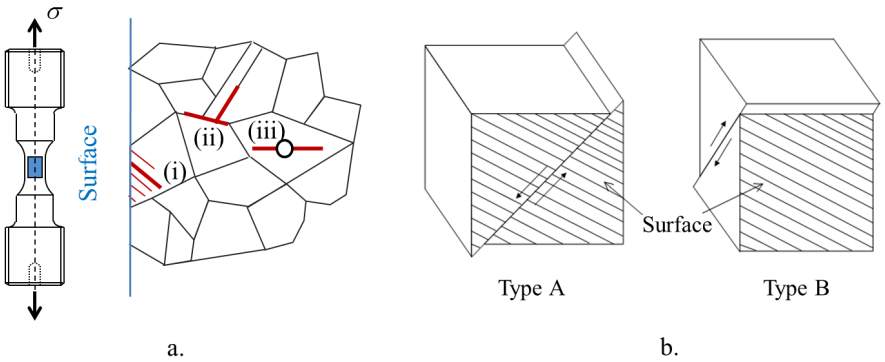
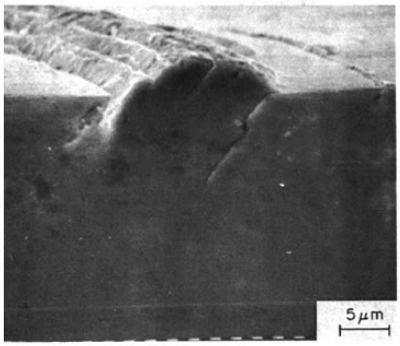
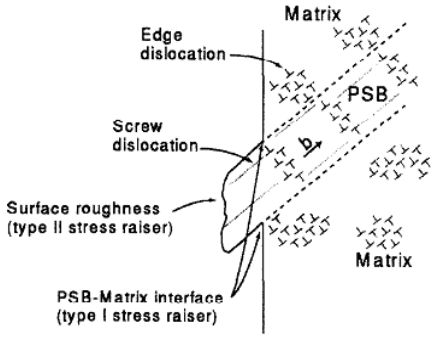


Figure 1-3 : a. Illustration des différents sites d'amorçage :(i) Fissure transgranulaire amorcée le long d'une bande de glissement, (ii) fissure intergranulaire amorcée le long d'un joint de grains ou de macle, (iii) fissure amorcée à partir de défauts ; b. Illustration des fissures de type A et type B.



a.



b.

Figure 1-4 : a. Amorçage en surface le long d'une bande de glissement persistante (Ma & Laird, 1989) b. Schéma de la structure de dislocations en échelles au sein d'une BGP (Mughrabi 1981).

Lors du chargement cyclique, le glissement plastique se localise généralement sous la forme de bandes, appelées bandes de glissement persistantes (BGP). L'émergence de ces bandes en surface conduit à la formation d'un relief qui se compose d'extrusions et/ou d'intrusions. L'amorçage est le plus souvent constaté au creux des intrusions le long de la bande de glissement (Figure 1-4.a).

Le caractère « persistant » est lié au fait que le relief ré-apparait au même endroit lorsque l'on sollicite à nouveau un échantillon fatigué après avoir poli sa surface. Ce constat est lié au développement en volume d'une structure de dislocations particulière dans la bande, dont la plus connue est la structure en échelles observée notamment dans les monocristaux de cuivre pur (Figure 1-4.b). Les principaux résultats fondamentaux relatifs à l'étude de la formation du relief (et sa transition vers l'amorçage) sont basés sur des essais réalisés sur des métaux purs à structure cubique à faces centrées (CFC) (majoritairement Cu, mais également Al et Ni) à l'état monocristallin et dans une moindre mesure à l'état polycristallin. La compréhension des structures de dislocations et de leur rôle sur la formation du relief est moins avancée dans le cas des alliages polycristallins. On notera également que le cas des métaux hexagonaux est beaucoup moins documenté que celui des CFC. Le lecteur est renvoyé à la synthèse de Man et al. (Man 2009a) ainsi qu'aux références qui y sont mentionnées.

Ce mécanisme suggère que l'amorçage le long d'une bande de glissement se produit au sein d'un grain de surface favorablement orienté pour le glissement plastique dont le plan de glissement forme un angle de 45° avec la surface afin de permettre la formation d'un relief en surface. Ceci conduit à la formation d'une fissure de type B (Figure 1-3.b), suivant la terminologie de Miller, se propageant en mode de cisaillement plan (stade 1 de la propagation) avant de s'orienter perpendiculairement à l'axe de traction pour se propager en mode d'ouverture (stade 2). Au contraire, un grain favorablement orienté de type A n'induira pas de relief en surface pour une activité plastique équivalente.

La durée de la phase d'amorçage le long des BGP est influencée par plusieurs facteurs:

- la microstructure polycristalline (morphologie et orientation cristallographique des grains, texture, ...),
- l'état de surface (rugosité, contraintes résiduelles),
- le chargement appliqué (multiaxialité, contrainte moyenne, présence de gradient...),
- l'environnement: espèce chimique (vide, air, ...), température.

La localisation sous forme de BGP constitue donc un des points clefs de la transition plasticité/endommagement à l'origine de la formation de fissures transgranulaires au sein des grains de surface. Cependant, la compréhension et la prédiction de la formation des BGP, ainsi que leur croissance, en relation avec les structures de dislocations sous-jacentes, restent à ce jour un problème scientifique non-résolu. Les travaux présentés dans ce mémoire, qui n'aborderont pas directement ces aspects, visent à évaluer les champs mécaniques à l'échelle des grains en surface d'un polycristal. De plus, il a été choisi, comme un parti pris, de limiter cette étude à la réponse élastique du matériau afin de mieux cerner la probabilité d'activation du glissement plastique en relation avec la configuration cristallographique locale. Le présent travail se positionne comme une contribution à l'étude du rôle de la microstructure polycristalline sur la variabilité des champs mécaniques locaux et à la discussion de ses implications sur l'activité plastique des grains et sa transition potentielle vers la formation de fissures. Dans ce cadre, le rôle de l'état de surface, de l'environnement et du type de chargement ne sera pas étudié dans ce travail.

1.3 Microplasticité et comportement en fatigue des 2 matériaux étudiés

L'objectif de cette section est de présenter et discuter certains travaux expérimentaux de la littérature en relation avec la micro-plasticité et l'amorçage de fissures de fatigue pour les 2 matériaux étudiés. Il ne s'agit pas de viser l'exhaustivité, mais de sélectionner quelques constats expérimentaux significatifs auxquels le présent travail apportera des éléments de compréhension, justifiant aussi le choix des 2 matériaux étudiés. Cette discussion est précédée d'une brève présentation des 2 matériaux, accompagnée de rappels relatifs aux notions et outils de base utiles à la compréhension des travaux présentés dans ce mémoire.

1.3.1 Aciers inoxydables austénitiques de type 316L

1.3.1.1 Présentation du matériau

L'acier inoxydable austénitique de type 316L est apprécié pour de nombreuses applications grâce à ses bonnes propriétés mécaniques et physico-chimiques : une bonne résistance à la corrosion et à l'oxydation, forte capacité d'écrouissage dans une large gamme de température. La composition chimique de l'acier 316L est présentée dans le Tableau 1-1.

Fe	C	Cr	Ni	Mo	Mn	Si	P	S
~ 65%	<0.03%	16-18.5%	10-14%	2-3%	<2%	<1%	<0.045%	<0.03%

Tableau 1-1: Composition chimique de l'acier 316L selon les normes RCC-MRx.

Bien qu'il puisse présenter une très faible proportion de ferrite résiduelle, le 316L est constitué principalement de la phase austénitique de structure cristalline cubique à faces centrées (CFC). Ce matériau se compose de grains dont la taille moyenne est de 30 µm environ. Il présente une proportion importante de joints de macles, induisant une texture de désorientation avec une forte concentration de désorientation à 60°. En revanche, une faible texture cristallographique est observée, conduisant à un comportement macroscopique quasi-isotrope décrit par les principales propriétés récapitulées dans le Tableau 1-2.

E [GPa]	$R_{p\,0.2}$ [MPa]	R_m [MPa]	A_r [%]
190	261	583	53

Tableau 1-2: Propriétés mécaniques du 316L déterminées par Mineur (Mineur 2000a): module d'Young E, limite d'élasticité $R_{p\,0.2}$,résistance à la rupture R_m, allongement à rupture A_r.

Les modes de déformation plastique suivants peuvent opérer au sein du 316L : le glissement des dislocations, le maclage et la transformation de phase martensitique. Dans le cas des chargements rencontrés dans le domaine de la fatigue, à température ambiante, seule la déformation par glissement des dislocations suivant les systèmes de glissement octaédriques {111} <110> est observée (Figure 1-5).

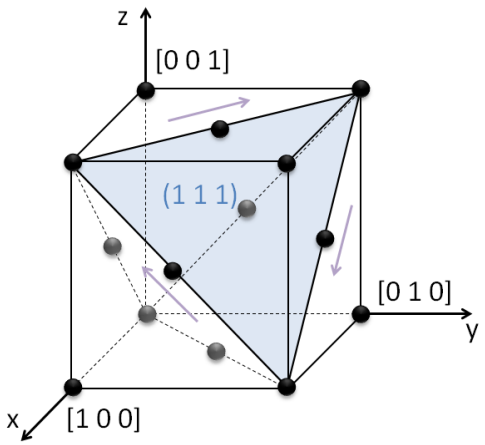


Figure 1-5 : Le réseau cristallin cubique à faces centrées (CFC) et les systèmes de glissement octaédriques {111}<110>.

Chacun des 4 plans de glissement de la famille {111} est associé à 3 directions de glissement de la famille <110>, ce qui définit les 12 systèmes de glissement octaédriques recensés dans le Tableau 1-3.

Plan de glissement	Direction de glissement	Notation
$(\bar{1}\ 1\ 1)$	$[0\ \bar{1}\ 1]$	A2
	[1 0 1]	A3
	[1 1 0]	A6
(1 1 1)	$[0\ \bar{1}\ 1]$	B2
	$[\bar{1}\ 0\ 1]$	B4
	$[\bar{1}\ 1\ 0]$	B5
$(\bar{1}\ \bar{1}\ 1)$	[0 1 1]	C1
	[1 0 1]	C3
	$[\bar{1}\ 1\ 0]$	C5
$(1\ \bar{1}\ 1)$	[0 1 1]	D1
	$[\bar{1}\ 0\ 1]$	D4
	[1 1 0]	D6

Tableau 1-3: Définition des 12 systèmes de glissement octaédriques {111}<110> pour les matériaux CFC (notation de Schmid et Boas).

Des compléments sur les notions et outils de cristallographie sont donnés en annexe A.

L'activation du glissement plastique est régie par la loi de Schmid selon laquelle aucun glissement plastique ne se développe sur un système de glissement α tant que la cission résolue (ou cission réduite) τ^{α} sur ce système est inférieure à la cission résolue critique τ_c. La cission résolue représente la projection, sur la direction de glissement, de la partie tangentielle (cisaillement) du vecteur-contrainte agissant sur le plan de glissement. Elle est définie de la manière suivante:

$$\tau^{\alpha} = \sigma_{ij} m_{ij}^{\alpha} \quad \text{avec} \quad m_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{2}\left(n_i^{\alpha} s_j^{\alpha} + s_i^{\alpha} n_j^{\alpha}\right) \tag{1-1}$$

où n_j^{α} désigne le vecteur unitaire normal au plan de glissement et s_i^{α} désigne le vecteur unitaire colinéaire à la direction de glissement du système de glissement α .

En considérant le cas d'un monocristal en traction simple (Figure 1-6), on définit le facteur de Schmid μ^{α} relatif au système de glissement α comme le rapport entre la cission résolue et la contrainte de traction:

$$\mu^{\alpha} = \frac{\tau^{\alpha}}{\sigma} = (t_i n_i^{\alpha})(t_j s_j^{\alpha}) = \cos\phi \cos\varphi \tag{1-2}$$

où σ est la contrainte de traction suivant la direction définie par le vecteur unitaire $\vec{t}$ (tel que $\sigma_{ij} = \sigma t_i t_j$). On parlera de facteur de Schmid « conventionnel » μ pour désigner le facteur de

Schmid maximal parmi les 12 systèmes de glissement : $\mu = \max_{\alpha}\left(\mu^{\alpha}\right)$. On ajoute le terme « conventionnel » pour le différencier du facteur de Schmid effectif défini ultérieurement.

Le facteur de Schmid est un paramètre purement géométrique relatif à l'orientation de la direction de traction par rapport au repère cristallin. La valeur maximale du facteur de Schmid est 0.5; elle est atteinte lorsque l'angle ϕ entre le plan de glissement et la direction de traction et l'angle φ entre la direction de glissement et la direction de traction valent 45°.

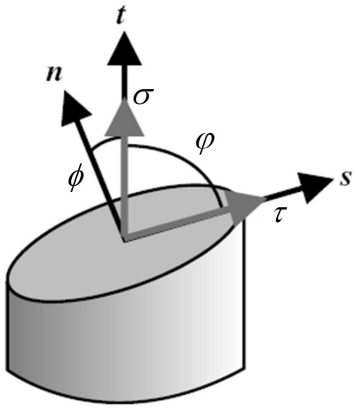


Figure 1-6 : Illustration de la loi de Schmid et de la notion de cission résolue dans le cas d'un monocristal en traction (Dunne 2005).

Le comportement élastique linéaire des matériaux présentant une symétrie cubique est décrit par les 3 coefficients indépendants C_{11}, C_{12} et C_{44} de la matrice des rigidités élastiques en notation de Voigt exprimée dans la base cristalline:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} \tag{1-3}$$

Les valeurs de ces 3 coefficients sont données pour le fer austénitique dans le Tableau 1-4 (Huntington 1958).

C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
198	125	122

Tableau 1-4 : Coefficients d'élasticité du fer austénitique.

Le module d'Young E_t d'un monocristal en traction simple suivant la direction t_i est défini par la relation suivante:

$$1/E_t = S_{ijkl}\ t_i t_j t_k t_l \tag{1-4}$$

les composantes S_{ijkl} du tenseur des souplesses élastiques étant calculées à partir des constantes C_{IJ} du Tableau 1-4.

L'orientation d'une direction donnée, par exemple la direction de traction, par rapport à la maille cristalline, peut être représentée à l'aide d'une figure de pôle inverse. Il s'agit de réaliser la projection stéréographique de la direction considérée sur le plan équatorial défini, dans le cas des structures cubiques, par les directions cristallographique [1 0 0] et [0 1 0]. En tirant partie des symétries cristallines (24 dans le cas des cubiques), le plan équatorial peut être réduit à un domaine appelé triangle standard (Figure 1-7).

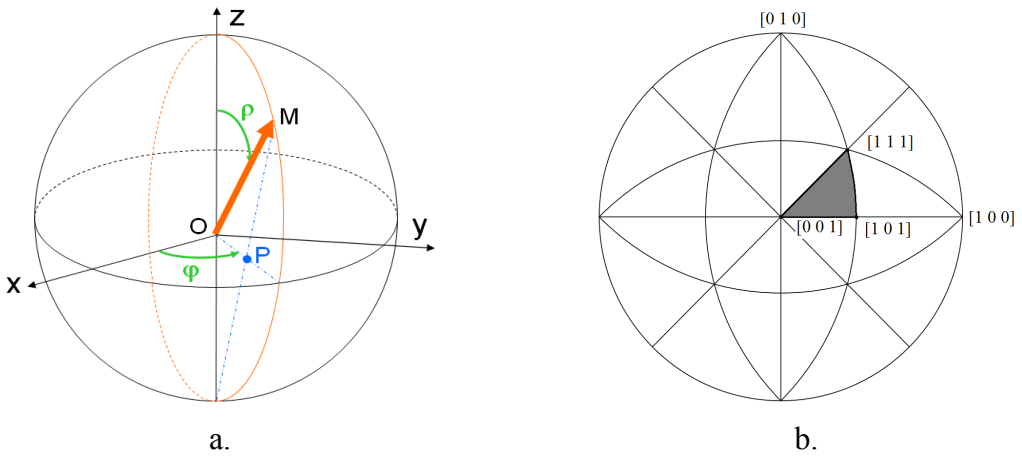


Figure 1-7 : a. Schéma de la projection stéréographique; b. Plan équatorial et triangle standard (région grisée) des matériaux cubiques (Randle 1992).

Il est possible de cartographier le triangle standard en y représentant les iso-valeurs d'une quantité associée à la direction de traction, par exemple le facteur de Schmid maximal μ et le module d'Young E_t (Figure 1-8).

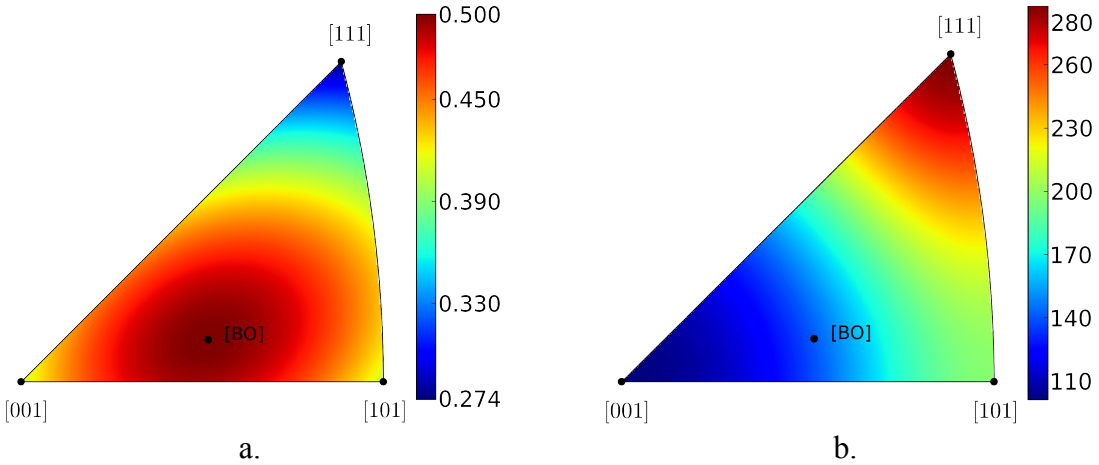


Figure 1-8 : Isovaleurs dans le triangle standard cubique : a. facteur de Schmid μ ; b. module d'Young E_t (GPa).

Ce mode de représentation sera utilisé très fréquemment dans la suite de ce mémoire. On y indiquera l'orientation des grains étudiés (que ce soit numériquement ou expérimentalement). Des compléments sur les outils de description et de représentation des orientations sont présentés en annexe A.4. Dans le Tableau 1-5, on indique, pour 4 orientations particulières, les valeurs du facteur de Schmid μ et le module d'Young E_t (que l'on peut bien sûr retrouver par lecture des triangles standards précédents).

	μ	E_t (GPa)
[1 0 0]	0.408	101
[1 1 0]	0.408	197
[1 1 1]	0.272	288
[B.O.]	0.5	141

Tableau 1-5 : Facteur de Schmid μ et module d'Young E_t pour 4 orientations particulières.

Dans le cas de l'orientation [1 0 0][1], le facteur de Schmid vaut 0.408, atteint sur 8 systèmes de glissement symétriques. Il s'agit de l'orientation qui présente le module d'Young le plus faible (101 GPa). Au contraire, l'orientation [1 1 1] présente le module maximal (288 GPa) et le facteur de Schmid le plus faible (0.272), atteint sur 6 systèmes de glissement. Le rapport entre le module maximal et le module minimal, valant environ 2.9, caractérise l'anisotropie du comportement élastique monocristallin. Il est très proche du coefficient d'anisotropie *A*, également appelé coefficient de Zener, valant 3.3, et correspondant au rapport du module de cisaillement maximal et minimal.

$$A = 2\, C_{44} / (C_{11} - C_{12}) = 3.3 \qquad (1\text{-}5)$$

Enfin, l'orientation [B.O.][2], définie telle que le facteur de Schmid soit égal à 0.5, présente un module de 141GPa.

Ces différentes orientations constituent des cas limites ou spécifiques qui encadrent toutes les autres configurations cristallographiques projetées « à l'intérieur » du triangle standard. Les informations relatives à ces orientations sont récapitulées en annexe A.5.1. La connaissance de ces valeurs caractéristiques sera utile dans l'interprétation des résultats de simulation.

[1] Plus précisément, il s'agit d'une orientation telle que l'axe de traction correspond à une direction cristallographique [100]. On rappelle que ce critère est vérifié pour une infinité d'orientations qui diffèrent uniquement d'une rotation autour de la direction [100].

[2] Cette orientation définit un monocristal particulièrement «bien orienté» pour le glissement plastique avec un facteur de Schmid maximal de la plus haute valeur possible de 0.5.

1.3.1.2 Résultats expérimentaux

Dans le cas des aciers inoxydables austénitiques de type 316L, notamment en raison de leurs applications, les travaux consacrés à la microplasticité cyclique et à l'amorçage de fissures sont plus documentés dans le cas des conditions de fatigue oligocyclique, associées à des essais de traction / compression symétrique (rapport de charge R=-1), sous air et à température ambiante. Cette brève synthèse se concentre plus particulièrement sur les travaux visant à identifier la micro-texture - ou les configurations cristallographiques locales - favorisant l'activité plastique cyclique et l'amorçage. De tels travaux sont généralement basés sur l'observation par microscopie électronique à balayage (MEB) des traces de glissement et des fissures à l'échelle des grains en relation avec l'orientation cristallographique locale mesurée par la technique de diffraction des électrons rétro-diffusés (EBSD).

On présente tout d'abord quelques résultats généraux relatifs au comportement cyclique de ce matériau. Celui-ci présente une grande ductilité associée à une forte capacité d'écrouissage (Figure 1-9). L'écrouissage cyclique présente un premier stade de durcissement suivi d'un adoucissement correspondant à la formation des bandes de glissement persistantes et à l'établissement des structures de dislocations associées.

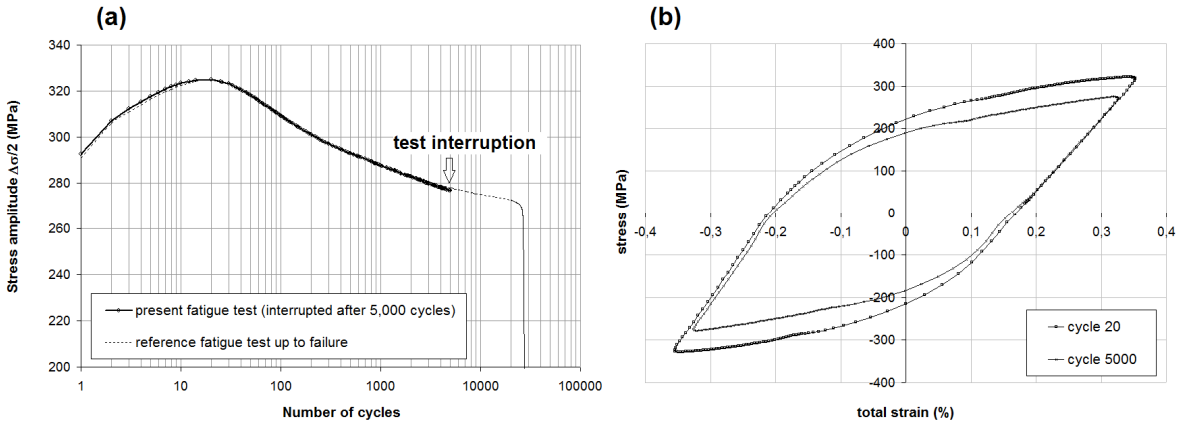
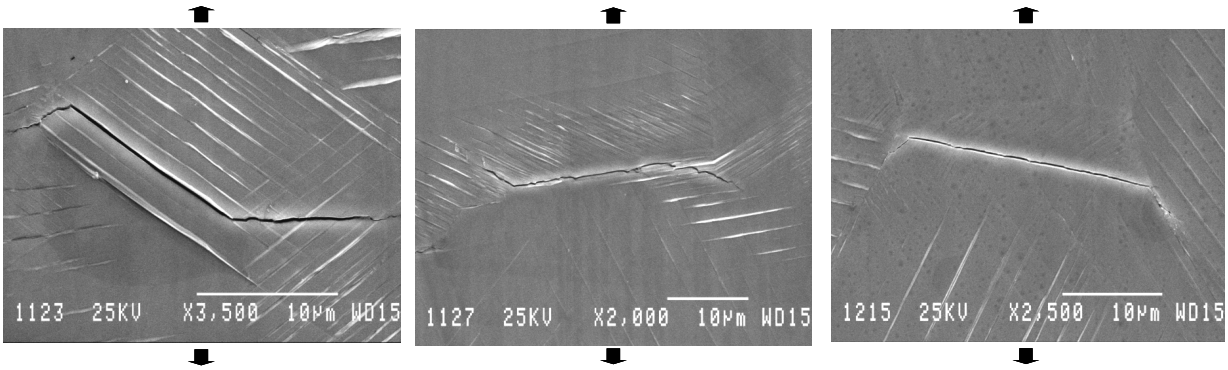


Figure 1-9 : a. Evolution de l'amplitude de contrainte pendant l'essai de fatigue ; b. Courbe de contrainte-déformation au cycle 20 et cycle 5000 (Signor 2016).

Par exemple, à $\Delta\varepsilon_p$ / 2 = 0.2%, 85% des grains présentent des traces de glissement à 20% de la durée de vie, avec en majorité un seul système de glissement activé par grain (Signor, 2016). Seulement 10% des grains présentent 2 systèmes de glissement activés. Dans des conditions proches, Man et al. (Man 2002) ont constaté des tendances similaires avec dans quelques grains (sur environ 400 étudiés) l'activation de 3 systèmes de glissement. Par ailleurs, lorsque plusieurs systèmes de glissement sont activés dans un grain, on note dans un cas sur deux que les traces de glissement de systèmes différents ne se croisent pas, ce qui signifie que l'on reste localement en configuration de glissement simple. Lorsqu'un seul système de glissement est activé, il s'agit du système primaire (système présentant le facteur de Schmid le plus élevé) dans environ 75% des cas. On constate également que les grains sans traces de glissement ne présentent pas spécialement un facteur de Schmid

particulièrement faible. Au contraire, une proportion non-négligeable de ces grains possède un facteur de Schmid supérieur à 0.45 (Man 2002, Signor 2016). L'analyse du nombre de traces par grain (Signor 2016) ou de la hauteur d'extrusion mesurée par microscopie à force atomique (AFM) (Man 2002) révèle une variabilité relativement importante de l'activité plastique, même au sein de grains d'orientation proche. En particulier, la hauteur d'extrusion semble ne pas dépendre de l'orientation du grain par rapport à l'axe de traction, i.e. de son facteur de Schmid.

Les 3 modes d'amorçage présentés ci-dessous coexistent. Ils ont été observés et quantifiés statistiquement (Mineur 2000b, Mu 2013, Signor 2016, Kamaya 2009): (a) amorçage transgranulaire le long d'une bande de glissement, (b) amorçage le long d'un joint de grains et (c) amorçage le long d'un joint de macle (Figure 1-10).



a. b. c.

Figure 1-10 : Modes d'amorçage observés au sein du 316L : a. amorçage transgranulaire le long d'une bande de glissement, b. amorçage le long d'un joint de grains et c. amorçage le long d'un joint de macles (Mineur 2000b).

En régime de fatigue oligocyclique, l'importance des fissures amorcées le long des bandes de glissement est prépondérante: elles représentent en effet environ deux tiers des fissures observées et sont à l'origine de la fissure principale. On notera, qu'en régime de fatigue à grand nombre de cycles, ces 3 modes d'amorçage coexistent mais l'amorçage aux joints de macles devient le mode d'endommagement critique. De plus, il faut également intégrer que les proportions relatives de ces mécanismes, pour un niveau de sollicitation donné, diffèrent selon les conditions d'environnement. Les processus constatés sous air et sous vide ne sont pas les mêmes. En toute rigueur, toutes les études portant sur les conditions locales favorisant l'endommagement de fatigue devraient se baser sur des expérimentations conduites sous vide, ou identifier explicitement les interactions entre déformation et processus physico-chimiques de surface (oxydation/corrosion).

L'analyse des sites d'amorçage en relation avec l'orientation cristallographique locale a conduit aux 3 tendances principales suivantes. Premièrement, l'amorçage est plus favorable au sein des gros grains (Signor 2016). Deuxièmement, le système de glissement activé dans une bande conduisant à une fissure occupe un domaine privilégié d'orientation par rapport à la surface. Celui-ci est décrit par l'angle β entre la direction de glissement (ou le vecteur de Burgers) et la normale à la surface libre, et par l'angle α entre la normale au plan de glissement et la normale à la surface libre (le calcul de ces angles sont présentés dans

l'annexe A.3). Typiquement, il a été noté que l'amorçage est favorisé pour 40° < β < 70° et 30° < α < 60° (Mineur 2000a; Mu 2013; Signor 2016), ce qui exclut les grains dont les bandes de glissement induisent un relief limité en surface. Troisièmement, (Mineur 2000a, Mu 2013) ont constaté que le facteur de Schmid sur le système de glissement associé à la fissure se situait sur une plage de valeurs relativement élevées comprises entre 0.4 et 0.5 (Figure 1-11). Cependant, il faut noter que beaucoup de grains sans fissures présentent un facteur de Schmid appartenant à cette plage. De plus, des résultats obtenus par (Signor 2016) indiquent une tendance différente où la proportion de grains avec un facteur de Schmid élevé parmi l'ensemble des grains fissurés est plus faible que dans l'ensemble des grains sans fissures (Figure 1-12.a). Ce résultat peut être visualisé dans le triangle standard où l'on remarque que les grains fissurés n'occupent pas de domaine d'orientation particulier (Figure 1-12.b).

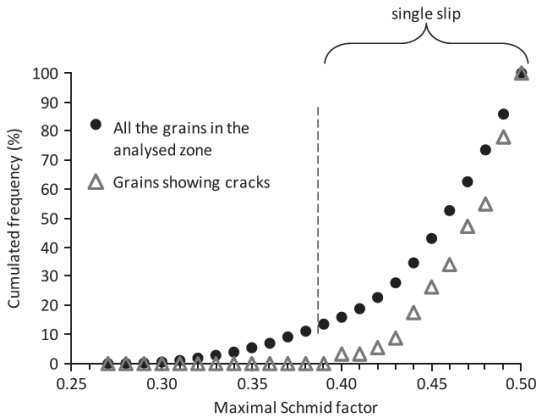
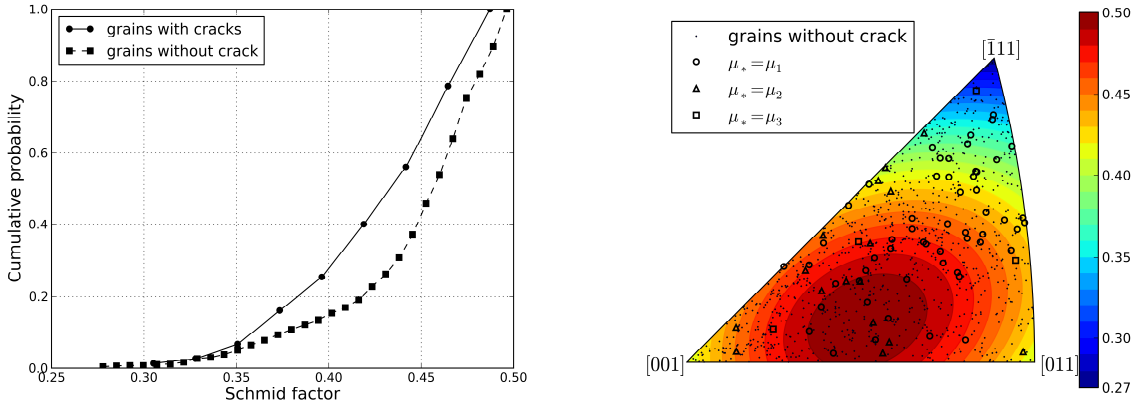


Figure 1-11 : Distribution cumulée du facteur de Schmid pour les grains fissurés comparée à la distribution pour l'ensemble des grains analysés (Mu 2013).



a. b.

Figure 1-12 : a. Distribution cumulée du facteur de Schmid pour les grains fissurés comparée à la distribution pour l'ensemble des grains sans fissure; b. Orientation des grains fissurés (grands symboles) et des grains sans fissures (petits points) dans le triangle standard en figure de pole inverse suivant la direction de traction (Signor 2016).

Ces 3 tendances ne définissent en aucun cas un critère permettant d'indiquer qu'un grain constituera ou non un site d'amorçage. En effet, il existe un nombre important de grains vérifiant ces tendances, et au sein desquels aucune fissure n'a été observée. Certains travaux suggèrent que l'amorçage pourrait être associé à une hauteur d'extrusion critique évaluée à environ 250nm pour le 316L (Osterstock 2010, Robertson 2012). Cependant, compte tenu du nombre important de traces de glissement et de la variabilité indiquée par (Man 2002) en termes de hauteur d'extrusion, il semble également probable que certaines extrusions de hauteur élevée ne produisent pas de fissure.

Ainsi, les caractéristiques des grains fissurés présentent une variabilité importante. Cette complexité contraste fortement avec la vision simplificatrice de l'amorçage au sein d'un grain de surface bien orienté dont le plan de glissement forme un angle de 45° avec la surface (grain bien orienté de type B, voir la Figure 1-3.b). De plus, des grains de caractéristiques proches présentent des réponses différentes en termes d'activité plastique et d'amorçage. Cette variabilité est le reflet de l'hétérogénéité des champs mécaniques (et du glissement plastique en particulier en raison de son rôle dans le processus d'amorçage) au sein du polycristal. L'état mécanique d'un grain dépend de ses caractéristiques propres (orientation cristallographique surtout et morphologiques) mais également des caractéristiques des grains voisins. Aucune information sur les configurations de voisinage favorisant l'amorçage n'a été établie dans les travaux mentionnés précédemment. Cela nécessiterait d'ailleurs l'étude d'un nombre très important de sites d'amorçage pour pouvoir extraire quelques tendances compte tenu de la diversité des configurations possibles. Par ailleurs, alors que seules des données de surface sont disponibles en général, l'activité plastique d'un grain doit dépendre fortement de la microstructure tridimensionnelle environnante sous la surface.

Enfin, il existe peu de données expérimentales décrivant l'hétérogénéité des champs à l'échelle du grain, en particulier dans le domaine macroscopiquement élastique où les déformations sont faibles. Les techniques de micro-diffraction de neutrons ou de rayons X permettent d'accéder à des données pour en ensemble de grains. On mentionnera les travaux de (Clausen 1999) sur un acier inoxydable austénitique. Dans le cas du cuivre pur polycristallin, l'écart-type des contraintes a été évalué à environ 6% de la contrainte moyenne de la classe d'orientation considérée pour une déformation macroscopique de 2% (Lienert 2004).

1.3.2 Alliages de Titane TA6V

1.3.2.1 Présentation du matériau

L'alliage de titane α/β TA6V considéré dans ce travail est utilisé pour des applications basse température au sein des turboréacteurs, en particulier au niveau de la partie basse pression du compresseur. Sa composition chimique est donnée dans le Tableau 1-6. Ses principales propriétés mécaniques sont indiquées dans le Tableau 1-7.

Ti	Al	V	C	Fe	O_2	N_2	Y	H_2	B	Sn+Mo+Cu+Mn+Zr
~ 89	5.5-6.75	3.5-4.5	<0.08	<0.3	<0.22	<0.05	<0.005	<0.01	<0.001	<0.2

Tableau 1-6: Composition chimique (%) de l'alliage TA6V (Bridier 2006).

E [GPa]	$R_{p\,0.2}$ [MPa]	R_m [MPa]	A_r [%]
119	940	1020	16.7

Tableau 1-7: Propriétés mécaniques de l'alliage TA6V étudié (Bridier 2006).

L'alliage TA6V étudié est composé principalement (95% en volume environ) de la phase α qui présente une structure cristalline hexagonale compacte. La fraction volumique de la phase β, de structure cubique centrée, est d'environ 5%. Cet alliage présente une microstructure de type bimodale (ou duplex) constituée de nodules de phase α primaire (~40% en volume) et de lamelles de phase α secondaire noyées dans une matrice β. Le diamètre moyen des nodules est d'environ 15µm, tandis que l'épaisseur moyenne des lamelles est d'environ 1µm (Figure 1-13).

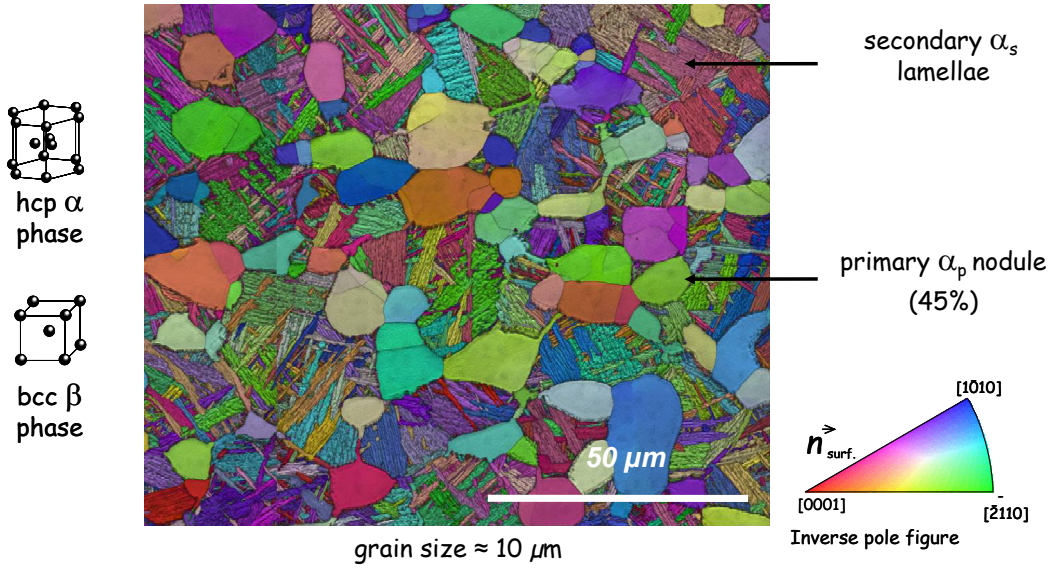
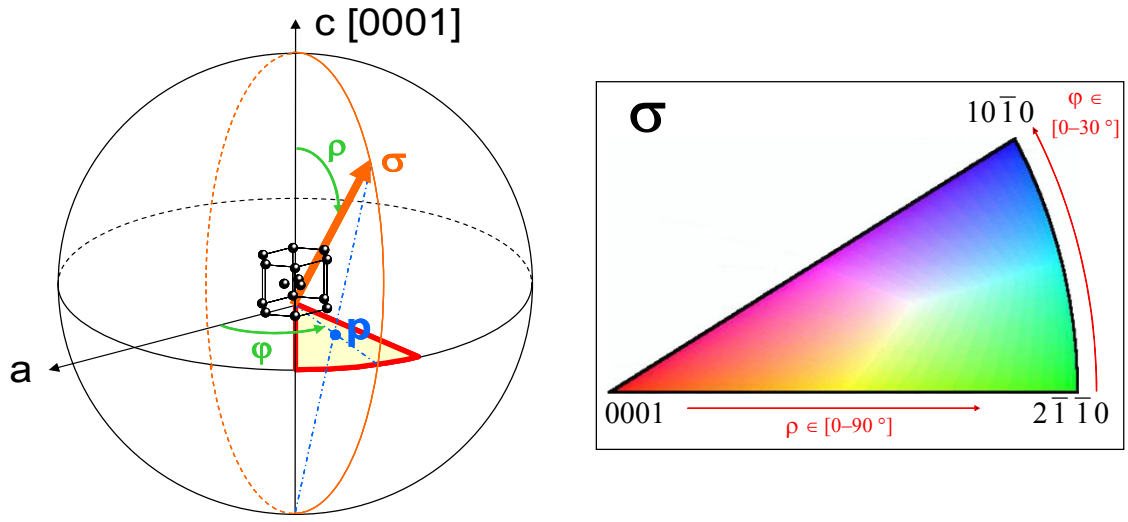


Figure 1-13 : Microstructure de l'alliage TA6V étudié.

La Figure 1-14.a illustre le processus de projection stéréographique en figure de pôle inverse dans le cas d'un matériau à structure hexagonale compacte, ainsi que la définition du triangle standard au sein du plan équatorial qui correspond alors au plan de base. Le code couleur utilisé pour cartographier le triangle standard est utilisé dans les cartographies EBSD pour visualiser facilement certaines orientations (Figure 1-14.b).



a. b.

Figure 1-14 : a. Schéma de construction des figures de pole inverse dans le cas de matériau à structure hexagonale compacte; b. Triangle standard pour les matériaux hexagonaux et code couleur EBSD associé.

La maille hexagonale compacte, illustrée sur la Figure 1-15, est notamment caractérisée par un rapport c/a de 1.588, a désignant le côté de l'hexagone dans le plan de base et c la hauteur d'un plan prismatique perpendiculairement au plan de base. Le comportement élastique linéaire est isotrope transverse d'axe c et est décrit par les 5 coefficients indépendants C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, et C_{44} de la matrice des rigidités élastiques en notation de Voigt exprimée dans la base cristalline (l'axe c correspondant à la direction 3) :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} \tag{1-6}$$

Les valeurs de ces 5 coefficients connues pour la phase α des alliages de titanes sont données dans le Tableau 1-8 (Fisher 1964).

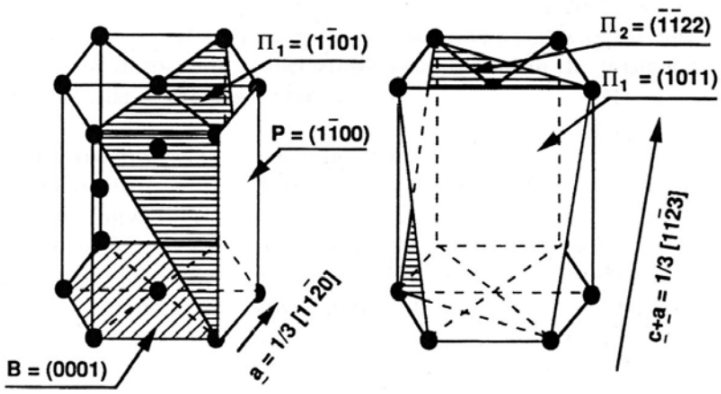
C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13}(GPa)	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)
162.4	92	69	180.7	46.7

Tableau 1-8 : 5 coefficients d'élasticité.

Au sein de la phase α hexagonale compacte, les mécanismes de déformation irréversible connus sont le glissement des dislocations et le maclage. Cependant, le maclage n'a pas été observé à température ambiante sur des alliages TA6V ou proches (Zaefferer 2003).

Les systèmes de glissement potentiels des métaux hexagonaux sont bien identifiés (Partridge 1967, Legrand 1984 et Feaugas 1997):

- une direction de glissement de type a $\langle 1\,1\,\bar{2}\,0\rangle$ associée aux plans de glissement basal (0001), prismatique $\{1\,0\,\bar{1}\,0\}$ ou pyramidal de 1ère espèce $\{1\,0\,\bar{1}\,1\}$, définissant respectivement 3, 3 et 6 systèmes de glissement (Figure 1-15.a et Tableau 1-9),
- une direction de glissement de type a+c $\langle 1\,1\,\bar{2}\,3\rangle$ associée aux plans de glissement pyramidal de 1ère espèce $\{1\,0\,\bar{1}\,1\}$ et de 2ème espèce $\{1\,1\,\bar{2}\,2\}$, définissant respectivement 12 et 6 systèmes de glissement (Figure 1-15.b et Tableau 1-9).



a. b.

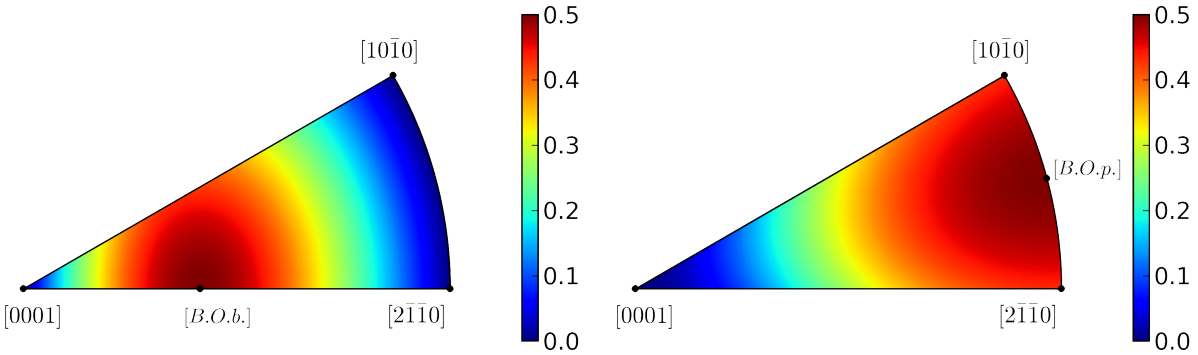
Figure 1-15 : Illustrations des systèmes de glissement des matériaux à structure cristalline hexagonale compacte (HC) : a. plans de glissement basal, prismatique et pyramidal de 1ère espèce associés à une direction de glissement de type a; b. plans de glissement pyramidal de 1ère et 2ème espèce associés à une direction de glissement de type a+c.

Le système de glissement prismatique est le plus souvent considéré comme le mode de glissement principal au sein de la phase α du titane pur et de ses alliages. L'importance du glissement basal et pyramidal est très variable dans la littérature. La diversité des configurations étudiées (en termes de composition de l'alliage, de sa microstructure, de l'état mono-, bi- ou polycristallin considéré et des conditions d'essais) ne permettent pas de dégager de tendances générales claires. On renvoie à la discussion de ce sujet par (Zaefferer 2003), (Bridier 2006) et (Poty 2011), ainsi qu'aux références des travaux qui y sont cités. A minima, il convient de considérer l'activation des systèmes de glissement dans les plans prismatiques et dans le plan de base, les études récentes permises par l'utilisation de l'EBSD montrant systématiquement au moins ces deux possibilités.

Systèmes de glissement maille hexagonale		Plan (hkil)	Direction (uvtw)
Glissement basal	type a	0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 1	1 1 -2 0 2 -1 -1 0 1 1 -2 0
Glissement prismatique	type a	1 0 -1 0 0 1 -1 0 -1 1 0 0	1 -2 1 0 2 -1 -1 0 1 1 -2 0
Glissement pyramidal première espèce	type a	1 0 -1 1 -1 0 1 1 0 1 -1 1 0 -1 1 1 1 -1 0 1 -1 1 0 1	1 -2 1 0 1 -2 1 0 2 -1 -1 0 2 -1 -1 0 1 1 -2 0 1 1 -2 0
	type c+a	1 0 -1 1 1 0 -1 1 0 1 -1 1 0 1 -1 1 -1 1 0 1 -1 1 0 1 -1 0 1 1 -1 0 1 1 0 -1 1 1 0 -1 1 1 1 -1 0 1 1 -1 0 1	2 -1 -1 -3 1 1 -2 -3 1 1 -2 -3 -1 2 -1 -3 -1 2 -1 -3 -2 1 1 -3 -2 1 1 -3 -1 -1 2 -3 -1 -1 2 -3 1 -2 1 -3 1 -2 1 -3 2 -1 -1 -3
Glissement pyramidal deuxième espèce	type c+a	1 -2 1 2 2 -1 -1 2 1 1 -2 2 -1 2 -1 2 -1 -1 2 2 -2 1 1 2	-1 2 -1 3 -2 1 1 3 -1 -1 2 3 1 -2 1 3 1 1 -2 3 2 -1 -1 3

Tableau 1-9: Définition des différents systèmes de glissement des métaux hexagonaux.

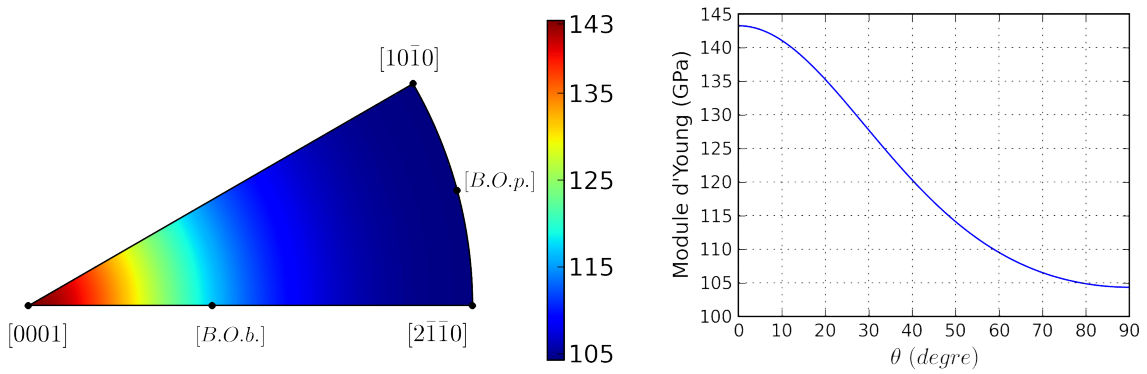
Comme cela a été fait dans le cas du 316L, on peut présenter dans le triangle standard des structures hexagonales les iso-valeurs du facteur de Schmid associé aux systèmes de glissement basal (Figure 1-16.a) ou prismatique (Figure 1-16.b).



a. b.

Figure 1-16 : Isovaleurs dans le triangle standard: a. facteur de Schmid sur le système glissement basal μ_{Basal}; b. facteur de Schmid sur le système glissement prismatique μ_{Pris}.

De même, on représente l'évolution du module d'Young E_t dans le triangle standard (Figure 1-17.a) qui ne dépend que de l'angle θ entre la direction de traction et l'axe c de la maille hexagonale (Figure 1-17.b).



a. b.

Figure 1-17 : a. Isovaleurs de module d'Young dans le triangle standard hexagonal ; b. Evolution du module d'Young en fonction de l'angle θ (°)

Le Tableau 1-10 regroupe les valeurs du facteur de Schmid μ, du module d'Young E_t et de l'angle θ associées à 5 orientations particulières indiquées sur les figures de pôle précédentes. L'orientation [0 0 0 1] présente un facteur de Schmid nul sur les systèmes de glissement basal et prismatique et présente le module d'Young le plus élevé de 143.3 GPa. Au contraire, l'orientation [B.O.p.] est favorable au glissement prismatique (μ=0.5) et présentent le module d'Young le plus faible (104.4 GPa). L'orientation qui est favorable au glissement basal ([B.O.b.]) présente un module d'Young égal à117 GPa, ce qui est proche du module macroscopique du TA6V (119 GPa). Le rapport entre le module maximal et le module minimal est environ 1.37.

	μ	E_t (GPa)	θ (°)
[0 0 0 1]	0	143.3	0
[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	0.433	104.4	90
[1 0 $\bar{1}$ 0]	0.433	104.4	90
[B.O.p.]	0.5	104.4	90
[B.O.b.]	0.5	117.0	45

Tableau 1-10 : Facteur de Schmid μ, module d'Young E_t et angle θ pour 5 orientations particulières.

On terminera cette partie relative aux informations générales sur ce matériau (et sa structure cristalline associée) par une discussion des textures cristallographiques spécifiques qu'il peut présenter. En effet, sur la cartographie EBSD de la Figure 1-18, on observe la présence de bandes texturées, appelées macrozones. La morphologie réelle des macrozones s'apparentent plutôt à des disques aplatis dont le diamètre peut atteindre plusieurs millimètres tandis que la hauteur est de l'ordre de quelques centaines de micromètres. Cette

morphologie est associée au processus de forgeage et à la forme des ex-grains β obtenus (Bridier 2006). A l'échelle de la large carte EBSD de la Figure 1-18.a, la fonction de distribution d'orientation pour la phase α présente des valeurs maximales limitées à environ 3 (indice de texture), ce qui correspond à une texture cristallographique relativement faible. En revanche une texture très marquée peut être relevée à l'intérieur des macrozones. Par exemple au sein la zone 1 de la Figure 1-18.a, un indice de texture maximal d'environ 8 est mesuré. En se basant sur le code couleur EBSD permettant de cartographier le triangle standard (Figure 1-14.b) on qualifiera la zone 1 de macrozone « rouge », cette couleur désignant une orientation pour laquelle l'axe de traction est proche de l'axe c du cristal, i.e. la direction (0001) normale au plan de base.

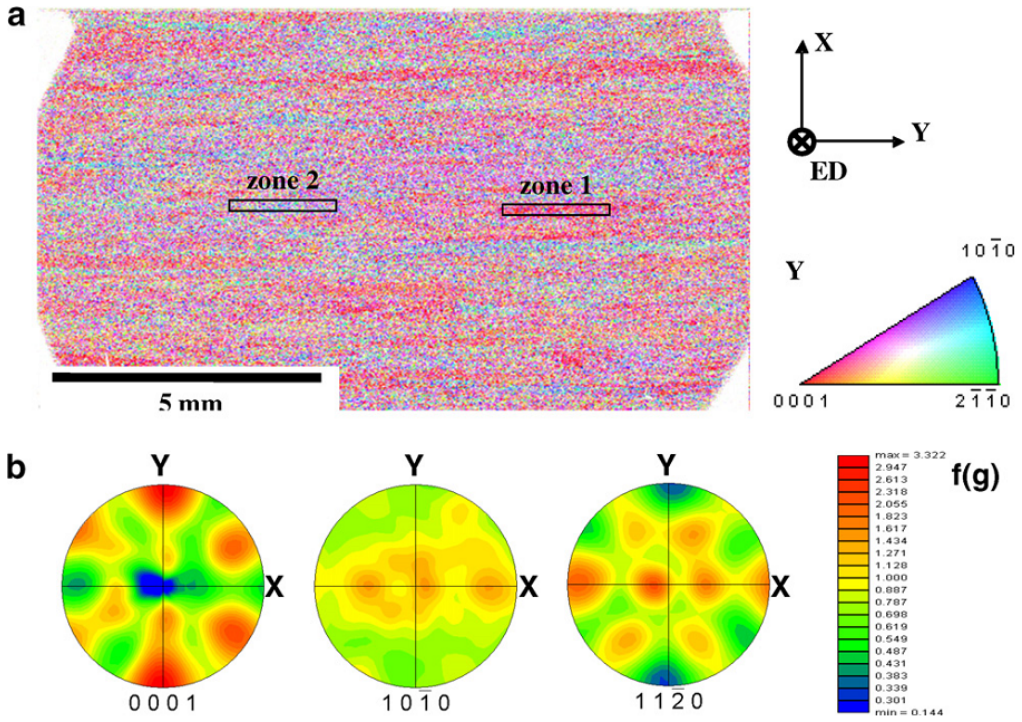


Figure 1-18 : Illustration de la texture cristallographique macroscopique de l'alliage TA6V étudié et de la présence de bandes texturées appelées « macrozones » : a. large carte EBSD ; b. figure de pôle [0001], [10-10], [11-20].

Les macrozones, dont l'origine est associée aux ex-grains β, présentent une assez grande variabilité de forme et d'intensité de texture. Elles ont été identifiées comme ayant un rôle important, encore mal compris, sur la durée de vie en fatigue et sa dispersion pour ce type d'alliages (Bridier 2008, LeBiavant 2002, Gey 2012, Bantounas 2007 et 2010).

1.3.2.2 Résultats expérimentaux

1.3.2.2.1 Résultats relatifs au comportement en fatigue

Le comportement plastique des alliages de titane est très différent de celui du 316L avec en particulier une très faible capacité d'écrouissage. Sous chargement cyclique (Figure 1-19), les boucles d'hystérésis (σ–ε) sont très fermées et ceci très rapidement lors d'essais à contrainte ou déformation totale imposées. On note parfois un adoucissement cyclique très lent et une stabilisation très rapide du comportement cyclique dans la majorité des cas.

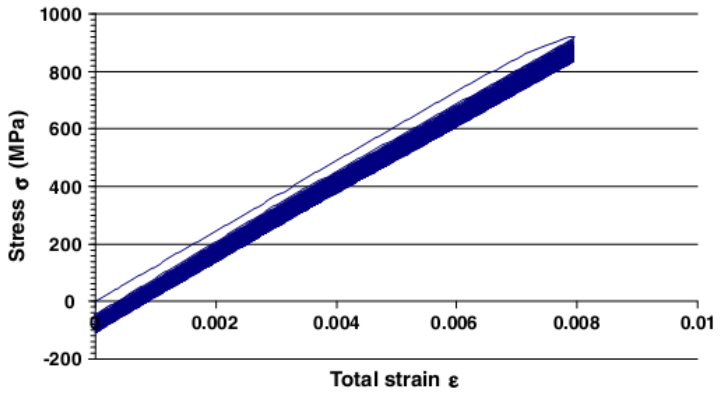


Figure 1-19 : Comportement sous chargement cyclique du TA6V, à température ambiante, déformation totale imposée 0.8% (Bridier 2007).

Un lien entre la durée de vie en fatigue, ainsi que sa dispersion, et le niveau de bruit en contrôle ultrasonore des échantillons a été constaté, comme l'illustre la Figure 1-20 (Bridier 2006, Bridier 2008). Les zones fortement bruitées (points bleus) présentent une durée de vie inférieure aux zones faiblement bruitées (points rouges), ces dernières conduisant à une dispersion plus importante. A l'aide d'analyses EBSD, le fort niveau de bruit de fond a été associé à la présence de macrozones très allongées et étroites.

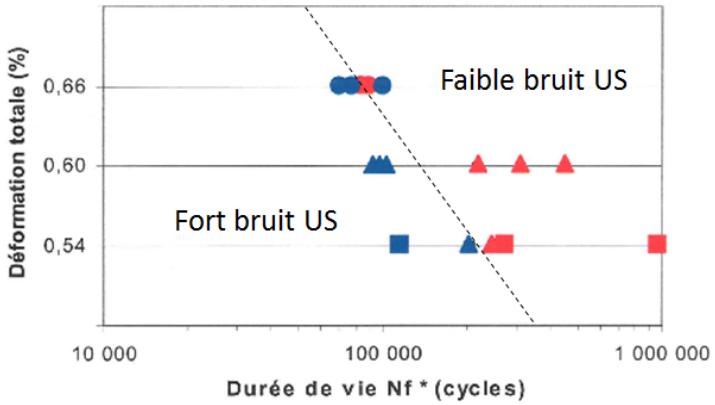
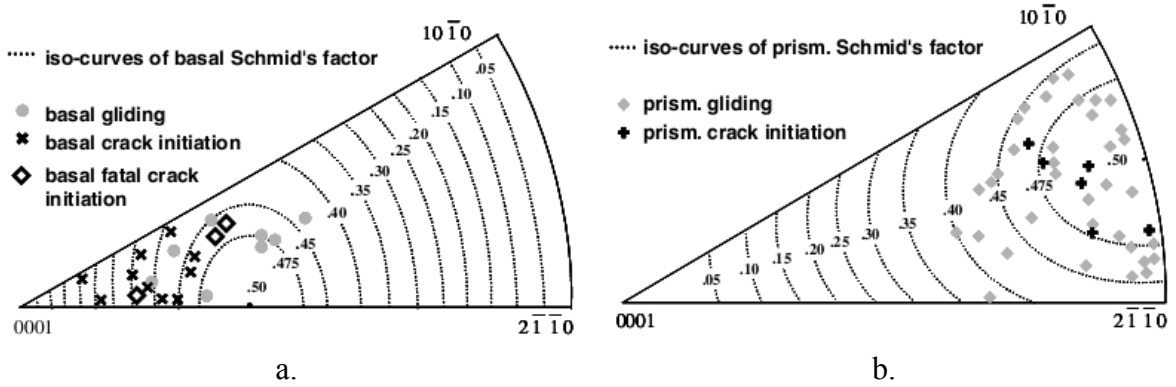


Figure 1-20 : Durées de vie en fonction du niveau de bruit en contrôle ultrasonore.

Bridier (Bridier 2006, Bridier 2008) a observé et analysé les traces de glissement et les fissures en surface après un essai de fatigue réalisé à déformation totale maximale imposée

de 0.8% (correspondant à un niveau de contraintes maximal de 920 MPa), avec un rapport de charge nul. La déformation plastique est principalement accommodée par les nodules α_p. Le glissement prismatique a été observé dans 25% de l'ensemble des nodules analysés (environ 200). Le glissement basal s'est activé dans seulement 5% des nodules analysés. Le glissement pyramidal de 1ère espèce n'a été observé que sur un seul nodule.

L'orientation des nodules au sein desquels les traces de glissement ont été observées est indiquée dans les triangles standards de la Figure 1-21. Le glissement prismatique et basal ont été constatés pour des nodules dont le facteur de Schmid est généralement supérieur à 0.4. En revanche, on gardera à l'esprit qu'une proportion non-négligeable de nodules analysés sans traces de glissement présente également un facteur de Schmid supérieur à 0.4.



a. b.

Figure 1-21 : Orientation des nodules présentant des fissures ou des traces de glissement suivant (a) les systèmes de glissement basal et (b) les systèmes de glissement prismatique (Bridier 2008).

L'analyse de 14 fissures secondaires détectées a montrée qu'elles se sont amorcées au sein de nodules suivant les plans de glissement de base (8 fissures) ou prismatique (6 fissures). Les fissures amorcées suivant un plan de base correspondent à un domaine d'orientation tel que le facteur de Schmid est supérieur à 0.2 et l'angle θ compris entre 15° et 40° environ (Figure 1-21.a). Les fissures amorcées suivant un plan prismatique occupent dans le triangle standard le domaine de facteur de Schmid supérieur à 0.47 environ (Figure 1-21.b). De plus, l'amorçage de type basal se manifeste par la formation de facettes très planes correspondant à un mécanisme qualifié de « pseudo-clivage » (Figure 1-22). Le domaine d'orientation particulier des fissures de type basal plaide également en faveur de ce type de mécanisme qui combine une activité plastique significative et une contrainte normale élevée sur le plan de base. En effet, ce domaine est globalement compris entre le pôle (0001), pour lequel le facteur de Schmid μ est nul et le module d'Young E_t est maximal, et le pôle [B.O.b.], pour lequel le facteur de Schmid est maximal et le module d'Young est moyen.

L'amorçage sur les plans de base, observé presque systématiquement au sein de macrozones « rouges », conduit à des fissures plus propagées que les fissures amorcées suivant un plan prismatique lorsque les analyses sont réalisées au même nombre de cycles. Ceci est cohérent avec l'identification des sites d'amorçage des fissures principales (fatales) toujours associée à un plan de base (Figure 1-21 et Figure 1-22). Au contraire, les fissures amorcées suivant un plan prismatique sont observées dans les macrozones de type « bleues-vertes » et restent plus confinées au sein du nodule d'amorçage. Cela suggère un amorçage plus précoce et/ou une micro-propagation plus rapide des fissures basales. Ce dernier aspect pourrait s'expliquer par la texture marquée des macrozones « rouges » qui doit probablement conduire à une texture de désorientation favorisant les faibles valeurs. Dans ce cas la propagation des fissures serait facilitée entre nodules d'orientation similaire. La coalescence de multiples microfissures basales pourrait être également mise en jeu.

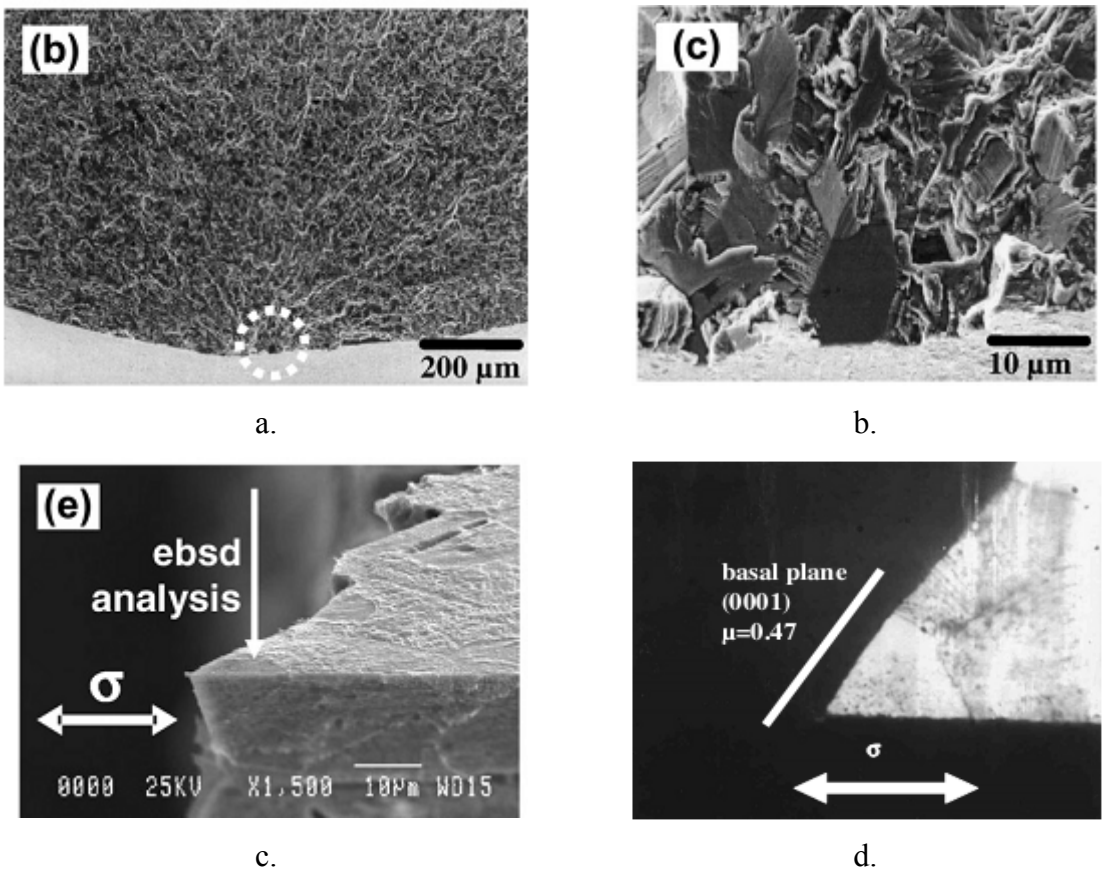
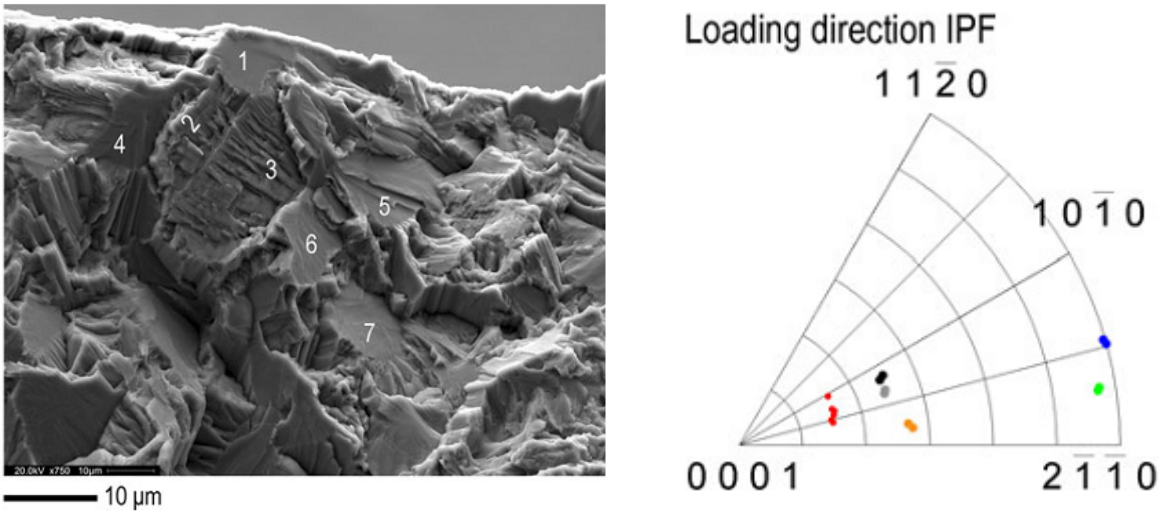


Figure 1-22 : (a-b) Identification du site d'amorçage de la fissure principale au sein d'un nodule en surface suivant une facette suggérant un mécanisme de type pseudo-clivage; (c-d) Identification du plan basal associé à la facette (Bridier 2008).

D'autres travaux ont fait état d'observations similaires relatives à l'amorçage de type « pseudo-clivage » par formation de facettes suivant les plans de base. Ces travaux s'incrivent par ailleurs dans un cadre plus général de la fatigue/fluage (effet dwell) des alliages de titane (Pilchak 2010, Jha 2012, Bantounas 2007 et 2010, Gey 2012).

Au cours des travaux de Pilchak & Williams (Pilchak 2010), l'amorçage en fatigue a été observé au sein de nodules dont l'orientation correspond au domaine identifié par

(Bridier 2006 et 2007): sur la Figure 1-23, la facette n°1 est associée au nodule d'amorçage en surface dont l'orientation correspond au point rouge sur la figure de pôles inverse. Sur le faciès de rupture, une facette associée au mécanisme de « pseudo-clivage » est bien constatée pour ce type d'orientation (facettes 1, 4, 5, 6 correspondant aux pôles rouges, noirs, gris et oranges), tandis que les régions 2 et 3, correspondant à des nodules favorablement orienté pour le glissement prismatique (points bleus et verts), ne présentent pas le même aspect. D'après ces auteurs, les facettes sont légèrement inclinées par rapport au plan de base, d'un angle inférieur à 10°.



a. b.

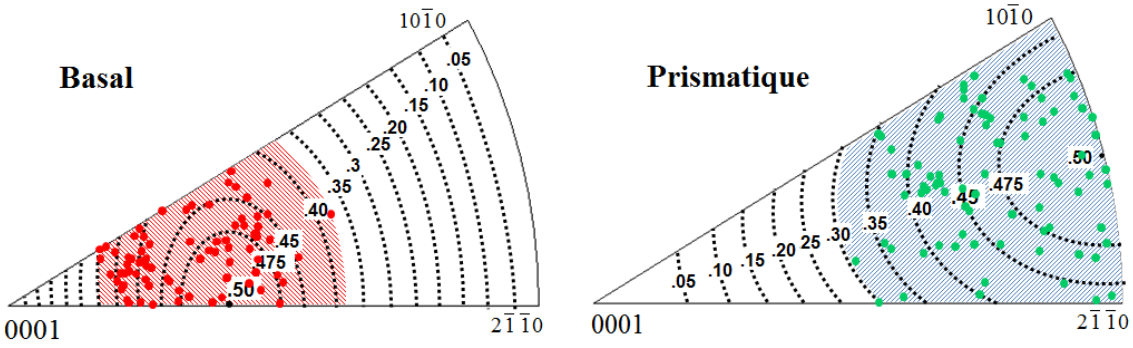
Figure 1-23 : Illustration du mécanisme d'amorçage par formation de facettes, ou « pseudo-clivage », selon les plans de base (Pilchak, 2010).

Jha et al. (Jha, 2012) ont étudié ce mécanisme d'amorçage en relation avec la dispersion des durées de vie. La plus faible durée de vie a été associée à une facette formant un angle de 30° avec la direction de traction et un angle de 10° avec le plan de base. Cette orientation est donc bien située dans le domaine identifié par (Bridier 2006 et 2007). Pour la plus haute durée de vie, des sites d'amorçage multiples ont été observés et ils correspondent à des facettes formant un angle variant de 41° à 56° avec la direction de traction. Cependant, la raison de la différence des durées de vie n'a pas pu être complètement identifiée. Enfin, Bantounas et al. (Bantounas 2010) ont observé que la formation de facettes suivant le plan de base par « pseudo-clivage » est favorisée au sein des macrozones « rouges ». Au contraire, les macrozones « bleues-vertes » sembleraient agir comme une barrière à la propagation.

Un amorçage plus facile suivant les plans de base a également été constaté au cours des travaux de LeBiavant (LeBiavant 2000). Dans ce cas, l'analyse des fissures au sein de 12 macrozones a montré qu'elles s'étaient amorcées suivant le plan de base pour 8 macrozones, et suivant un plan prismatique pour 4 macrozones. De plus, en supposant un état de contraintes uniforme et en tenant compte de l'orientation cristallographique principale des macrozones (et non l'orientation locale du nodule d'amorçage) la cission critique de formation des fissures suivant un plan de base a été évaluée à 200MPa environ, et à 320MPa pour les fissures prismatiques.

1.3.2.2.2 Activation du glissement plastique

Bridier (Bridier 2005 et 2006) a caractérisé la chronologie de l'activation du glissement plastique au cours d'un essai de traction monotone in-situ par observation et analyse des traces de glissement apparaissant successivement en surface. L'activation du glissement prismatique et basal a principalement été observée (ainsi que quelques cas de glissement pyramidal de 1ère espèce. Les premières traces ont été détectées peu avant 800MPa. A la limite d'élasticité conventionnelle (930MPa), les nodules présentant des traces de glissement prismatique ou basal occupent dans le triangle standard le domaine où leur facteur de Schmid respectif est supérieur à 0.3 (Figure 1-24). Cependant, les nodules présentant des traces de glissement basal, et dont le facteur de Schmid est compris entre 0.3 et 0.4, représentent une fraction importante des nodules activés et n'apparaissent que dans la « partie gauche » du triangle standard. On notera que ce domaine est très proche de celui identifié comme favorable à l'amorçage en fatigue suivant le plan de base. Pour la même plage de valeurs du facteur de Schmid basal située « à droite » du pôle μ = 0.5, c'est au contraire le glissement prismatique qui est observé. Cela suggère une activation plus facile du glissement prismatique. La dissymétrie de l'activation du glissement basal « à gauche » et « à droite » du pôle μ = 0.5 est relié à l'évolution du module d'Young E_t.



a. b.

Figure 1-24 : Orientation des nodules présentant des traces de glissement basal (a) et prismatique (b) (Bridier 2006).

En suivant, l'hypothèse de contraintes homogènes et en tenant compte de l'orientation cristallographique de chaque nodule, une contrainte critique d'activation peut être calculée pour chaque nodule. Cette valeur est obtenue en multipliant la contrainte de traction macroscopique à partir de laquelle la trace correspondante a été détectée par le facteur de Schmid du système activé. En moyenne, Bridier (Bridier 2006) a obtenu une cission critique de 373MPa pour le glissement basal et 384 MPa pour le glissement prismatique. Ces valeurs moyennes sont associées à des écarts-types relativement important de 45 MPa (basal) et 34 MPa (prismatique). Sous les mêmes hypothèses et sur la base d'observation en microscopie à transmission, (Zaefferer 2003) a conclu que la cission critique sur le plan prismatique est légèrement plus faible que la cission critique sur le plan de base ou pyramidal de 1ère espèce. De même, Szczepanski et al. (Szczepanski 2013), lors d'essais de traction monotone et cyclique in-situ sur micro-éprouvette de diamètre de la partie utile de

20µm, ont observé du glissement prismatique et basal, le premier étant légèrement prépondérant. L'importance relative de l'activation du glissement basal et prismatique est principalement gouvernée par deux effets. Le premier est la différence des cissions résolues critiques sur ces deux types de systèmes de glissement. Aucune donnée fiable n'est accessible à ce jour pour l'alliage considéré. Le second est la différence des contraintes, et donc des cissions résolues, subies en moyenne par les orientations favorisant chaque type de systèmes en raison de l'anisotropie élastique. La présence de texture cristallographique influence également les champs locaux de cissions.

1.4 Modélisation et simulation micromécanique d'agrégats polycristallins

1.4.1 Généralités

1.4.1.1 Modélisation du monocristal

Dans cette section, on présente brièvement le formalisme général de l'élasto-(visco-) plasticité cristalline dans le cadre de la mécanique des milieux continus où le point matériel représente un élément de cristal au sein d'un monocristal ou au sein d'un grain d'un polycristal. Compte-tenu des conditions de chargement considérées dans ce travail, on se limitera au cadre des petites perturbations (Fivel 2004).

La déformation totale est décomposée comme la somme de la déformation élastique et de la déformation permanente (plastique ou viscoplastique):

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^{e} + \varepsilon_{ij}^{p} \tag{1-7}$$

Le comportement élastique est décrit par

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{e} \tag{1-8}$$

la forme du tenseur C des rigidités élastiques d'ordre 4 ayant été donnée en notation de Voigt dans le cas des symétries cubiques et isotropes transverses (Eq. 1-3 et 1-6).

La contribution de chaque système de glissement à la déformation plastique est décrite par la relation suivante:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{p} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} m_{ij}^{\alpha} \quad \text{avec} \quad m_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{2}\left(n_i^{\alpha} s_j^{\alpha} + s_i^{\alpha} n_j^{\alpha}\right) \tag{1-9}$$

où $\dot{\gamma}^{\alpha}$ représente le taux de glissement plastique sur le système de glissement α dont le tenseur d'orientation est m_{ij}^{α}.

Le domaine d'élasticité est décrit par la loi de Schmid:

$$\tau^{\alpha} < \tau_c \tag{1-10}$$

où τ^{α} représente la cission résolue définie par

$$\tau^{\alpha} = \sigma_{ij} m_{ij}^{\alpha} \tag{1-11}$$

et τ_c la cission résolue critique.

Les lois d'écoulement les plus couramment utilisées correspondent à une formulation visco-plastique et peuvent être divisées en 2 principales familles d'approche (Fivel 2004):

- les approches phénoménologiques, basées sur une formulation visco-plastique macroscopique écrite à l'échelle des systèmes de glissement (Méric 1991a et b, Guilhem 2011, McDowell 2008)
- les approches dites « physiques » écrites en termes de densité de dislocations (Tabourot 1992, Schwartz 2011).

Un écrouissage isotrope et/ou cinématique peut être défini pour chaque système de glissement avec ou sans interactions entre systèmes.

Ce type d'approche décrit une plasticité « diffuse » qui ne peut pas rendre compte, en l'état, de la localisation du glissement plastique, en particulier sous la forme de bande de glissement persistante. La modélisation et la simulation numérique de la formation et/ou de l'évolution des BGP reste une question ouverte (Repetto 1997, Liu 2013, Zhang 2010). A une échelle plus fine, la dynamique des dislocations a permis d'obtenir, à l'échelle d'un grain, des résultats pertinents sur la formation des BGP et du relief induit en surface notamment dans le cas du 316L (Déprés 2006).

1.4.1.2 Modélisation du polycristal

Les techniques de transition d'échelles, employées dans la théorie de l'homogénéisation, ne donnent en général accès qu'aux champs mécaniques moyens par phase, c'est-à-dire par ensemble de grains de même orientation cristallographique. On parle alors d'approches en champs moyens. L'approche auto-cohérente, qui s'appuie sur la solution du problème d'inclusion d'Eshelby, est la plus adaptée au cas du polycristal. Bien qu'elle puisse fournir des évaluations fiables des champs moyens - voir par exemple (Brenner 2009, Priser 2011) en élasticité - celle-ci ne permet pas en général de prédire la dispersion des champs au sein d'un grain ou entre 2 grains de même orientation mais de voisinage granulaire différent. De plus, ce type d'approche ne permet pas de prendre en compte les effets de surface libre (Sauzay 2002). A partir des travaux initiés par Dang Van (Dang Van 1999) basés sur le concept d'adaptation élastique à l'échelle des grains, certains critères de fatigue, ou modèles d'endommagement, basés sur une telle approche multi-échelles ont vu le jour (Cano 2004, Monchiet 2008).

A partir de ces approches, des enrichissements permettent toutefois d'accéder à des données sur la dispersion des champs. Brenner et al. (Brenner 2009) ont montré qu'il est possible d'estimer de façon fiable l'écart-type des contraintes par phase, en élasticité, dans le

cadre d'une modélisation auto-cohérente. Cependant, il s'agit d'une information très globale de la dispersion d'un ensemble de grains sans lien direct avec les configurations locales de grains qui conduisent à des contraintes faibles ou élevées. Pourian et al. (Pourian 2014) ont combiné l'approche auto-cohérente et la technique d'automate cellulaire dans le cas des alliages de titane afin de rendre compte d'une variabilité des champs d'un grain associé à une configuration particulière de grains voisins. Les résultats obtenus sont globalement en assez bon accord avec ceux obtenus par éléments-finis.

L'accès aux champs locaux nécessite, par une approche dite en « champs complets », la description explicite de la microstructure polycristalline, i.e. la description individuelle des grains (forme et orientation cristallographique) du polycristal. La résolution du problème micromécanique nécessite des méthodes numériques comme la méthode des éléments-finis EF). Les méthodes basées sur la transformée de Fourrier rapide (Brenner 2009) sont reconnues pour leur efficacité. Cependant, elles nécessitent l'emploi d'une microstructure et de conditions aux limites périodiques ce qui ne permet pas classiquement de rendre compte d'une surface libre.

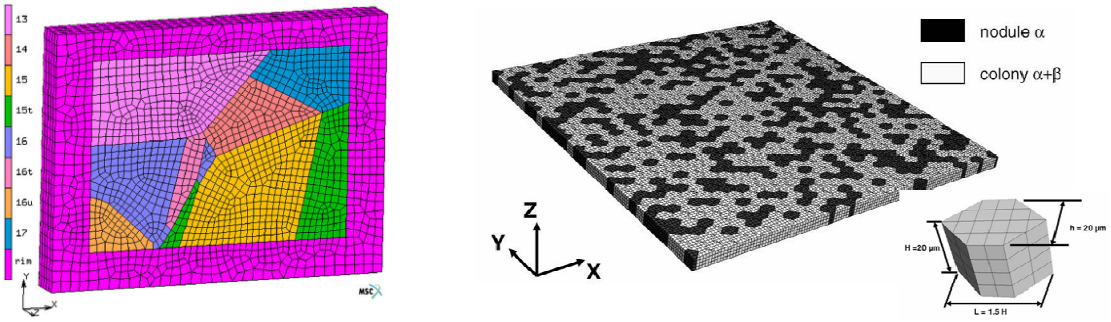
1.4.2 Simulation EF d'agrégats polycristallins

1.4.2.1 Morphologie et maillage des agrégats, conditions aux limites

Les différents types d'agrégats et de maillages peuvent être classés en fonction de :

- la dimension des agrégats (2D ou 3D),
- l'origine des données ayant servi à leur définition; la microstructure pouvant être identifiée expérimentalement en 3D, générée par un modèle (différentes approches conduisent alors à différents niveaux de description morphologique) ou par des approches mixtes,
- la description des grains (par une carte de voxels ou par des entités géométriques explicites).

En effet, la description peut se faire soit en 2 dimensions (2D), sous l'hypothèse de contraintes ou déformations planes ou déformations planes généralisées (appelés 2D et demie (Guerchais 2014)), soit en 3 dimensions (3D). Certains agrégats 3D sont construits par extrusion de données 2D : on parlera d'agrégats 2D extrudés (Figure 1-25). Cette description peut être adaptée dans le cas de microstructures dites colonnaires ou lorsque l'épaisseur de l'éprouvette considérée est inférieure à la taille des grains. En général, elle est insuffisante car la morphologie de la microstructure est intrinsèquement tridimensionnelle et qu'elle néglige la présence de grains voisins sous la surface.



a. b.

Figure 1-25 : Illustration d'agrégats 2D extrudés: a. agrégat basé sur une carte EBSD avec l'ajout d'une matrice (Bieler 2009); b. agrégat constitué d'hexagones réguliers (Bridier 2009).

L'agrégat peut être construit à partir de données expérimentales 3D ou en utilisant une méthode de génération « synthétique » (Figure 1-26).

La méthode la plus répandue pour caractériser expérimentalement un agrégat polycrystallin 3D consiste à acquérir une succession de cartes EBSD 2D suivant la profondeur en procédant à des coupes sériées (=serial-sectioning) de l'échantillon (Figure 1-26.a). Il s'agit donc d'une méthode destructive. Le retrait de matière peut s'effectuer par polissage mécanique manuel (Schwartz 2011, Signor 2016) ou quasi-automatique (Lewis 2006, Qidwai 2009). Cette méthode est coûteuse en temps (surtout par polissage manuel) en fonction du volume de la zone étudiée et de la résolution en profondeur choisie (conditionnant le nombre de polissages). Le retrait de matière peut s'opérer par faisceau d'ions (FIB) permettant d'atteindre une meilleure résolution en profondeur (Groeber 2008). Le volume analysé est typiquement un parallélépipède rectangle d'environ 50 à 100µm de côté, ce qui exclut son utilisation pour l'étude des matériaux à « gros » grains. Des approches plus récentes visent à réaliser des reconstructions de cette nature sur des surfaces importantes pouvant inclure des centaines de grains voire plus. Elles impliquent soit une ablation laser, soit un polissage contrôllé par des actions robotisées (Uchic 2011). Ces travaux restent aujourd'hui exceptionnels. Enfin, la technique de tomographie en contraste de diffraction (DCT) de rayons X permet d'accéder à une caractérisation non-destructive 3D de la morphologie et de l'orientation cristallographique locale des polycristaux (King 2010). Cette approche en plein essor aujourd'hui ne permet pas encore aisément la caractérisation fine en 3D des matériaux tels que le 316L ou le TA6V, matériaux de cette étude.

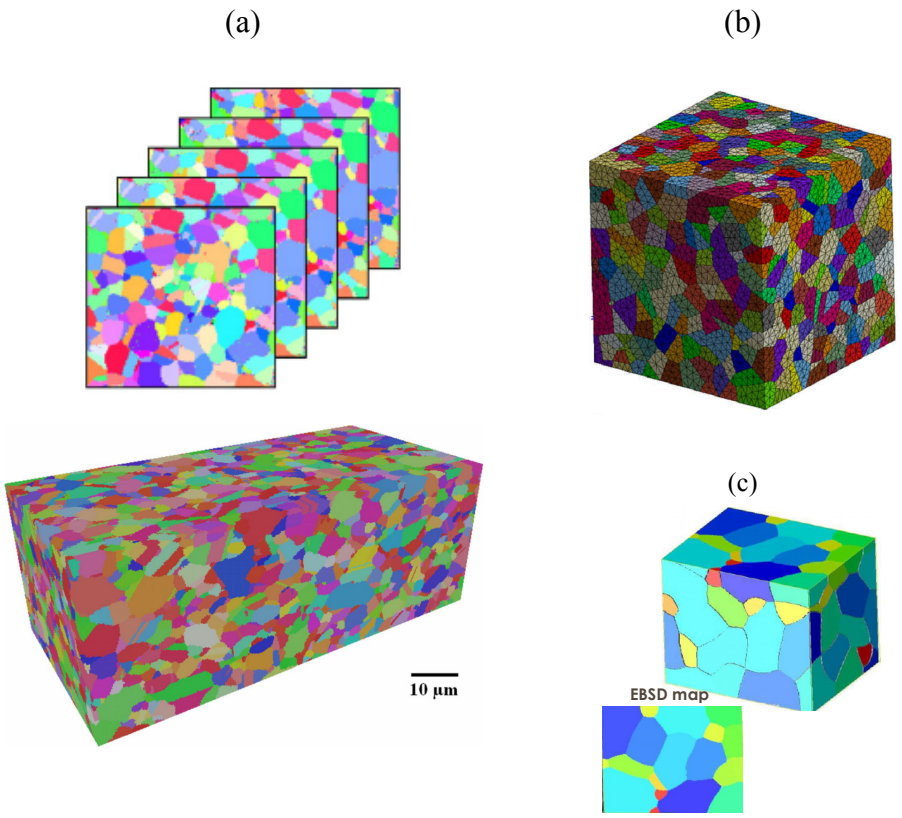
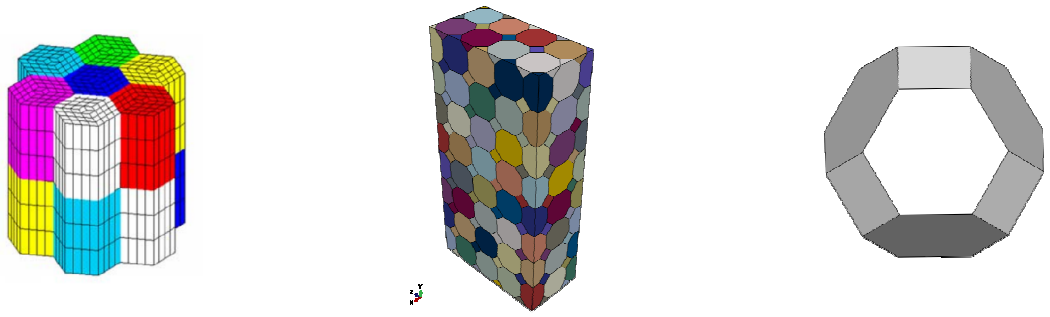


Figure 1-26 : (a) exemple d'agrégat 3D « réel » reconstruit intégralement à partir de données expérimentales 3D issues ici de coupes sériées réalisées par FIB (Groeber 2008). (b) exemple d'agrégat 3D « synthétique » généré par la méthode de Voronoï (Barbe 2009). (c) exemple de génération d'agrégat 3D « semi-synthétique » par une méthode mixte où une face, correspondant à une carte EBSD 2D expérimentale, est imposée (St-Pierre 2008).

Les agrégats « synthétiques » les plus simples sont basés sur l'utilisation d'un motif géométrique unique. Les hexagones sont souvent utilisés lors d'une description 2D (Guilhem 2010) ou 2D extrudés (Pommier 2002, Bridier 2008) (Figure 1-25.b). En 3D, les motifs trop simplistes (tétraèdre, cube ou rectangle…) sont rarement employés car ils correspondent à des morphologies et des configurations de joints de grains très particulières. Cette description peut être toutefois suffisante si l'on ne s'intéresse qu'au comportement macroscopique de l'agrégat, par exemple lors d'une procédure d'identification inverse des paramètres de la loi de comportement monocristalline (Schwartz 2011). Des agrégats 3D peuvent être construits avec des prismes hexagonaux identiques par assemblage de plusieurs couches (correspondant chacune à un agrégat 2D extrudé). La Figure 1-27.a illustre le cas d'un assemblage de deux couches effectué de manière à ce que les hexagones soient alignés en profondeur (Sauzay 2006 a et b). Cette méthode permet d'introduire simplement des grains voisins en volume, i.e. sous la couche en surface. Cependant, lorsque les couches d'hexagones sont alignées, un grain de surface n'a de contact surfacique qu'avec un seul grain de volume. Les couches d'hexagones successives peuvent être décalées. Dans les deux cas, les joints de grains sont tous perpendiculaires ou parallèles aux faces hexagonales. Les octaèdres tronqués (Figure 1-27.b-c) sont fréquemment utilisés pour générer des agrégats 3D avec un motif géométrique unique (Watanabe 2009, Guilhem 2011). Il s'agit d'un polyèdre

composé de 8 faces hexagonales et 6 faces carrées. L'agrégat ainsi constitué correspond à un cas particulier de la décomposition de Voronoï où les germes sont placés en suivant un motif cubique à faces centrées. La décomposition de Voronoï (Figure 1-26.b) est également largement utilisée pour la description des polycristaux (Barbe 2009, Quey 2011). Elle permet d'introduire une dispersion de la taille des grains. Cette méthode repose sur le placement de germes (points) permettant de définir une cellule (ou grain) comme l'ensemble des points les plus proches d'un germe donné. En 2D, les cellules sont des polygones convexes délimités par les médiatrices entre un germe et ses voisins les plus proches. Par généralisation, en 3D, les cellules sont des polyèdres convexes délimités par des plans médiateurs. Les joints de grains ne sont donc décrits que par des faces planes. Différentes stratégies ou algorithmes de placement des germes permettent de contrôler la distribution de la taille ou la forme des cellules (Luther 2009, Zhang 2011). L'introduction de textures morphologiques peut également s'effectuer en déformant le maillage d'une structure à grains initialement équi-axe et en remaillant l'agrégat (Quey 2011).



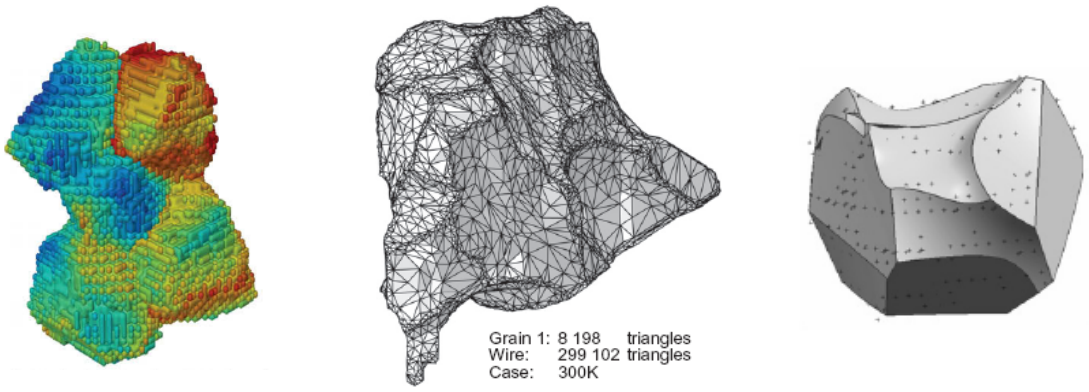
a. b. c.

Figure 1-27 : Agrégats « synthétiques » obtenus par assemblage de cellules unitaires: a. Hexagones réguliers avec plusieurs couches alignées suivant la profondeur (Sauzay 2006a); b. Assemblages d'octaèdres tronqués; c. Octaèdre tronqué.

Une dernière famille de méthode de génération consiste à placer un ensemble d'ellipses sur une surface (en 2D) ou d'ellipsoïdes dans un volume (en 3D) et à définir les cellules comme l'ensemble des points les plus proches de la frontière d'une ellipse ou ellipsoïde (Brahme 2006, Groeber 2008, St-Pierre 2008). Cette méthode permet de décrire des joints de grains par des surfaces complexes et non planes contrairement à une décomposition de Voronoï. De plus, les grains peuvent être potentiellement concaves. L'utilisation d'ellipsoïdes permet de mieux contrôler la distribution du volume des grains et de leur forme (facteur de forme, orientation privilégiée…). L'utilisation de sphères correspond à un cas particulier et peut être une solution adéquate pour la description des grains équiaxes (Guéguen 2011). Un recouvrement des ellipsoïdes peut être autorisé pour introduire une concavité plus marquée des grains. Il est possible de contraindre la position et la taille des ellipsoïdes intersectant une des faces afin de reproduire au mieux une cartographie EBSD 2D obtenue expérimentalement (St-Pierre 2008, Guéguen 2011, Signor 2016), on parlera dans ce cas d'agrégat « semi-synthétique » (Figure 1-26.c).

La description morphologique de la microstructure peut se baser sur une carte de données 3D étiquetées, ou image 3D, constituée de voxels (équivalent du pixel en 3D)

auxquels une orientation cristalline ou un numéro de grain sont assignés. Cette approche conduit à une description des joints de grains « discrétisée » ou en « marche d'escalier » conduisant à un maillage régulier (Figure 1-28.a). Des algorithmes de type marching-cubes permettent de lisser les surfaces à partir d'une image 3D et d'aboutir à un maillage tel que celui représenté sur la Figure 1-28.b (Simonovski 2011). Enfin, la morphologie du grain peut être décrite explicitement par un ensemble d'entités géométriques par une approche de type C.A.O. (Ghosh 2008), comme illustré par la Figure 1-28.c. La frontière du grain est définie par un ensemble de surfaces planes ou complexes délimitées par un contour fermé, lui-même défini par un ensemble de courbes délimitées par des points. Cette approche est plus réaliste car elle conduit à une description lisse des joints de grains.



a. b. c.

Figure 1-28 : (a) Maillage régulier (Qidwai 2009), (b) maillage des surfaces de type marching-cubes (Simonovski 2011); (c) description CAO des entités géométriques d'un grain (Ghosh 2008).

Les agrégats considérés dans ce travail représentent un volume élémentaire en surface d'un polycristal sollicité macroscopiquement en traction simple. Les conditions aux limites exactes à appliquer à la frontière de l'agrégat sont en général inconnues. Même si l'on considère un agrégat identifié expérimentalement en 3D, la définition des conditions aux limites exactes nécessite la mesure du champ de déplacement qui est, d'une part, délicate à obtenir aux échelles fines malgré les progrès récents (El Bartali 2009, Stinville 2015) et, d'autre part, limitée en général à la surface. Dans le cas où des mesures de surface sont disponibles, elles peuvent être maintenues constantes suivant la profondeur (Evrard 2010, Heripré 2007).

Lorsque les CL exactes ne sont pas connues, ou lorsque l'on considère un agrégat synthétique, les 3 stratégies les plus utilisées afin d'imposer à la microstructure un état moyen de déformation ou de contrainte sont:

- l'application de conditions aux limites uniformes en déplacement ou en contrainte
- l'application des conditions aux limites périodiques en déplacement
- l'application de conditions aux limites uniformes sur la frontière d'une matrice à l'intérieur de laquelle est plongée la microstructure étudiée. Le comportement de

la matrice doit alors être identique au comportement effectif du matériau hétérogène étudié.

Dans un contexte d'homogénéisation numérique, il a été montré que le biais introduit par les conditions aux limites périodiques, pour une taille de microstructure donnée, est plus faible que celui introduit par les conditions aux limites uniformes, même appliquées à une microstructure non-périodique (Kanit 2003). Cependant, l'application de conditions aux limites périodiques en présence d'une surface libre n'est pas possible classiquement, et nécessite des développements spécifiques (Guilhem 2011).

Guilhem a estimé, avec des simulations 3D en CL uniformes, que la région affecté par les CL est comprise entre 10 et 15µm (environ 5% des dimensions totales de l'agrégat) ce qui correspond également à environ une rangée de grains. D'autres travaux indiquent que les champs simulés dans un grain au centre d'une face libre de l'agrégat sont peu affectés si 2 à 3 grains entiers le séparent des frontières où un déplacement uniforme est appliqué (Basseville 2016).

1.4.2.2 Simulation numérique d'agrégats polycristallins en fatigue

Les travaux de simulations numériques d'agrégats polycristallins dans le cadre de la fatigue peuvent suivre 2 approches différentes:

- La comparaison directe de champs simulés au sein d'une microstructure identifiée expérimentalement avec des champs mesurés et/ou des observations des bandes de glissement et/ou de fissures.
- L'analyse de champs simulés au sein de microstructures généralement synthétiques en vue de capturer et de comprendre l'influence de certains paramètres sur la distribution d'une quantité mécanique donnée à l'échelle des grains: caractéristiques microstructurales (taille de grains, orientations, texture...), conditions de chargement... Ce type d'études paramétriques nécessite d'effectuer un ensemble de simulations correspondant, s'il s'agit d'étudier des paramètres microstructuraux, à plusieurs réalisations du polycristal.

Le premier type d'approche est à ce jour encore difficile à mettre en œuvre car l'accès à toutes les informations nécessaires à une confrontation expérience/simulation la plus directe possible (microstructure 3D, CL, ...) n'est pas aisé, voire impossible dans certaines situations. Ce travail s'inscrit dans la seconde famille d'approches dont on présente ci-dessous une brève synthèse.

Une des premières études dans ce cadre est due à (Bennett 2003). Une configuration 2D simplifiée a été utilisée, tant du point de vue géométrique (agrégat 2D à grains carrés identiques) que du maillage (un élément fini par grain) et de la loi de comportement (élasticité isotrope, plasticité cristalline avec seulement 2 systèmes de glissement effectifs) appliquée à un acier 4340. Les simulations permettent d'établir, en traction/compression ou en cisaillement, la distribution de différentes quantités mécaniques, appelées « paramètres indicateur de fatigue » (= Fatigue Indicator Parameter (FIP)): (1) l'amplitude maximale du glissement plastique, (2) une contrainte équivalente basée sur le critère de Dang Van, (3) un paramètre mixte (en glissement plastique et contrainte) de type plan critique basé sur le

critère de Fatemie-Socie. En se dotant d'une loi de propagation de fissure courte simplifiée, pilotée par ces différents FIP, la comparaison de la distribution de longueur de fissures simulée et expérimentale conduit à des résultats qualitativement cohérents pour les FIP en glissement plastique seul et celui de type Fatemie-Socie.

Sauzay & Jourdan (Sauzay 2006a) ont mis en évidence le rôle important de l'anisotropie cristalline sur l'hétérogénéité des champs de contraintes élastiques au sein des grains de surface. Un modèle 3D est utilisé (Figure 1-27.a). Bien que la plasticité cristalline ne soit pas directement prise en compte, l'implication des contraintes au sein des grains vis-à-vis de l'activation de la micro-plasticité cyclique est étudiée par la détermination des cissions résolues sur les 12 systèmes de glissement octaédriques pour des matériaux CFC de comportement élastique différent. Pour cela, la notion de facteur de Schmid apparent ou effectif est introduite (Sauzay 2007): elle est définie comme le rapport entre la cission résolue moyenne d'un grain et la contrainte de traction macroscopique. Le facteur de Schmid effectif peut également être défini pour une orientation, c'est-à-dire à partir de la cission résolue obtenue en moyenne sur un ensemble de grains de même orientation (cela permettant d'étudier la variabilité associée au voisinage particulier d'un grain). Certains résultats significatifs de ce travail seront donnés dans le paragraphe suivant consacré spécifiquement aux travaux effectués en élasticité cristalline uniquement.

Guilhem et al. (Guilhem 2010) ont analysé les mêmes paramètres que (Bennett 2003) dans une configuration 2D améliorée permettant de rendre compte d'une surface libre et avec un maillage plus fin des grains (Figure 1-29.a). L'élasticité cristalline est prise en compte, en revanche, un seul système de glissement est considéré dans la loi de plasticité cristalline: la normale au plan de glissement et la direction de glissement sont contenues dans le plan d'étude et repérées par un angle θ (Figure 1-29.b). La distribution du glissement plastique cumulé, en moyenne par grain, est analysée par classe d'orientation et par type de grains sur la base de 800 simulations (Figure 1-29.c). Compte-tenu de la configuration choisie, un grain de surface peut être soit un grain dit « ouvert » (demi-hexagone) soit un grain dit « fermé » (hexagone entier). Dans le cas de grains favorablement orientés pour le glissement plastique (i.e. θ~45°, correspondant à un facteur de Schmid égal à 0.5) ou grains « mous », les grains fermés (courbe en bleu foncé) se déforment de la même façon qu'un monocristal (courbe noire), ce qui signifie qu'ils ne subissent pas l'effet du voisinage, du moins en moyenne. Au contraire, les grains « mous » ouverts (courbe rose) présentent un glissement plastique moyen plus faible et subissent plus fortement l'effet du voisinage. Ce résultat est cohérent avec ceux obtenus en élasticité et en 3D par (Sauzay 2007) qui a montré que l'effet de voisinage réduit en moyenne (i.e. en considérant toutes les configurations de voisinage possible) la cission résolue au sein des grains favorablement orienté.

Guilhem et al. (Guilhem 2010) ont également étudié l'effet de cluster particulier de grains en considérant différentes combinaisons d'un grain en surface (ouvert ou fermé, « mou » ou « dur ») associé à une couronne de voisins « mous » ou « durs ». Un grain dur correspond à un angle θ quasiment nul, donc à un facteur de Schmid également quasiment nul, ce qui n'arrive pas dans le cas où l'ensemble des systèmes de glissement est considéré. Les champs constatés pour un type de cluster donné montrent une variabilité relativement

importante qui traduit l'influence des autres grains de l'agrégat dont l'orientation est tirée aléatoirement. La configuration définie par un grain « mou fermé » entouré de grains « durs » conduit au glissement cumulé maximal. On notera que le rôle de l'anisotropie élastique est délicat à interpréter pour cette configuration 2D simplifiée à un seul système de glissement. En effet, l'évolution du module d'Young E_t et du facteur de Schmid μ n'est visiblement pas la même que dans une configuration 3D avec l'ensemble des systèmes de glissement.

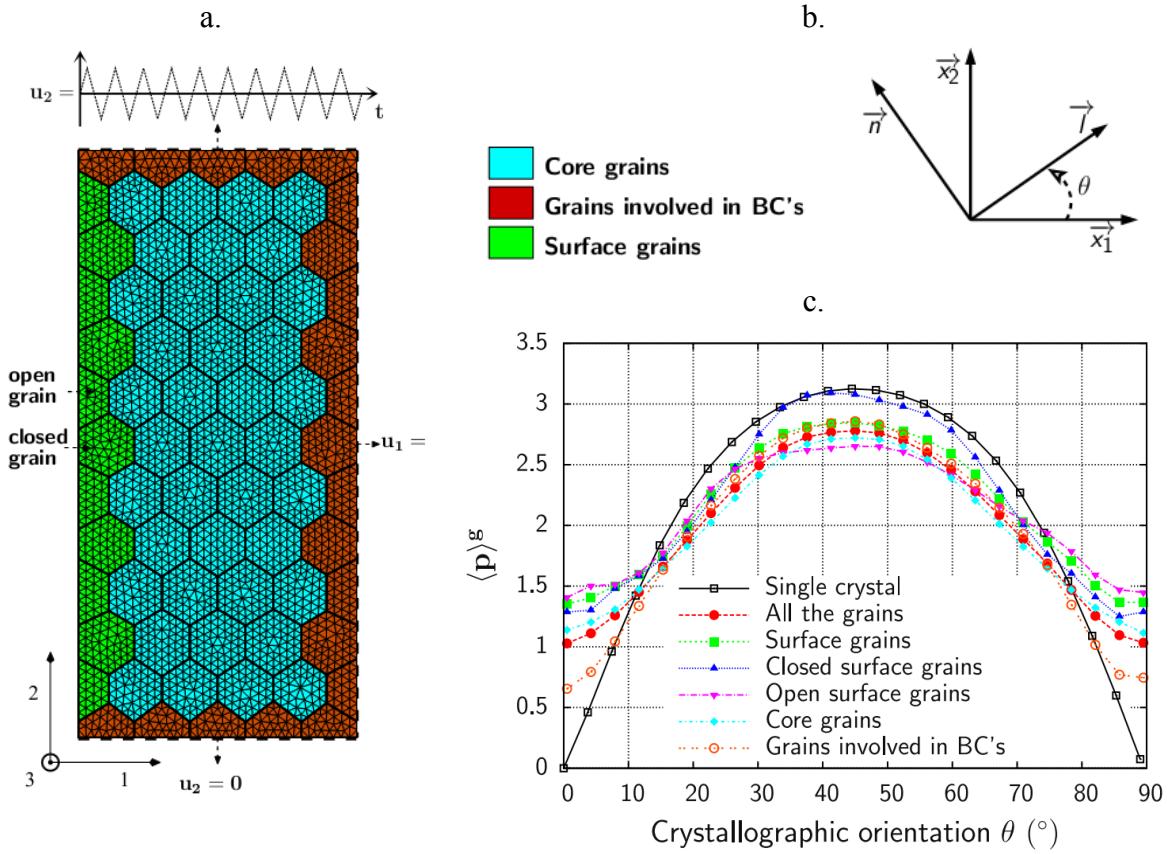


Figure 1-29 : (a) Illustration du maillage 2D utilisé par (Guilhem 2011) incluant des grains de surface ouverts ou fermés; (b) définition des différents types de grains et de l'orientation cristalline dans le plan de l'étude; (c) distribution du glissement plastique cumulé moyen par grain pour chaque type de grains et par classe d'orientation cristalline.

La stratégie de simulation mise en place par (Przybyla 2010) permet de caractériser la distribution des valeurs extrêmes d'un FIP, défini localement ou en moyenne par grain. La distribution est construite en considérant N réalisations d'un agrégat polycristallin d'une taille donnée, chacune des réalisations étant qualifiée de volume élémentaire statistique, puis en établissant la liste des N FIP extrémaux de chaque réalisation. Ensuite, afin d'identifier les configurations locales associées à ces valeurs extrêmes, les auteurs introduisent des fonctions de corrélation spatiale d'attributs microstructuraux comme l'orientation cristallographique, la taille de grain... L'exemple représenté en Figure 1-30 concerne un superalliage base Nickel IN100 dont la réponse en fatigue a été évaluée par un FIP de type Fatemie-Socie déterminé pour chaque grain de 200 agrégats. Dans cette étude, 2 familles de systèmes de glissement sont pris en compte: glissement suivant les plans octaédriques et cubiques (ce dernier est

introduit comme un système de glissement effectif pour décrire le glissement déviée en « zig-zag » associé à 2 systèmes octaédriques). Afin de visualiser simplement les résultats des corrélations spatiales, l'orientation cristallographique est décrite de manière indirecte (et incomplète) par le facteur de Schmid μ du grain suivant les systèmes octaédriques ou cubiques.

Les courbes représentées ci-dessous (Figure 1-30) correspondent à une fonction de probabilité à 2 points d'appui radiale (ou isotrope, i.e. en considérant toutes les directions de l'espace). Plus précisément, elle décrit la probabilité qu'un grain (ou un point) possédant un facteur de Schmid m_a^g compris entre 0.45 et 0.5 sur un système octaédrique se situe à une distance r (normalisée par la taille de grain d) d'un grain (ou un point) possédant un facteur de Schmid $m_a^{g'}$ compris entre 0.45 et 0.5 sur un système cubique. La distribution complète (courbe bleue) considère tous les grains qui présentent l'attribut microstructural m_a^g, tandis que la distribution en pointillés (courbe rouge) ne considère que les grains d'attribut m_a^g et correspondant à un FIP extrémal au sein d'un volume élémentaire statistique. L'exemple présenté ici indique donc qu'il est plus probable d'obtenir un FIP extrémal au sein d'un grain bien orienté pour le glissement octaédrique si celui-ci est entouré de grains bien orientés pour le glissement cubique.

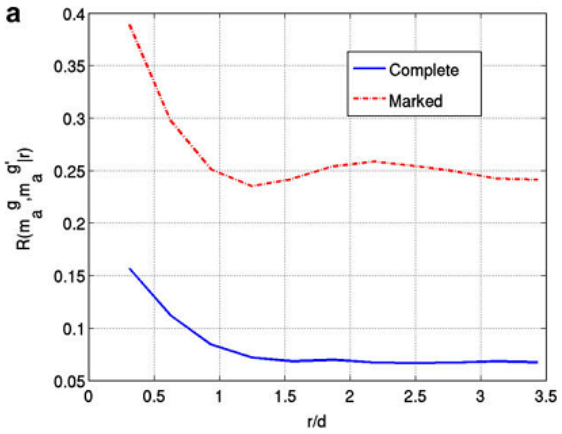


Figure 1-30 : Corrélation spatiale des grains présentant un facteur de Schmid donné pour tous les grains (courbe bleue) ou pour les grains correspondant à un extremum du paramètre indicateur de fatigue (Przybyla 2010).

Ce formalisme général et rigoureux doit permettre d'identifier les configurations locales (par exemple cluster de grains) conduisant aux valeurs extrémales de la force motrice de l'endommagement. Sur la base d'autres résultats présentés dans ce mémoire, il semblerait que, pour l'exemple donné ici, le paramètre microstructural le plus directement influent (fonction de l'orientation cristallographique) soit l'élasticité locale. En effet, les grains favorablement orientés pour le glissement cubique sont des grains d'orientation [111] qui sont les plus rigides en traction. Cependant, le rôle de l'élasticité n'a pas été discuté par les auteurs. On notera que cette stratégie a été appliquée à un alliage TA6V afin d'étudier la compétition entre amorçage en surface ou à cœur, la compétition entre glissement basal et prismatique n'étant pas ou peu discutée par (Przybyla 2012). Cependant, les outils mis en place dans ces travaux pourraient être utilisés pour la quantifier.

Dans ces travaux, le facteur de Schmid conventionnel μ, i.e. défini uniquement en fonction de l'orientation cristalline et de la direction de traction (1-2) est appelé par les auteurs facteur de Schmid apparent. Ils introduisent alors un facteur de Schmid local égal au rapport entre la cission résolue (définie en un point ou en moyenne dans un grain) et la contrainte de traction macroscopique. Or cette quantité avait été préalablement appelée facteur de Schmid effectif ou apparent par (Sauzay 2007) en considérant la cission résolue moyenne d'un grain ou d'un ensemble de grains de même orientation. On veillera donc à éviter toute confusion.

Les travaux de Robert et al. (Robert 2012) ont permis d'étudier la variabilité des grandeurs mécaniques, calculées en moyenne dans chaque grain, intervenant dans les critères de fatigue de Crossland, Dang Van et Matake (reformulés au niveau des systèmes de glissement pour les deux derniers). Les résultats sont obtenus pour du cuivre pur à partir de 9 agrégats 2D de 300 grains environ et 3 types de chargement (traction, cisaillement, traction + cisaillement). Le rôle prépondérant de l'élasticité cristalline est clairement mis en évidence. Comme l'illustre la Figure 1-31 dans le cas d'une traction, l'hétérogénéité due à l'élasticité cristalline seule est bien plus importante que celle due à la plasticité cristalline définie avec une élasticité isotrope.

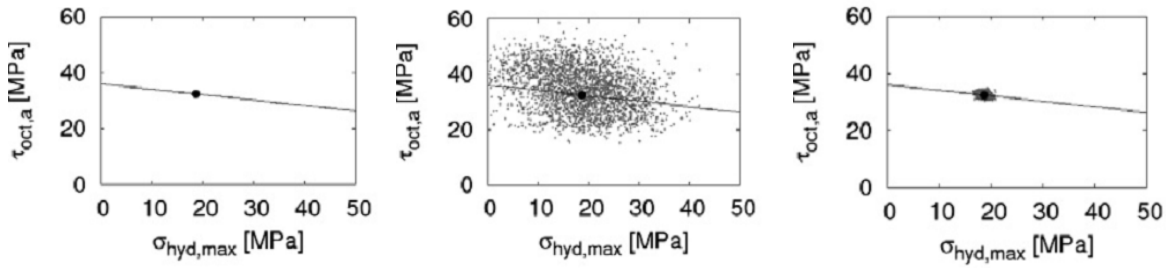


Figure 1-31 : Nuage de points indiquant les moyennes par grain de l'amplitude de la contrainte octaédrique et de la contrainte hydrostatique maximale au sein d'un agrégat en traction: (a) cas de l'élasticité isotrope, (b) cas de l'élasticité cristalline, (c) cas de l'élasticité isotrope et plasticité cristalline (Robert 2012).

Enfin, on notera que les auteurs ont définis un facteur de Schmid apparent comme le rapport entre la cission résolue moyenne d'un grain et la contrainte principale maximale. Cette terminologie est bien cohérente, et équivalente en traction, avec celle de (Sauzay 2007), mais pas avec celle de (Przybyla 2010). L'utilisation de la contrainte principale maximale permet de définir un facteur de Schmid apparent pour tout type de chargement.

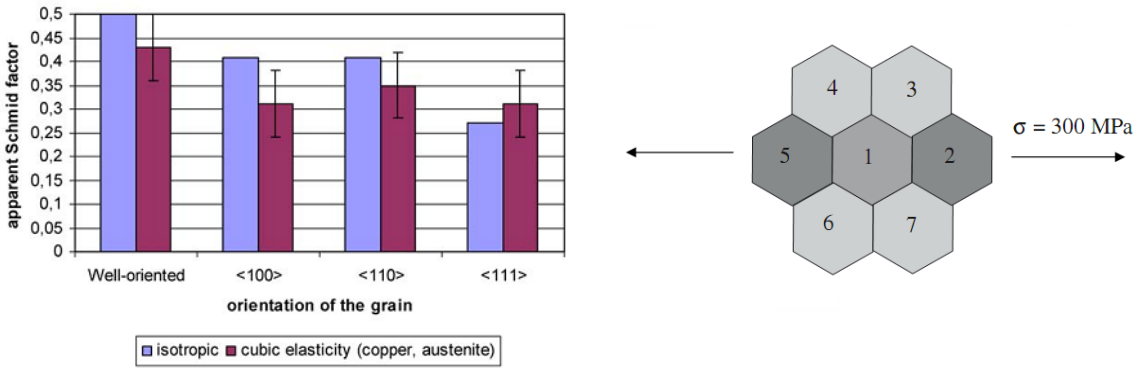
1.4.2.3 Travaux en élasticité cristalline

L'une des premières études de l'hétérogénéité des contraintes élastiques au sein d'un polycristal basée sur des simulations EF d'agrégats polycristallins est due à (Pommier 2002). Les agrégats 2D extrudés constitués d'environ 200 grains en forme d'hexagone régulier sont utilisés (similaire à celui représenté sur la Figure 1-25.b). L'hétérogénéité des contraintes, d'autant plus marquée que le coefficient d'anisotropie est élevé, se manifeste par la formation de bandes le long desquelles se concentrent les contraintes. Ces bandes, s'orientant suivant les directions principales des contraintes macroscopiques, forment une sorte de réseau de percolation de la charge qui se développe à une échelle plus grande que la taille des grains, même lorsque l'agrégat ne présente aucune texture.

L'apparition de ces bandes, à l'origine des contraintes élevées dans certains grains, est expliquée de la façon suivante. La présence d'un grain rigide (i.e. avec un module d'Young E_t élevé suivant la direction de traction) joue le rôle de concentrateur de contrainte (de façon similaire à une inclusion rigide dans une matrice isotrope). La présence de contraintes élevées au sein d'une bande fine est alors associée à une faible capacité de transfert de charge à partir du grain rigide, c'est-à-dire un faible module de cisaillement. Enfin, la longueur de la bande est liée au nombre de grains de module élevé alignés dans la direction principale des contraintes.

Comme évoqué dans le paragraphe précédent, (Sauzay 2007) a étudié l'influence de l'anisotropie élastique cristalline et son rôle sur l'activation de la micro-plasticité en introduisant la notion de facteur de Schmid apparent (ou effectif). La démarche est basée sur la réalisation de simulations EF avec l'agrégat décrit à la Figure 1-27.a inséré dans une matrice isotrope. L'orientation cristallographique du grain central en surface est fixée, et celle des grains voisins est tirée aléatoirement. 60 tirages (donc 60 simulations) sont réalisés pour chaque orientation étudiée: la cission résolue moyenne des 60 grains centraux est calculée en post-traitement puis divisée par la contrainte de traction macroscopique appliquée à la frontière de la matrice, définissant le facteur de Schmid effectif pour l'orientation étudiée.

Les principaux résultats obtenus sont représentées sur la Figure 1-32.a pour des constantes élastiques proches de celles du cuivre et du fer austénitique présentant un coefficient d'anisotropie proche de 3. Dans le cas d'un grain « bien orienté », i.e. dont le facteur de Schmid conventionnel μ vaut 0.5, le facteur de Schmid effectif vaut environ 0.43. Cela signifie que, pour activer, en moyenne, la plasticité dans un grain bien orienté au sein d'un polycristal, il faut appliquer une contrainte macroscopique plus élevée que celle à appliquer à un monocristal de même orientation. Le facteur de Schmid effectif est plus faible que le facteur de Schmid conventionnel du fait que, pour cette orientation, le module d'Young du cristal est plus faible que le module d'Young macroscopique. Ainsi, en moyenne, la contrainte axiale dans un grain bien orienté devrait être plus faible que la contrainte macroscopique. L'effet inverse est observé dans le cas de grains orientés [111] qui présentent le module d'Young le plus élevé.



a. b.

Figure 1-32 : Résultats issus des travaux de (Sauzay 2006a): a. Facteur de Schmid effectif de 4 orientations étudiées; b. Cluster de grains identifiés comme maximisant les contraintes dans le grain: grains axiaux rigides (2,5) et grains latéraux souples (3, 4, 6, 7).

En définissant le facteur de Schmid effectif pour un grain (ou une réalisation) associé à un voisinage particulier, celui-ci est différent du facteur de Schmid effectif basé sur les N réalisations qui représente la moyenne de la cission résolue pour tous les voisinages possibles. Les barres d'erreur indiquées sur la Figure 1-32.a décrivent l'étendue des facteurs de Schmid effectifs obtenus à chaque réalisation. On remarque que le facteur de Schmid maximal obtenu pour un grain bien orienté est légèrement supérieur à 0.5, ce qui correspond à une configuration de voisinage particulièrement favorable à l'activation du glissement plastique. En se basant notamment sur les travaux de (Pommier 2002) adaptés à cette configuration, Sauzay et Jordan (Sauzay 2006a) ont suggéré une configuration qui doit conduire au facteur de Schmid effectif maximal. Celle-ci est décrite sur la Figure 1-32.b: grains rigides (orientation [111]) alignés dans l'axe de traction avec le grain central et grains souples (orientation [100]) en voisins latéraux.

Le calcul du facteur de Schmid effectif a permis d'expliquer l'absence de traces de glissement au sein de 4 grains à fort facteur de Schmid (>0.45) en surface d'une éprouvette polycristalline en 316L sollicité en fatigue oligocyclique. Le calcul du facteur de Schmid

effectif a été réalisé en tenant compte de l'orientation cristallographique exacte des grains voisins mesurée par EBSD (Sauzay 2008).

D'autres travaux, basés sur l'utilisation de plusieurs tirages d'agrégats mais avec quelques différences en termes d'agrégats, de matériaux ou de quantités analysées, s'inscrivent dans l'étude de la fluctuation des champs élastiques au sein des polycristaux. La stratégie employée par Zeghadi et al. (Zeghadi 2007a) vise à évaluer la fluctuation des champs élastiques locaux provoquée par la variabilité de la forme et de l'orientation cristallographique des grains sous une surface dont les caractéristiques restent constantes. Les différents agrégats générés par décomposition de Voronoï présentent exactement la même surface. Ce travail, appliqué au cuivre, visait à évaluer dans quelle mesure les observations faites en surface peuvent être affectées par la forme des grains dans la profondeur et par les voisins (forme et orientation) sous la première couche de grains. Il a été constaté que, en un point au centre d'un grain, la contrainte équivalente locale pouvait varier de +/- 20% autour de la valeur moyenne. En revanche, ces fluctuations sont de l'ordre de +/-40%, voire parfois +/-60%, dans le cas d'un point situé à proximité d'un joint de grain. Afin d'évaluer l'influence du nombre de réalisations utilisées pour évaluer une grandeur donnée (contraintes moyennes ou écart-type) par ensemble de grains de même orientation, on peut définir une erreur d'échantillonnage (Brenner 2009; Priser 2011).

Enfin, on mentionnera que peu de travaux de simulations ont été consacrés à l'influence de l'élasticité cristalline sur l'activation de la plasticité dans le cas des hexagonaux, c'est-à-dire à l'étude des cissions résolues sur les différentes familles de systèmes de glissement propre à cette classe de matériaux. Cet aspect a été traité en élastoplasticité cristalline (Bridier 2009; Zhang 2010) pour le TA6V mais sans isoler l'influence de l'élasticité cristalline. Les simulations réalisées par Pourian et al. (Pourian 2014) ont permis d'estimer la distribution des contraintes au sein de grains de TA6V pour quelques orientations.

1.5 Bilan et objectifs

L'ensemble des résultats expérimentaux et numériques repris dans cette revue bibliographique a révélé l'importance que peut avoir l'hétérogénéité des contraintes élastiques au sein d'un polycristal sur l'activation de la micro-plasticité et les premiers stades d'endommagement en fatigue. L'anisotropie des propriétés élastiques apparaît comme un des points essentiels dans ce contexte. En particulier, il a été identifié, dans le cas du TA6V, que l'activation du glissement plastique et l'amorçage de fissures de fatigue dépendent principalement de l'orientation cristalline locale du nodule considéré. De cette orientation cristalline dépend en effet le comportement élastique, principalement via le module d'Young dans la direction de traction considérée, ainsi que le comportement plastique, via l'orientation des systèmes de glissement. Cependant, ces processus dépendent également du voisinage granulaire du nodule considéré et des textures locales particulières, appelées macrozones, rencontrées au sein de ce matériau. Plus précisément, en ce qui concerne l'activation de la plasticité, celle-ci résulte de 2 effets mutuels reliés à l'orientation cristallographique. Le premier concerne l'anisotropie élastique qui conditionne les champs de

contraintes avant l'activation du glissement. Le second correspond à l'anisotropie plastique liée à l'existence de différents systèmes de glissement présentant éventuellement des cissions résolues critiques différentes. Dans le cas des aciers inoxydables de type 316L, de structure cristalline cubique à faces centrées, l'anisotropie élastique est plutôt élevée (rapport de module d'Young ~3) conduisant à une forte hétérogénéité des contraintes. Différents travaux de simulations ont permis de quantifier partiellement cette hétérogénéité. En revanche, l'anisotropie plastique est relativement faible car il existe 12 systèmes de glissement équivalents. Ces 2 aspects réunis conduisent à ce que l'activation du glissement, ainsi que l'amorçage, ne s'opèrent pas dans un domaine d'orientations privilégiées clairement identifié. La situation est quelque peu inversée dans le cas de la phase hexagonale compacte de l'alliage de titane TA6V puisque le coefficient d'anisotropie est de 1.5 environ et qu'il existe 2 familles de systèmes de glissement différentes avec potentiellement une cission critique différente. Cela conduit à des domaines d'orientations favorables à l'activation du glissement basal et prismatique mieux identifiés. Cependant, les travaux de simulations sur les matériaux hexagonaux sont bien plus rares et ces aspects n'ont donc à ce jour pas été quantifiés.

Un des principaux objectifs de ce travail sera d'évaluer, de façon statistique, les champs de contraintes élastiques, et les cissions résolues correspondantes, dans la phase α du TA6V afin de quantifier l'importance relative du glissement basal et prismatique, en tenant compte de la présence d'éventuelles textures. De telles informations permettront de mieux caractériser et comprendre les domaines d'orientations favorables à l'activation du glissement sur ces 2 systèmes. Compte-tenu des observations des sites d'amorçage en fatigue effectuées pour ce matériau, une meilleure compréhension et quantification de l'activité de glissement, et plus généralement de l'état de contraintes associé, est un des éléments clefs dans la formation des fissures de fatigue.

Ainsi, la démarche de travail proposée, qui s'inscrit dans la continuité des travaux de Sauzay (Sauzay 2006 et 2007), est basée sur la réalisation d'un ensemble de simulations numériques en champs complets, en élasticité cristalline, sur des microstructures polycristallines dont les orientations cristallines sont tirées aléatoirement. Les aspects cristallographiques étant du premier ordre sur les processus étudiés ici, la description morphologique des agrégats sera très idéalisée. La méthodologie de simulations proposée est présentée en détail au chapitre 2.

Tout d'abord, elle sera appliquée au chapitre 3 au cas du 316L, de structure cristalline cubique à faces centrées. Les résultats seront comparés à ceux de la littérature où le cas des CFC est relativement bien documenté. Les résultats obtenus permettront de compléter travaux engagés notamment par Sauzay (Sauzay 2006 et 2007) sur la distribution des contraintes en surface dans les polycristaux CFC. Une attention particulière sera apportée aux configurations de voisinages les plus favorables ou défavorables à l'activation du glissement.

Ensuite, cette stratégie de simulations sera appliquée au chapitre 4 à la phase α du TA6V, présentant une structure cristalline hexagonale compacte. La spécificité des matériaux hexagonaux, en termes d'anisotropie élastique et en termes de systèmes de glissement, sera présentée. Dans un second temps, la présence de régions localement texturées, i.e. les macrozones, sera prise en compte dans la stratégie de simulations et d'analyse.

Enfin, l'activation du glissement plastique au sein du TA6V sera étudiée expérimentalement au chapitre 5. Riche de l'expérience acquise au cours des travaux de thèse de Florent Bridier (Bridier 2006), et à la lumière des résultats de simulations du chapitre précédent, l'analyse de l'activation des traces de glissement au cours d'un essai de traction monotone in-situ sous microscope électronique à balayage sera présentée. La confrontation des résultats expérimentaux et des prédictions numériques des champs de cissions résolues permettra d'évaluer les cissions résolues critiques du glissement basal et prismatique.

Chapitre 2

Description de la méthodologie générale de simulation

Sommaire

2.1 Introduction 50

2.2 Définitions et notations 51
2.2.1 Opérateurs de moyennes et variances spatiales 51
2.2.2 Post-traitement d'une série de N simulations 52

2.3 Description de la série de simulations 54

2.4 Analyse de la distribution des contraintes 56
2.4.1 Analyse des contraintes à l'échelle de l'agrégat 56
2.4.2 Analyse des contraintes à l'échelle du grain central 61

2.5 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 65
2.5.1 Définition des grandeurs post-traitées 65
2.5.2 Résultats 67

2.6 Analyse d'un indicateur d'amorçage tenant compte de la contrainte normale au plan de glissement 70
2.6.1 Définition des quantités post-traitées 70
2.6.2 Résultats 74

2.7 Etude de l'influence de certains paramètres de simulations 78
2.7.1 Sensibilité à la densité de maillage 78
2.7.2 Sensibilité à la dimension de l'agrégat et au nombre de grains 79
2.7.3 Sensibilité au nombre de réalisations 80

2.8 Bilan 82

2.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter en détail la méthodologie de simulation qui sera mise en œuvre:

- au chapitre 3 dans le cas des aciers inoxydables austénitiques de type 316L présentant une structure cristalline cubique à faces centrées (C.F.C.),
- au chapitre 4 dans le cas de la phase α des alliages de titane TA6V présentant une structure cristalline hexagonale compacte (H.C.).

Les simulations réalisées visent à évaluer et analyser la répartition des champs de contraintes dans un ensemble de grains de surface de même orientation cristallographique. Pour une orientation cristallographique étudiée, la réponse élastique de N agrégats polycristallins est simulée par éléments-finis. L'orientation étudiée est assignée au grain situé au centre de chaque agrégat, appelé grain central (représenté en rouge), sur la Figure 2-1 qui illustre cette démarche.

Pour chaque agrégat, l'orientation cristallographique des autres grains est tirée aléatoirement afin de restituer la texture souhaitée. Chaque agrégat constitue ainsi une réalisation du voisinage polycristallin d'un grain de surface de l'orientation étudiée. Après une série de simulations, le post-traitement des résultats nous permet d'analyser la distribution d'un champ d'une grandeur X pour chaque réalisation (Figure 2-1.b) et ensuite pour l'ensemble de N réalisations (Figure 2-1.c) au sein de l'agrégat et du grain central.

Après avoir introduit la notation générale utile à la définition des grandeurs calculées par post-traitement des simulations (paragraphe 2.2), on présentera, pour illustrer cette démarche, les résultats d'une série particulière de simulations décrite au paragraphe 2.3. Tout d'abord, la répartition des contraintes au sein de l'agrégat et au sein du grain central sera analysée (paragraphe 2.4). Ensuite on étudiera la répartition de la cission résolue, permettant d'introduire la notion de facteur de Schmid effectif (paragraphe 2.5). Enfin, on définira un indicateur tenant compte simultanément de la cission résolue et de la contrainte normale au plan de glissement (paragraphe 2.6). Parallèlement à la présentation de la méthode suivie et des grandeurs étudiées, l'analyse détaillée de cet exemple particulier a pour but d'introduire certains résultats ayant une portée générale afin de rendre plus facile la compréhension des résultats présentés dans les chapitres suivants. Enfin, dans la dernière partie de chapitre (paragraphe 2.7), l'influence des principaux paramètres de cette démarche de simulation est étudiée: nombre de réalisations, dimensions et nombre de grains de l'agrégat, type et densité de maillage, etc.

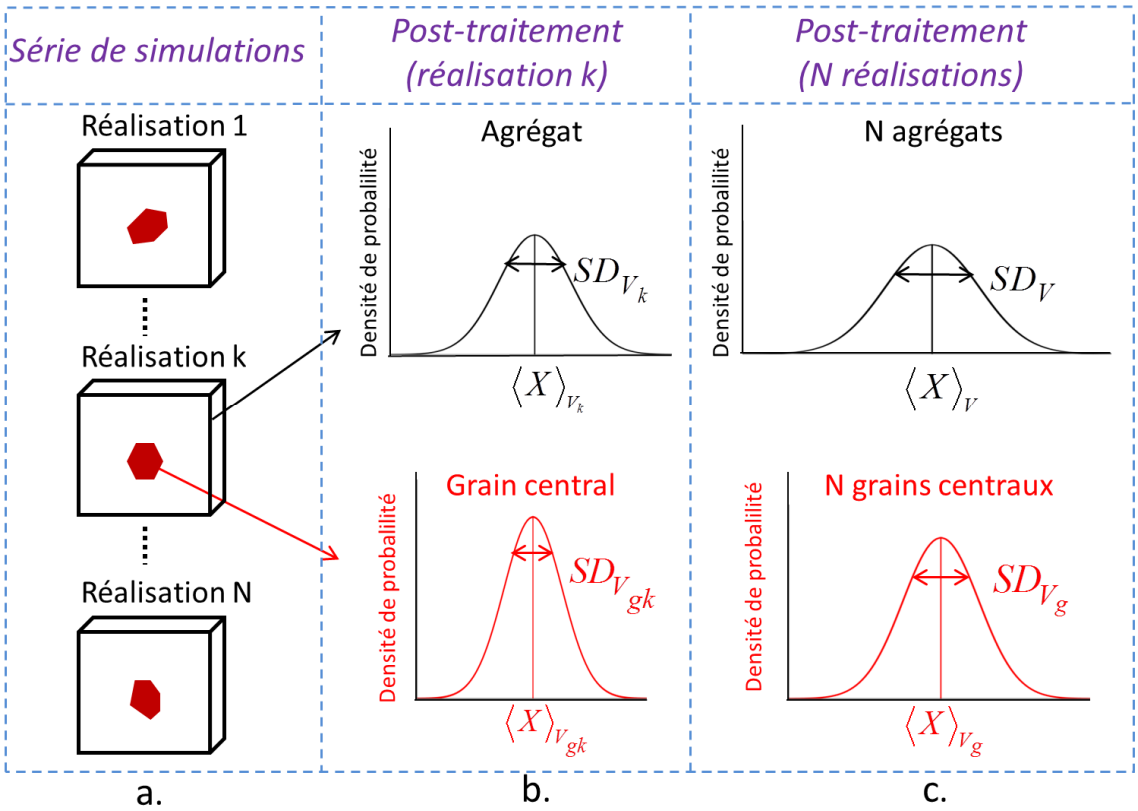


Figure 2-1 : Illustration de la stratégie de simulation : a. Série de N simulations où chaque simulation décrit la réponse d'une réalisation d'agrégat polycristallin dont l'orientation cristallographique du grain central (en rouge) est constante ; b. Post-traitement et analyse de la distribution d'un champ d'une grandeur X au sein de l'agrégat (en noir) et du grain central (en rouge) d'une réalisation k donnée; c. Post-traitement et analyse de la distribution d'un champ X au sein des N agrégats et des N grains centraux de la série de simulations.

2.2 Définitions et notations

2.2.1 Opérateurs de moyennes et variances spatiales

Soit un champ X défini sur un domaine V. L'expression de la moyenne volumique $\langle X \rangle_V$ du champ X dans V est:

$$\langle X \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V X(\vec{x}) dv \tag{2-1}$$

et celle de la variance $Var_V(X)$

$$Var_V(X) = \frac{1}{V} \int_V \left(X(\vec{x}) - \langle X \rangle_V \right)^2 dv \tag{2-2}$$

avec l'écart-type $SD_V(X)$ défini comme la racine carrée de la variance.

Lors d'une simulation par éléments-finis, le champ X est défini en chaque point d'intégration i du maillage du domaine V constitué de n_{PI} points d'intégration (i = 1… n_{PI}). La moyenne et l'écart-type sont alors calculés de la façon suivante:

$$\langle X \rangle_V = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n_{PI}} X_i \Delta v_i \tag{2-3}$$

$$SD_V(X) = \sqrt{\frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n_{PI}} \left(X_i - \langle X \rangle_V \right)^2 \Delta v_i} \tag{2-4}$$

où X_i désigne la valeur de la grandeur X au point d'intégration i de volume Δv_i. Le volume V du domaine considéré est la somme du volume des n_{PI} points d'intégration.

2.2.2 Post-traitement d'une série de N simulations

Le déroulement général du post-traitement d'une série de simulations est illustré par la Figure 2-1. Pour chaque réalisation k, on exporte les valeurs du champ X étudié sur l'ensemble des points d'intégration de l'agrégat et du grain central. La distribution du champ X dans l'agrégat et celle dans le grain central seulement peuvent alors être représentées sous la forme d'histogrammes tracés en densité de probabilité, correspondant respectivement aux histogrammes noir et rouge de la Figure 2-1.b. En notant V_k le volume de l'agrégat et V_{gk} celui du grain central pour la réalisation k, on détermine alors:

- la moyenne $\langle X \rangle_{V_k}$ et l'écart-type $SD_{V_k}(X)$ du champ X dans l'agrégat de volume V_k.
- la moyenne $\langle X \rangle_{V_{gk}}$ et l'écart-type $SD_{V_{gk}}(X)$ du champ X dans le grain central de volume V_{gk}.

En combinant les résultats obtenus pour les N réalisations de la série, on peut représenter la distribution du champ X au sein de la réunion des N agrégats (définissant un domaine de volume noté V), puis celle obtenue au sein de la réunion des N grains centraux (définissant un domaine de volume noté V_g). Celles-ci sont schématisées par les 2 histogrammes noir et rouge de la Figure 2-1.c. On définit le volume V des N agrégats, et le volume V_g des N grains centraux:

$$V = \sum_{k=1}^{N} V_k \quad \text{et} \quad V_g = \sum_{k=1}^{N} V_{gk} \tag{2-5}$$

On définit ainsi les moyennes $\langle X \rangle_V$ et $\langle X \rangle_{V_g}$, ainsi que les écarts-types $SD_V(X)$ et $SD_{V_g}(X)$ du champ X, au sein des N agrégats et des N grains centraux respectivement.

Les moyennes définies pour l'ensemble des N réalisations peuvent également s'exprimer en fonction des moyennes obtenues à chaque réalisation. Par exemple, en considérant la moyenne au sein des agrégats, on obtient:

$$\langle X \rangle_V = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{N} \langle X \rangle_{V_k} V_k \tag{2-6}$$

Lorsque le volume des agrégats (ou des grains centraux) est constant pour toutes les réalisations, la relation précédente devient:

$$\langle X \rangle_V = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \langle X \rangle_{V_k} \tag{2-7}$$

Les 2 écarts-types $SD_V(X)$ et $SD_{V_g}(X)$ caractérisent la dispersion du champ X au sein des N agrégats et grains centraux, respectivement. Cette dispersion totale peut être définie comme la somme de 2 contributions. La première, traduisant la dispersion du champ X à l'intérieur de chaque réalisation, est qualifiée de dispersion intra-réalisation. La seconde, traduisant la dispersion du champ X entre les différentes réalisations, est qualifiée de dispersion inter-réalisation. On définit alors la variance intra-réalisation comme la moyenne des variances pour chaque réalisation. Par exemple, au sein des agrégats, on obtient:

$$Var_V^{\text{intra}}(X) = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{N} Var_{V_k}(X) V_k \quad \Rightarrow \quad SD_V^{\text{intra}}(X) = \sqrt{Var_V^{\text{intra}}(X)} \tag{2-8}$$

La variance inter-réalisation est la variance des moyennes de chaque réalisation:

$$Var_V^{\text{inter}}(X) = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{N} \left(\langle X \rangle_{V_k} - \langle X \rangle_V \right)^2 V_k \quad \Rightarrow \quad SD_V^{\text{inter}}(X) = \sqrt{Var_V^{\text{inter}}(X)} \tag{2-9}$$

On adapte ces formules à l'échelle des grains centraux en remplaçant V_k par V_{gk} (le volume du grain central de la réalisation k) et V par V_g (la somme des volumes V_{gk}). L'adaptation de l'équation 2-7 aux grains centraux est valide si le volume du grain central est constant à chaque réalisation. On montre que la variance totale est la somme de la variance intra-réalisation et de la variance inter-réalisation, soit en termes d'écart-type:

$$SD_V(X) = \sqrt{\left(SD_V^{\text{intra}}(X)\right)^2 + \left(SD_V^{\text{inter}}(X)\right)^2} \tag{2-10}$$

Les graphiques de la Figure 2-2 visent à illustrer schématiquement la distinction entre dispersion intra-réalisation et inter-réalisation. Dans ces graphes, chaque point représente la moyenne $\langle X \rangle_{V_k}$ de la grandeur X considérée dans la réalisation k. La barre d'erreur représente d'écart-type $SD_{V_k}(X)$ associé. La Figure 2-2.a correspond à un cas général où l'écart-type intra-réalisation et inter-réalisation sont du même ordre de grandeur. La Figure 2-2.b correspond à un cas particulier pour lequel l'écart-type intra-réalisation est prépondérant : la dispersion dans chaque réalisation est importante, mais la moyenne varie très peu d'une réalisation à l'autre. Au contraire, la Figure 2-2.c correspond à un cas particulier pour lequel l'écart-type inter-réalisation est prépondérant : la dispersion est très faible dans chaque réalisation, mais la moyenne varie beaucoup d'une réalisation à l'autre.

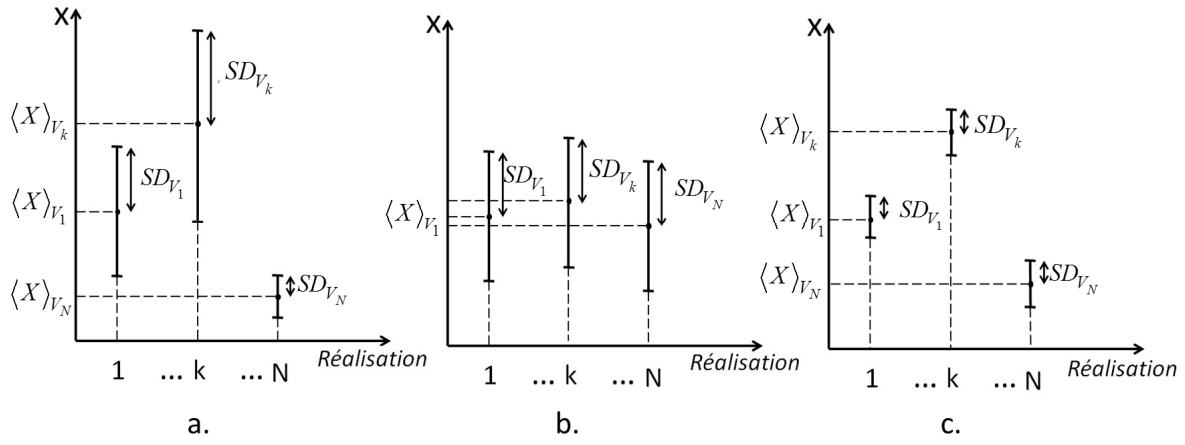


Figure 2-2: Illustration de la notion d'écarts-types intra-réalisation et inter-réalisation.

Cette stratégie de simulation et de post-traitement est appliquée à titre d'exemple à une série de simulations décrite au paragraphe 2.3. En premier lieu, on analysera les résultats des post-traitements portant sur la distribution des contraintes à l'échelle de l'agrégat et du grain central (paragraphe 2.4). Puis on s'intéressera à la distribution, à l'échelle du grain central seulement, des champs « dérivés » des contraintes et relatifs aux systèmes de glissement. L'étude de la distribution de la cission résolue est discutée en relation avec l'activation du glissement plastique (paragraphe 2.5). On y introduira la notion de facteur de Schmid effectif. Ensuite, la distribution de la contrainte normale au plan de glissement sera étudiée et prise en compte avec la cission réduite dans la définition d'un « indicateur » visant à fournir une évaluation de la force motrice nécessaire à la formation de fissures (paragraphe 2.6).

2.3 Description de la série de simulations

La série de simulations particulière choisie pour illustrer la méthodologie suivie est basée sur 140 réalisations et est appliquée à l'acier inoxydable de type 316L de structure cristalline CFC. Les simulations sont réalisées avec le code éléments-finis Abaqus. La morphologie des agrégats polycristallins est tridimensionnelle et constante d'une réalisation à une autre. Chaque agrégat est composé de 135 grains identiques (à l'exception des grains de bord) de forme hexagonale, alignés suivant la profondeur (Figure 2-3). Le modèle est discrétisé par 252999 éléments finis tétraédriques linéaires (C3D4 suivant la terminologie Abaqus). Le nombre d'éléments dans le grain central est de 2258.

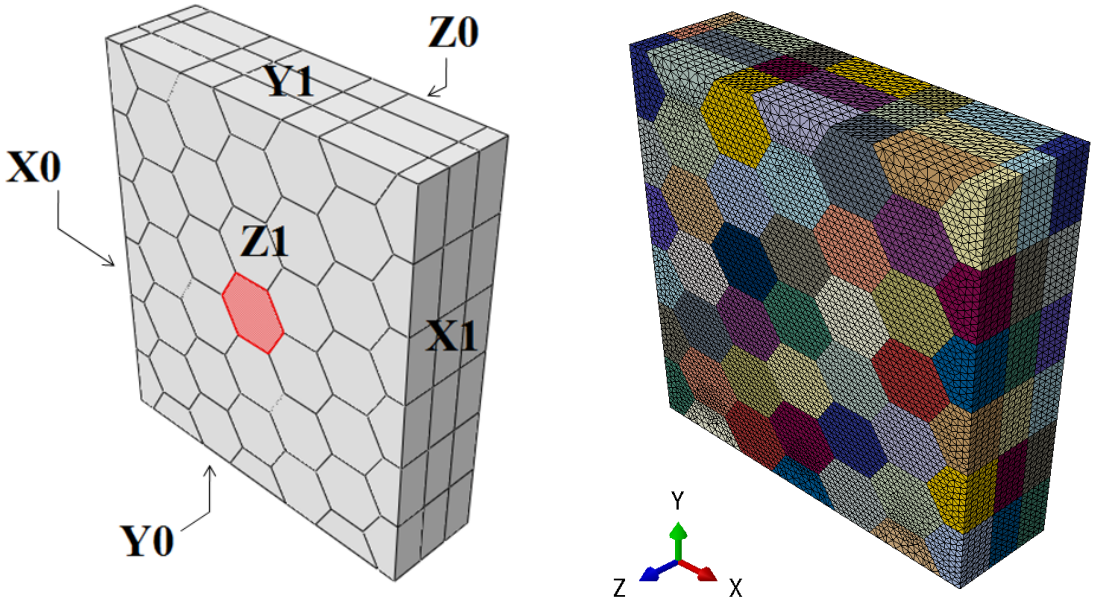


Figure 2-3 : a. Géométrie de l'agrégat et notation des faces pour la définition des conditions aux limites (le grain central est indiqué en rouge) ; b. Maillage du modèle.

L'orientation cristallographique dans le grain central, constante d'une réalisation à une autre, est favorable au glissement plastique. Plus précisément, l'orientation choisie est telle que (1) le système de glissement B5 présente un facteur de Schmid égal à 0.5 et que (2) la normale au plan de glissement et la direction de glissement de ce système forment un angle de 45° avec la normale à la surface libre (Z). Ce type de grain est qualifié de « bien orienté » de type B (orientation notée [B.O.B.], voir paragraphe 1.1.2 du chapitre 1, ainsi que l'annexe A.5.1 pour plus de détail). Pour chaque réalisation, l'orientation cristallographique de tous les autres grains est tirée aléatoirement de façon à restituer une texture isotrope. Pour cela, le tirage des angles d'Euler est effectué en suivant la méthode en $\sin\Phi$ décrite en annexe A.2.1. Les constantes élastiques du fer austénitique (CFC) ont été utilisées (pour rappel C_{11}=198 GPa, C_{12}=125 GPa et C_{44}=122 GPa, voir paragraphe 1.2.1.1 du chapitre 1).

Les conditions aux limites définies ci-dessous visent à imposer à l'agrégat, dont une des faces est libre de charge, un état de contrainte macroscopique uniaxial suivant la direction X, l'agrégat représentant un élément de volume en surface d'une éprouvette polycristalline en traction (Figure 2-3):

- La face Z_1 est libre de charge (le grain central, représenté en rouge sur la figure, débouche sur cette face).
- Un déplacement uniforme $u_x^d = E_{xx}L_x$ suivant la direction de traction X est imposé sur la face X_1, avec $E_{xx} = 0.1\%$ la déformation macroscopique visée et L_x la distance entre la faces X_0 et X_1.
- Des conditions de symétrie sont appliquées sur les faces X_0, Y_0 et Z_0 (déplacement normal nul).
- Le déplacement de la face Y_1 dans la direction Y est contraint à être homogène.

Remarques:

- Afin de se concentrer ici sur la démarche, la justification du choix de certains paramètres (nombre de réalisations, maillage...) sera présentée ultérieurement au paragraphe 2.7 de ce chapitre ou au début des chapitres suivants pour les informations spécifiques à chaque matériau.
- La valeur de la déformation macroscopique totale imposée (0.1%) est complètement arbitraire : elle ne représente rien de particulier pour le matériau étudié, les contraintes correspondantes sont proches de la limite d'élasticité conventionnelle. Les simulations étant développées en élasticité linéaire, les résultats seront normalisés. Cette valeur sera également conservée dans le chapitre 4 pour éventuellement permettre la comparaison directe des valeurs de contraintes obtenues.
- Dans cet exemple, et comme dans l'ensemble des séries de simulations présentées aux chapitres 3 et 4, la morphologie des agrégats, et donc du grain central, est la même pour les N réalisations. Mais la démarche proposée reste applicable dans le cas d'agrégats et de grains centraux dont la morphologie et le volume varient d'une réalisation à une autre. L'influence de la morphologie sera étudiée en comparant plusieurs séries de N simulations effectuées avec des morphologies différentes (mais constantes à l'intérieur de chaque série). De plus, dans la grande majorité des cas, la morphologie des grains sera décrite de façon très idéalisée, à l'instar de cet exemple.
- L'influence d'une texture cristallographique ne sera étudiée que dans le cas des alliages de titane TA6V afin de prendre en compte la présence de macrozones (chapitre 4). Les aspects « textures » sont très peu marqués pour le matériau 316L étudié.

2.4 Analyse de la distribution des contraintes

2.4.1 Analyse des contraintes à l'échelle de l'agrégat

2.4.1.1 Moyennes et écarts-types

Les moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_V$ et les écarts-types $SD_V(\sigma_{ij})$, $SD_V^{\text{intra}}(\sigma_{ij})$, $SD_V^{\text{inter}}(\sigma_{ij})$ des 6 composantes du tenseur des contraintes estimées au sein des N agrégats de la série sont donnés dans le Tableau 2-1.a. Le Tableau 2-1.b présente les mêmes informations en normalisant les contraintes par la contrainte axiale moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_V$=194.3MPa, qualifiée également de contrainte de traction macroscopique.

Ces résultats indiquent que l'état de contrainte macroscopique est presque parfaitement uniaxial. En effet, seule la moyenne de la composante axiale $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ est significativement non-nulle. Les moyennes sur les autres composantes représentent au maximum 0.2% de la contrainte de traction macroscopique (en valeur absolue).

De plus, on remarque que l'écart-type inter-réalisation est très faible devant l'écart-type intra-réalisation. En effet, l'écart-type inter-réalisation est systématiquement inférieur à 1%, sauf pour la composante axiale σ_{11} où il atteint 2.2%, tandis que l'écart-type intra-réalisation varie de 8% à 20%. Cela signifie que la moyenne des contraintes dans un agrégat varie très peu d'une réalisation à une autre, bien qu'il y ait une hétérogénéité relativement importante des contraintes à l'intérieur de chaque agrégat. La dimension des agrégats (en réalité le nombre de grains, donc d'orientations cristallines) est donc suffisante pour stabiliser les contraintes moyennes dans un agrégat. Nous avons jugé que l'écart-type de 2.2% sur la contrainte axiale moyenne par agrégat restait acceptable pour considérer qu'à chaque réalisation, le grain central et son voisinage proche appartenait à un élément de volume dont l'état de contrainte moyen est constant.

	$\langle \cdot \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
σ_{11}	194.3	39.5	4.2	39.8
σ_{22}	0.0	33.0	0.0	33.0
σ_{33}	0.0	25.8	0.0	25.8
σ_{12}	-0.5	22.4	1.7	22.5
σ_{13}	0.1	17.7	0.9	17.8
σ_{23}	0.1	14.9	0.6	14.9

a.

	$\langle \cdot \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
σ_{11}	1.000	0.203	0.022	0.205
σ_{22}	0.000	0.170	0.000	0.170
σ_{33}	0.000	0.133	0.000	0.133
σ_{12}	-0.002	0.115	0.009	0.116
σ_{13}	0.001	0.091	0.005	0.091
σ_{23}	0.000	0.076	0.003	0.077

b.

Tableau 2-1: Moyennes et écarts-types des contraintes au sein des 140 agrégats : a. valeurs en MPa; b. valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$.

La Figure 2-4 illustre la différence entre l'écart-type intra-réalisation et l'écart-type inter-réalisation en suivant le même mode de représentation que celui utilisé schématiquement sur la Figure 2-2. On y indique, pour chacune des 140 réalisations, la contrainte axiale moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_k}$ (points) et l'écart-type associé $SD_{V_k}(\sigma_{11})$ (barres d'erreur). Les moyennes sont comprises entre 185 et 205 MPa environ, tandis que les demi-barres d'erreur, correspondant à l'écart-type, représentent environ 40MPa.

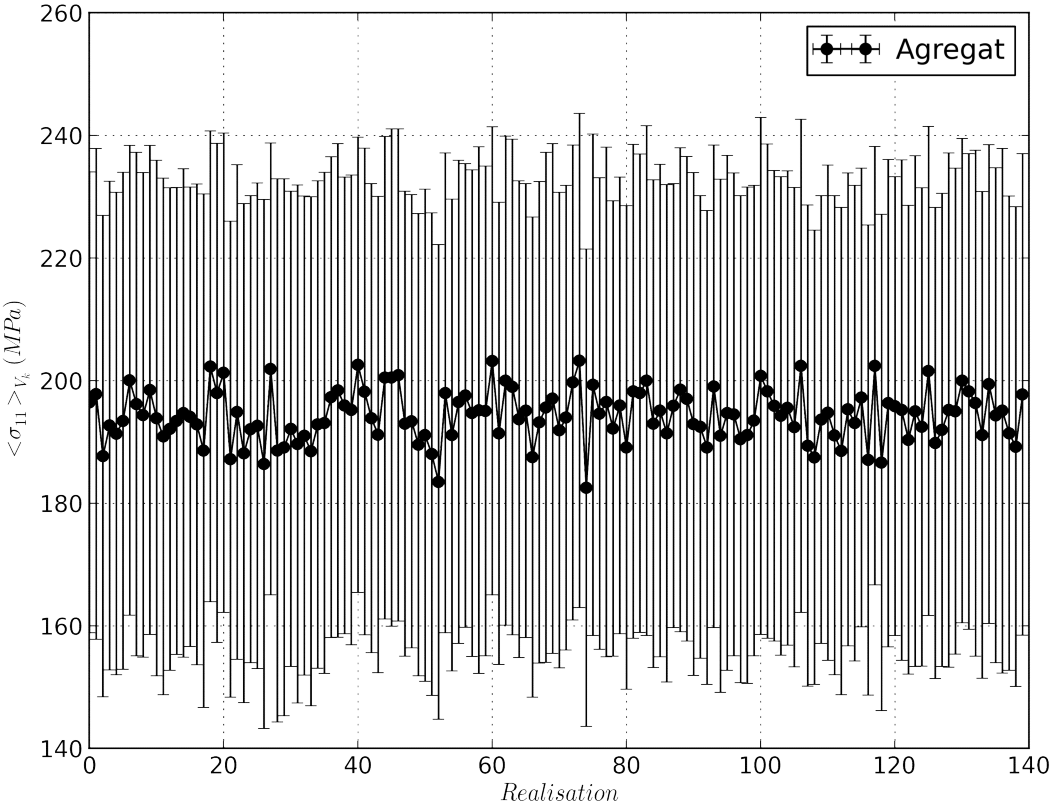


Figure 2-4: Moyenne (points) et écart-type (barres d'erreur) de la contrainte σ_{11} au sein de l'agrégat pour chacune des 140 réalisations.

On remarque que la dispersion sur les 5 autres composantes est plus faible que celle observée sur la contrainte axiale. En effet, alors que l'écart-type total est de l'ordre de 20% sur la composante σ_{11}, il varie de 13 à 17% pour les composantes normales σ_{22} et σ_{33}, et de 8% à 12% pour les composantes de cisaillement. On notera que, parmi les 5 autres composantes pratiquement nulles en moyenne, la composante $\langle \sigma_{12} \rangle_V$ est très légèrement supérieure aux autres. Cet effet a été constaté sur d'autres configurations et résulte très certainement des conditions aux limites définies sur la face Y1 afin qu'elle reste plane, cela induisant du cisaillement dans le plan (X-Y) qui n'aurait pas lieu si la face était libre de se déformer.

Les moyennes $\langle \varepsilon_{ij} \rangle_V$ et les écarts-types $SD_V(\varepsilon_{ij})$, $SD_V^{\text{intra}}(\varepsilon_{ij})$, $SD_V^{\text{inter}}(\varepsilon_{ij})$ des 6 composantes du tenseur des déformations estimées au sein des N agrégats sont donnés dans le Tableau 2-2. On obtient exactement la déformation axiale imposée dans la direction X

(E_{xx}=0.1%). Le résultat obtenu rend compte d'un comportement macroscopique pratiquement isotrope. Cependant on note une légère différence entre $\langle \varepsilon_{22} \rangle_V$ et $\langle \varepsilon_{33} \rangle_V$ qui résulte probablement d'un biais lié aux conditions aux limites et aux dimensions de l'agrégat, notamment la faible profondeur. En revanche, on a $\langle \varepsilon_{12} \rangle_V$, $\langle \varepsilon_{13} \rangle_V$ et $\langle \varepsilon_{23} \rangle_V$ quasiment nulles (inférieures à 0.2% de la déformation axiale). Le module d'Young effectif est :

$$E_{eff} = \frac{\langle \sigma_{11} \rangle_V}{\langle \varepsilon_{11} \rangle_V} = 194.3\ GPa \tag{2-11}$$

Le coefficient de Poisson dans la direction 2 ν_{12eff} vaut 0.275, tandis que celui dans la direction 3 ν_{13eff} vaut 0.293.

	$\langle . \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
ε_{11}	1.000e-3	0.176e-3	0.000e-3	0.176e-3
ε_{22}	-0.275e-3	0.144e-3	0.014e-3	0.144e-3
ε_{33}	-0.293e-3	0.153e-3	0.013e-3	0.154e-3
ε_{12}	0.002e-3	0.266e-3	0.023e-3	0.267e-3
ε_{13}	0.000e-3	0.306e-3	0.034e-3	0.308e-3
ε_{23}	-0.001e-3	0.243e-3	0.024e-3	0.245e-3

a.

	$\langle . \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
ε_{11}	1.000	0.176	0.000	0.176
ε_{22}	-0.275	0.144	0.014	0.144
ε_{33}	-0.293	0.153	0.013	0.154
ε_{12}	0.002	0.266	0.023	0.267
ε_{13}	0.000	0.306	0.034	0.308
ε_{23}	-0.001	0.243	0.024	0.245

b.

Tableau 2-2: Moyennes et écarts-types des déformations au sein des 140 agrégats : a. valeurs brutes ; b. valeurs normalisées par $\langle \varepsilon_{11} \rangle_V$.

2.4.1.2 Distribution des contraintes

Les courbes bleues des histogrammes de la Figure 2-5 représentent la distribution des contraintes locales (valeurs aux points d'intégration) au sein des N agrégats de la série de simulations. La dispersion de ces distributions est relative à l'écart-type total $SD_V(\sigma_{ij})$. Afin de discuter de l'allure des distributions simulées, les fonctions de distribution normales de même moyenne $\langle \sigma_{ij} \rangle_V$ et de même écart-type $SD_V(\sigma_{ij})$ ont été tracées en rouge.

Cet ensemble d'histogrammes permet de retrouver visuellement les informations déduites du Tableau 2-1 et reflète bien un état de contraintes macroscopiques uniaxial. En effet, parmi les 6 distributions qui semblent toutes pratiquement symétriques, seule celle relative à la composante axiale σ_{11} est centrée sur une valeur non-nulle. La distribution des composantes σ_{11}, σ_{22}, σ_{12} est très proche d'une gaussienne. En revanche, pour les composantes σ_{13}, σ_{23}, σ_{33}, on s'écarte, parfois assez fortement, d'une distribution normale. Bien que symétriques, elles présentent un pic au voisinage des valeurs nulles (correspondant ici à la moyenne) car ces 3 composantes sont nulles sur la face Z1 libre de charge et restent faibles à proximité. Cela résulte de la faible profondeur de l'agrégat. On note que cet effet est plus prononcé sur la composante normale σ_{33}.

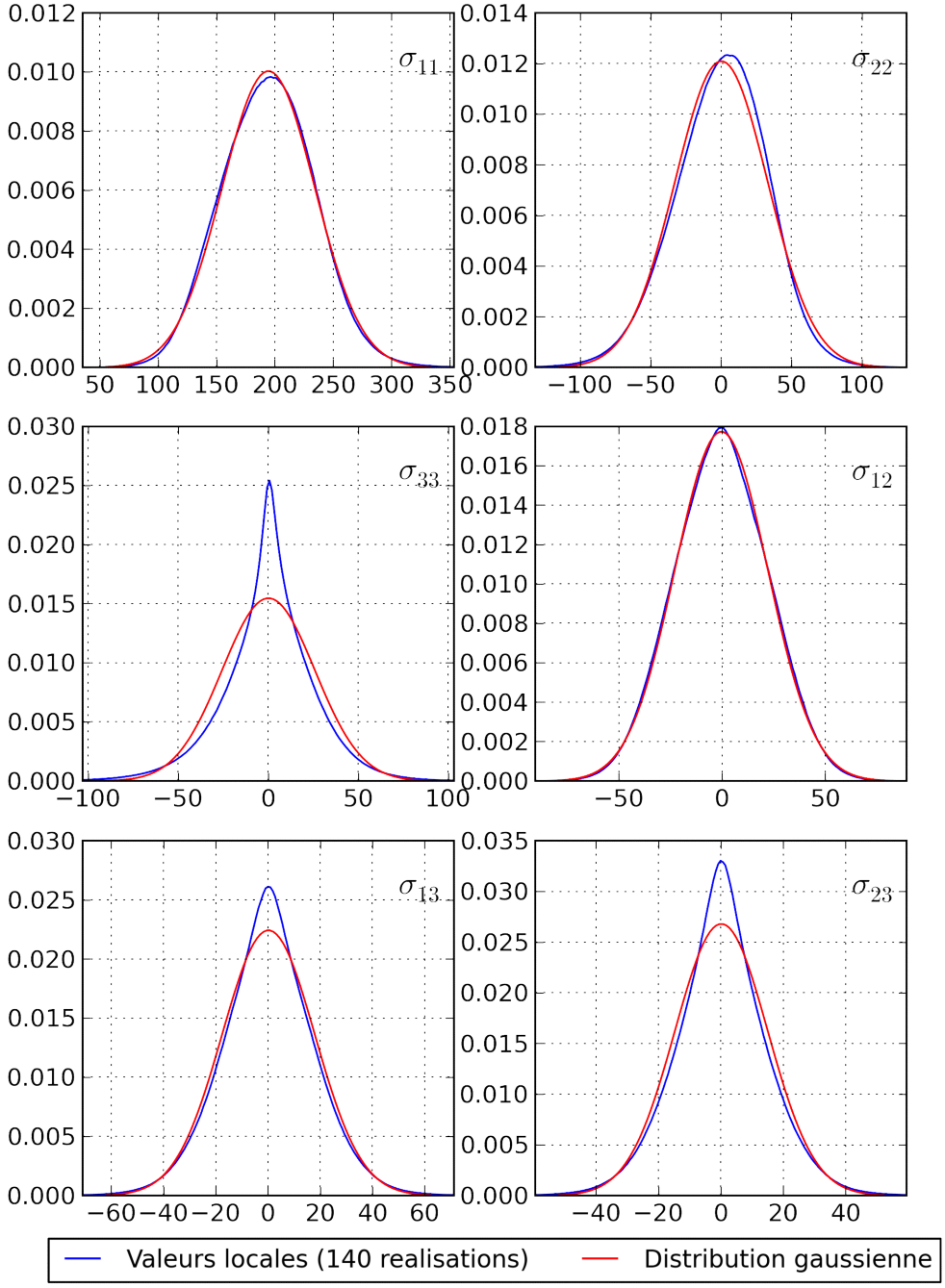


Figure 2-5: Distribution des contraintes (MPa) au sein des N agrégats.

Remarque sur les histogrammes:

Dans l'intégralité de ce mémoire, lorsqu'aucun titre d'axes n'apparaît sur les histogrammes du type de ceux représentés sur la Figure 2-5, l'axe des abscisses représente la grandeur étudiée telle qu'indiquée dans la légende (ici une composante du tenseur des contraintes exprimée en MPa) et l'axe des ordonnées représente la densité de probabilité. L'aire sous la courbe entre x_1 et x_2 définit la probabilité que la grandeur étudiée soit comprise entre ces 2 valeurs.

2.4.2 Analyse des contraintes à l'échelle du grain central

2.4.2.1 Moyennes et écarts-types

Les moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_g}$ et les écarts-types $SD_{V_g}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_g}^{\text{intra}}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_g}^{\text{inter}}(\sigma_{ij})$ des 6 composantes du tenseur des contraintes au sein des N grains centraux sont donnés dans le Tableau 2-3.a. Le Tableau 2-3.b présente les mêmes données normalisées par la contrainte de traction macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$=194.3MPa. Dans le cas du grain central, on parlera également d'écart-type intra-granulaire et inter-granulaire au lieu d'écart-type intra-réalisation et inter- réalisation.

	$\langle \cdot \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
σ_{11}	174.8	20.6	15.3	25.7
σ_{22}	-11.8	21.6	15.6	26.7
σ_{33}	9.1	15.3	4.9	16.0
σ_{12}	-30.9	11.5	8.6	14.4
σ_{13}	2.4	12.5	6.5	14.1
σ_{23}	6.0	9.7	4.7	10.8

a.

	$\langle \cdot \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
σ_{11}	0.899	0.106	0.079	0.132
σ_{22}	-0.061	0.111	0.081	0.137
σ_{33}	0.047	0.079	0.025	0.083
σ_{12}	-0.159	0.059	0.044	0.074
σ_{13}	0.012	0.064	0.034	0.072
σ_{23}	0.031	0.050	0.024	0.056

b.

Tableau 2-3: Moyennes et écarts-types des contraintes au sein des 140 grains centraux : a. valeurs en MPa; b. valeur normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$.

Compte-tenu des données indiquées dans le Tableau 2-3, on vérifie que les contraintes au sein des N grains centraux correspondent en moyenne à un état différent de l'état de contrainte macroscopique et qu'elles présentent une assez forte hétérogénéité. En effet, d'une part, la contrainte axiale moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ des N grains centraux est différente de la valeur macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$. Pour l'orientation [B.O.B.] étudiée ici, on a: $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g} \sim 0.9 \langle \sigma_{11} \rangle_V$. L'abaissement de la contrainte axiale du grain par rapport à la valeur macroscopique est principalement lié au fait que le module d'Young E_t de l'orientation étudiée (E_t (BOB) = 141 GPa) est plus faible que le module effectif du polycristal (E_{eff}= 194.3 GPa), avec E_t (BOB) =0.76 E_{eff}. Cet aspect sera décrit et discuté ultérieurement au chapitre 3 à la section 3.3.1.2 pour un nombre de cas plus important.

D'autre part, l'état de contraintes moyen des N grains n'est plus uniaxial: les composantes autres que σ_{11} sont, en général, non-nulles en moyenne. Néanmoins, elles restent inférieures à $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ d'environ un ordre de grandeur: au maximum, on obtient sur la composante σ_{12} une valeur moyenne de 31MPa (en valeur absolue) ce qui représente ~15% de la contrainte axiale macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ et ~18% de la contrainte axiale $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ dans les N grains centraux.

A l'échelle du grain central, l'écart-type inter-granulaire n'est plus négligeable: il représente environ 2% à 8% de la contrainte de traction macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$. Cela signifie que l'état de contrainte moyen du grain central varie d'un agrégat à l'autre, ce qui traduit l'influence du voisinage granulaire particulier de chaque réalisation (qualifié aussi parfois de microtexture). Cependant, l'écart-type intra-granulaire représente 5% à 10% de la contrainte de traction macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ et il reste systématiquement supérieur à l'écart-type inter-granulaire. La Figure 2-6 (analogue à la Figure 2-4) permet de visualiser les contributions respectives des dispersions intra- et inter-granulaire. Sur ce graphique, la présence d'une dispersion inter-granulaire significative se manifeste par le fait que les moyennes de chaque grain central (points) fluctuent dans une plage comprise entre 140MPa et 210MPa environ, tandis que les moyennes par agrégats étaient comprises dans une plage de 20MPa.

L'écart-type total des contraintes au sein de N grains centraux est inférieur à celui obtenus pour les N agrégats puisque ce dernier intègre également la fluctuation des contraintes d'une orientation à une autre, qualifiée de dispersion inter-orientation par Sauzay (Sauzay 2007). Cependant, il est important de noter que la dispersion intra-orientation n'est pas négligeable devant la dispersion inter-orientation. En effet, pour l'orientation [B.O.B], l'écart-type total de la contrainte axiale est de 13%, alors qu'il est de 20% en considérant toutes les orientations (agrégat). Ceci est vrai pour les 5 autres composantes.

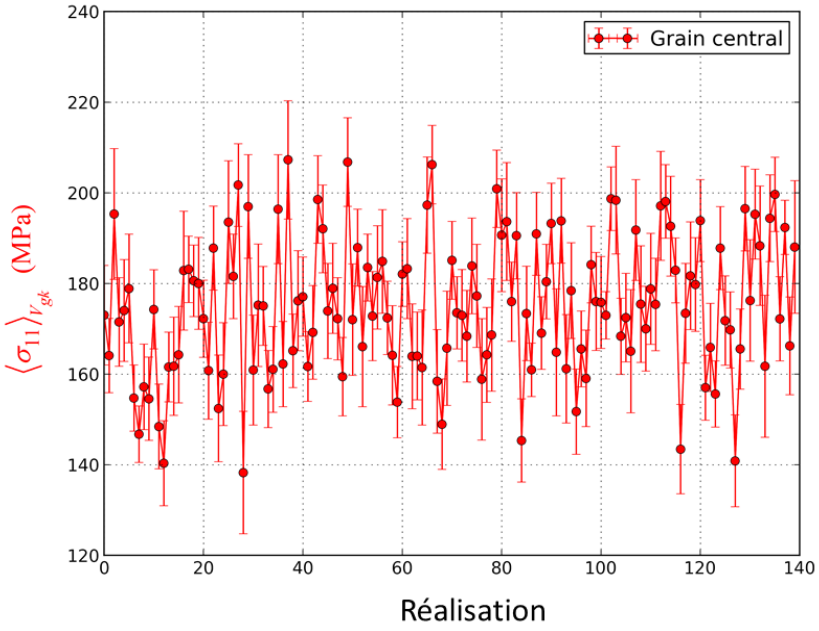


Figure 2-6: Moyenne (points) et écart-type (barres d'erreur) de la contrainte σ_{11} au sein du grain central pour chacune des 140 réalisations.

Les résultats indiqués ici illustrent donc clairement le rôle de l'anisotropie élastique sur l'hétérogénéité des contraintes au sein d'un polycristal et, en particulier, au sein d'un ensemble de grains de surface de même orientation. L'hypothèse de contraintes uniformes par phases n'est donc pas acceptable lorsqu'il s'agit d'étudier des phénomènes pilotés par les valeurs extrêmes des champs mécaniques locaux (contraintes, glissement plastique).

2.4.2.2 Distribution des contraintes

La distribution des contraintes au sein des N grains centraux est représentée, par composante et en valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$, sur les histogrammes de la Figure 2-7. De façon similaire à la Figure 2-5 pour les agrégats, les courbes bleues en trait continu correspondent aux distributions des contraintes locales et les courbes rouges en trait continu correspondent aux gaussiennes de même moyenne $\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_g}$ et même écart-type $SD_{V_g}(\sigma_{ij})$. Les courbes bleues en trait pointillé représentent la distribution des contraintes moyennes par grain (i.e. moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_{gk}}$ de chaque réalisation). La dispersion est alors relative à l'écart-type inter-granulaire seulement. Les courbes rouges en trait pointillé correspondent aux gaussiennes de même moyenne $\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_g}$ et de même écart-type inter-granulaire $SD_{V_g}^{\text{inter}}(\sigma_{ij})$. Du point de vue des contrainte locales (courbes en trait continu), les distributions simulées sont très proches d'une distribution normale pour les composantes σ_{11}, σ_{22}, σ_{12}. Ce n'est pas le cas des composantes σ_{33}, σ_{13}, σ_{23} qui présentent un pic aux valeurs proches de 0. Comme cela avait déjà été constaté à l'échelle des agrégats, cela résulte du fait que le grain central débouche sur la face Z1 libre de charge. Cet effet induit une dissymétrie de la distribution des contraintes locales lorsque la moyenne n'est pas nulle, ce qui est observé de façon assez marquée pour la composante σ_{33}. Lorsque l'on considère la distribution des moyennes par réalisation, la différence, pour les composantes σ_{33}, σ_{13}, σ_{23}, entre la distribution simulée (courbes bleues pointillées) et la gaussienne associée (courbes rouges pointillées) est moins marquée, bien que les distributions simulées semblent toujours présenter un léger pic associé aux valeurs proches de zéro. Cependant, cette impression visuelle peut également provenir du fait que ces histogrammes (courbes bleues pointillées) sont basés sur un nombre de données plus faible (i.e. les 140 valeurs moyennes par réalisation).

Nous terminerons l'analyse de la distribution des contraintes par quelques données sur les valeurs extrémales, en nous limitant à la composante axiale σ_{11} (en valeurs normalisées). Localement (i.e. aux points d'intégrations), la valeur maximale atteinte est de 1.76 tandis que la valeur minimale est de 0.09. Il est donc possible d'atteindre localement presque le double de la contrainte axiale moyenne, et au contraire d'atteindre localement des contraintes qui sont inférieures d'un ordre de grandeur. Cependant, ces valeurs concernent très peu d'éléments et sont très certainement fortement sensibles au maillage et au nombre de réalisations considérées: ainsi, l'étude des contraintes locales extrémales mériterait une étude spécifique dans ce sens. En moyenne par grain, la contrainte axiale vaut au maximum 1.07 et au minimum 0.71 (ces 2 valeurs correspondant aux points extrêmes de la courbe bleue pointillée pour la contrainte σ_{11}). On remarque que les queues de la distribution gaussienne correspondante (courbe rouge pointillée) peuvent atteindre des valeurs plus élevées (respectivement moins) que la valeur maximale (respectivement minimale) simulée. Cela signifie également que les valeurs extrêmes des moyennes par grain sont sensibles aux

tirages particuliers considérés parmi les 140 réalisations étudiées. Cet aspect sera discuté au paragraphe 2.7 puis également aux chapitres 3 et 4 lors de l'étude des valeurs extrêmes.

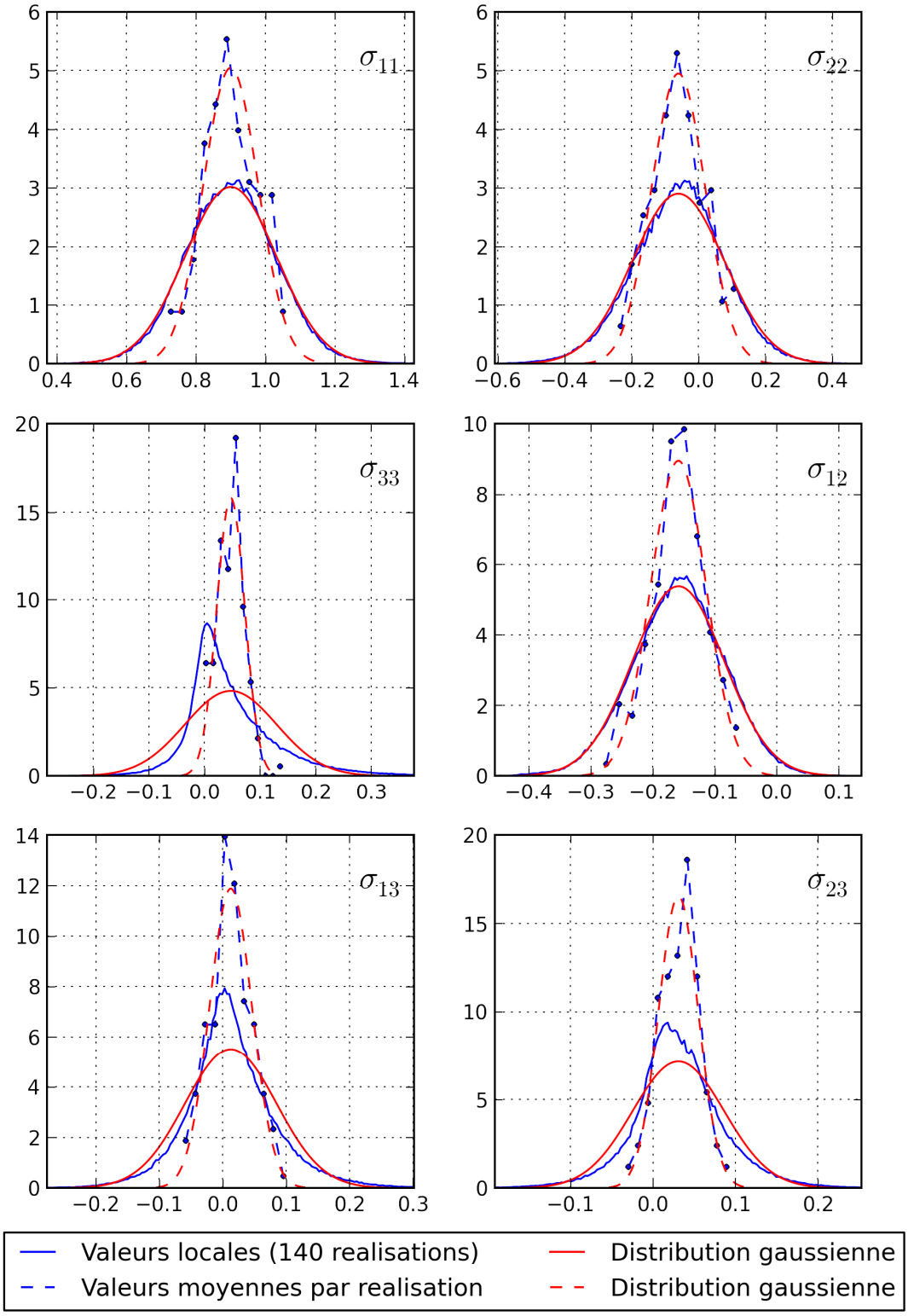


Figure 2-7: Distribution des contraintes au sein des N grains centraux d'orientation [B.O.B.] (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$).

2.5 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif

2.5.1 Définition des grandeurs post-traitées

La cission résolue locale τ^{α} sur un système de glissement α est déterminée en chaque point d'intégration (voir paragraphe 1.2.1.1 du chapitre 1). En la normalisant par la contrainte de traction macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$, on définit le facteur de Schmid effectif local μ_{eff}^{α}, tenant compte de l'état de contrainte effectivement atteint au point considéré:

$$\mu_{eff}^{\alpha} = \frac{\tau^{\alpha}}{\langle \sigma_{11} \rangle_V} \tag{2-12}$$

Le facteur de Schmid effectif est en général différent du facteur de Schmid « conventionnel » μ^{α}, tel que défini au chapitre 1 (voir Eq 1-2 au paragraphe 1.2.1.1), c'est-à-dire le paramètre - de nature purement géométrique - donnant accès à la cission résolue uniquement si le point considéré est localement dans un état de traction unixial identique à l'état de contrainte macroscopique (ce qui est le cas par exemple pour un monocristal).

Au sein du grain central de la réalisation k, on détermine la moyenne $\langle \tau^{\alpha} \rangle_{V_{gk}}$ et l'écart-type $SD_{V_{gk}}\left(\tau^{\alpha}\right)$ de la cission résolue sur chaque système α. Ainsi, en raisonnant en termes de cission résolue normalisée, la moyenne des cissions définit alors le facteur de Schmid effectif $\langle \mu_{eff}^{\alpha} \rangle_{V_{gk}}$, sur le système α, du grain central de la réalisation k. On notera μ_{eff}^{gk}, appelé facteur de Schmid effectif du grain central de la réalisation k, la valeur maximale obtenue parmi les 12 systèmes de glissement dans le cas CFC par exemple.

$$\mu_{eff}^{gk} = \max_{\alpha}\left(\langle \mu_{eff}^{\alpha} \rangle_{V_{gk}}\right) \tag{2-13}$$

Remarque : comme déjà mentionné au chapitre 1 (paragraphe 1.3.2.2), le facteur de Schmid effectif d'un grain est appelé facteur de Schmid apparent par (Robert 2012). En revanche, il est appelé facteur de Schmid local par (Przybyla 2010) - défini en moyenne dans un grain (alors équivalent à μ_{eff}^{gk}) mais aussi véritablement localement (alors équivalent à μ_{eff}^{α}) - alors que, au contraire, le facteur de Schmid « conventionnel » μ^{α} est appelé par Przybyla et al. facteur de Schmid apparent. Par ailleurs, il est également appelé facteur de Schmid macroscopique par (Guilhem 2011).

A la manière de Sauzay (Sauzay, 2007), on définit le facteur de Schmid effectif pour une orientation, i.e. pour l'ensemble des N grains centraux de la série de simulations. Or, d'une réalisation à une autre, il est possible que la cission résolue maximale (en moyenne dans le grain, i.e. décrite par μ_{eff}^{gk}) ne soit pas atteinte sur le même système de glissement. Deux manières de définir le facteur de Schmid effectif sont alors possibles. La première

consiste à calculer, sur l'ensemble des N grains, la moyenne du facteur de Schmid effectif $\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g}$ séparément pour chaque système de glissement, puis de ne retenir que la valeur maximale obtenue parmi les 12 systèmes.

$$\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g} = \frac{1}{V_g} \sum_{k=1}^{N} \left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_{gk}} V_{gk} \tag{2-14}$$

$$\mu_{eff} = \max_{\alpha} \left(\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g} \right) = \max_{\alpha} \left(\frac{1}{V_g} \sum_{k=1}^{N} \left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_{gk}} V_{gk} \right) \tag{2-15}$$

Le facteur de Schmid effectif μ_{eff} ainsi défini ne tient pas compte des cissions maximales atteintes sur un autre système pour certaines réalisations. On peut définir les écarts-types associés à μ_{eff} en considérant le système α_1 maximisant le facteur de Schmid effectif:

$$SD_{V_g}^{\text{inter}} \left(\mu_{eff}^{\alpha_1} \right) = \sqrt{\frac{1}{V_g} \sum_{k=1}^{N} V_{gk} \left(\left\langle \mu_{eff}^{\alpha_1} \right\rangle_{V_{gk}} - \mu_{eff} \right)^2} \tag{2-16}$$

$$SD_{V_g}^{\text{intra}} \left(\mu_{eff}^{\alpha_1} \right) = \sqrt{\frac{1}{V_g} \sum_{k=1}^{N} SD_{V_{gk}}^{2} \left(\mu_{eff}^{\alpha_1} \right) V_{gk}} \tag{2-17}$$

$$SD_{V_g} \left(\mu_{eff}^{\alpha_1} \right) = \sqrt{\left(SD_{V_g}^{\text{inter}} \left(\mu_{eff}^{\alpha_1} \right) \right)^2 + \left(SD_{V_g}^{\text{inter}} \left(\mu_{eff}^{\alpha_1} \right) \right)^2} \tag{2-18}$$

La seconde manière consiste à déterminer la moyenne des facteurs de Schmid effectif de chaque grain μ_{eff}^{gk} même si, d'une réalisation à une autre, ils sont obtenus sur des systèmes de glissement différents:

$$\mu_{eff\,2} = \frac{1}{V_g} \sum_{k} \mu_{eff}^{gk} V_{gk} = \frac{1}{V_g} \sum_{k=1}^{N} \left(\max_{\alpha} \left(\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_{gk}} \right) \right) V_{gk} \tag{2-19}$$

La question de la définition du facteur de Schmid effectif en combinant ou non les systèmes de glissement pouvait se poser également pour un seul grain. Le facteur de Schmid effectif d'un grain μ_{eff}^{gk} a été défini en considérant la moyenne des cissions résolues locales sur un même système de glissement. Or, en chaque point du grain, la cission locale maximale peut ne pas être atteinte sur le même système. Cependant, définir un facteur de Schmid effectif d'un grain en y comptabilisant les cissions locales maximales sur plusieurs systèmes de glissement ne nous a pas semblé pertinent. Il faudrait plutôt faire cette analyse par sous-régions du grain en définissant un facteur de Schmid effectif associé à un système dans une sous-région et, éventuellement, un facteur de Schmid effectif associé à un autre système dans une autre sous-région. Cet aspect sera étudié au chapitre 3.

2.5.2 Résultats

La moyenne et les écarts-types du facteur de Schmid effectif de chaque système de glissement, obtenus au sein des 140 grains centraux, sont reportés dans le Tableau 2-4. Pour l'orientation étudiée [B.O.B.], la valeur maximale des facteurs de Schmid effectifs $\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g}$ est obtenue sur le système primaire B5, c'est-à-dire $\mu_{eff} = \left\langle \mu_{eff}^{B5} \right\rangle_{V_g} = 0.426$. Il est inférieur au facteur de Schmid « conventionnel » $\mu^{B5} = 0.5$. Cela signifie que, en moyenne, la cission résolue d'un grain [B.O.B.] au sein d'un polycristal soumis à une contrainte de traction Σ_{11} sera plus faible que la cission résolue d'un monocristal [B.O.B.] soumis à la même contrainte.

SG α		μ^{α}	$\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g}$	$SD_{V_g}^{\text{intra}}$	$SD_{V_g}^{\text{inter}}$	SD_{V_g}
1	(A2)	0.121	0.179	0.048	0.037	0.061
2	(A3)	0.318	0.234	0.044	0.028	0.052
3	(A6)	0.197	0.067	0.037	0.025	0.045
4	(B2)	0.250	0.292	0.052	0.039	0.065
5	(B4)	0.250	0.135	0.044	0.026	0.051
6	**(B5)**	**0.500**	**0.426**	**0.046**	**0.035**	**0.058**
7	(C1)	0.053	0.083	0.044	0.026	0.051
8	(C3)	0.219	0.098	0.045	0.031	0.055
9	(C5)	0.167	0.047	0.034	0.013	0.037
10	(D1)	0.182	0.193	0.047	0.029	0.055
11	(D4)	0.287	0.194	0.046	0.032	0.056
12	(D6)	0.469	0.387	0.049	0.036	0.061

Tableau 2-4: Moyenne et écarts-types du facteur de Schmid effectif au sein de N grains centraux par système de glissement.

On remarque que, pour 8 systèmes de glissement, le facteur de Schmid effectif $\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g}$ est inférieur au facteur de Schmid conventionnel μ^{α}. Deux effets expliquent cette tendance observée pour une majorité des systèmes de glissement. Tout d'abord, la contrainte axiale en moyenne dans le grain central est inférieure à la contrainte axiale macroscopique, ce qui conduit à une diminution du facteur de Schmid effectif par rapport au facteur de Schmid conventionnel pour les 12 systèmes de glissements. Ensuite, la présence d'autres contraintes non-nulles en moyenne dans le grain central peut conduire à une augmentation ou à une diminution du facteur de Schmid effectif en fonction du système de glissement considéré et de son orientation. L'écart relatif moyen entre le facteur de Schmid effectif et le facteur de Schmid est :

$$Ecart_{rel.}^{\mu} = \frac{1}{12} \sum_{\alpha} \frac{\left| \mu^{\alpha} - \left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g} \right|}{\mu^{\alpha}} = 38\% \qquad (2\text{-}20)$$

Pour le système primaire B5, l'écart relatif est de 15%. En adoptant la seconde définition du facteur de Schmid effectif afin de tenir compte du fait que, dans certaines réalisations, le facteur de Schmid effectif maximal est atteint sur un système de glissement différent, on obtient $\mu_{eff\,2} = 0.427$. Cette valeur est très proche de la valeur de 0.426 obtenue sur le système primaire B5 pour les 140 réalisations. En effet, le nombre de réalisations où la cission maximale (en moyenne dans un grain) est atteinte sur un système différent de B5 est plutôt faible: cette situation correspond à 17 réalisations et le système de glissement concerné est le système secondaire D6. De plus, dans ces cas de figure, la cission résolue maximale est très légèrement supérieure à celle obtenue sur le système primaire B5. Nous verrons que cet effet est plus important pour les orientations favorisant le glissement multiple (par exemple les orientations [100], [110] ou [111], cf. paragraphe 3.3.2).

Les écarts-types recensés dans le Tableau 2-4 montre que, tout comme cela avait été constaté pour les contraintes à l'échelle du grain central, la dispersion de la cission résolue est de type intra- et inter-granulaire. Cependant l'écart-type intra-granulaire est, en moyenne sur les 12 systèmes de glissement, 1.5 fois plus élevé que l'écart-type inter-granulaire.

L'histogramme suivant (Figure 2-8) représente la distribution du facteur de Schmid effectif local (courbe bleue continue), ainsi que la distribution des moyennes par réalisation (courbe bleue pointillée), sur le système de glissement B5. La différence de ces 2 distributions est reliée à la dispersion intra-réalisation. L'allure des 2 distributions est proche d'une gaussienne. Cependant, pour les moyennes par réalisation, le faible nombre de valeurs (i.e. 140) se traduit par des écarts non-négligeables entre l'histogramme et la courbe gaussienne, bien que l'allure générale soit bien retrouvée.

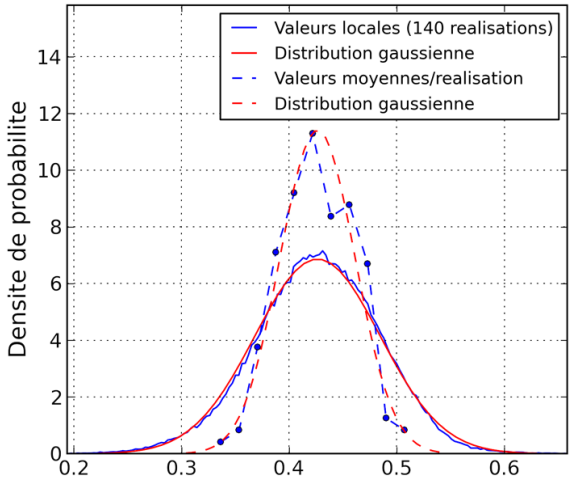


Figure 2-8: Distribution du facteur de Schmid effectif sur le système de glissement B5 au sein des N grains centraux d'orientation [B.O.B.].

Parmi l'ensemble des réalisations, la valeur minimale du facteur de Schmid effectif d'un grain central μ_{eff}^{gk} est de 0.328 et la valeur maximale est de 0.516. Ces 2 valeurs correspondent aux points extrêmes de l'histogramme de la Figure 2-8 (courbe bleue pointillée). La distribution du facteur de Schmid effectif local est donnée sur la Figure 2-9 pour ces 2 réalisations extrémales. Les 2 distributions présentent un recouvrement

non-négligeable: localement, la cission minimale du grain présentant la cission moyenne maximale est inférieure à la cission maximale du grain présentant la cission moyenne minimale. La valeur maximale de facteur de Schmid effectif notée en un point d'intégration est de 0.81 et la valeur minimale est de 0.13.

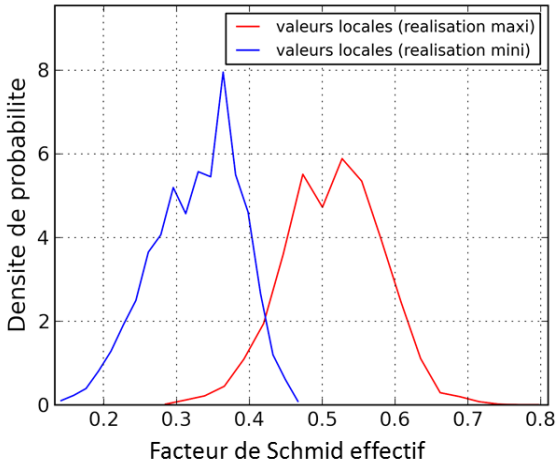


Figure 2-9: Distribution du facteur de Schmid effectif local sur le système de glissement B5 au sein du grain central pour lequel le facteur de Schmid effectif est maximal (courbe rouge) et minimal (courbe bleue).

Bilan sur le facteur de Schmid effectif :

La notion de facteur de Schmid effectif, introduite par (Sauzay 2007), est importante dans le présent travail. Accompagné d'information sur la dispersion de la cission résolue (écart-types intra- et inter-granulaire, allure de la distribution), le facteur de Schmid effectif permet de décrire statistiquement l'état de cission dans un grain.

Considérons un ensemble de grains, par exemple orientés [B.O.B.], en surface d'un polycristal soumis à une contrainte de traction macroscopique Σ_{11} :

- La moyenne de la cission résolue sur le système de glissement B5 $\langle \tau^{B5} \rangle_{V_g}$, calculée sur le domaine défini par la réunion des grains considérés, est égale au produit du facteur de Schmid effectif μ_{eff} et de la contrainte macroscopique Σ_{11} (la valeur obtenue sur le système B5 étant la plus élevée parmi les 12 systèmes).
- La moyenne de la cission $\langle \tau^{B5} \rangle_{V_{gk}}$ d'un grain k suit une distribution normale de moyenne $\mu_{eff} \times \Sigma_{11}$ et d'écart-type $\Sigma_{11} \times SD_{Vg}^{inter}(\mu_{eff}^{B5})$, i.e. l'écart-type inter-granulaire.
- La distribution de la cission locale dans le grain k suit une loi normale de moyenne $\langle \tau^{B5} \rangle_{V_{gk}}$ et d'écart-type $\Sigma_{11} \times SD_{V_{gk}}^{intra}(\mu_{eff}^{B5})$, i.e. l'écart-type intra-granulaire.

2.6 Analyse d'un indicateur d'amorçage tenant compte de la contrainte normale au plan de glissement

Le facteur de Schmid effectif constitue un indicateur de l'activation potentielle du glissement plastique au sein d'un ensemble de grains de même orientation (si défini pour N réalisations) ou au sein d'un seul de ces grains pour un voisinage granulaire donné (si défini pour 1 réalisation). L'évaluation du développement du glissement plastique après son activation, notamment sous chargement cyclique (accumulation, adaptation), nécessiterait de réaliser la même démarche de simulation en élasto-plasticité cristalline. Néanmoins, l'analyse du facteur de Schmid effectif en relation avec les configurations cristallographiques locales permet d'identifier les sites préférentiels d'activation de la plasticité. Dans le contexte de l'étude de l'amorçage en fatigue, de tels sites satisfont donc une première condition nécessaire - mais pas suffisante - à la formation de fissures le long d'une bande de glissement persistante.

Cependant, certains sites d'amorçage observés au sein d'un alliage TA6V résultent d'un mécanisme de type pseudo-clivage, en particulier suivant les plans de base de la maille hexagonale de la phase α (Bridier 2006). Ces observations suggèrent un rôle de la contrainte normale au plan de glissement, conjointement à celui de la plasticité, dans le processus d'amorçage. En adaptant la formulation de critères d'amorçage macroscopique à l'échelle cristalline, i.e. définis sur les systèmes de glissement, de type Fatemi-Socie (Bennett 2003, Przybyla 2012) ou Matake (Robert 2012), on définit ici un indicateur tenant compte simultanément de la cission résolue et de la contrainte normale au plan de glissement. Par ailleurs, afin de mieux comprendre le rôle de la contrainte normale dans l'indicateur défini, celle-ci sera étudiée d'abord séparément.

2.6.1 Définition des quantités post-traitées

2.6.1.1 Contrainte normale au plan de glissement

La contrainte normale au plan de glissement du système de glissement α est définie localement par la relation suivante :

$$\sigma_n^\alpha = \sigma_{ij} n_i^\alpha n_j^\alpha \tag{2-21}$$

De façon analogue au facteur de Schmid, en considérant un état de traction simple (Chapitre 1, paragraphe 1.2.1.1, Figure 1-6), on peut définir le facteur de contrainte normale :

$$\upsilon^\alpha = \frac{\sigma_n^\alpha}{\sigma} = (\vec{t}.\overrightarrow{n^\alpha})^2 = \cos^2\phi \tag{2-22}$$

La valeur maximale obtenue parmi les 12 systèmes de glissement sera appelée le facteur de contrainte normale υ :

$$\upsilon = \max_{\alpha}\left(\upsilon^{\alpha}\right) \tag{2-23}$$

On ajoutera éventuellement le terme « conventionnel » pour désigner υ afin de le distinguer du facteur effectif défini ensuite.

En chaque point d'intégration, on définit le facteur de contrainte normale effectif au plan de glissement du système α en normalisant la contrainte normale locale par la contrainte axiale macroscopique $\langle\sigma_{11}\rangle_V$ **:**

$$\upsilon_{eff}^{\alpha} = \frac{\sigma_n^{\alpha}}{\langle\sigma_{11}\rangle_V} \tag{2-24}$$

Au sein du grain central de la réalisation k, on détermine la moyenne du facteur de contrainte normale effectif $\langle\upsilon_{eff}^{\alpha}\rangle_{V_{gk}}$ séparément sur chaque système α. On notera υ_{eff}^{gk}, appelé facteur de contrainte normale effectif du grain central de la réalisation k, la valeur maximale obtenue parmi les 12 systèmes de glissement.

$$\upsilon_{eff}^{gk} = \max_{\alpha}\left(\langle\upsilon_{eff}^{\alpha}\rangle_{V_{gk}}\right) \tag{2-25}$$

Pour l'ensemble des N réalisations, la moyenne du facteur de contrainte normale effectif $\langle\upsilon_{eff}^{\alpha}\rangle_{V_g}$ est déterminée séparément pour chaque système de glissement. On définit alors le facteur de contrainte normale effectif υ_{eff} de l'ensemble des N grains centraux comme la valeur maximale des moyennes précédentes:

$$\upsilon_{eff} = \max_{\alpha}\left(\langle\upsilon_{eff}^{\alpha}\rangle_{V_g}\right) \tag{2-26}$$

Ce facteur effectif ne tient pas compte des contraintes normales maximales atteintes, en moyenne dans le grain central, sur d'autres plans de glissement pour certaines réalisations. Comme cela avait été fait pour le facteur de Schmid effectif, d'autres définitions pourraient être introduites pour rendre compte de telles situations. L'expérience a montré que les résultats obtenus avec ces définitions alternatives étaient peu différents dans la majorité des cas et surtout que l'information qu'ils apportaient était difficilement exploitable. Il a donc été choisi de ne pas indiquer ces définitions et les résultats associés. Ce commentaire s'appliquera également à l'indicateur d'amorçage introduit au paragraphe suivant.

Les écarts-types associés à υ_{eff} sont définis de la même façon que dans le cas du facteur de Schmid effectif (voir Eq. 2-16 à 2-18).

2.6.1.2 Indicateur d'amorçage

Définition de l'indicateur dans le cas d'un monocristal en traction

La grandeur adimensionnée introduite ici, appelée indicateur d'amorçage, tient compte de la cission résolue et de la contrainte normale au plan de glissement. En considérant tout d'abord le cas d'un monocristal en traction simple, l'indicateur proposé prend la forme suivante:

$$I^{\alpha} = \frac{\tau^{\alpha}}{\sigma}\left(1+\frac{m\sigma_n^{\alpha}}{\sigma}\right) = \mu^{\alpha}\left(1+m\upsilon^{\alpha}\right) \tag{2-27}$$

La plus grande valeur obtenue sur les 12 systèmes de glissement sera appelée l'indicateur d'amorçage I (qualifiée parfois de « conventionnel » afin de le distinguer de l'indicateur effectif) :

$$I = \max_{\alpha}\left(I^{\alpha}\right) \tag{2-28}$$

La formulation proposée consiste à considérer que le glissement plastique est la force motrice principale de l'amorçage (elle en est une condition nécessaire puisque l'indicateur est nul si la cission résolue est nulle) modulée par une contrainte normale au plan de glissement favorisant l'amorçage en traction. Un coefficient m de sensibilité à la contrainte normale au plan de glissement est alors introduit. En absence d'information relative à ce paramètre, il sera fixé arbitrairement à 1. D'autres valeurs seront considérées ponctuellement. Notons qu'une valeur unitaire du paramètre équivalent dans le critère de Fatemi-Socie généralisé à l'échelle cristalline a été utilisée pour un alliage de titane TA6V (Przybyla 2012). Dans ce cas, les auteurs normalisent la contrainte normale au plan de glissement avec la limite d'élasticité.

SG		μ^{α}	υ^{α}	I^{α}
1	(A2)	0.121	0.117	0.135
2	(A3)	0.318	0.117	0.355
3	(A6)	0.197	0.117	0.220
4	(B2)	0.250	0.500	0.375
5	(B4)	0.250	0.500	0.375
6	**(B5)**	**0.500**	**0.500**	**0.750**
7	(C1)	0.053	0.056	0.056
8	(C3)	0.219	0.056	0.232
9	(C5)	0.167	0.056	0.176
10	(D1)	0.182	0.661	0.302
11	(D4)	0.287	0.661	0.477
12	**(D6)**	**0.469**	**0.661**	**0.780**

Tableau 2-5: Facteur de Schmid, facteur de contrainte normale et indicateur d'amorçage (m=1) calculés pour un monocristal d'orientation [B.O.B.] en traction simple.

Le facteur de Schmid, le facteur de contrainte normale et l'indicateur d'amorçage « conventionnels », i.e. calculés pour un monocristal en traction simple, sont donnés dans le Tableau 2-5 pour une orientation [B.O.B.]. Malgré un facteur de Schmid μ^{α} maximal sur le

système B5, l'indicateur d'amorçage I^{α} atteint la valeur maximale sur le système D6 sur lequel la contrainte normale est la plus élevée.

Ce résultat dépend bien sûr de la valeur du coefficient *m* fixé ici à l'unité de façon arbitraire. Le même indicateur d'amorçage est atteint sur les 2 systèmes de glissement B5 et D6 lorsque *m* est égal à 0.517, avec alors $I^{B5} = I^{D6} = 0.629$.

Post-traitement des simulations

La cission résolue locale τ^{α} et la contrainte normale locale au plan de glissement σ_n^{α} d'un système de glissement α sont déterminées en chaque point d'intégration. En normalisant ces valeurs par la contrainte de traction macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$, on définit l'indicateur d'amorçage effectif local I_{eff}^{α}, tenant compte de l'état de contrainte effectivement atteint au point considéré:

$$I_{eff}^{\alpha} = \frac{\tau^{\alpha}}{\langle \sigma_{11} \rangle_V} \left(1 + \frac{m\sigma_n^{\alpha}}{\langle \sigma_{11} \rangle_V} \right) = \mu_{eff}^{\alpha} \left(1 + m\upsilon_{eff}^{\alpha} \right) \tag{2-29}$$

En absence d'indication contraire, le coefficient de sensibilité à la contrainte normale *m* sera choisi égal à 1.

Pour chaque réalisation k, on détermine la moyenne dans le grain central de l'indicateur d'amorçage effectif $\left\langle I_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_{gk}}$ séparément sur chaque système α. On notera I_{eff}^{gk}, appelé indicateur d'amorçage effectif du grain central de la réalisation k, la valeur maximale obtenue parmi les 12 systèmes de glissement.

$$I_{eff}^{gk} = \max_{\alpha} \left(\left\langle I_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_{gk}} \right) \tag{2-30}$$

Pour l'ensemble des N réalisations, la moyenne de l'indicateur d'amorçage effectif $\left\langle I_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g}$ est déterminée séparément pour chaque système de glissement. On définit alors l'indicateur d'amorçage effectif I_{eff} de l'ensemble des N grains centraux comme la valeur maximale des moyennes précédentes:

$$I_{eff} = \max_{\alpha} \left(\left\langle I_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g} \right) = \max_{\alpha} \left(\frac{1}{V_g} \sum_k \left\langle I_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_{gk}} V_{gk} \right) \tag{2-31}$$

2.6.2 Résultats

2.6.2.1 Distribution de la contrainte normale au plan de glissement

La moyenne et les écarts-types du facteur de contrainte normale effectif au plan de glissement, obtenu pour les 140 grains centraux, sont reportés dans le Tableau 2-6 pour les 12 systèmes de glissement. Les données représentées dans ce tableau sont donc équivalentes à celles indiquées précédemment pour le facteur de Schmid effectif, mais en considérant la contrainte normale au plan de glissement au lieu de la cission résolue. A titre de comparaison, on a également inclus le facteur de contrainte normale υ^{α} « conventionnel » (obtenu dans le cas d'un monocristal en traction simple). Afin de conserver le même format de tableau que celui utilisé pour le facteur de Schmid effectif et l'indicateur d'amorçage, les données sont indiquées par système de glissement, alors qu'elles ne dépendent que du plan de glissement considéré. On retrouve donc les mêmes informations sur les 3 systèmes constitués du même plan de glissement.

Le facteur de contrainte normale effectif sur le plan de glissement B vaut 0.486. Cette valeur est inférieure à celle obtenue pour un état de contrainte uniforme au sein du polycristal (0.5). On observe donc la même tendance, cependant moins forte, que celle notée sur la cission résolue pour le système B5, son facteur de Schmid « conventionnel » étant de 0.5 et son facteur de Schmid effectif étant de 0.426. Le plan de glissement D subit la contrainte normale la plus élevée, égale à 0.712, qui est cette fois plus élevée qu'en faisant l'hypothèse de contraintes uniformes (0.661).

La dispersion des résultats a une origine inter-réalisation et intra-réalisation. On note que l'écart-type intra-réalisation est 1.5 à 2 fois plus élevé que l'écart-type inter-réalisation. L'écart-type total représente alors 10% à 15% de la contrainte de traction macroscopique.

SG		υ^{α}	$\left\langle \upsilon^{\alpha}_{eff} \right\rangle_{Vg}$	SD^{intra}_{Vg}	SD^{inter}_{Vg}	SD_{Vg}
1	(A2)	0.117	0.041	0.095	0.045	0.105
2	(A3)	0.117	0.041	0.095	0.045	0.105
3	(A6)	0.117	0.041	0.095	0.045	0.105
4	(B2)	0.500	0.486	0.109	0.058	0.123
5	(B4)	0.500	0.486	0.109	0.058	0.123
6	**(B5)**	**0.500**	**0.486**	**0.109**	**0.058**	**0.123**
7	(C1)	0.056	-0.057	0.118	0.081	0.143
8	(C3)	0.056	-0.057	0.118	0.081	0.143
9	(C5)	0.056	-0.057	0.118	0.081	0.143
10	(D1)	0.661	0.712	0.117	0.085	0.144
11	(D4)	0.661	0.712	0.117	0.085	0.144
12	**(D6)**	**0.661**	**0.712**	**0.117**	**0.085**	**0.144**

Tableau 2-6: Moyennes et écarts-types du facteur de contrainte normale effectif au sien des 140 grains centraux par système de glissement.

Les histogrammes suivants représentent la distribution du facteur de contrainte normale effectif local (courbes bleues), ainsi que la distribution des moyennes par réalisation (courbe bleue pointillée) sur le plan de glissement B (Figure 2-10.a) et sur le plan de glissement D (Figure 2-10.b).

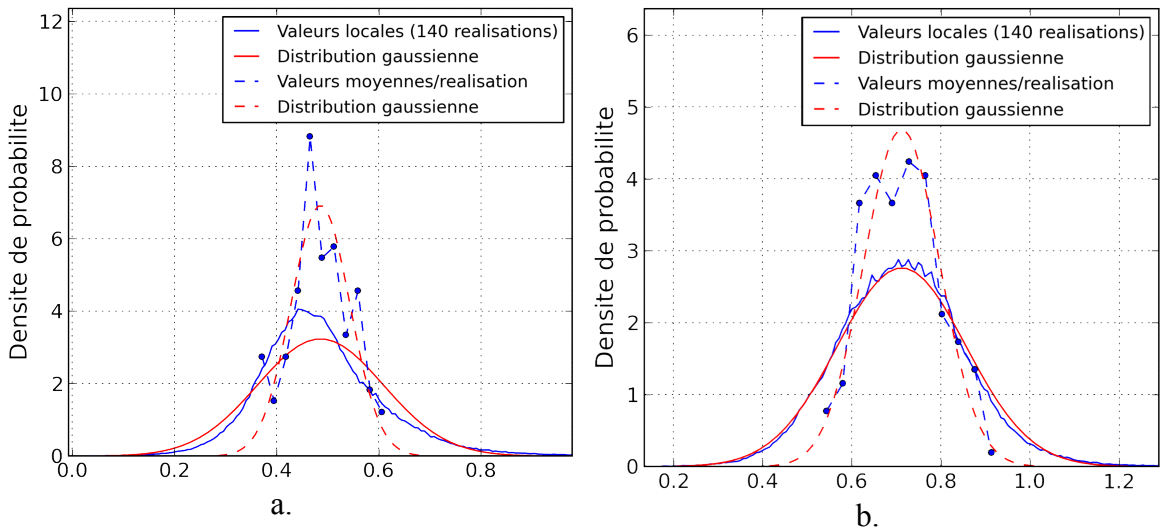


Figure 2-10: Distribution du facteur de contrainte normale effectif au sein des 140 grains centraux : a. plan de glissement B ; b, plan de glissement D.

On remarque que la distribution des contraintes normales locales sur le plan B présente une dissymétrie avec un pic aux valeurs légèrement inférieures à la moyenne. La distribution s'écarte ainsi légèrement d'une distribution normale qui peut toutefois fournir une description acceptable en première approximation. Pour le plan D, et pour les valeurs moyennes par réalisation, les distributions obtenues sont bien décrites par une distribution normale.

2.6.2.2 Distribution de l'indicateur d'amorçage

La moyenne et les écarts-types de l'indicateur d'amorçage effectif des 12 systèmes de glissement sont présentés dans le Tableau 2-7.

SG		I^{α}	$\left\langle I_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
1	(A2)	0.135	0.185	0.052	0.036	0.063
2	(A3)	0.355	0.244	0.054	0.034	0.064
3	(A6)	0.220	0.071	0.041	0.028	0.050
4	(B2)	0.375	0.435	0.087	0.066	0.109
5	(B4)	0.375	0.202	0.071	0.042	0.083
6	**(B5)**	**0.750**	**0.636**	**0.093**	**0.070**	**0.117**
7	(C1)	0.056	0.077	0.043	0.023	0.049
8	(C3)	0.232	0.092	0.046	0.030	0.055
9	(C5)	0.176	0.045	0.034	0.014	0.037
10	(D1)	0.302	0.332	0.088	0.058	0.105
11	(D4)	0.477	0.332	0.081	0.057	0.099
12	**(D6)**	**0.780**	**0.664**	**0.101**	**0.079**	**0.128**

Tableau 2-7: Moyenne et écarts-types de l'indicateur d'amorçage effectif au sein des 140 grains centraux par système de glissement.

Malgré un facteur de Schmid effectif maximal sur le système de glissement B5, on obtient ici l'indicateur d'amorçage effectif maximal sur le système de glissement D6 (I_{eff} =0.664) pour lequel la contrainte normale est maximale. La valeur obtenue sur le système de glissement B5 vaut 0.636. Ce résultat est dû au choix effectué pour le coefficient de sensibilité à la contrainte normale (m=1). On remarque que, globalement, les écarts-types prennent des valeurs intermédiaires à celles constatées séparément sur le facteur de Schmid effectif et le facteur de contrainte normale effectif.

Les histogrammes suivants (Figure 2-11) représentent la distribution des valeurs locales de l'indicateur sur les 2 systèmes de glissement B5 et D6 (courbes bleues continues), ainsi que la distribution des moyennes par réalisation (courbes bleues pointillées). Ces distributions sont toutes décrites de façon acceptable par une loi normale.

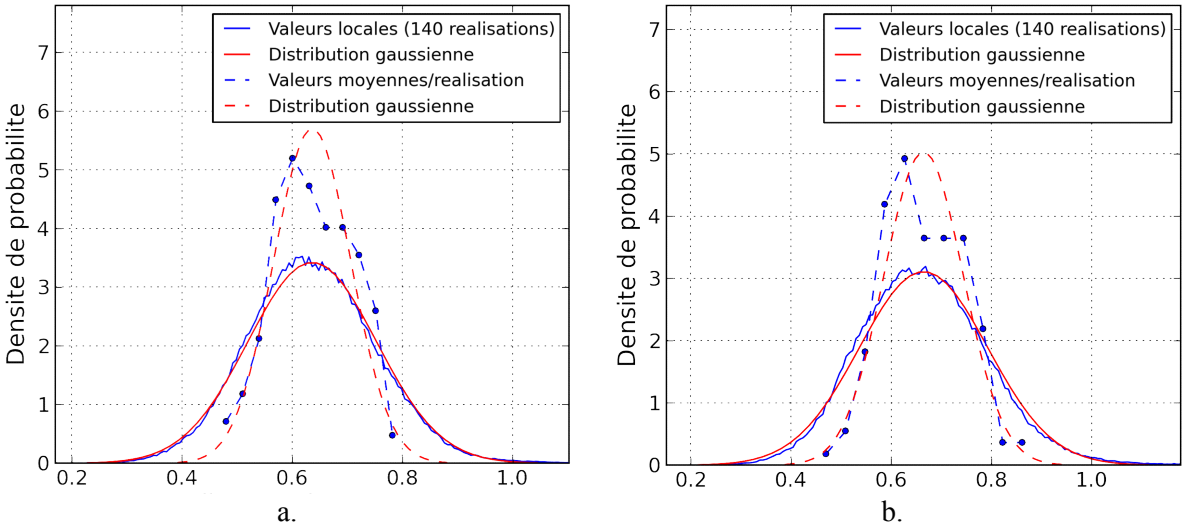


Figure 2-11: Distribution de l'indicateur d'amorçage effectif au sein des 140 grains centraux : a. plan de glissement B5 ; b, plan de glissement D6.

La distribution de l'indicateur d'amorçage effectif sur les 2 systèmes de glissement B5 et D6 est donnée pour *m*=1 (Figure 2-12.a) et *m*=0.517 (Figure 2-12.b), c'est-à-dire la valeur du coefficient de sensibilité à la contrainte normale m pour lequel l'indicateur d'amorçage « conventionnel » est égal sur ces 2 systèmes. Lorsque *m*=0.517, on trouve que l'indicateur d'amorçage effectif sur le système B5 (0.535) est légèrement supérieur à celui sur le système D6 (0.53), i.e. $\left\langle I_{eff}^{B5} \right\rangle_{V_g} > \left\langle I_{eff}^{D6} \right\rangle_{V_g}$.

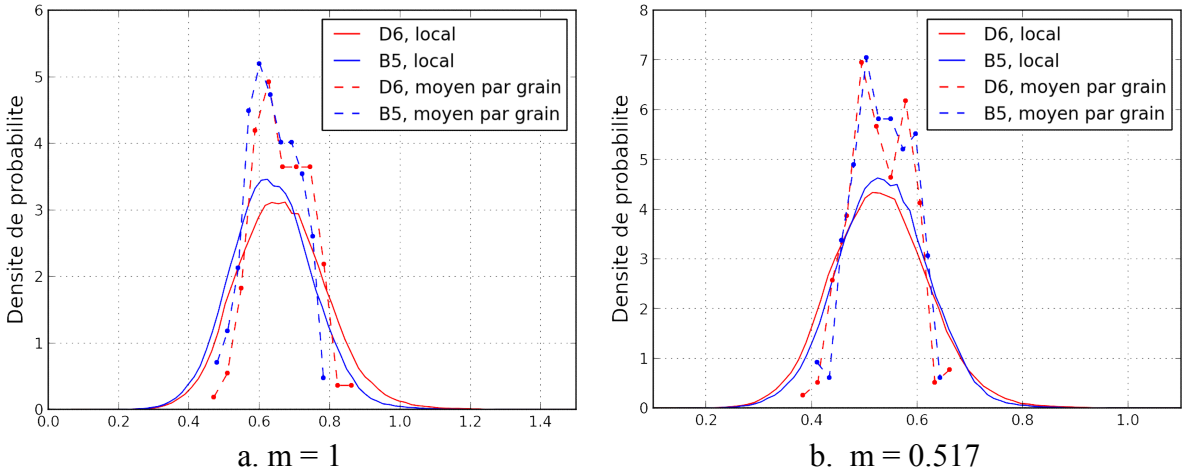


Figure 2-12: Influence du coefficient de sensibilité à la contrainte normale m sur la distribution de l'indicateur d'amorçage effectif des systèmes de glissement B5 et D6 (a. m=1; b. m=0.517).

2.7 Etude de l'influence de certains paramètres de simulations

Avant de mettre en œuvre, au cours des chapitres 3 & 4, la stratégie de simulation décrite précédemment, il convient d'étudier l'influence de certains paramètres des simulations afin de justifier de leur choix. Sans être exhaustif, nous mentionnerons dans ce qui suit certains résultats portant sur l'influence de:

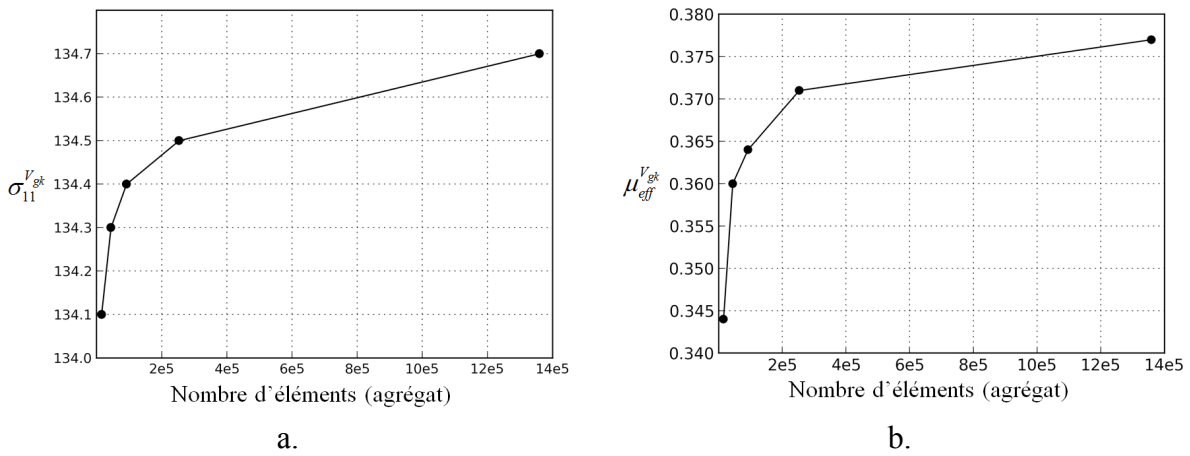
- la densité de maillage,
- la dimension des agrégats et le nombre de grains,
- le nombre de réalisations N d'une série de simulations.

2.7.1 Sensibilité à la densité de maillage

Les résultats présentés dans le Tableau 2-8 correspondent à des simulations sur un seul et même agrégat (grain central d'orientation [100]) maillé avec une densité d'éléments croissante. Des éléments-finis tétraédriques C3D4 sont utilisés. On y compare les quantités suivantes: la contrainte axiale moyenne dans l'agrégat $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ et le grain central $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$, les écarts-types correspondants, puis le facteur de Schmid effectif μ_{eff}.

Maillage	Nombre éléments (Agrégat)	Nombre éléments (GC)	$\langle \sigma_{11} \rangle_V$ (MPa)	$SD_V(\sigma_{11})$ (MPa)	$\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ (MPa)	$SD_{V_g}(\sigma_{11})$ (MPa)	μ_{eff}
1	15254	134	194.9	41.7	134.1	13.2	0.344
2	44055	443	192.3	41.1	134.3	13.1	0.360
3	91911	852	191.2	41.0	134.4	13.0	0.364
4	252999	2258	189.8	40.4	134.5	12.9	0.371
5	1358940	12004	188.7	39.9	134.7	12.7	0.377

Tableau 2-8: Influence du nombre d'éléments utilisé.



a. b.

Figure 2-13: Influence du nombre d'éléments sur (a) la contrainte axiale moyenne dans le grain central et (b) son facteur de Schmid effectif.

A partir de ces résultats, il a été choisi de travailler avec le maillage n°4 (252 999 éléments dans l'agrégat et 2 258 dans le grain central) à partir duquel les résultats obtenus ont été jugés stables. L'écart relatif entre les résultats obtenus pour ce maillage et celui le plus dense (maillage n°5) est d'environ 0.5% pour les contraintes moyennes (agrégat et grain central) et d'environ 1.5% pour le facteur de Schmid effectif.

2.7.2 Sensibilité à la dimension de l'agrégat et au nombre de grains

Influence du nombre de grains suivant la profondeur

On compare ici 3 agrégats dont les dimensions en surface sont identiques, mais comportant un nombre de grains différent suivant la profondeur. Les paramètres de simulations sont identiques à ceux du paragraphe précédent avec la densité de maillage 4. L'orientation cristallographique des grains dans 3 premières couches est la même pour les 3 agrégats. Pour chaque agrégat, une seule réalisation a été simulée.

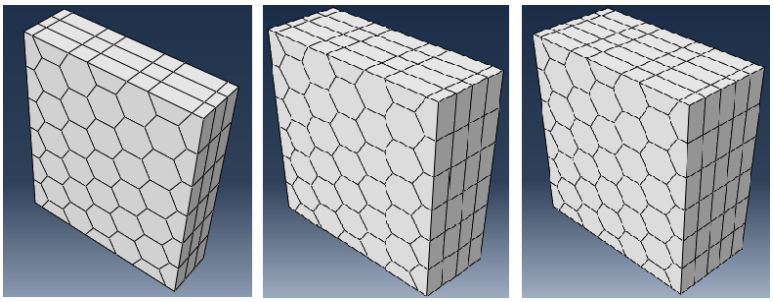


Figure 2-14: Agrégat avec 3, 4 et 5 grains en profondeur

Les résultats obtenus pour ces 3 simulations sont donnés dans le Tableau 2-9. Les valeurs obtenues sont très proches. Quelques différences sont constatées notamment au niveau du grain central, ce qui traduit l'influence des grains supplémentaires et celle de l'éloignement du bord (C.L.) opposé à la surface. L'écart maximal est obtenu pour le facteur de Schmid effectif entre l'agrégat à 3 couches de grains et celui à 5 couches de grains, et il représente un peu moins de 3%. Le compromis retenu a consisté à choisir seulement 3 couches de grains en profondeur afin de pouvoir considérer un nombre de réalisations suffisant, comme discuté au paragraphe suivant.

Profondeur	3 couches	4 couches	5 couches
$\langle\sigma_{11}\rangle_V$ (MPa)	198.86	198.66	197.47
$SD_V(\sigma_{11})$ (MPa)	39.88	39.23	39.69
$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_g}$ (MPa)	151.91	151.34	152.24
$SD_{V_g}(\sigma_{11})$ (MPa)	19.41	19.39	19.51
μ_{eff}	0.378	0.367	0.368

Tableau 2-9: Influence du nombre de grains suivant la profondeur.

Influence du nombre de grains dans le plan de la surface

On considère ici 3 agrégats avec un nombre de grains identique dans la profondeur mais un nombre de grains dans le plan de la surface différent (22, 45 et 67 grains). La distance du grain central aux bords correspond environ à 1, 2 et 3 fois de taille du grain respectivement. Les paramètres de simulations sont identiques à ceux du paragraphe précédent. Une série de 200 simulations a été réalisée pour chaque agrégat.

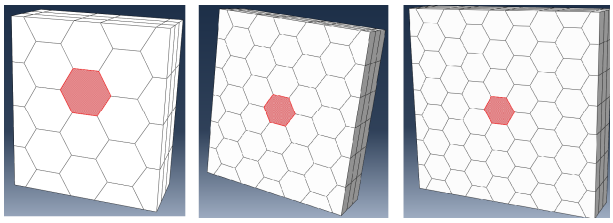


Figure 2-15: Agrégat avec 22, 45 et 67 grains dans le plan de la surface

Le Tableau 2-10 présente les résultats obtenus pour les 3 agrégats. On retiendra la taille intermédiaire de 45 grains en surface. On remarque que les résultats obtenus avec le plus petit agrégat fournissent des résultats relativement proches des 2 autres.

Nb. de grains	22	45	67
$\langle \sigma_{11} \rangle_V$ (MPa)	191.2	192.5	192.9
$SD_V(\sigma_{11})$ (MPa)	41.2	39.9	39.4
$\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ (MPa)	135.7	136.7	138.0
$SD_{V_g}(\sigma_{11})$ (MPa)	20.4	21.0	21.7

Tableau 2-10: Influence du nombre de grains dans le plan de la surface

2.7.3 Sensibilité au nombre de réalisations

Afin de quantifier la fluctuation qui peut être observée sur une grandeur A évaluée par un tirage de N réalisations, on utilise l'erreur d'échantillonnage:

$$\varepsilon_{rel}(A) = \frac{2SD_V(A)}{\langle A \rangle_V \sqrt{N}} \tag{2-32}$$

Avec $\langle A \rangle_V$, $SD_V(A)$ la moyenne et l'écart-type de A dans le domaine V, et N le nombre de réalisations.

Les courbes de la Figure 2-16 sont basées sur un ensemble de 500 réalisations/simulations effectuées avec un agrégat constitué d'octaèdres tronqués et un grain central d'orientation [B.O.B.]. Elles représentent l'évolution de l'erreur relative d'échantillonnage en fonction du nombre de réalisations considérées pour déterminer les grandeurs suivantes:

- la moyenne $\langle\sigma_{11}\rangle_V$ et l'écart-type $SD_V(\sigma_{11})$ de la contrainte axiale au sein des agrégats
- la moyenne $\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$ et l'écart-type $SD_{Vg}(\sigma_{11})$ de la contrainte axiale au sein des grains centraux

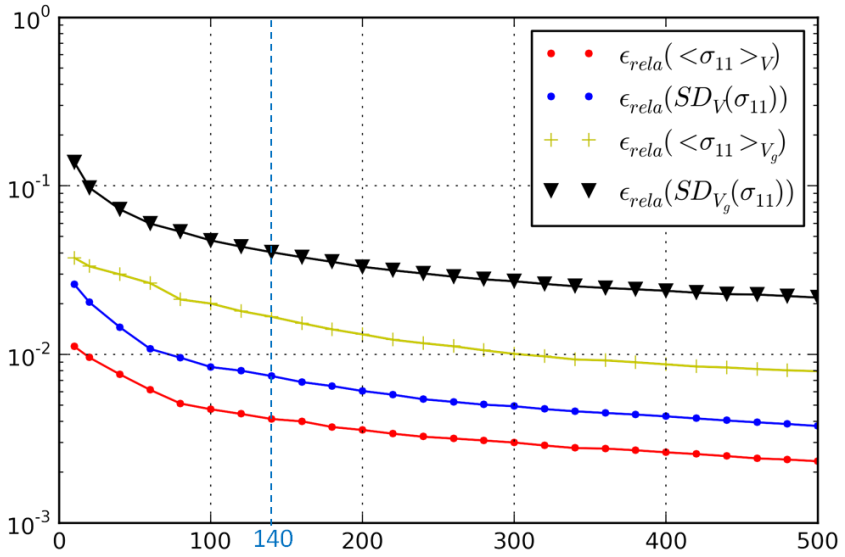


Figure 2-16: Erreur relative d'échantillonnage en fonction du nombre de réalisations considérées sur la contrainte axiale moyenne et son écart-type au sein de l'agrégat et du grain central.

On remarque que l'erreur relative diminue évidemment avec le nombre de réalisations. Cette diminution devient très lente lorsque le nombre de réalisation devient élevé. L'erreur commise sur une moyenne d'un champ est supérieure à celle commise sur son écart-type. De plus l'erreur augmente avec le « niveau de localité » de la grandeur considérée. Elle est donc plus importante pour les grandeurs définies à l'échelle du grain central. Le nombre de réalisations retenu pour la suite est 140: ce choix correspond à une erreur relative d'échantillonnage de 2% et 4% environ pour la contrainte moyenne $\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$ et son écart-type $SD_{Vg}(\sigma_{11})$, respectivement, au sein du grain central. L'erreur commise sur le facteur de Schmid effectif (ou la cission résolue) sera du même ordre puisqu'il dépend linéairement des contraintes.

Le choix de ce nombre de réalisations est bien-sûr un compromis entre la précision recherchée et la durée des simulations et de leur analyse. Avec les paramètres de simulation retenus, une série de simulations nécessite 10 heures (dont 3 heures pour les post-traitements).

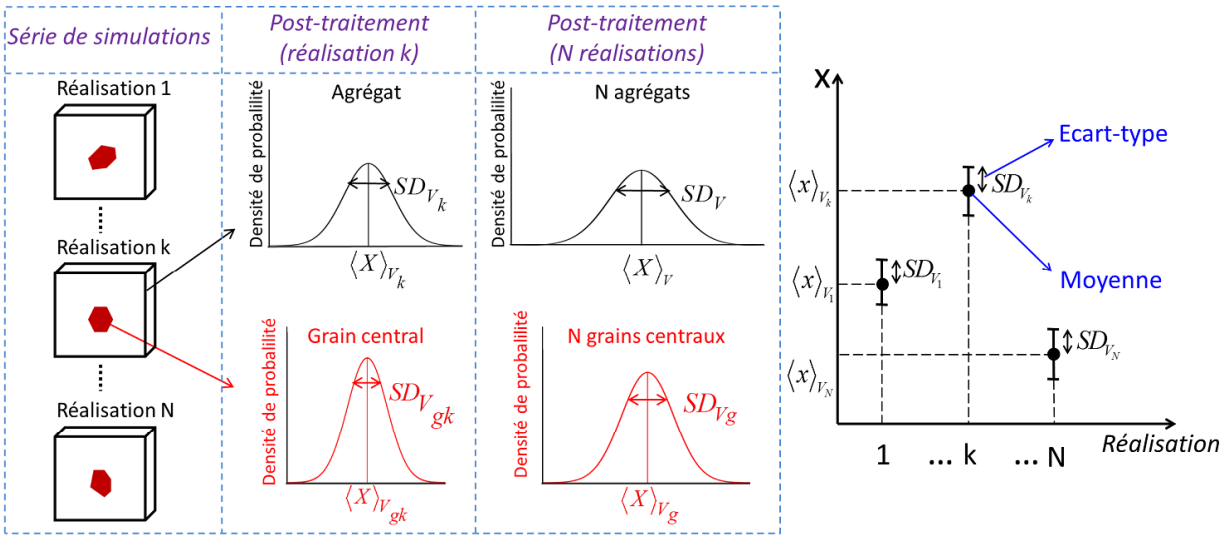
Dans les chapitres suivants, les réalisations conduisant aux valeurs extrêmes des grandeurs étudiées seront analysées. L'influence du nombre de réalisations sur les valeurs extrêmes n'a pas été étudiée directement.

2.8 Bilan

Dans ce chapitre, la démarche de simulation proposée a été présentée. Elle est basée sur le tirage de N microstructures polycristallines présentant un grain central dont l'orientation cristallographique est fixée. Les post-traitements permettent de caractériser la distribution des champs mécaniques au sein des N grains centraux de même orientation, mais de voisinages différents. A travers un exemple (grain favorablement orienté pour le glissement dans le cas de l'austénite), la distribution des contraintes a été analysée. Une dispersion importante est observée au sein des N grains centraux. Par exemple, l'écart-type total de la contrainte axiale locale correspond à 13% de la contrainte axiale macroscopique. Lorsque toutes les orientations possibles sont considérées, i.e. à l'échelle des N agrégats, l'écart-type est de 20%. La distribution de la cission résolue, à travers un facteur de Schmid effectif, a été décrite, de même qu'un indicateur tenant compte de la cission et de la contrainte normale sur les systèmes de glissement.

A partir des études paramétriques présentées à la fin du chapitre, on choisira de travailler avec 140 réalisations, ce qui correspond à un compromis acceptable entre la précision des estimations (de quelques pourcentages pour les grandeurs associées au grain central) et la durée des simulations et de l'exploitation des résultats. Les agrégats retenus, en termes de dimensions (nombre de grains) et de maillage, seront décrits dans les chapitres suivant, et de façon plus détaillée en annexe (annexe B). Ils respectent les critères de l'étude paramétriques. Avec les conditions aux limites définies, le grain central doit être séparé des frontières par 2 grains entiers au minimum et il doit être maillé avec environ 2500 éléments-finis tétraédriques linéaires (ou maillage équivalent avec d'autres éléments ou taille de grains).

Remarque : *Sur la page suivante, la démarche de simulation et les post-traitements réalisés sont représentés de façon synthétique. Cette fiche est reporté en annexe E et pourra servir d'aide mémoire pour la lecture des chapitres 3 et 4.*



<u>Moyenne</u> et **<u>écart-type</u>** du champ X dans un domaine V : $\langle X \rangle_V = \frac{1}{V}\int_V X(\vec{x})dv$ et $SD_V(X) = \sqrt{\frac{1}{V}\int_V \left(X(\vec{x}) - \langle X \rangle_V\right)^2 dv}$

<u>Variance intra-réalisation</u> : moyenne des variances par réalisation $\left(\langle SD_{V_k} \rangle_V\right)^2$

<u>Variance inter-réalisation</u> : variance des moyennes par réalisation $\left(SD_V(\langle X \rangle_{V_k})\right)^2$

Notations : volume des domaines considérés

Volume d'**Agrégat**		Volume du **Grain central**	
Réalisation k	N réalisations	Réalisation k	N réalisations
V_k	$V = \sum_{k=1}^{N} V_k$	V_{gk}	$V_g = \sum_{k=1}^{N} V_{gk}$

Grandeurs post-traitées au sein de l'<u>agrégat</u>

Grandeur	Réalisation k	N réalisations
Contrainte moyenne	$\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_k}$	$\langle \sigma_{ij} \rangle_V$
Ecart-type	$SD_{V_k}^{intra}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_k}^{inter}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_k}(\sigma_{ij})$	$SD_V^{intra}(\sigma_{ij})$, $SD_V^{inter}(\sigma_{ij})$, $SD_V(\sigma_{ij})$

Grandeurs post-traitées au sein du <u>grain central</u>

Grandeur	Réalisation k	N réalisations
Contrainte moyenne	$\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_{gk}}$	$\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$
Ecart-type de contrainte	$SD_{V_{gk}}^{intra}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_{gk}}^{inter}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_{gk}}(\sigma_{ij})$	$SD_{Vg}^{intra}(\sigma_{ij})$, $SD_{Vg}^{inter}(\sigma_{ij})$, $SD_{Vg}(\sigma_{ij})$
Facteur de Schmid effectif moyen du GC	$\mu_{eff}^{gk} = \max_{\alpha}\left(\langle \mu_{eff}^{\alpha} \rangle_{V_{gk}}\right)$	$\mu_{eff} = \max_{\alpha}\left(\langle \mu_{eff}^{\alpha} \rangle_{V_g}\right)$

<u>Facteur de Schmid effectif</u> local (système de glissement α) : $\mu_{eff}^{\alpha} = \frac{\tau^{\alpha}}{\langle \sigma_{11} \rangle_V}$

Chapitre 3

Simulations appliquées au cas des aciers austénitiques 316L

Sommaire

3.1 Introduction 87

3.2 Présentation des simulations réalisées 88
3.2.1 Orientations étudiées 88
3.2.2 Morphologies étudiées 90
3.2.3 Bilan 91

3.3 Résultats de la campagne principale de simulations 92
3.3.1 Analyse des contraintes 92
3.3.2 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 108
3.3.3 Analyse de l'indicateur d'amorçage 113

3.4 Etude des réalisations extrémales et configurations cristallographiques locales associées 116
3.4.1 Facteurs de Schmid effectif extrémaux 116
3.4.2 Analyse des configurations de voisinage 119
3.4.3 Etude de clusters de grains spécifiques 126

3.5 Analyse des champs par sous-domaines du grain central 129
3.5.1 Introduction et démarche 129
3.5.2 Analyse des contraintes 130
3.5.3 Analyse du facteur de Schmid effectif 134
3.5.4 Configurations extrémales 137
3.5.5 Analyse de l'indicateur d'amorçage 139
3.5.6 Analyse des fluctuations des champs en un point 140

3.6 Etude de l'influence de la morphologie 143
3.6.1 Description de la morphologie des agrégats 143
3.6.2 Résultats obtenus 147

3.7 Bilan 153

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'application de la stratégie de simulation définie au chapitre 2 aux aciers inoxydables austénitiques de type 316L. Ce matériau présente une structure cristallographique cubique à faces centrées (C.F.C.), ses caractéristiques ayant été décrites au chapitre 1 (paragraphe 1.2.1).

La majorité des résultats de ce chapitre est obtenue avec une description morphologique très idéalisée des agrégats polycristallins, afin de mieux cerner les effets cristallographiques. Le tirage aléatoire des orientations est réalisé de manière à générer des agrégats sans texture cristallographique ce qui constitue une approximation acceptable, en général, pour ce matériau. En revanche, la présence de joints de macles, pourtant au cœur de certains modes d'endommagement, a été négligée tant morphologiquement que cristallographiquement.

La campagne de simulation principale est tout d'abord décrite au paragraphe 3.2 en termes d'orientations cristallographiques étudiées, i.e. assignées au grain central des agrégats d'une série, et de morphologie des agrégats. Les résultats sont présentés au paragraphe 3.3. Ceux-ci sont obtenus en effectuant les post-traitements et analyses présentés au chapitre 2 sur un exemple. Rappelons que cet exemple correspond à une des séries de simulations de cette campagne. Ainsi le chapitre 2 a permis en quelque sorte d'anticiper cette partie afin d'en faciliter la lecture. Les résultats obtenus constituent une « base de données » statistique, complétant les résultats de la littérature, sur la distribution des contraintes et des cissions résolues. Cette dernière est décrite à travers un facteur de Schmid effectif. La distribution d'un « indicateur d'amorçage » tenant compte simultanément de la cission résolue et de la contrainte normale au plan de glissement est également considérée.

Ensuite, au paragraphe 3.4, sur la base des mêmes séries de simulations décrites précédemment, on s'intéresse aux valeurs extrêmes de la cission résolue obtenue en moyenne dans un grain. Les réalisations correspondantes sont analysées en termes d'orientation cristalline des voisins du grain central et de leur arrangement spatial afin d'identifier les configurations favorables ou défavorables à l'activation du glissement plastique.

Jusqu'alors, la répartition spatiale des champs mécaniques au sein du grain était ignorée dans les descripteurs statistiques considérés (distribution, moyenne et écart-type dans un grain ou un ensemble de grains). Au paragraphe 3.5, les post-traitements précédents sont réalisés pour différentes régions, ou sous-domaines, du grain central. Ceci conduit à évaluer l'influence du « niveau de localité » (point, moyenne dans le grain entier ou dans une région du grain) sur les grandeurs mécaniques associées à un grain (ou un ensemble de grains).

Enfin, l'influence de la morphologie des grains, plus précisément celle de sa profondeur en maintenant constante sa forme en surface, est discutée au paragraphe 3.6.

3.2 Présentation des simulations réalisées

3.2.1 Orientations étudiées

Comme cela a été évoqué à la fin du chapitre 2, l'étude d'une « orientation » nécessite 140 simulations. Il n'était alors pas possible de chercher à appliquer la démarche à un nombre d'orientations suffisant pour représenter complètement l'espace des orientations. Quelques orientations particulières ont donc été retenues. Celles-ci sont représentées en figure de pôles inverse suivant l'axe de traction dans le triangle standard (Figure 3-1).

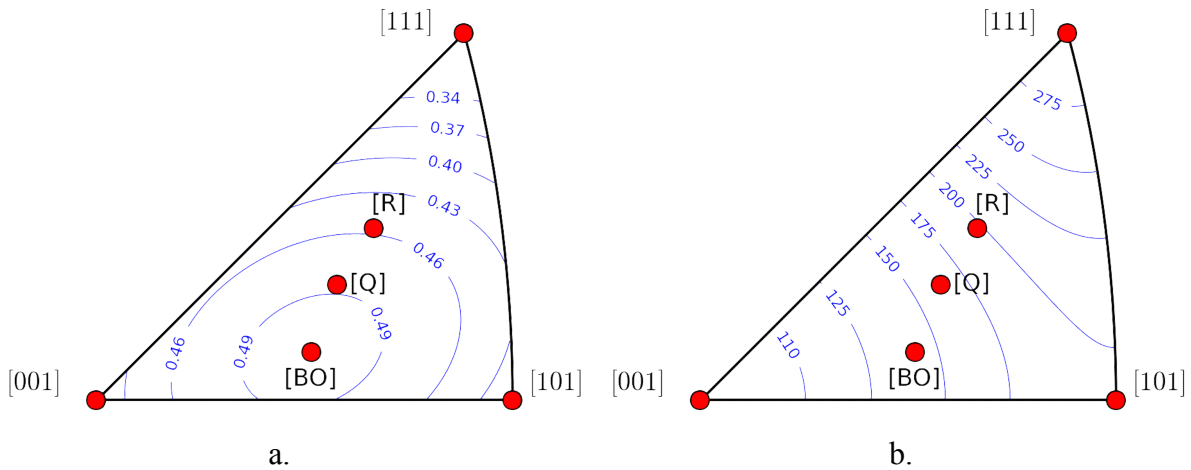


Figure 3-1 : Représentation des orientations cristallographiques étudiées en figure de pôles inverse suivant l'axe de traction dans le triangle standard cartographié avec : a. les iso-valeurs de facteur de Schmid μ ; b. les iso-valeurs de module d'Young E_t (GPa).

Les 3 premières orientations correspondent aux « sommets » du triangle standard: l'axe de traction correspond à une direction cristallographique [100], [110] ou [111]. L'orientation [B.O.], caractérisant un grain « bien orienté » pour le glissement plastique, est telle que le facteur de Schmid sur l'un des systèmes de glissement vaut 0.5. Pour l'orientation [R.], l'axe de traction est tel que le rapport *R* entre le facteur de Schmid du système secondaire et celui du système primaire est le plus faible. Cette orientation est celle qui doit permettre de favoriser le glissement simple le plus longtemps dans le cas d'un monocristal en traction. Enfin, la dernière orientation [Q.] est une orientation quelconque choisie de manière à ce que le pôle de la direction de traction se situe au centre du triangle standard, de façon intermédiaire aux orientations [B.O.] et [R.].

Telle que définie ci-dessus, chaque orientation correspond en réalité à une infinité d'orientations qui diffèrent seulement d'une rotation autour de l'axe de traction, conduisant au même pôle dans le triangle standard (et donc au même facteur de Schmid μ et même module d'Young E_t). Ainsi, pour les orientations de type [100], [110], [111] et [Q.], l'orientation exacte correspondante a été fixée de façon arbitraire. Pour les orientations de type [B.O.], 2 orientations spécifiques ont été choisies. L'orientation « bien orientée » de type A [B.O.A.], suivant la terminologie de Miller reprise par Sauzay (Sauzay 2006 et 2007), est

telle que la normale au plan de glissement et la direction de glissement du système primaire soient perpendiculaires à la normale à la surface libre. L'orientation « bien orientée » de type B [B.O.B.] est telle que la normale au plan de glissement et la direction de glissement du système primaire forment un angle de 45° avec la normale à la surface libre. De façon analogue, deux orientations de type [R.] ont été définies, [R.A.] et [R.B.], mais les angles précédents ne valent plus 0° ou 45°. On notera que les orientations [100], [110], [111], [B.O.A.] et [B.O.B.] avaient été étudiées par Sauzay (Sauzay 2007).

Les informations suivantes sont données dans le Tableau 3-1 pour chacune des orientations:

- le facteur de Schmid « conventionnel » μ
- le module d'Young équivalent suivant la direction de traction E_t
- le rapport R
- les angles π, α et β.

Le facteur de Schmid μ et les angles π, α et β sont donnés pour le système de glissement primaire. L'angle π représente l'angle entre la trace du plan de glissement en surface et la direction de traction. L'angle α (respectivement β) représente l'angle entre la normale à la surface libre et la normale au plan de glissement (respectivement la direction de glissement). La définition de ces quantités, ainsi que des compléments sur la description des orientations et des systèmes de glissement, sont reportés en annexe (voir annexe A.3).

	SG	μ	R	E_t (GPa)	π (°)	β (°)	α (°)
[100]	A3	0.408	1	101	45	45	55
[110]	B2	0.408	1	197	90	45	55
[111]	A3	0.272	1	288	22	73	62
[B.O.A.]	B5	0.5	0.94	141	45	90	90
[B.O.B.]	B5	0.5	0.94	141	90	45	45
[R.A]	D4	0.456	0.72	198	38	90	70.5
[R.B]	D4	0.456	0.72	198	79	54	36
[Q.]	B4	0.487	0.87	163	85	50.4	39.6

Tableau 3-1: Orientations cristallographiques étudiées et informations associées.

En termes de réponse plastique, l'orientation [111] peut être qualifiée d'orientation « dure » car elle présente le facteur de Schmid le plus faible. Au contraire, les 2 orientations [B.O.] peuvent être qualifiées d'orientations « douces » ou « molles » car elles présentent le facteur de Schmid le plus élevé. Cette terminologie est également associée à un écrouissage généralement plus important pour l'orientation [111] en raison de la possibilité de glissement multiple. En termes de réponse élastique suivant la direction de traction, l'orientation [111] est la plus rigide car elle possède le module d'Young E_t le plus élevé, tandis que l'orientation [100] est la plus souple.

3.2.2 Morphologies étudiées

Afin de se concentrer avant tout sur les aspects cristallographiques, il a été choisi de ne travailler principalement qu'avec une description morphologique très idéalisée du polycristal. Cependant, des morphologies plus réalistes seront considérées au paragraphe 3.6 de ce chapitre. La Figure 3-2 décrit les 4 agrégats virtuels utilisés dans ce travail. Dans chaque agrégat, les grains sont identiques et basés sur un seul motif géométrique élémentaire (à l'exception des grains de bords qui sont coupés). Les 2 types de motifs utilisés sont des hexagones extrudés et des octaèdres tronqués, conduisant aux 4 types d'agrégat suivants:

- Agrégat H.A. dont les grains sont des hexagones alignés en profondeur (Figure 3-2.a)
- Agrégat H.D. dont les grains sont des hexagones décalés en profondeur (Figure 3-2.b)
- Agrégat G.O. dont les grains sont des octaèdres tronqués disposés de façon à ce que le grain central soit coupé en 2, alors qualifié de grain « ouvert » (Figure 3-2.c)
- Agrégat G.F. dont les grains sont des octaèdres tronqués disposés de façon à ce que le grain central soit entier, alors qualifié de grain « fermé » (Figure 3-2.d)

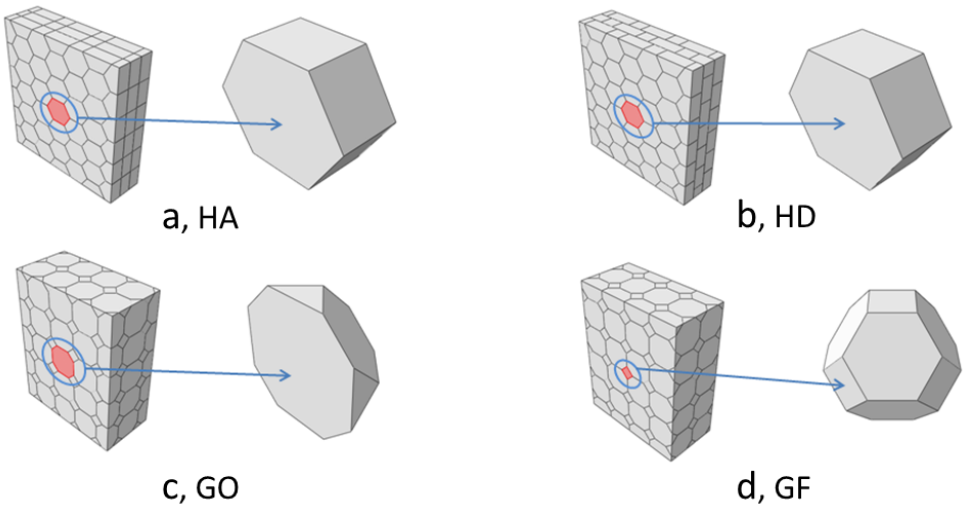


Figure 3-2 : Morphologies étudiées : a) hexagones alignés (H.A.), b) hexagones décalés (H.D.), c) octaèdre tronqué grain « ouvert » (G.O.), d) octaèdre tronqué grain « fermé » (G.F.).

L'appellation de grains « ouverts » ou « fermés » reprend la terminologie employée par (Guilhem 2011) pour désigner les 2 types de grains de surface étudiés au sein d'un agrégat 2D constitués d'hexagones (voir paragraphe 1.3.2.2).

Les principales caractéristiques morphologiques de ces 2 motifs élémentaires et des 4 agrégats associés sont décrites brièvement ci-dessous. Ces informations sont reportées de façon plus exhaustive en annexe (voir annexe B). Les données concernant le maillage y sont également indiquées, celles-ci étant basées sur l'étude de l'influence du maillage présentée, partiellement, à la fin du chapitre 2.

Les dimensions des grains hexagonaux sont les suivantes: les arêtes parallèles de l'hexagone sont séparées de 20µm, tandis que la profondeur vaut 10µm. Dans le cas de l'octaèdre tronqué entier, les faces parallèles sont séparées de 20µm. Ainsi, dans le cas d'un grain ouvert (G.O.), sa profondeur est de 10µm. Le choix de ces dimensions peut être fait de manière arbitraire car aucun effet de taille n'est inclus dans la modélisation et car tous les grains sont identiques. La valeur de 20µm est motivée par le fait qu'elle s'approche du diamètre moyen des nodules de l'alliage de titane TA6V étudié aux chapitres 4 et 5. Ainsi, le volume d'un hexagone (3450µm^3) est assez proche de celui de l'octaèdre tronqué entier GF (4000µm^3). De plus, l'hexagone et le demi-octaèdre tronqué (GO) possèdent les mêmes dimensions caractéristiques en surface (20µm) et la même profondeur (10µm), avec cependant des volumes très différents. De ce fait, ils présentent un rapport entre l'aire en surface et la profondeur très proche: 34.5 pour l'hexagone et 35 pour le grain GO, alors qu'il vaut 2.5 pour le grain GF.

Les agrégats sont générés de manière à ce que la distance entre le grain central en surface et les faces autour de l'agrégat fasse au moins deux fois la taille du grain. La dimension de la surface des 4 agrégats est environ 100µm x 100µm, tandis que la profondeur est 30µm et 40µm pour les agrégats constitués d'hexagones et d'octaèdres tronqués respectivement. L'agrégat HA est constitué de 135 grains et les autres agrégats sont constitués de 140 grains.

3.2.3 Bilan

Pour chaque orientation et morphologie, une série de 140 simulations est réalisée. Cette campagne de simulations, basée sur 32 séries, correspond donc à un total de 4480 simulations. Chaque série de simulations consomme environ 10 heures de calculs dont 7 heures pour les simulations EF (8 processeurs) et 3 heures pour le post-traitement des résultats.

Tous les paramètres de simulations non rappelés ici sont identiques à ceux présentés au chapitre 2, en particulier dans le paragraphe récapitulatif. On rappelle les constantes élastiques de l'austénite utilisées pour ces simulations: C_{11}=198 GPa, C_{12}=125 GPa et C_{44}=122 GPa (voir paragraphe 1.3.1 et annexe A).

Dans les 2 parties suivantes, on présente les principaux résultats issus du post-traitement, tel qu'il a été défini au chapitre 2 appliqué à cette campagne de simulations. Au paragraphe 3.3, on étudiera la distribution des contraintes à l'échelle de l'agrégat puis du grain central où y sera analysée la distribution de la cission résolue et de la contrainte normale au plan de glissement. Au paragraphe 3.4, les réalisations extrémales, en termes de cission résolue dans le grain central, seront analysées en relation avec les configurations de voisinage correspondantes.

Remarque : *L'aide-mémoire, donné en annexe E, rappelle les principales notations et définitions relatives aux résultats post-traités, ainsi que les principales caractéristiques des orientations cristallographiques étudiées.*

3.3 Résultats de la campagne principale de simulations

On présente ici les résultats des 32 séries de simulations (4 types d'agrégat et 8 orientations du grain central) décrites précédemment. En suivant l'exemple du chapitre 2, l'analyse portera successivement sur l'étude:

- des contraintes au sein de l'agrégat et du grain central (paragraphe 3.3.1)
- de la cission résolue et du facteur de Schmid effectif (paragraphe 3.3.2)
- de la contrainte normale au plan de glissement et de l'indicateur d'amorçage (paragraphe 3.3.3).

3.3.1 Analyse des contraintes

3.3.1.1 Analyse des contraintes au sein des agrégats

Le Tableau 3-2 regroupe les moyennes et les écarts-types de la contrainte axiale σ_{11} au sein des N agrégats de chacune des 32 séries.

Orientations		[100]	[110]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[R.A]	[R.B]	[Q.]
H.A.	$\langle\sigma_{11}\rangle_V$	193.1	194.2	194.8	194.1	194.3	194.6	195.0	194.5
	SD_V^{intra}	40.0	39.3	39.4	39.2	39.5	39.5	39.4	39.4
	SD_V^{inter}	4.4	4.4	4.5	4.9	4.2	4.9	4.5	4.7
	SD_V	40.2	39.6	39.7	39.5	39.8	39.8	39.6	39.7
H.D.	$\langle\sigma_{11}\rangle_V$	193.3	194.7	194.8	192.9	194.0	194.4	194.9	194.4
	SD_V^{intra}	39.5	39.3	39.5	39.5	39.5	39.6	39.3	39.5
	SD_V^{inter}	4.8	4.5	4.4	4.4	4.5	4.6	4.5	4.5
	SD_V	39.8	39.6	39.7	39.7	39.8	39.8	39.6	39.7
G.O.	$\langle\sigma_{11}\rangle_V$	193.8	195.9	195.0	194.7	194.7	193.8	195.0	195.2
	SD_V^{intra}	38.7	38.0	38.5	38.4	38.2	38.3	38.3	38.5
	SD_V^{inter}	5.2	5.0	5.4	4.5	5.1	5.0	4.6	5.4
	SD_V	39.0	38.4	38.9	38.7	38.5	38.6	38.6	38.8
G.F.	$\langle\sigma_{11}\rangle_V$	193.4	195.5	196.0	194.4	194.8	196.0	195.2	194.6
	SD_V^{intra}	38.8	38.3	38.7	38.3	38.5	38.1	38.3	38.3
	SD_V^{inter}	5.1	5.5	4.9	5.3	4.8	5.3	5.0	5.5
	SD_V	39.1	38.7	39.0	38.6	38.8	38.4	38.6	38.7

Tableau 3-2 : Contrainte axiale macroscopique $\langle\sigma_{11}\rangle_V$ et écarts-types associés (MPa).

L'influence de l'orientation du grain central et de la morphologie de l'agrégat est négligeable sur les valeurs obtenues. Les faibles écarts constatés sont plutôt imputables à l'erreur d'échantillonnage décrite à la fin du chapitre 2. Par exemple, si l'on considère les agrégats de type H.A. uniquement, la contrainte axiale moyenne varie de 193.1MPa à 195MPa, correspondant à un écart relatif d'environ 1% alors que l'erreur d'échantillonnage

estimée (voir Figure 2-16) est d'environ 0.5%. Pour l'écart-type total, l'écart relatif est d'environ 1.7% alors que l'erreur d'échantillonnage estimée est d'environ 0.8%.

Les résultats pour les autres composantes sont tout à fait conformes à ceux obtenus sur l'exemple décrit au chapitre 2 (agrégat H.A. et grain central d'orientation [B.O.B.]). A titre d'exemple, le Tableau 3-3 présente le détail des résultats pour l'orientation [B.O.B.] et les 4 morphologies, permettant de vérifier par ailleurs que l'influence de la morphologie est pratiquement négligeable. Ainsi, l'état de contraintes macroscopiques est bien uniaxial. Comme cela avait été déjà remarqué au chapitre 2, on constate un léger cisaillement σ_{12} qui représente moins de 0.25% de la contrainte axiale moyenne. Cette valeur, bien que très faible, est toutefois légèrement supérieure à celles constatées sur les autres composantes ce qui résulte très probablement des conditions aux limites appliquées sur la face Y_1 de l'agrégat (pour rappel, on impose à cette face de rester plane). Dans tous les cas, la dispersion inter-réalisation est négligeable. On note toutefois qu'elle est plus importante pour la composante axiale σ_{11}. Enfin, l'écart-type total est légèrement plus élevé sur les composantes σ_{33}, σ_{13} et σ_{23} dans le cas des agrégats constitués d'octaèdres tronqués. Cela provient certainement de l'erreur d'échantillonnage mais peut-être également du fait que cette morphologie, qui n'est pas obtenue par extrusion dans la direction 3 (normale à la surface) contrairement aux hexagones, introduit plus de dispersion sur les contraintes associées à cette direction. L'écart-type total relatif (normalisé par la contrainte axiale moyenne) est de l'ordre de 20% pour la composante σ_{11}, de l'ordre de 15% pour les composantes σ_{22} et σ_{33}, et de l'ordre de 10% pour les cisaillements.

	$\langle\cdot\rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
σ_{11}	194.3	39.5	4.2	39.8
σ_{22}	0.0	33.0	0.0	33.0
σ_{33}	0.0	25.8	0.0	25.8
σ_{12}	-0.5	22.4	1.7	22.5
σ_{13}	0.1	17.7	0.9	17.8
σ_{23}	0.1	14.9	0.6	14.9

H.A.

	$\langle\cdot\rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
σ_{11}	194.0	39.5	4.5	39.8
σ_{22}	0.0	33.0	0.0	33.0
σ_{33}	0.0	25.8	0.0	25.8
σ_{12}	-0.3	22.2	1.5	22.3
σ_{13}	-0.1	17.7	0.9	17.7
σ_{23}	0.0	14.8	0.6	14.8

H.D.

	$\langle\cdot\rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
σ_{11}	194.7	38.2	5.1	38.5
σ_{22}	0.0	32.1	0.0	32.1
σ_{33}	0.0	28.5	0.0	28.5
σ_{12}	-0.4	21.0	1.8	21.0
σ_{13}	0.1	19.5	1.5	19.6
σ_{23}	0.0	16.4	0.9	16.4

G.O.

	$\langle\cdot\rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
σ_{11}	194.8	38.5	4.8	38.8
σ_{22}	0.0	31.6	0.0	31.6
σ_{33}	0.0	28.4	0.0	28.4
σ_{12}	-0.6	21.0	1.6	21.0
σ_{13}	0.0	19.3	1.4	19.4
σ_{23}	0.1	16.2	0.9	16.3

G.F.

Tableau 3-3: Moyenne et écarts-types des contraintes (MPa) au sein des N agrégats obtenus pour les 4 morphologies et un grain central d'orientation [B.O.B].

La Figure 3-3 et la Figure 3-4 présentent la distribution des contraintes locales au sein des agrégats de type H.A. et G.F., respectivement, avec un grain central d'orientation [B.O.B.]. Les distributions des contraintes σ_{11}, σ_{12} et σ_{22} sont gaussiennes et ne dépendent pas du type d'agrégat. Les distributions des contraintes σ_{13}, σ_{23} et σ_{33} ne sont pas gaussiennes. Elles présentent un pic très marqué au voisinage des valeurs nulles résultant de la présence de la surface libre comme cela avait été constaté au chapitre 2. Ce pic est plus prononcé pour les agrégats constitués d'hexagones car le rapport entre l'aire de la surface libre et le volume de l'agrégat est plus élevé que celui des agrégats constitués d'octaèdres tronqués.

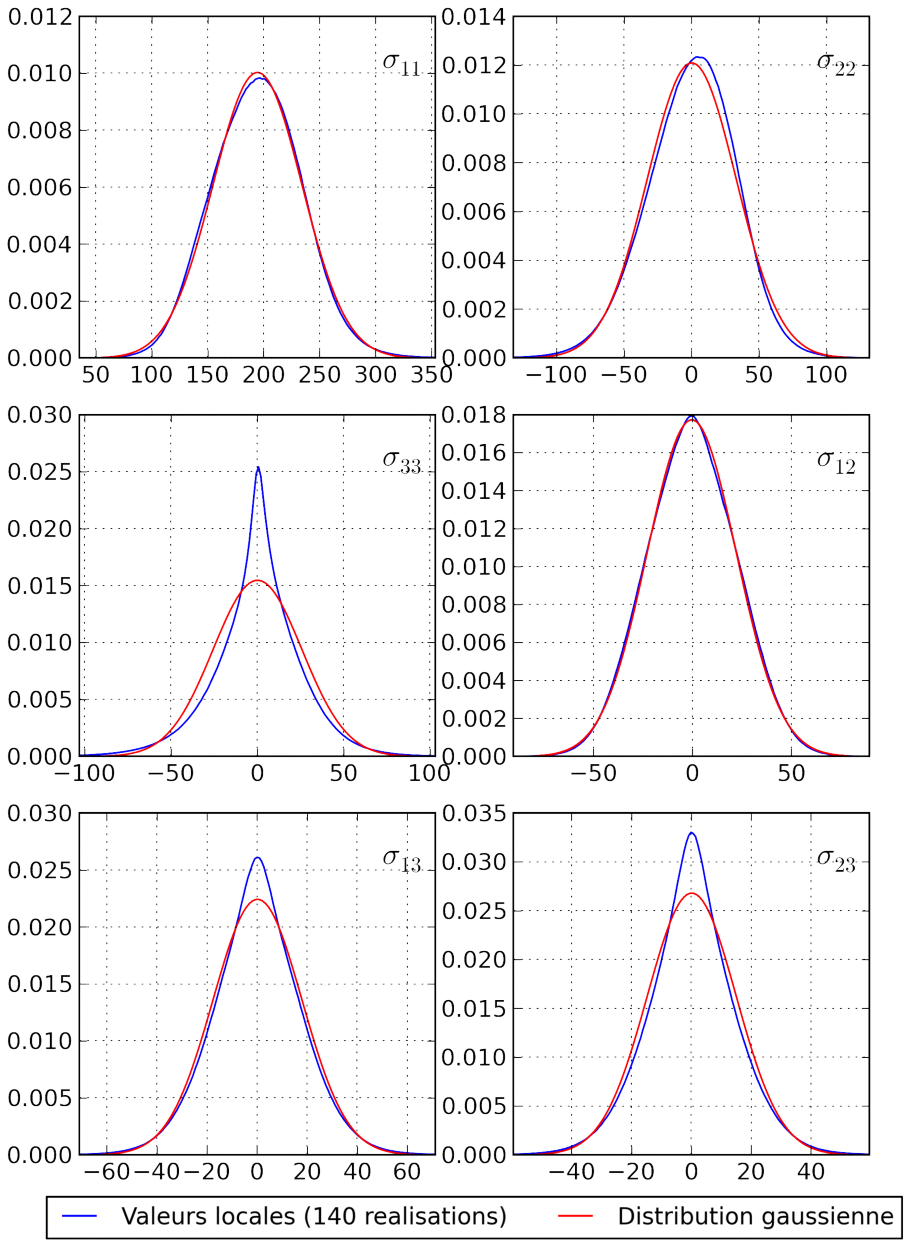


Figure 3-3: Distribution des contraintes locales (MPa) au sein des N agrégats H.A. (grain central d'orientation [B.O.B.]).

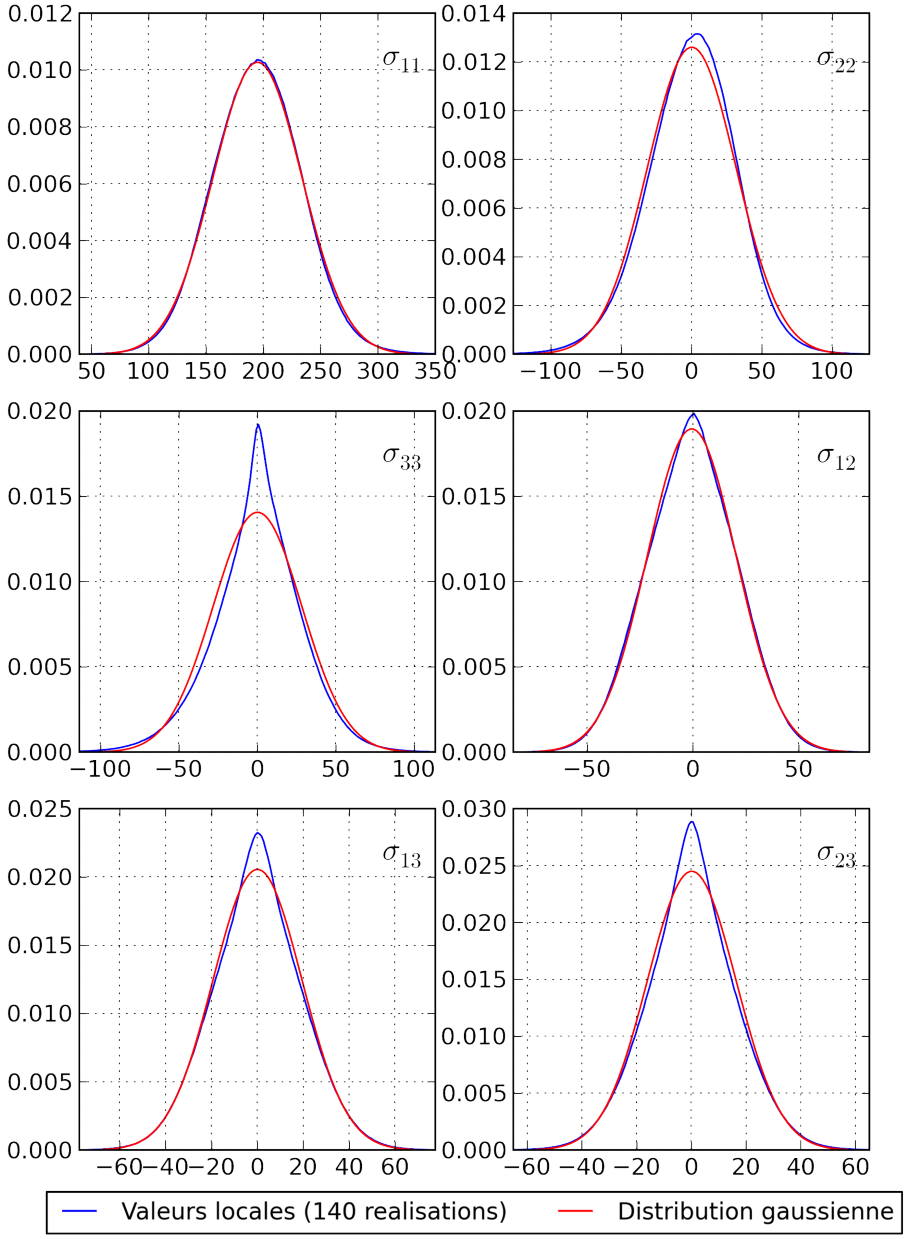


Figure 3-4: Distribution des contraintes locales (MPa) au sein des N agrégats G.F. (grain central d'orientation [B.O.B.]).

3.3.1.2 Analyse des contraintes au sein des grains centraux

L'analyse des contraintes est effectuée de la manière suivante. Tout d'abord, on se concentrera sur l'étude de la moyenne et des écarts-types de la contrainte axiale uniquement. Ensuite, ces données seront complétées pour les autres composantes des contraintes. Enfin, l'allure des distributions des contraintes, définies localement ou en moyenne par grain, sera discutée.

Résultats relatifs à la contrainte axiale

Sur la Figure 3-5 sont indiquées les contraintes axiales moyennes $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ (barres rouges) et l'écart-type total associé $SD_{Vg}(\sigma_{11})$ (barres d'erreur) pour les 8 orientations et les 4 morphologies. L'ensemble de ces données est également reporté dans le Tableau 3-4, indiquant le détail des écarts-types intra- et inter-réalisation (ou intra- et inter-granulaire). La lecture des graphiques de la Figure 3-5 indique que l'effet le plus significatif est évidemment l'influence de l'orientation du grain central sur sa contrainte axiale moyenne. L'influence de la morphologie apparaît extrêmement faible sur la moyenne. Par ailleurs, l'écart-type ne semble pas dépendre significativement ni de l'orientation du grain central, ni de la morphologie (cependant cela étant difficile à évaluer précisément par simple lecture graphique sur la Figure 3-5, ce point sera rediscuté sur la base des valeurs du Tableau 3-4).

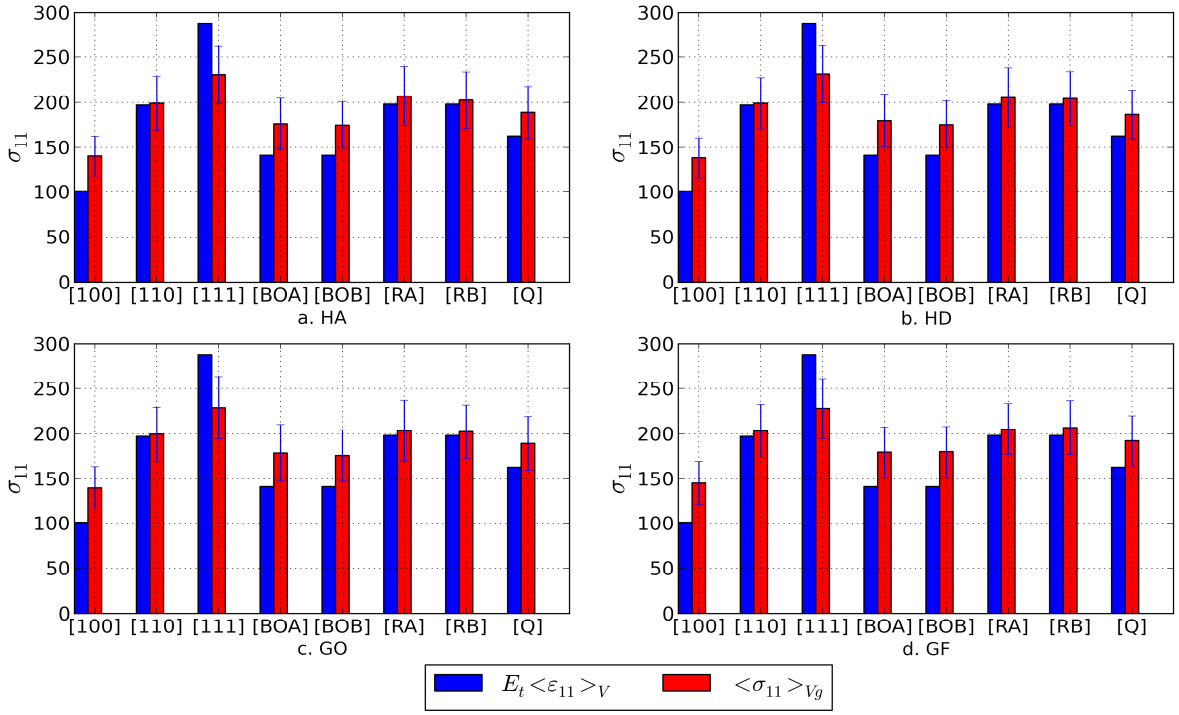


Figure 3-5: Contrainte moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ (barres rouges) et écart-type total $SD_{Vg}(\sigma_{11})$ (barres d'erreur) (MPa) au sein des 140 grains centraux de chacune des 32 série de simulations (8 orientations et 4 morphologies). La longueur totale des barres d'erreur correspond au double de l'écart-type.

La contrainte axiale moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ varie de 140 MPa environ pour l'orientation [100] (soit environ 0.72 en normalisant par la contrainte axiale macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ =195 MPa) à 230 MPa pour l'orientation [111] (soit environ 1.18 après normalisation). Cet écart représente environ 45% de la contrainte axiale macroscopique, ce qui illustre la forte hétérogénéité des contraintes d'une orientation à une autre (dispersion inter-orientation). La contrainte moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ d'une orientation donnée est principalement corrélée à son module d'Young E_t dans l'axe de traction, indiqué indirectement sur la Figure 3-5 à travers les barres bleues. Plus précisément, on remarque que l'écart entre la contrainte moyenne d'une orientation et la contrainte macroscopique est relié à l'écart entre le module d'Young E_t de l'orientation et le module d'Young macroscopique. Les contraintes moyennes obtenues pour les orientations [100] et [111] sont celles qui s'écartent le plus de la contrainte macroscopique car elles correspondent respectivement aux modules d'Young E_t minimum (~100GPa) et maximum (~290GPa), le module d'Young macroscopique valant ~195GPa.

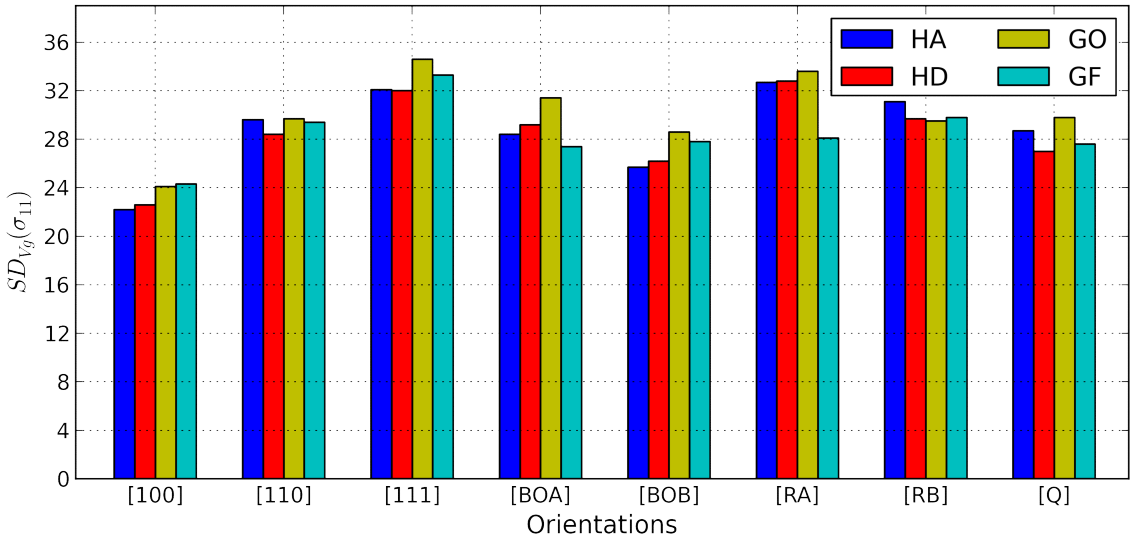
En plus d'apporter une information sur la rigidité des grains, la barre bleue de la Figure 3-5 correspondrait à la contrainte axiale du grain sous l'hypothèse de déformations homogènes au sein du polycristal (suivant une vision 1D simplifiée, chaque grain restant en traction uniaxiale à un niveau de déformation donné). On remarque que la contrainte axiale moyenne d'une orientation se situe entre la contrainte macroscopique (qu'aurait chaque orientation sous l'hypothèse des contraintes homogènes = hypothèse de Reuss) et la valeur indiquée par la barre bleue (correspondant à un état de déformation homogène = hypothèse de Voigt). On remarque toutefois que cela n'est pas vrai pour l'orientation [R.] (et dans une moindre mesure [110]), ce qui est probablement dû au fait que le module de ces orientations est très proche du module macroscopique. Dans ce cas, l'écart entre la contrainte axiale dans le grain central et la contrainte macroscopique est faible et est sans doute piloté par les aspects anisotropes 3D.

En se référant plus précisément aux valeurs du Tableau 3-4, on constate que l'écart-type total varie de 22MPa à 35MPa environ en fonction de l'orientation. L'influence de la morphologie du grain est très faible et de l'ordre de grandeur de l'erreur d'échantillonnage. En normalisant l'écart-type total par la contrainte moyenne de l'orientation considérée, on obtient des écarts-types relatifs compris entre 14 et 16%. A l'échelle des grains (et contrairement à l'échelle des agrégats), l'écart-type inter-réalisation (ou inter-granulaire) n'est plus négligeable: il est du même ordre de grandeur que l'écart-type intra-réalisation (ou intra-granulaire). Cependant, quelle que soit l'orientation et la morphologie, la dispersion intra-granulaire reste systématiquement supérieure. En effet, l'écart-type intra-granulaire représente ~11-13% de la contrainte axiale moyenne de l'orientation considérée, tandis que l'écart-type inter-granulaire vaut ~8-10%.

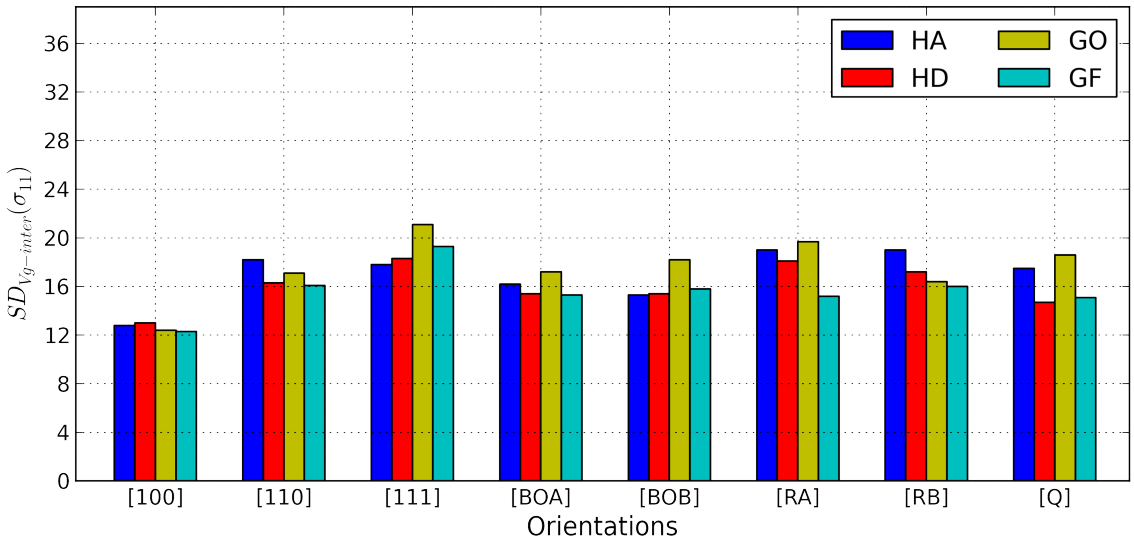
Orientations		[100]	[110]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[R.A]	[R.B]	[Q.]
H.A.	$\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$	140.3	199.0	230.7	176.3	174.8	207.1	202.6	188.9
	SD_{Vg}^{intra}	18.2	23.3	26.6	23.3	20.6	26.6	24.6	22.7
	SD_{Vg}^{inter}	12.8	18.2	17.8	16.2	15.3	19.0	19.0	17.5
	SD_{Vg}	22.2	29.6	32.1	28.4	25.7	32.7	31.1	28.7
H.D.	$\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$	138.3	199.0	231.4	179.9	175.4	205.3	204.2	186.8
	SD_{Vg}^{intra}	18.5	23.3	26.3	24.8	21.1	27.3	24.2	22.6
	SD_{Vg}^{inter}	13.0	16.3	18.3	15.4	15.4	18.1	17.2	14.7
	SD_{Vg}	22.6	28.4	32.0	29.2	26.2	32.8	29.7	27.0
G.O.	$\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$	139.5	199.4	228.7	178.7	175.8	203.4	202.2	189.3
	SD_{Vg}^{intra}	20.7	24.3	27.4	26.3	22.1	27.2	24.5	23.4
	SD_{Vg}^{inter}	12.4	17.1	21.1	17.2	18.2	19.7	16.4	18.6
	SD_{Vg}	24.1	29.7	34.6	31.4	28.6	33.6	29.5	29.8
G.F.	$\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$	145.2	203.0	227.9	179.7	180.2	205.1	206.7	192.3
	SD_{Vg}^{intra}	21.0	24.7	27.1	22.7	22.8	23.7	25.1	23.1
	SD_{Vg}^{inter}	12.3	16.1	19.3	15.3	15.8	15.2	16.0	15.1
	SD_{Vg}	24.3	29.4	33.3	27.4	27.8	28.1	29.8	27.6

Tableau 3-4: Contrainte axiale moyenne $\langle\sigma_{11}\rangle_{V_g}$ et écarts-types associés (MPa) au sein des N grains centraux de chaque série de simulations.

Enfin, quelques très légères tendances ont été notées quant à l'influence de la morphologie du grain central sur les écart-types associés à la contrainte axiale. En effet, à l'exception de l'orientation [R.B.], l'écart-type total des grains G.O. est systématiquement supérieur à celui des grains hexagonaux (Figure 3-6.a). De plus, l'écart-type inter-granulaire des grains ouverts est systématiquement supérieur à celui des grains fermés (Figure 3-6.b). Les écarts constatés sont très faibles et pourraient être attribués à un effet d'échantillonnage, mais cette tendance est presque systématique et mériterait donc d'être vérifiée par des investigations complémentaires.



a.



b.

Figure 3-6: Ecart-type total (a.) et écart-type inter-granulaire (b.) de contrainte axiale au sein de N grains centraux pour les 4 morphologies et les 8 orientations étudiées.

Résultats relatifs à toutes les composantes

Le Tableau 3-5 recense, pour chaque orientation et chaque morphologie, les 6 contraintes moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_g}$. Comme déjà évoqué lors de la description de l'exemple du chapitre 2 (relatif à l'orientation [B.O.B.]), l'état de contraintes moyen d'une orientation n'est pas uniaxial. Les moyennes des composantes différentes de σ_{11} sont en général non-nulles. Elles peuvent représenter au maximum 20% de la contrainte axiale macroscopique environ, et en moyenne elles représentent 5%. De plus, dans la grande majorité des cas, les composantes de cisaillement sont plus faibles que les 2 autres contraintes axiales σ_{22} et σ_{33}. Sur l'ensemble des composantes et des orientations, l'influence de la morphologie du grain est très faible. Elle est quasiment négligeable lorsque l'on compare les grains hexagonaux (que ce soit dans le cas aligné H.A. ou décalé H.D.) et les grains ouverts G.O. Dans la plupart des cas, on note que les contraintes obtenues pour les grains fermés G.F. s'écartent très légèrement des valeurs caractéristiques obtenues avec les 3 autres morphologies. Si l'on compare deux orientations différentes pour lesquelles la direction de traction correspond à la même direction cristallographique, (par exemple [B.O.A.] et [B.O.B.], ou [R.A.] et [R.B.]), on note que:

- les contraintes axiales $\langle \sigma_{11} \rangle_{V_g}$ sont très proches (écart relatif inférieur à 2.5%)
- tandis que les autres composantes sont radicalement différentes, en valeur et en signe,

alors que le comportement en traction des 2 monocristaux correspondants serait le même (module d'Young et facteur de Schmid identiques). La cission résolue sera affectée par ces composantes en fonction de la manière dont elles se projettent sur les systèmes de glissement, ces deux aspects dépendant de la position angulaire du cristal autour de l'axe de traction.

		[100]	[1 1 0]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[R.A]	[R.B]	[Q.]
H.A.	σ_{11}	140.3	199.0	230.7	176.3	174.8	207.1	202.6	188.9
	σ_{22}	18.7	-46.5	-10.1	21.6	-11.8	11.3	-24.0	-18.5
	σ_{33}	11.8	10.8	-7.5	-2.2	9.1	-8.1	4.3	6.4
	σ_{12}	-0.4	-0.3	1.0	6.7	-30.9	-0.5	-25.4	30.6
	σ_{13}	-1.0	0.2	-0.4	17.0	2.4	16.7	4.6	2.7
	σ_{23}	-0.6	-0.4	-0.2	-5.7	6.0	7.0	-3.2	4.8
H.D.	σ_{11}	138.3	199.0	231.4	179.9	175.4	205.3	204.2	186.8
	σ_{22}	17.8	-42.6	-12.0	22.9	-10.3	9.1	-23.5	-19.0
	σ_{33}	10.9	10.8	-7.8	-2.2	9.1	-8.3	4.0	6.0
	σ_{12}	1.4	0.2	1.1	5.0	-29.9	-1.0	-25.8	30.1
	σ_{13}	0.4	-0.4	-0.3	18.2	3.3	16.7	4.0	2.9
	σ_{23}	0.2	-0.9	0.3	-4.8	6.7	7.2	-3.0	4.6
G.O.	σ_{11}	139.5	199.4	228.7	178.7	175.8	203.4	202.2	189.3
	σ_{22}	17.8	-41.7	-12.7	19.7	-12.7	7.8	-23.0	-18.5
	σ_{33}	9.5	9.7	-6.0	-1.9	7.3	-4.9	2.8	5.6
	σ_{12}	-1.8	0.5	0.3	5.2	-30.9	1.5	-25.6	31.7
	σ_{13}	0.0	-0.5	-0.8	18.7	2.3	17.3	5.5	2.5
	σ_{23}	0.2	0.3	0.6	-6.4	7.2	7.2	-3.3	4.5
G.F.	σ_{11}	145.2	203.0	227.9	179.7	180.2	205.1	206.7	192.3
	σ_{22}	18.5	-38.2	-14.0	16.3	-7.7	4.7	-18.0	-11.2
	σ_{33}	16.6	16.4	-10.2	-4.7	13.5	-9.7	5.5	10.4
	σ_{12}	-0.6	-0.2	0.3	5.2	-29.5	-0.5	-24.4	28.6
	σ_{13}	-1.1	-0.1	-0.6	26.0	3.7	23.7	6.7	3.2
	σ_{23}	-0.7	0.8	0.4	-8.7	9.6	9.5	-4.3	6.0

Tableau 3-5: Contraintes moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_g}$ au sein des N grains centraux de chaque série de simulations (MPa).

A titre d'exemple, le Tableau 3-6 recense les moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_g}$ et les écarts-types $SD_{V_g}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_g}^{\text{intra}}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_g}^{\text{inter}}(\sigma_{ij})$ des 6 composantes du tenseur des contraintes au sein des N grains centraux d'orientation [B.O.B.] pour 4 morphologies étudiées. Comme déjà constaté dans le chapitre 2, l'écart-type inter-granulaire n'est pas négligeable: il représente environ 2% à 8% de la contrainte de traction macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ et il reste systématiquement inférieur à l'écart-type intra-granulaire qui représente 5% à 10% de la contrainte de traction macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$. On trouve que l'influence de la morphologie sur l'écart-type est faible : quelle que soit la composante des contraintes, on constate que l'effet de la morphologie correspond à un écart inférieur à 1.5% de la contrainte axiale macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$.

	$\langle \cdot \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
σ_{11}	174.8	20.6	15.3	25.7
σ_{22}	-11.8	21.6	15.6	26.7
σ_{33}	9.1	15.3	4.9	16.0
σ_{12}	-30.9	11.5	8.6	14.4
σ_{13}	2.4	12.5	6.5	14.1
σ_{23}	6.0	9.7	4.7	10.8

H.A.

	$\langle \cdot \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
σ_{11}	175.4	21.1	15.4	26.2
σ_{22}	-10.3	21.5	15.3	26.4
σ_{33}	9.1	15.5	4.3	16.1
σ_{12}	-29.9	12.0	7.5	14.1
σ_{13}	3.3	12.8	6.8	14.4
σ_{23}	6.7	9.5	5.1	10.8

H.D.

	$\langle \cdot \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
σ_{11}	175.8	22.1	18.2	28.6
σ_{22}	-12.7	23.0	17.2	28.7
σ_{33}	7.3	14.2	4.5	14.9
σ_{12}	-30.9	11.6	10.0	15.3
σ_{13}	2.3	12.0	5.0	13.0
σ_{23}	7.2	9.9	5.6	11.3

G.O.

	$\langle \cdot \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
σ_{11}	180.2	22.8	15.8	27.8
σ_{22}	-7.7	22.3	14.8	26.8
σ_{33}	13.5	18.0	8.4	19.8
σ_{12}	-29.5	11.7	7.6	13.9
σ_{13}	3.7	13.1	7.9	15.3
σ_{23}	9.6	10.2	6.7	12.2

G.F.

Tableau 3-6: Moyenne et écarts-types des contraintes (MPa) au sein des N grains centraux obtenus pour les 4 morphologies et un grain central d'orientation [B.O.B].

Analyse des distributions

La série de figures suivantes (Figure 3-7, Figure 3-8, Figure 3-9 et Figure 3-10) présente la distribution des contraintes au sein des grains centraux d'orientation [B.O.B.] pour les 4 morphologies étudiées. Comme cela avait été constaté au chapitre 2, les distributions des valeurs locales des contraintes σ_{11}, σ_{22} et σ_{12} (courbes bleues continues) sont très proches d'une distribution normale (par comparaison à la gaussienne de même moyenne et même écart-type, courbes rouges continues). Ce résultat est vérifié pour les 4 morphologies ainsi que pour toutes les orientations étudiées (non-représentées). Pour les composantes σ_{33}, σ_{13} et σ_{23}, les distributions des valeurs locales présentent un pic en zéro associé à l'effet de surface libre décrit au chapitre 2. Les distributions s'écartent alors de la distribution normale, et présentent éventuellement une dissymétrie lorsque la contrainte moyenne correspondante n'est pas nulle. Cet effet semble être principalement piloté par le rapport entre l'aire du grain sur la surface libre et son volume. Ainsi, il disparaît presque dans le cas d'un grain fermé (G.F.) pour lequel ce rapport est très faible (Figure 3-10). Pour les autres morphologies, ce phénomène est très marqué et il est légèrement plus important dans le cas du grain ouvert (G.O.). Les distributions obtenues pour les hexagones alignés et décalés sont très proches. On observe que, dans la plupart des cas, la distribution des contraintes moyennes par réalisation (ou par grain) correspondant aux courbes bleues pointillées, est décrite de façon acceptable par une loi normale.

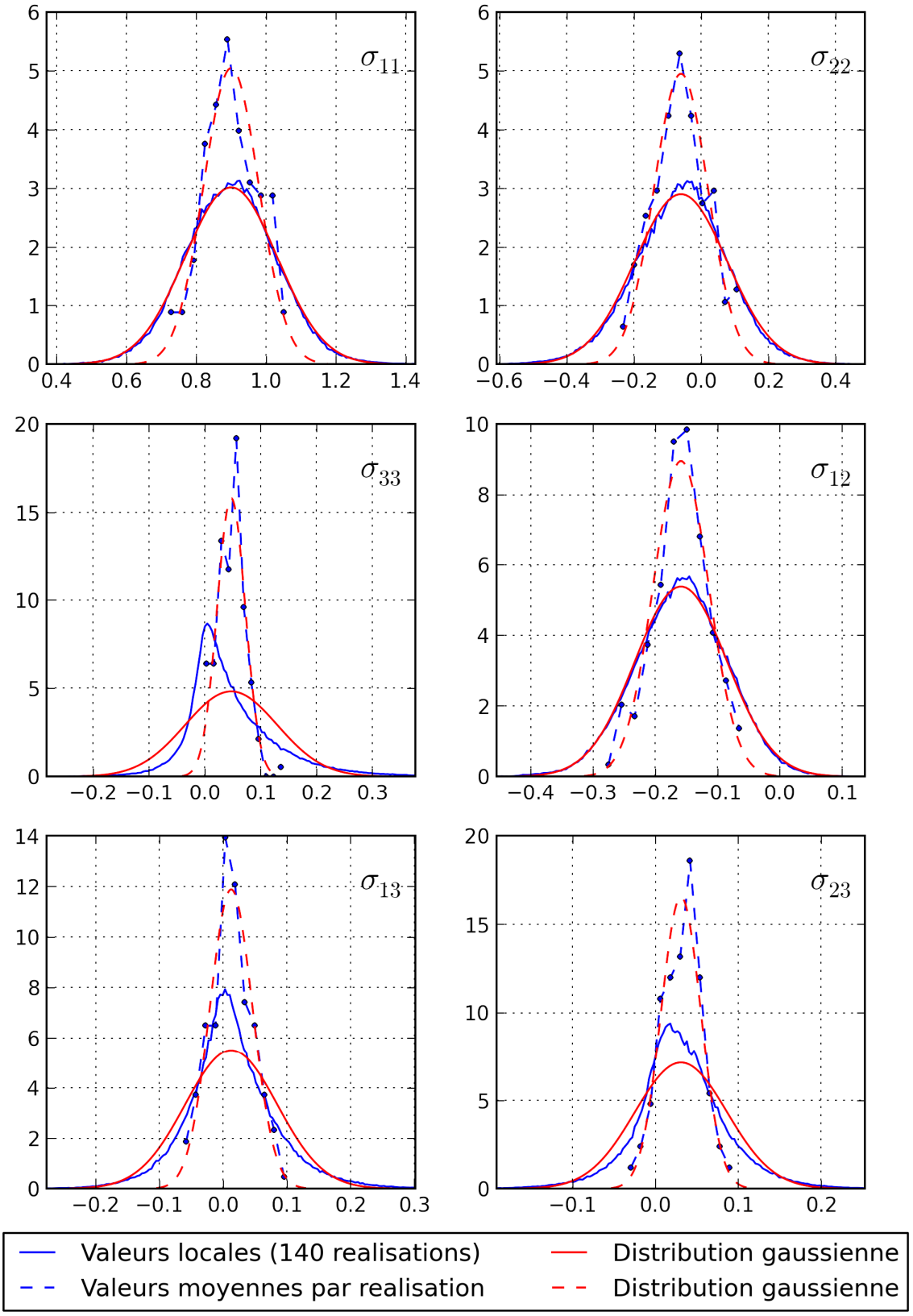


Figure 3-7: Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central H.A., orientation [B.O.B.].

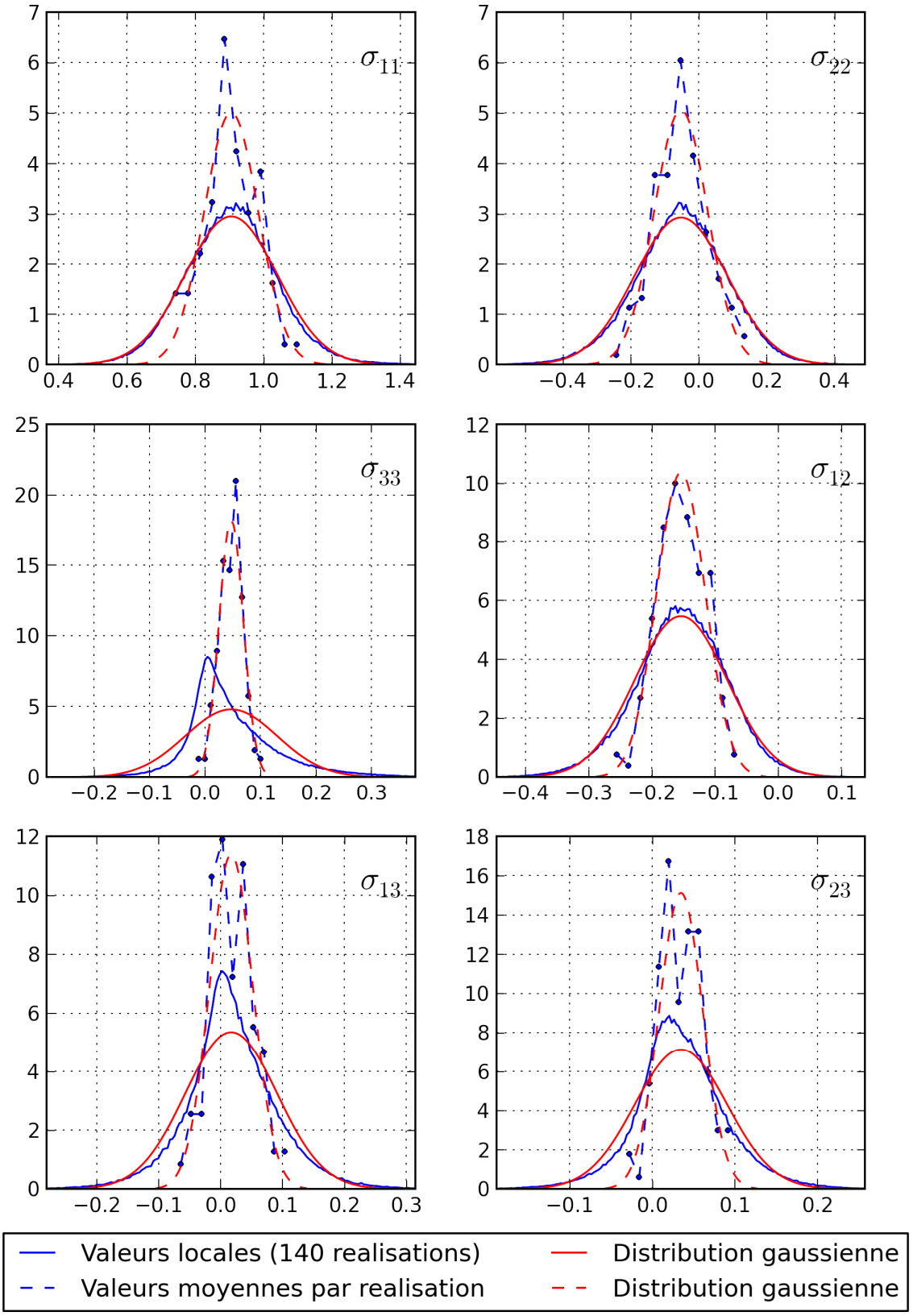


Figure 3-8: Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central H.D., orientation [B.O.B.].

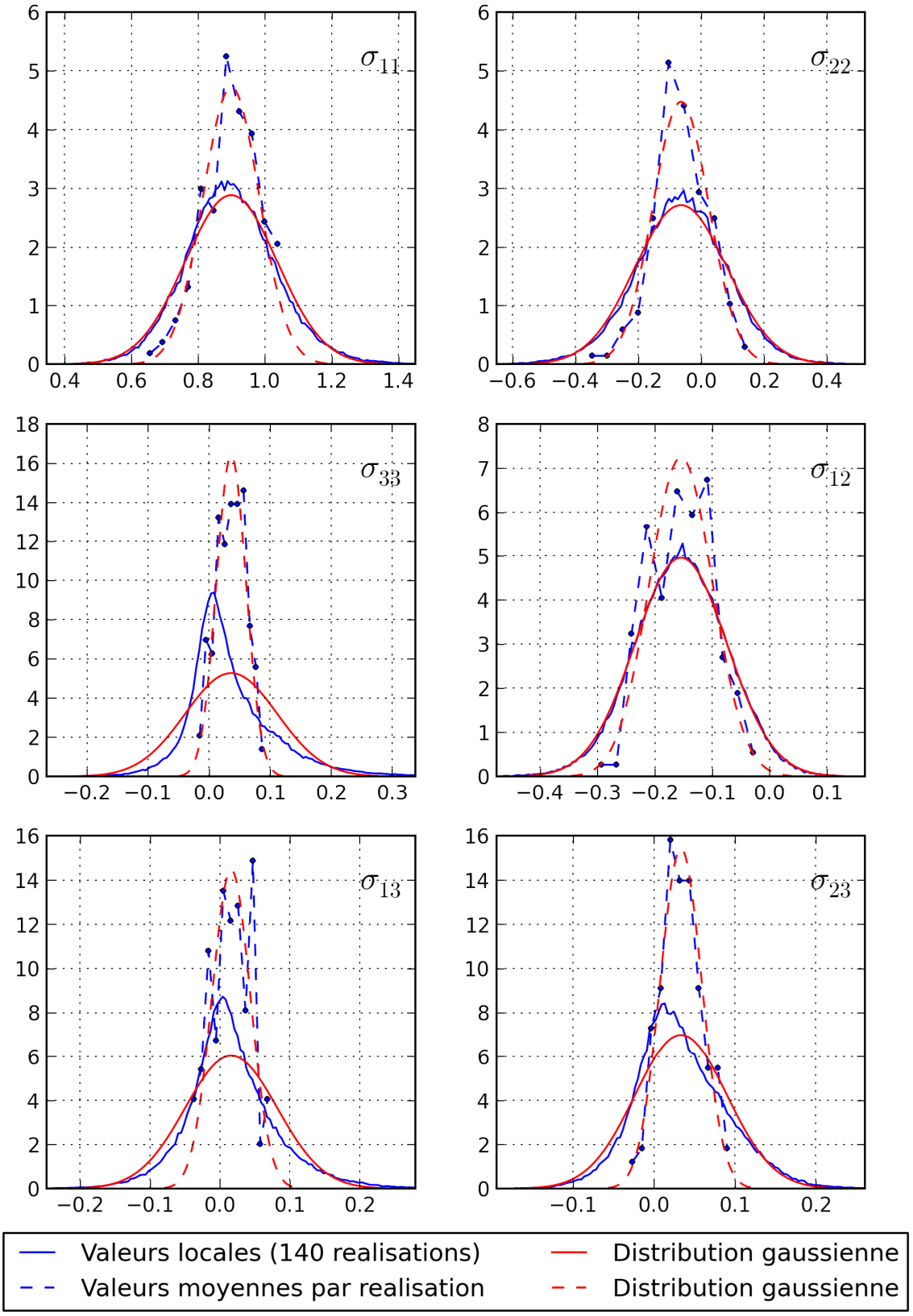


Figure 3-9: Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central G.O., orientation [B.O.B.].

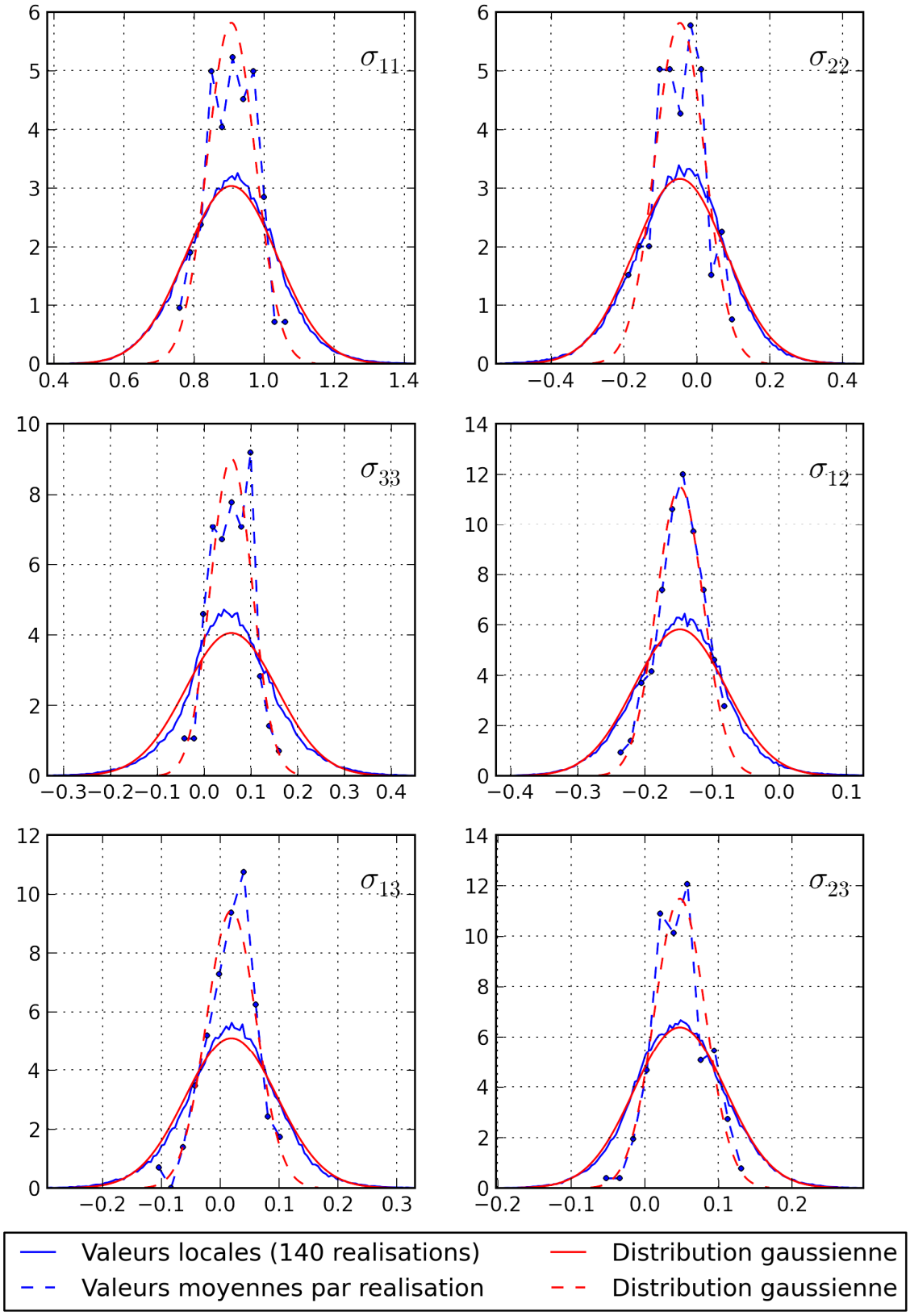


Figure 3-10: Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central G.F., orientation [B.O.B.].

3.3.2 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif

La Figure 3-11 rapporte les facteurs de Schmid effectifs (barres rouges) et l'écart-type total associés (les valeurs précises sont données dans le Tableau 3-7). Les valeurs indiquées ici correspondent à la 1ère définition du facteur de Schmid effectif μ_{eff} dans laquelle on ne retient la moyenne des cissions résolues que sur un seul système de glissement, même si dans certains grains (i.e. certaines réalisations), la cission maximale, en moyenne dans le grain, est atteinte sur un autre système (voir paragraphe 2.5.1). La seconde définition sera discutée à la fin de cette partie.

Tout d'abord, le facteur de Schmid effectif dépend essentiellement de l'orientation et pas (ou très peu) de la morphologie. Les valeurs constatées pour le facteur de Schmid effectif μ_{eff} sont globalement expliquées par la contrainte axiale moyenne de chaque orientation, décrit dans la partie précédente. Le facteur de Schmid le plus faible est noté pour l'orientation [100], principalement car celle-ci présente la contrainte axiale moyenne la plus faible (ceci étant lié au fait que son module d'Young est également le plus faible). C'est l'orientation qui présente la plus forte diminution du facteur de Schmid effectif, par rapport au facteur de Schmid conventionnel μ. Au contraire, l'orientation [111] subit la plus forte augmentation du facteur de Schmid effectif, car il s'agit de l'orientation avec la contrainte axiale moyenne maximale (et le module d'Young le plus élevé). Cependant, son facteur de Schmid effectif reste inférieur à celui obtenu pour la plupart des orientations car le facteur de Schmid conventionnel est initialement le plus faible.

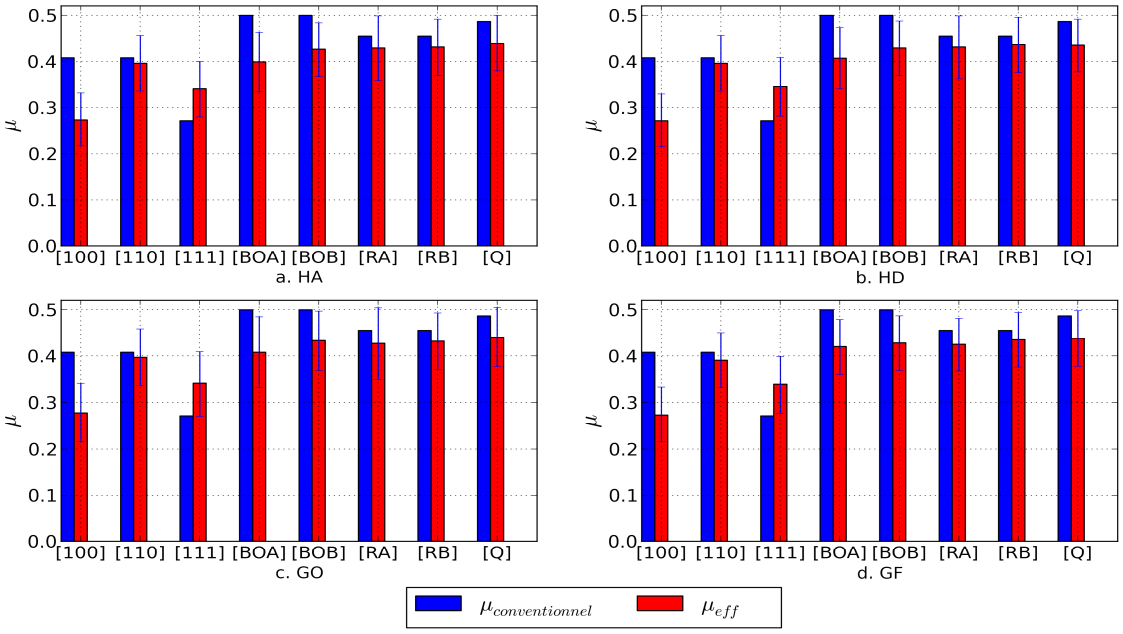


Figure 3-11: Facteur de Schmid conventionnel μ, facteur de Schmid effectif μ_{eff} et écart-type total associé (barres d'erreur) pour les 8 orientations et les 4 morphologies étudiées.

L'écart entre le facteur de Schmid effectif et conventionnel se réduit à mesure que l'écart entre le module d'Young E_t de l'orientation et le module macroscopique diminue. En

effet, les variations les plus faibles sont notées pour les orientations [110], [R.A.] et [R.B.] qui présentent un module d'Young E_t très légèrement supérieur à la valeur macroscopique (quelques GPa). Cependant, on constate dans ces 3 cas que le facteur de Schmid effectif est légèrement plus faible que la valeur conventionnelle. Cela traduit l'influence des autres composantes des contraintes.

		[100]	[110]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[R.A]	[R.B]	[Q.]
	μ	0.408	0.408	0.272	0.500	0.500	0.456	0.456	0.487
H.A.	μ_{eff}	0.274	0.396	0.340	0.399	0.426	0.429	0.431	0.440
	SD_{Vg}^{intra}	0.048	0.048	0.051	0.055	0.046	0.055	0.048	0.048
	SD_{Vg}^{inter}	0.031	0.037	0.032	0.036	0.035	0.043	0.038	0.037
	SD_{Vg}	0.057	0.061	0.060	0.065	0.058	0.070	0.061	0.060
H.D.	μ_{eff}	0.272	0.396	0.345	0.407	0.429	0.431	0.436	0.435
	SD_{Vg}^{intra}	0.048	0.049	0.051	0.058	0.048	0.058	0.049	0.048
	SD_{Vg}^{inter}	0.031	0.037	0.036	0.033	0.035	0.036	0.035	0.031
	SD_{Vg}	0.057	0.061	0.063	0.067	0.059	0.068	0.060	0.057
G.O.	μ_{eff}	0.278	0.397	0.340	0.408	0.433	0.427	0.432	0.441
	SD_{Vg}^{intra}	0.051	0.050	0.056	0.067	0.047	0.065	0.049	0.048
	SD_{Vg}^{inter}	0.037	0.036	0.041	0.039	0.043	0.041	0.036	0.042
	SD_{Vg}	0.062	0.062	0.069	0.077	0.064	0.077	0.061	0.064
G.F.	μ_{eff}	0.274	0.391	0.338	0.420	0.428	0.425	0.435	0.438
	SD_{Vg}^{intra}	0.050	0.049	0.051	0.048	0.049	0.048	0.049	0.049
	SD_{Vg}^{inter}	0.030	0.034	0.033	0.034	0.033	0.030	0.032	0.035
	SD_{Vg}	0.058	0.060	0.061	0.059	0.059	0.057	0.059	0.060

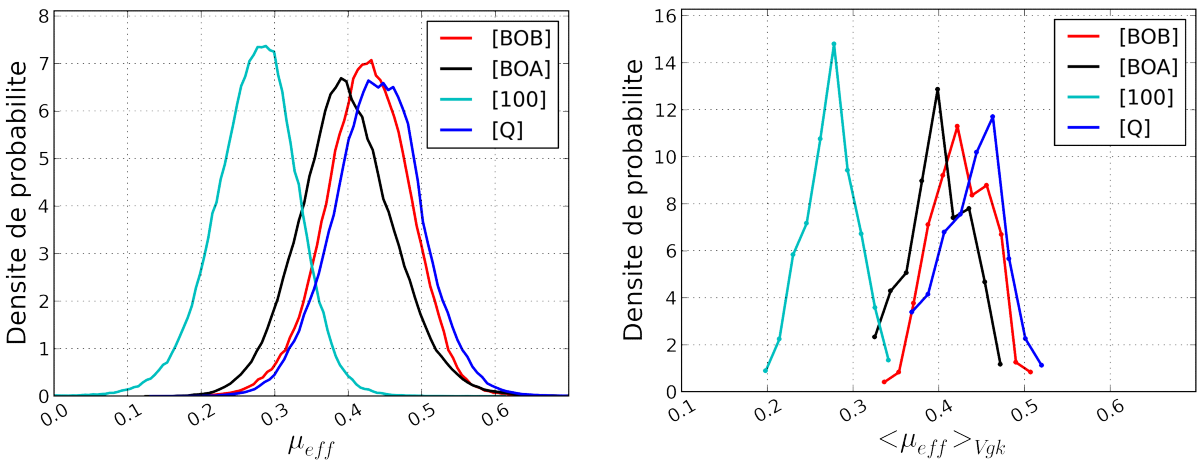
Tableau 3-7: Facteur de Schmid effectif et écarts-types associées pour toutes les orientations et morphologies étudiées.

L'effet de la morphologie est négligeable sur le facteur de Schmid effectif et les écarts-types. Dans la grande majorité des cas, l'influence de la morphologie se traduit par une différence de 0.005 au maximum. Sur les écarts-types, on note dans certains cas des valeurs plus élevées dans le cas des grains G.O. Dans tous les cas, l'écart-type inter-granulaire, qui est compris entre 0.030 et 0.043, reste inférieur à l'écart-type intra-granulaire, qui est compris entre 0.046 à 0.067.

De façon générale, on constate que pour les orientations de type [B.O.], [R.] et [Q.], c'est-à-dire les orientations situées « au centre » du triangle standard, les écarts entre les facteurs de Schmid effectifs (compris entre 0.426 et 0.44, si l'on exclut l'orientation [B.O.A.]) sont un peu plus faibles que les écarts entre les facteurs de Schmid conventionnels (compris entre 0.456 et 0.5). Cela traduit donc une uniformisation de la contrainte macroscopique à laquelle sera observée, en moyenne, l'activation du glissement plastique pour ces orientations. En se basant sur les valeurs du facteur de Schmid effectif, l'ordre d'activation moyen suivrait la séquence suivante (de l'activation la plus précoce à l'activation la plus tardive):

[Q]	→	[R]	→	[BO]	→	[110]	→	[111]	→	[100]
μ_{eff}~0.44		μ_{eff}~0.43		μ_{eff}~0.4-0.43		μ_{eff}~0.4		μ_{eff}~0.34		μ_{eff}~0.27

L'ordre d'activation du glissement plastique des différentes orientations est donc radicalement différent de celui observé dans le cas de monocristaux en traction, tel que décrit par le facteur de Schmid conventionnel. Cependant, il s'agit d'un ordre d'activation moyen car le facteur de Schmid effectif caractérise la cission résolue moyenne pour un ensemble de grains de même orientation. Or, localement, ou en considérant les moyennes par grain, il existe une dispersion importante de la cission résolue au sein d'une même orientation, tels qu'en attestent les écarts-types prédits. Cette dispersion est d'ailleurs plus importante que l'écart entre les facteurs de Schmid effectifs des orientations [BO], [R] et [Q]. Ainsi, on observera par exemple un nombre important de grains d'orientation [BO] s'activant avant certains grains d'orientation [Q] bien que cette dernière s'activera, en moyenne, plus tôt. Cet effet peut être visualisé directement en comparant les distributions de facteurs de Schmid effectifs, localement ou en moyenne par grain (Figure 3-12). Comme cela avait été constaté au chapitre 2, l'allure de ces courbes montre que la distribution du facteur de Schmid effectif est décrite de manière acceptable par une loi normale.



a. b.

Figure 3-12: Distribution du facteur de Schmid effectif pour 4 orientations étudiées (morphologie H.A.) : a. valeurs locales ; b. valeurs moyennes par grain.

Le Tableau 3-8 montre la différence entre les 2 définitions du facteur de Schmid effectif. Pour rappel la 1ère définition correspond aux résultats montrés précédemment, tandis que, pour la 2nde définition, on tient compte des cissions résolues maximales obtenues, dans certaines réalisations, sur un système de glissement différent de celui qui maximise le facteur de Schmid effectif sur toutes les réalisations. Ainsi, dans tous les cas, le facteur de Schmid défini selon le 2nde méthode est supérieur à celui défini selon la 1ère méthode. Pour les orientations correspondant aux sommets du triangle standard, l'écart constaté entre les 2 méthodes est relativement important car ils existent plusieurs systèmes de glissement orientés de la même façon par rapport à la direction de traction. En fonction des contraintes qui se développent dans les autres directions, celles-ci privilégient un de ces systèmes. Pour les autres orientations, les facteurs de Schmid calculés avec les 2 méthodes sont très proches car les cissions résolues maximales sont atteintes majoritairement sur le même système et, dans le cas contraire, la cission résolue maximale atteinte sur un autre système n'est pas beaucoup plus élevée que celle atteinte sur le système primaire.

	Méthode	[100]	[110]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[RA]	[RB]	[Q]
H.A.	1	0.274	0.396	0.340	0.399	0.426	0.429	0.431	0.440
	2	0.302	0.415	0.368	0.404	0.427	0.430	0.431	0.440
H.D.	1	0.272	0.396	0.345	0.407	0.429	0.431	0.436	0.435
	2	0.299	0.414	0.37	0.415	0.430	0.431	0.436	0.435
G.O.	1	0.278	0.397	0.340	0.408	0.433	0.427	0.432	0.441
	2	0.308	0.418	0.371	0.415	0.434	0.428	0.432	0.441
G.F.	1	0.274	0.391	0.338	0.420	0.428	0.425	0.435	0.438
	2	0.306	0.413	0.365	0.423	0.429	0.425	0.436	0.438

Tableau 3-8: Facteur de Schmid effectif: comparaison des 2 définitions pour chaque orientation et chaque morphologie.

Afin de comprendre la valeur de ces différences, le Tableau 3-9 recense, par orientation, le nombre de réalisations où un système de glissement donné développe la cission résolue maximale, en moyenne dans le grain. Ainsi, on constate que, pour l'orientation [110] par exemple, la cission résolue maximale est atteinte de façon équitable sur les 4 systèmes de glissement présentant le même facteur de Schmid conventionnel. Dans le cas de l'orientation [B.O.A.], la cission maximale est atteinte sur le système primaire B5 dans 91 réalisations sur 140. La probabilité d'activation du système secondaire D6, avant celle de B5, est donc relativement élevée (35%) sans, pour autant, affecter beaucoup la cission moyenne. Pour l'orientation [R.] qui présente la plus forte différence entre les facteurs de Schmid conventionnels sur les systèmes de glissement primaire et secondaire, la cission maximale sur le système de glissement secondaire est malgré tout observé dans 5 réalisations. (4%). Pour l'orientation [Q.], la cission résolue maximale est toujours atteinte sur le système de glissement primaire. Ce type d'informations peut s'avérer utile lors de l'analyse de traces de glissement observées à la surface d'un polycristal.

	(A2)	(A3)	(A6)	(B2)	(B4)	(B5)	(C1)	(C3)	(C5)	(D1)	(D4)	(D6)
[100]	0	29	11	0	29	6	0	25	6	0	28	6
[110]	0	0	0	32	36	0	38	34	0	0	0	0
[111]	0	32	28	0	0	0	18	16	0	28	0	18
[BOA]	0	0	0	0	0	91	0	0	0	0	0	49
[B.O.B.]	0	0	0	0	0	123	0	0	0	0	0	17
[RA]	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	135	5
[RB]	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	135	5
[Q]	0	0	0	0	140	0	0	0	0	0	0	0

Tableau 3-9: Nombre de réalisations pour lesquelles un système de glissement présente la valeur maximale de la cission résolue moyenne dans le grain central.

A titre de comparaison, le Tableau 3-10 rappelle les facteurs de Schmid effectifs obtenus par (Sauzay 2007). Les mêmes tendances sont observées mais les valeurs obtenues ne sont pas identiques. Ces différences peuvent provenir de l'effet d'échantillonnage: les résultats obtenus par (Sauzay 2007) sont basés sur 60 réalisations. Les agrégats considérés sont également différents. Bien que chaque grain soit décrit par un hexagone dans les 2 études, la configuration utilisée par (Sauzay 2007) ne considère que 14 grains (le grain central et 13 voisins en surface et en profondeur) insérés au sein d'une matrice élastique isotrope. Les maillages sont également légèrement différents. De plus, la direction de traction est perpendiculaire à 2 côtés de l'hexagone dans le cas de (Sauzay 2007) mais parallèle dans la présente étude.

Orientations	[100]	[110]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]
μ_{eff}	0.274	0.396	0.340	0.399	0.426
$\mu_{eff\,2}$	0.302	0.415	0.368	0.404	0.427
$\mu_{eff} - M.Sauzay$	0.27	0.36	0.31	0.43	0.43

Tableau 3-10: Facteur de Schmid effectif obtenu au cours de cette étude par la méthode 1 et la méthode 2, comparées aux résultats obtenus par (Sauzay 2007).

3.3.3 Analyse de l'indicateur d'amorçage

La Figure 3-13 et Figure 3-14 représentent la moyenne et l'écart-type total du facteur de contrainte normale effectif et de l'indicateur d'amorçage effectif, respectivement, pour les 8 orientations et les 4 morphologies étudiées (les valeurs précises sont données pour l'indicateur d'amorçage seulement dans le Tableau 3-11). Ces résultats montrent une forte influence de l'orientation du grain central et une faible influence de la morphologie sur ces 2 grandeurs considérées. Dans les 2 figures, on note une corrélation entre le module d'Young E_t et l'écart entre la valeur effective, en moyenne dans le grain central, et la valeur conventionnelle. Cet écart est le plus élevé pour le grain central [111] (le grain le plus rigide) et le plus faible pour le grain central [100] (le grain le plus souple).

Comme cela a été constaté dans l'analyse du facteur de Schmid effectif, la dispersion de ces 2 grandeurs considérées ici vient de la dispersion intra- et inter-granulaire. L'écart-type intra-granulaire est systématiquement plus élevé que l'écart-type inter-granulaire (~1.5 fois).

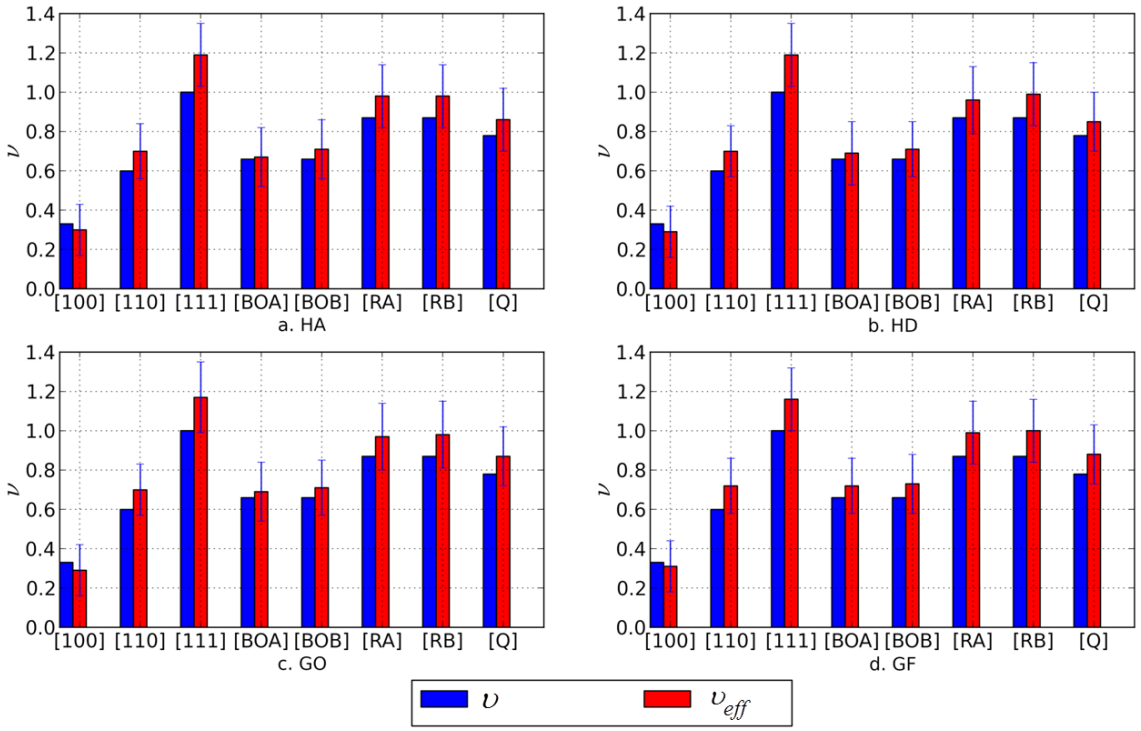


Figure 3-13: Facteur de contrainte normale « conventionnel » υ, facteur de contrainte normale effectif υ_{eff} au plan de glissement et écart-type total associé (barre d'erreur) pour les 8 orientations et les 4 morphologies étudiées.

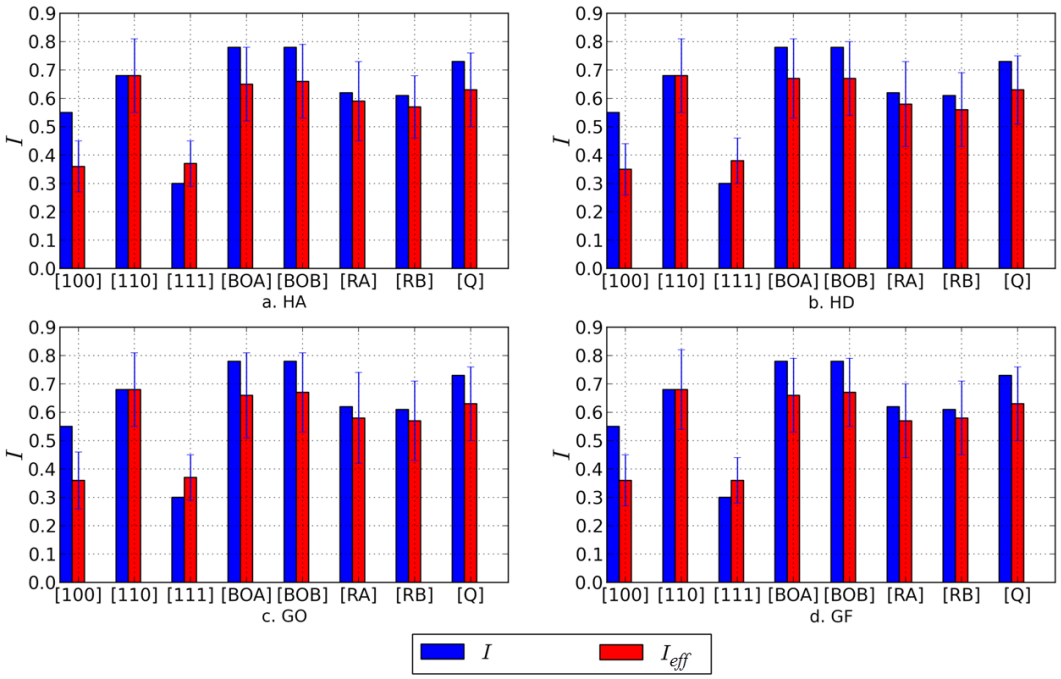


Figure 3-14: Indicateur d'amorçage « conventionnel » I, indicateur d'amorçage effectif I_{eff} et écart-type total associé (barre d'erreur) pour les 8 orientations et les 4 morphologies étudiées.

L'ordre des indicateurs d'amorçage effectifs est différent de celui obtenu pour le facteur de Schmid effectif. L'indicateur d'amorçage effectif I_{eff} maximal est atteint pour l'orientation [110] et il vaut alors 0.68. Cette valeur est légèrement supérieure à celles obtenues pour les orientations [BOB] et [BOA] (comprises entre 0.65 et 0.68). La valeur minimale est obtenue pour l'orientation [100] (I_{eff} ~0.36), des valeurs légèrement supérieures étant obtenues pour l'orientation [111]. Des valeurs intermédiaires sont obtenues pour les orientations de type [R] (I_{eff}~0.56-0.59) et [Q] (I_{eff}~0.63).

La Figure 3-15 représente la distribution de l'indicateur d'amorçage effectif, localement ou en moyenne par grain, pour 4 des orientations étudiées.

		[100]	[1 1 0]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[R.A]	[R.B]	[Q.]
	I	0.55	0.68	0.30	0.75	0.75	0.62	0.62	0.73
H.A.	I_{eff}	0.36	0.68	0.37	0.65	0.66	0.59	0.57	0.63
	SD_{Vg}^{intra}	0.08	0.10	0.07	0.11	0.10	0.12	0.09	0.10
	SD_{Vg}^{inter}	0.05	0.08	0.04	0.08	0.08	0.08	0.07	0.08
	SD_{Vg}	0.09	0.13	0.08	0.13	0.13	0.14	0.11	0.13
H.D.	I_{eff}	0.35	0.68	0.38	0.67	0.67	0.58	0.56	0.63
	SD_{Vg}^{intra}	0.07	0.10	0.07	0.12	0.10	0.12	0.11	0.10
	SD_{Vg}^{inter}	0.05	0.07	0.05	0.07	0.08	0.09	0.08	0.07
	SD_{Vg}	0.09	0.13	0.08	0.14	0.13	0.15	0.13	0.12
G.O.	I_{eff}	0.36	0.68	0.37	0.66	0.67	0.58	0.57	0.63
	SD_{Vg}^{intra}	0.08	0.11	0.07	0.12	0.11	0.11	0.09	0.11
	SD_{Vg}^{inter}	0.06	0.08	0.05	0.08	0.09	0.06	0.06	0.08
	SD_{Vg}	0.10	0.13	0.08	0.15	0.14	0.13	0.11	0.14
G.F.	I_{eff}	0.36	0.68	0.36	0.66	0.67	0.57	0.58	0.63
	SD_{Vg}^{intra}	0.08	0.11	0.07	0.11	0.10	0.08	0.09	0.10
	SD_{Vg}^{inter}	0.05	0.07	0.04	0.07	0.07	0.05	0.06	0.07
	SD_{Vg}	0.09	0.13	0.08	0.13	0.13	0.10	0.11	0.12

Tableau 3-11: Indicateur d'amorçage effectif au sein des N grains centraux pour les 8 orientations et les 4 morphologies étudiées.

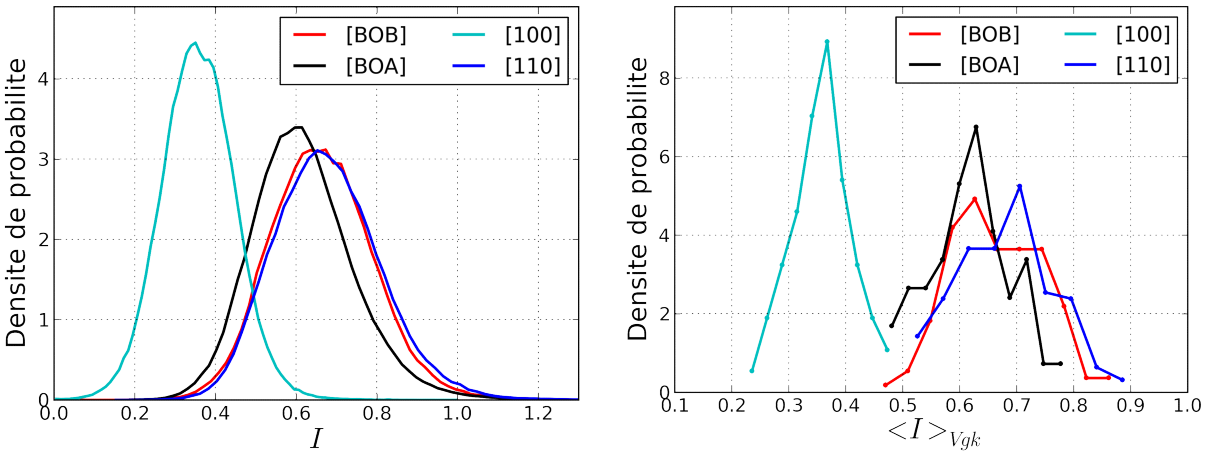


Figure 3-15: Distribution de l'indicateur d'amorçage effectif pour 4 orientations étudiées (morphologie H.A.) : a. valeurs locales ; b. valeurs moyennes par grain.

3.4 Etude des réalisations extrémales et configurations cristallographiques locales associées

Cette partie est consacrée à l'étude des réalisations ayant conduit, pour chaque série, aux valeurs extrémales du facteur de Schmid effectif moyen dans le grain central.

Tout d'abord, ces valeurs extrémales, obtenues pour chaque série étudiée précédemment (paragraphe 3.2 et 3.3), sont présentées au paragraphe 3.4.1 en fonction de l'orientation considérée et, dans une moindre mesure, de la morphologie. Ensuite, l'orientation cristallographique des voisins du grain central et leur arrangement spatial sont analysées pour ces réalisations extrémales (paragraphe 3.4.2).

Enfin, des résultats associés à de nouvelles simulations seront présentés (paragraphe 3.4.3). Ceux-ci correspondent à des agrégats où l'orientation des premiers voisins du grain central a été fixée de manière à reproduire des configurations de clusters de grains identifiées dans les travaux de la littérature (Sauzay 2006; Guilhem 2011) comme favorable ou défavorable au glissement.

3.4.1 Facteurs de Schmid effectif extrémaux

Sur la Figure 3-16, les facteurs de Schmid effectifs extrémaux sont données pour chaque orientation étudiée et les agrégats de morphologie H.A. uniquement. Pour une orientation donnée, le facteur de Schmid effectif maximal (resp. minimal) correspond à la plus forte (resp. faible) valeur parmi l'ensemble des 140 moyennes dans chaque grain central μ_{eff}^{gk} obtenues (Eq 2-13). Les facteurs de Schmid effectifs moyens indiqués ici correspondent à la 1ère définition , soit μ_{eff} , c'est-à-dire à la moyenne des 140 réalisations calculée sur un seul système de glissement. Les valeurs sont également récapitulées dans le Tableau 3-12 avec, de plus, la contrainte axiale moyenne normalisée ainsi que l'écart-type inter-granulaire du facteur de Schmid effectif.

L'indication dans le Tableau 3-12 de l'écart-type permettra de comparer les valeurs extrêmes aux bornes d'un intervalle de confiance défini à +/- 3 SD^{inter} de la valeur moyenne. En supposant que le facteur de Schmid effectif suit bien une loi normale et que ses paramètres ont bien été estimés, la probabilité de trouver une valeur extrême en dehors de cet intervalle est alors très faible (environ 0.3%).

Parmi l'ensemble des orientations, la valeur maximale du facteur de Schmid effectif d'un grain est obtenue pour l'orientation [R.A.] et est égale à 0.575. Cette valeur est en dehors de l'intervalle de confiance dont la borne supérieure vaut 0.558. La valeur maximale suivante vaut 0.557 pour l'orientation [Q.] et est très légèrement inférieure à la borne supérieure de l'intervalle de confiance. Pour l'orientation [B.O.B.], la valeur maximale, qui est inférieure à celle obtenue avec [R.B.] et supérieure à celle obtenue avec [B.O.A.], vaut 0.516 et est inférieure à la borne supérieure de l'intervalle. Ceci illustre ainsi que les valeurs maximales

obtenues sur un échantillon limité, mais incluant tout de même 140 configurations, présentent une variabilité importante dont la caractérisation nécessiterait des travaux complémentaires.

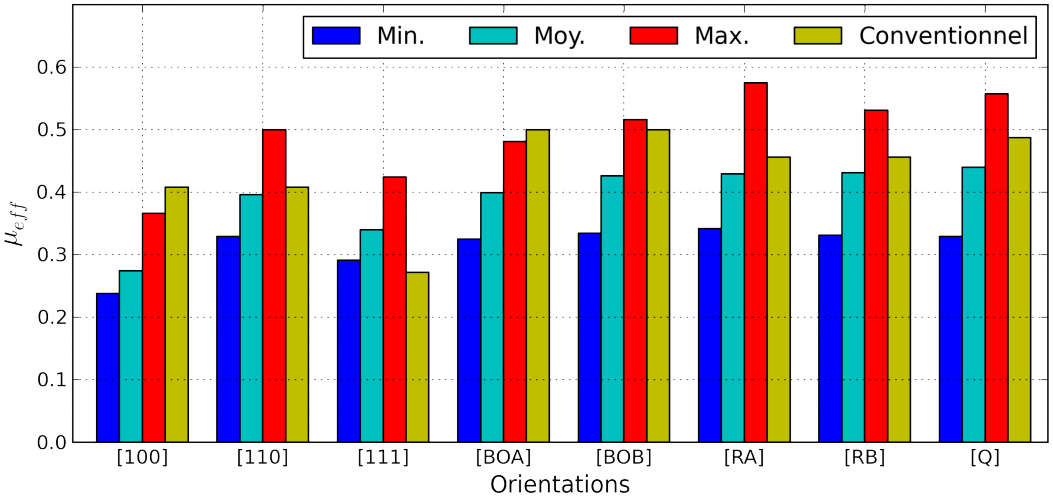


Figure 3-16: Facteurs de Schmid effectif extrémaux obtenus pour chacune des 8 orientations cristallographiques étudiées(agrégats de morphologie H.A.).

Orient.	μ	μ_{eff}				$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_g} / \langle\sigma_{11}\rangle_V$		
		Min	Moy	Max	SD_{Vg}^{inter}	Min	Moy	Max
[100]	0.408	0.238	0.274	0.366	0.031	0.60	0.73	0.82
[110]	0.408	0.329	0.396	0.500	0.037	0.79	1.02	1.26
[111]	0.272	0.291	0.34	0.424	0.032	0.97	1.18	1.40
[B.O.A.]	0.5	0.325	0.399	0.481	0.036	0.82	0.91	1.08
[B.O.B.]	0.5	0.334	0.426	0.516	0.035	0.71	0.90	1.07
[RA]	0.456	0.342	0.429	0.575	0.043	1.06	1.06	1.25
[RB]	0.456	0.331	0.431	0.531	0.038	0.73	1.04	1.31
[Q]	0.487	0.329	0.44	0.557	0.037	0.72	0.97	1.23

Tableau 3-12: Facteurs de Schmid effectif extrémaux et contrainte axiale correspondante.

La Figure 3-17 présente la distribution du facteur de Schmid effectif dans le grain central pour les réalisations maximales et minimales pour l'orientation [100], [Q] et [BOB]. On retrouve la même conclusion que celle constatée au le chapitre 2 (paragraphe 2.5.2) : les distributions des réalisations maximale et minimale présentent un recouvrement non-négligeable, c'est-à-dire que la cission maximale dans la réalisation minimale est quand même supérieure à la cission minimale dans la réalisation maximale.

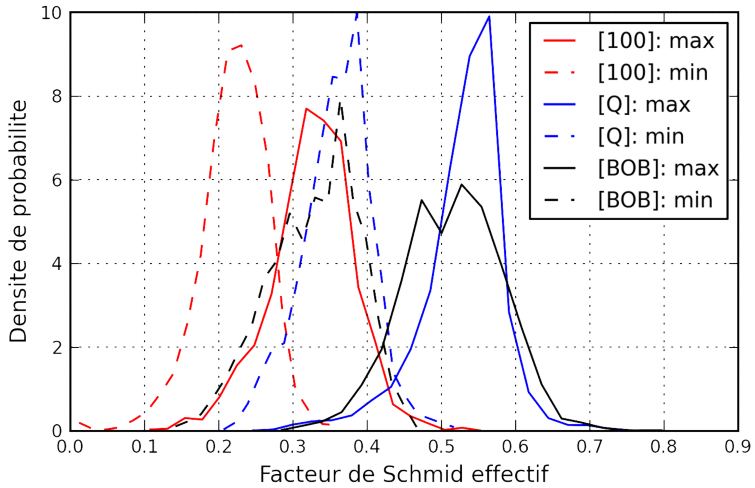


Figure 3-17: Distribution du facteur de Schmid effectif dans le grain central pour les réalisations maximales et minimales pour l'orientation [100], [Q] et [BOB]

La Figure 3-18 et la Figure 3-19 indiquent les facteurs de Schmid effectifs maximaux pour les morphologies G.O et G.F., respectivement. La valeur maximale, égale à 0.555, est bien obtenue pour l'orientation [Q.] qui présente la plus forte valeur moyenne. Globalement, l'ordre des valeurs extrêmes suit celui des valeurs moyennes. On remarque que, pour une orientation donnée, la valeur maximale est systématiquement légèrement plus élevée dans les grains ouverts (G.O.). Cela n'était pas le cas des valeurs moyennes et est probablement lié à la présence d'une dispersion légèrement plus élevée pour ce type de grains.

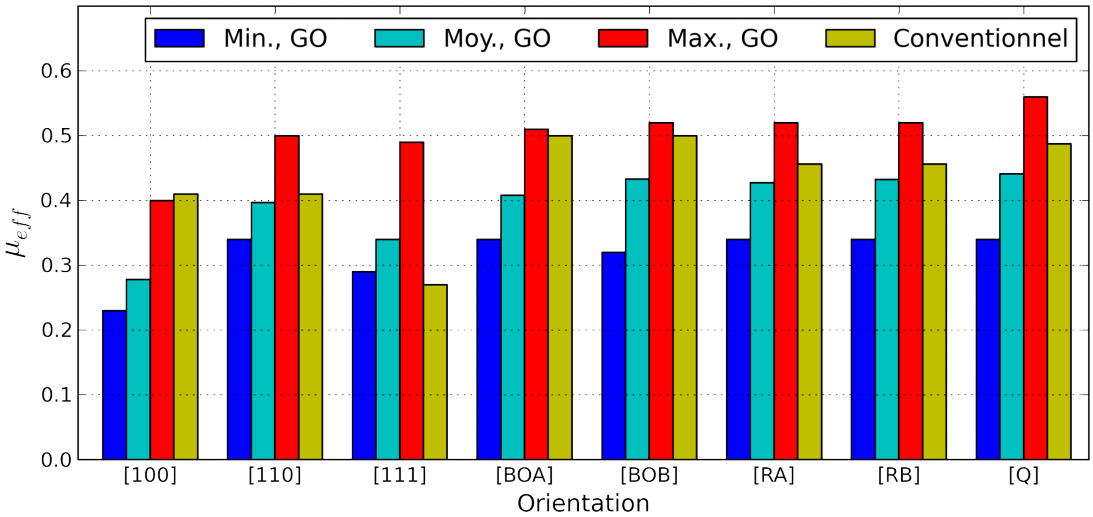


Figure 3-18: Facteurs de Schmid effectifs extrémaux obtenus pour chacune des 8 orientations cristallographiques étudiées (agrégats de morphologie G.O.).

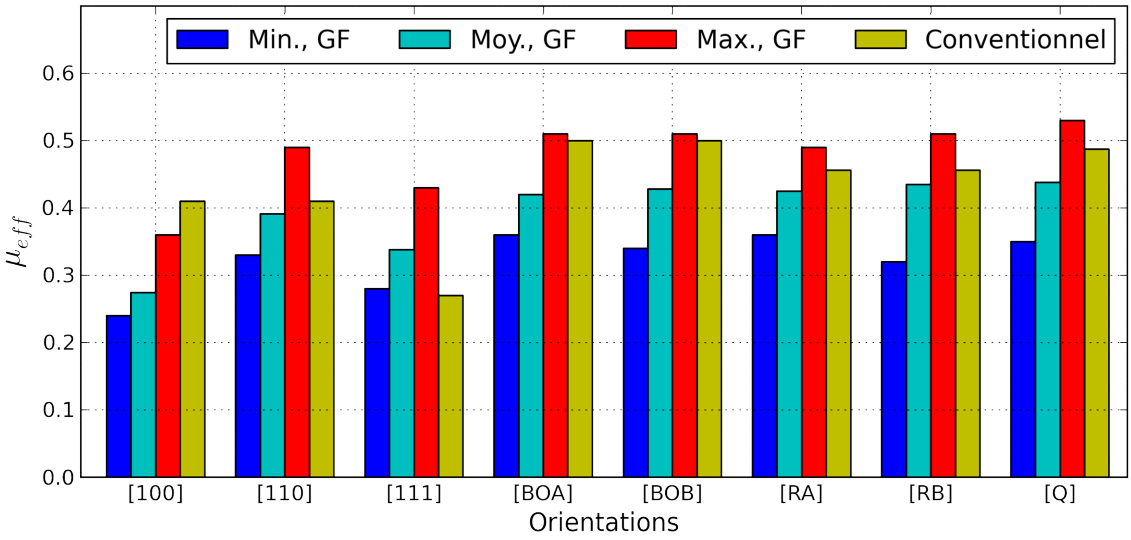


Figure 3-19: Facteurs de Schmid effectifs extrémaux obtenus pour chacune des 8 orientations cristallographiques étudiées (agrégats de morphologie G.F).

3.4.2 Analyse des configurations de voisinage

Cette partie est consacrée à l'étude de l'orientation cristallographique des voisins du grain central, et de leur arrangement spatial, dans le cas des réalisations « extrêmes » de chaque série. L'étude est dans un premier temps réalisée pour les morphologies H.A. ce qui permet une comparaison plus directe avec les travaux de la littérature. Puis, le cas des grains en forme d'octaèdres tronqués, ouverts ou fermés, sera discuté.

3.4.2.1 Cas des morphologies H.A. (hexagones alignés)

La Figure 3-20 décrit l'arrangement des voisins du grain central en ne considérant que les premiers voisins, c'est-à-dire les grains présentant un joint commun avec le grain central. Le grain central (0) est entouré en surface par 6 voisins (grains 1 à 6). Les numéros des grains situées sous ces grains de surface sont indiqués entre parenthèses. Parmi ces grains, dans la configuration H.A. (hexagones alignés en profondeur, voir paragraphe 3.2.2 et annexe B), seul le grain 7 présente une surface de contact avec le grain central 0. Les grains 8 à 13 ne présentent qu'une arrête en commun avec le grain central 0. Ils ne seront pas considérés dans l'analyse présentée ici car aucune tendance remarquable sur l'orientation de ces grains n'a été mise en évidence

La direction de traction, indiquée sur Figure 3-20, n'est pas la même que celle utilisée par (Sauzay 2006) où un axe de traction vertical dans cette figure a été considéré (paragraphe 1.3.2.3). Suivant la configuration étudiée par (Sauzay 2006) qui sera étudiée au paragraphe 3.4.3, la configuration rendant maximale les contraintes ou le facteur de Schmid effectif correspondait à des grains [111] (grains rigides) alignés dans l'axe de traction avec le grain central, celui-ci étant entouré latéralement de grains [100] (grains souples). La configuration inverse minimisait les contraintes dans le grain central.

Compte-tenu de la direction de traction retenue ici, les grains 1 et 4 sont appelés « grains latéraux » et les grains 2, 3, 5, 6 sont appelés « grains axiaux ».

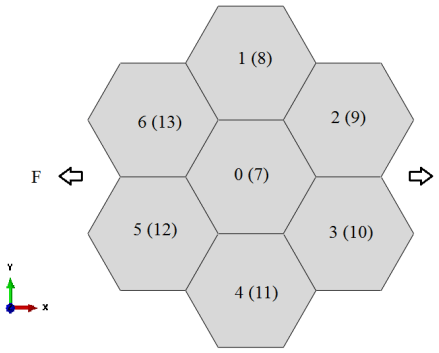


Figure 3-20: Arrangement et numérotation des voisins du grain central (agrégat H.A.).

La Figure 3-21 décrit, dans le triangle standard cartographié avec le module d'Young local E_t suivant la direction de traction, l'orientation des voisins d'un grain central d'orientation [111] pour les 2 réalisations ayant conduit au facteur de Schmid effectif maximal et minimal (que nous appellerons simplement « configuration maximale » et « configuration minimale »). Dans cette figure, pour la configuration maximale, les grains 1 à 6 (voisins en surface) sont représentés par des triangles rouges et le grain 7 (voisin principal en profondeur) par un triangle violet. Pour la configuration minimale, les voisins en surface sont décrits par des ronds bleus et le voisin en profondeur par un rond violet.

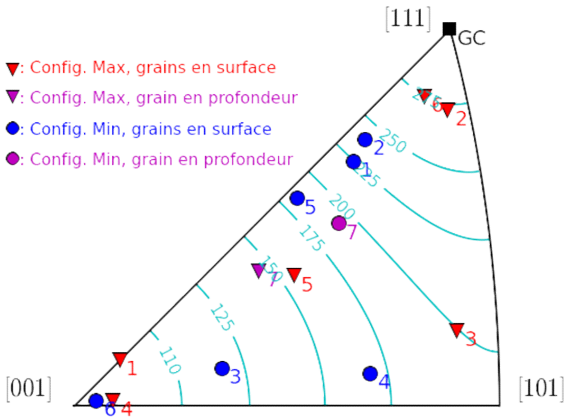


Figure 3-21: Orientation des différents voisins du grain [111] pour les 2 réalisations ayant conduit au facteur de Schmid maximal (« Config. Max. ») et minimal (« Config. Min. »).

Pour un grain central d'orientation [111], la configuration maximale se rapproche de celle proposée par (Sauzay, 2006) adaptée à l'arrangement légèrement différent de notre étude. En effet, les voisins latéraux 1 et 4 sont très proches de l'orientation souple [100], alors que les voisins 2 et 6 alignés suivant l'axe de traction sont très proches de l'orientation rigide [111]. Les autres voisins (3, 5, 7) sont au centre du triangle standard et présentent un module d'Young compris entre 150 et 200 GPa, plus faible que le module d'Young macroscopique. On notera que le grain 7 sous le grain central, qui constitue également un grain latéral (mais pas en surface) a un module d'Young plutôt faible (150GPa).

En revanche, la configuration minimale est plus difficilement interprétable. On y retrouve 2 voisins axiaux 3 et 6 qui présentent un module d'Young plus faible et un grain latéral 1 avec un module plus élevé.

La Figure 3-22 concerne les réalisations extrêmes d'un grain central d'orientation [B.O.A.]. Pour la configuration maximale, les voisins en surface n'occupent pas de position remarquable dans le triangle et possèdent un module local relativement proche de la valeur macroscopique (compris entre 150 et 230 GPa). En revanche, le voisin en profondeur est très proche de l'orientation souple [100]. Pour la configuration minimale, la majorité des grains possèdent un module d'Young local inférieur à 150GPa.

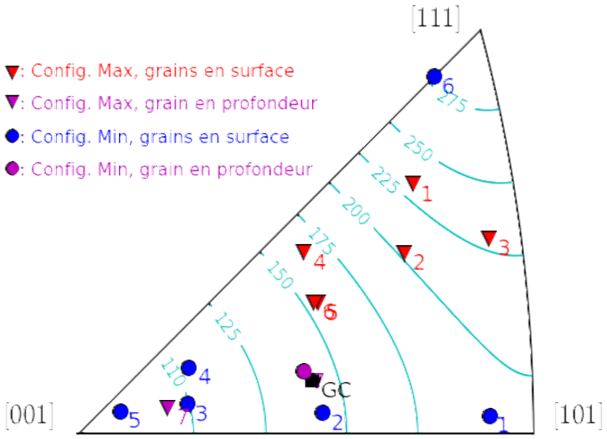


Figure 3-22: Orientation des différents voisins du grain [B.O.A.] pour les 2 réalisations ayant conduit au facteur de Schmid maximal (« Config. Max. ») et minimal («Config. Min.»).

Dans le cas d'un grain central [B.O.B.] (Figure 3-23), la configuration maximale fait apparaître des voisins de surface au centre du triangle standard présentant des modules plutôt faibles compris entre 150 et 200GPa. Cependant, on constate à nouveau que le voisin 7 en profondeur est proche [100] (orientation souple).

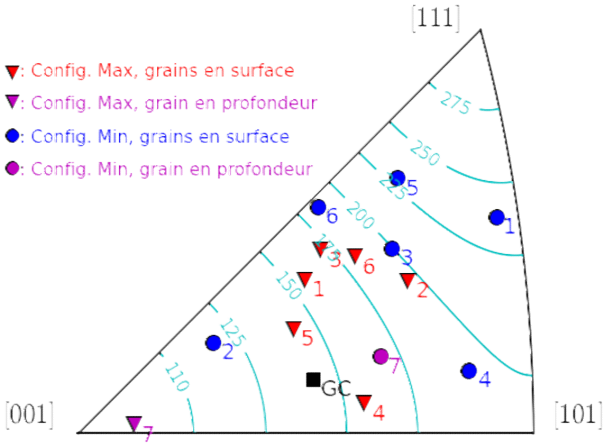


Figure 3-23: Orientation des différents voisins du grain [B.O.B.] pour les 2 réalisations ayant conduit au facteur de Schmid maximal (« Config. Max. ») et minimal (« Config. Min. »).

Pour l'orientation [R.B.] (Figure 3-24), on peut remarquer que, dans la configuration maximale, on retrouve: (i) 2 voisins latéraux en surface (grains 1 et 4) relativement proches du pôle [100], (ii) 2 voisins alignés suivant l'axe de traction (grains 3 et 5) s'approchant du pôle [111], (iii) le voisin en profondeur (grain 7) également proche du pôle [100]. Un arrangement quasiment opposé est observé pour la configuration minimale.

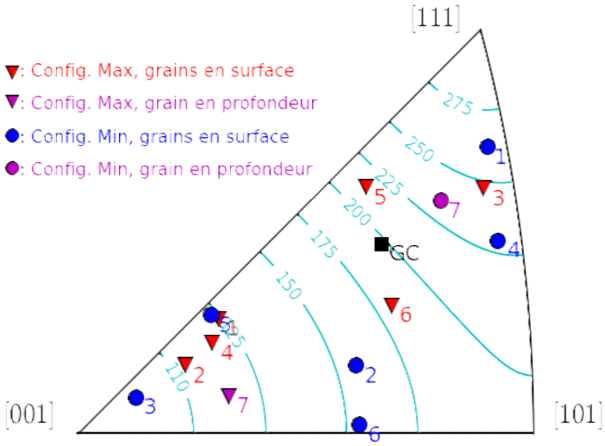
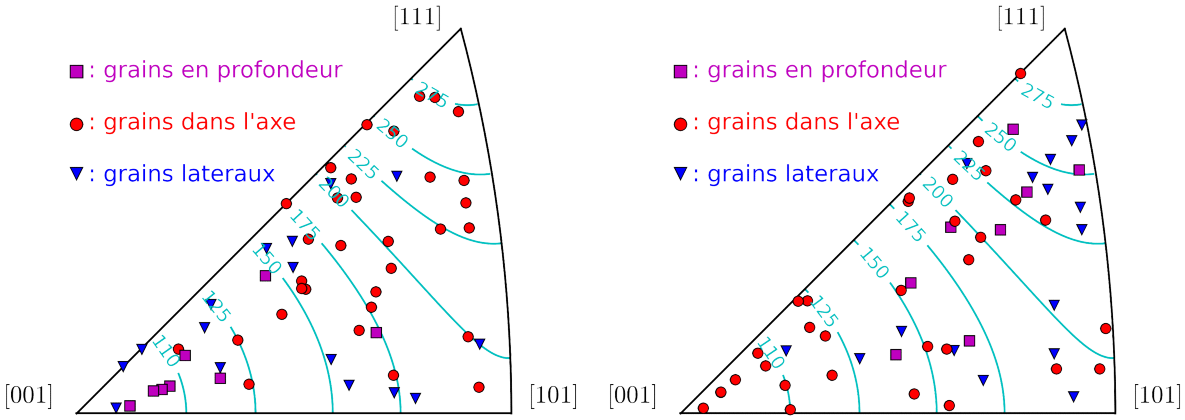


Figure 3-24: Orientation des différents voisins du grain [R.B.] pour les 2 réalisations ayant conduit au facteur de Schmid maximal (« Config. Max. ») et minimal (« Config. Min. »).

L'analyse individuelle des autres orientations n'a pas permis de retrouver des arrangements remarquables de façon probante. Afin de tenter de dégager des tendances générales pour l'ensemble des orientations étudiées, la Figure 3-25 représente l'orientation des voisins pour toutes les orientations étudiées, en séparant les configurations maximales et minimales.



a. configurations maximales *b. configurations minimales*

Figure 3-25: Orientation des différents types de voisins d'un grain central des réalisations conduisant au facteur de Schmid effectif maximal (a=configuration maximale) et minimal (b=configuration minimale) pour les 8 orientations étudiées. Les voisins en surface axiaux (2, 3, 5, 6) sont représentés en rouge, les voisins en surface latéraux (1, 4) en bleu et le voisin en profondeur (7) en violet.

Pour les configurations maximales, on remarque principalement que:

- la grande majorité des grains latéraux en surface (~80%) présentent un module local inférieure à 175GPa et au contraire presque aucun ne possède un module significativement élevé (un seul a un module de 230GPa),
- au contraire, environ la moitié des grains axiaux en surface possède un module d'Young local supérieur à la valeur macroscopique, i.e. 200GPa,
- tous les voisins en profondeur ont un module inférieur à 175GPa et la moitié d'entre eux présentent un module très faible inférieur à 110GPa.

Les configurations minimales présentent des arrangements de voisins complémentaires:

- un peu plus de la moitié des grains latéraux en surface possède un module local supérieur à 225GPa,
- un peu plus de la moitié des grains axiaux en surface possède un module local inférieur à 160GPa,
- un seul voisin en profondeur a un module inférieur à 150GPa, les autres se répartissant dans le reste du triangle en atteignant parfois des modules élevés.

3.4.2.2 Cas des morphologies G.O. et G.F. (octaèdres tronqués ouverts ou fermés)

L'adaptation des analyses précédentes et leur comparaison aux morphologies G.O. ou G.F. est délicate dans la mesure où les configurations de voisinage décrites par ces morphologies deviennent plus complexes et, sur certains aspects, se rapprochent de configurations tridimensionnelles pouvant réellement exister. La Figure 3-26 décrit les arrangements de voisins du grain central et la numérotation proposée.

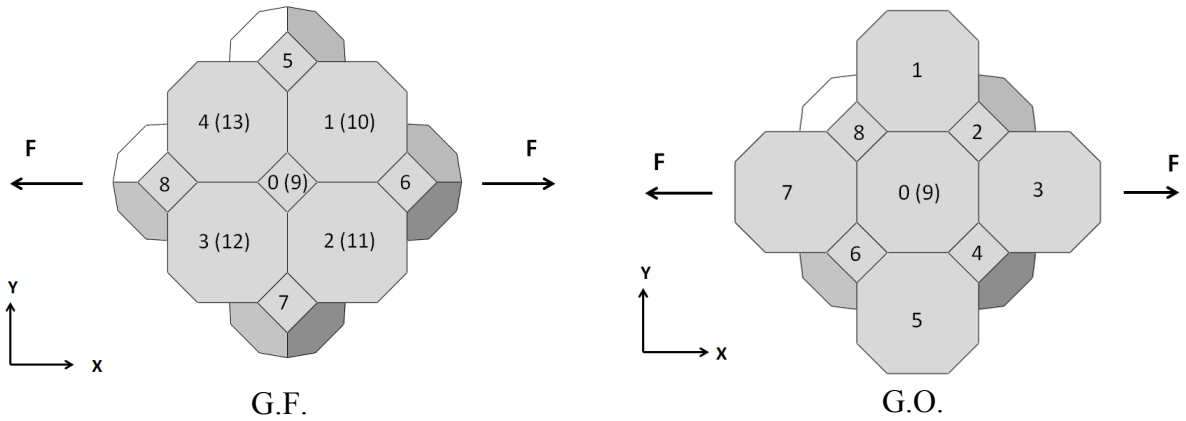
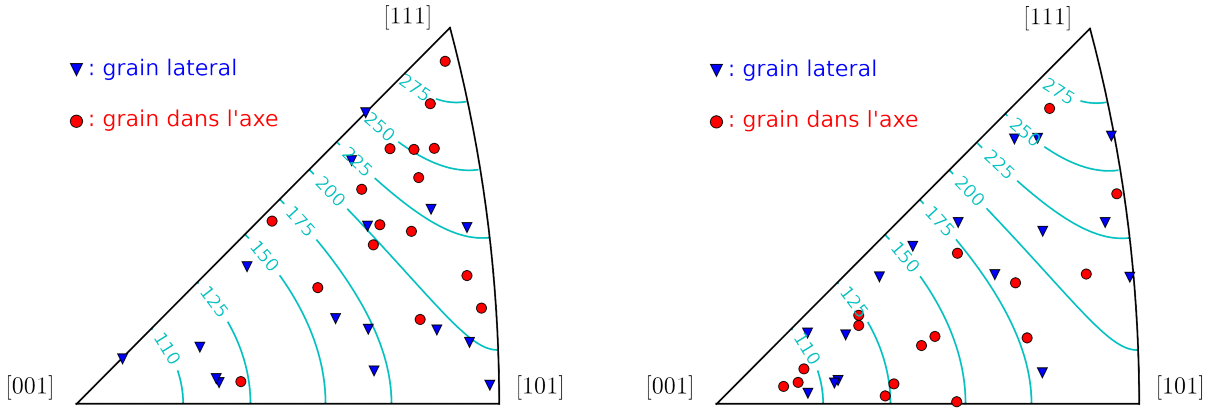


Figure 3-26: Arrangement et numérotation des voisins du grain central: a. agrégat G.F.; b. agrégat G.O.

Dans l'analyse proposée ci-dessous, une définition quelque peu arbitraire des grains axiaux et latéraux a été retenue. Pour le grain central G.F. (Figure 3-26.a), on ne retient dans l'analyse que 2 voisins latéraux (grains 5 et 7) et 2 voisins axiaux (grains 6 et 8). Bien que ces grains ne soient pas en contact du grain central en surface, ils présentent un joint de grains avec le grain central en profondeur. Sans doute en raison de leur volume, et parce qu'ils peuvent être définis comme grains axiaux ou latéraux (contrairement aux voisins 1 à 4), une tendance sur l'orientation de ces grains s'est dégagée plus clairement. Pour le grain central G.O. (Figure 3-26.b), on ne retient dans l'analyse que 2 voisins latéraux (grains 1 et 5) et 2 voisins axiaux (grains 3 et 7).

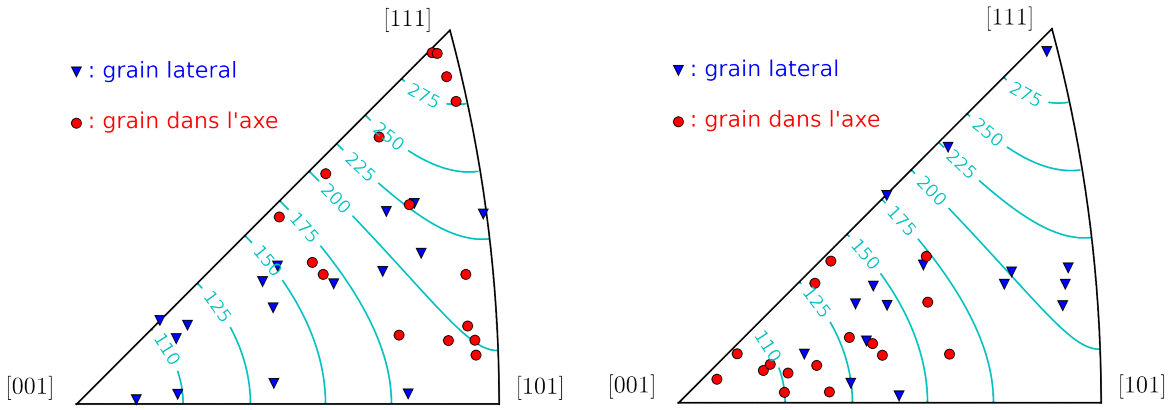
La Figure 3-27 représente les orientations cristallographiques des voisins dans le cas des configurations extrémales pour les huit orientations étudiées et la morphologie G.O. De façon globale, environ 2/3 des voisins considérés (quel que soit leur type) ont un module d'Young local supérieur à 180 GPa dans la configuration maximale et inférieur à 180 GPa dans la configuration minimale. Aucun domaine d'orientation ne peut être identifié clairement pour les grains latéraux (grains 1 et 5). En revanche, les grains axiaux possédant un module supérieur à 200GPa représentent environ 75% des grains axiaux dans la configuration maximale alors qu'ils n'en représentent que 25% dans la configuration minimale. De plus, il y a une proportion importante de voisins axiaux à faible module dans la configuration minimale (environ 2/3 ont un module inférieur à 150GPa), alors qu'il n'y a qu'un grain axial de ce type dans les configurations maximales.



a. configuration maximale b. configuration minimale

Figure 3-27: Orientation des différents types de voisins d'un grain central G.O. des réalisations conduisant au facteur de Schmid effectif maximal (a=configuration maximale) et minimal (b=configuration minimale) pour les 8 orientations étudiées

Des tendances tout à fait similaires sont notées avec la morphologie G.F. (Figure 3-28).



a. configuration maximale *b. configuration minimale*

Figure 3-28: Orientation des différents types de voisins d'un grain central G.F. des réalisations conduisant au facteur de Schmid effectif maximal (a=configuration maximale) et minimal (b=configuration minimale) pour les 8 orientations étudiées.

3.4.3 Etude de clusters de grains spécifiques

Dans cette partie, les agrégats H.A. ont été considérés avec la direction de traction telle que définie sur la Figure 3-29 afin d'obtenir la même configuration géométrique de voisins de surface que celle étudiée par (Sauzay 2006). Il s'agira notamment d'imposer l'orientation des grains 1 à 6 suivant les clusters identifiés par (Sauzay 2006) qui, contrairement aux travaux de ce mémoire, ne considère qu'une seule « couronne » de voisins du grain central, l'ensemble étant inséré dans une matrice élastique isotrope (paragraphe 1.3.2.3). Les résultats présentés ici permettront ainsi d'évaluer l'influence des voisins différents de ceux numérotés 1 à 6 sur le schéma.

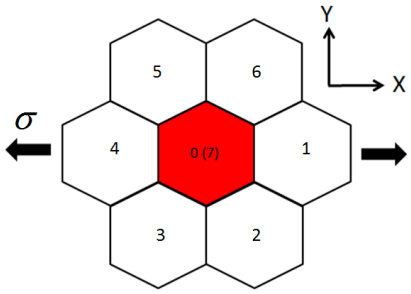


Figure 3-29: Arrangement et numérotation des voisins du grain central (agrégat H.A.).

Dans cette nouvelle configuration (nouvelle direction de traction), une série de 200 réalisations a été effectuée avec un grain central [B.O.A.] et un tirage aléatoire de l'orientation des autres grains. La moyenne de la contrainte axiale normalisée au sein des N grains centraux est de 0.91 et le facteur de Schmid effectif vaut 0.397, ce qui est très proche des résultats obtenus précédemment (voir paragraphe 3.3, un facteur de Schmid effectif de 0.399 avait été obtenu pour la morphologie H.A.). Les facteurs de Schmid extrêmes obtenus, ainsi que les contraintes moyennes par composante, sont donnés dans le Tableau 3-13. La Figure 3-30 décrit l'arrangement des voisins pour ces 2 réalisations extrêmes.

	$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_{gk}}$	$\langle\sigma_{22}\rangle_{V_{gk}}$	$\langle\sigma_{33}\rangle_{V_{gk}}$	$\langle\sigma_{12}\rangle_{V_{gk}}$	$\langle\sigma_{13}\rangle_{V_{gk}}$	$\langle\sigma_{23}\rangle_{V_{gk}}$	μ_{eff}^{gk}
Config. Max.	326.9	24.3	5.4	-0.5	51.9	-15.2	0.490
Config. Min.	235.6	35.6	-6.5	1.1	40.5	-1.5	0.324

Tableau 3-13: Facteur de Schmid effectif et contraintes dans un grain central [B.O.A.] des 2 réalisations conduisant au facteur de Schmid effectif maximal (« config. max. ») et minimal (« config. min. »).

Pour la configuration maximale, 3 voisins en surface présentent un module d'Young local supérieur à 225GPa et aucun des grains de surface ne possède un module d'Young inférieur à 160GPa. Comme cela avait été constaté dans la partie précédente, le voisin latéral en profondeur (grain 7) est souple (module d'Young inférieur à 110 GPa). Pour la configuration minimale, des grains latéraux 2 et 3 sont proches de l'orientation [111] et le module d'Young de tous les autres grains est inférieur à 160 GPa.

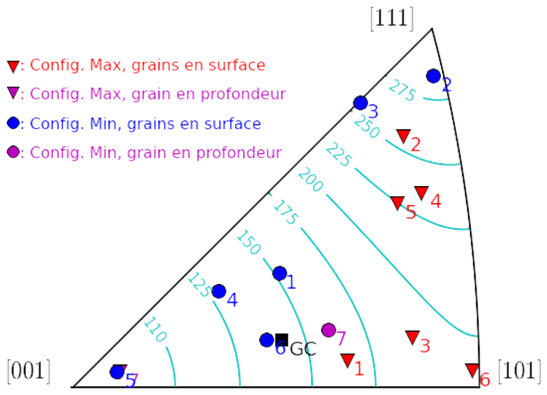


Figure 3-30: Grains voisins de 2 cas extrêmes

Ensuite, sur la base de ces 2 réalisations extrémales, on définit 6 configurations (ou cas) spécifiques. Pour les 3 premières, à l'exception des grains voisins 1 à 6, l'orientation des grains est la même que dans la configuration maximale. Pour les 3 suivantes, à l'exception des grains voisins 1 à 6, l'orientation des grains est la même que dans la configuration minimale. On obtient alors les 6 cas suivants, décrits par la Figure 3-31:

- cas 1: grains axiaux [111] et latéraux [100], les autres issus de la « config. max. »
- cas 2: grains axiaux [100] et latéraux [111], les autres issus de la « config. max. »
- cas 3: grains axiaux et latéraux [B.O.A.], les autres issus de la « config. max. »
- cas 4: grains axiaux [111] et latéraux [100], les autres issus de la « config. min. »
- cas 5: grains axiaux [100] et latéraux [111], les autres issus de la « config. min. »
- cas 6: grains axiaux et latéraux [B.O.A.], les autres issus de la « config. min. »

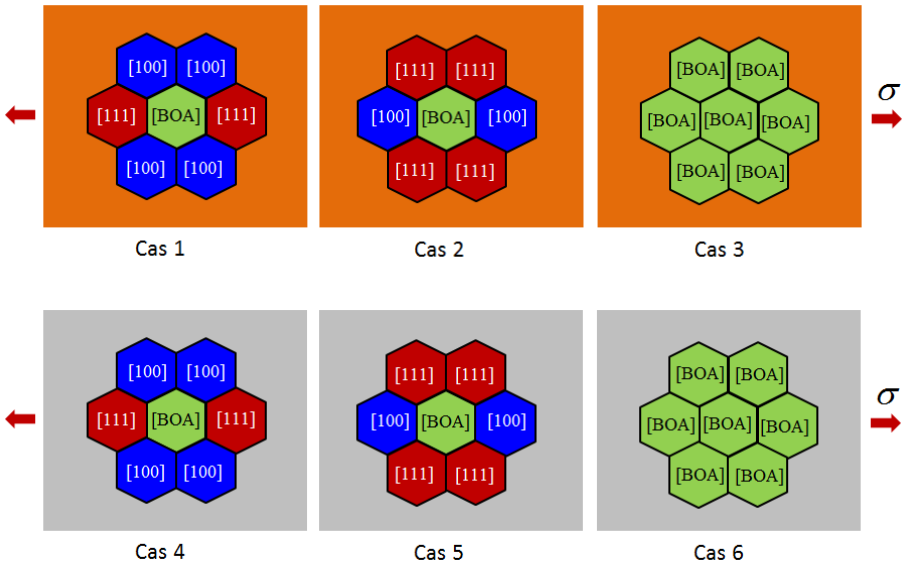


Figure 3-31: 6 cas spécifiques de voisinages étudiés: pour les cas 1-3, l'orientation des grains non-représentés est la même que dans la réalisation aléatoire ayant conduit au facteur de Schmid effectif maximal, pour les cas 4-6, il s'agit de la réalisation ayant conduit au facteur de Schmid effectif minimal.

La Figure 3-32 représente la contrainte axiale normalisée et le facteur de Schmid effectif dans le grain central des principaux cas de figure, en classant les valeurs dans l'ordre décroissant. Le détail des valeurs est donné dans le Tableau 3-14.

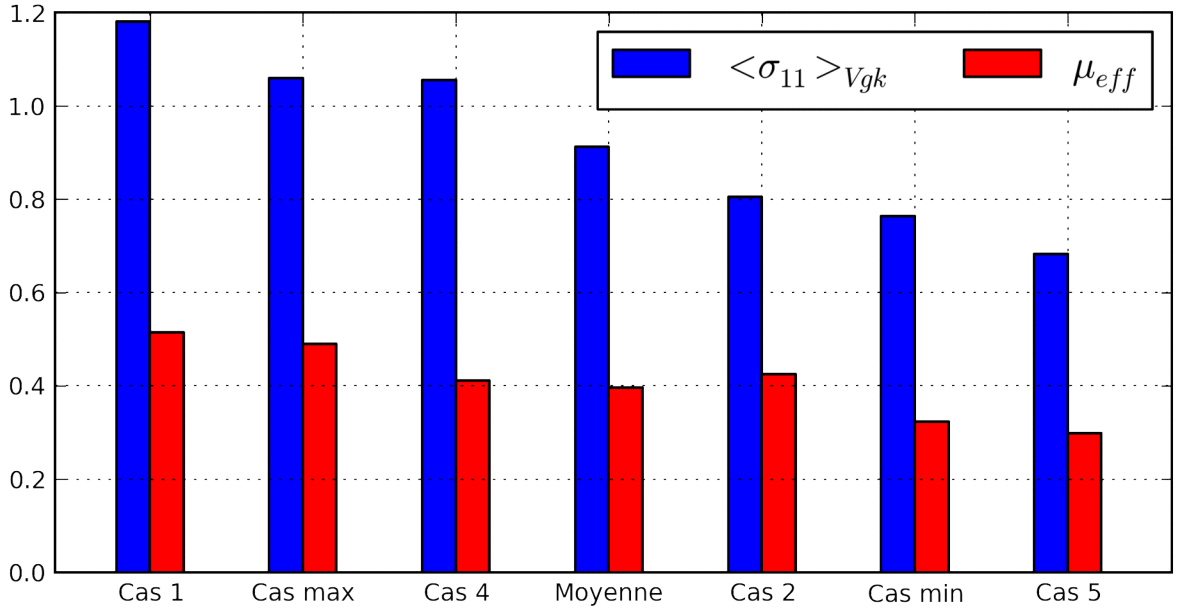


Figure 3-32: La moyenne de la contrainte axiale normalisée et du facteur de Schmid effectif pour les différents cas étudiés.

	Cas 1	Cas max	Cas 3	Cas 4	Moyenne	Cas 6	Cas 2	Cas min	Cas 5
$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_{gk}}$	1.181	1.060	0.955	1.056	0.913	0.821	0.805	0.764	0.683
μ_{eff}	0.515	0.490	0.431	0.412	0.397	0.341	0.425	0.324	0.299

Tableau 3-14 : Contrainte $\langle\sigma_{11}\rangle_{V_{gk}}$ dans le grain central normalisée et facteur de Schmid effectif (contrainte et cission sont normalisées par la contrainte macroscopique $\langle\sigma_{11}\rangle_V$ obtenue avec la série di 200 simulations).

En ajoutant une couronne de voisins en surface rigides dans l'axe et souples latéralement (cas 1 et 4), on augmente systématiquement la contrainte axiale et le facteur de Schmid effectif dans le grain central. En permutant grains rigides et souples (cas 2 et 5), on diminue systématiquement la contrainte axiale et le facteur de Schmid effectif. Ainsi, on obtient donc la contrainte axiale et le facteur de Schmid effectif maximaux et minimaux pour les cas 1 et 5, respectivement.

En partant de la configuration minimale, l'application de la couronne maximisant la contrainte axiale (cas 4) conduit à une contrainte axiale plus élevée que celle obtenue en appliquant la couronne minimisant la contrainte axiale à partir de la configuration maximale (cas 2). Cela signifie que l'effet des grains voisins de la première couronne en surface est plus important que celui des autres grains. Cependant, ce n'est pas toujours le cas pour le

facteur de Schmid effectif. La valeur obtenue pour le cas 2 (0.425) est légèrement supérieure à celle du cas 4 (0.412). Mais il faut noter que ce dernier n'est pas obtenu sur le système de glissement primaire B5 mais sur le secondaire D6. Les autres composantes sont donc également influencées par le voisinage et sont non-négligeables sur le facteur de Schmid effectif.

Le Tableau 3-15 donne une synthèse des cissions résolues maximale et minimale $\langle \tau \rangle_{V_{gk}}$ obtenues par tirages aléatoires des orientations des voisins, ainsi que celles $\langle \tau \rangle_{V_{gk}}^{Cluster\ Spécifique}$ obtenues en imposant un cluster spécifique de 1ers voisins (cas 1 et 5 pour les valeurs maximales et minimales). Ces valeurs sont rapportées à la même contrainte de traction macroscopique que celle utilisée par (Sauzay 2006) pour permettre la comparaison des valeurs. On trouve la même tendance générale. La cission résolue maximale obtenue avec des clusters spécifiques (158 MPa) est un peu plus élevée que la cission résolue maximale parmi 200 réalisations (151 MPa). La cission résolue minimale obtenue avec des clusters spécifiques (94 MPa) est légèrement inférieure à la cission résolue minimale parmi 200 réalisations (100 MPa). De plus, des valeurs tout à fait comparables ont été obtenues dans les 2 études.

	$\langle \tau \rangle_{V_{gk}}$ (MPa)	$\langle \tau \rangle_{V_{gk}}^{Cluster\ Spécifique}$ (MPa)
Maximum	151	158
Minimum	100	94
Maximum (Sauzay 2006)	141	149
Minimum (Sauzay 2006)	102	92

Tableau 3-15 : Comparaison avec les résultats de M.Sauzay (Sauzay 2006).

3.5 Analyse des champs par sous-domaines du grain central

3.5.1 Introduction et démarche

Dans les parties précédentes, la distribution des grandeurs mécaniques locales (contrainte, cission résolue,...) a été étudiée de façon globale dans le grain central, notamment à travers leur moyenne et leur écart-type, sans aucune information sur leur répartition spatiale. Il s'agit ici d'introduire une échelle, ou « niveau de localité », intermédiaire entre le point et le grain entier dans l'analyse des champs en réalisant une partition du grain central en plusieurs sous-domaines. Les mêmes post-traitements que ceux effectués précédemment à l'échelle du grain central seront réalisés alors pour chaque sous-domaine afin d'y évaluer la distribution des champs de contraintes et de cissions résolues. Ce type d'analyse est motivé par le fait qu'on peut observer l'apparition de traces de glissement sur une partie du grain seulement, par exemple à proximité d'un joint de grain.

La partition du grain central est décrite par la Figure 3-33. Tout d'abord, le grain central est coupé en 2 dans la profondeur puis la moitié supérieure en surface est divisée en 2 domaines, l'un au centre du grain (P_C) et l'autre à proximité des joints de grains (P_{JG}) tel que défini sur la Figure 3-33.a. Ensuite, le domaine P_{JG} est lui-même divisé en 6 sous-domaines égaux P_i, i=1..6 (Figure 3-33.b). L'indice i désigne le numéro du voisin du grain central partageant un joint avec le domaine P_i, en suivant la numérotation des grains adoptée précédemment (cf. paragraphe 3.4.2, Figure 3-20).

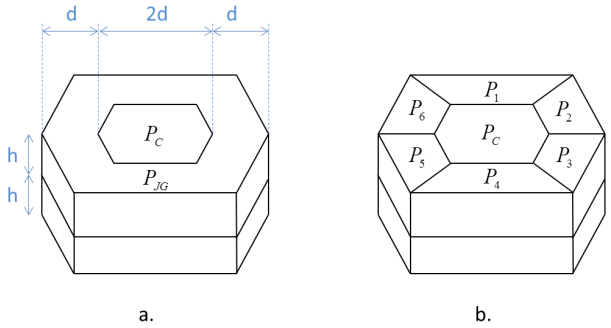


Figure 3-33 : Partition du grain central en sous-domaines : a. 2 sous-domaines en surface (domaine P_C au centre du grain et P_{JC} proche des joints de grain), b. partition du domaine P_{JC} en 6 sous-domaines P_i, i=1..6.

Le sous-domaine P_C est composé de 240 éléments et chaque sous-domaine P_i d'environ 150 éléments. Cette étude a été réalisée pour seulement 3 des séries de simulations décrites précédemment, correspondant à un agrégat de morphologie H.A. et un grain central d'orientation [100], [B.O.A.] ou [Q.]. Les résultats présentés dans cette partie correspondent donc à de nouveaux post-traitements effectués sur ces 3 séries de simulations dont les résultats, analysés à l'échelle du grain central entier, ont déjà été présentés. On inclura également quelques résultats relatifs à la fluctuation d'une réalisation à une autre de grandeurs mécaniques observées sur quelques points fixes au sein du grain central.

3.5.2 Analyse des contraintes

Les graphes de la Figure 3-34 et le Tableau 3-16 indiquent la moyenne et les écarts-types de la contrainte axiale σ_{11} déterminés pour chaque type de sous-domaines (P_C, P_{JG} ou P_i) et chacune des orientations étudiées. Ces quantités sont calculées exactement de la même manière que $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$, SD_{Vg} , SD_{Vg}^{intra} , SD_{Vg}^{inter} en considérant la réunion de N sous-domaines d'un type donné (V_p) au lieu de la réunion de N grains centraux entiers (V_g). Les résultats obtenus précédemment (paragraphe 3.3) pour la réunion des N grains centraux entiers sont indiqués ici par la mention *GC* (grain central).

Pour les 3 orientations étudiées, la contrainte axiale moyenne dans le sous-domaine P_C (au centre du grain central en surface) est systématiquement légèrement plus faible que celle obtenue pour le grain entier. Les valeurs moyennes obtenues pour le sous-domaine P_{JG} (à proximité des joints de grains en surface) sont systématiquement légèrement plus élevées que celles obtenues au centre du grain (sous-domaine P_C). Les valeurs moyennes obtenues

pour un sous-domaine P_i donné (à proximité d'un joint de grains en surface) fluctuent autour de celles obtenues sur le sous-domaine P_{JG}.

a.

b.

c.

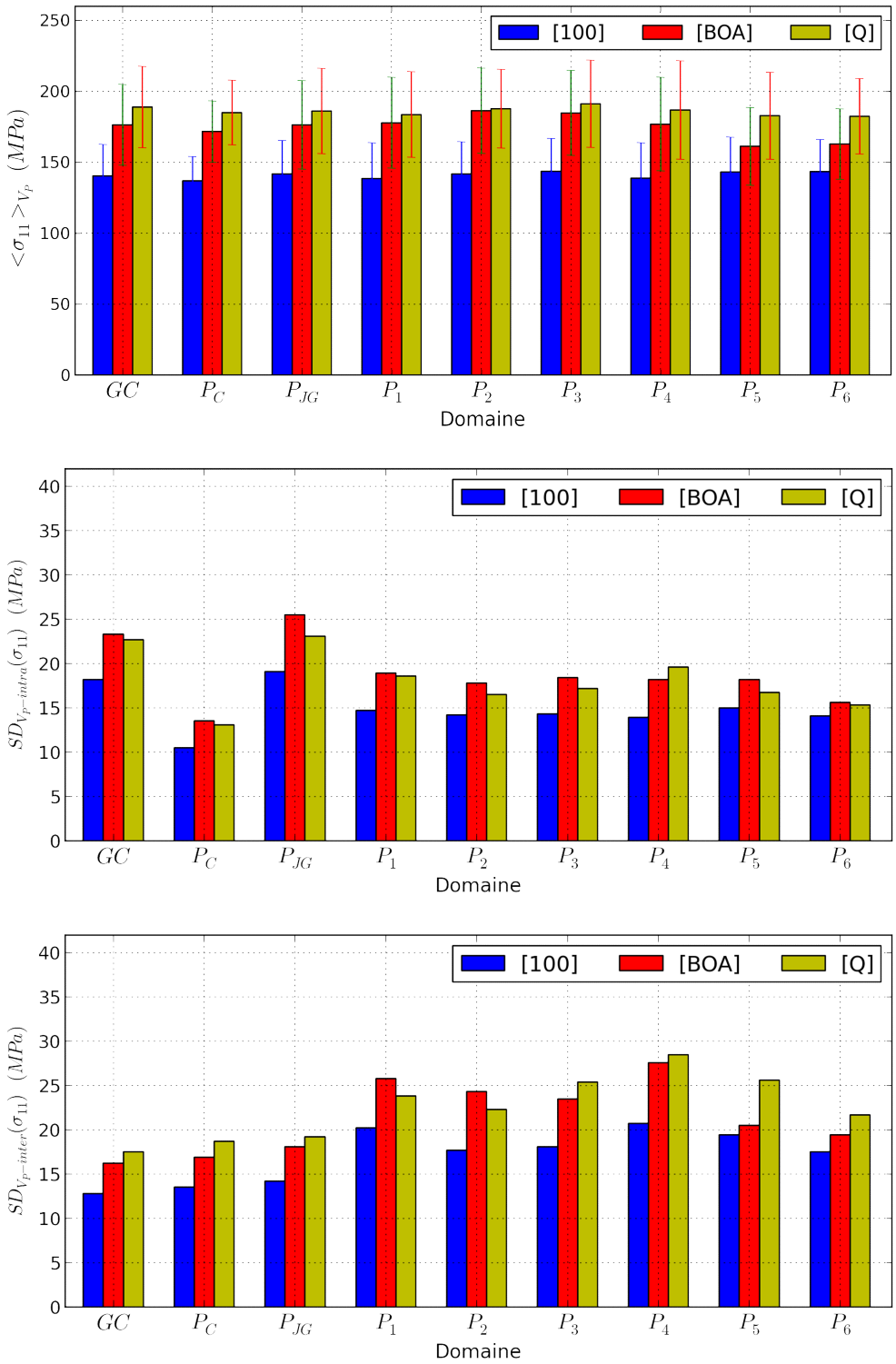


Figure 3-34 : Moyenne et écarts-types de la contrainte axiale σ_{11} (MPa) au sein des différents sous-domaines pour les 3 orientations étudiées: a. Moyenne et écart-type total (barres d'erreur), b. Ecart-type intra-réalisation, c. Ecart-type inter-réalisation.

Au centre du grain (sous-domaine P_C), l'écart-type intra-réalisation est significativement plus faible que celui constaté dans le grain entier. En revanche, l'écart-type inter-réalisation au centre du grain n'est que très légèrement supérieur à celui évalué dans le grain entier et il est alors supérieur à la dispersion intra-réalisation (ce qui n'est pas le cas pour le grain entier). L'écart-type total au centre du grain est plus faible que dans les domaines proches des joints de grains.

A proximité des joints de grains (sous-domaine P_{JG}), les différents écarts-types sont légèrement supérieurs à ceux constatés dans le grain entier, mais le poids des contributions intra- et inter-réalisation reste inchangé. Lorsque l'on considère un seul sous-domaine P_i (associé à un seul joint de grains), l'écart-type total est très proche de celui constaté sur l'ensemble du sous-domaine P_{JG}. Cependant, l'écart-type inter-réalisation est alors supérieur à l'écart-type intra-réalisation.

Orientations		GC	P_C	P_{JG}	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6
[100]	$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_P}$	140.3	136.8	141.7	138.6	141.8	143.7	138.8	143.1	143.5
	$SD_{V_P}^{intra}$	18.2	10.5	19.1	14.7	14.2	14.3	13.9	15.0	14.1
	$SD_{V_P}^{inter}$	12.8	13.5	14.2	20.2	17.7	18.1	20.7	19.4	17.5
	SD_{V_P}	22.2	17.1	23.7	25.0	22.7	23.1	24.9	24.5	22.5
[B.O.A.]	$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_P}$	176.3	171.6	176.3	177.8	186.3	184.8	176.9	161.2	162.8
	$SD_{V_P}^{intra}$	23.3	13.5	25.5	18.9	17.8	18.4	18.2	18.2	15.6
	$SD_{V_P}^{inter}$	16.2	16.9	18.1	25.8	24.3	23.5	27.6	20.5	19.4
	SD_{V_P}	28.4	21.6	31.2	32.0	30.1	29.9	33.0	27.4	24.8
[Q.]	$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_P}$	188.9	185.0	186.1	183.6	187.7	191.2	186.8	182.8	182.4
	$SD_{V_P}^{intra}$	22.7	13.1	23.1	18.6	16.5	17.2	19.6	16.7	15.3
	$SD_{V_P}^{inter}$	17.5	18.7	19.2	23.8	22.3	25.4	28.5	25.6	21.7
	SD_{V_P}	28.7	22.8	30.0	30.2	27.7	30.7	34.6	30.6	26.5

Tableau 3-16: Moyenne et écarts-types de la contrainte axiale σ_{11} (MPa) au sein des différents sous-domaines pour les 3 orientations étudiées.

Le Tableau 3-17 indique en valeurs normalisées les moyennes et les écart-types des contraintes dans le grain central (GC), le sous-domaine au centre du grain (P_C), le sous-domaine à proximité des joints de grains (P_{JG}) et le sous-domaine P_5 pour l'orientation [B.O.A.]. Globalement, le niveau de multiaxialité locale est le même pour tous les sous-domaines. On constate que l'écart-type total dans le sous-domaine P_{JG} varie de 5% à 16% de la contrainte axiale macroscopique ; et de 3 à 14% dans les autres sous-domaines. On note également que l'écart-type intra-granulaire des contraintes dans le sous-domaine P_{JG} est plus élevé que dans les autres sous-domaines. Par contre, l'écart-type inter-granulaire est plus faible que celui dans les sous-domaines P_i (i=1-6).

	$\langle\cdot\rangle_{V_P}$	$SD_{V_P}^{intra}$	$SD_{V_P}^{inter}$	SD_{V_P}
σ_{11}	0.908	0.120	0.083	0.146
σ_{22}	0.111	0.103	0.068	0.124
σ_{33}	-0.01	0.086	0.026	0.090
σ_{12}	0.035	0.076	0.048	0.090
σ_{13}	0.088	0.058	0.030	0.065
σ_{23}	-0.03	0.050	0.024	0.056

GC

	$\langle\cdot\rangle_{V_P}$	$SD_{V_P}^{intra}$	$SD_{V_P}^{inter}$	SD_{V_P}
σ_{11}	0.908	0.131	0.093	0.161
σ_{22}	0.106	0.108	0.075	0.131
σ_{33}	-0.016	0.075	0.023	0.078
σ_{12}	0.032	0.088	0.050	0.101
σ_{13}	0.081	0.057	0.025	0.062
σ_{23}	-0.028	0.050	0.019	0.054

P_{JG}

	$\langle\cdot\rangle_{V_P}$	$SD_{V_P}^{intra}$	$SD_{V_P}^{inter}$	SD_{V_P}
σ_{11}	0.884	0.070	0.087	0.111
σ_{22}	0.113	0.064	0.075	0.098
σ_{33}	0.009	0.029	0.014	0.032
σ_{12}	0.041	0.046	0.061	0.077
σ_{13}	0.058	0.035	0.023	0.041
σ_{23}	-0.02	0.026	0.021	0.033

P_C

	$\langle\cdot\rangle_{V_P}$	$SD_{V_P}^{intra}$	$SD_{V_P}^{inter}$	SD_{V_P}
σ_{11}	0.830	0.094	0.106	0.141
σ_{22}	0.126	0.079	0.107	0.132
σ_{33}	0.001	0.060	0.044	0.074
σ_{12}	0.015	0.063	0.076	0.099
σ_{13}	0.070	0.049	0.031	0.058
σ_{23}	-0.032	0.037	0.029	0.047

P_5

Tableau 3-17: Moyenne et écarts-types des 6 composantes du tenseur des contraintes (normalisées par la contrainte axiale macroscopique) pour le grain central entier (P_{GC}), le sous-domaine au centre du grain (P_C), le sous-domaine à proximité des joints de grains (P_{JG}) et le sous-domaine P_5. Cas de l'orientation [B.O.A.].

L'analyse de l'allure des distributions pour chaque type de sous-domaine (non représentées ici) conduit aux mêmes conclusions que celles obtenues à l'échelle du grain central entier. La distribution des contraintes σ_{11}, σ_{22} et σ_{12} (valeurs locales ou moyennes par réalisation) est assez bien décrite par une loi normale (par comparaison à la gaussienne de même moyenne et de même écart-type). Pour les composantes σ_{33}, σ_{13} et σ_{23}, les distributions des valeurs locales présentent un pic en zéro associé à l'effet de surface libre décrit précédemment et ne peuvent plus être décrites par une loi normale. En revanche, la distribution des valeurs moyennes par réalisation est décrite de façon acceptable par une loi normale.

3.5.3 Analyse du facteur de Schmid effectif

Le facteur de Schmid effectif et les écarts-types associés sont représentés sur la Figure 3-35 et le Tableau 3-18. Les données qui apparaissent avec la mention *GC* (grain central), correspondant à celles obtenues pour le grain central entier, sont indiquées ici à titre de comparaison. Le facteur de Schmid effectif calculé pour les sous-domaines P_C et P_{JG} est déterminé exactement de la même façon que le précédent en considérant l'un des sous-domaines au lieu du grain central entier. Le facteur de Schmid effectif indiqué correspond à la 1ère définition, i.e. calculé sur le système de glissement conduisant à la moyenne la plus élevée pour les N réalisations (voir paragraphe 2.5.1).

Le facteur de Schmid effectif $P_i(1)$ correspond à la valeur maximale obtenue en calculant le facteur de Schmid effectif séparément pour chacun des 6 sous-domaines P_i et chacun des 12 systèmes de glissement. La valeur ainsi obtenue caractérise le sous-domaine P_i et le système de glissement pour lequel la cission résolue est maximale en moyenne. Toutefois, elle ne comptabilise pas les réalisations où des cissions résolues plus élevées sont atteintes dans un autre sous-domaine et/ou sur un autre système de glissement. Ainsi, la facteur de Schmid effectif $P_i(2)$ a été défini comme la moyenne des facteurs de Schmid effectifs de chaque réalisation k obtenus pour tout sous-domaine et tout système de glissement.

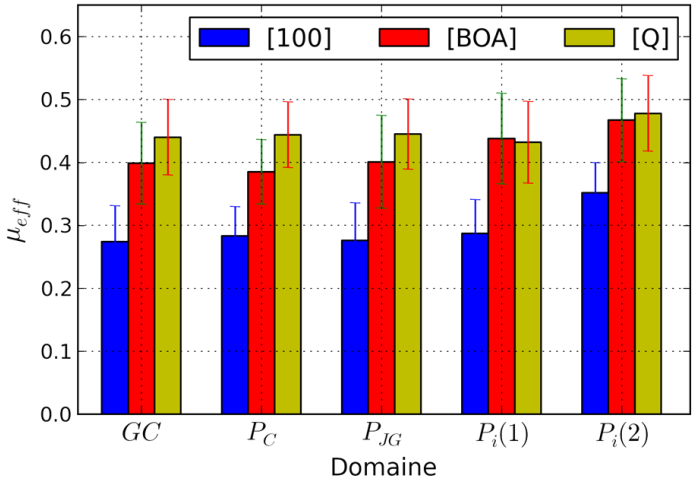


Figure 3-35 : Facteur de Schmid effectif et écart-type total (barres d'erreur) au sein de différents sous-domaines pour les 3 orientations étudiées.

L'objectif est de fournir des indicateurs, en termes de moyennes et de dispersion, permettant de décrire la distribution de la cission résolue dans différentes régions du grain (au centre ou à proximité d'un joint) afin d'évaluer si l'activation du glissement a lieu préférentiellement dans une région donnée. Pour les 3 orientations étudiées, le facteur de Schmid effectif évalué au centre du grain (P_C) reste relativement proche de ceux obtenus dans le sous-domaine (P_{JG}) et dans un sous-domaine (P_i), tel que défini par $P_i(1)$. Des valeurs plus élevées sont obtenues à proximité des joints pour l'orientation [B.O.A.], mais ce n'est pas systématiquement le cas pour les 2 autres orientations. Cependant, avec la définition $P_i(2)$, i.e. en considérant, d'une réalisation à une autre, différents sous-domaines et

différents systèmes de glissement, le facteur de Schmid effectif ainsi obtenu est plus significativement et systématiquement supérieur à celui défini au centre. Cela suggère que l'activation du glissement est plus favorable à proximité d'un joint, mais que d'une réalisation à une autre (i.e. d'un voisinage à un autre), l'activation du glissement peut survenir à proximité d'un joint différent et sur un système de glissement différent.

		[100]	[B.O.A.]	[Q.]
Domaine	μ	0.408	0.500	0.487
Grain Central	μ_{eff}	0.274	0.399	0.440
	$SD_{V_P}^{intra}$	0.048	0.055	0.048
	$SD_{V_P}^{inter}$	0.031	0.036	0.037
	SD_{V_P}	0.057	0.065	0.060
P_C	μ_{eff}	0.283	0.385	0.444
	$SD_{V_P}^{intra}$	0.028	0.033	0.028
	$SD_{V_P}^{inter}$	0.038	0.039	0.044
	SD_{V_P}	0.047	0.051	0.052
P_{JG}	μ_{eff}	0.276	0.401	0.445
	$SD_{V_P}^{intra}$	0.046	0.063	0.036
	$SD_{V_P}^{inter}$	0.037	0.038	0.044
	SD_{V_P}	0.060	0.074	0.056
$P_i(1)$	μ_{eff}	0.287	0.438	0.432
	$SD_{V_P}^{intra}$	0.035	0.048	0.051
	$SD_{V_P}^{inter}$	0.042	0.053	0.040
	SD_{V_P}	0.054	0.072	0.065
$P_i(2)$	μ_{eff}	0.352	0.467	0.478
	$SD_{V_P}^{intra}$	0.037	0.050	0.035
	$SD_{V_P}^{inter}$	0.030	0.044	0.049
	SD_{V_P}	0.048	0.066	0.060

Tableau 3-18: Facteur de Schmid effectif et écarts-types associés au sein des différents types de sous-domaines pour les 3 orientations étudiées.

La distribution du facteur de Schmid effectif est représentée sur la Figure 3-36 pour l'orientation [B.O.A.]. Que ce soit au centre du grain (sous-domaine P_C, Figure 3-36.a) ou à proximité d'un joint (sous-domaine P_2, Figure 3-36.b), la distribution des valeurs locales (courbes bleues continues) peut être décrite de façon acceptable par une loi normale, par comparaison aux courbes gaussiennes de même moyenne et écart-type (courbes rouges continues). Cela semble également vrai, dans une moindre mesure, lorsqu'il s'agit de la distribution des valeurs moyennes par réalisation.

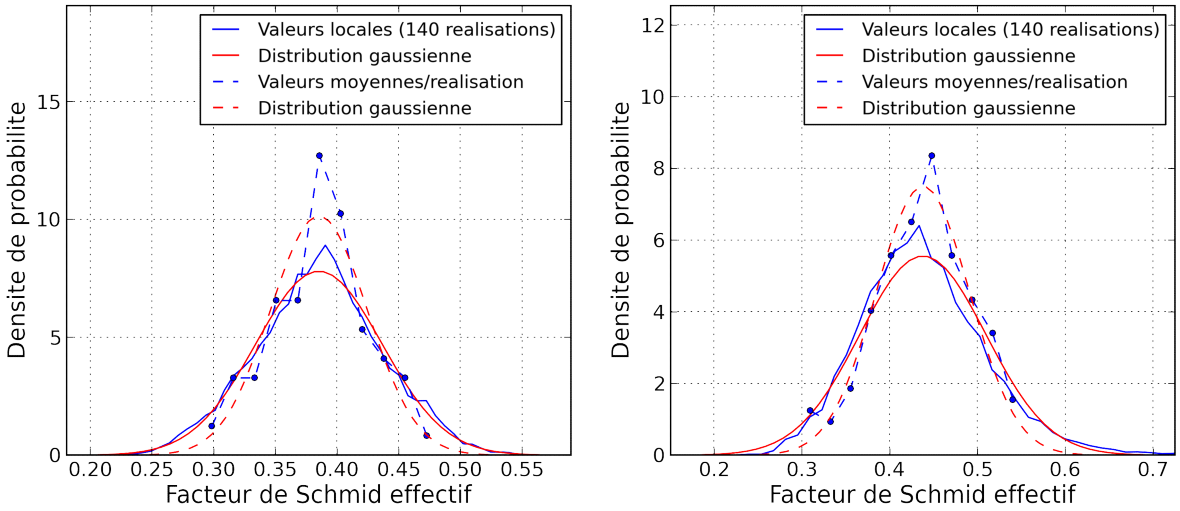


Figure 3-36 : Distribution du facteur de Schmid effectif: a. dans le sous-domaine P_C ; b. dans le sous-domaine P_2 (orientation [B.O.A.]).

Sur la Figure suivante, on compare, pour l'orientation [B.O.A.], la distribution du facteur de Schmid effectif au centre du grain (sous-domaine P_C) et à proximité des joints (sous-domaine P_{JG}) (Figure 3-37.a). La distribution des valeurs locales (courbes continues) indique clairement que les cissions résolues maximales sont atteintes d'abord à proximité des joints. Cependant, cette différence est beaucoup moins marquée en considérant les valeurs moyennes par réalisation (courbes pointillées). En effet, pour une réalisation, les cissions sont très hétérogènes dans le sous-domaine P_{JG}. En considérant la distribution dans un sous-domaine P_i précis (par exemple le sous-domaine P_2, Figure 3-37.b), la différence est alors bien plus marquée. Dans une réalisation donnée, un facteur de Schmid effectif moyen supérieur à 0.5 pourra être atteint dans ce sous-domaine alors qu'au centre du grain il restera inférieur à 0.47.

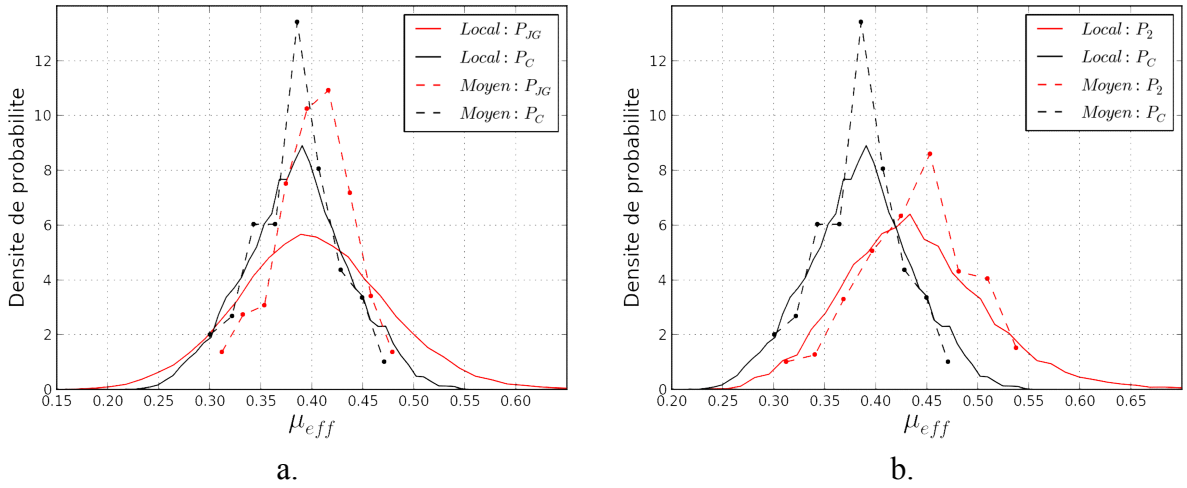


Figure 3-37 : Distribution de facteur de Schmid effectif : a. dans les sous-domaines P_C et P_{JG} ; b. dans les sous-domaines Pc et P2 (orientation [B.O.A.]).

3.5.4 Configurations extrémales

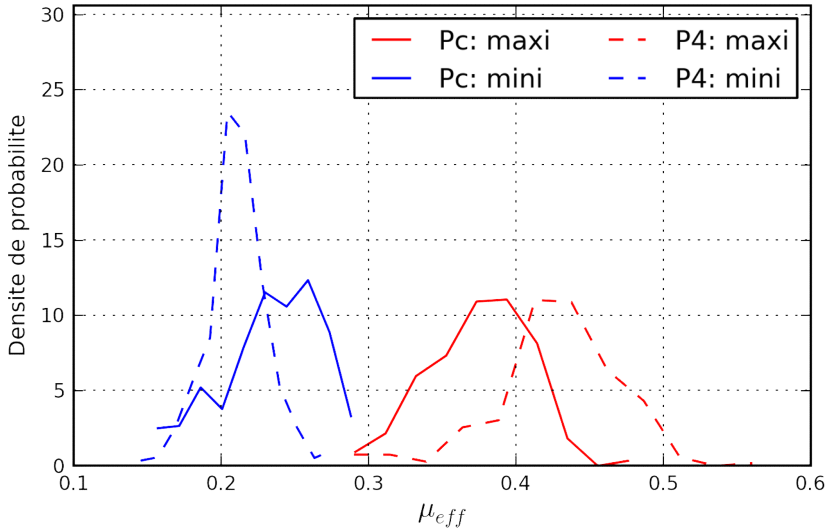
Les valeurs extrémales du facteur de Schmid effectif obtenues au centre du grain (P_C) et au sein d'un des 6 sous-domaines (P_i) sont indiquées pour les 3 orientations étudiées dans le Tableau 3-19. Pour une orientation donnée, les valeurs extrémales sont obtenues à proximité d'un joint. Le facteur de Schmid maximal (resp. minimal) obtenu au centre du grain est plus faible (resp. plus fort) que la valeur maximale (resp. minimale) obtenue à proximité d'un joint. Cela provient de la forte fluctuation des contraintes observée à proximité des joints. On note que les facteurs de Schmid effectif maximaux sont relevés dans les domaines P_1 ou P_4. Le facteur de Schmid effectif le plus élevé vaut 0.631, obtenu pour l'orientation [Q.] et le sous-domaine P_4. En moyenne dans le grain entier, la valeur maximale obtenue pour cette orientation était de 0.557.

		Max	Moy	Min
[100]	P_C	0.375	0.283	0.234
	P_i	0.428 (P_4)	0.286 (P_4)	0.211 (P_4)
[B.O.A.]	P_C	0.481	0.385	0.299
	P_i	0.557 (P_1)	0.419 (P_1)	0.254 (P_5)
[Q.]	P_C	0.562	0.444	0.318
	P_i	0.631 (P_4)	0.425 (P_4)	0.277 (P_5)

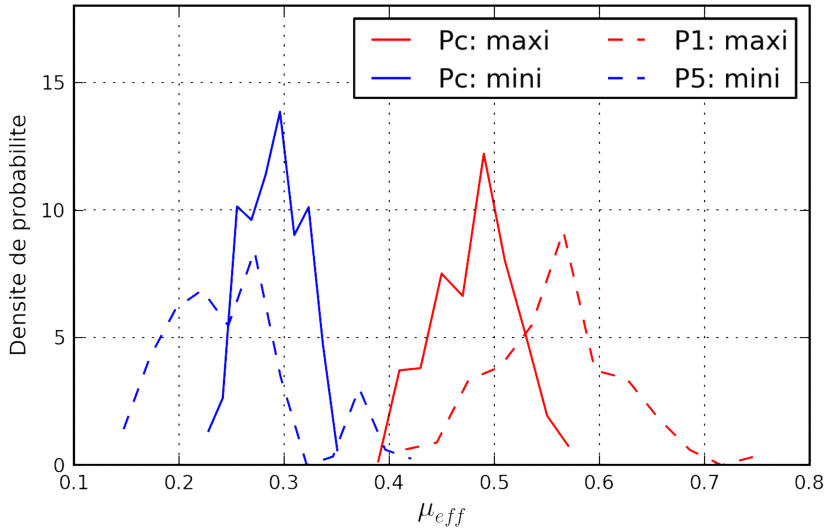
Tableau 3-19: Facteur de Schmid effectif extrémal au centre du grain (P_C) et à proximité d'un joint (P_i) pour les 3 orientations étudiées.

La distribution de la cission résolue dans chaque sous-domaine (au centre ou à proximité d'un joint) correspondant à une réalisation extrémale est représentée sur la Figure 3-38. Quel que soit l'orientation ou le sous-domaine considéré, la distribution de la réalisation maximale est disjointe de la distribution de la réalisation minimale. Ainsi, la cission résolue en tout point du sous-domaine de la réalisation maximale est supérieure à celle en tout point du sous-domaine de la réalisation minimale. Or, ce n'était pas le cas lorsque la distribution de la cission dans le grain entier était considérée. Ce constat est tout à fait conforme aux observations expérimentales. En effet, il est possible d'observer des traces de glissement recouvrant un sous-domaine d'un grain alors que certains sous-domaines d'autres grains de même orientation n'ont pas activé de glissement. On notera également qu'une loi normale pourra décrire, certes de façon très grossière, la distribution de la cission dans un sous-domaine d'une réalisation.

a.



b.



c.

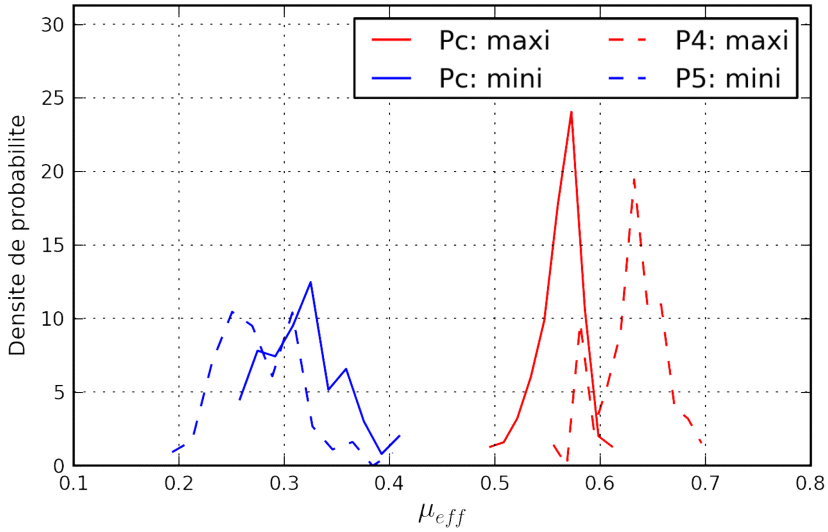


Figure 3-38 : Distribution du facteur de Schmid effectif pour les réalisations extrémales dans les sous-domaines P_C et P_i : a. orientation [100]; b. orientation [B.O.A.]; c. orientation [Q.].

La Figure 3-39 présente l'orientation des grains voisins (grain 1 à 6) du grain central (GC) d'orientations [Q.] dans le triangle standard pour les réalisations extrémales dans un des 6 sous-domaines proches d'un joint de grain. Les points rouges représentent les voisins du grain central pour la réalisation qui rend le facteur de Schmid effectif maximal dans le sous-domaine P_4. Les points bleus correspondent à la réalisation minimale obtenue dans le sous-domaine P_5. On remarque que pour la réalisation maximale, les grains axiaux (grains 3 et 5) sont rigides (E_t>200 GPa) et le grain latéral (grain 4) est souple (E_t<125 GPa). On retrouve plus ou moins ce schéma pour les 3 orientations: si le facteur de Schmid effectif est maximal dans le sous-domaine max en P_4, les grains axiaux 3 et 5 sont rigides et le grain latéral 4 est souple. Si le facteur de Schmid effectif est maximal dans le sous-domaine P_1, les grains axiaux 2 et 6 sont rigides et le grain latéral 1 est souple.

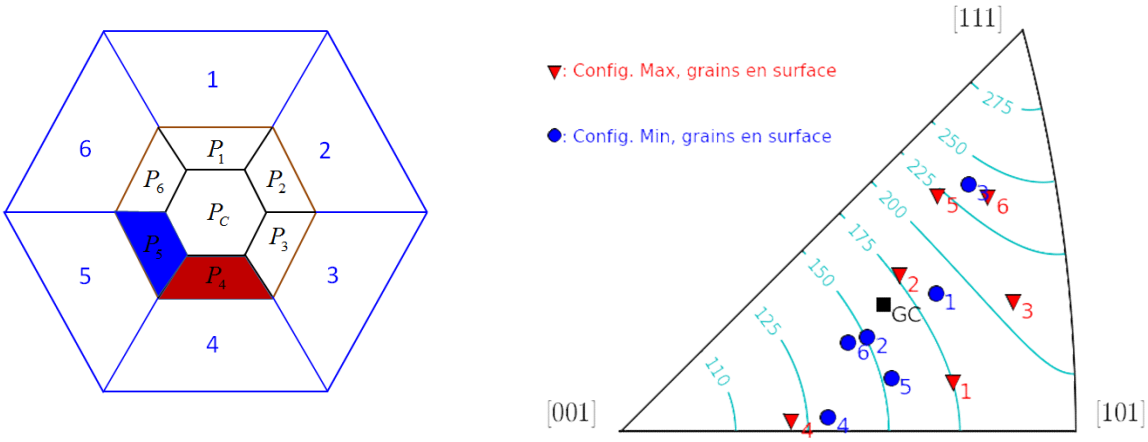


Figure 3-39 : Orientation des voisins pour les 2 configurations extrémales dans un des 6 sous-domaines proches d'un joint de grain (orientation [Q.]).

3.5.5 Analyse de l'indicateur d'amorçage

Le Tableau 3-20 et la Figure 3-40 reportent les données de l'indicateur d'amorçage pour l'orientation [B.O.A.] au sein des différents sous-domaines. On remarque que les sous-domaines proches des joints de grains favorisent le développement des valeurs particulièrement élevées.

	P_C	P_{JG}	$P_i(1)$	$P_i(2)$
I	0.75	0.75	0.75	0.75
I_{eff}	0.621	0.652	0.707	0.779
$SD_{V_P}^{\text{intra}}$	0.061	0.127	0.098	0.110
$SD_{V_P}^{\text{inter}}$	0.081	0.086	0.116	0.111
SD_{V_P}	0.101	0.153	0.152	0.156

Tableau 3-20: Indicateur d'amorçage effectif et écarts-types associés au sein des différents sous-domaines (orientation [B.O.A.]).

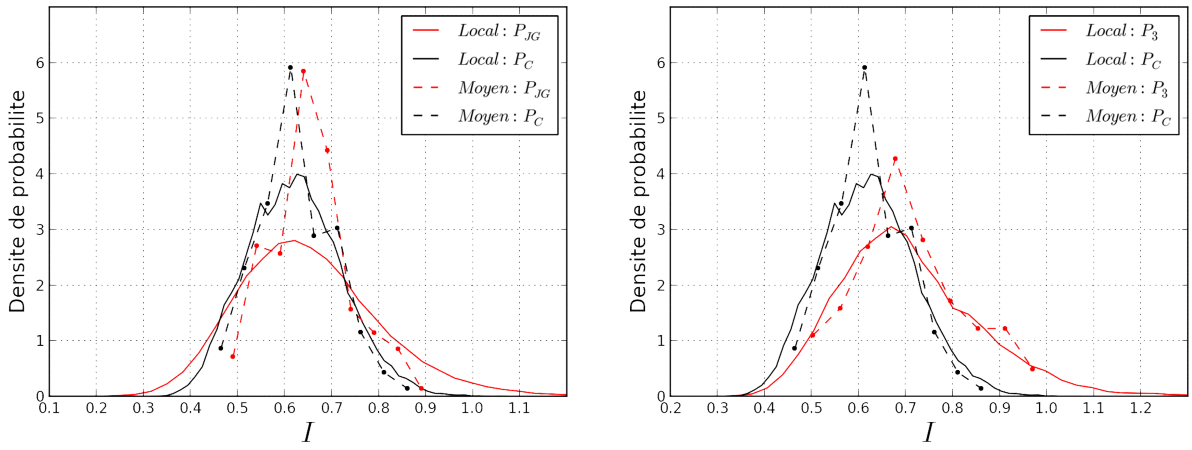


Figure 3-40: Distribution de l'indicateur d'amorçage effectif (orientation [B.O.A.]: a. dans les sous-domaines P_C et P_{JG} ; b. dans les sous-domaines P_C et P_3.

3.5.6 Analyse des fluctuations des champs en un point

Dans cette partie, on analyse les contraintes et le facteur de Schmid effectif pour 4 éléments-finis dans le grain central (Figure 3-41). Les éléments analysés sont situés au centre du grain en surface (*elem-c-s*) ou dans le volume (*elem-c-v*), et à proximité de joints de grains en surface (*elem-j-s*) ou dans le volume (*elem-j-v*).

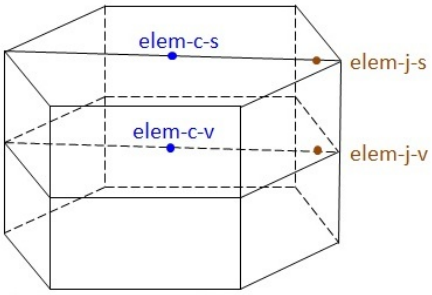


Figure 3-41 : 4 éléments-finis analysés dans le grain central.

Le Tableau 3-21 récapitule les contraintes moyennes et les écart-types sur 140 réalisations pour les 4 éléments-finis étudiés dans le grain central d'orientation [B.O.B.]. Globalement, l'état de contrainte moyen de ces 4 éléments encadre celui obtenu pour le grain entier. On note que, en surface, la composante axiale σ_{11} est plus faible en moyenne et fluctue plus que celle obtenue en volume. En surface, les composantes σ_{13}, σ_{23} et σ_{33} restent toujours très faibles (moyenne et écart-type proches de 0) en raison de la surface libre. On note également que les écart-types des contraintes des éléments proches du joint de grains sont plus élevés que ceux des éléments au centre (sauf pour la composante σ_{12}) et que les contraintes moyennes et les écarts-types obtenus en volume pour les éléments (*elem-c-v*) et (*elem-j-v*) sont proches des moyennes et écarts-types totaux obtenus pour les sous-domaines P_C et P_{JG}.

		σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
elem-c-s	$\langle . \rangle$	162.0	-20.2	-0.9	-26.9	-0.2	0.8
	SD	22.5	22.3	1.7	14.3	1.9	1.9
elem-c-v	$\langle . \rangle$	172.9	-11.6	-0.1	-32.4	-0.3	6.1
	SD	17.9	16.9	5.5	11.2	7.8	4.6
elem-j-s	$\langle . \rangle$	163.1	-14.7	0.6	-19.7	3.4	4.4
	SD	26.8	33.7	2.5	12.3	3.0	3.4
elem-j-v	$\langle . \rangle$	180.9	-9.2	11.0	-31.6	10.4	12.9
	SD	23.9	29.8	13.8	10.5	13.0	9.2

Tableau 3-21 : Moyenne et écart-type des contraintes (MPa) des 4 éléments-finis étudiés (orientation [B.O.B.]).

Ces résultats sont également présentés sous forme d'histogrammes dans la Figure 3-42.

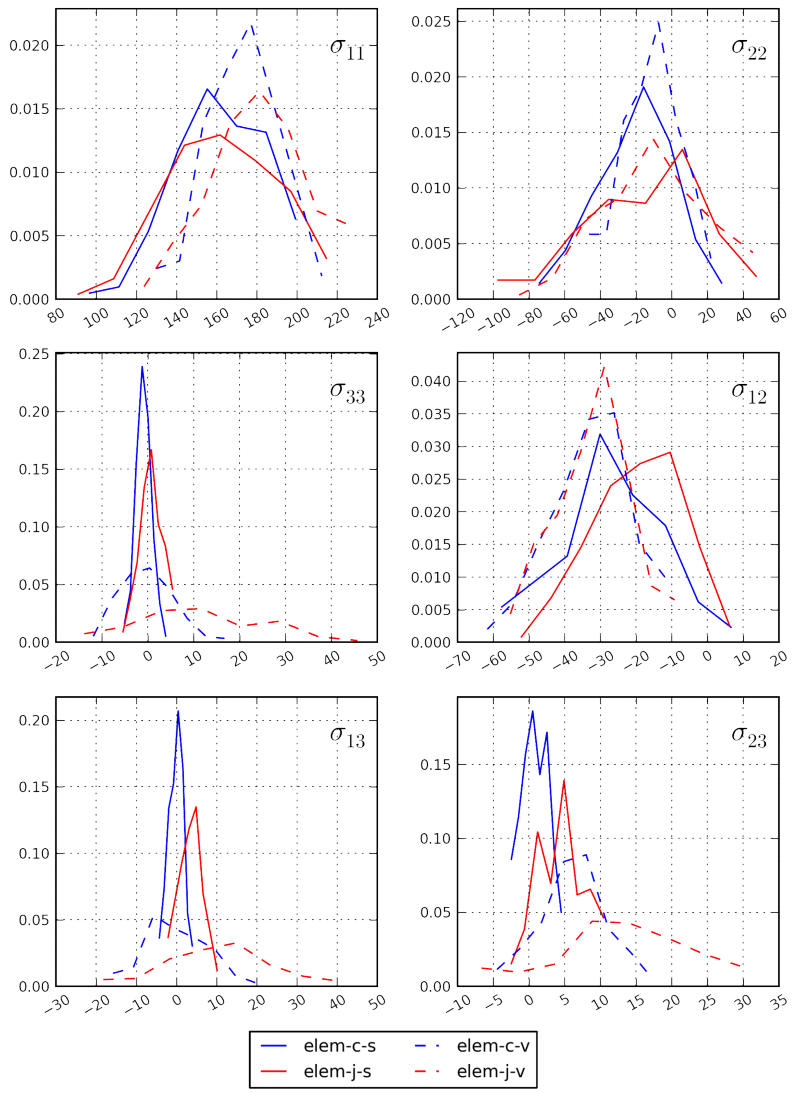


Figure 3-42 : Distribution des contraintes des 4 éléments-finis étudiés (orientation [B.O.B.]).

Le Tableau 3-22 présente les facteurs de Schmid effectifs, définis alors comme la moyenne d'ensemble du facteur de Schmid effectif local sur les 140 réalisations, et leur écart-type pour les 4 éléments-finis étudiés. On retrouve globalement les mêmes tendances sur le facteur de Schmid effectif que celles constatées sur la contrainte axiale. On observe cependant une différence non-négligeable entre les orientations [B.O.A.] et [B.O.B.]. Pour un point donné, l'écart-type de facteur de Schmid effectif est du même ordre que l'écart-type total obtenu dans le grain central entier.

		[100]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[Q.]
	μ	0.408	0.500	0.500	0.487
elem-c-s	μ_{eff}	0.281	0.368	0.419	0.437
	SD	0.052	0.049	0.056	0.055
elem-c-v	μ_{eff}	0.296	0.399	0.445	0.452
	SD	0.043	0.045	0.044	0.044
elem-j-s	μ_{eff}	0.283	0.433	0.418	0.447
	SD	0.053	0.070	0.067	0.072
elem-j-v	μ_{eff}	0.284	0.428	0.437	0.444
	SD	0.045	0.058	0.046	0.041

Tableau 3-22 : Facteur de Schmid effectif et écart-type pour les 4 éléments-finis étudiés.

La Figure 3-43 reporte la distribution du facteur de Schmid effectif pour les 4 éléments-finis étudiés dans le cas d'un grain central d'orientation [B.O.B.].

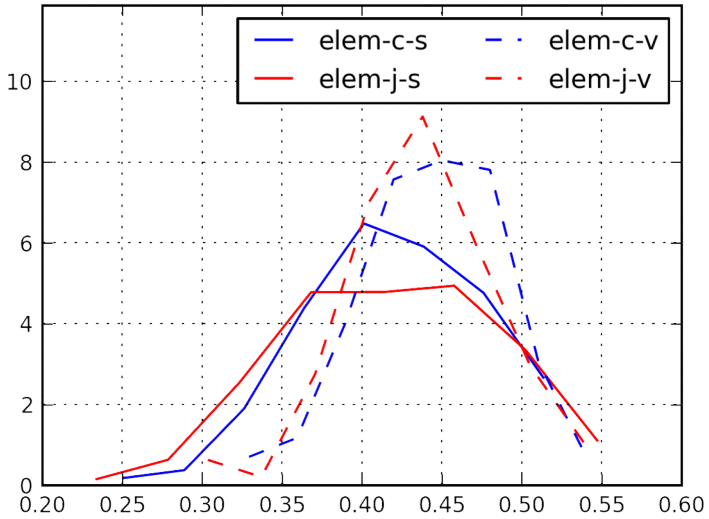


Figure 3-43 : Distribution du facteur de Schmid effectif pour les 4 éléments-finis étudiés (grain central d'orientation [B.O.B.]).

Enfin, la Tableau 3-23 reporte les facteurs de Schmid effectifs obtenus à différentes « échelles »: celle du grain central entier (*GC*), celle des sous-domaines P_C et P_{JG} puis celle des éléments-finis. En dehors des données relatives aux éléments finis, l'écart-type indiqué est l'écart-type inter-réalisation. On trouve que le facteur de Schmid effectif atteint toujours la valeur maximale au sein de l'élément proche du joint de grain. L'orientation [B.O.A.] et [Q.] présentent le même ordre de croissance du facteur de Schmid effectif : point au centre, sous-domaine au centre, sous-domaine aux joints, point au joint. Globalement, la fluctuation du facteur de Schmid effectif augmente avec le « niveau de localité » et la proximité aux joints.

		GC	P_C	P_{JG}	*elem-c-s*	*elem-j-s*
[100]	μ_{eff}	0.274	0.283	0.276	0.281	0.283
	SD_{inter}	0.031	0.038	0.037	0.052	0.053
[B.O.A.]	μ_{eff}	0.399	0.385	0.401	0.368	0.433
	SD_{inter}	0.036	0.039	0.038	0.049	0.070
[Q.]	μ_{eff}	0.440	0.444	0.445	0.437	0.447
	SD_{inter}	0.037	0.044	0.044	0.055	0.072

Tableau 3-23 : La moyenne et écart-type inter-réalisation de μ_{eff}

3.6 Etude de l'influence de la morphologie

Dans cette dernière partie, on présente des résultats obtenus avec des agrégats morphologiquement plus réalistes afin de (i) juger des limites associées aux morphologies idéalisées et de (ii) rendre compte de l'influence de la profondeur d'un grain en maintenant sa forme constante en surface. Pour étudier ce second aspect, les agrégats seront générés en suivant une procédure spécifique décrite au paragraphe 3.6.1. Ensuite l'influence de ce paramètre morphologique sera discutée, notamment en lien avec les différences qui ont été déjà constatées entre un grain décrit par un octaèdre tronqué entier (grain « fermé », G.F.) ou coupé en deux en surface (grain « ouvert », G.O.).

3.6.1 Description de la morphologie des agrégats

Dans cette partie, 3 morphologies d'agrégat ont été générées et utilisées pour de nouvelles séries de simulations. La méthode de génération, décrite par la Figure 3-44 (Gueguen 2011), sera employée de façon particulière afin de construire 3 agrégats morphologiquement identiques à l'exception du grain central, et donc de ses voisins directs, dont la forme et les dimensions sous la surface uniquement varieront d'un agrégat à l'autre. Les 3 agrégats présenteront exactement la même surface.

La génération des agrégats est réalisée en 4 étapes principales. Tout d'abord, on place dans une boîte un ensemble de sphères associées aux futurs grains de l'agrégat

(Figure 3-44.a). Puis, on définit une image 3D étiquetée de la boîte où l'on assigne à chaque voxel le numéro de la sphère la plus proche. Chaque sphère conduit alors à la définition d'un grain comme un ensemble de voxels contigus (Figure 3-44.b). Un maillage en éléments-finis régulier peut alors aisément être construit en définissant par exemple un élément fini hexaédrique pour chaque voxel. Ce type de maillage conduit à une description pauvre des joints de grains et/ou à un nombre d'éléments pouvant devenir prohibitif. Les étapes suivantes consistent à modéliser géométriquement la frontière de chaque grain, alors défini par un ensemble de voxels, par un ensemble de faces, chacune étant décrite par une surface de type NURBS et délimitée par un contour fermé. Celui-ci est défini par un ensemble de courbes décrites par 2 points (segments) ou par 3 points (splines à 3 points de contrôle). La détection et la définition des entités géométriques est réalisée par analyse d'images (Figure 3-44.c) puis celles-ci sont reconstruites et maillées avec le logiciel de conception assistée par ordinateur (C.A.O.) Catia de façon automatisée par un script Python (Figure 3-44.d).

Les 3 agrégats ont été construits à partir d'un placement de sphères de référence dont l'intersection avec la surface libre est représentée sur la Figure 3-45. En effet, les sphères intersectant la surface libre ont été définie de manière à ce que, en surface, on obtienne une morphologie équivalente à un pavage d'hexagones qui aurait été bruité aléatoirement. Dans ce placement de référence, les disques représentés sur la Figure 3-45 correspondent à l'intersection des sphères par la surface libre suivant un plan équatorial (cf. schéma de la Figure 3-46.a). Ainsi le diamètre d'un disque est égal au diamètre de la sphère correspondante. La boîte est ensuite remplie par d'autres sphères (non-représentées) dont la position et le diamètre sont tirés aléatoirement (en respectant la distribution de diamètres des sphères coupées en surface). Ce placement de sphères est utilisé pour décrire l'agrégat 1. Le grain central correspond à la sphère 23 (Figure 3-45). En surface, ce grain aura comme voisins axiaux (suivant la direction x) les grains construits à partir des sphères 22 et 24, tandis que les sphères 16, 17, 29 et 30 conduiront aux grains voisins latéraux.

A l'image du diamètre des sphères de surfaces vues sur la Figure 3-45, la distribution de la taille des sphères, donc des grains, sera relativement peu dispersée. L'effet de la taille des grains sera considéré pour le grain central uniquement via les 2 autres agrégats. Il a été choisi de ne pas introduire une dispersion trop importante de la taille des autres grains pour rester proche des morphologies idéalisées sur cet aspect.

Les agrégats 2 et 3 sont basés sur ce placement de sphères en modifiant uniquement la position et le diamètre de la sphère 23 de sorte que le diamètre du disque d intersecté reste constant, conformément au schéma de la Figure 3-46. Dans le cas de l'agrégat 2, la sphère 23 a subi une augmentation de diamètre et son centre a été décalé perpendiculairement à la surface en dehors de la boîte (Figure 3-46.b). Dans le cas de l'agrégat 3, il a été décalé à l'intérieur de la boîte (Figure 3-46.c). Le diamètre de la sphère 23 dans les cas 2 et 3 a été choisi empiriquement de manière à ce que la profondeur du grain central corresponde très approximativement dans le cas 2 (resp. 3) à la moitié (resp. le double) de la profondeur dans le cas 1.

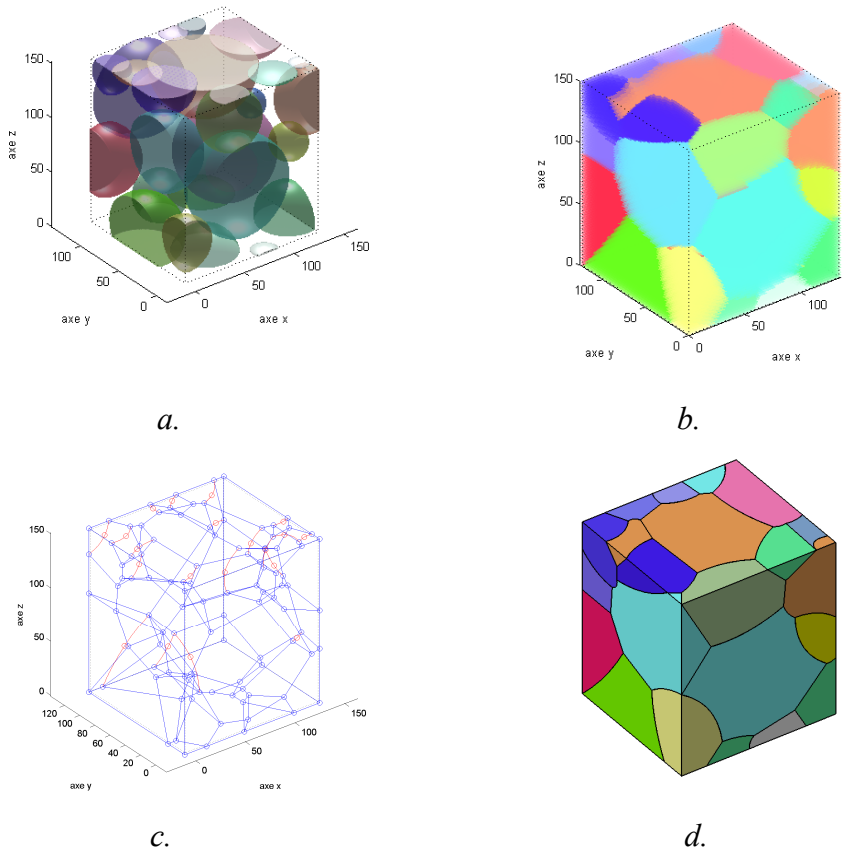


Figure 3-44 : Illustration de la méthode de génération d'agrégats (Gueguen 2011).

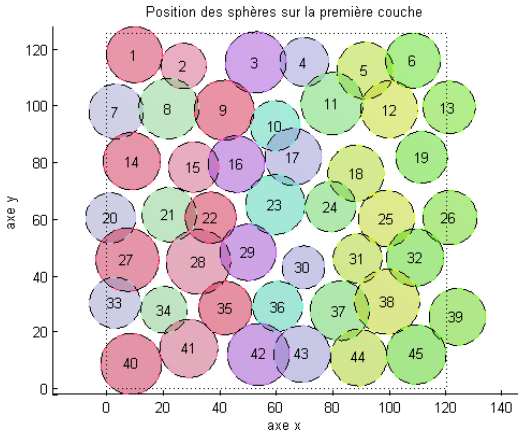


Figure 3-45 : Intersection des sphères avec la surface libre.

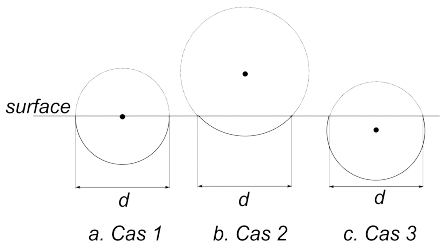


Figure 3-46 : Schéma de la sphère décrivant le grain central pour les agrégats 1, 2 et 3.

Après avoir suivi la procédure de génération décrite sur la Figure 3-44, les 3 agrégats obtenus présentent une surface très proche mais pas exactement identique à proximité du grain central car il est décrit par une sphère différente. Cependant, les modèles C.A.O. ont pu être modifiés de façon semi-automatique pour que les 3 surfaces soient identiques. Cette surface est représentée pour l'agrégat 1 sur la Figure 3-47. Différentes vues du grain central sont reportées sur la Figure 3-48 pour les 3 agrégats afin d'illustrer que sa forme en surface est la même dans les 3 cas, mais que la profondeur du grain central n'est pas constante. Les 3 agrégats, de dimensions 120×125×60µm^3, se composent de 207 grains. Le maillage retenu conduit à environ 240000 éléments finis tétraédriques linéaires.

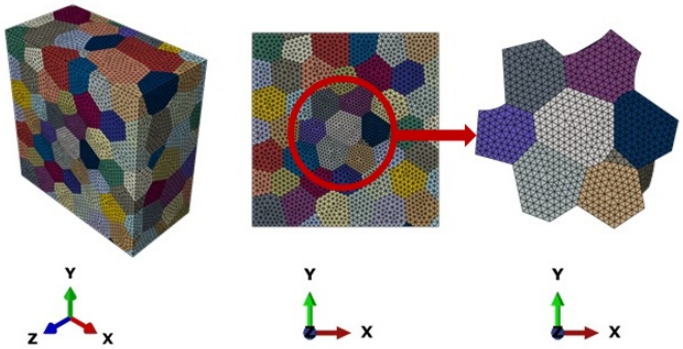


Figure 3-47: Illustration de l'agrégat n°1 (les 2 autres conduisent aux mêmes images).

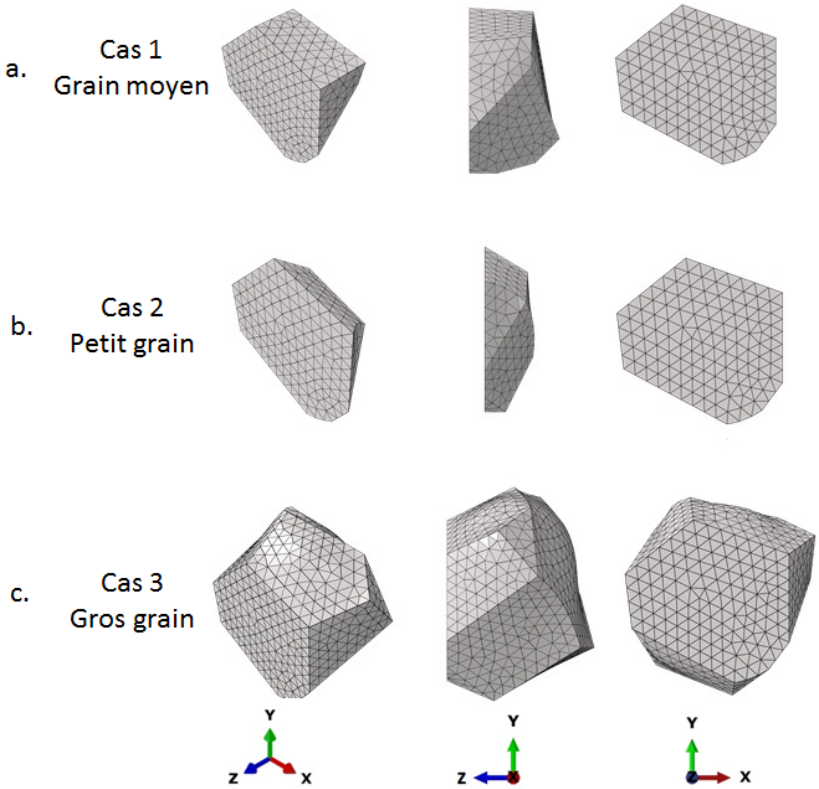


Figure 3-48: Grain central pour l'agrégat 1 (a. grain de profondeur intermédiaire), l'agrégat 2 (b. grain de faible profondeur) et l'agrégat 3 (c. grain de profondeur élevée).

Les caractéristiques de 3 grains centraux sont reportées dans le Tableau 3-24. La profondeur du grain central est égale à 13µm dans le cas 1, à 7µm dans le cas 2 et à 22µm dans le cas 3. On remarque que la profondeur peut affecter le voisinage. Pour le cas 3, le grain central présente un nombre de voisins plus élevé. Le maillage a été défini de manière à obtenir un nombre d'éléments finis dans le grain central du cas 1 (2500) similaire à celui utilisé pour les agrégats de morphologie H.A. (2258).

	L_x (µm)	L_y (µm)	L_z (µm)	V (µm^3)	Nb.V.	Nb.E
Cas 1 : grain moyen	25	24	13	3412	10	2500
Cas 2 : petit grain	25	24	7.2	1559	10	1539
Cas 3 : gros grain	25	24	22	9541	14	4637

Tableau 3-24 : Caractéristiques morphologiques et du maillage du grain central des 3 agrégats étudiés: dimensions suivant les directions x, y et z, volume, nombre de voisins, nombre d'éléments-finis.

3.6.2 Résultats obtenus

3.6.2.1 Analyse de 3 séries de simulations avec tirage aléatoire des orientations

Une série de simulations a été réalisée avec chaque agrégat. Pour les 3 séries, l'orientation cristallographique assignée au grain central est de type [B.O.B.]. Un tirage d'orientation unique est assigné à la réalisation k des 3 séries. Ainsi, 3 réalisations k correspondent à 3 agrégats identiques morphologiquement et cristallographiquement, à l'exception du grain central et de ses voisins dont la morphologie sous la surface est différente d'un agrégat à l'autre.

Le grain central de l'agrégat 1 (ou cas 1) sera appelé également « grain moyen », celui de l'agrégat 2 « petit grain » et celui de l'agrégat 3 « gros grain ». On rappelle que ces qualificatifs ne font référence qu'à la dimension du grain central en profondeur (perpendiculairement à la surface libre) puisqu'en surface les 3 grains sont identiques. La moyenne et les écarts-types de la contrainte axiale σ_{11} sont reportés sur la Figure 3-49, et ceci pour toutes les composantes dans le Tableau 3-25. La contrainte axiale moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ est minimale dans le petit grain et maximale dans le gros grain. L'écart entre ces 2 cas correspond à environ 3% de la contrainte axiale macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$. L'écart-type intra- et inter-granulaire est systématiquement maximal pour le petit grain (cas 2) et minimal pour le gros grain (cas 3). La différence est cependant plus marquée sur l'écart-type inter-granulaire ce qui montre que le petit grain est plus sensible à son voisinage.

Les mêmes tendances avaient déjà été observées entre la morphologie G.F. et G.O. (paragraphe 3.3.1.2), mais elles sont reliées ici plus directement à la profondeur du grain. Notons que la notion de taille/profondeur du grain doit être entendue ici de façon relative à

une valeur caractéristique (par exemple la taille de grain moyenne) puisque aucun effet de taille n'est pris en compte dans les simulations présentées.

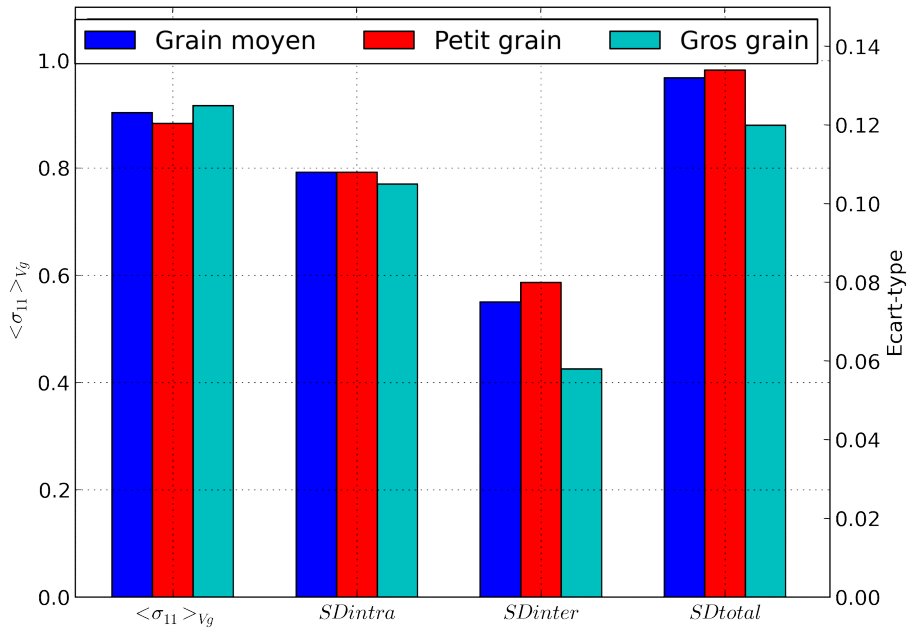


Figure 3-49 : Moyennes et écarts-types de la contrainte axiale σ_{11} au sein des N grains centraux dans les 3 cas étudiés (valeurs normalisées par la contrainte axiale macroscopique $\langle\sigma_{11}\rangle_V$).

	Cas 1 (grain moyen)				Cas 2 (petit grain)				Cas 3 (gros grain)			
	$\langle\cdot\rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	$\langle\cdot\rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	$\langle\cdot\rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
σ_{11}	0.903	0.108	0.075	0.132	0.883	0.108	0.080	0.134	0.916	0.105	0.058	0.120
σ_{22}	-0.06	0.114	0.088	0.144	-0.07	0.128	0.106	0.166	-0.05	0.105	0.064	0.123
σ_{33}	0.045	0.087	0.023	0.090	0.022	0.077	0.014	0.078	0.053	0.083	0.026	0.087
σ_{12}	-0.16	0.064	0.047	0.079	-0.17	0.073	0.056	0.092	-0.15	0.056	0.035	0.066
σ_{13}	0.014	0.066	0.032	0.073	0.011	0.061	0.025	0.066	0.017	0.064	0.032	0.072
σ_{23}	0.037	0.049	0.028	0.056	0.034	0.050	0.024	0.055	0.039	0.047	0.026	0.054

Tableau 3-25: Moyennes et écarts-types normalisés des contraintes au sein des N grains centraux pour les 3 cas étudiés.

En dehors de l'influence de la profondeur que ces 3 séries permet d'étudier, les résultats obtenus avec ces agrégats de morphologie réalistes sont tout à fait similaires à ceux obtenus avec les morphologies idéalisées (paragraphe 3.3.1.2), qu'il s'agisse des moyennes, des écarts-types ou des distributions. La distribution des contraintes est donnée pour le gros grain (cas 3) sur les histogrammes de la Figure 3-50. Même dans le cas du gros grain, des pics proches des valeurs nulles sont observés pour les composantes mises en jeu dans les conditions aux limites (surface libre de charge). Les distributions obtenues dans ce cas sont intermédiaires entre celles des grains hexagonaux et des grains fermés. Pour ce dernier cas,

on rappelle que ces pics disparaissaient presque car le rapport entre l'aire en surface et la profondeur (ou le volume) de ce grain est particulièrement élevé.

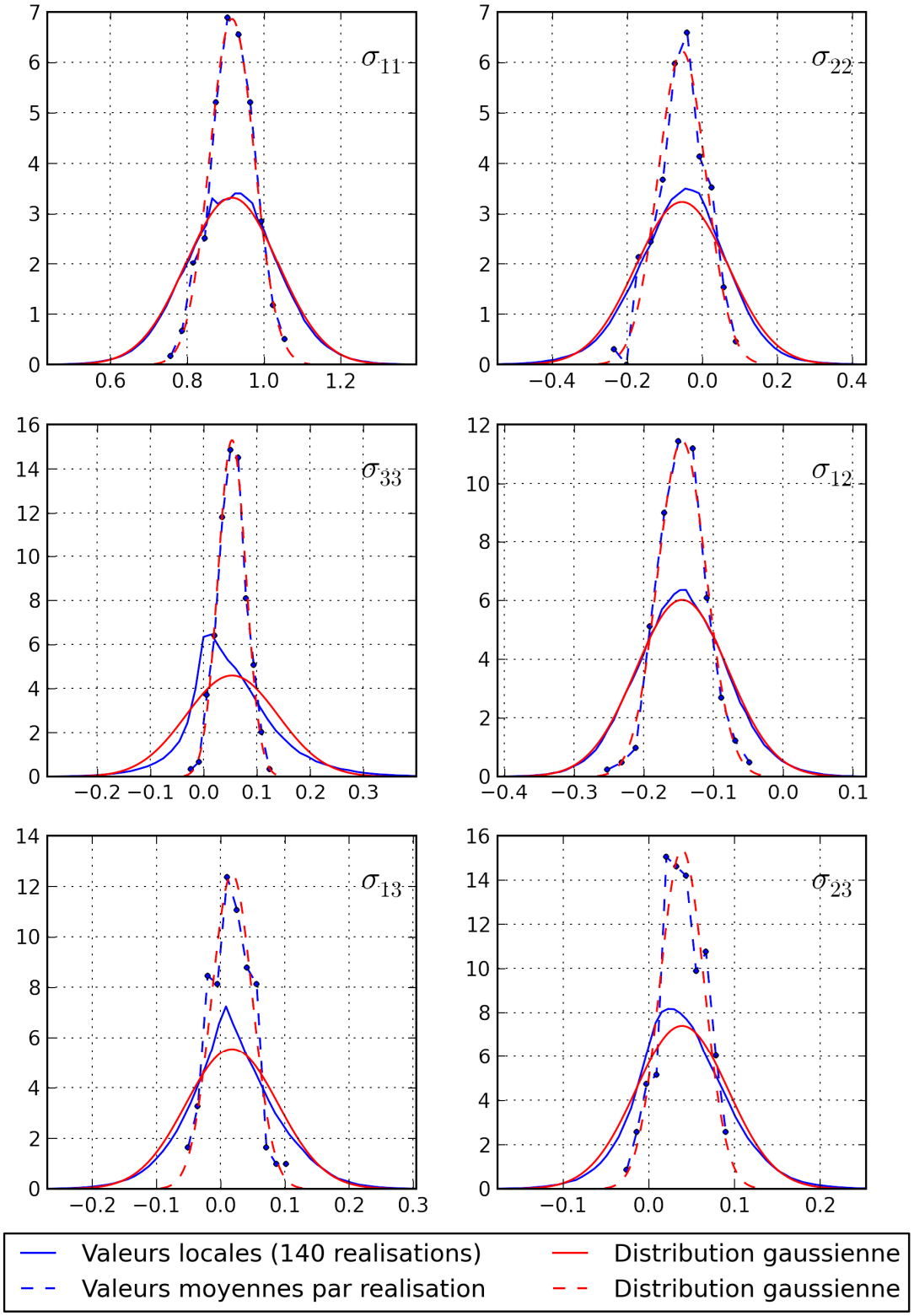


Figure 3-50 : Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$) pour le cas 3 (gros grain).

La Figure 3-51 montre que le facteur de Schmid effectif est proche pour les trois cas. De façon similaire aux contraintes, l'écart-type intra- et inter-granulaire du facteur de Schmid effectif est maximal pour le petit grain (cas 2) et minimal pour le gros grain (cas 3). L'évolution de la dispersion avec la profondeur du grain est visible sur les distributions du facteur de Schmid effectif (Figure 3-52). On notera que les valeurs obtenues pour le facteur de Schmid effectif sont comprises entre celle obtenue par un grain fermé (0.428) et celle obtenue pour un grain ouvert (0.433).

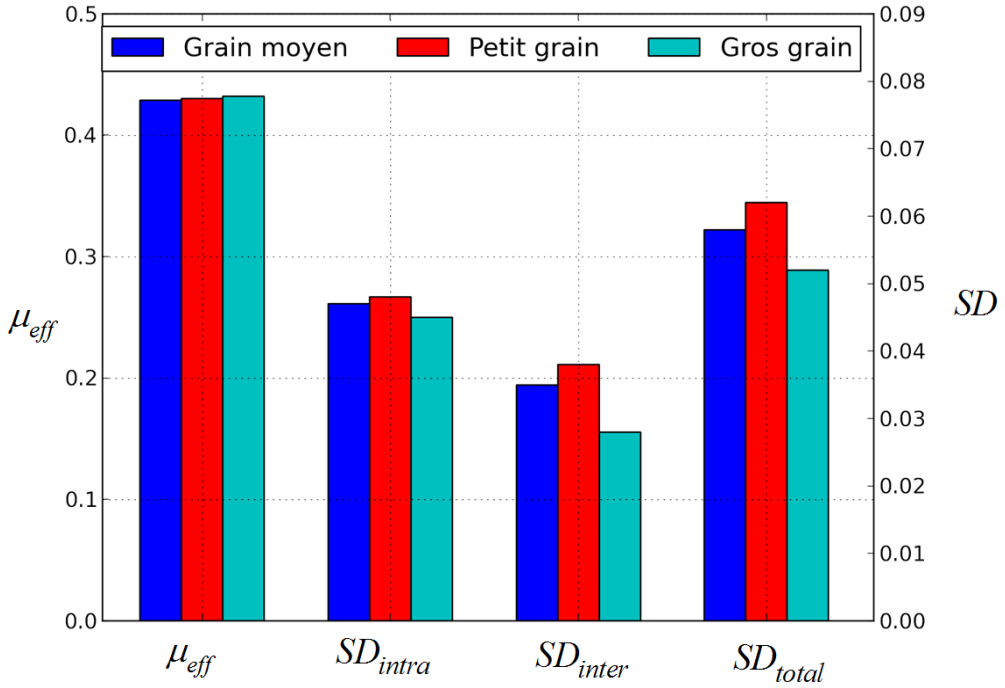
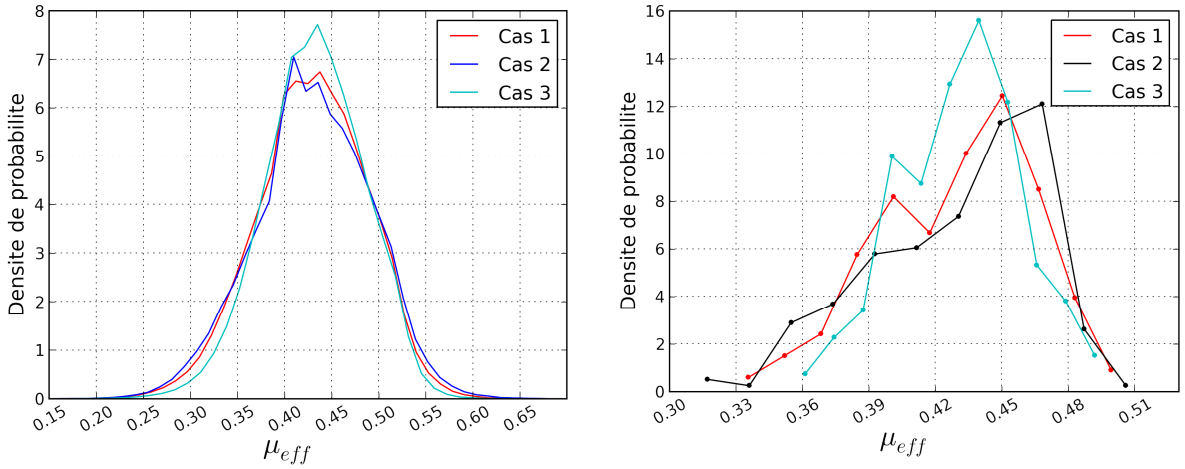


Figure 3-51 : Facteur de Schmid effectif et écarts-types associés au sein des N grains centraux dans les 3 cas étudiés.



a. b.

Figure 3-52: Distribution du facteur de Schmid effectif pour les 3 cas étudiés: a. valeurs locales ; b. valeurs moyennes par grain.

Le Tableau 3-26 récapitule les facteurs de Schmid effectif extrémaux et les contraintes axiales correspondantes parmi 140 réalisations de chaque série. Les mêmes configurations de grains voisins (i.e. mêmes numéros de réalisation) ont conduit aux facteurs de Schmid effectif extrémaux dans les cas 1 (grain moyen) et 2 (petit grain). Les résultats obtenus dans le cas 3 avec ces réalisations correspondent à un facteur de Schmid effectif relativement élevé ou faible bien que les valeurs extrémales aient été observées pour d'autres réalisations.

		Numéro de réalisation	$\langle \mu_{eff} \rangle_{Vgk}$	$SD(\mu_{eff})$	$\langle \sigma_{11} \rangle_{Vgk}$ (MPa)	$SD(\sigma_{11})$(MPa)
Cas 1	max	140	0.508	0.029	191.2	14.5
	min	14	0.339	0.056	134.3	14.9
Cas 2	max	140	0.515	0.037	197.8	16.1
	min	14	0.311	0.051	120.8	11.9
Cas 3	-	140	0.489	0.038	180.9	15.8
	-	14	0.380	0.043	159.3	22.4
Cas 3	max	54	0.498	0.040	200.8	16.0
	min	70	0.355	0.036	149.3	18.8

Tableau 3-26: Facteurs de Schmid effectifs extrémaux et contraintes axiales correspondantes.

De façon cohérente avec l'effet de la profondeur sur la dispersion, le facteur de Schmid effectif maximal du petit grain est supérieur à celui du grain moyen, lui-même supérieur à celui du gros grain. Le classement inverse est observé pour les valeurs minimales.

Les arrangements de voisins (et leur orientation cristallographique) ayant conduit aux facteurs de Schmid effectifs extrémaux sont décrits par la Figure 3-53. Aucun arrangement remarquable n'est observé pour les grains de surface (grains 1 à 7). En revanche, pour les cas 1 et 2 (Figure 3-53.a), la « configuration maximale » présente 2 voisins en profondeur (grains 8 et 10) de module d'Young E_t faible (>120GPa) tandis que la « configuration minimale » présente 2 voisins en profondeur (grains 9 et 10) de module d'Young E_t élevé (>230GPa). De même, pour la « configuration minimale » du cas 3 (Figure 3-53.b), le voisin en profondeur 9 possède un module d'Young proche de la valeur maximale (i.e. orientation proche [111]) tandis que celui des 2 autres voisins 8 et 10 est proche de la valeur macroscopique.

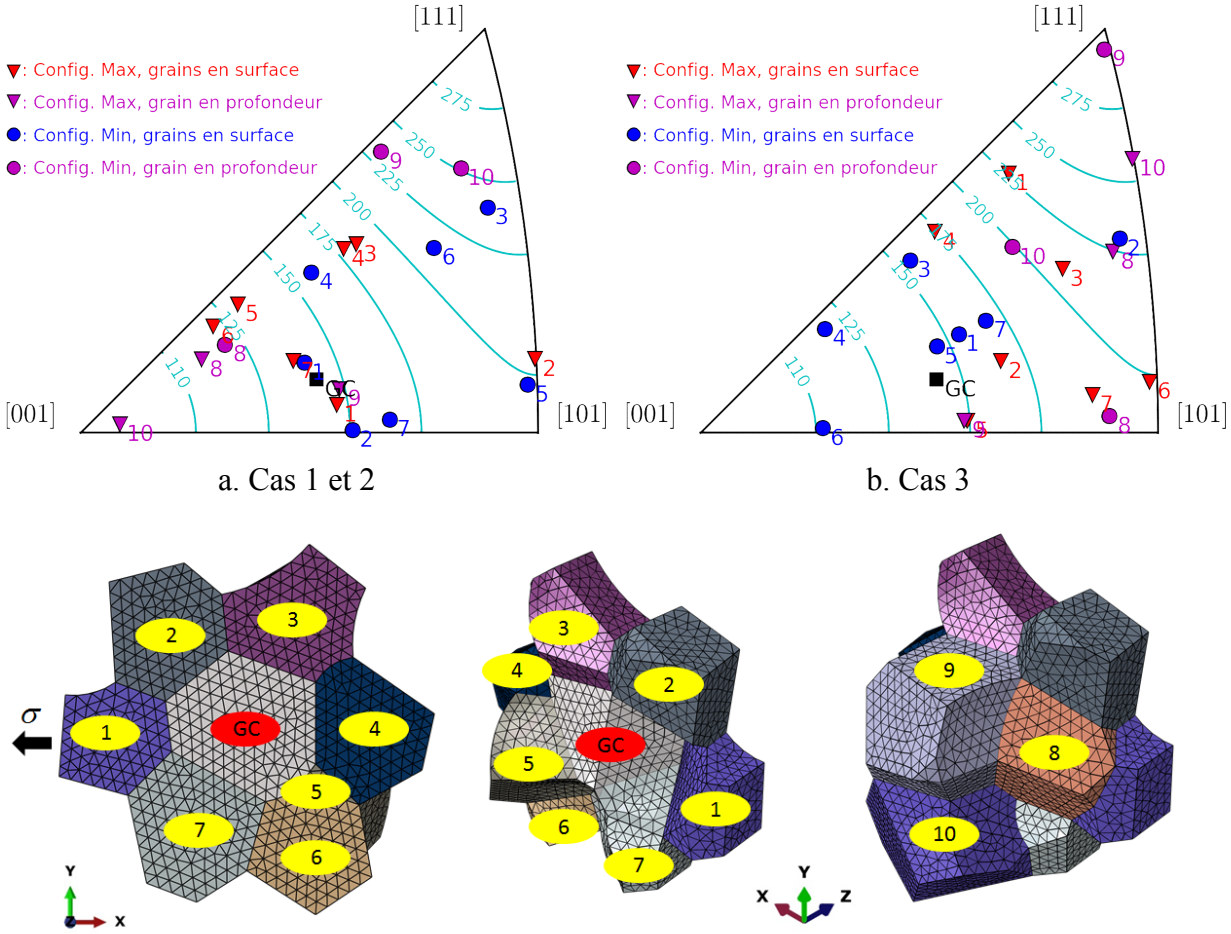


Figure 3-53: Orientation des différents voisins du grain centrale pour les 2 réalisations ayant conduit au facteur de Schmid maximal (« Config. Max. ») et minimal (« Config. Min. »): a. cas 1 et 2 (grain moyen et petit grain); b. cas 3 (gros grain); c. arrangement et numérotation des voisins du grain central (les grains 1 à 7 sont des voisins en surface, tandis que les grains 8 à 10 sont voisins en profondeur).

3.7 Bilan

Ce chapitre a été consacré à l'application de la démarche de simulation présentée au chapitre 2 aux matériaux CFC (acier austénitique). Plusieurs séries de simulations ont été réalisées avec 8 orientations différentes pour le grain central, ainsi que 4 morphologies de grains idéalisées. Les post-traitements ont permis de caractériser la distribution des contraintes au sein des agrégats et au sein des grains centraux, puis celle de la cission résolue et de la contrainte normale sur les systèmes de glissement dans les grains centraux uniquement.

Les principales conclusions relatives à la distribution de champs sont les suivantes (§3.3) :

- De façon générale, la distribution de la cission est apparue très peu sensible à la morphologie. Des dispersions très légèrement supérieures ont été observées pour un grain central correspondant à un demi octaèdre tronqué (i.e. un grain « ouvert ») ce qui peut potentiellement avoir des conséquences importantes lorsque les valeurs extrêmes sont considérées. Cependant, lors de l'étude numérique du chapitre 4 consacrée à un matériau hexagonal (TA6V), les 4 types de morphologie ne seront pas systématiquement utilisées.
- La distribution des contraintes et des cissions résolues dans les N grains centraux de même orientation dépend principalement de l'orientation considérée. En moyenne, l'état de contrainte n'est plus strictement uniaxial, mais la contrainte axiale moyenne, qui est différente de la contrainte axiale macroscopique, reste prépondérante. Les autres composantes sont, en moyenne, inférieures à ~10% de la contrainte macroscopique, dans la majorité des cas. La contrainte axiale moyenne au sein des N grains centraux varie entre ~70% et ~120% de la contrainte macroscopique en fonction de l'orientation considérée. Elle augmente avec la valeur du module d'Young E_t du monocristal de même orientation. La cission résolue moyenne, décrite par le facteur de Schmid effectif, dépend de la contrainte axiale moyenne. Par exemple, si celle -ci est inférieure à la contrainte macroscopique, le facteur de Schmid effectif sera plus faible que le facteur de Schmid « conventionnel ». Dit autrement, dans ce cas, la cission dans un grain d'un polycristal, en moyenne (car elle varie dans le grain et d'un grain à un autre en fonction de son voisinage), est plus faible que celle d'un monocristal de même orientation soumis à la même contrainte macroscopique. Cependant, les autres composantes des contraintes ont également une influence non-négligeable. Elles semblent être à la source d'une différence entre facteur de Schmid effectif de l'orientation [B.O.A.] et celui de l'orientation [B.O.B.]. Elle est cependant plus délicate à analyser car elle dépend de l'orientation cristallographique exacte (et pas seulement de l'orientation de la direction de traction par rapport à la maille cristalline). Cet aspect n'est pas du premier ordre mais nécessiterait des investigations supplémentaires via des simulations réalisées sur d'autres orientations.

- Pour les orientations étudiées présentant un facteur de Schmid « conventionnel » supérieur à 0.45 (orientations de type [B.O.], [R.] et [Q.]), le facteur de Schmid effectif est plus faible que la valeur « conventionnelle » et il tend à s'homogénéiser entre les différentes orientations. Le facteur de Schmid effectif maximal, égal à 0.44, est obtenu pour l'orientation [Q.] suivi de près par ceux obtenus avec les autres orientations précitées. Associé à une dispersion relativement élevée, ce résultat explique une activation du glissement plutôt uniforme, i.e. sans domaine d'orientation privilégié où l'activation serait plus précoce, au centre du triangle standard. La dispersion des cissions résolues peut être décrite de façon acceptable par une loi normale. Globalement, l'écart-type intra-granulaire sur la cission résolue correspond à ~5-6% de la contrainte macroscopique. Il est légèrement supérieur à l'écart-type inter-granulaire qui est de l'ordre de ~3-4%.

Les principales conclusions relatives aux valeurs extrémales de la cission résolue sont les suivantes (§3.4) :

- Les valeurs extrémales du facteur de Schmid effectif dans un grain ont été atteintes sur les orientations [R.] ou [Q.] avec une valeur maximale de 0.575. Une valeur maximale de 0.71 est reportée par (Robert 2012) dans le cas du cuivre pur, pour une orientation non-indiquée parmi 900 grains d'orientation aléatoire dans des agrégats 2D. Une des perspectives est de poursuivre l'étude des configurations extrémales en termes d'indicateur d'amorçage qui n'a pas été développée dans le cadre de cette thèse par manque de temps mais aussi d'informations sur la pertinence d'une grandeur pour le 316L sensible par exemple à la contrainte normale.
- Pour chaque orientation étudiée, les voisins du grain central ont été analysés dans les 2 réalisations ayant conduit à un facteur de Schmid effectif extrémal. L'analyse, conduite d'abord sur les morphologies hexagonales, a permis de confirmer les clusters spécifiques de voisins en surface proposés par (Sauzay 2006) pour ce type de morphologie. La configuration de voisins de surface conduisant à la cission maximale correspond à la présence des grains rigides alignés avec le grain central dans l'axe de traction et de voisins latéraux souples permettant de concentrer la charge dans le grain central. Un nouvel élément qui se dégage de notre étude concerne l'influence de l'orientation du voisin du grain central sous la surface qui peut être considéré comme un voisin latéral particulier. Dans la majorité des cas étudiés, la cission maximale est atteinte lorsque le module d'Young de ce voisin est faible.
- Les configurations de voisinage pour des morphologies légèrement plus complexes (souvent plus réalistes) deviennent rapidement plus difficiles à analyser en raison de la diversité des configurations possibles. L'utilisation d'agrégats de morphologie plus réaliste à la fin de ce chapitre illustre bien cette situation. Certaines tendances similaires semblent toutefois ressortir mais il faudrait certainement considérer un

nombre de configurations bien plus important et les analyser de façon différente pour faire ressortir des tendances statistiquement quantifiées.

Deux études, de moindre importance et moins abouties, ont conclu ce chapitre (§3.5 et 3.6).

- La première correspond à l'analyse des champs, non plus dans l'ensemble du grain, mais par sous-domaines. Il s'agit d'une première tentative qui visait à dégager certains ordres de grandeur capables de décrire la distribution des champs mécaniques en tenant compte simplement de leur répartition spatiale dans le grain. Les sous-régions définies à proximité d'un joint de grains donné conduisent à un facteur de Schmid effectif légèrement plus important qu'au centre du grain. L'écart-type inter-réalisation est très important dans ces sous-régions. Des fluctuations importantes sont donc possibles à proximité des joints, tel que cela avait été quantifié par (Zeghadi 2007a) de façon locale uniquement. Il conviendrait de compléter cette première étude par une analyse de sensibilité à la configuration géométrique des sous-domaines granulaires (taille relative / taille de grain) pour mieux évaluer les variations de champs mécaniques possibles au voisinage des joints de grains.
- La seconde étude portait sur l'influence de la profondeur du grain. Les 3 agrégats différents utilisés pour cela ont été définis de manière à partager la même surface libre. La seule différence entre ces agrégats est la profondeur du grain central, et de façon plus générale sa forme sous la surface impactant celle de ces voisins directs. Aucune influence significative n'a été observée sur la cission moyenne. Cependant une dispersion légèrement plus élevée a été constatée pour les petits grains conduisant à obtenir des cissions extrémales sur ce type de grain. A taille équivalente en surface, les champs au sein de grains peu profonds seraient alors plus sensibles à leur voisinage. Cela conforte les quelques tendances associées à la morphologie vues en début de chapitre par la comparaison des grains « ouverts » et grains « fermés ».

Enfin, en vue d'une application plus directe de ce travail à l'acier 316L, les deux principales perspectives seraient: (i) l'application de la démarche de simulations à la réponse élasto-plastique cristalline du matériau, suivie à termes par les aspects cycliques ; (ii) la prise en compte de joints de macles d'une façon réaliste morphologiquement et cristallographiquement.

Chapitre 4
Simulations appliquées au cas des alliages de titane TA6V

Sommaire

4.1 Introduction 158

4.2 Simulations sur agrégats non-texturés 160
4.2.1 Présentation des simulations réalisées 160
4.2.2 Analyse des contraintes 162
4.2.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 175
4.2.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage 180
4.2.5 Etude des réalisations extrémales et configurations cristallographiques locales associées 185

4.3 Simulations sur agrégats texturés 192
4.3.1 Présentation des simulations réalisées et définition des textures 192
4.3.2 Analyse des contraintes 194
4.3.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 202
4.3.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage 204

4.4 Influence des textures sous forme de macrozones 206
4.4.1 Prise en compte simplifiée des macrozones 206
4.4.2 Analyse des contraintes au sein des grains centraux 208
4.4.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif 210
4.4.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage 212

4.5 Bilan 214

4.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'application au cas de l'alliage TA6V de la démarche de simulation décrite au chapitre 2 et déjà mise en œuvre au chapitre 3 dans le cas de l'acier inoxydable 316L. L'objectif est de fournir des éléments de compréhension de certains constats expérimentaux, présentés au chapitre 1 (voir paragraphe 1.2.2.2), relatifs à l'activation du glissement plastique et, dans une moindre mesure, à ses conséquences sur l'amorçage des fissures de fatigue.

Pour rappel, l'alliage TA6V étudié est composé principalement (95% en volume environ) de la phase α qui présente une structure cristalline hexagonale compacte. La fraction volumique de la phase β, de structure cubique centrée, est d'environ 5%. La microstructure étudiée est de type bimodale (ou duplex) constituée de nodules de phase α primaire (~40% en volume) et de lamelles de phase α secondaire noyées dans une matrice β. Lorsque l'on considère les premiers stades de plasticité, l'activation du glissement est observée au sein des nodules principalement suivant les plans prismatiques et le plan de base bien que du glissement pyramidal soit également parfois observé. Les différentes études d'identification des systèmes de glissement n'ont pas permis de statuer clairement sur l'importance relative du glissement prismatique et basal. En effet, celle-ci est liée à la différence des cissions résolues critiques sur ces 2 types de systèmes mais également à la différence de l'état de contrainte subi, en moyenne, par les grains favorablement orientés pour ces 2 systèmes. Le présent chapitre vise en particulier à quantifier les aspects relatifs à ce dernier point. De plus, la présence des macrozones, régions localement fortement texturées, a certainement une influence non-négligeable sur les champs mécaniques locaux. L'activation du glissement basal a été observée dans un domaine d'orientation cristallographique spécifique qui semble indiquer un rôle des contraintes locales, donc de l'élasticité locale. En fatigue, l'amorçage des fissures est observé au sein des nodules suivant un plan basal ou prismatique. Les fissures associées à du glissement basal sont systématiquement plus longues que les fissures prismatiques et s'amorcent suivant un mécanisme de pseudo-clivage. Les fissures fatales sont formées au sein des macrozones « rouges » suivant un plan de base. L'ensemble de ces observations suggèrent donc également un rôle des contraintes locales.

Dans ce chapitre, on analysera les champs de contraintes pour la phase hexagonale de l'alliage étudié. Plus précisément, et de façon identique au 316L, les cissions résolues sur les systèmes de glissement basal et prismatique seront étudiées pour différentes orientations de référence sélectionnées en lien avec l'activation du glissement plastique dans ce matériau. La démarche de simulation sera en particulier appliquée en présence d'une texture cristallographique afin de mieux comprendre le rôle des macrozones. En revanche, la nature bimodale de la microstructure ne sera pas prise en compte. On supposera que l'alliage n'est constitué que de nodules de phase α primaire. La présence des colonies de lamelles α secondaire au sein de la phase β sera donc négligée. Ce choix, motivé par l'activation du glissement et l'amorçage de fissures essentiellement au sein des nodules, semble raisonnable dans la mesure où l'étude se limite à la réponse élastique du matériau.

La première partie de cette étude (paragraphe 4.2) sera consacrée au cas d'un alliage sans texture cristallographique afin d'obtenir un jeu de résultats de référence. Les spécificités de ce matériau hexagonal seront discutées en relation avec les résultats du chapitre précédent. Elles portent sur le type et, surtout, sur le niveau d'anisotropie élastique (coefficient d'anisotropie de 1.5 environ contre 3 pour le 316L). Elles concernent aussi les différents systèmes de glissement, donc d'une certaine manière l'anisotropie plastique, bien que les déformations plastiques ne soient pas simulées. Ensuite (paragraphe 4.3), la même analyse sera réalisée en introduisant dans les agrégats simulés 2 textures cristallographiques différentes, observées au sein de ce matériau dans les macrozones. Avec la stratégie de simulation utilisée, les résultats rendent compte d'une texture répartie spatialement uniformément qui n'existe pas dans le matériau étudié. Cette approche permet cependant d'analyser le rôle des textures indépendamment de leur répartition spatiale. Enfin, afin de rendre compte de la présence des macrozones, i.e. de fines bandes texturées, une échelle intermédiaire est introduite, d'une façon simple et pragmatique, dans la démarche de simulation (paragraphe 4.4).

Remarques : *Une partie importante des résultats proposés dans ce chapitre correspond à des types de données, et des modes de représentation sous la forme de tableaux et de graphes, ayant déjà été utilisés au cours des chapitres 2 et 3. Ainsi, certains résultats pourront être décrits plus brièvement, le lecteur étant habitué à la logique d'analyse proposée.*

4.2 Simulations sur agrégats non-texturés

4.2.1 Présentation des simulations réalisées

Au chapitre 3, il a été vu que peu de différences avaient été observées entre les résultats obtenus pour les grains de morphologie hexagonale (H.A. ou H.D.) et ceux obtenus pour les octaèdres tronqués ouverts (G.O.). La quasi-totalité des résultats présentés dans ce chapitre a été obtenue avec les morphologies G.O. et G.F. uniquement. Les onze orientations cristallographiques particulières assignées au grain central sont représentées en figure de pôles inverse suivant l'axe de traction dans le triangle standard (Figure 4-1).

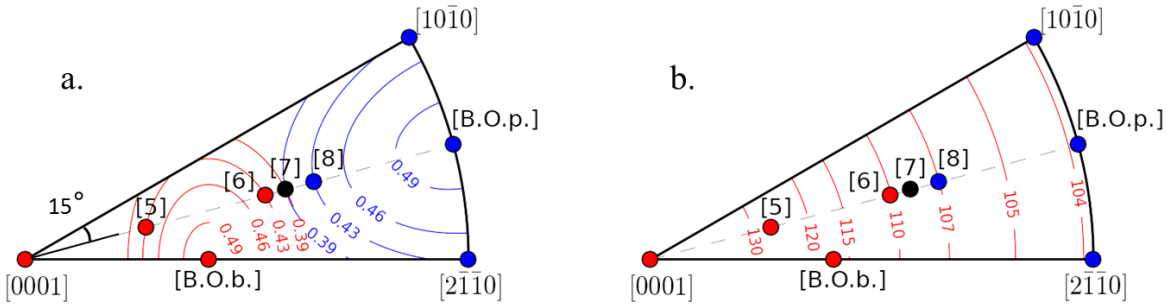


Figure 4-1 : Représentation des orientations cristallographiques étudiées en figure de pôles inverse suivant l'axe de traction dans le triangle standard cartographié avec : a. les iso-valeurs de facteur de Schmid μ (système de glissement basal en rouge et prismatique en bleu) ; b. les iso-valeurs de module d'Young E_t (GPa).

Les principales informations relatives à ces 11 orientations sont indiquées dans le Tableau 4-1 et commentées ci-dessous (les informations détaillées sont données en annexe A.5.2). Les 3 premières orientations correspondent aux « sommets » du triangle standard: l'axe de traction est alors une direction cristallographique [0001], $[1\,0\,\bar{1}\,0]$ ou $[2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0]$. La première, correspondant à l'axe c de cristal, est une orientation « dure » et « rigide » car le facteur de Schmid est nul (pour le glissement basal et prismatique) et le module d'Young prend la valeur maximale de 143GPa. Les 2 autres orientations présentent au contraire le plus faible module d'Young (104GPa) et un facteur de Schmid plutôt élevé (0.43).

4 orientations « bien orientées » ont été définies. Les orientations [B.O.b.A] et [B.O.b.B] présentent un système de glissement basal dont le facteur de Schmid est maximal (0.5) et dont l'orientation par rapport à la surface est de type A et B, respectivement (cf. paragraphe 1.1.2). Le module d'Young est alors égal à 117GPa, ce qui est très légèrement supérieur au module d'Young macroscopique simulé dans le cas d'une texture isotrope (E=115 GPa). Les orientations [B.O.p.A] et [B.O.p.B] sont définies de façon similaire pour un système de glissement prismatique. Le module d'Young est celui dans le plan d'isotropie transverse (perpendiculaire à l'axe c du cristal) qui correspond à la valeur la plus faible (104GPa). Les 4 dernières orientations ont été choisies sur le segment du triangle incliné à 15° par rapport à l'arête horizontale afin d'étudier plus spécifiquement la compétition entre le glissement basal et le glissement prismatique ainsi que les limites du domaine d'orientation favorisant le glissement basal. Ainsi les orientations [5] et [6] présentent le même facteur de Schmid

maximal sur le système de glissement basal ($\mu = 0.430$), mais « à gauche » et « à droite » respectivement du pole [B.O.b]. L'orientation [5] est donc plus rigide que l'orientation [6]. L'orientation [7] présente le même facteur de Schmid maximal sur un système de glissement basal et un système prismatique ($\mu = 0.394$). Enfin, l'orientation [8] possède un facteur de Schmid maximal sur un système de glissement prismatique ($\mu = 0.430$) égal à celui des orientations [5] et [6] pour un système basal.

	SG	μ	E_t (GPa)	π (°)	β (°)	α (°)	θ (°)
[0001]	basal	0.000	143	90	60	90	0
$[2\bar{1}\bar{1}0]$	prism.	0.433	104	60	90	90	90
$[10\bar{1}0]$	prism.	0.433	104	30	90	90	90
[5]	prism.	0.430	127	69	75	90	31
[6]	basal	0.430	110	31	75	90	59
[7]	basal	0.394	109	27	75	90	63
	prism.	0.394	109	63	45	45	
[8]	prism.	0.430	107	68	45	45	68
[BObA]	basal	0.500	117	45	90	90	45
[BObB]	basal	0.500	117	90	45	45	45
[BOpA]	prism.	0.500	104	45	90	90	90
[BOpB]	prism.	0.500	104	90	45	45	90

Tableau 4-1: Orientations étudiées et informations associées.

Les paramètres de simulations sont identiques à ceux utilisés au chapitre 3 pour le 316L en termes de maillage et de conditions aux limites. La valeur de la déformation macroscopique totale imposée (0.1%) est la même que celle utilisée dans le chapitre précédent. Cette valeur est très faible par rapport aux chargements réellement appliqués à ce type d'alliage. Ce point n'a cependant pas grande importance pour cette étude qui se concentre uniquement sur le domaine élastique du comportement. Les simulations étant développées en élasticité linéaire, les résultats seront normalisés. Les constantes élastiques suivantes de la phase α du titane (HCP) ont été utilisées : C_{11}=162.4 GPa, C_{12}=92 GPa, C_{13}=69 GPa, C_{33}=180.7 GPa et C_{44}=46.7 GPa (cf. paragraphe 1.2.2.1). Pour chaque réalisation, l'orientation cristallographique des grains (hormis le grain central) est tirée aléatoirement de façon à restituer une texture isotrope. Pour chaque série de simulations (au total, 22 ont été effectuées pour 11 orientations et 2 morphologies), 140 réalisations sont définies. Le même nombre de réalisations que celui utilisé pour le 316L a été retenu malgré le type et le niveau d'anisotropie différents. Une étude de l'influence du nombre de réalisations aurait été utile. Cependant, compte-tenu de la plus faible anisotropie élastique du titane et des résultats établis pour le 316L, 140 réalisations doivent correspondre ici à une erreur d'échantillonnage plus faible que celle évaluée pour le 316L.

Remarque : *L'aide-mémoire, donné en annexe E, rappelle les principales notations et définitions relatives aux résultats post-traités, ainsi que les principales caractéristiques des orientations cristallographiques étudiées.*

4.2.2 Analyse des contraintes

4.2.2.1 Analyse des contraintes au sein des agrégats

Les contraintes moyennes au sein de N agrégats d'une série (indiquées à titre d'exemple pour 2 composantes seulement, 3 orientations et 2 morphologies dans le Tableau 4-2) décrivent un état de contrainte macroscopique uniaxial qui ne dépend ni de l'orientation du grain central, ni de la morphologie des grains. L'écart-type inter-réalisation est négligeable (< 1%). Cela signifie que la contrainte moyenne dans l'agrégat est quasiment constante d'une réalisation à une autre.

		GF				GO			
		$\langle . \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V	$\langle . \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
[0001]	σ_{11}	115.1	6.5	1.0	6.6	114.9	6.4	0.9	6.5
	σ_{22}	0.0	7.1	0.0	7.1	0.0	7.1	0.0	7.1
$[2\bar{1}\bar{1}0]$	σ_{11}	114.7	6.4	1.0	6.4	114.7	6.4	1.0	6.4
	σ_{22}	0.0	7.1	0.0	7.1	0.0	7.1	0.0	7.1
[B.O.b.A.]	σ_{11}	115.0	6.4	1.0	6.5	114.9	6.4	1.0	6.4
	σ_{22}	0.0	7.1	0.0	7.1	0.0	7.1	0.0	7.1

Tableau 4-2 : Moyennes et écarts-types des contraintes (MPa) au sein des 140 agrégats.

Les moyennes et les écarts-types des contraintes au sein des 140 agrégats avec un grain central d'orientation [B.O.b.A] sont donnés pour toutes les composantes dans le Tableau 4-3. Les valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ sont présentées dans le Tableau 4-4.

	GF				GO			
	$\langle . \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V	$\langle . \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
σ_{11}	115.0	6.4	1.0	6.5	114.9	6.4	1.0	6.4
σ_{22}	0.0	7.1	0.0	7.1	0.0	7.1	0.0	7.1
σ_{33}	0.0	6.3	0.0	6.3	0.0	6.2	0.0	6.2
σ_{12}	0.0	2.8	0.3	2.9	0.0	2.8	0.2	2.8
σ_{13}	0.0	2.6	0.2	2.6	0.0	2.6	0.2	2.6
σ_{23}	0.0	3.9	0.3	3.9	0.0	3.9	0.3	3.9

Tableau 4-3 : Moyennes et écarts-types des contraintes (MPa) au sein des 140 agrégats (grain central d'orientation [B.O.b.A.]).

	GF				GO			
	$\langle \cdot \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V	$\langle \cdot \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
σ_{11}	1.00	0.06	0.01	0.06	1.00	0.06	0.01	0.06
σ_{22}	0.00	0.06	0.00	0.06	0.00	0.06	0.00	0.06
σ_{33}	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00	0.05
σ_{12}	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.02
σ_{13}	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.02
σ_{23}	0.00	0.03	0.00	0.03	0.00	0.03	0.00	0.03

Tableau 4-4 : Moyennes et écarts-types des contraintes (normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$) au sein des 140 agrégats (grain central d'orientation [B.O.b.A.]).

L'écart-type total représente 5-6% de la contrainte macroscopique pour les composantes σ_{11}, σ_{22}, σ_{33} et 2-3% pour les composantes de cisaillement σ_{12}, σ_{13}, σ_{23}. Comparativement, on obtenait dans le cas du 316L 15 à 20% pour les composantes axiales et 10% pour les cisaillements, ce qui reflète l'influence de l'anisotropie sur l'hétérogénéité des contraintes.

En termes de distributions, les mêmes résultats sont obtenus quelles que soient la morphologie de l'agrégat et l'orientation du grain central. Les histogrammes des contraintes locales sont donnés en Figure 4-2 et Figure 4-3 dans le cas d'un grain central d'orientation [B.O.b.A]. La distribution de σ_{11} est assez proche d'une gaussienne, mais elle présente une petite dissymétrie (pic aux valeurs inférieures à 1) ce qui n'avait pas été noté dans le cas des CFC. Pour les autres composantes, on retrouve les mêmes conclusions que celles obtenues dans le cas des CFC. Deux autres dimensions d'agrégats ont été testées pour étudier l'influence sur la forme des distributions par rapport à l'agrégat de référence. En doublant la profondeur de l'agrégat (et donc le nombre de grains dans cette direction), le pic en 0 des composantes σ_{13}, σ_{23}, σ_{33} diminue, mais la distribution des autres composantes reste inchangée. En doublant les dimensions latérales de l'agrégat (et le nombre de grains), on n'observe pas de changement des distributions.

La déformation axiale moyenne est exactement égale à la valeur imposée en conditions aux limites ($E_{xx} = \langle \varepsilon_{xx} \rangle_V = 0.1\%$). Le comportement macroscopique de l'agrégat est bien isotrope ($\langle \varepsilon_{22} \rangle_V = \langle \varepsilon_{33} \rangle_V$=0.00032 et $\langle \varepsilon_{12} \rangle_V = \langle \varepsilon_{13} \rangle_V = \langle \varepsilon_{23} \rangle_V$=0). Le module d'Young effectif et le coefficient de Poisson effectif sont donc :

$$E_{eff} = \frac{\langle \sigma_{11} \rangle_V}{\langle \varepsilon_{11} \rangle_V} = \frac{115\ MPa}{0.001} = 115\ GPa \tag{4-1}$$

$$\nu_{eff} = -\frac{\langle \varepsilon_{22} \rangle_V}{\langle \varepsilon_{11} \rangle_V} = 0.32 \tag{4-2}$$

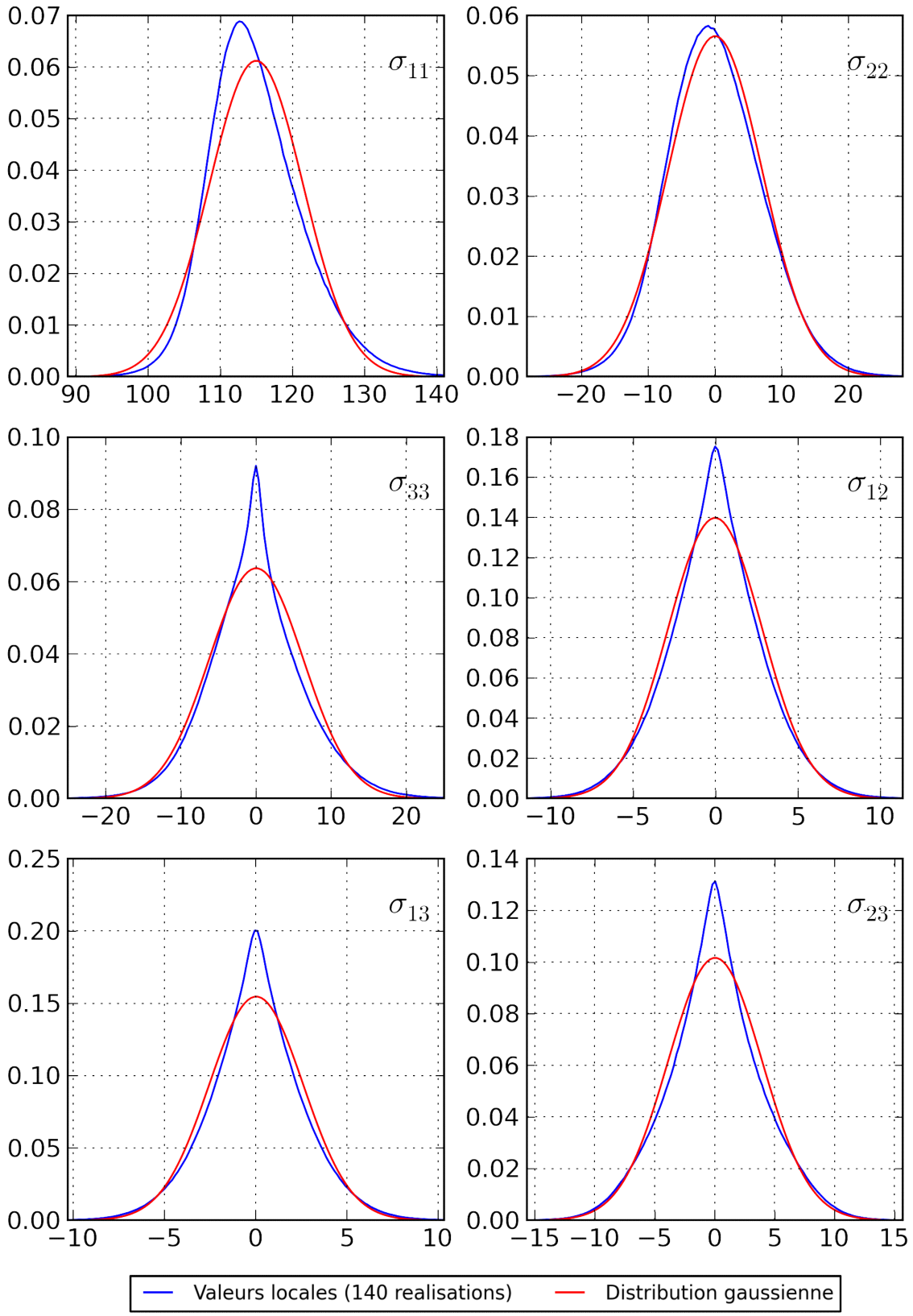


Figure 4-2 : Distribution des contraintes locales (MPa) au sein des N agrégats G.F. (grain central d'orientation [B.O.b.A.]).

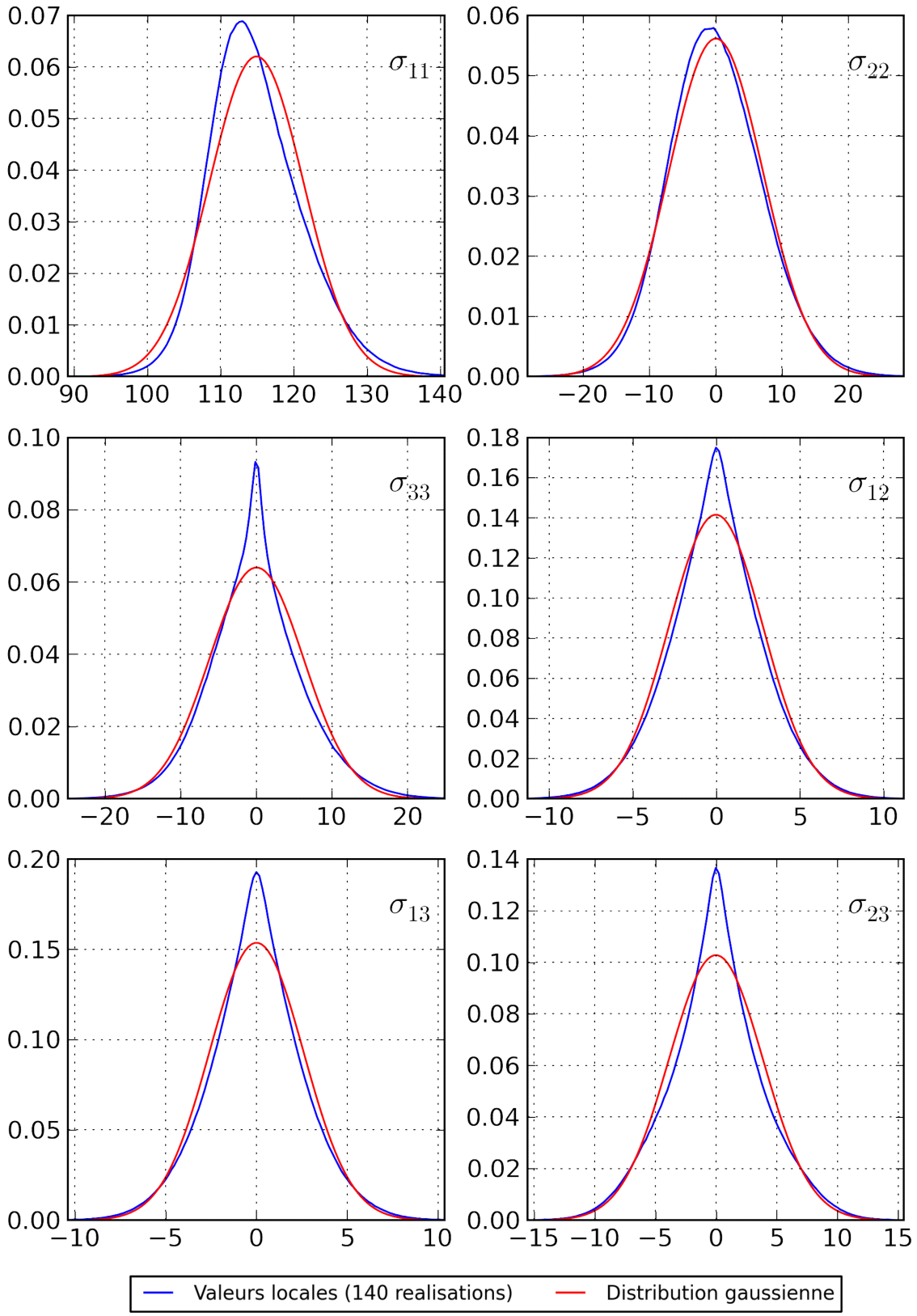


Figure 4-3 : Distribution des contraintes (MPa) au sein des N agrégats G.O. (grain central d'orientation [B.O.b.A.]).

4.2.2.2 Analyse des contraintes au sein des grains centraux

Le Tableau 4-5 reporte l'état de contrainte $\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$ dans le grain central pour les 2 morphologies et les 11 orientations étudiées. Les valeurs normalisées par la contrainte axiale macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ sont présentées dans le Tableau 4-6. On observe que la contrainte moyenne dans le grain central ne dépend pratiquement pas du type de grain (G.O. ou G.F.). En effet, l'écart entre la contrainte moyenne d'un grain ouvert et celle d'un grain fermé est inférieur à 2% de la contrainte macroscopique.

L'état de contrainte moyen du grain central n'est pas uniaxial. Mais les composantes autres que σ_{11} restent très faibles. Comparativement, elles sont plus faibles que dans le cas de l'austénite (CFC) car l'anisotropie de la phase α du titane est plus faible. Typiquement, la composante σ_{22} est comprise entre 1% et 10% de la contrainte macroscopique en fonction de l'orientation considérée. Les autres composantes restent inférieures à 5% (et dans la majorité des cas, les composantes de cisaillement σ_{13} et σ_{23} sont pratiquement nulles).

Pour la composante axiale σ_{11}, la moyenne dans le grain central dépend principalement de l'angle θ entre l'axe de traction et l'axe c du cristal. De plus, elle évolue en fonction de l'angle θ d'une façon similaire au module d'Young du monocristal de même orientation (Figure 4-4). Cependant, pour certaines orientations présentant le même angle θ (par exemple $\theta = 90^o$), la contrainte axiale moyenne n'est pas la même, ce qui reflète l'influence de l'orientation complète du cristal et des effets anisotropes 3D. L'évolution de la contrainte moyenne axiale $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ en fonction du module d'Young est quasi-linéaire (Figure 4-5).

L'influence de l'orientation sur la moyenne des autres composantes ne fait pas apparaître de tendance particulière. Cela nécessiterait des investigations spécifiques, notamment sur le rôle de l'orientation précise de l'axe c par rapport aux autres directions (et pas seulement la direction de traction). En particulier, les 2 orientations [B.O.b.A.] et [B.O.b.B] (idem pour [B.O.p.A.] et [B.O.p.B]) subissent des contraintes différentes dans les autres directions que la direction de traction. Le même résultat avait été constaté dans le cas des CFC et était certainement à l'origine d'une différence de facteur de Schmid effectif entre les orientations [B.O.A.] et [B.O.B.].

		[0001]	$[2\bar{1}\bar{1}0]$	$[10\bar{1}0]$	[5]	[6]	[7]	[8]	[BObA]	[BObB]	[BOpA]	[BOpB]
GF	σ_{11}	124.8	112.2	111.4	119.7	112.8	112.3	111.2	115.9	116.1	112.1	110.3
	σ_{22}	-4.49	8.90	8.47	-2.94	-4.19	-3.89	-4.70	-3.29	1.46	9.01	-5.56
	σ_{33}	-3.63	-3.29	-3.26	-0.85	3.30	4.33	4.74	1.14	-2.17	-3.51	5.83
	σ_{12}	-0.07	-0.12	0.06	-3.98	-2.05	-1.91	-1.27	-3.36	0.15	-0.11	-0.10
	σ_{13}	-0.03	0.06	0.01	-0.01	-0.01	0.05	-0.01	0.07	-3.05	-0.05	0.11
	σ_{23}	0.00	-0.08	0.03	0.11	0.19	0.02	-0.01	-0.07	0.05	0.04	-0.10
GO	σ_{11}	125.9	112.6	112.1	119.5	112.1	111.3	110.3	115.7	116.7	112.9	108.5
	σ_{22}	-4.60	10.45	10.22	-3.20	-4.57	-5.82	-5.69	-3.45	2.95	11.02	-7.64
	σ_{33}	-1.83	-1.85	-1.63	-0.67	1.79	2.01	2.37	0.62	-1.01	-1.75	3.00
	σ_{12}	-0.03	0.05	-0.13	-4.05	-2.54	-2.01	-1.68	-3.62	0.02	-0.12	-0.08
	σ_{13}	0.02	0.09	0.08	0.02	0.14	0.06	-0.07	-0.10	-2.01	-0.03	-0.17
	σ_{23}	-0.14	0.05	-0.12	-0.05	-0.07	0.09	-0.14	-0.01	-0.14	-0.11	0.01

Tableau 4-5 : Contraintes moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$ pour les 2 morphologies et les 11 orientations étudiées (valeurs en MPa).

		[0001]	$[2\bar{1}\bar{1}0]$	$[10\bar{1}0]$	[5]	[6]	[7]	[8]	[BObA]	[BObB]	[BOpA]	[BOpB]
GF	σ_{11}	1.08	0.98	0.97	1.04	0.98	0.98	0.97	1.01	1.01	0.98	0.96
	σ_{22}	-0.04	0.08	0.07	-0.03	-0.04	-0.03	-0.04	-0.03	0.01	0.08	-0.05
	σ_{33}	-0.03	-0.03	-0.03	-0.01	0.03	0.04	0.04	0.01	-0.02	-0.03	0.05
	σ_{12}	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
	σ_{13}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
	σ_{23}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
GO	σ_{11}	1.10	0.98	0.98	1.04	0.98	0.97	0.96	1.01	1.02	0.98	0.94
	σ_{22}	-0.04	0.09	0.09	-0.03	-0.04	-0.05	-0.05	-0.03	0.03	0.10	-0.07
	σ_{33}	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.03
	σ_{12}	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
	σ_{13}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
	σ_{23}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Tableau 4-6 : Contraintes moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$ pour les 2 morphologies et les11 orientations étudiées (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_{V}$).

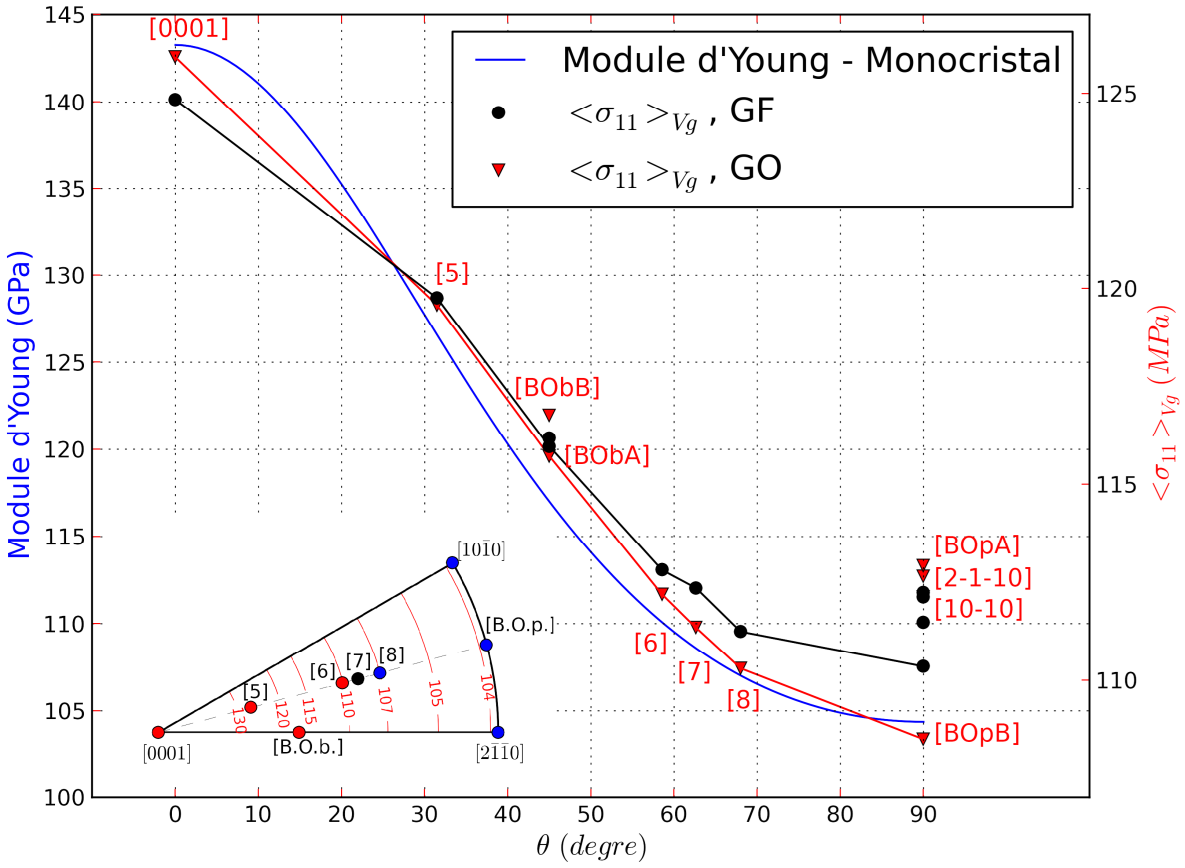


Figure 4-4 : Contrainte $\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$ et module d'Young du monocristal E_t en fonction de l'angle θ entre l'axe c du cristal et la direction de traction.

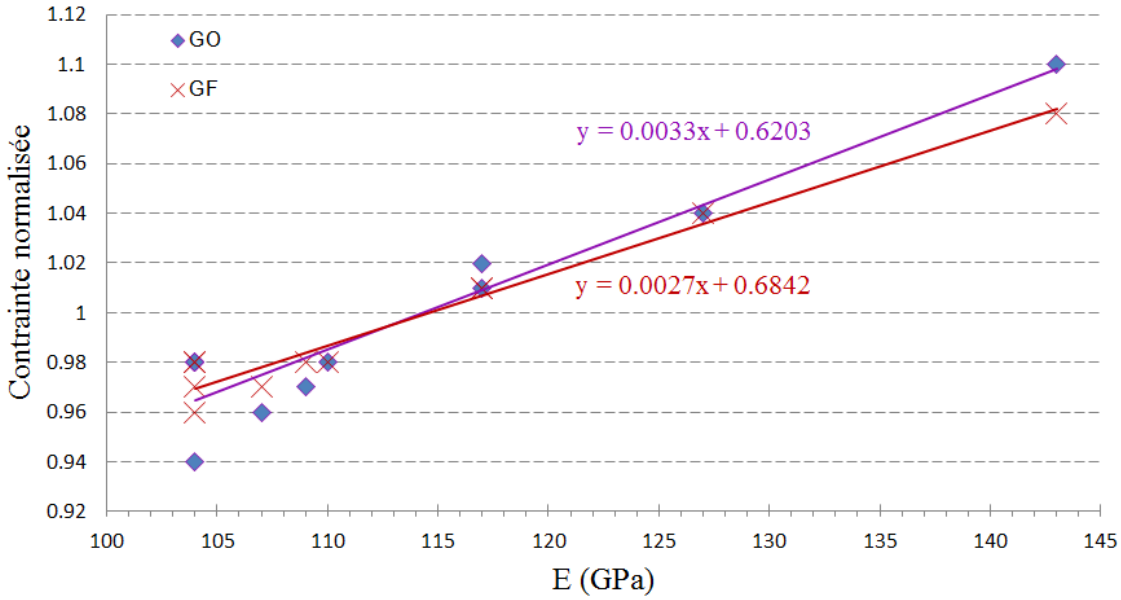


Figure 4-5 : Evolution de la contrainte axiale moyenne dans le grain central $\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$ normalisée par $\langle\sigma_{11}\rangle_{V}$ en fonction du module d'Young du monocristal E_t.

La Figure 4-6 représente l'écart-type total de la contrainte axiale σ_{11} dans le grain central normalisé par $\langle\sigma_{11}\rangle_V$ pour les 11 orientations cristallographiques et les 2 morphologies étudiées (le détail des données est également reporté dans le Tableau 4-7). Globalement, l'écart-type total représente environ 3.5% à 5% de la contrainte macroscopique $\langle\sigma_{11}\rangle_V$.

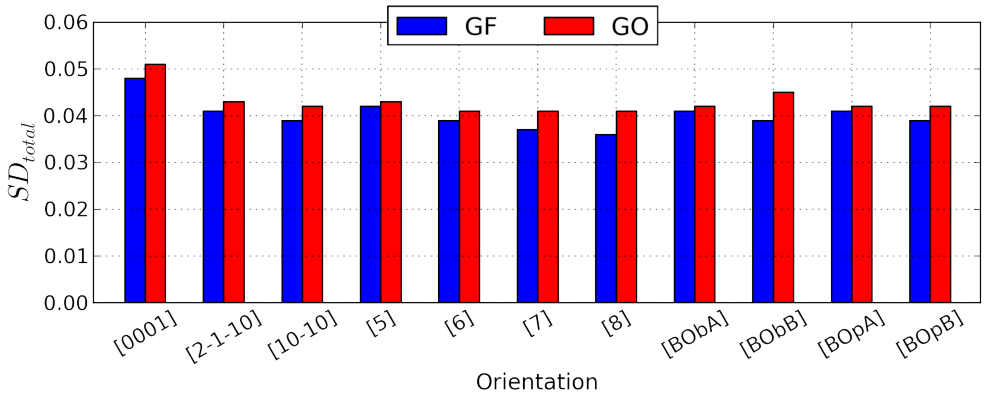


Figure 4-6 : Ecart-type total de la contrainte axiale σ_{11} au sein des 140 grains centraux pour les 11 orientations et les 2 morphologies étudiées (valeurs normalisées par $\langle\sigma_{11}\rangle_V$).

	GF				GO			
	$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_g}$	$SD_{V_g}^{\text{intra}}$	$SD_{V_g}^{\text{inter}}$	SD_{V_g}	$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_g}$	$SD_{V_g}^{\text{intra}}$	$SD_{V_g}^{\text{inter}}$	SD_{V_g}
[0001]	1.085	0.039	0.028	0.048	1.096	0.043	0.027	0.051
$[2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0]$	0.978	0.033	0.024	0.041	0.982	0.034	0.027	0.043
$[1\,0\,\bar{1}\,0]$	0.972	0.031	0.024	0.039	0.977	0.034	0.025	0.042
[5]	1.042	0.033	0.026	0.042	1.040	0.034	0.026	0.043
[6]	0.983	0.030	0.025	0.039	0.977	0.032	0.026	0.041
[7]	0.979	0.031	0.021	0.037	0.968	0.034	0.024	0.041
[8]	0.970	0.030	0.020	0.036	0.961	0.034	0.023	0.041
[BObA]	1.009	0.032	0.025	0.041	1.007	0.031	0.029	0.042
[BObB]	1.012	0.030	0.025	0.039	1.017	0.036	0.026	0.045
[BOpA]	0.978	0.032	0.026	0.041	0.983	0.032	0.028	0.042
[BOpB]	0.962	0.032	0.021	0.039	0.945	0.035	0.024	0.042

Tableau 4-7 : Moyenne et écarts-types de la contrainte axiale au sein des 140 grains centraux pour les 2 morphologies et les 11 orientations étudiées (valeurs normalisées par $\langle\sigma_{11}\rangle_V$).

Comme on peut le constater dans le cas de l'orientation [B.O.b.A.] (Tableau 4-8), l'écart-type total est du même ordre de grandeur pour la composante σ_{11}, σ_{22} et environ 2 à 3% pour les autres composantes. Les écarts-types intra- et inter-réalisation sont du même ordre de grandeur mais la dispersion intra-granulaire est systématiquement plus élevée. L'influence de l'orientation cristalline sur l'écart-type est très faible. On remarque que l'écart-type total de la contrainte σ_{11} dans un grain ouvert (G.O.) est systématiquement très légèrement supérieur à celui dans un grain fermé (G.F.) de même orientation. L'écart constaté représente 0.3% de la contrainte macroscopique.

	GF				GO			
	$\langle . \rangle_{V_g}$	$SD_{V_g}^{\text{intra}}$	$SD_{V_g}^{\text{inter}}$	SD_{V_g}	$\langle . \rangle_{V_g}$	$SD_{V_g}^{\text{intra}}$	$SD_{V_g}^{\text{inter}}$	SD_{V_g}
σ_{11}	1.009	0.032	0.025	0.041	1.007	0.031	0.029	0.042
σ_{22}	-0.029	0.037	0.025	0.045	-0.030	0.037	0.029	0.047
σ_{33}	0.010	0.029	0.015	0.033	0.005	0.023	0.010	0.025
σ_{12}	-0.029	0.019	0.013	0.023	-0.032	0.019	0.018	0.026
σ_{13}	0.001	0.015	0.010	0.018	-0.001	0.014	0.008	0.016
σ_{23}	-0.001	0.017	0.010	0.020	0.000	0.016	0.009	0.018

Tableau 4-8 : Moyenne et écarts-types des contraintes au sein des 140 grains centraux pour 2 morphologies étudiées (orientation [B.O.b.A], valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$).

Les figures suivantes représentent la distribution des contraintes locales, par composantes, dans l'ensemble des grains ouverts et fermés bien orientés pour le glissement basal (Figure 4-7 et Figure 4-8) et prismatique (Figure 4-9 et Figure 4-10). Les distributions constatées sont proches d'une distribution normale pour les composantes σ_{22} et σ_{12}, ainsi que pour la composante σ_{11} axiale dans une moindre mesure. En effet, dans le cas des grains fermés (G.F.), la distribution de σ_{11} présente une légère dissymétrie « vers la gauche » plus prononcée que dans le cas des grains ouverts. Ce résultat est vérifié pour toutes les orientations étudiées à l'exception de l'orientation [B.O.p.A]. De façon similaire à ce qui avait été constaté au chapitre 3 en relation avec l'effet de la surface libre, les distributions des composantes σ_{33}, σ_{23} et σ_{13} présentent un pic vers zéro prononcé dans le cas des grains ouverts et disparaissant presque dans le cas des grains fermés.

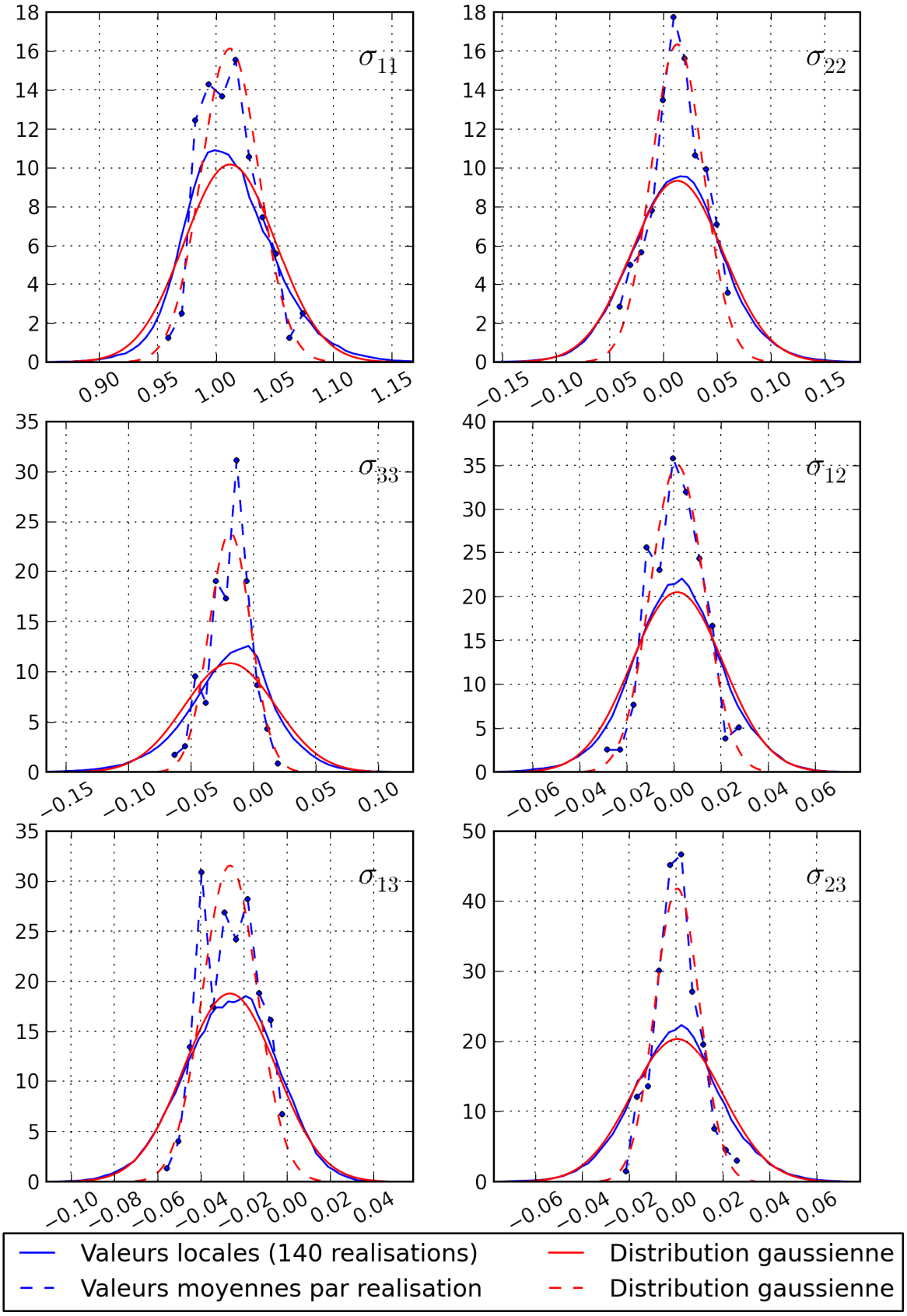


Figure 4-7 : Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central G.F., orientation [B.O.b.B.].

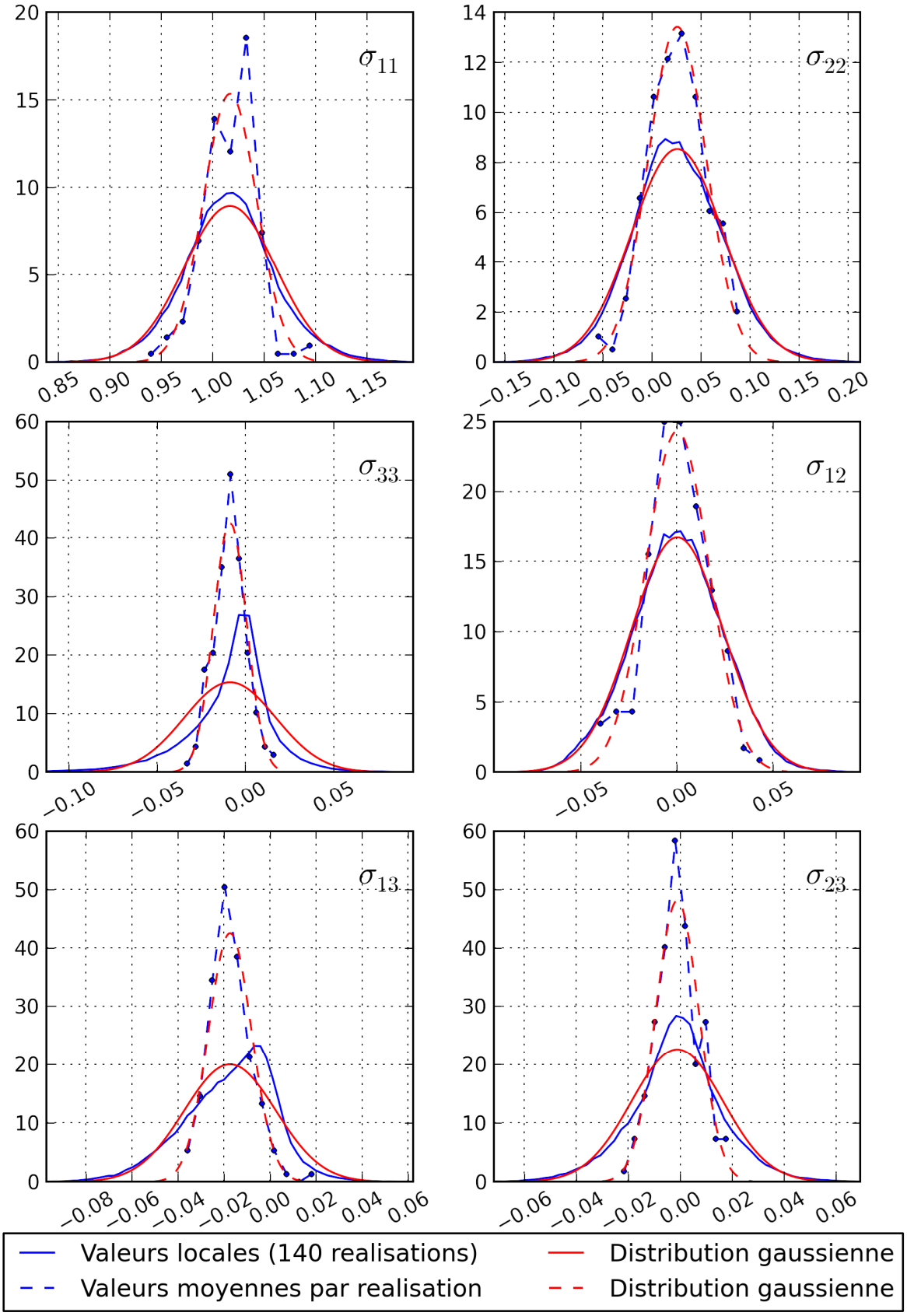


Figure 4-8 : Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central G.O., orientation [B.O.b.B.].

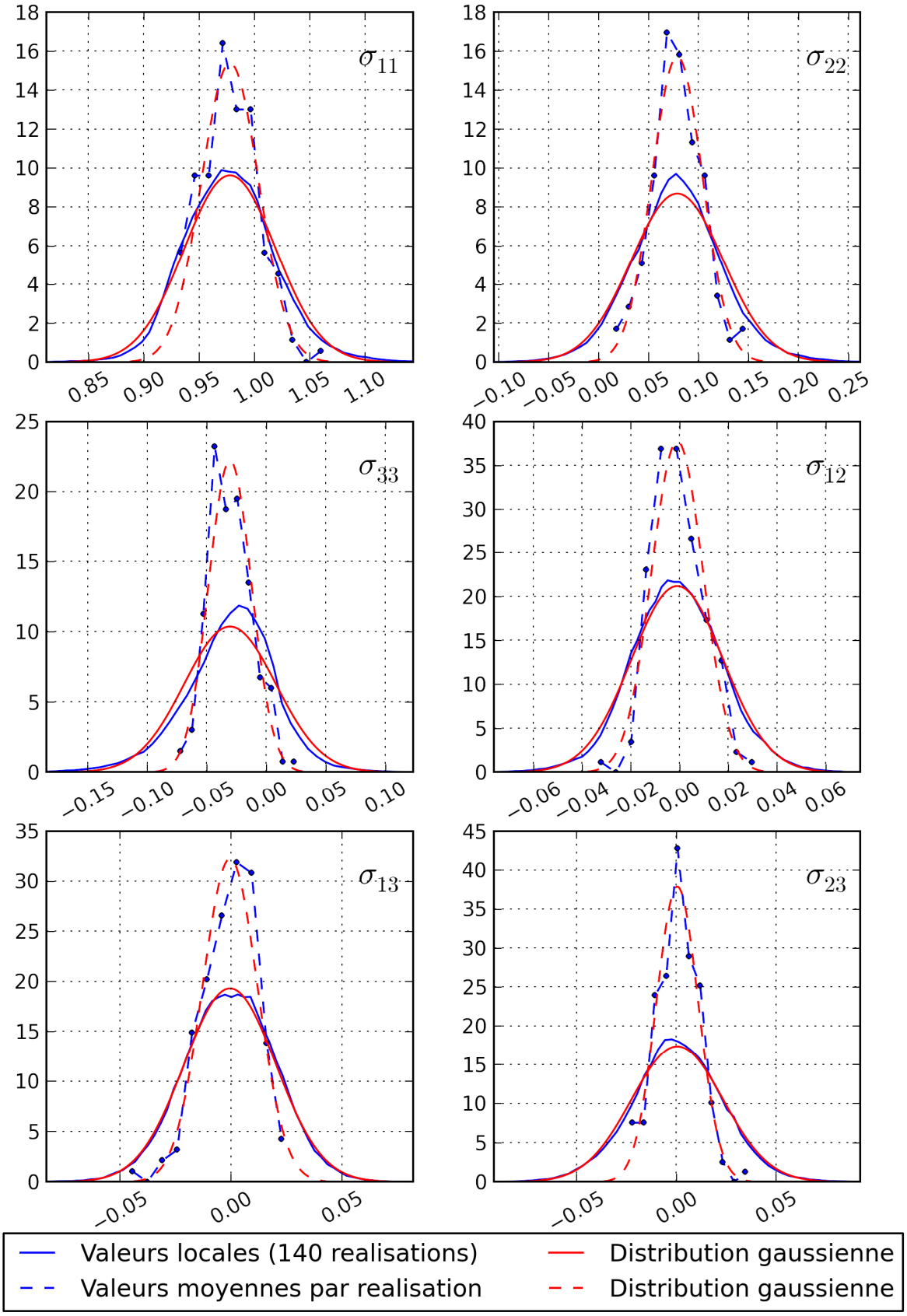


Figure 4-9 : Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central G.F., orientation [B.O.p.A.].

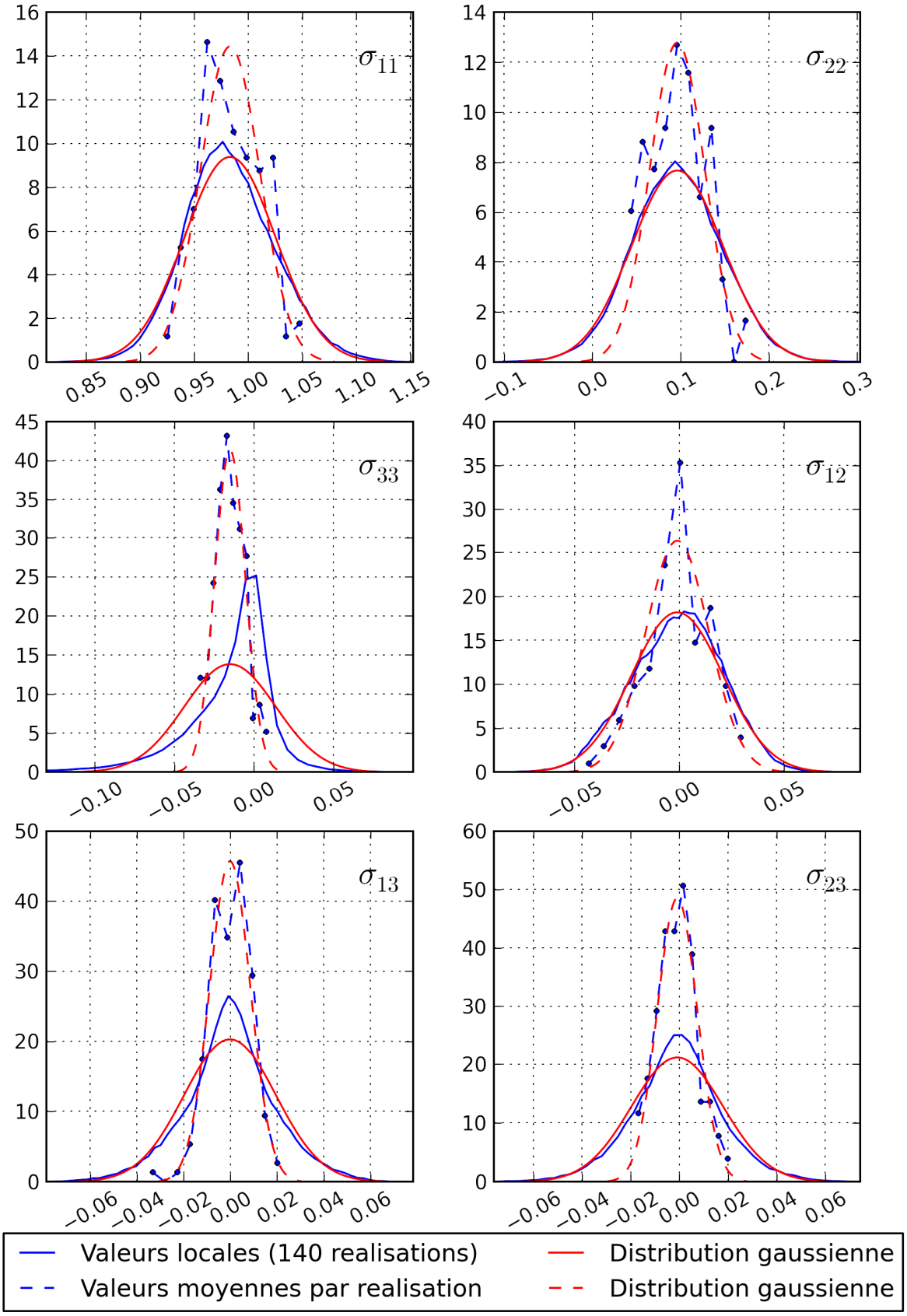


Figure 4-10 : Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central G.O., orientation [B.O.p.A.].

4.2.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif

La Figure 4-11 représente le facteur de Schmid effectif et l'écart-type total pour les 11 orientations et les 2 morphologies étudiées (les valeurs précises sont indiquées dans le Tableau 4-9). Globalement, on note la tendance suivante: lorsque $\theta < 65^o$, le facteur de Schmid effectif μ_{eff} est supérieur au facteur de Schmid μ « conventionnel » (c'est le cas des orientations [0001], [5], [6], [7] et [B.O.b.]) et lorsque $\theta > 65^o$, μ_{eff} est inférieur à μ (c'est le cas des orientations [2-1-10], [10-10], [8] et [B.O.p.]). Le facteur de Schmid considéré ici est celui défini, selon la première méthode, sur un seul système de glissement (voir paragraphe 2.5.1).

En particulier, le facteur de Schmid effectif maximal est obtenu pour les orientations [B.O.b.] et atteint la valeur de ~0.51 - 0.52. Pour les orientations [B.O.p.], le facteur de Schmid effectif est compris entre 0.44 et 0.46. La diminution de facteur de Schmid effectif pour les orientations [B.O.p.] (par rapport au facteur « conventionnel ») est plus marquée que l'augmentation pour les orientations [B.O.b.]. On ne note pas de corrélation entre l'écart μ_{eff} - μ et l'angle θ.

Pour les orientations [5] et [6], les facteurs de Schmid effectifs obtenus sur un système basal sont presque identiques, valant 0.444 et 0.446 respectivement. Ils sont supérieurs au facteur de Schmid effectif de l'orientation [8] obtenu sur un système prismatique (alors que les orientations [5], [6] et [8] présentent le même facteur « conventionnel »). Contrairement à ce qui avait été observé expérimentalement en termes de domaine favorisant l'activation du glissement basal, le facteur de Schmid effectif ne décrit pas une activité de glissement plus favorable pour l'orientation [5] par rapport à l'orientation [6]. Cependant, la contrainte axiale moyenne pour l'orientation [5] est plus élevée que celle de l'orientation [6]. Cela signifie que les autres contraintes provoquent une diminution de la cission résolue pour l'orientation [5] et/ou une augmentation de celle pour l'orientation [6].

Pour l'orientation [7], on note que le facteur de Schmid effectif sur le système de base vaut ~0.41 et que celui sur le système prismatique vaut ~0.36. Il a été vérifié que les contraintes différentes de σ_{11} augmentent la cission pour le système de base et la diminuent pour le système prismatique. Cette tendance a été observée pour 2 autres orientations de type [7]. Comme cela a été évoqué en conclusion du chapitre 3, le temps a manqué pour explorer précisément l'effet de l'orientation exacte sur les contraintes dans toutes les directions et, donc, sur la cission résolue. Cet aspect constitue une des perspectives de ce travail.

On constate une influence quasi-nulle de la morphologie du grain sur le facteur de Schmid effectif. Mais on note que les écarts-types sont systématiquement très légèrement plus élevés dans les grains ouverts. L'écart-type total est proche de 2.5% dans le cas des grains ouverts et de 2% pour les grains fermés. L'écart-type intra-granulaire, compris entre

1.5% et 2% est légèrement supérieure à l'écart-type inter-granulaire, globalement compris entre 1% et 1.5% (des valeurs supérieures sont quelques fois notées pour les grains ouverts).

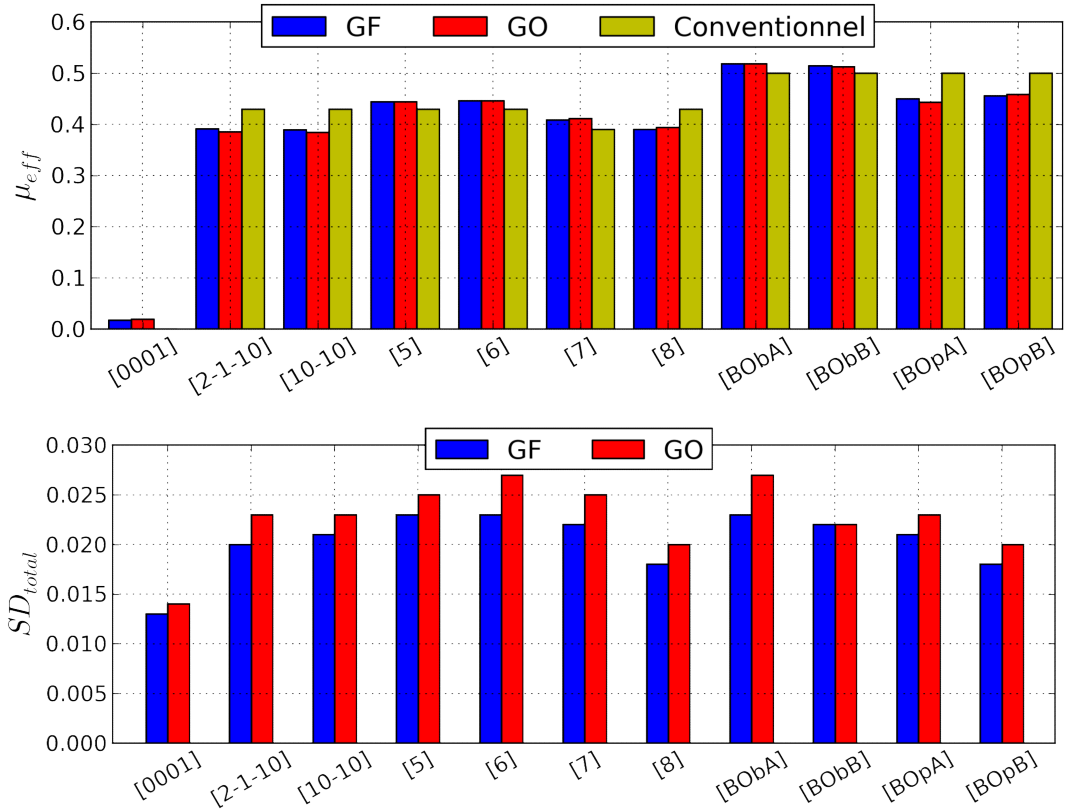


Figure 4-11 : Moyenne et écart-type total du facteur de Schmid effectif pour les 11 orientations et les 2 morphologies étudiées.

			GF				GO			
Orient.	SG	μ	μ_{eff}	$SD_{V_g}^{intra}$	$SD_{V_g}^{inter}$	SD_{V_g}	μ_{eff}	$SD_{V_g}^{intra}$	$SD_{V_g}^{inter}$	SD_{V_g}
[0001]	Basal	0.000	0.017	0.012	0.005	0.013	0.019	0.013	0.007	0.014
$[2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0]$	Pris	0.433	0.391	0.017	0.012	0.020	0.386	0.018	0.014	0.023
$[1\,0\,\bar{1}\,0]$	Pris	0.433	0.389	0.017	0.013	0.021	0.385	0.018	0.015	0.023
[5]	Basal	0.430	0.444	0.018	0.015	0.023	0.444	0.019	0.016	0.025
[6]	Basal	0.430	0.446	0.019	0.014	0.023	0.446	0.019	0.020	0.027
[7]	Basal	0.394	0.409	0.018	0.013	0.022	0.412	0.019	0.016	0.025
	Pris	0.394	0.357	0.015	0.010	0.018	0.361	0.015	0.011	0.019
[8]	Pris	0.430	0.390	0.015	0.010	0.018	0.394	0.015	0.013	0.020
[BObA]	Basal	0.500	0.519	0.018	0.015	0.023	0.519	0.020	0.019	0.027
[BObB]	Basal	0.500	0.515	0.017	0.014	0.022	0.513	0.018	0.014	0.022
[BOpA]	Pris	0.500	0.450	0.017	0.013	0.021	0.443	0.018	0.014	0.023
[BOpB]	Pris	0.500	0.456	0.015	0.010	0.018	0.459	0.016	0.012	0.020

Tableau 4-9 : Facteur de Schmid effectif et écarts-types associés pour les 2 morphologies et les 11 orientations étudiées.

La Figure 4-12 représente à titre d'exemple la distribution du facteur de Schmid effectif au sein des N grains centraux d'orientation [B.O.b.A] dans le cas des grains fermés et grains ouverts. La distribution du facteur de Schmid effectif est donc décrite convenablement par une loi normale, qu'il s'agisse des valeurs locales ou moyennes par réalisation.

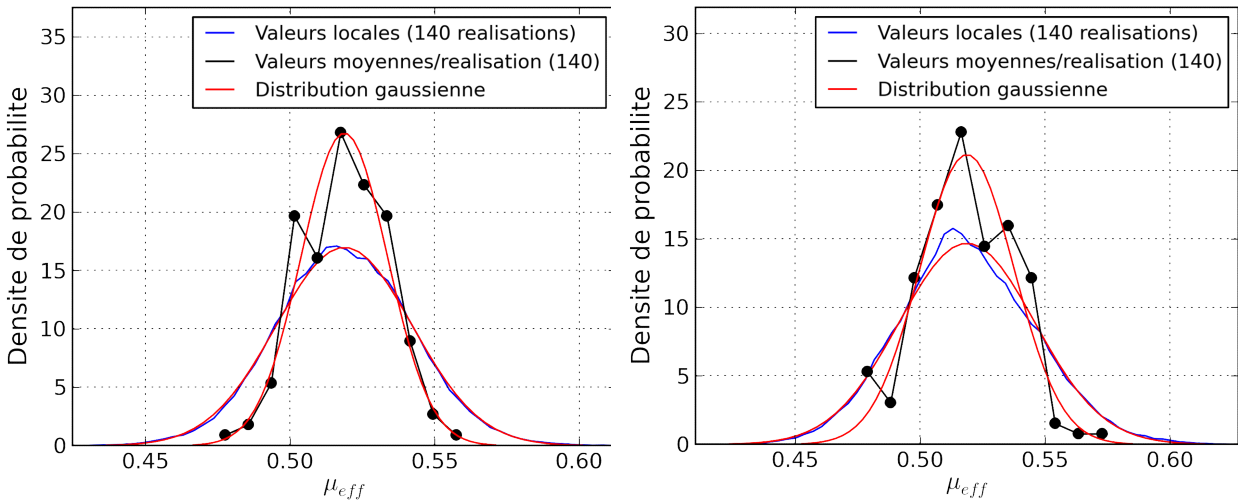
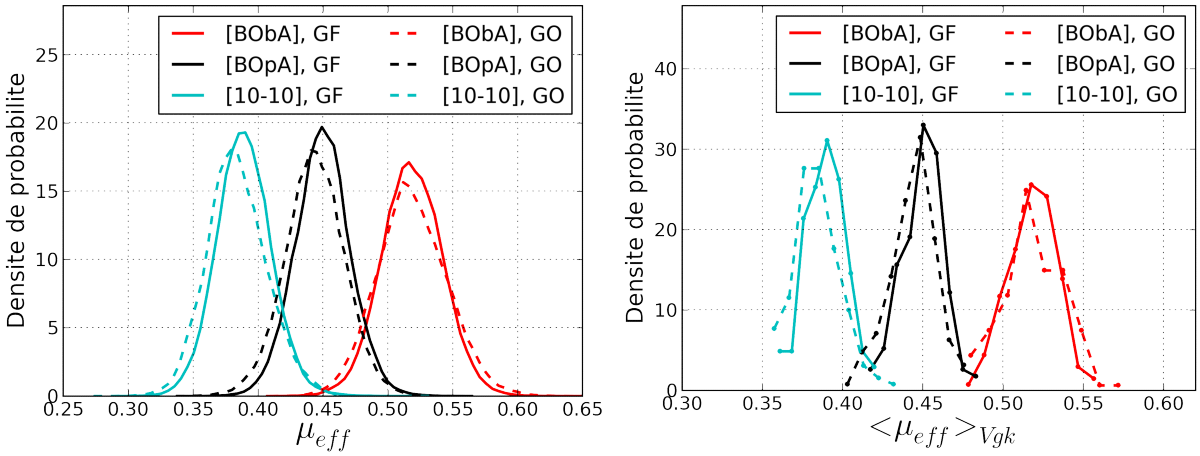


Figure 4-12 : Distribution du facteur de Schmid effectif dans le grain central : a. pour l'orientation [B.O.b.A.], GF ; b. pour l'orientation [B.O.b.A.], GO

La Figure 4-13 représente la distribution du facteur de Schmid effectif, localement ou en moyenne par réalisation, pour les 3 orientations [10-10], [B.O.b.A.] et [B.O.p.A.]. En raison de la différence des moyennes et de la dispersion relativement faible (comparativement au cas des C.F.C.) les 3 distributions présentent un recouvrement plutôt faible, voire presque inexistant en considérant la distribution des moyennes par grain (Figure 4-13.b). Ainsi, si l'on considère dans un polycristal non-texturé que les traces de glissement basal ou prismatique apparaissent lorsque la cission moyenne dans un grain atteint la cission critique (supposée identique pour le glissement prismatique et basal), le glissement basal devrait être activé dans pratiquement tous les grains [B.O.b.] avant que du glissement prismatique ne soit observé dans le grain [B.O.p.]. Les constats expérimentaux montrent que ce résultat est exagéré. Cependant, cette approche illustre la manière dont les résultats obtenus en simulation permettraient de mieux séparer les effets respectifs de la distribution de l'état de contrainte local par orientation, de la texture et d'un écart entre les cissions résolues critiques basal et prismatique sur l'activation du glissement sur ces 2 systèmes.



a. b.

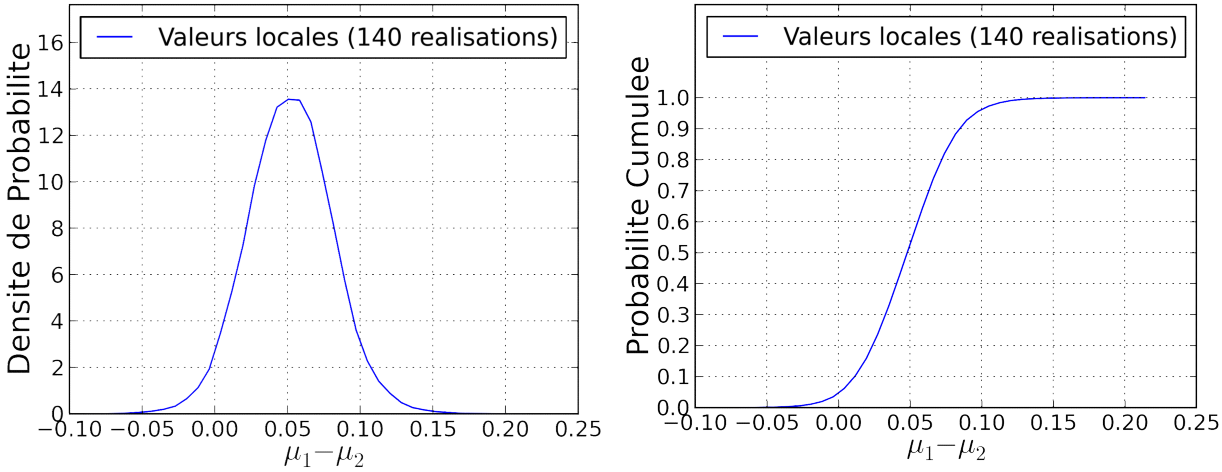
Figure 4-13 : Distribution des valeurs locales au point d'intégration (a) et des valeurs moyennes par grain (b) du facteur de Schmid effectif au sein des N grains centraux pour les 3 orientations [B.O.b.A.], [B.O.p.A.] et $[10\bar{1}0]$ et les 2 morphologies.

Le Tableau 4-10 indique, pour chaque orientation, le nombre de réalisations pour lesquelles le facteur de Schmid effectif d'un grain $\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_{gk}}$ sur un système α a été maximal.

Pour les grains « bien orientés », ainsi que les orientations [5] et [6], la cission maximale est toujours atteinte, en moyenne dans le grain, sur le système de glissement primaire. Pour les orientations [2-1-10] et [10-10], les réalisations se répartissent de façon assez équilibrée sur les 2 systèmes de glissement qui présentent le même facteur de Schmid « conventionnel ». Pour l'orientation [8] dont le facteur de Schmid conventionnel est maximal pour le glissement prismatique, une seule réalisation a conduit à une cission moyenne maximale sur un système basal. Enfin, pour l'orientation [7] qui présente le même facteur de Schmid « conventionnel » sur 2 systèmes basal et prismatique, le glissement basal domine le glissement prismatique pour toutes les réalisations. En représentant, pour cette orientation, la distribution de la différence entre le facteur de Schmid effectif local sur le système basal μ_1 et celui sur le système prismatique μ_2 (Figure 4-14), on constate que seulement 5% du volume de tous les grains (i.e. V_g) atteint une cission résolue maximale sur le système de glissement prismatique.

	GF						GO					
	B1	B2	B3	P1	P2	P3	B1	B2	B3	B1	B2	B3
[0001]	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$[2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0]$	0	0	0	70	70	0	0	0	0	66	74	0
$[1\,0\,\bar{1}\,0]$	0	0	0	0	67	73	0	0	0	0	73	67
[5]	0	0	140	0	0	0	0	0	140	0	0	0
[6]	0	0	140	0	0	0	0	0	140	0	0	0
[7]	0	0	140	0	0	0	0	0	140	0	0	0
[8]	0	0	1	0	139	0	0	0	4	0	136	0
[BObA]	0	140	0	0	0	0	0	140	0	0	0	0
[BObB]	0	140	0	0	0	0	0	140	0	0	0	0
[BOpA]	0	0	0	140	0	0	0	0	0	140	0	0
[BOpB]	0	0	0	140	0	0	0	0	0	140	0	0

Tableau 4-10 : Nombre de réalisations pour lesquelles le facteur de Schmid effectif d'un grain $\left\langle \mu_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_{gk}}$ *sur un système* α *est maximal.*



a. b.

Figure 4-14 : Distribution de $(\mu_1 - \mu_2)$ *pour l'orientation [7], GF : a. Densité de probabilité ; b. probabilité cumulée.*

4.2.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage

4.2.4.1 Contraintes normales au plan de glissement

La moyenne $\left\langle \upsilon_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g}$ et l'écart-type total $SD_{Vg}\left(\upsilon_{eff}^{\alpha}\right)$ du facteur de contrainte normale effectif au plan de glissement du système α sur lequel le facteur de Schmid effectif est maximal sont présentés sur la Figure 4-15. Les valeurs précises sont données dans le Tableau 4-11. On trouve que le facteur de contrainte normale effectif maximal est obtenu pour l'orientation [0001] car le plan de glissement de base est perpendiculaire à la direction de traction. On observe globalement que la valeur effective est supérieure à la valeur « conventionnelle », i.e. $\left\langle \upsilon_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g} > \upsilon^{\alpha}$, si $\theta < 50^o$ et l'inverse, i.e. $\left\langle \upsilon_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g} < \upsilon^{\alpha}$ si $\theta > 50^o$.

Cela n'est pas vrai pour les orientations pour lesquelles θ est égal à 90° ($[2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0]$, $[1\,0\,\bar{1}\,0]$ et [B.O.p.]). Contrairement à ce qui a été constaté pour le facteur de Schmid effectif, le facteur de contrainte normale effectif des orientations [B.O.p.] est pratiquement égal à celui des orientations [B.O.b.]. L'influence de la morphologie du grain sur le facteur de contrainte normale effectif moyen et sur les écarts-types est faible. Globalement, l'écart-type total est compris entre 3 et 5% de la contrainte macroscopique.

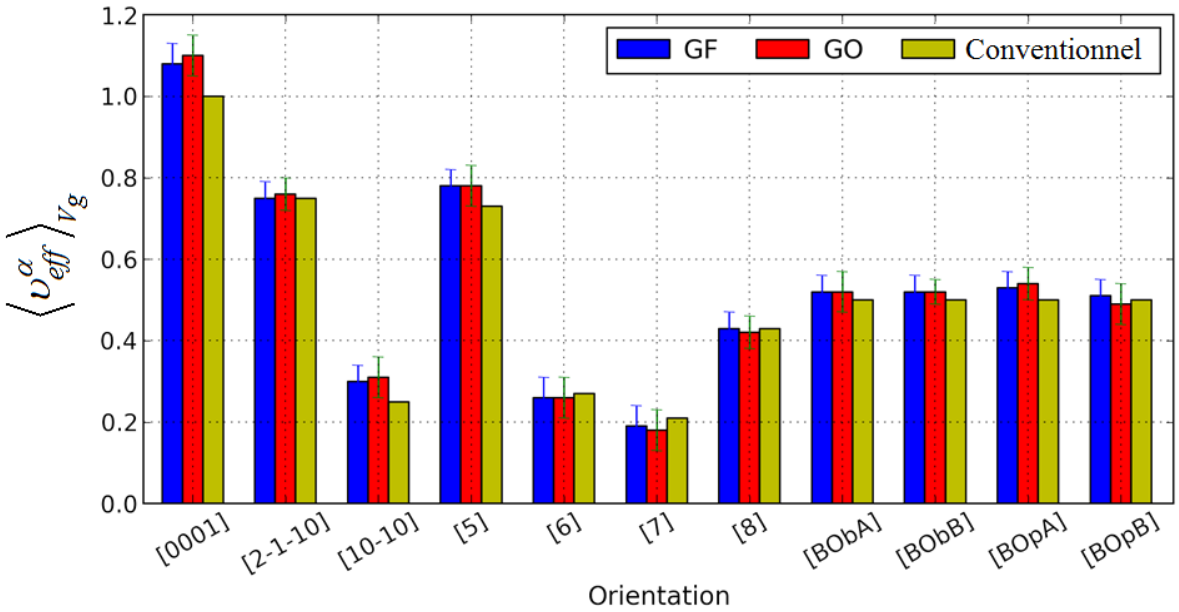


Figure 4-15 : Facteur de contrainte normale effectif $\left\langle \upsilon_{eff}^{\alpha} \right\rangle_{V_g}$ et écart-type total associé $SD_{Vg}\left(\upsilon_{eff}^{\alpha}\right)$ pour le système de glissement α sur lequel le facteur de Schmid effectif est maximal (11 orientations et 2 morphologies étudiées).

			GF				GO			
Orient.	SG	υ	$\langle \upsilon_{eff}^{\alpha} \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	$\langle \upsilon_{eff}^{\alpha} \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
[0001]	Basal	1.00	1.08	0.039	0.028	0.048	1.10	0.043	0.027	0.051
$[2\bar{1}\bar{1}0]$	Pris	0.75	0.75	0.033	0.025	0.042	0.76	0.035	0.027	0.044
$[10\bar{1}0]$	Pris	0.25	0.30	0.037	0.024	0.043	0.31	0.039	0.024	0.046
[5]	Basal	0.73	0.78	0.036	0.025	0.044	0.78	0.036	0.029	0.046
[6]	Basal	0.27	0.26	0.038	0.026	0.046	0.26	0.038	0.029	0.048
[7]	Basal	0.21	0.19	0.039	0.026	0.047	0.18	0.040	0.030	0.050
[8]	Pris	0.43	0.43	0.031	0.018	0.036	0.42	0.032	0.015	0.035
[BObA]	Basal	0.50	0.52	0.037	0.024	0.044	0.52	0.036	0.031	0.047
[BObB]	Basal	0.50	0.52	0.032	0.020	0.038	0.52	0.028	0.017	0.033
[BOpA]	Pris	0.50	0.53	0.035	0.026	0.043	0.54	0.036	0.030	0.047
[BOpB]	Pris	0.50	0.51	0.033	0.019	0.038	0.49	0.034	0.015	0.038

Tableau 4-11 : Facteur de contrainte normale effectif $\langle \upsilon_{eff}^{\alpha} \rangle_{Vg}$ et écarts-types associés pour le système de glissement α sur lequel le facteur de Schmid effectif est maximal (11 orientations et 2 morphologies étudiées).

Pour certaines orientations, le facteur de contrainte normale effectif maximal υ_{eff} est atteint sur un plan qui ne correspond pas au facteur de Schmid effectif maximal. Celles-ci sont indiquées dans le Tableau 4-12.

			GF				GO			
Orient.	SG	υ	υ_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	υ_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
$[10\bar{1}0]$	Pris	1.00	0.97	0.03	0.02	0.04	0.98	0.03	0.03	0.04
[6]	Basal	0.70	0.65	0.03	0.02	0.04	0.64	0.03	0.02	0.04
[7]	Pris	0.74	0.70	0.03	0.02	0.04	0.69	0.03	0.02	0.04
[BOpA]	Pris	0.93	0.92	0.03	0.02	0.04	0.92	0.03	0.03	0.04
[BOpB]	Pris	0.93	0.90	0.03	0.02	0.04	0.88	0.03	0.02	0.04

Tableau 4-12 : Facteur de contrainte normale effectif υ_{eff} et écarts-types associés (uniquement pour les orientations pour lesquelles des valeurs différentes de celles du tableau précédent ont été obtenues).

4.2.4.2 Analyse des indicateurs d'amorçage

La Figure 4-16 présente l'indicateur d'amorçage effectif moyen I_{eff} et l'écart-type total associé dans le grain central pour les 2 morphologies et les 11 orientations étudiées. Les valeurs précises sont indiquées dans le Tableau 4-13. On observe que $I_{eff} > I$ si $\theta < 60^o$ et $I_{eff} < I$ si $\theta > 60^o$. L'indicateur d'amorçage est le plus élevé pour les orientations [5], [B.O.b.A] et [B.O.b.B] (I_{eff}~0.79) puis [B.O.p.A], [B.O.p.B] et $[2\bar{1}\bar{1}0]$ (I_{eff}~0.68). Les orientations [6] et [8] présentent la même valeur d'indicateur d'amorçage (I_{eff}~0.56). L'indicateur d'amorçage obtenu pour l'orientation [0001] est très faible car la cission résolue sur le système de glissement associé au plan de base est très faible également.

On constate une influence minime du type de grain (ouvert ou fermé) sur l'indicateur d'amorçage et sur des écarts-types (écart relatif inférieur à 2%).

Globalement, l'écart-type total est compris entre 3 et 5% de la contrainte macroscopique.

La distribution de l'indicateur d'amorçage, représentée sur la Figure 4-17 pour 4 des orientations étudiées et la morphologie G.F. uniquement, pourra être décrite de façon acceptable par une loi normale.

Sur la base de l'indicateur d'amorçage effectif moyen ou de sa distribution, l'orientation [5] n'apparaît pas comme significativement plus favorable à l'amorçage que les orientations de type [B.O.b.]. Cependant, parmi les 140 réalisations considérées pour chaque orientation, l'indicateur maximal obtenu en moyenne dans un grain central est effectivement atteint pour l'orientation [5]. Cela est visible sur les distributions des moyennes par grain de la Figure 4-17.b.

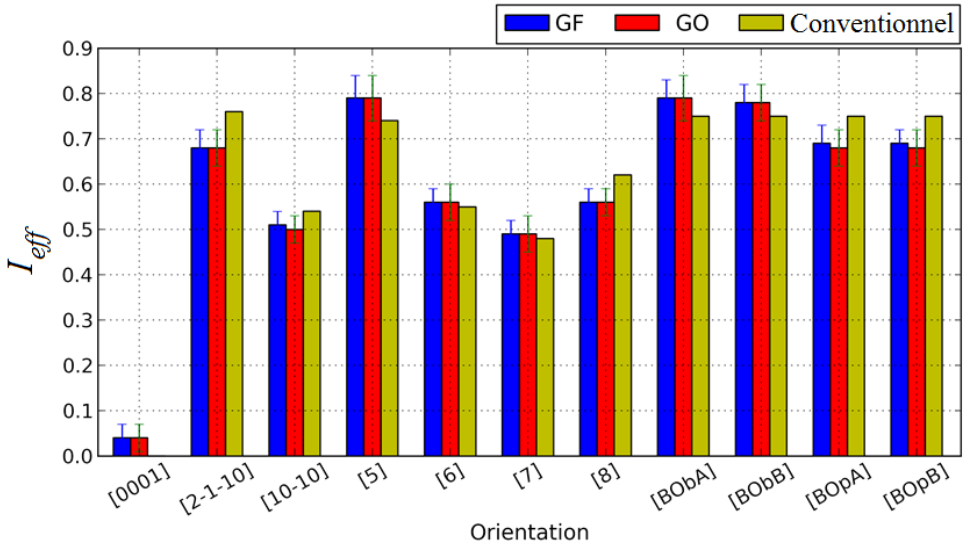
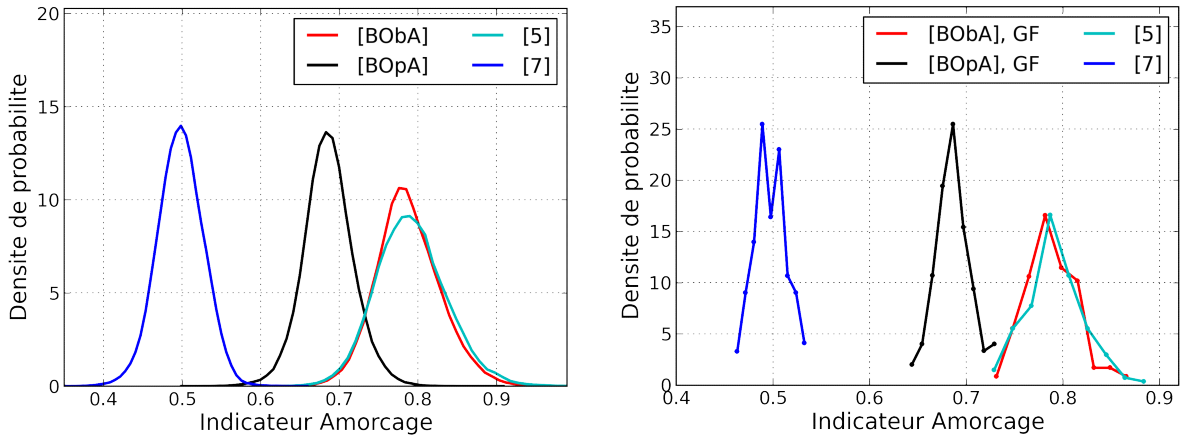


Figure 4-16 : Indicateur d'amorçage effectif et écart-type total associé (barres d'erreur) pour les 11 orientations et les 2 morphologies étudiées.

			GF				GO			
Orient.	SG	I	I_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	I_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
[0001]	Basal	0	0.036	0.026	0.010	0.028	0.038	0.026	0.014	0.030
$[2\bar{1}\bar{1}0]$	Pris	0.76	0.684	0.031	0.023	0.039	0.679	0.032	0.027	0.042
$[10\bar{1}0]$	Pris	0.54	0.505	0.023	0.019	0.030	0.505	0.024	0.022	0.033
[5]	Basal	0.74	0.791	0.034	0.030	0.045	0.790	0.037	0.031	0.048
[6]	Basal	0.55	0.561	0.028	0.021	0.035	0.561	0.027	0.029	0.040
[7]	Basal	0.48	0.487	0.025	0.017	0.030	0.485	0.026	0.023	0.035
	Pris	0.55	0.497	0.024	0.017	0.029	0.497	0.026	0.019	0.032
[8]	Pris	0.62	0.576	0.022	0.016	0.027	0.558	0.026	0.022	0.034
[BObA]	Basal	0.75	0.788	0.032	0.026	0.041	0.788	0.033	0.033	0.047
[BObB]	Basal	0.75	0.785	0.030	0.027	0.040	0.780	0.035	0.027	0.044
[BOpA]	Pris	0.75	0.687	0.028	0.023	0.036	0.682	0.028	0.025	0.038
[BOpB]	Pris	0.75	0.686	0.026	0.018	0.032	0.683	0.030	0.023	0.037

Tableau 4-13 : Indicateur d'amorçage effectif I_{eff} et les écart-types associés pour 2 morphologies et 11 orientations étudiées



a. Valeurs locales b. Moyennes par grain

Figure 4-17 : Distribution de l'indicateur d'amorçage effectif (morphologie G.F.): a. valeurs locales, b. valeurs moyennes par grain.

Les résultats obtenus sont difficiles à interpréter en raison d'absence d'information sur la valeur du coefficient m de sensibilité à la contrainte normale. A défaut on propose d'évaluer son influence. La Figure 4-18 indique, en particulier, que l'indicateur d'amorçage conventionnel (c'est-à-dire dans le cas d'un monocristal en traction) devient maximal pour l'orientation [5] lorsque le coefficient m est supérieur à 1.1.

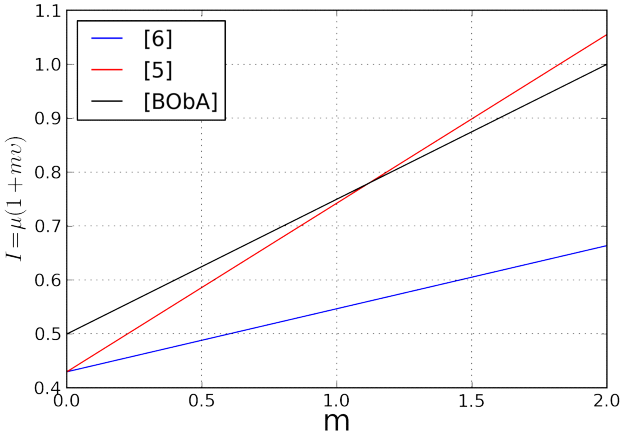
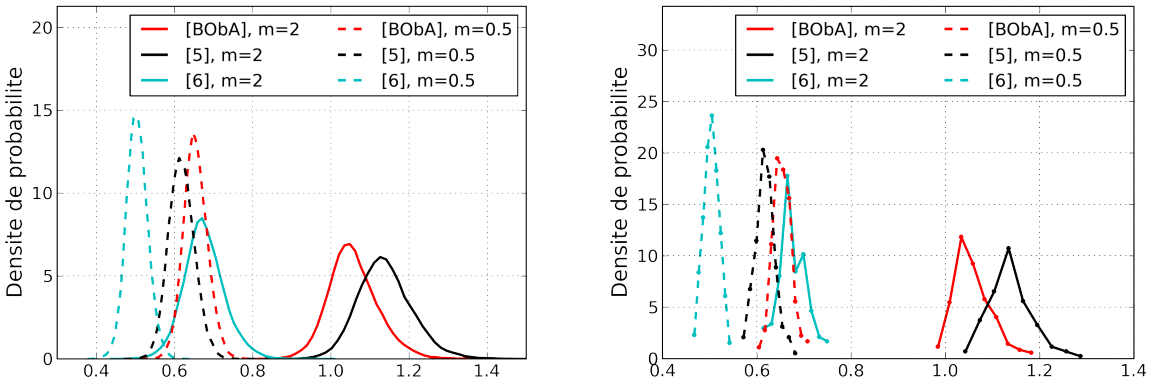


Figure 4-18 : Evolution de l'indicateur d'amorçage conventionnel en fonction du coefficient m pour l'orientation [B.O.b.A], [5] et [6].

En tenant compte de la distribution des contraintes simulées, l'indicateur d'amorçage effectif est déterminé, pour m=2 et m=0.5, en moyenne au sein de 140 grains centraux (Tableau 4-14). La distribution correspondante est représentée sur la Figure 4-19. Lorsque m=2, l'indicateur pour l'orientation [5] est nettement supérieur à celui obtenue sur l'orientation [B.O.b.]. Supposons que cet indicateur puisse constituer un critère d'amorçage ce qui reste à prouver. En se basant sur la distribution de moyennes par grain pour m=2, lorsqu'environ la moitié des grains orientés [5] serait sujet à l'amorçage, seule une très faible fraction de grains [B.O.b.] présenterait des fissures.

	m=0.5		m=2	
	I	I_{eff}	I	I_{eff}
[B.O.b.A]	0.626	0.653	1	1.057
[5]	0.585	0.618	1.06	1.138
[6]	0.488	0.504	0.665	0.675

Tableau 4-14 : Indicateur d'amorçage conventionnel et effectif avec différentes valeurs de m pour 3 orientations [B.O.b.A], [5] et [6].



a. Valeurs locales a. Valeurs moyennes par grain

Figure 4-19 : Distribution de l'indicateur d'amorçage effectif avec différentes valeurs de m.

4.2.5 Etude des réalisations extrémales et configurations cristallographiques locales associées

4.2.5.1 Facteurs de Schmid effectifs extrémaux

La Figure 4-20 représente les facteurs de Schmid effectifs extrémaux obtenus pour chaque série de simulations avec la morphologie (G.O.). Les valeurs sont données dans le Tableau 4-15 et le Tableau 4-16 pour les morphologies (G.F.) et (G.O) respectivement. Parmi toutes les configurations étudiées, le facteur de Schmid effectif maximal atteint une valeur de 0.578 dans le cas d'un grain central ouvert d'orientation [B.O.b.A]. Comme cela avait été vu sur les distributions du facteur de Schmid effectif, la valeur maximale obtenue pour les grains [B.O.p.] (~0.5) n'est que légèrement supérieure aux valeurs minimales obtenues pour les orientations [B.O.b.] (~0.47-0.48). Même en termes de valeurs maximales, les cissions obtenues pour l'orientation [5] demeurent largement inférieures à celles obtenues pour les orientations [B.O.b.]. Ces résultats ne vont pas dans le sens d'un domaine d'activation du glissement basal plus favorable « à gauche » du pôle correspondant aux orientations [B.O.b.]. Notons qu'une seule orientation (i.e. [5]) est considérée pour décrire l'ensemble de ce domaine d'orientation dans le triangle standard identifié expérimentalement. Des analyses supplémentaires seraient donc nécessaires pour confirmer cette tendance.

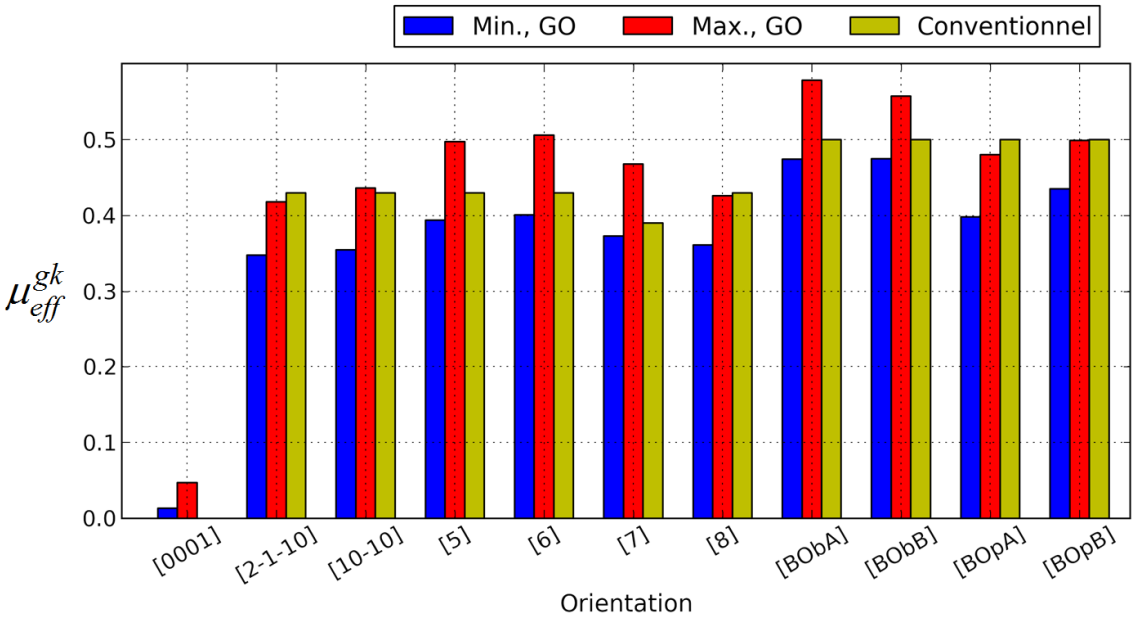


Figure 4-20: Facteurs de Schmid effectifs extrémaux (morphologie G.O.).

Orient.	μ	μ_{eff}				$\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg} / \langle\sigma_{11}\rangle_{V}$		
		Min	Moy	Max	SD_{Vg}^{inter}	Min	Moy	Max
[0001]	0.000	0.013	0.017	0.033	0.005	1.05	1.08	1.06
$[2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0]$	0.433	0.371	0.391	0.434	0.012	0.92	0.98	0.99
$[1\,0\,\bar{1}\,0]$	0.433	0.364	0.389	0.423	0.013	0.93	0.97	1.01
[5]	0.430	0.411	0.444	0.484	0.015	0.99	1.04	1.12
[6]	0.430	0.409	0.446	0.480	0.014	0.95	0.98	1.05
[7]	0.394	0.373	0.409	0.443	0.013	0.95	0.98	0.97
[8]	0.394	0.362	0.390	0.419	0.010	0.95	0.97	1.02
[BObA]	0.430	0.474	0.519	0.561	0.010	0.97	1.01	1.06
[BObB]	0.500	0.486	0.515	0.562	0.015	0.97	1.01	1.07
[BOpA]	0.500	0.413	0.450	0.487	0.014	0.94	0.98	0.99
[BOpB]	0.500	0.432	0.456	0.480	0.013	0.92	0.96	0.98

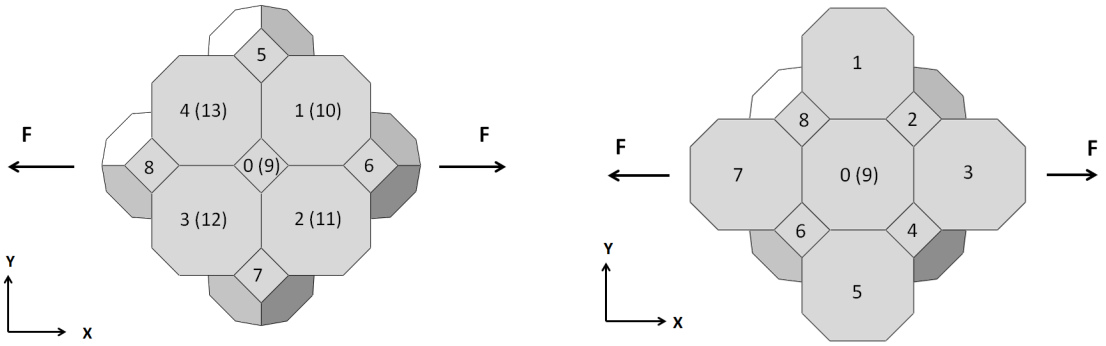
Tableau 4-15: Facteurs de Schmid effectifs extrémaux (morphologie G.F.).

Orient.	μ	μ_{eff}				$\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg} / \langle\sigma_{11}\rangle_{V}$		
		Min	Moy	Max	SD_{Vg}^{inter}	Min	Moy	Max
[0001]	0.000	0.013	0.019	0.047	0.007	1.08	1.10	1.07
$[2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0]$	0.433	0.348	0.386	0.418	0.014	0.97	0.98	0.97
$[1\,0\,\bar{1}\,0]$	0.433	0.355	0.385	0.436	0.015	0.91	0.98	1.01
[5]	0.430	0.394	0.444	0.497	0.016	1.02	1.04	1.10
[6]	0.430	0.401	0.446	0.506	0.020	0.98	0.98	1.00
[7]	0.394	0.373	0.412	0.468	0.016	0.93	0.97	1.00
[8]	0.394	0.361	0.394	0.426	0.011	0.91	0.96	1.04
[BObA]	0.430	0.474	0.519	0.578	0.013	1.00	1.01	1.07
[BObB]	0.500	0.475	0.513	0.557	0.019	0.93	1.02	1.10
[BOpA]	0.500	0.398	0.443	0.480	0.014	0.99	0.98	1.02
[BOpB]	0.500	0.435	0.459	0.499	0.014	0.89	0.94	1.03

Tableau 4-16: Facteurs de Schmid effectifs extrémaux (morphologie G.O.).

4.2.5.2 Analyse des configurations de voisinage

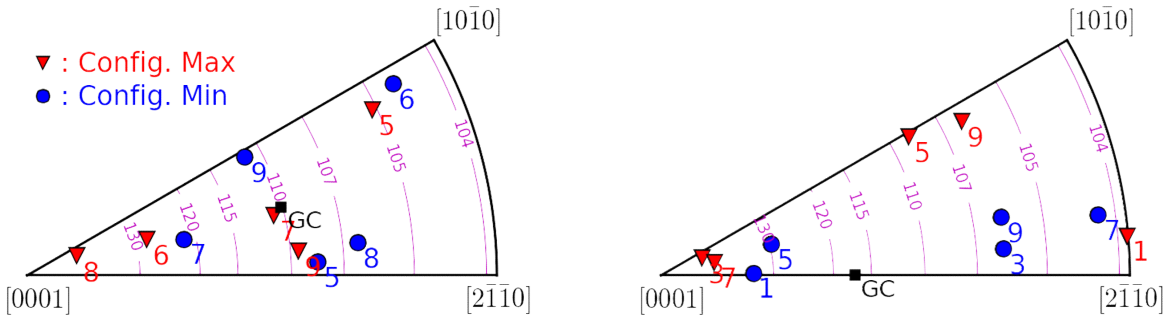
La Figure 4-21 rappelle les arrangements de voisins du grain central et la numérotation proposée pour un grain central fermé (a) ou ouvert (b). Comme cela avait été fait dans le cas du 316L (voir paragraphe 3.4.2.2), l'analyse du voisinage est faite de façon un peu simplifiée. Pour le grain central G.F. (Figure 4-21.a), on ne retient dans l'analyse que 2 voisins latéraux (grains 5 et 7) et 2 voisins axiaux (grains 6 et 8). Pour le grain central G.O. (Figure 4-21.b), on ne retient dans l'analyse que 2 voisins latéraux (grains 1 et 5) et 2 voisins axiaux (grains 3 et 7). Le voisin en profondeur (grain 9) est également considéré.



a. G.F. b. G.O.

Figure 4-21: Arrangement et numérotation des voisins du grain central: a. agrégat G.F.; b. agrégat G.O.

L'orientation des grains voisins du grain central est présentée dans le triangle standard sur la Figure 4-22 pour l'orientation [6] (cas d'un grain central fermé) et l'orientation [B.O.b.B.] (cas d'un grain central ouvert). Dans ce dernier cas, lorsque le facteur de Schmid effectif est maximal, les grains voisins axiaux (grain 3 et 7) sont rigides et les grains voisins latéraux (grain 1, 5 et 9) sont souples. L'arrangement opposé est observé pour le cas du facteur de Schmid effectif minimal (hormis le voisin en profondeur 9 qui est également souple). Les arrangements de voisins constatés pour le grain central fermé d'orientation [6] présentent certaines caractéristiques communes avec la précédente.

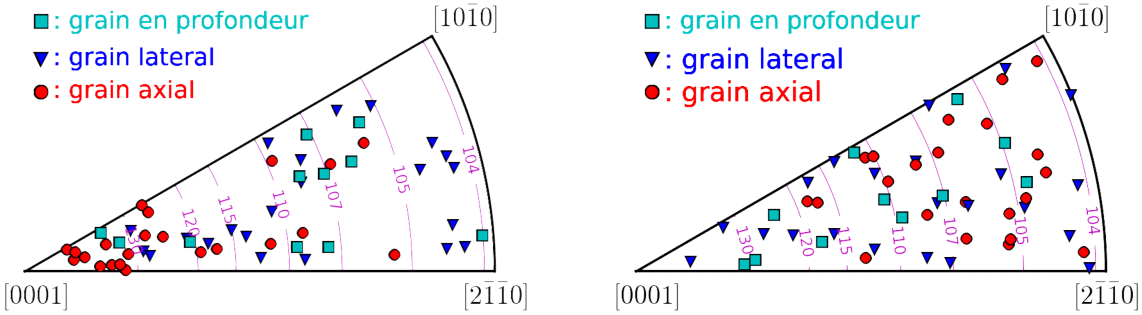


a. [6], GF b. [B.O.b.B.], GO

Figure 4-22 : Orientation des différents voisins du grain central pour les 2 réalisations ayant conduit au facteur de Schmid maximal (« Config. Max. ») et minimal (« Config. Min. »): a. grain central fermé d'orientation [6]; b. grain central ouvert d'orientation [B.O.b.B.].

La Figure 4-23 et la Figure 4-24 décrivent, respectivement pour les grains centraux fermés et ouverts, l'arrangement et l'orientation des voisins associés aux configurations « maximales » et « minimales » des 11 orientations étudiées. Pour les configurations maximales, environ 75% des grains axiaux (resp. latéraux) ont un module supérieur (resp. inférieur) au module d'Young macroscopique (115GPa). Pour les grains ouverts, presque tous les voisins en profondeur ont un module inférieur à 110GPa dans les configurations maximales.

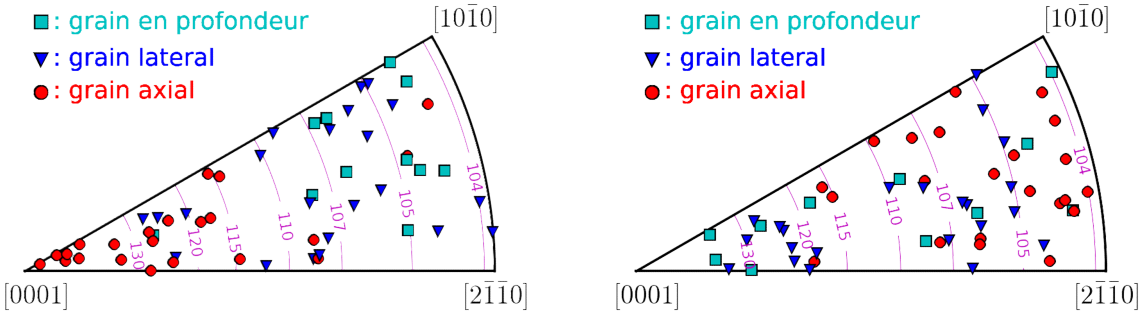
Dans les configurations minimales, les grains axiaux n'atteignent jamais des valeurs de module d'Young élevées, alors que, pour les grains latéraux, cela devient plus fréquent qu'avec les configurations maximales.



a. Configurations Max, GF

b. Configurations Min, GF

Figure 4-23 : Orientation des différents types de voisins d'un grain central des réalisations conduisant au facteur de Schmid effectif maximal (a=configurations maximales) et minimal (b=configurations minimales) pour les 11 orientations étudiées (grain central fermé).



a. Configurations Max, GO

b. Configurations Min, GO

Figure 4-24 : Orientation des différents types de voisins d'un grain central des réalisations conduisant au facteur de Schmid effectif maximal (a=configurations maximales) et minimal (b=configurations minimales) pour les 11 orientations étudiées (grain central ouvert).

4.2.5.3 Etude de clusters de grains spécifiques

Dans cette partie, on reprend l'étude décrite au chapitre 3 (paragraphe 3.4.3) dans le cas du 316L en l'adaptant à celui du TA6V. Ainsi, une série de 200 simulations a été réalisée avec un grain central d'orientation [B.O.b.B.] et avec une morphologie d'agrégats basée sur des grains hexagonaux alignés dans la profondeur (morphologie H.A.). La Figure 4-25 représente le grain central en rouge et la première couronne de voisins en surface pour la configuration étudiée. Pour les 200 réalisations, l'orientation des grains, hormis le grain central, est tirée aléatoirement. Le chargement appliqué correspond à une déformation macroscopique totale de 0.1% suivant la direction X.

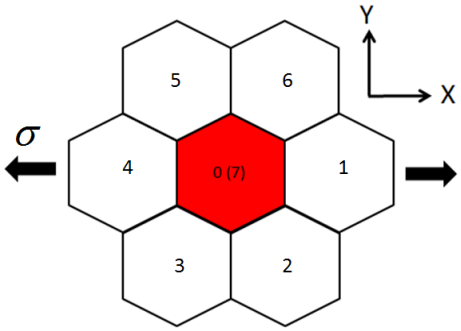


Figure 4-25 : Arrangement et numérotation des voisins du grain central (agrégat H.A.).

Les facteurs de Schmid effectifs extrémaux obtenus, ainsi que les contraintes moyennes correspondantes par composante, sont donnés dans le Tableau 4-17.

	$\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$	$\langle\sigma_{22}\rangle_{Vg}$	$\langle\sigma_{33}\rangle_{Vg}$	$\langle\sigma_{12}\rangle_{Vg}$	$\langle\sigma_{13}\rangle_{Vg}$	$\langle\sigma_{23}\rangle_{Vg}$	μ_{eff}^{gk}
Config. Max.	126.7	7.0	0.5	-0.5	-1.2	-1.1	0.550
Config. Min.	111.1	0.7	-1.1	-1.1	-2.1	0.0	0.488

Tableau 4-17 : Facteur de Schmid effectif et contraintes dans un grain central [B.O.b.B.] des 2 réalisations conduisant au facteur de Schmid effectif maximal (« config. max. ») et minimal (« config. min. »).

Le facteur de Schmid effectif maximal (resp. minimal) vaut 0.55 (resp. 0.488). Ces valeurs sont relativement proches de celles obtenues précédemment pour un grain ouvert (G.O.) de même orientation (valeur maximale de 0.557 et minimale de 0.475). Les écarts constatés entre les 2 séries sont liés à la sensibilité importante des valeurs extrêmes au tirage d'orientation. Un nombre de réalisations beaucoup plus important devrait être considéré pour stabiliser l'évaluation des valeurs extrêmes.

La Figure 4-26 décrit l'arrangement des voisins - en ne considérant que les voisins de la première couronne en surface (grains 1-6) et le voisin en profondeur (grain 7) - pour les 2 réalisations qui ont conduit au facteur de Schmid effectif maximal (appelée « configuration max », cf. points rouges) et minimal (appelée « configuration min », cf. points bleus).

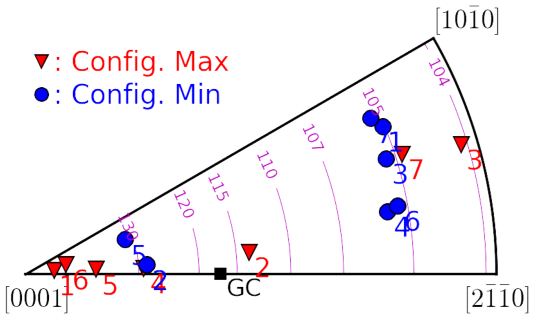


Figure 4-26 : Grains voisins de 2 configurations extrêmes.

Dans la configuration maximale, 4 des voisins en surface, dont les 2 voisins axiaux (grains 1 et 4) présentent un module d'Young élevé (>130 GPa) et le voisin en profondeur (grain 7) a un module faible.

Dans la configuration minimale, tous les voisins présentent un module faible (150-106 GPa) sauf 2 voisins latéraux en surface (grains 2 et 5) dont le module est élevé (~130 GPa). Ces résultats sont donc conformes à ceux obtenus au chapitre 3.

Ensuite, sur la base de ces 2 réalisations extrémales, on définit 6 configurations (ou cas) spécifiques. Pour les 3 premières, à l'exception des grains voisins 1 à 6, l'orientation des grains est la même que dans la configuration maximale. Pour les 3 suivantes, à l'exception des grains voisins 1 à 6, l'orientation des grains est la même que dans la configuration minimale. On obtient alors les 6 cas suivants:

- cas 1: grains axiaux [0001] et latéraux [$2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0$], les autres issus de la « config. max. »
- cas 2: grains axiaux [$2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0$] et latéraux [0001], les autres issus de la « config. max. »
- cas 3: grains axiaux et latéraux [B.O.b.B], les autres issus de la « config. max. »
- cas 4: grains axiaux [0001]et latéraux [$2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0$], les autres issus de la « config. min. »
- cas 5: grains axiaux [$2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0$] et latéraux [0001], les autres issus de la « config. min. »
- cas 6: grains axiaux et latéraux [B.O.b.B], les autres issus de la « config. min. »

Ces configurations sont définies de façon analogue à celles décrites au chapitre 3 sur la Figure 3.32 dans le cas du 316L. L'orientation [0 0 0 1] définit un voisin rigide (module d'Young maximal) et « dur » (facteur de Schmid nul), celle-ci étant utilisée « à la place » de l'orientation [111] des matériaux CFC. Réciproquement, l'orientation [$2\,\bar{1}\,\bar{1}\,0$] définit un voisin souple (module d'Young minimal) et « doux » (facteur de Schmid relativement élevé, ~0.43), celle-ci étant utilisée « à la place » de l'orientation [100] des matériaux CFC.

La Figure 4-27 représente la contrainte axiale normalisée et le facteur de Schmid effectif dans le grain central des principaux cas de figure, en classant les valeurs dans l'ordre décroissant. Le détail des valeurs est donné dans le Tableau 4-18 pour tous les cas.

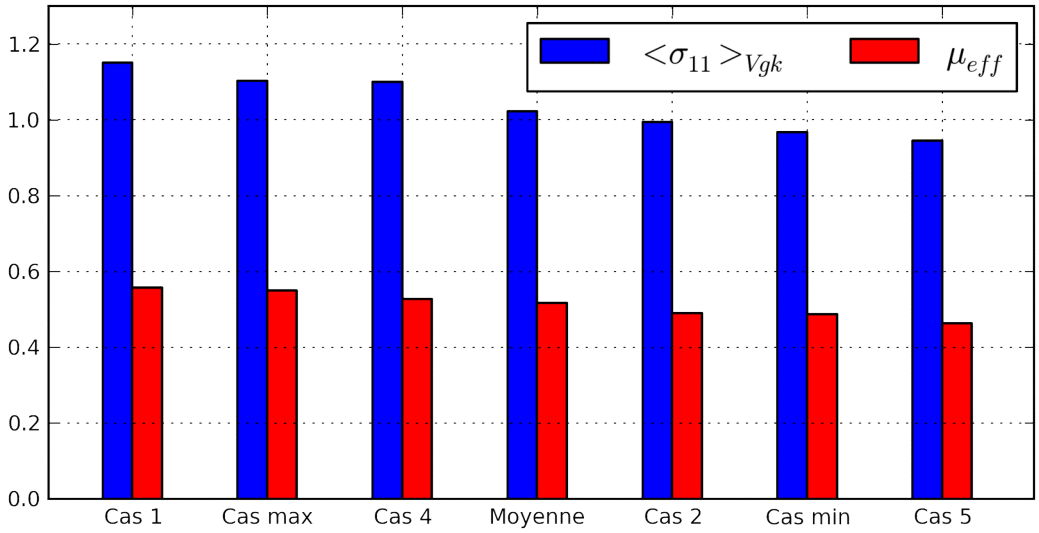


Figure 4-27 : Moyenne de la contrainte axiale normalisée et du facteur de Schmid effectif pour les différents cas étudiés.

	Cas 1	Cas max	Cas 4	Cas 3	Moyenne	Cas 6	Cas 2	Cas min	Cas 5
$\langle\sigma_{11}\rangle_{V_{gk}}$	1.152	1.104	1.100	1.059	1.023	1.009	0.994	0.968	0.946
μ_{eff}	0.558	0.550	0.528	0.523	0.518	0.493	0.491	0.488	0.463

Tableau 4-18 : Moyenne de la contrainte axiale normalisée et du facteur de Schmid effectif pour les différents cas étudiés.

Le cluster de grains de surface imposé dans les cas 1 et 4 (voisins axiaux rigides et voisins latéraux souples) conduit bien à une contrainte axiale et un facteur de Schmid effectif supérieurs aux valeurs moyennes. En imposant cette première couronne de voisins en surface avec, pour les autres grains, les orientations de la configuration maximale (cas 1), on obtient le facteur de Schmid effectif le plus élevé. Réciproquement, le cluster des cas 2 et 5 (voisins axiaux souples et voisins latéraux rigide) conduit à des valeurs inférieures à celles obtenues en moyenne. Associé à la configuration minimale pour les autres grains (cas 5), il conduit au facteur de Schmid le plus faible. L'influence de ce cluster de grains (par exemple en comparant le cas 1 au cas 2, où les autres grains sont issus de la configuration maximale, idem avec les cas 4 et 5 basés pour la configuration minimale) est plus forte que celle des autres grains (en comparant les cas 1 et 4 où la même couronne de premiers voisins est imposée, idem en comparant les cas 2 et 5).

4.3 Simulations sur agrégats texturés

4.3.1 Présentation des simulations réalisées et définition des textures

Les simulations présentées ici visent à rendre compte de l'influence d'une texture cristallographique sur la distribution des champs de contraintes au sein du grain central. Elles ont été effectuées avec la morphologie G.F. uniquement. Seulement 5 des orientations étudiées dans la partie précédente ont été considérées: [B.O.b.A.], [B.O.p.B.], [5], [6] et [7] (voir paragraphe 4.2.1).

Contrairement à la partie précédente (et au chapitre 3), l'orientation des grains (sauf celle du grain central qui est fixée parmi les 5 orientations citées) n'est plus tirée complètement aléatoirement mais au sein d'une liste d'orientations définie pour décrire une texture qui est observée au sein des macrozones. Deux textures (i.e. 2 listes d'orientations) ont été établies à partir des 2 larges cartes EBSD présentées sur la Figure 4-28. Une analyse des textures non présentée ici a montré qu'aucune tendance marquée n'apparaît à l'échelle des cartographies alors que les macrozones sont individuellement très texturées.

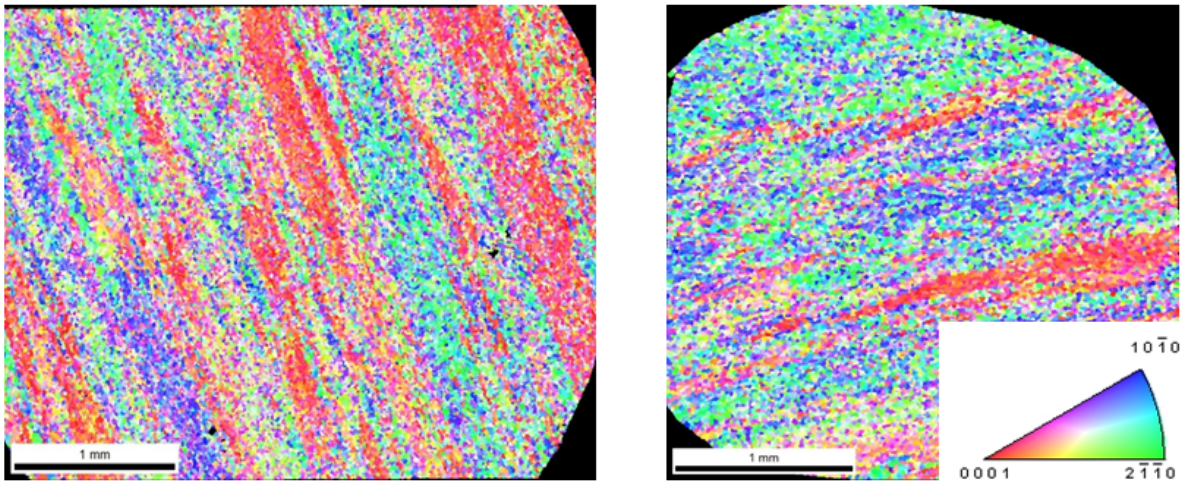
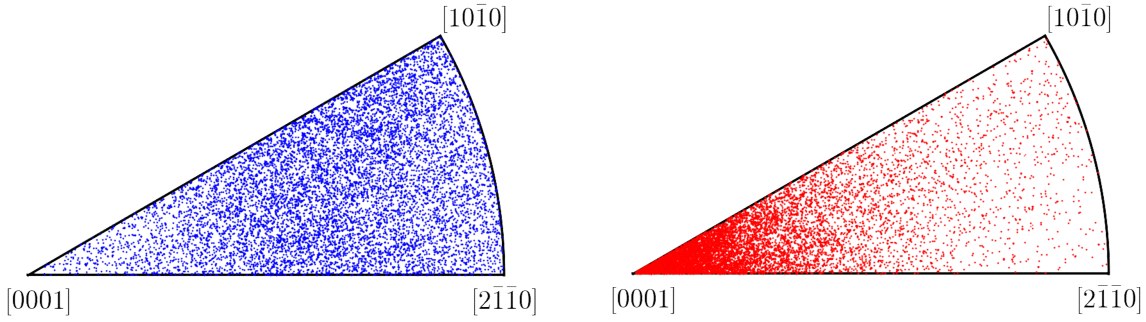


Figure 4-28 : Cartes EBSD utilisées pour établir les 2 listes d'orientations (la carte de gauche est composée de 33312 nodules, celle de droite de 17610).

Deux listes d'orientations, appelées texture 1 et texture 2, ont été construites en sélectionnant plusieurs régions au sein des macrozones dans les 2 cartes précédentes. La texture 1 est construite avec les orientations présentes au sein des macrozones à dominante « bleue ou verte », tandis que la texture 2 est construite avec les macrozones à dominante « rouge-orange ». La Figure 4-29 représente l'orientation des grains sélectionnés pour ces 2 textures. Les grains de la texture 1 et la texture 2 présentent un angle θ entre l'axe c de la maille hexagonale compacte et la direction de sollicitation majoritairement supérieur et inférieur à 45°, respectivement. La sélection correspond à 9575 nodules pour la texture 1 et 9125 pour la texture 2. Les 2 listes d'orientation établies finalement correspondent aux distributions représentées sur la Figure 4-30.



a. Texture 1 b. Texture 2

Figure 4-29 : Orientations cristallographiques des grains pour 2 textures.

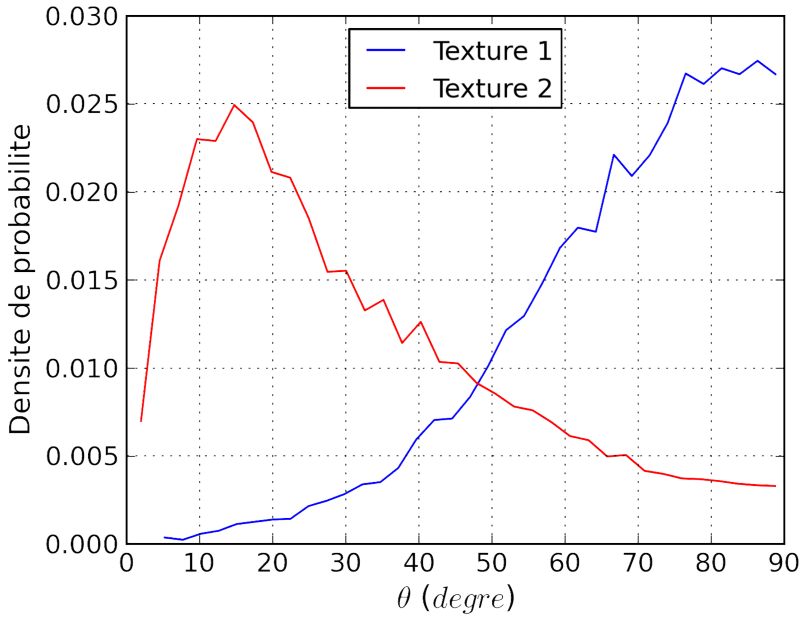


Figure 4-30 : Distribution de l'angle θ (°) des grains pour 2 textures définies.

Les paramètres choisis pour les séries de simulations présentées dans cette partie sont les mêmes que ceux utilisés précédemment. En particulier, la déformation macroscopique totale imposée est de 0.1% suivant la direction X. De plus le nombre de réalisations considéré pour chaque série a été maintenu à 140. Compte-tenu de la plus faible anisotropie élastique de la phase α du titane devant celle du 316L, et de par la présence de la texture qui réduit la diversité des configurations de voisinage du grain central, l'utilisation de 140 réalisations devrait conduire à une erreur d'échantillonnage plus faible que celle évaluée au chapitre 2 dans le cas du 316L non-texturé (cf. paragraphe 2.7.3). L'influence de la texture sur le nombre de réalisations à considérer a été discutée dans un autre contexte par Priser (Priser 2011).

Ainsi, dans cette partie, 10 nouvelles séries de simulations seront effectuées (pour 5 orientations cristallographiques du grain central, 2 textures cristallographiques et la morphologie G.F. uniquement).

On attire l'attention sur le fait que les statistiques de champs ainsi obtenues dans le grain central ne décrivent pas celles d'un grain appartenant à une macrozone, mais celles d'un grain au sein d'un polycristal présentant une texture donnée uniformément répartie. L'influence des textures étudiée ici s'éloigne donc de la réalité plus complexe du matériau étudié. Dans la partie 3.4, la distribution des contraintes subies par un grain au sein de macrozones sera évaluée, sur la base des résultats présentés ici, en introduisant une échelle intermédiaire d'une façon simple et pragmatique.

4.3.2 Analyse des contraintes

4.3.2.1 Analyse des contraintes au sein des agrégats

Les moyennes et les écarts-types des contraintes au sein des N agrégats sont reportés dans le Tableau 4-19 et le Tableau 4-20 pour les 2 séries de simulations réalisées avec un grain central d'orientation [B.O.b.A.] et avec les 2 textures différentes. Pour une texture donnée, les mêmes résultats sont obtenus quelle que soit l'orientation du grain central. Dans tous les cas, on vérifie que l'état de contrainte moyen est bien uniaxial.

Avec les valeurs en MPa reportées dans le Tableau 4-19, on compare l'état de contrainte moyen de 2 agrégats de texture différente soumis au même niveau de déformation totale. Dans ce cas, la contrainte axiale moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ pour la texture 2 est la plus élevée car cette texture correspond à une majorité de grains dont le module d'Young est élevé, variant entre 117GPa et 143GPa. On observe la contrainte axiale moyenne la plus faible pour la texture 1, une valeur intermédiaire ayant été obtenue dans le cas non-texturé.

		$\langle . \rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
Texture 1	σ_{11}	110.6	4.7	0.6	4.7
	σ_{22}	0.0	7.4	0.0	7.4
	σ_{33}	0.0	6.5	0.0	6.5
	σ_{12}	0.1	2.6	0.2	2.6
	σ_{13}	0.0	2.2	0.1	2.2
	σ_{23}	-0.3	4.3	0.3	4.3
Texture 2	σ_{11}	128.0	7.8	1.2	7.9
	σ_{22}	0.0	5.5	0.0	5.5
	σ_{33}	0.0	4.8	0.0	4.8
	σ_{12}	-0.2	2.9	0.3	2.9
	σ_{13}	0.0	2.8	0.2	2.8
	σ_{23}	-0.2	2.6	0.2	2.6

Tableau 4-19 : Moyennes et écarts-types des contraintes (MPa) au sein des N agrégats obtenus pour les 2 textures et un grain central d'orientation [B.O.b.A.].

En considérant les valeurs normalisées par la contrainte axiale moyenne $\langle\sigma_{11}\rangle_V$ (Tableau 4-20), les résultats obtenus pour les 2 textures correspondent évidemment au même état de contrainte moyen uniaxial unitaire. La différence entre les textures porte sur la dispersion des contraintes. Dans tous les cas, la contribution inter-réalisation est quasiment inexistante; l'écart-type inter-réalisation vaut au maximum 1% pour la composante axiale σ_{11}. L'écart-type total de la composante σ_{11} est égal à environ 4% pour la texture 1 et environ 6% pour la texture 2, cette dernière étant très proche de la valeur obtenue dans le cas non-texturé. La dispersion plus importante constatée dans la texture 2 est liée au fait que, pour la majorité des grains, le module d'Young est compris entre 117GPa et 143GPa, alors que, pour la texture 1, il varie majoritairement dans une plage plus réduite (de 104GPa à 117GPa).

		$\langle\cdot\rangle_V$	SD_V^{intra}	SD_V^{inter}	SD_V
Texture 1	σ_{11}	1.00	0.04	0.01	0.04
	σ_{22}	0.00	0.07	0.00	0.07
	σ_{33}	0.00	0.06	0.00	0.06
	σ_{12}	0.00	0.02	0.00	0.02
	σ_{13}	0.00	0.02	0.00	0.02
	σ_{23}	0.00	0.04	0.00	0.04
Texture 2	σ_{11}	1.00	0.06	0.01	0.06
	σ_{22}	0.00	0.04	0.00	0.04
	σ_{33}	0.00	0.04	0.00	0.04
	σ_{12}	0.00	0.02	0.00	0.02
	σ_{13}	0.00	0.02	0.00	0.02
	σ_{23}	0.00	0.02	0.00	0.02

Tableau 4-20 : Moyennes et écarts-types des contraintes (normalisées par $\langle\sigma_{11}\rangle_V$) au sein des N agrégats obtenus pour les 2 textures et un grain central d'orientation [B.O.b.A.].

Dans tous les cas, la déformation axiale moyenne suivant la direction de sollicitation (X) est égale à la valeur imposée (0.1%). Les résultats obtenus sur les autres composantes correspondent à un comportement quasi isotrope. En effet, pour la texture 1, on obtient: $\langle\varepsilon_{22}\rangle_V$=0.032%, $\langle\varepsilon_{33}\rangle_V$=0.034% et $\langle\varepsilon_{12}\rangle_V=\langle\varepsilon_{13}\rangle_V$=0%, $\langle\varepsilon_{23}\rangle_V$=0.002%. Cela correspond à un module d'Young effectif de 110.6GPa et à un coefficient de Poisson effectif compris entre 0.32 et 0.34. Pour la texture 2, on obtient: $\langle\varepsilon_{22}\rangle_V=\langle\varepsilon_{33}\rangle_V$=0.03% et $\langle\varepsilon_{12}\rangle_V=\langle\varepsilon_{13}\rangle_V$=0%, $\langle\varepsilon_{23}\rangle_V$=0.001%, ce qui correspond à un module d'Young effectif de 128GPa et un coefficient de Poisson effectif de 0.3.

4.3.2.2 Analyse des contraintes au sein des grains centraux

La Figure 4-31 et la Figure 4-32 représentent les contraintes axiales moyennes $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ pour les 5 orientations étudiées au sein des 3 textures considérées (textures 1 et 2, ainsi que la texture isotrope dont les résultats ont été présentés précédemment au paragraphe 4.2.2.2). Les valeurs précises sont reportées par composante dans le Tableau 4-21 (valeurs en MPa) et le Tableau 4-22 (valeurs normalisées).

La Figure 4-31 et le Tableau 4-21 indiquent les valeurs en MPa obtenues avec la même déformation totale imposée (0.1%) pour les 3 textures. Pour un type de texture donné, la contrainte axiale moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ dans le grain central dépend de son orientation et décroît dans l'ordre suivant: [5], [B.O.b.A.], [6], [7] puis [B.O.p.B.] (ce qui correspond à l'ordre décroissant des modules d'Young de chaque orientation). Pour une orientation donnée et le même niveau de déformation totale imposé, la contrainte axiale moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ dans le grain central est minimale dans la texture 1 et maximale dans la texture 2, une valeur intermédiaire étant obtenue dans le cas non-texturé. Cet ordre est le même que celui des contraintes axiales moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{V}$ dans les agrégats. A une niveau de déformation total donné, la contrainte moyenne dans un agrégat présentant la texture 2 est plus élevée (les orientations de cette texture étant majoritairement plus rigides) et impose donc au grain central une contrainte en moyenne plus élevée qu'au sein des 2 autres textures.

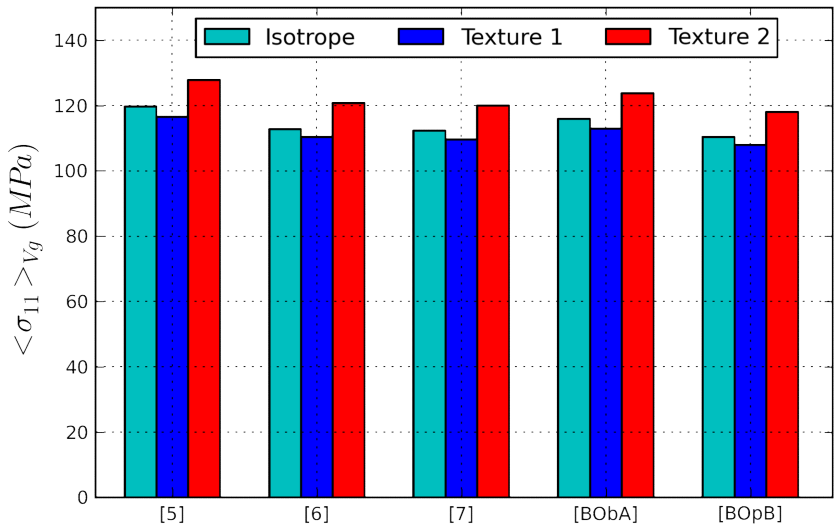


Figure 4-31 : Contrainte moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ (MPa) pour les 5 orientations et les 3 textures étudiées.

La Figure 4-32 et le Tableau 4-22 indiquent les valeurs des contraintes normalisées par la contrainte axiale macroscopique $\langle \sigma_{11} \rangle_V$ de la série correspondante, celle-ci dépendant de la texture considérée. Les valeurs reportées décrivent alors la contrainte axiale moyenne du grain central lorsque l'agrégat est soumis à une contrainte moyenne unitaire. Pour une texture donnée, l'ordre des contraintes en fonction de l'orientation est inchangé (car les valeurs sont normalisée par la même contrainte axiale macroscopique). En revanche, pour une orientation donnée, l'ordre des contraintes en fonction de la texture est inversé. En effet, pour la texture 1 contenant majoritairement des orientations souples, la déformation axiale moyenne des agrégats est plus élevée que pour la texture 2 au même niveau de contrainte macroscopique. Ainsi, les agrégats de texture 1 imposent, en moyenne, au grain central une déformation - donc une contrainte - plus élevée qu'au sein des 2 autres textures contenant majoritairement des orientations plus rigides.

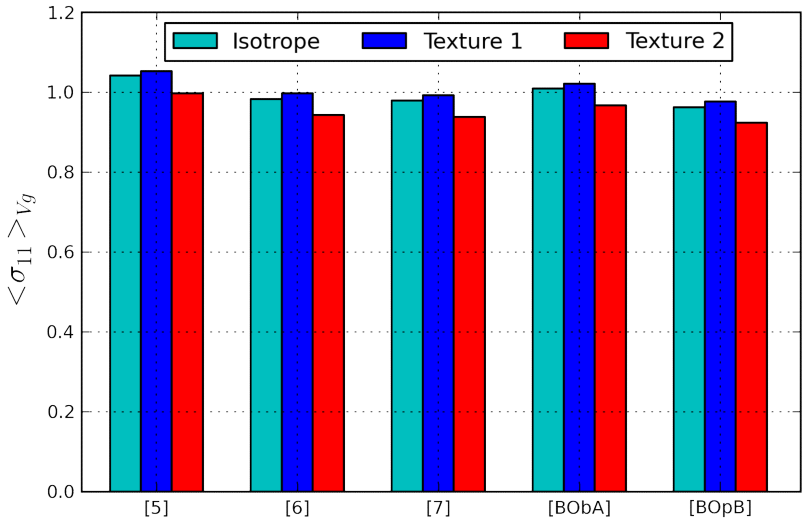


Figure 4-32 : Contrainte moyenne $\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$ (normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$) pour les 5 orientations et les 3 textures étudiées.

	Texture 1					Texture 2				
$\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$	[5]	[6]	[7]	[BObA]	[BOpB]	[5]	[6]	[7]	[BObA]	[BOpB]
σ_{11}	116.6	110.3	109.6	113.0	107.9	127.8	120.7	120.0	123.8	118.1
σ_{22}	-3.7	-4.1	-4.4	-3.6	-6.0	-1.2	-1.9	-2.2	-1.1	-3.8
σ_{33}	-2.4	2.0	2.6	0.1	4.5	0.8	5.3	5.9	3.0	8.0
σ_{12}	-3.7	-2.1	-1.7	-3.2	0.1	-4.2	-2.4	-2.0	-3.7	-0.1
σ_{13}	-0.1	-0.1	-0.1	0.0	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
σ_{23}	0.1	0.1	0.1	0.3	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1

Tableau 4-21 : Contraintes moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$ (MPa).

Aucune tendance claire ne se dégage quant à l'influence de la texture sur les contraintes moyennes des autres composantes. Le niveau de multiaxialité reste relativement faible. Les moyennes des composantes σ_{22}, σ_{33} et σ_{12} varient entre 1% et 5% de la contrainte axiale macroscopique, alors qu'elles sont inférieures à 1% pour les composantes σ_{23} et σ_{13}.

	Texture 1					Texture 2				
$\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$	[5]	[6]	[7]	[BObA]	[BOpB]	[5]	[6]	[7]	[BObA]	[BOpB]
σ_{11}	1.053	0.997	0.992	1.021	0.977	0.997	0.943	0.938	0.967	0.924
σ_{22}	-0.034	-0.037	-0.040	-0.032	-0.054	-0.009	-0.015	-0.017	-0.009	-0.030
σ_{33}	-0.022	0.018	0.023	-0.002	0.041	0.006	0.041	0.046	0.024	0.063
σ_{12}	-0.034	-0.019	-0.016	-0.030	0.001	-0.033	-0.019	-0.016	-0.029	-0.001
σ_{13}	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
σ_{23}	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001

Tableau 4-22 : Contraintes moyennes $\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$ (normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$).

L'écart-type total sur la composante σ_{11} est légèrement plus élevé dans le cas de la texture 2 (Tableau 4-23): il est de l'ordre de 4% dans la texture 2 et seulement de 3% dans la texture 1. On remarque que l'influence de la texture sur la dispersion est plus forte sur l'écart-type inter-granulaire. En revanche, on note la tendance inverse en ce qui concerne les 5 autres composantes des contraintes (données non-représentées): dans ce cas la dispersion est un peu plus importante pour la texture 1.

		$\langle \sigma_{11} \rangle_{Vg}$	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
Texture 1	[5]	1.053	0.029	0.017	0.034
	[6]	0.997	0.025	0.016	0.030
	[7]	0.992	0.025	0.016	0.030
	[BObA]	1.021	0.026	0.017	0.031
	[BOpB]	0.977	0.026	0.016	0.031
Texture 2	[5]	0.997	0.032	0.025	0.041
	[6]	0.943	0.033	0.024	0.041
	[7]	0.938	0.034	0.023	0.041
	[BObA]	0.967	0.032	0.024	0.040
	[BOpB]	0.924	0.035	0.023	0.042

Tableau 4-23 : Moyennes et écarts-types de la contrainte axiale (normalisés par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$).

Les figures suivantes représentent la distribution de la contrainte axiale σ_{11} au sein des grains centraux d'orientation [B.O.b.A.] (localement ou en moyenne par grain/réalisation) pour les 3 textures, indiquées en MPa pour la même déformation macroscopique (Figure 4-33) et en valeurs normalisées par la contrainte axiale macroscopique, i.e. obtenues à même contrainte macroscopique unitaire (Figure 4-34). On visualise clairement que la dispersion est plus faible au sein de la texture 1 (courbes bleues), en particulier la dispersion inter-granulaire (la distribution bleue pointillée est bien plus étroite que les autres). A même niveau de contrainte macroscopique (Figure 4-34), la majorité de la faction volumique des grains [B.O.b.A.] dans la texture 1 (courbe bleue continue) subit une contrainte axiale supérieure à la contrainte axiale moyenne des grains de même orientation dans la texture rouge (courbe rouge continue).

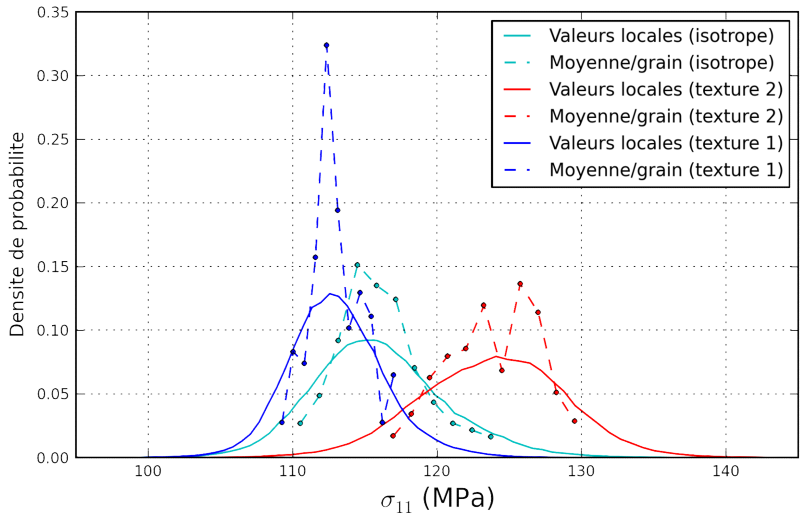


Figure 4-33 : Distribution de la contrainte axiale (MPa) au sein des N grains centraux G.F. d'orientation [B.O.b.A.] pour les 3 textures étudiées.

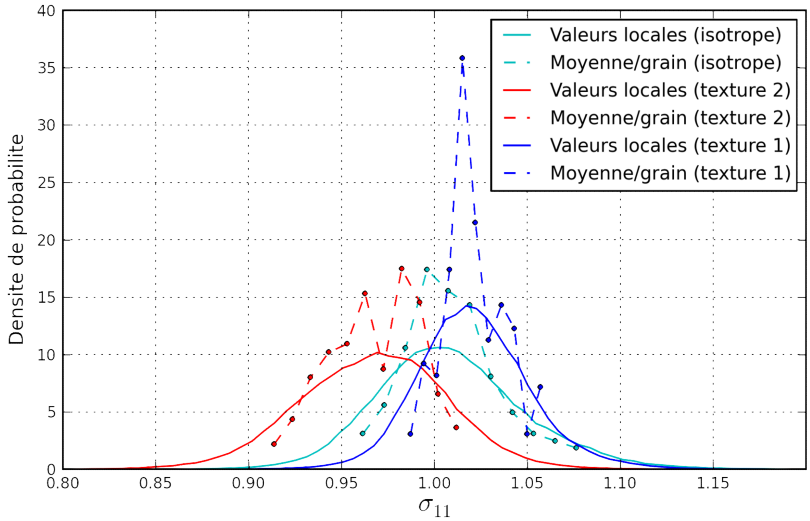


Figure 4-34 : Distribution de la contrainte axiale (normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$) au sein des N grains centraux G.F. d'orientation [B.O.b.A.] pour les 3 textures étudiées.

Les distributions obtenues pour toutes les composantes, pour l'orientation [B.O.b.A.], sont indiquées sur la Figure 4-35 pour la texture 1 et sur la Figure 4-36 pour la texture 2. En termes d'allure, les conclusions sont similaires à celles obtenues dans le cas non-texturé. Une loi normale fournit une description acceptable de la distribution des composantes σ_{11}, σ_{22} et σ_{12}. Un pic à proximité des valeurs nulles est visible sur la composante σ_{33}, de par la présence d'une surface libre, mais il reste assez modéré car il s'agit ici d'un grain fermé (il est d'ailleurs presque inexistant pour les composantes σ_{23} et σ_{13}).

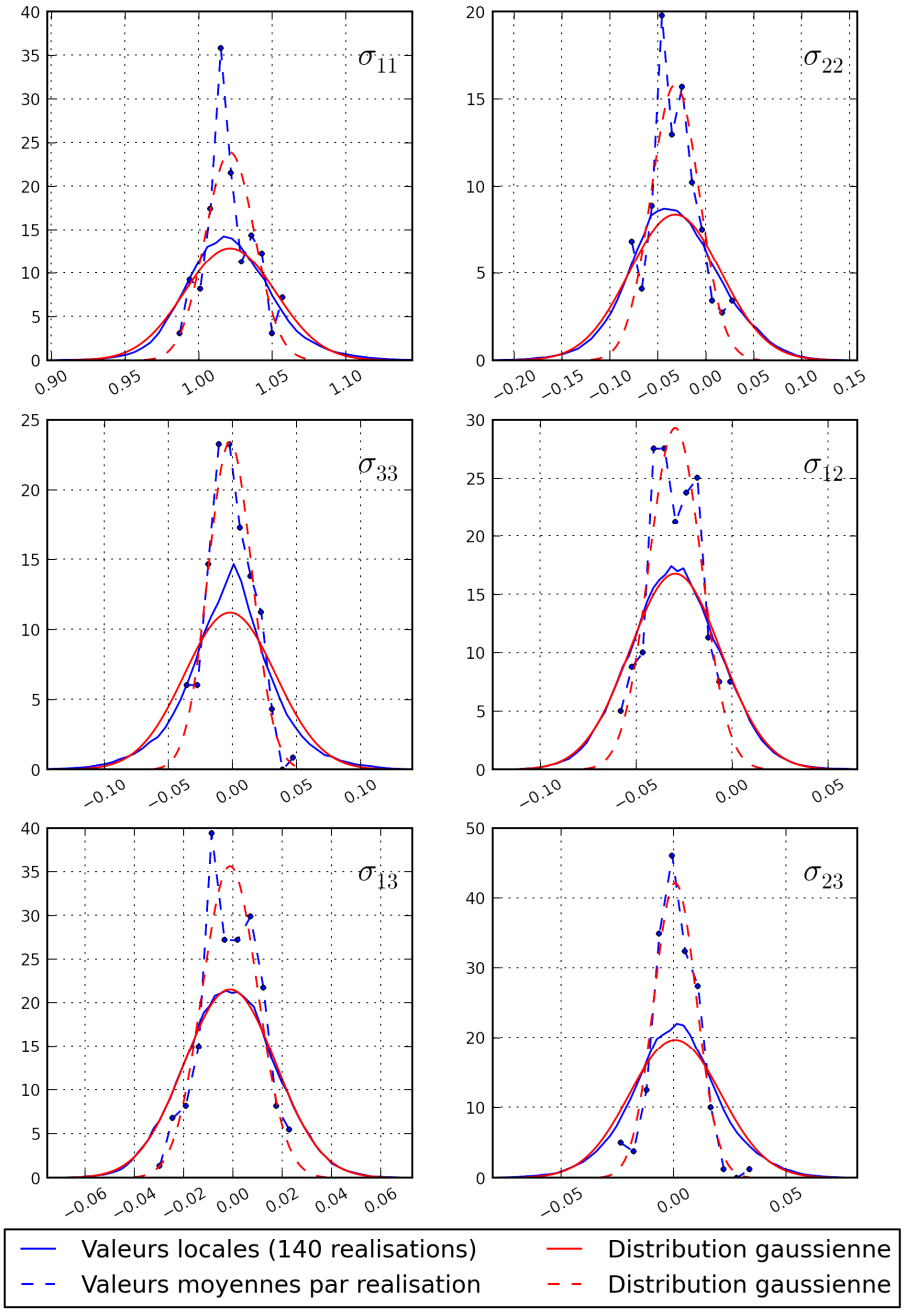


Figure 4-35 : Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central G.F. d'orientation [B.O.b.A.], texture 1.

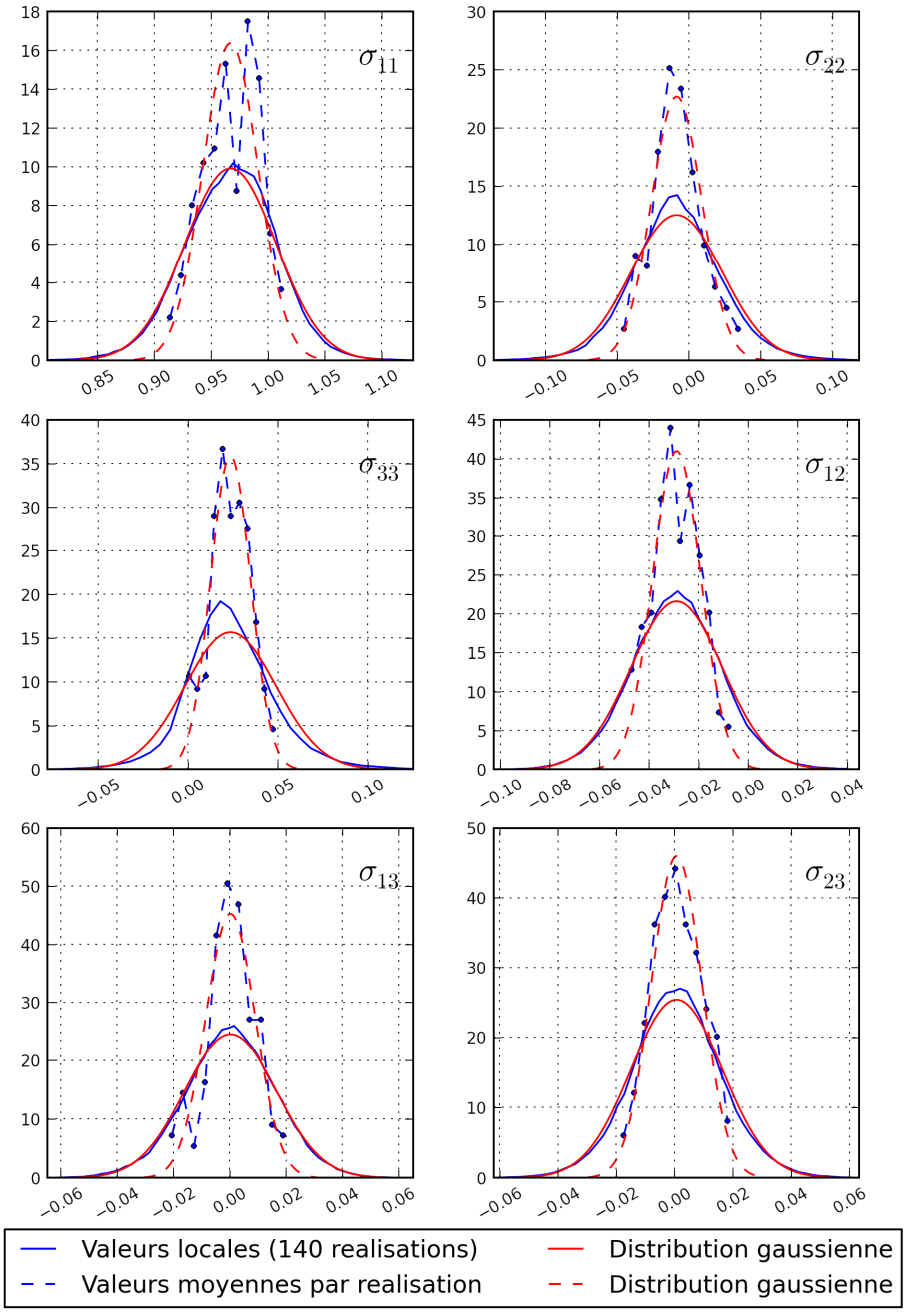


Figure 4-36 : Distribution des contraintes au sein des N grains centraux (valeurs normalisées par $\langle \sigma_{11} \rangle_V$); grain central G.F. d'orientation [B.O.b.A.], texture 2.

4.3.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif

La Figure 4-37 représente le facteur de Schmid effectif obtenu pour chacune des 5 orientations au sein des 3 textures étudiées. Les données détaillées sont indiquées dans le Tableau 4-24 (moyennes et écarts-types des cissions résolues obtenues pour la même déformation totale imposée aux agrégats) et dans le Tableau 4-25 (idem en termes de facteur de Schmid effectif, i.e. de cission résolue normalisée par la contrainte axiale macroscopique).

De façon similaire à la contrainte axiale, la présence d'une texture n'affecte par l'ordre des facteurs de Schmid effectifs des 5 orientations. Pour une texture donnée, le facteur de Schmid effectif maximal est atteint pour l'orientation [B.O.b.A.], puis pour l'orientation [B.O.p.B.] suivi de près par les orientations [5] et [6] (présentant pratiquement le même facteur de Schmid effectif). La faible valeur est obtenue pour l'orientation [7].

L'effet de la texture sur la cission résolue est le même que celui constaté sur la contrainte axiale. A même contrainte unitaire imposée aux agrégats (i.e. en considérant les cissions normalisées = facteur de Schmid effectif), la texture 2, plus rigide donc se déformant moins que les 2 autres textures, entraîne dans le grain central des cissions résolues plus faibles qu'au sein des autres textures.

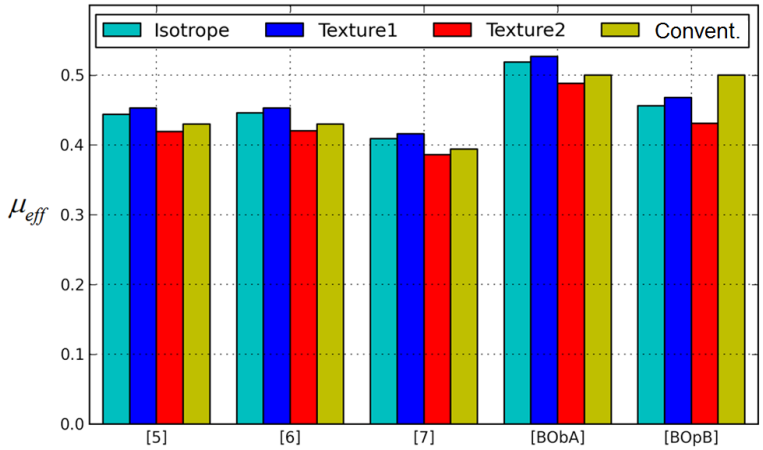


Figure 4-37 : Facteur de Schmid effectif pour les 5 orientations et les 3 textures étudiées.

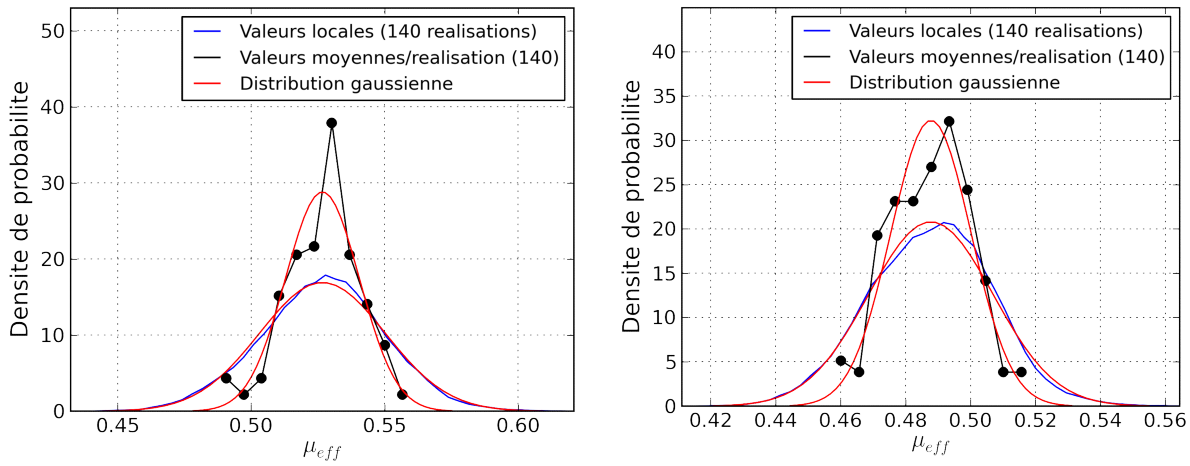
		Texture 1				Texture 2			
Orientation	SG	τ	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	τ	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
[5]	Basal	50.2	2.2	1.5	2.6	53.6	1.8	1.5	2.3
[6]	Basal	50.1	2.1	1.5	2.6	53.8	2.0	1.6	2.5
[7]	Basal	46.0	2.1	1.5	2.6	49.3	2.0	1.5	2.5
[BObA]	Basal	58.3	2.1	1.5	2.6	62.4	1.9	1.6	2.5
[BOpB]	Pris	51.7	1.6	1.0	1.9	55.1	2.0	1.3	2.4

Tableau 4-24 : Moyennes et écarts-types de la cission résolue (MPa) pour les 5 orientations étudiées au sein des 2 textures.

			Texture 1				Texture 2			
Orientation	SG	μ	μ_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	μ_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
[5]	Basal	0.430	0.453	0.019	0.014	0.024	0.419	0.014	0.011	0.018
[6]	Basal	0.430	0.453	0.019	0.013	0.023	0.420	0.015	0.012	0.020
[7]	Basal	0.394	0.416	0.019	0.013	0.023	0.386	0.016	0.012	0.020
[BObA]	Basal	0.500	0.527	0.019	0.013	0.023	0.488	0.015	0.012	0.019
[BOpB]	Pris	0.500	0.468	0.015	0.009	0.017	0.431	0.016	0.010	0.019

Tableau 4-25 : Facteur de Schmid effectif et écarts-types associés pour les 5 orientations étudiées au sein des 2 textures.

La dispersion de la cission résolue est légèrement plus importante dans le cas de la texture 1, ce qui était le cas pour 5 composantes des contraintes à l'exception de la composante axiale. La distribution du facteur de Schmid effectif peut être bien décrite par une loi normale (Figure 4-38). En comparant sur le même graphique les distributions du facteur de Schmid effectif de l'orientation [B.O.b.A.] au sein des 3 textures (Figure 4-39), la situation est tout à fait semblable à celle observée pour la contrainte axiale (Figure 4-34). Toutefois, les zones de recouvrement des 3 distributions sont légèrement plus importantes ici.



a. Texture 1 b. Texture 2

Figure 4-38 : Distribution du facteur de Schmid effectif au sein des 140 grains centraux d'orientation [B.O.b.A] dans 2 textures : a. Texture 1 ; b. Texture 2.

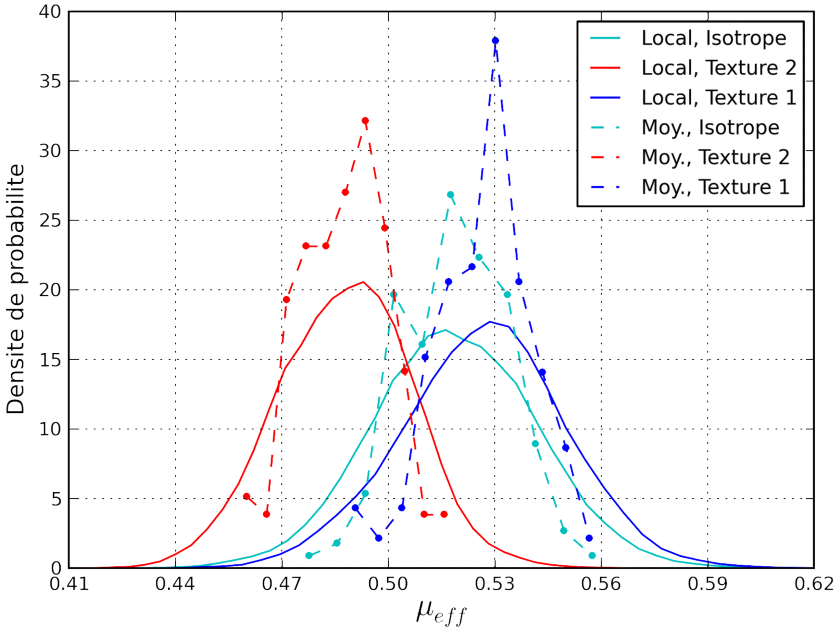


Figure 4-39 : Distribution du facteur de Schmid effectif au sein de 140 grains centraux d'orientation [B.O.b.A.] pour les 3 textures étudiées.

4.3.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage

La Figure 4-40 représente l'indicateur d'amorçage effectif obtenu pour les 5 orientations au sein des 3 textures étudiées. Les valeurs précises sont données dans le Tableau 4-26. Comme l'indicateur est défini en normalisant la cission résolue et la contrainte normale par la contrainte axiale macroscopique, les valeurs indiquées ici correspondent à celles obtenues au sein de polycristaux de texture différente soumis à la même contrainte de traction macroscopique unitaire. Dans ce cas, comme cela avait été observé pour la contrainte axiale du grain central et le facteur de Schmid effectif, l'indicateur d'amorçage effectif pour la texture 2 (resp. texture 1) est systématiquement plus faible (resp. plus élevée) que celui obtenu dans un polycristal non-texturé.

Pour une texture donnée, l'ordre des indicateurs est le même que celui déterminé dans le cas non-texturé (du moins pour les 5 orientations étudiées). Ainsi, les indicateurs maximaux sont atteints pour les orientations [5] et [B.O.b.A]. L'indicateur minimal est obtenu pour l'orientation [7], une valeur légèrement supérieure étant constatée pour l'orientation [6]. L'orientation [B.O.p.B] présente un indicateur de valeur intermédiaire.

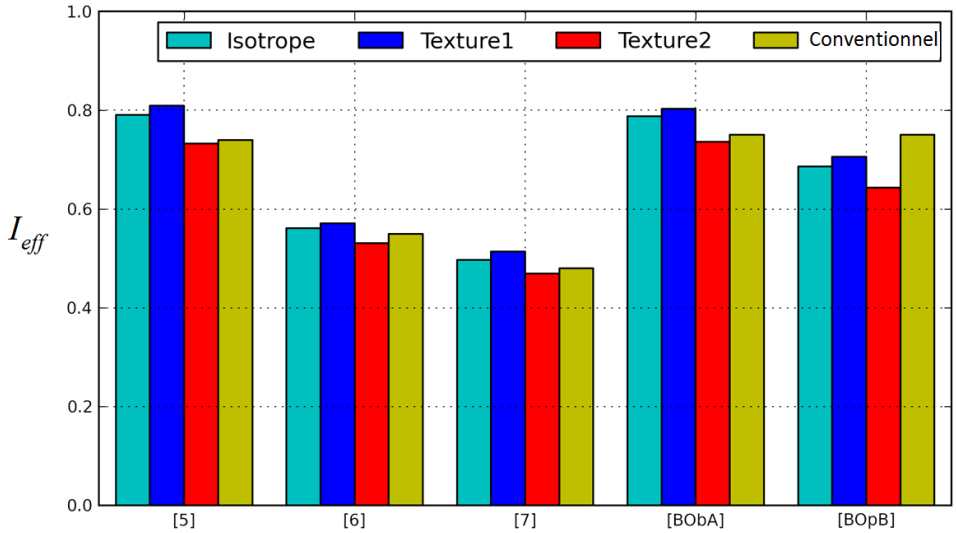
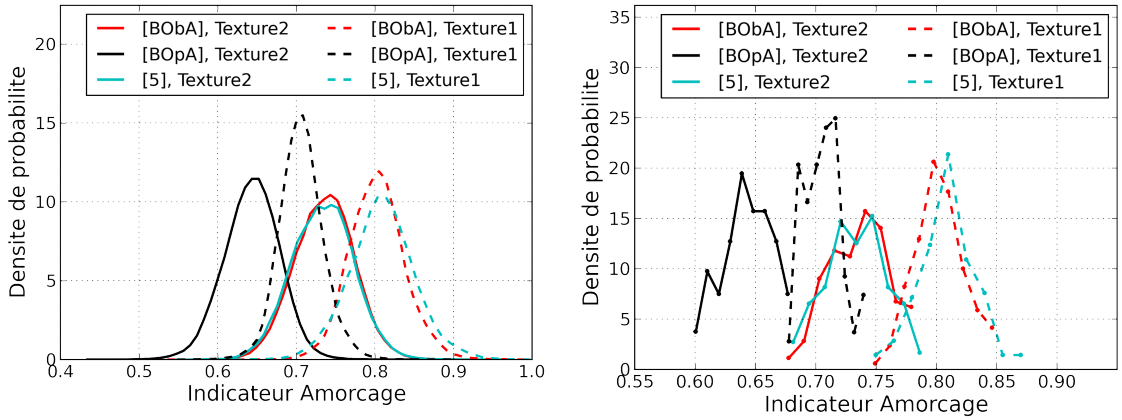


Figure 4-40 : Indicateur d'amorçage effectif pour les 5 orientations et les 3 textures étudiées.

			Texture 1				Texture 2			
Orient.	SG	I	I_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	I_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
[5]	Basal	0.74	0.809	0.035	0.024	0.042	0.733	0.030	0.025	0.039
[6]	Basal	0.55	0.571	0.025	0.017	0.031	0.531	0.025	0.019	0.031
[7]	Pris	0.48	0.514	0.021	0.016	0.027	0.469	0.023	0.016	0.028
[BObA]	Basal	0.75	0.803	0.029	0.019	0.035	0.736	0.029	0.024	0.038
[BOpB]	Pris	0.75	0.706	0.023	0.016	0.028	0.643	0.029	0.021	0.035

Tableau 4-26 : Indicateur d'amorçage effectif des 5 orientations étudiées au sein des 2 textures considérées.

La distribution de l'indicateur d'amorçage est représentée pour les 2 textures considérées et 3 des orientations étudiées sur la Figure 4-41.



a. Valeurs locales

b. Moyennes par grain

Figure 4-41 : Distribution de l'indicateur d'amorçage effectif pour 3 des orientations étudiées et les 2 textures considérées : a. valeurs locales, b. valeurs moyennes par grain.

4.4 Influence des textures sous forme de macrozones

Dans la partie précédente, deux textures cristallographiques ont été utilisées pour définir, dans les séries de simulations étudiées, l'orientation des grains des agrégats, comme si ces textures étaient réparties uniformément en tout point du polycristal. Or, cela ne correspond pas à l'alliage de TA6V étudié ici, dont la présentation a été faite au chapitre 1 (cf paragraphe 1.2.2.1). En effet, les 2 textures définies précédemment sont observées au sein de bandes de quelques millimètres de longueur et de quelques centaines de micromètres d'épaisseur, appelées macrozones. L'organisation spatiale des orientations devient alors un point essentiel.

Dans cette partie, la démarche décrite au paragraphe 4.4.1 vise à prendre en compte la présence de la texture sous la forme de macrozones, d'une façon assez simple et pragmatique, en corrigeant les résultats obtenus précédemment par l'introduction d'une échelle intermédiaire correspondant à celle des macrozones.

4.4.1 Prise en compte simplifiée des macrozones

Le modèle simplifié suivant a été défini pour évaluer l'état mécanique moyen au sein d'une macrozone d'une texture donnée. La méthode choisie consiste à considérer des macrozones au sein du matériau non texturé. Deux bandes, en forme de parallélépipède rectangle, sont insérées en surface d'une matrice, conformément à la Figure 4-42.

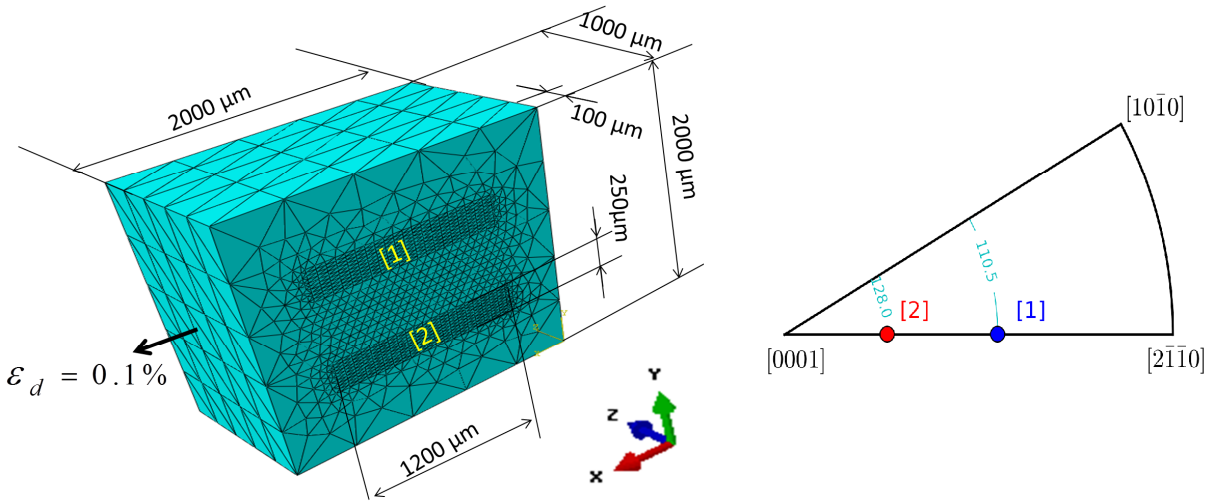


Figure 4-42 : Modélisation simplifiée des macrozones.

Le comportement d'une bande, idéalisant une macrozone, est supposé être celui d'un cristal hexagonal dont le module d'Young E_t est égal au module moyen des orientations de la macrozone considérée. Le comportement de la matrice est le comportement élastique linéaire isotrope du polycristal non-texturé obtenu dans la partie 4.2 de ce chapitre. Le comportement de la matrice et des 2 bandes est décrit dans le Tableau 4-27.

Matrice	élasticité isotrope	E = 115 GPa , $\nu = 0.33$
Bande [1] supérieure	élasticité cristalline (orientation [1])	E_t = 110.5 GPa
Bande [2] inférieure	élasticité cristalline (orientation [2])	E_t = 128 GPa

Tableau 4-27 : Description du comportement de la matrice et des 2 bandes.

La bande [1] supérieure décrit donc une macrozone de texture 1 et la bande [2] inférieure une macrozone de texture 2.

Les conditions aux limites appliquées aux modèles sont définies afin d'y générer un état de contrainte macroscopiquement uniaxial. Les 4 faces perpendiculaires à la direction de traction X sont libres de charge. Le déplacement uniforme imposé sur les faces perpendiculaires à la direction X correspond à une déformation macroscopique axiale de 0.1%. Le Tableau 4-28 et le Tableau 4-29 présentent respectivement les contraintes et les déformations moyennes calculées dans chaque bande et dans le modèle entier, c'est-à-dire la matrice et les 2 bandes ($\langle . \rangle_{Macro}$). L'état de contrainte macroscopique est bien uniaxial avec la contrainte de traction $\Sigma_{11}=<\sigma_{11}>_{Macro}$ égale à 115MPa. La contrainte axiale moyenne dans la bande 1 (schématisant une macrozone présentant la texture 1) est égale à 110.8MPa alors que celle dans la bande 2 (schématisant une macrozone présentant la texture 2) vaut 126.43MPa. Dans les bandes, les autres composantes ne sont pas nulles mais restent inférieures à 5% de la contrainte axiale macroscopique Σ_{11}. La déformation axiale moyenne de chaque bande s'écarte relativement peu de la valeur macroscopique (0.1%), alors que la différence est plus marquée sur les contraintes. Une hypothèse très simplificatrice pourrait consister à supposer les déformations uniformes (hypothèse de Voigt).

	σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
$\langle . \rangle_{Bande1}$	110.76	-5.17	1.18	-2.57	0.00	-0.04
$\langle . \rangle_{Bande2}$	126.43	-3.39	-0.29	-4.52	0.00	0.02
$\langle . \rangle_{Macro}$	115.02	0.00	0.00	-0.06	0.00	-0.02

Tableau 4-28 : Contraintes moyennes dans chaque bande et dans le modèle entier.

	ε_{11}	ε_{22}	ε_{33}	ε_{12}	ε_{13}	ε_{23}
$\langle . \rangle_{Bande1}$	0.001003	-0.000281	-0.000393	0.000045	0.000000	-0.000001
$\langle . \rangle_{Bande2}$	0.000987	-0.000298	-0.000302	0.000075	0.000000	0.000001
$\langle . \rangle_{Macro}$	0.001000	-0.000329	-0.000330	0.000001	0.000000	-0.000001

Tableau 4-29 : Déformations moyennes dans chaque bande et dans le modèle entier.

Compte-tenu de ces résultats, la démarche suivante est proposée pour corriger les résultats obtenus au paragraphe 4.3 avec les agrégats texturés, afin qu'ils rendent compte des champs mécaniques au sein de grains appartenant à une macrozone présentant un texture de type 1 ou 2.

On supposera qu'une macrozone se trouve dans un état de contrainte moyen uniaxial associé à la contrainte axiale ou à la déformation axiale déterminée à partir du modèle simplifié précédent. Ainsi, en considérant une éprouvette polycristalline en traction soumise à une déformation macroscopique E_{11}=0.1%, correspondant à une contrainte macroscopique Σ_{11}=115MPa, une macrozone de texture 1 (MZ1) se trouve alors en moyenne en traction uniaxiale due à l'application d'une déformation axiale $E_{11}^{(MZ1)}=<\varepsilon_{11}>_{bande1}$=0.1003%. De façon analogue, la déformation axiale d'une macrozone de texture 2 (MZ2) est $E_{11}^{(MZ2)}=<\varepsilon_{11}>_{bande2}$=0.0987%.

Ensuite, considérant un agrégat utilisé dans les séries de la partie 4.3 comme un volume élémentaire polycristallin à l'intérieur d'une macrozone, on lui appliquera une déformation axiale $E_{11}^{(MZ1)}$ s'il s'agit d'une macrozone présentant la texture 1 (ou $E_{11}^{(MZ2)}$ dans le cas d'une macrozone présentant la texture 2). Les résultats de la partie 4.3 ayant été obtenus, en élasticité linéaire, en imposant aux agrégats une déformation axiale moyenne de 0.1%, ceux-ci seront multipliés par un coefficient $c=E_{11}^{(MZ1)}/E_{11}$ ou $c=E_{11}^{(MZ2)}/E_{11}$ selon le type de macrozone considéré.

Les contraintes ainsi obtenues seront normalisées par la contrainte macroscopique Σ_{11} (définie à la plus grande échelle et commune aux 2 types de macrozones) au lieu de les normaliser, comme cela avait été fait dans la partie 4.3, par la contrainte moyenne dans les N agrégats d'une série $\langle\sigma_{11}\rangle_V$ dont la valeur dépendait de la texture considérée.

4.4.2 Analyse des contraintes au sein des grains centraux

La Figure 4-43 et le Tableau 4-30 indiquent les contraintes moyennes $\langle\sigma_{ij}\rangle_{Vg}$ au sein des grains centraux corrigées par le coefficient c (en fonction de la texture de la macrozone considérée) puis normalisées par la contrainte axiale macroscopique Σ_{11}, tel que décrit précédemment. Sur la Figure 4-43, les valeurs indiquées avec la mention isotrope sont directement celles issues de la partie 4.2, obtenues avec les agrégats non-texturés; elles ne sont évidemment pas soumises à cette correction relative à la description de l'influence des macrozones.

Pour une orientation donnée et par rapport aux résultats obtenus dans le cas d'agrégats non-texturés, la contrainte axiale moyenne d'un grain dans une macrozone présentant la texture 1 est plus faible, alors que celle obtenue pour un grain dans une macrozone présentant la texture 2 est plus élevée. Pour un type de macrozone donné, l'ordre parmi les 5 orientations étudiées est identique à celui constaté dans le cas non-texturé.

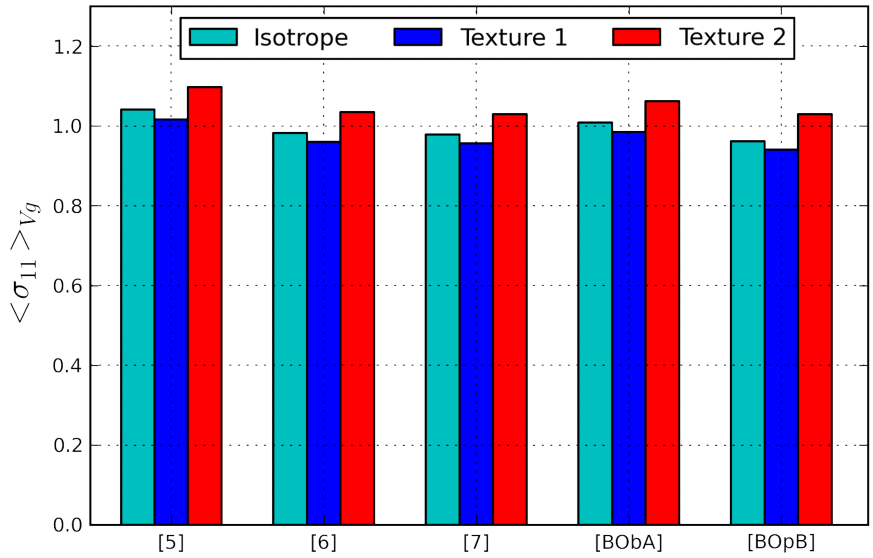


Figure 4-43 : Contraintes axiales moyennes $\langle\sigma_{11}\rangle_{Vg}$ au sein des N grains centraux corrigées avec le coefficient c puis normalisées par la contrainte axiale macroscopique Σ_{11}.

	Texture 1					Texture 2				
$\langle\sigma_{ij}\rangle_{Vg}$	[5]	[6]	[7]	[BObA]	[BOpB]	[5]	[6]	[7]	[BObA]	[BOpB]
σ_{11}	1.017	0.961	0.956	0.985	0.941	1.097	1.035	1.030	1.062	1.029
σ_{22}	-0.032	-0.036	-0.039	-0.031	-0.052	-0.010	-0.016	-0.019	-0.010	-0.013
σ_{33}	-0.021	0.017	0.022	0.001	0.040	0.007	0.045	0.050	0.026	0.048
σ_{12}	-0.033	-0.018	-0.015	-0.028	0.001	-0.036	-0.021	-0.017	-0.032	-0.001
σ_{13}	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.008
σ_{23}	0.001	0.001	0.001	0.003	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001

Tableau 4-30 : Contraintes moyennes $\langle\sigma_{ij}\rangle_{Vg}$ au sein des N grains centraux corrigées avec le coefficient c puis normalisées par la contrainte axiale macroscopique Σ_{11}.

4.4.3 Analyse de la cission résolue à l'échelle du grain central. Facteur de Schmid effectif

Les facteurs de Schmid effectifs reportés sur la Figure 4-44 et dans le Tableau 4-31, décrivent la moyenne de la cission résolue d'une orientation au sein d'une macrozone de texture 1 ou 2, déterminées suivant la méthode décrite au paragraphe 4.4.1 à partir des résultats de la partie 4.3. Sur la Figure 4-44, le facteur de Schmid conventionnel et le facteur de Schmid effectif dans le cas d'un agrégat non-texturé (cas isotrope) sont données à titre de comparaison.

En moyenne l'activation du glissement sera donc plus précoce au sein d'une macrozone présentant la texture 2, quelle que soit l'orientation du grain considéré.

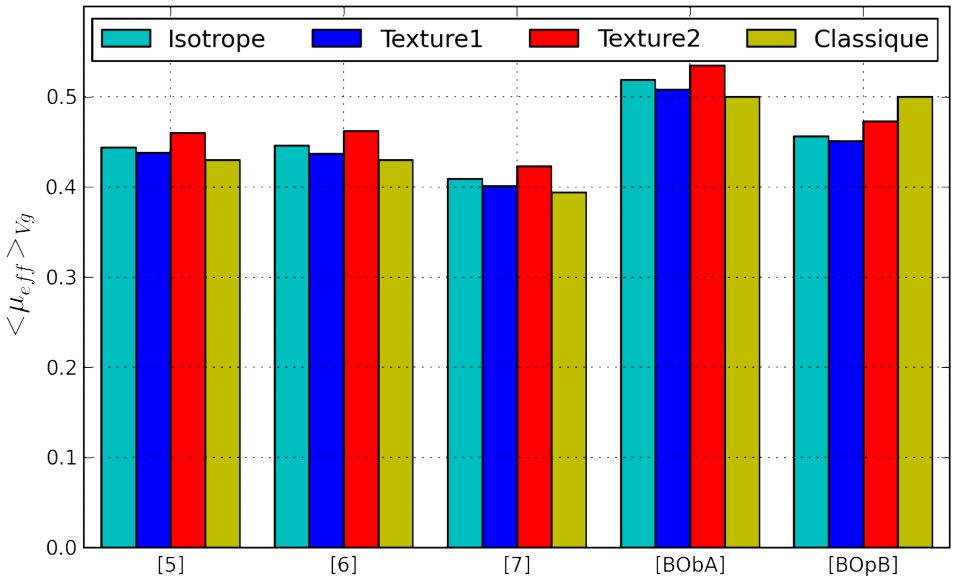


Figure 4-44 : Facteur de Schmid effectif au sein des N grains centraux pour les 5 orientations étudiées (les données associées aux textures 1 et 2 sont obtenues suivant la méthode décrite au paragraphe 4.4.1. afin de rendre compte de l'effet des macrozones).

			Macrozone - Texture 1				Macrozone - Texture 2			
Orient.	SG	μ	μ_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	μ_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
[5]	Basal	0.430	0.438	0.019	0.013	0.023	0.460	0.015	0.013	0.020
[6]	Basal	0.430	0.437	0.018	0.013	0.023	0.462	0.017	0.014	0.021
[7]	Basal	0.394	0.401	0.018	0.013	0.023	0.423	0.017	0.013	0.021
[BObA]	Basal	0.500	0.508	0.018	0.013	0.023	0.535	0.016	0.014	0.021
[BOpB]	Pris	0.500	0.451	0.014	0.009	0.017	0.473	0.017	0.011	0.021

Tableau 4-31 : Facteur de Schmid effectif et écarts-types associés au sein des N grains centraux pour les 5 orientations étudiées et les 2 types de macrozones.

La Figure 4-45 et la Figure 4-46 illustrent la distribution du facteur de Schmid effectif des orientations [B.O.b.A.] et [B.O.p.B], respectivement, dans les 2 types de macrozones étudiées et dans un polycristal non-texturé. Ce type d'information pourrait être comparé à des observations de surface permettant d'évaluer la fraction de nodules d'une orientation donnée activant du glissement plastique, en fonction de la texture dans la zone d'observation.

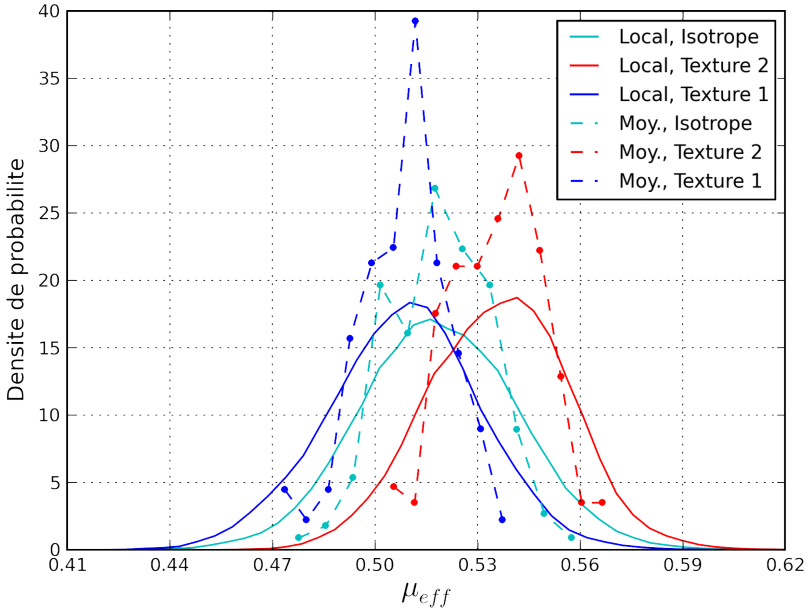


Figure 4-45 : Distribution du facteur de Schmid effectif au sein de 140 grains centraux d'orientation [B.O.b.A.] dans les 2 types de macrozones étudiées et dans un polycristal non-texturé.

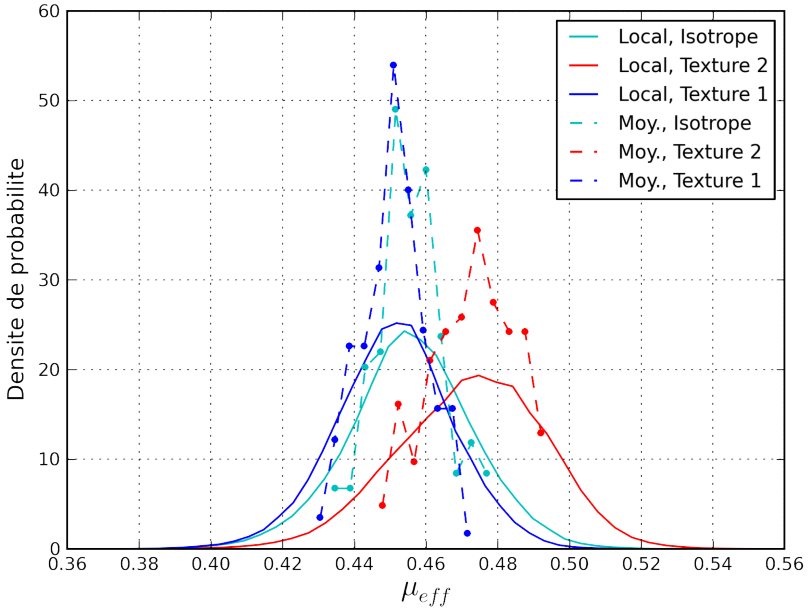


Figure 4-46 : Distribution du facteur de Schmid effectif au sein de 140 grains centraux d'orientation [B.O.p.B.] dans les 2 types de macrozones étudiées et dans un polycristal non-texturé.

4.4.4 Analyse de l'indicateur d'amorçage

En prenant en compte la répartition spatiale des 2 textures sous la forme de macrozones, l'influence de la texture sur l'indicateur d'amorçage, reportée sur la Figure 4-47 et le Tableau 4-32 , est la même que celle constatée précédemment sur le facteur de Schmid effectif. Pour une orientation donnée, les macrozones présentant la texture 2 (resp. texture 1) conduisent à un indicateur d'amorçage plus élevé (resp. plus faible) qu'en considérant des grains de même orientation au sein d'un polycristal non-texturé. Pour un type de macrozone donné, l'ordre des indicateurs parmi les 5 orientations étudiées est le même que celui constaté jusqu'à présent. La valeur maximale est donc obtenue pour l'orientation [5] au sein d'une macrozone présentant la texture 2. Cependant, cette valeur n'est que très légèrement supérieure à celle obtenue pour l'orientation [B.O.b.A.].

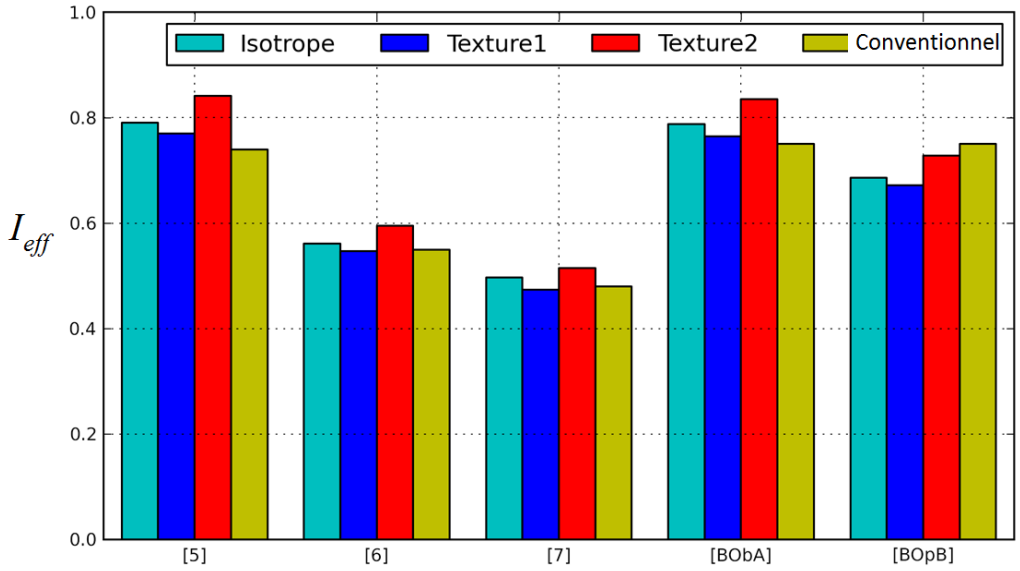


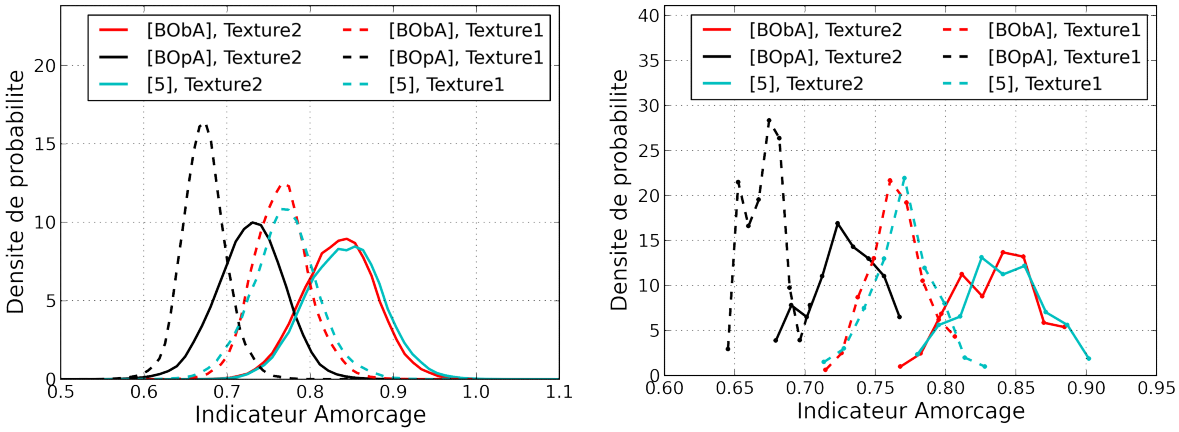
Figure 4-47 : Indicateur d'amorçage effectif au sein des N grains centraux pour les 5 orientations étudiées (les données associées aux textures 1 et 2 sont obtenues suivant la méthode décrite au paragraphe 4.4.1. afin de rendre compte de l'effet des macrozones).

			Macrozone - Texture 1				Macrozone - Texture 2			
Orient.	SG	I	I_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}	I_{eff}	SD_{Vg}^{intra}	SD_{Vg}^{inter}	SD_{Vg}
[5]	Basal	0.74	0.770	0.033	0.023	0.040	0.841	0.035	0.030	0.046
[6]	Basal	0.55	0.547	0.024	0.017	0.029	0.595	0.028	0.022	0.036
[7]	Pris	0.48	0.474	0.023	0.016	0.028	0.515	0.026	0.020	0.033
[BObA]	Basal	0.75	0.765	0.027	0.020	0.034	0.835	0.034	0.028	0.044
[BOpB]	Pris	0.75	0.672	0.022	0.015	0.026	0.728	0.033	0.024	0.041

Tableau 4-32 : Indicateur d'amorçage effectif et écarts-types associés au sein des N grains centraux pour les 5 orientations étudiées et les 2 types de macrozones.

L'analyse des distributions, représentées sur la Figure 4-48, indique également que la queue de distribution de l'indicateur de l'orientation [5] est également associée à des valeurs

légèrement supérieures à celles obtenues pour l'orientation [B.O.b.A.], que ce soit localement ou en moyenne dans le grain.



a. Valeurs locales

b. Moyennes par grain

Figure 4-48 : Distribution de l'indicateur d'amorçage effectif pour 3 des orientations étudiées au sein d'une macrozone présentant l'une des 2 textures considérées : a. valeurs locales, b. valeurs moyennes par grain.

4.5 Bilan

Ce chapitre a été consacré à l'application de la démarche de simulation présentée au chapitre 2 et déjà mise en œuvre au chapitre 3 dans le cas de l'acier inoxydable 316L de structure cubique à faces centrées à la phase α hexagonale de l'alliage de titane TA6V. En vue de simplifier le problème considéré, la microstructure bimodale de l'alliage étudiée n'est pas prise en compte et la microstructure est décrite comme un polycristal intégralement composé de nodules de phase α primaire. De plus, seuls les systèmes de glissement basal et prismatique sont pris en compte dans les analyses.

La première partie (§4.2) est dédiée aux séries de simulations réalisées avec des agrégats non-texturés cristallographiquement. Plusieurs séries de simulations ont été effectuées avec 11 orientations différentes pour le grain central. Ces orientations ont été choisies afin de tenir compte au mieux de la multiplicité des configurations possibles en termes d'élasticité et de systèmes de glissement. D'un point de vue morphologique, 2 types d'agrégats, constitués de grains en forme d'octaèdres tronqués, sont considérés en distinguant les grains centraux « ouverts » des grains centraux « fermés ». Les principales conclusions relatives à cette étude sont les suivantes :

- La caractérisation de la distribution des contraintes, ainsi que celle de la cission résolue et de la contrainte normale sur les systèmes de glissement, fournissent des résultats qualitativement semblables à ceux obtenus au chapitre 3 dans le cas du 316L de structure CFC. Mais, la plus faible anisotropie élastique du titane hexagonal conduit à une hétérogénéité des champs beaucoup plus faible. Conjointement à l'existence de 2 familles de systèmes de glissement dont l'activation est associée à des domaines d'orientation bien distincts, les distributions de la cission résolue des différentes orientations présentent des zones de recouvrement plus faibles que dans le cas du 316L. Ceci peut expliquer une activation du glissement associée, pour chaque orientation, à des domaines d'orientations et des niveaux de contraintes mieux définis.
- En raison d'un comportement élastique très différent, et malgré une anisotropie relativement faible, la cission résolue des orientations favorables au glissement prismatique (orientations [B.O.p.]) est clairement inférieure à celle obtenue avec les orientations favorables au glissement basal (orientation [B.O.b.]) pour une fraction importante de grains. Ce résultat est qualitativement en accord avec certaines observations de (Bridier 2006) en traction monotone pour ce matériau en particulier du point de vue de l'évaluation des cissions critiques. En effet, sous l'hypothèse de contraintes uniformes, une cission résolue critique plus faible avait été trouvée pour le glissement basal. Cependant, d'autres données de la littérature conduisaient à la conclusion contraire.

- Les distributions de la cission résolue obtenues pour les orientations [5] et [6] sont sensiblement les mêmes, et celle-ci demeure plus faible que celle obtenue pour l'orientation [B.O.b.]. Pourtant, d'un point de vue expérimental, les orientations proches du pôle d'orientation [5] dans le triangle standard semblaient présenter une activation du glissement plus précoce et/ou plus importante que celles proches du pôle de l'orientation [6]. Par ailleurs, aucune différence significative n'avait été constatée, en termes d'activation, entre les orientations proches des pôles [5] et [B.O.b.]. Deux raisons principales permettraient d'expliquer ces divergences entre les distributions de cissions simulées et les constatations expérimentales. En premier lieu, les distributions simulées sont basées sur l'étude d'une orientation cristallographique uniquement choisie pour représenter un domaine entier du triangle standard. En second lieu, les constantes d'élasticité pourraient ne pas représenter fidèlement l'évolution des propriétés élastiques entre les orientations de type [B.O.b.], [5] et [6].
- Du point de vue de l'endommagement en fatigue, la distribution de l'indicateur d'amorçage de l'orientation [5], appartenant au domaine identifié comme favorable à la formation des fissures suivant le plan de base (parmi lesquelles se trouvent les fissures fatales), correspond à des valeurs significativement plus élevées que celles obtenue pour l'orientation [6]. Ceci est cohérent avec le fait qu'aucune fissure n'a été observée dans ce dernier domaine d'orientations. Cependant, ceci est également vrai pour le domaine d'orientations correspondant à l'orientation [B.O.b.] pour laquelle l'indicateur d'amorçage est du même ordre que pour l'orientation [5], lorsque celui-ci est calculé avec un coefficient de sensibilité à la contrainte normale m égale à l'unité. Une étude de l'influence de ce paramètre a montré que l'orientation [5] favoriserait l'amorçage pour un coefficient m supérieur à l'unité.
- Les configurations de voisinage associées aux valeurs extrémales de la cission résolue présentent des caractéristiques très proches de celles identifiées dans le cas du 316L.

La deuxième et la troisième parties de ce chapitre (§4.3 et §4.4) visaient à étudier l'influence des textures cristallographiques. En effet, l'alliage étudié présente de fines bandes, appelées macrozones, au sein desquelles une texture marquée est observée. Deux listes d'orientations cristallographiques, correspondant à deux textures caractéristiques rencontrées au sein des macrozones, ont été établies. De nouvelles séries de simulations ont été réalisées en assignant aux grains des agrégats (à l'exception du grain central) des orientations tirées aléatoirement à l'intérieur de l'une de ces deux listes. La texture 1 privilégie les orientations pour lesquelles l'angle θ entre la direction de traction et l'axe c du cristal est supérieur à 45°. De telles orientations sont associées à un module Young plutôt faible (104-117GPa) et favorisent le glissement prismatique. La texture 2 correspond à des orientations pour lesquelles l'angle θ est inférieur à 45°, associées à un module élevé (117-143GPa) et plutôt favorables au glissement basal. Les principales analyses et conclusions effectuées autour de cette problématique sont les suivantes :

- Les résultats issus des séries de simulations définies en introduisant un texture de la manière décrite ci-dessus (§4.3) permettent d'évaluer la distribution des champs mécaniques au sein de grains appartenant à un polycristal présentant une texture (1 ou 2) uniformément répartie dans l'espace. Or ceci ne décrit pas la réalité du matériau étudié, i.e. présentant localement ces textures distribuées spatialement sous la forme de macrozones. Ainsi, la comparaison des résultats obtenus, de cette manière, avec les deux textures, correspond à une situation fictive en regard de la base de données expérimentale acquise pour cet alliage et du rôle des macrozones. Toutefois en comparant les résultats obtenus avec les 2 textures pour la même contrainte macroscopique appliquée, la cission résolue moyenne d'un grain (quelle que soit son orientation) dans la texture 2 est plus faible que pour la texture 1. En effet, la texture 2, qui est la plus rigide, impose en moyenne au grain central une déformation, donc une contrainte, plus faible. On observe donc la tendance inverse que celle supposée avoir lieu dans le macrozone, dont on ne tient pas compte ici. En effet, il avait été constaté que les macrozones « rouges », correspondant à la texture 2, étaient plus endommageantes.
- Une stratégie, volontairement simple, a été mise en place afin de rendre compte de la distribution spatiale de ces deux textures (§4.4). Une simulation annexe a été réalisée pour évaluer l'état mécanique moyen d'une macrozone de texture 1 ou 2. Une échelle intermédiaire est donc introduite: celle des macrozones entre l'échelle du grain (ou du cristal) et celle du volume élémentaire représentatif d'un polycristal sans texture globale contenant plusieurs macrozones. Au prix d'hypothèses simplificatrices, l'état moyen de la macrozone est reporté sur les agrégats texturés utilisés précédemment (§4.3) sans avoir à réaliser de simulations supplémentaires. Les résultats ont été établis pour quelques orientations seulement afin d'évaluer la pertinence de cette démarche. L'effet attendu des macrozones est restitué: pour une orientation donnée, les grandeurs mécaniques moyennes étudiées sont systématiquement plus élevées dans la macrozone de texture 2. Les travaux futurs sur ce point porteront sur: (i) l'amélioration de la simulation annexe rendant compte de l'échelle intermédiaire et (ii) sur l'étude d'un nombre d'orientations plus important suivie d'une analyse approfondie des résultats. On notera que, au sein des macrozones « rouges » associées à la texture 2, la cission résolue moyenne de l'orientation [5] demeure nettement inférieure à celle de l'orientation [B.O.b.].
- Afin d'évaluer, d'une façon assez qualitative, la pertinence des résultats obtenus relatifs à l'effet des macrozones, les distributions de la cission résolue, évaluées pour quelques orientations seulement au sein des 2 types de macrozones, seront confrontées aux observations de l'apparition des traces de glissement. Celles-ci, présentées au chapitre 5, ont été réalisées au cours d'un essai de traction monotone in-situ sous microscope électronique à balayage. Les données sont basées sur des observations réalisées au sein de 2 macrozones de textures différentes.

De façon plus générale, on mentionnera deux principales perspectives aux études présentées dans ce chapitre. La première, comme cela avait été évoqué à l'issue du chapitre 3, est la prise en compte de la plasticité cristalline. Celle-ci permettra l'introduction d'indicateur de fatigue de type Fatemi-Socie (Przybyla 2012) intégrant directement et quantitativement de glissement plastique. La seconde est la prise en compte du caractère bimodal de la microstructure pouvant consister, en première approche, à supposer que le comportement des colonies de lamelles reste élastique.

Chapitre 5

Etude expérimentale de l'activation du glissement plastique du TA6V en traction monotone

Sommaire

5.1 Introduction 220

5.2 Description générale de l'essai 222

5.3 Choix et description des zones d'observation 223
5.3.1 Caractérisation de la microstructure en surface de l'éprouvette 223
5.3.2 Choix des zones d'observation 227
5.3.3 Description des 2 zones d'observations 230

5.4 Identification des systèmes de glissement activés 234

5.5 Analyse des systèmes de glissement activés à la fin de l'essai 237
5.5.1 Résultats obtenus à fort grandissement (x1000) 237
5.5.2 Résultats obtenus à faible grandissement (x150) 241
5.5.3 Influence du grandissement 243
5.5.4 Effet de la taille des nodules 244

5.6 Analyse de la chronologie d'activation du glissement en relation avec l'orientation cristallographique 245
5.6.1 Résultats obtenus à fort grandissement (x1000) 245
5.6.2 Résultats obtenus à faible grandissement (x150) 251
5.6.3 Synthèse 260

5.7 Analyse de configurations de voisinages 262

5.8 Identification de la cission résolue critique 264
5.8.1 Méthode 1 basée sur le facteur de Schmid 264
5.8.2 Méthode 2 basée sur le facteur de Schmid effectif 266
5.8.3 Méthode 3 basée sur la distribution de la cission résolue 270

5.9 Bilan 273

5.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation et à l'analyse d'un essai de traction monotone in-situ réalisé au sein d'un MEB et destiné à étudier l'activation du glissement plastique dans le TA6V. L'alliage étudié, déjà présenté au chapitre 1 (paragraphe 1.2.2.1) est le même alliage que celui utilisé au cours des travaux de thèse de Florent Bridier (Bridier 2006). Il présente également la même microstructure biphasée (la phase α hexagonale compacte représentant 95% en volume, le reste étant la phase β cubique centrée) et bimodale (40% en volume de nodules de phase α primaire et 60% de colonies de lamelles de phase α secondaire noyées dans une matrice β).

Les principales conclusions et questions ouvertes dégagées à l'issue de la synthèse bibliographique (paragraphe 1.2.2) sont brièvement rappelées ci-dessous. Celles-ci sont essentiellement basées sur les résultats obtenus par Florent Bridier (Bridier 2006) pour lequel le travail présenté dans ce chapitre constitue une suite logique. La définition de l'essai et son analyse ont été menées en bénéficiant de l'expérience passée mais aussi des résultats de simulations présentés au chapitre précédent.

Une des principales problématiques est la caractérisation précise de l'importance du glissement basal et du glissement prismatique qui s'active en premier lieu au sein des nodules α. En effet, les différentes données disponibles, sur le même matériau (ou sur des alliages et des microstructures proches), sont parfois quelques peu contradictoires et n'ont pas permis à ce jour de statuer sur la question. Ce constat est lié à la diversité des configurations étudiées principalement en termes de textures locales (macrozones) et de type de sollicitation (monotone, cyclique). De plus, la grande variabilité des premières activations du glissement, qui reflète l'hétérogénéité des contraintes au cœur du présent travail, nécessite l'analyse d'un nombre important de nodules afin de dégager des tendances fiables.

La question ouverte sous-jacente est celle de la caractérisation de la cission résolue critique du glissement prismatique et basal. L'écart entre les cissions critiques de ces 2 types de systèmes, ainsi que la distribution différente de l'état mécanique local pour les domaines d'orientations favorables à leur activation respective, constituent les 2 principaux paramètres contrôlant l'activation du glissement. Par ailleurs, la connaissance de la cission critique sur ces deux familles de systèmes de glissement est cruciale pour l'application à ce matériau des approches en plasticité cristalline par simulations éléments-finis en champs complets.

Un des objectifs de l'essai présenté ici est de confirmer et de mieux décrire les domaines d'orientations favorables aux glissements identifiés par Florent Bridier (Bridier 2006). En particulier, le domaine d'orientation associé à l'apparition du glissement basal a été observé pour des nodules présentant un facteur de Schmid compris entre 0.3 et 0.5, ainsi qu'un angle θ (angle entre la direction de traction et l'axe c de la maille hexagonale) compris entre 20° et 60°. Une activité particulièrement importante a été constatée « à gauche » du pôle où le facteur de Schmid vaut 0.5 dans le triangle standard, suggérant un rôle de l'élasticité locale. La présence de textures entre alors en jeu dans l'activation des 2 systèmes à travers l'état local de contraintes associé à cette texture et à la proportion relative des orientations

favorables à leur activation. Le travail présenté a été défini notamment pour mieux séparer l'effet de l'orientation propre des nodules analysés de celui de leur texture environnante (macrozone).

Enfin, on rappellera que la compréhension des conditions favorables à l'amorçage de fissures de fatigue pour ce matériau a soulevé des questions de même nature. En effet, l'amorçage est observé en surface au sein des nodules présentant du glissement basal ou prismatique. Toutefois, les fissures fatales s'amorcent suivant un plan de base dans un domaine d'orientation compris entre le pôle [0001] (direction de traction suivant l'axe c du cristal) et celui pour lequel le facteur de Schmid vaut 0.5. De plus, le mécanisme d'amorçage par pseudo-clivage mis en jeu suivant le plan de base suggère également un rôle de la contrainte normale au plan de glissement. Bien que le travail présenté dans ce chapitre n'aborde pas directement cette problématique, il en constitue un premier maillon tant dans la compréhension de l'activation du glissement précédant l'amorçage, que dans la définition d'une méthodologie d'analyse des observations en surface des polycristaux, couplée éventuellement aux simulations.

La présentation générale de l'essai réalisé est faite au paragraphe 5.2. Ensuite (paragraphe 5.3), les caractéristiques microstructurales de l'éprouvette testée sont présentées, en particulier dans les zones d'observation dont le choix est également discuté. Ainsi, les principales informations relatives à la microstructure de cet alliage, déjà décrites au chapitre 1, seront brièvement rappelées. Après avoir décrit la procédure d'identification des systèmes de glissement activés (paragraphe 5.4), l'analyse de l'activation du glissement est d'abord présentée de façon globale en considérant l'ensemble des traces observées à la fin de l'essai (paragraphe 5.5), puis de façon plus précise en tenant compte de la chronologie d'activation (paragraphe 5.6). Quelques commentaires seront faits en relation avec le voisinage des nodules d'orientations particulières (paragraphe 5.7). Enfin, il sera discuté au paragraphe 5.8 de la détermination de la cission critique à partir des données expérimentales obtenues, notamment par l'utilisation des résultats des simulations du chapitre 4.

5.2 Description générale de l'essai

L'essai de traction monotone in-situ réalisé suit un protocole identique à celui mis en œuvre au cours de travaux de thèse de Florent Bridier (Bridier 2006). La géométrie de l'éprouvette plate utilisée, décrite sur la Figure 5-1, permet l'observation MEB en cours d'essai sur l'ensemble de la partie utile, ainsi que des analyses EBSD.

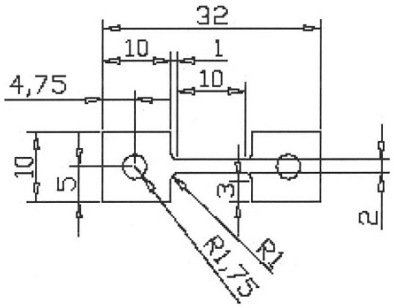


Figure 5-1 : Géométrie et dimensions (en mm) de l'éprouvette étudiée (épaisseur 1mm).

L'essai est réalisé sur une machine de traction installée dans un microscope électronique à balayage (Figure 5-2). Le mouvement des deux traverses étant symétrique, le centre de la partie utile peut être suivi et observé aisément en cours d'essai.

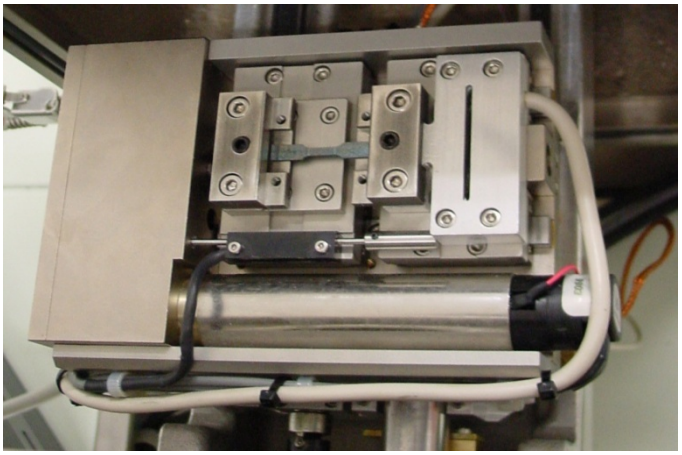
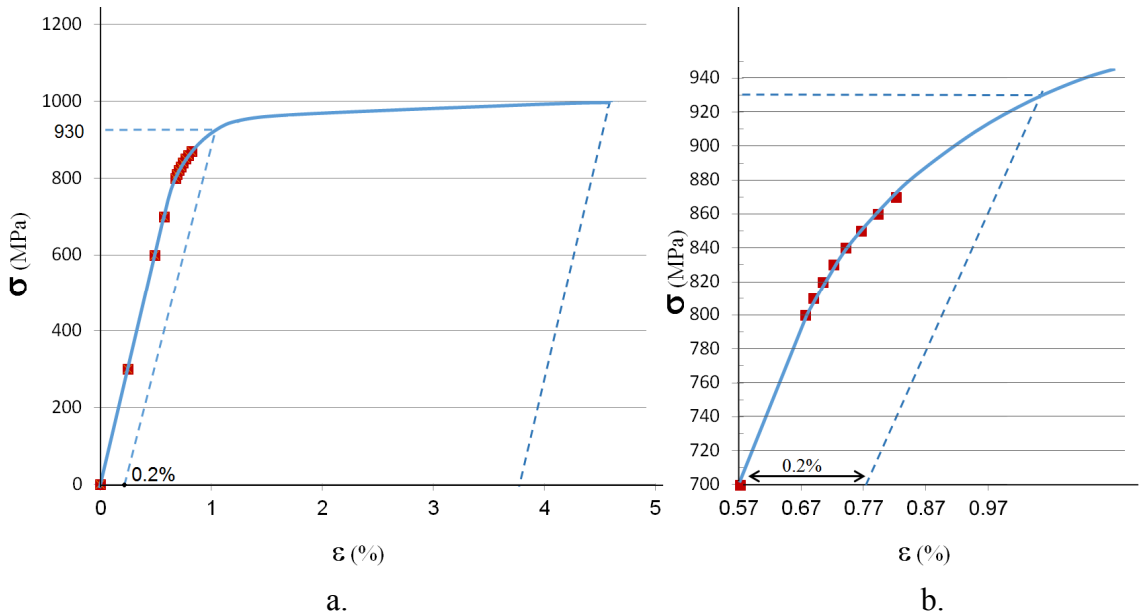


Figure 5-2 : Machine de traction installée sur la platine du MEB.

L'essai a été conduit avec une vitesse de déplacement de traverse de 0.02 mm.min^{-1}. 11 arrêts du déplacement des traverses ont été réalisés, conformément à la courbe de la Figure 5-3. A chaque arrêt, plusieurs images MEB sont réalisées dans 2 zones principales de la partie utile. Le choix et la caractérisation des zones d'observation, ainsi que le nombre d'images réalisées afin d'y détecter l'apparition des traces de glissement, sont décrits au paragraphe 5.3.



a. b.

Figure 5-3 : (a.) Courbe de traction indiquant les 11 arrêts réalisés ; (b.) zoom dans le régime plastique.

La séquence d'arrêts suivante a été définie: dans la partie élastique, 3 arrêts relativement espacés ont été effectués à 300MPa, 600MPa et 700MPa. Puis, à partir de 800MPa, où les premières traces de glissement sont attendues, un arrêt est alors réalisé tous les 10MPa jusqu'à 870MPa. Cette valeur est inférieure à la limite d'élasticité conventionnelle définie à 0.2 % de déformation plastique macroscopique.

Pendant chaque arrêt du déplacement des traverses, on observe une relaxation des contraintes, faible dans le domaine élastique et augmentant progressivement en entrant dans le domaine plastique. Les observations ne sont réalisées qu'une fois que cette relaxation devient négligeable au point que deux images consécutives deviennent identiques.

5.3 Choix et description des zones d'observation

Avant l'essai, une très large cartographie EBSD d'environ 8700 µm × 1100 µm a été réalisée en surface de la partie utile de l'éprouvette (Figure 5-4) avec un pas de 1 µm afin de (i) caractériser finement la microstructure de l'éprouvette, puis de (ii) définir les zones à suivre durant l'essai (ce choix étant présenté au paragraphe 5.3.2).

5.3.1 Caractérisation de la microstructure en surface de l'éprouvette

Dans cette section, on indique quelques informations sur la microstructure polycristalline en surface de l'éprouvette étudiée, et plus spécifiquement au sein des régions P1 et P2 dans lesquelles les observations seront réalisées in situ (cf. paragraphe 5.3.2). La microstructure duplex de cet alliage est illustrée sur la Figure 5-5. On observe sur la Figure 5-4 que la surface de l'éprouvette présente des régions de texture cristallographique

très diverse. Notamment, la région P2 appartient à une macrozone « rouge » associée à une orientation privilégiée telle que l'axe de traction soit proche de l'axe *c* de la maille cristalline hexagonale compacte[3].

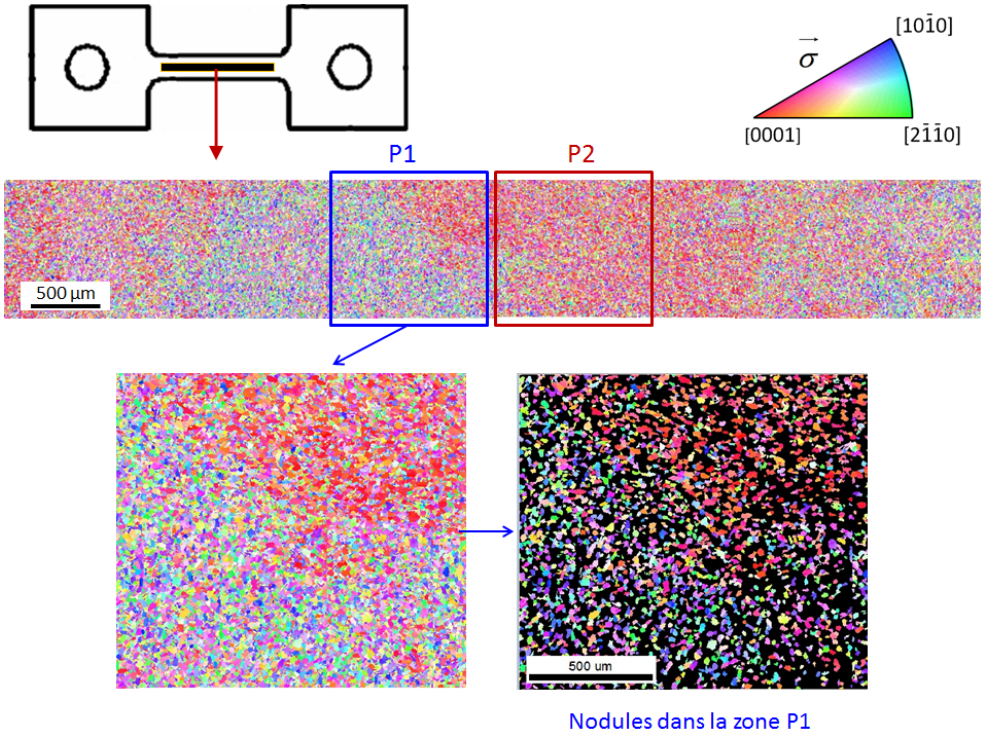


Figure 5-4 : Large cartographie EBSD en surface de l'éprouvette (en haut) et illustration de l'identification des nodules dans la région P1 (en bas).

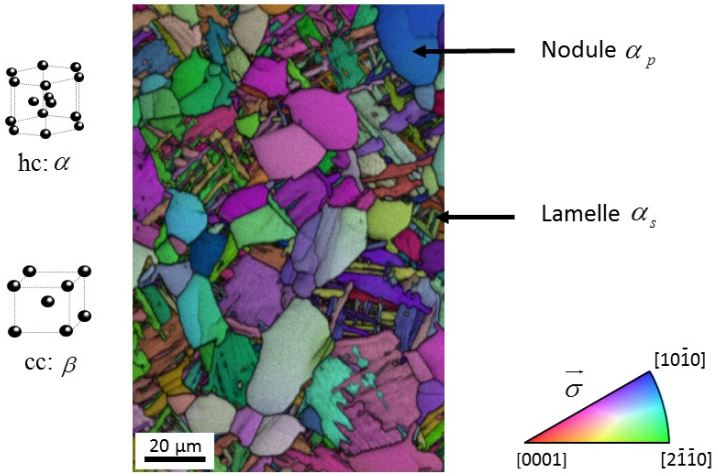
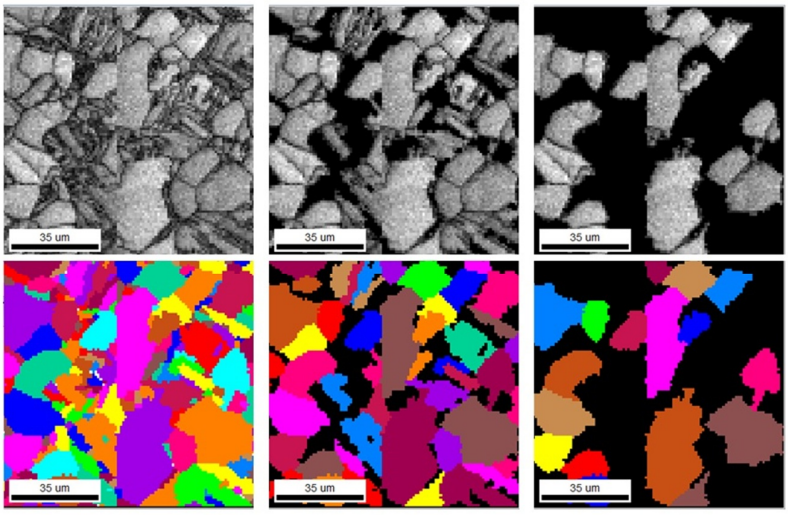


Figure 5-5 : Microstructure de l'alliage TA6V étudié.

[3] Toutes les cartes EBSD reportées dans ce chapitre correspondent à la surface de l'éprouvette et sont représentées de façon à ce que l'axe de traction soit la direction horizontale. Le code couleur EBSD correspondent à une projection stéréographique de l'axe de traction en figure de pôle inverse.

Afin d'évaluer la fraction de nodules α_p, ainsi que leurs caractéristiques morphologiques, il est nécessaire de les distinguer des colonies constituées de lamelles α_s au sein de la matrice β. Cette étape est réalisée par région de la large cartographie, tel qu'illustrée sur la Figure 5-4 pour la région P1. A partir de la cartographie EBSD partitionnée avec une orientation unique par grain à l'aide d'un seuil de désorientation des pixels (Figure 5-6.a), on retire dans un premier temps les grains composés de moins de 50 pixels (Figure 5-6.b), puis ceux pour lesquels la qualité d'indexation (IQ) moyenne est inférieure à la moyenne de l'ensemble des pixels de la carte initiale (Figure 5-6.c). On peut vérifier visuellement l'efficacité de cette méthode sur la petite cartographie EBSD de la Figure 5-6. Cependant, la résolution spatiale de la carte (pas de 1µm) ne permet pas toujours de distinguer clairement les zones lamellaires des nodules.



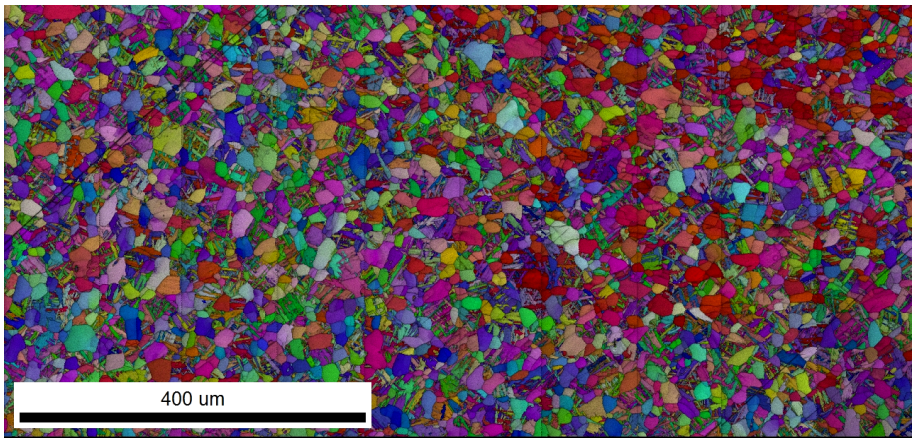
a. b. c.

Figure 5-6 : Illustration de la méthode de détection des nodules: a. Cartographie EBSD initiale ; b. Exclusion des grains de taille inférieure à 50 pixels ; c. Exclusion des grains dont la qualité de l'indexation (IQ) est inférieure à la valeur moyenne de la carte complète.

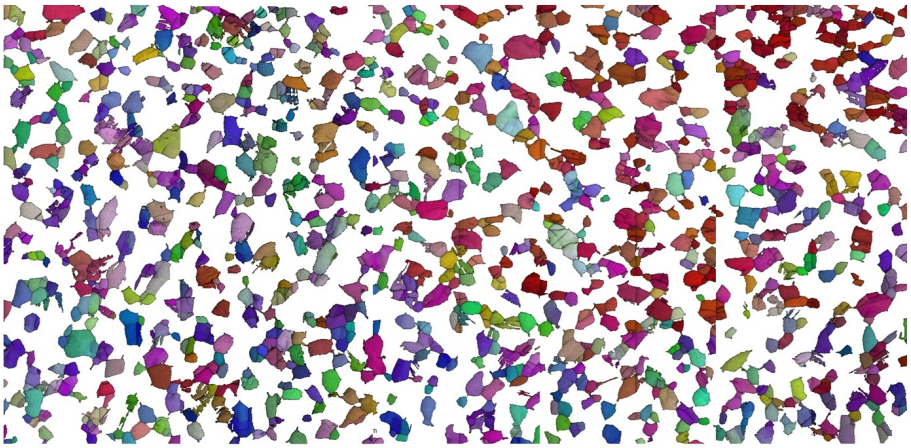
En appliquant cette méthode aux parties P1 et P2 de taille de 1400 µm × 1100 µm (Figure 5-4) au centre de l'éprouvette, on obtient 3113 nodules dans la partie P1 et 3073 nodules dans la partie P2. Dans chaque partie, la fraction surfacique de nodules est de 41%. La distribution du diamètre des nodules dans ces deux parties est présentée dans la Figure 5-8. Les deux distributions sont très proches avec un diamètre moyen de 17 µm et 16.8 µm pour les parties P1 et P2 respectivement. Ces 2 parties présentant des textures cristallographiques différentes, il n'y a donc pas de corrélation entre les textures cristallographiques, la fraction de nodules et leur taille. Ce point montre combien une analyse microstructurale uniquement morphologique peut ne pas suffire pour interpréter les résultats obtenus en matière de propriétés d'usage. L'utilisation ici de l'EBSD est essentielle.

Une seconde cartographie EBSD d'environ 1000µm × 500µm a été réalisée avec un pas de 0.18 µm au centre de la première afin de distinguer sans ambiguïté les nodules α_p des colonies de lamelles α_s (Figure 5-7). L'objectif était de valider la méthode de détection des nodules décrite précédemment en s'assurant qu'elle n'exclut pas un nombre trop important de

nodules ou que, au contrainte, elle n'inclut pas de colonies de lamelles α_s. Dans cette cartographie à plus haute résolution, les nodules ont été sélectionnés manuellement.



a.



b.

Figure 5-7 : a. Carte EBSD haute résolution; b. Nodules α_p.

La fraction surfacique de nodules au sein de la cartographie haute résolution est de 41,7% ce qui est très proche des valeurs obtenues avec la méthode automatique sur les 2 parties P1 et P2 de la grande carte. De plus, la fraction surfacique de la phase β est évaluée à 3,9% sur la cartographie haute résolution alors qu'elle avait été évaluée à 5%. La distribution du diamètre des nodules dans cette cartographie est reportée dans la Figure 5-8. Cette distribution, ainsi que le diamètre moyen associé (16.7 µm), sont très proches de ceux obtenus sur les deux parties P1 et P2.

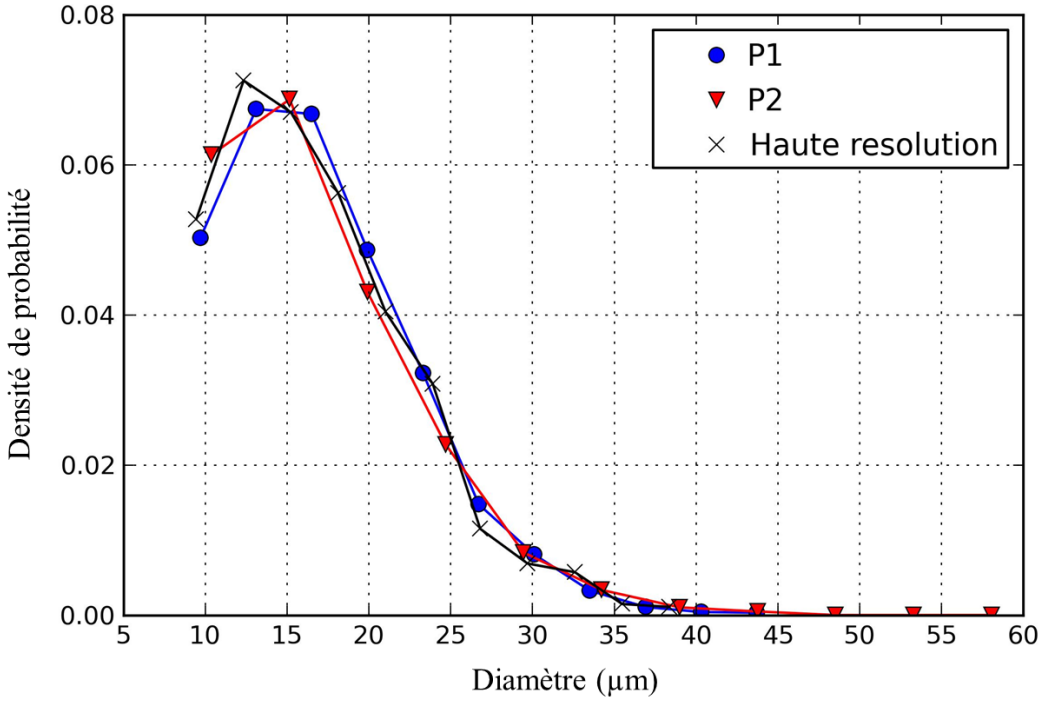


Figure 5-8 : Distribution du diamètre des nodules dans la cartographie haute résolution de la Figure 5-7 ; dans la partie P1 et P2 de la grande cartographie de la Figure 5-4

5.3.2 Choix des zones d'observation

Par analogie avec la démarche de simulation suivie dans les précédents chapitres, et pour mieux confronter les résultats obtenus avec les observations expérimentales, il serait naturel de chercher à observer l'apparition des traces de glissement au sein d'un (ou plusieurs) ensemble(s) de grains d'orientation cristallographique identique, mais différents de par leur morphologie et leur voisinage granulaire associé à une certaine texture. Cependant, cette approche n'a de sens que si un nombre de grains suffisant peut être étudié afin d'en dégager des résultats statistiquement représentatifs (tout comme un nombre de réalisations/simulations suffisant a été nécessaire). Ainsi, une recherche des nodules présentant une orientation proche de celles utilisées pour les simulations a été effectuée sur l'ensemble de la cartographie de la Figure 5-4. Pour cela, on détermine, pour chaque nodule et pour chaque orientation de référence simulée, l'angle de désorientation Φ et on associe le nodule à l'orientation de référence si cet angle est inférieur à une tolérance de désorientation $\Delta\Phi$ fixée (le calcul de la désorientation est présenté en annexe A.2.3). Les résultats de cette recherche sont donnés à titre d'exemple pour les trois orientations suivantes : [5], [BObB], [BOpB] telles que définies au chapitre 4 (voir paragraphe 4.1 et annexe A.5.2). Le Tableau 5-1 correspond aux recherches effectuées sur la cartographie de la Figure 5-4 entière composée de 24000 nodules environ. Les mêmes données obtenues sur la partie P1 seulement sont indiquées dans le Tableau 5-2.

Orientation de référence		$\Delta\Phi$ = 2°	$\Delta\Phi$ = 5°	$\Delta\Phi$ = 8°
[5]	Nb. nodules	0	4	78
	μ = 0.43	-	0.396 - 0.446	0.38 - 0.467
	E_t = 127 (GPa)	-	126 - 130	121 - 131
[B.O.b.B.]	Nb. nodules	0	14	54
	μ = 0.5	-	0.497 - 0.499	0.485 - 0.499
	E_t = 117 (GPa)	-	115 - 117	114 - 121
[B.O.p.B.]	Nb. nodules	1	6	32
	μ = 0.5	0.5	0.496 - 0.5	0.487 - 0.5
	E_t = 104.4 (GPa)	104.4	104.4	104.4 - 105

Tableau 5-1: Nombre de nodules présentant la même orientation cristallographique, à une tolérance de désorientation $\Delta\Phi$ donnée, qu'une des 3 orientations de référence [5], [B.O.b.B] ou [B.O.p.B] parmi 24000 nodules dans la grande cartographie de 8700×1100µm^2 (Figure 5-4). Pour une orientation de référence et une tolérance données, les valeurs minimales et maximales du facteur de Schmid µ et du module d'Young E_t obtenues parmi les nodules dénombrés sont indiquées afin d'évaluer comment ceux-ci s'écartent de l'orientation de référence.

Orientation référence		$\Delta\Phi$ = 2°	$\Delta\Phi$ = 5°	$\Delta\Phi$ = 8°
[5]	Nb. nodules	0	1	8
	µ = 0.43	-	0.43	0.38 - 0.453
	E = 127 (GPa)	-	126	125 - 129
[BObB]	Nb. nodules	0	3	5
	µ = 0.5	-	0.497 - 0.499	0.495 - 0.499
	E = 117 (GPa)	-	116 - 117	116 - 119
[BOpB]	Nb. Orientaion Près	0	1	6
	µ = 0.5	-	0.498	0.487 - 0.498
	E = 104.4 (GPa)	-	104.4	104.4 - 105

Tableau 5-2: Données similaires à celles du Tableau 5-1 obtenues à partir de la carte de la région P1 composée de 3100 nodules environ (Figure 5-4).

Avec une tolérance $\Delta\Phi$ de 2°, on ne recense en général aucun nodule proche d'une orientation de référence. Au mieux, un nodule d'orientation [BOpB] a été détecté dans la grande cartographie et il présente des caractéristiques identiques à l'orientation de référence (en termes de facteur de Schmid et de module d'Young). Avec une tolérance $\Delta\Phi$ de 5°, on trouve 4 à 14 nodules dans la grande carte et 1 à 3 dans la région P1. En considérant les 4 nodules associés à l'orientation [5] dans la grande carte, le facteur de Schmid varie de 0.396 à 0.446, tandis que le module d'Young varie de 126GPa à 130GPa. Ces écarts sont cependant

moins marqués pour les autres orientations. Avec une tolérance de désorientation $\Delta\Phi$ de 8°, 32 à 78 nodules sont dénombrés dans la grande carte et seulement 5 à 8 dans la région P1. Compte-tenu de la tolérance autorisée, le facteur de Schmid varie de 0.485 à 0.5 pour les orientations « bien orientées » et de 0.38 à 0.467 pour l'orientation [5]. Un écart maximal de 10MPa est noté pour le module d'Young dans le cas de l'orientation [5].

Afin de mieux comprendre le caractère très restrictif de ce mode de sélection par la désorientation, il faut garder à l'esprit que, lorsque l'orientation est représentée en figure de pôle inverse suivant la direction de traction dans le triangle standard, il y a une perte d'information sur l'orientation. En effet, un point dans le triangle standard ne définit pas complètement une orientation cristallographique: il représente une infinité d'orientations qui diffèrent d'une rotation autour de l'axe de traction. Ainsi, 2 nodules occupant le même pôle dans le triangle standard peuvent présenter une désorientation importante, bien qu'ils possèdent le même facteur de Schmid et le même module d'Young suivant la direction de traction.

Donc, pour obtenir un échantillon représentatif de nodules d'une orientation donnée (typiquement quelques dizaines au minimum) avec une tolérance de désorientation « raisonnable » (par exemple 5°), il faudrait explorer une surface très importante. Cela conduirait à des essais extrêmement longs et fastidieux en raison des déplacements nécessaires pour réaliser les différentes analyses EBSD et images MEB. De plus, cela pourrait même devenir incompatible avec le montage actuel (dimensions de l'éprouvette et de la fenêtre d'observation). Enfin, l'augmentation de la tolérance de désorientation conduit à une augmentation de la dispersion de la réponse des nodules (évaluée ici en termes de facteur de Schmid et de module d'Young) risquant d'introduire un biais dans l'analyse.

De plus, un des objectifs principaux étant de mieux évaluer et comprendre l'influence des textures « mésoscopiques » à l'intérieur des régions appelées macrozones, il a été choisi d'étudier 2 ensembles de nodules associés à 2 textures cristallographiques différentes. Ainsi, en adoptant une stratégie plus pragmatique, les 2 zones indiquées sur la Figure 5-9 ont été retenues.

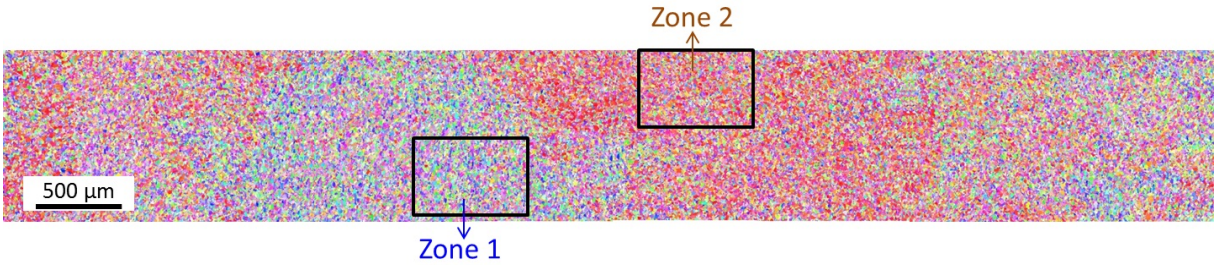


Figure 5-9 : Cartographique EBSD en surface de l'éprouvette avec les 2 zones d'observation.

Le choix de ces 2 zones a été effectué afin d'obtenir un compromis acceptable sur les critères suivants. Tout d'abord, chaque zone présente une texture relativement homogène. Les 2 textures sont radicalement différentes. En particulier, celle de la zone 2 correspond à

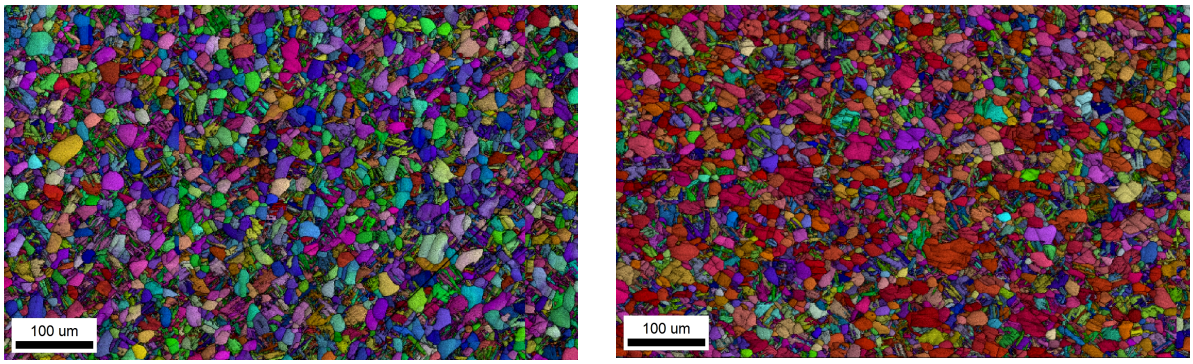
une texture du même type que les macrozones « rouges » au sein desquelles les fissures de fatigue fatales sont généralement observées.

Ensuite, les 2 zones sont de mêmes dimensions et contiennent donc environ le même nombre de nodules (environ 600) à analyser en vue d'obtenir pour chaque texture un jeu de données comparables. Les dimensions, et donc le nombre de nodules, ont été choisies pour disposer d'un échantillon de nodules plus riche que ceux mis en jeu dans les études passées, ceci étant possible en raison notamment des capacités actuelles des analyses EBSD. Pour rappel, l'étude de Florent Bridier (Bridier 2006) était basée sur l'analyse de 200 nodules. De plus, ces 2 zones ont été choisies de manière à ce qu'elles contiennent tout de même quelques nodules (de 3 à une dizaine) dont l'orientation cristallographique est proche, soit d'une orientation utilisée dans les simulations, soit d'une autre orientation quelconque dans la zone observée. L'analyse de ces nodules sera discutée au paragraphe 5.7.

Enfin, ces 2 zones sont relativement proches l'une de l'autre et proches du centre de la partie utile de l'éprouvette ce qui permet de minimiser les déplacements lors des observations pas à pas réalisées in situ sous MEB.

5.3.3 Description des 2 zones d'observations

Les 2 zones d'observation sélectionnées sont représentées sur la Figure 5-10. Elles présentent les mêmes dimensions de 740µm × 460µm. La zone 1 est constituée de 586 nodules correspondant à une fraction surfacique de 41,8%. La zone 2 est constituée de 624 nodules correspondant à une fraction surfacique de 43.7%.



Zone 1 Zone 2

Figure 5-10 : Cartes EBSD des 2 zones d'observation sélectionnées.

La distribution du diamètre des nodules dans les 2 zones est présentée dans la Figure 5-11. Le diamètre moyen est de 16.4 µm et 16.2 µm dans la zone 1 et zone 2 respectivement.

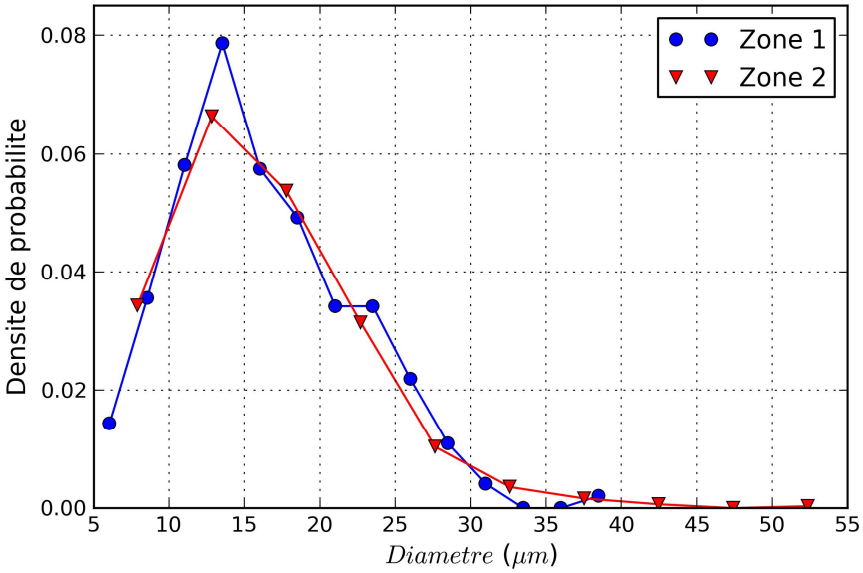
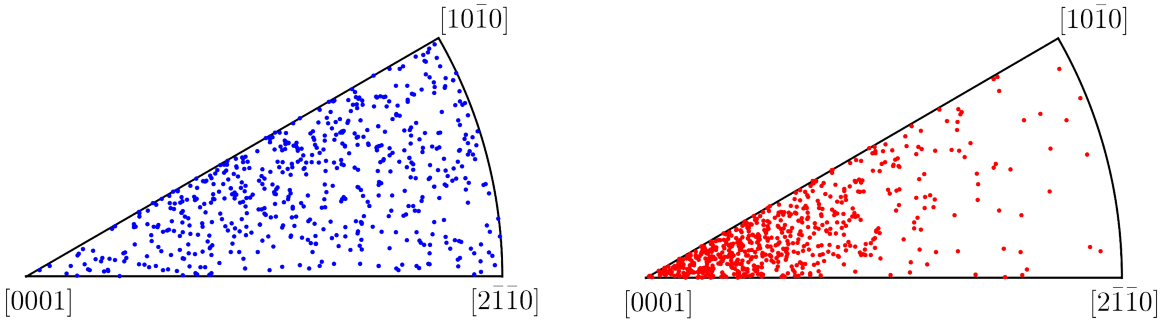


Figure 5-11 : Distribution du diamètre des nodules dans 2 zones d'observation.

Qualitativement, par l'examen des couleurs des 2 cartographies EBSD, la zone 1 peut paraître faiblement texturée, quoique les orientations « violettes-roses-bleues » semblent dominer légèrement, alors que la zone 2 présente clairement une texture marquée associée aux orientations « rouges-oranges ». La représentation de l'orientation cristallographique des nodules des 2 zones dans le triangle standard en projection stéréographique suivant l'axe de traction (Figure 5-12) confirme cette impression visuelle. Dans cette représentation, chaque point correspond à la moyenne des orientations pour chaque nodule.



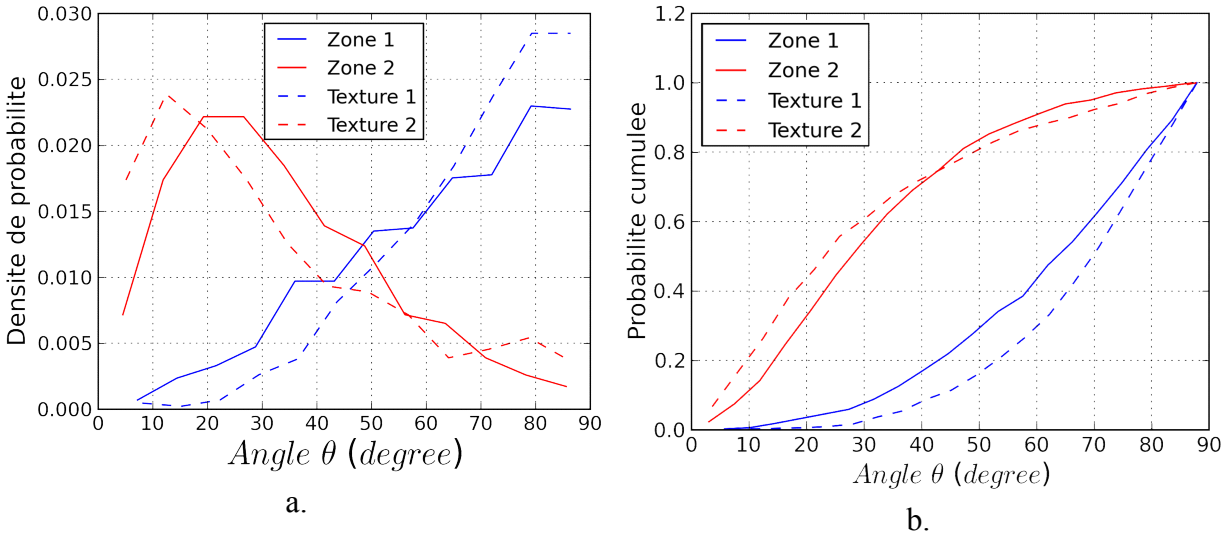
Zone1 : 586 nodules

Zone2 : 624 nodules

Figure 5-12 : Orientation des nodules représentée dans le triangle standard suivant la direction de traction pour 2 zones d'observation. Chaque point correspond à 1 nodule (moyenne des mesures associées à l'ensemble des pixels du nodule).

Comme cela avait été proposé au chapitre 4, afin de définir les textures utilisées au cours des simulations, on peut décrire la texture de ces 2 zones par la distribution de l'angle θ entre l'axe c de la maille hexagonale et l'axe de traction. Ces distributions sont représentées

ci-dessous en densité de probabilité (Figure 5-13.a) et en probabilité cumulée (Figure 5-13.b).



a. b.

Figure 5-13 : Distribution de l'angle θ dans 2 zones : a. Densité de probabilité, b. Probabilité cumulée.

Les distributions correspondant aux textures définies pour les simulations sont reportées en trait pointillé. On constate que la distribution établie expérimentalement pour la zone 1 (respectivement de la zone 2) est très proche de la distribution construite pour la texture 1 (respectivement pour la texture 2) dans les simulations du chapitre 4. En termes de distribution de l'angle θ, les 2 zones d'observation sont relativement complémentaires, tout comme les textures 1 et 2 (qui, pour rappel, avaient été conçues dans ce sens sur la base de textures mesurées). Ainsi, il sera légitime de comparer l'effet des textures observé expérimentalement de celui prédit par les simulations.

La capacité à détecter les traces de glissement au sein des nodules dépend de la résolution / grandissement des images MEB réalisées durant l'essai. Cependant, l'acquisition d'images contenant quelques nodules seulement (i.e. correspondant à un grandissement permettant de détecter « confortablement » les traces de glissement sur la base de l'expérience passée) correspondrait à une durée d'essai trop longue pour couvrir l'ensemble des nodules des 2 zones d'observation. Des traces de glissement peuvent toutefois être détectées à des grandissements plus faibles. Ainsi, le compromis suivant a été retenu en réalisant à chaque arrêt:

- une seule image de chaque zone à faible grandissement (x150) telle que celle représentée sur la Figure 5-14 pour la zone 1. La résolution numérique élevée de ces images permet en partie de compenser le faible grandissement. Il a été vérifié pendant les premiers arrêts qu'un nombre important de traces pouvait être détectées grâce à ces images.
- des images à plus fort grandissement (x1000) de 9 sous-fenêtres au sein de la zone 1 uniquement. Celles-ci sont indiquées sur la Figure 5-14. La réunion de ces 9 sous-

fenêtres correspond à 205 nodules parmi lesquels se trouvent les quelques nodules d'orientations particulières sélectionnées à l'avance dans la zone 1.

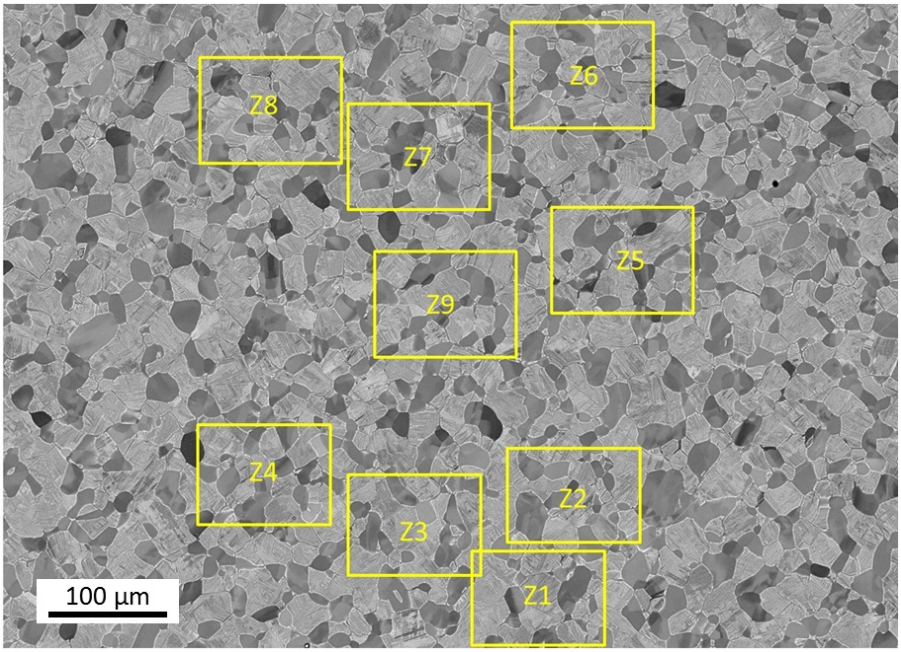


Figure 5-14 : Image MEB de la zone 1 observée à faible grandissement (x150) et position des 9 sous-fenêtres qui seront observées à fort grandissement (x1000).

L'orientation des 205 nodules de ces 9 sous-fenêtres est représentée sur le triangle standard ci-dessous (Figure 5-15). La répartition des orientations dans le triangle standard est comparable à celle observée pour la zone 1 entière (Figure 5-12).

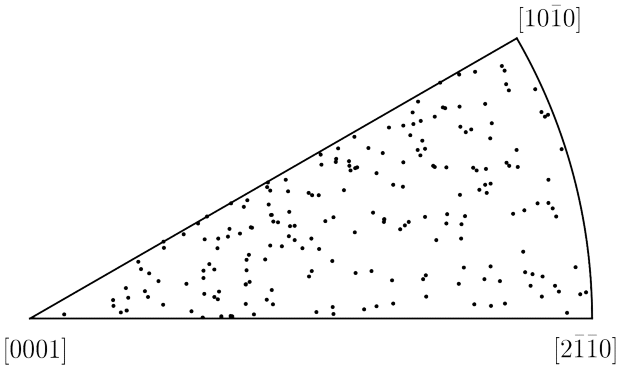


Figure 5-15 : Triangle standard avec des nodules observés dans les 9 sous-fenêtres de la zone 1.

5.4 Identification des systèmes de glissement activés

L'analyse des traces détectées et l'identification des systèmes de glissement activés sont effectuées suivant la démarche décrite ci-dessous et illustrée sur la Figure 5-16.

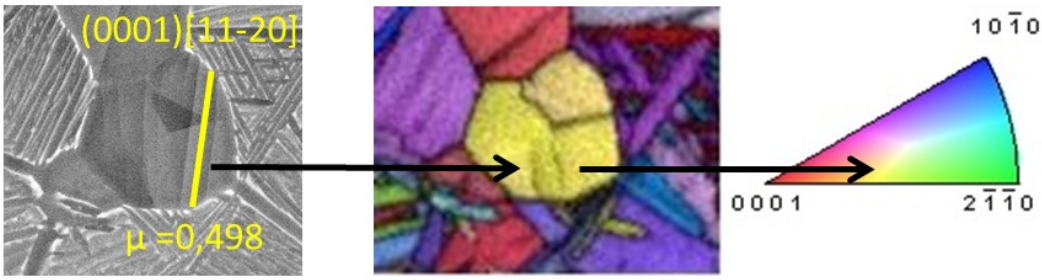


Figure 5-16 : Analyse des traces de glissement détectées pour l'identification des systèmes activés.

Soit une trace de glissement (ou plusieurs traces parallèles) apparue(s) au sein d'un nodule au niveau de contrainte Σ_k (associé à l'arrêt k). On mesure l'angle π_c entre la trace et la direction de traction (correspondant à la direction horizontale sur toutes les images MEB et cartes EBSD). La trace de glissement correspond à l'intersection du plan de glissement et de la surface libre de l'éprouvette. Connaissant l'orientation cristalline du nodule étudié (décrite par 3 angles d'Euler), il est possible de calculer l'angle π_i entre la trace théorique d'un plan de glissement i et la direction de traction. Le calcul de cet angle (voir annexe A.3) étant effectué pour tous les plans de glissement potentiels, la comparaison de l'angle mesuré π_c avec les angles calculés π_i permet d'identifier le plan cristallographique du système de glissement activé entre Σ_{k-1} et Σ_k. L'analyse est réalisée à l'aide de l'orientation cristalline mesurée par analyse EBSD avant l'essai. Le niveau de déformation atteint durant l'essai est suffisamment faible pour négliger les rotations cristallines, ainsi que les évolutions morphologiques des grains.

Lorsqu'il existe plusieurs systèmes de glissement définis avec le même plan cristallographique (mais avec des directions de glissement différentes, comme c'est le cas pour les systèmes de glissement basal), on suppose que le système activé est celui qui présente le facteur de Schmid le plus élevé. Lorsque l'écart entre la trace observée et les traces calculées est trop important (environ 10°), le système activé est qualifié de non-identifié et ne sera pas pris en compte pour les analyses ultérieures. L'ensemble des configurations ambiguës représente 15% des nodules présentant des traces de glissement. L'origine de telles ambiguïtés peut être multiple : (i) une indexation EBSD qui intègre partiellement une information issue d'un nodule sous couche ; (ii) une observation des traces qui intègre également une activité de glissement sous la surface (rôle de la tension d'accélération) ; (iii) une non prise en compte de systèmes de glissement moins habituels.

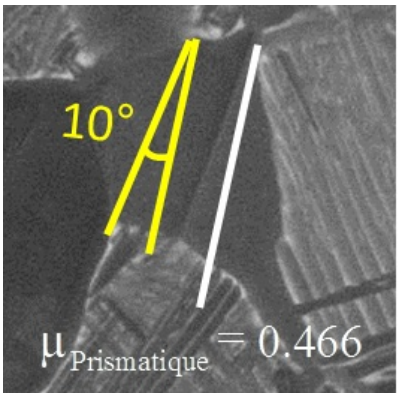
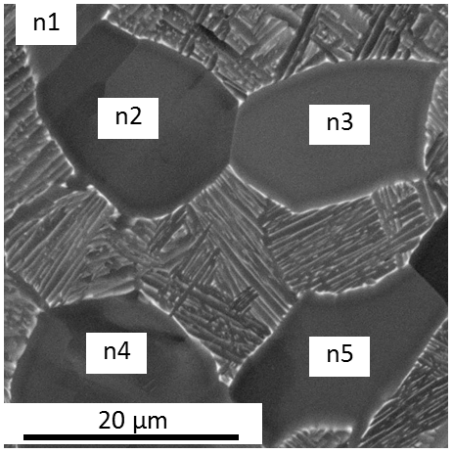
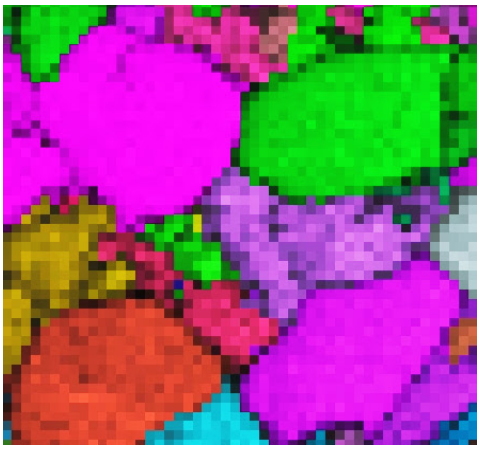


Figure 5-17 : Cas d'ambiguïtés de l'identification de système activé : écart important de l'angle mesuré et l'angle calculé

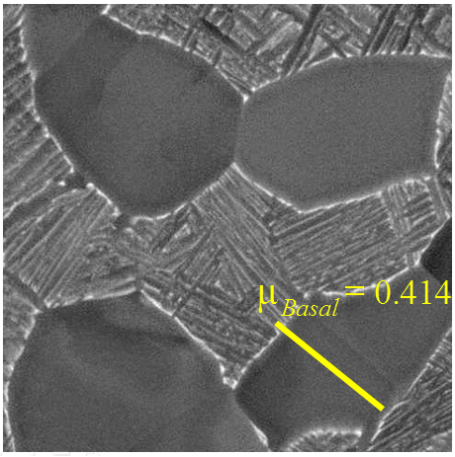
La Figure 5-18, accompagnée du Tableau 5-3, illustre la procédure d'identification des systèmes activés sur un exemple extrait d'une image réalisée à fort grandissement dans la zone 1. Cet exemple permet d'insister sur le fait que la principale information retenue dans l'analyse est l'activation de nouveaux systèmes de glissement, mais pas l'apparition de nouvelles traces d'un système déjà activé au sein du nodule étudié. Par exemple, dans le nodule n3, une trace de plan de glissement prismatique est détectée à 850MPa alors qu'aucune trace de ce système n'avait été observée au cours des étapes précédentes. Cet évènement est noté dans le Tableau 5-3. En revanche, l'apparition à 870MPa de nouvelles traces associées au même plan n'est pas considérée dans l'analyse présentée ici.



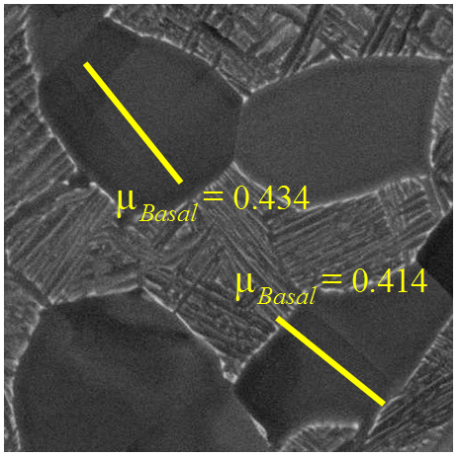
a. Σ = 0 MPa



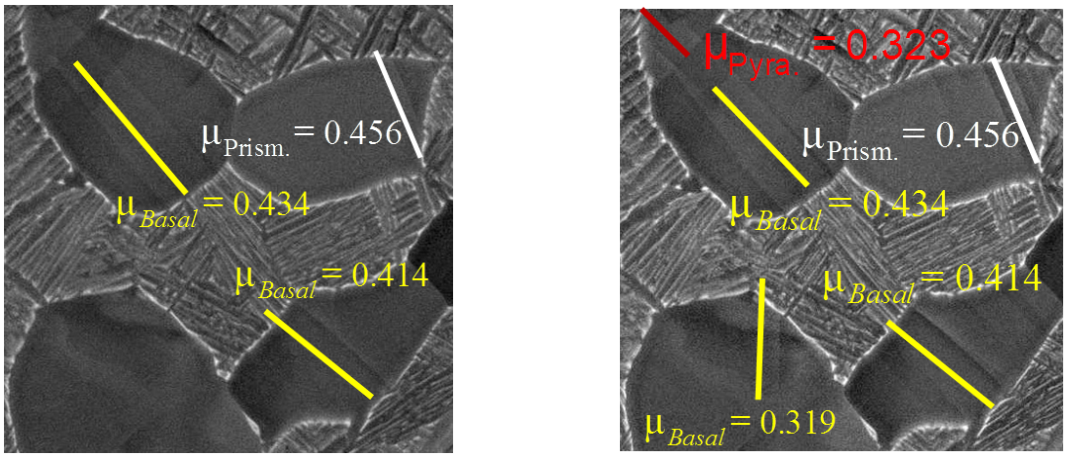
b. EBSD



c. Σ = 820 MPa



d. Σ = 830 MPa



e. Σ = 850MPa f. Σ = 870 MPa

Figure 5-18 : Illustration de l'identification des systèmes de glissement activés.

	Angle Euler (°)			Σ (MPa)	$\Pi_{Calculé}$	Système de glissement	μ
	φ_1	ϕ	φ_2				
n1	356	61	5	870	49°	(-1 0 1 1)[1 -2 1 0] pyram.	0.323
n2	315	84	36	830	45°	(0 0 0 1)[1 1 -2 0] basal	0.434
n3	8	58	359	850	66°	(-1 1 0 0)[1 1 -2 0] prism	0.456
n4	88	70	263	870	88°	(0 0 0 1)[1 1 -2 0] basal	0.319
n5	324	82	34	820	36°	(0 0 0 1)[1 1 -2 0] basal	0.414

Tableau 5-3: Analyse de l'activation des systèmes de glissement au sein des nodules représentés sur les images de la Figure 5-18.

5.5 Analyse des systèmes de glissement activés à la fin de l'essai

On se propose tout d'abord d'étudier l'ensemble des systèmes de glissement activés durant la totalité de l'essai, c'est-à-dire sans tenir compte de la chronologie de leur activation qui sera discutée ultérieurement au paragraphe 5.6. Cette première analyse permettra de fournir une description globale de l'activité de glissement plastique dans la plage de contraintes étudiée, qui reste compatible avec des sollicitations de type fatigue par exemple. De plus, on s'attachera à discuter de l'effet du grandissement des images et du biais qu'il peut introduire dans la détection des traces. Enfin la comparaison des résultats obtenus sur les 2 zones donnera un premier aperçu du rôle des textures.

5.5.1 Résultats obtenus à fort grandissement (x1000)

La Figure 5-19 représente l'image MEB, à la dernière étape de contraintes (870MPa), de la sous-fenêtre Z6 au sein de la zone 1 présentant, parmi les 9 sous-fenêtres observées, le plus grand nombre de traces.

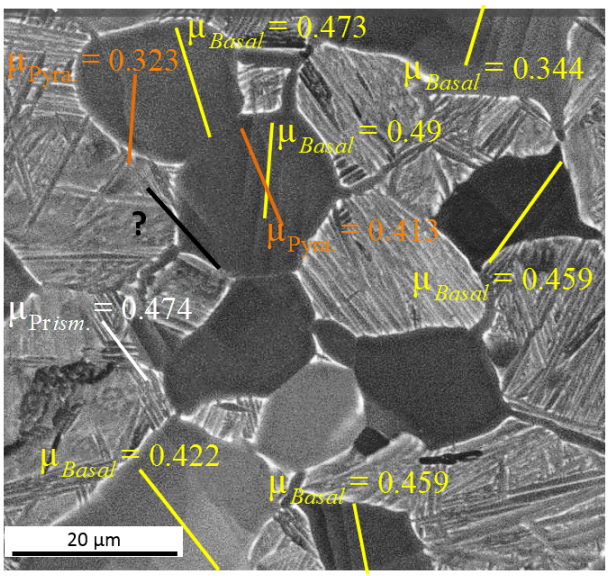


Figure 5-19 : Traces de glissement observées dans la sous-fenêtre Z6 à la dernière étape de contrainte (870 MPa).

Sur la base des systèmes de glissement observés au cours des travaux de Florent Bridier (Bridier 2006), les systèmes de glissement potentiels suivant ont été considérés lors de l'analyse des traces sur les images réalisées à fort grandissement:

- les systèmes de glissement basal (3 systèmes),
- Les systèmes de glissement prismatique (3 systèmes),
- Les systèmes de glissement pyramidal de 1ère espèce associés aux directions de glissement <a> (6 systèmes) et <a+c> (12 systèmes),
- Les systèmes de glissement pyramidal de 2nde espèce associés à la direction de glissement <a+c> (6 systèmes).

A la fin de l'essai, des traces de glissement sont observées dans 100 nodules (soit 49%) parmi les 205 nodules contenus dans les 9 images MEB réalisées à fort grandissement (x1000) au sein de la zone 1. Le Tableau 5-4 et le Tableau 5-5 récapitulent les résultats de l'analyse des traces de glissement détectées à la fin de l'essai. Le premier tableau indique, pour chaque famille de systèmes de glissement considéré, le nombre et la fraction de nodules au sein desquels au moins une trace de glissement associée à ce système a été observée.

	Nb de nodules	% de nodules
Glissement basal	52	26.4
Glissement prismatique	33	16.1
Glissement pyramidal de 1ère espèce	11	5.4
Glissement pyramidal de 2nde espèce	2	1
Système de glissement non-identifié	16	7.8

Tableau 5-4: Activité de glissement par système.

Des traces de glissement basal sont observées dans 52 nodules, correspondant à 26% de l'ensemble des nodules analysés mais aussi à légèrement plus que la moitié des nodules présentant des traces. Des traces de glissement prismatique sont observées dans un nombre plus faible de nodules représentant un tiers des nodules présentant du glissement plastique. Des traces de glissement pyramidal ont également été détectées dans des proportions nettement plus faibles mais non négligeables puisqu'elles sont observées dans 13 nodules. La majorité des traces correspond alors a du glissement pyramidal de première espèce (pour 11 nodules). Dans la grande majorité des cas où le système de glissement a pu être identifié, l'écart entre la trace observée et la trace calculée est au maximum de 2 ou 3 degrés.

On notera que la somme du nombre de nodules présentant des traces reporté dans le Tableau 5-4 est supérieure au nombre total de nodules avec traces car on observe dans certains nodules l'activation de plusieurs systèmes de glissement. L'activation de 2 systèmes de glissement a été observé dans 14 nodules, soit 7% de l'ensemble des nodules analysés. Le nombre maximal des systèmes activés dans un nodule est de 3 et ce cas de figure n'a été constaté que pour un seule nodule. Ainsi, dans le Tableau 5-5, on distingue les données relatives aux nodules où un seul système de glissement s'est activé de celles relatives aux nodules où plusieurs systèmes de glissement se sont activés.

	Nb de nodules	% de nodules
1 système de glissement activé	**85**	**41.5**
basal	46	22.4
prismatique (primaire)	23	11.2
prismatique (secondaire)	2	1
pyramidal 1ère espèce <a> (primaire)	2	1
pyramidal 1ère espèce <a> (secondaire)	1	0.5
pyramidal 2ème espèce (primaire)	1	0.5
non-identifié	10	4.9
2 système de glissement activés	**14**	**6.8**
dont 1 système basal	5	2.5
dont 1 ou 2 systèmes prismatiques	7	3.5
sans basal ni prismatique	2	1
3 système de glissement activés	**1**	**0.5**

Tableau 5-5: Activité de glissement simple ou multiple par système.

85 nodules, soit environ 42% de l'ensemble des nodules analysés, présentent un seul système de glissement activé. Pour la moitié de ces nodules, des traces de glissement basal sont observées. Un peu moins d'un tiers de ces nodules ont développé des traces de glissement prismatique. Par ailleurs, pour 2 nodules, le système de glissement prismatique activé est le système secondaire. L'activation seule du glissement pyramidal est très rare (<2%).

Lorsque 2 systèmes sont activés dans un nodule, dans la majorité des cas, l'un des deux systèmes de glissement activés est soit basal, soit prismatique, l'autre système étant pyramidal ou non-identifié. Dans 2 cas, 2 systèmes prismatiques sont activés. Aucun nodule ne présente des traces de glissement basal et prismatique.

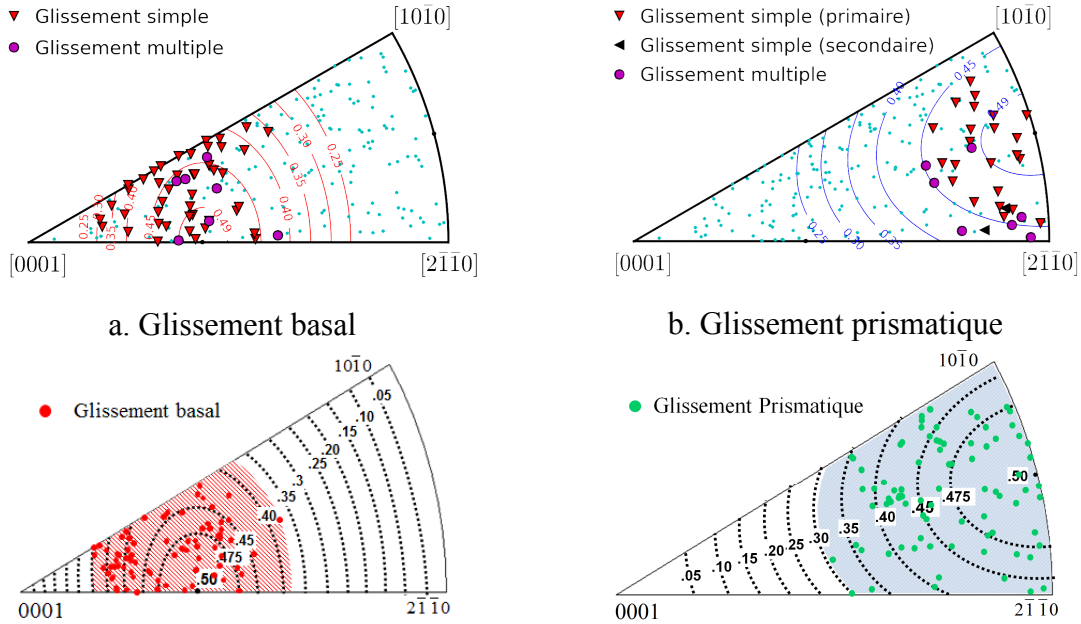
La Figure 5-20 représente, dans le triangle standard, l'orientation des nodules au sein desquels des traces de glissement basal ou prismatique ont été observées. Lorsque le nodule est indiqué avec la mention « glissement multiple », au moins un des systèmes activés correspond à la famille considérée, l'information sur l'autre système (ou les autres systèmes) activés n'étant pas indiquée. Ces figures permettent d'identifier les domaines d'orientation favorisant l'activation du glissement. Pour faciliter l'analyse, les iso-valeurs du facteur de Schmid du système de glissement considéré sont tracées dans chaque triangle standard.

Les nodules présentant du glissement basal (Figure 5-20.a) présentent un facteur de Schmid supérieur à 0.3. Cependant, l'activation du glissement dans les nodules au facteur de Schmid compris entre 0.3 et 0.35 est observée uniquement « à gauche » du pôle d'un grain bien orienté (μ=0.5). De façon générale, l'activation semble moins fréquente « à droite » de ce pôle. Cette tendance sera quantifiée ultérieurement (paragraphe 5.6) en considérant la fraction de nodules activés parmi l'ensemble des nodules d'une classe d'orientation donnée (définie, pour simplifier, par sa position dans le triangle standard à travers le facteur de Schmid et/ou l'angle θ entre la direction de traction et l'axe c du cristal).

Les grains présentant du glissement prismatique uniquement (glissement simple) présentent un facteur de Schmid supérieur à 0.45 (Figure 5-20.b). Les grains qui présentent du glissement multiple avec un système prismatique activé montrent un facteur de Schmid légèrement plus faible en général et/ou se situent à la périphérie du triangle standard.

Les domaines favorisant le glissement prismatique et basal sont tout à fait similaires à ceux identifiés par Florent Bridier (Bridier 2006) dont les résultats sont indiqués sur la Figure 5-20.c-d. Cependant, la proportion de nodules activant du glissement basal, relativement aux nodules activant du glissement prismatique, est plus importante dans notre étude. De plus, aucun glissement prismatique n'a été observé au sein de nodules dont le facteur de Schmid est inférieur à 0.43, alors que de tels cas de figure avaient été reportés par Florent Bridier au même niveau de contraintes (Figure 5-20.d). De plus, des traces de glissement basal sont observées dans un nodule dont le facteur de Schmid basal est du même ordre que le facteur de Schmid prismatique, alors que la tendance contraire semblait se dégager des travaux de Florent Bridier (les données manquent dans notre cas pour établir une véritable tendance). On notera également dès maintenant qu'un nombre non-négligeable de nodules possédant un facteur de Schmid supérieur à 0.45 sur un système n'active aucun glissement au niveau de contrainte considéré (870MPa). Ce résultat est le reflet de l'hétérogénéité des contraintes, et donc de la cission résolue, d'un grain à un autre, même si ceux-ci présentent une orientation proche. Les nodules présentant du glissement pyramidal, événement plutôt rare comme cela a été vu dans les statistiques globales, présentent un facteur de Schmid plutôt élevé, mais un nombre très important de nodules avec un facteur de

Schmid supérieur n'active aucun glissement. Les figures de pôles inverses correspondantes sont reportées en annexe.



a. Glissement basal

b. Glissement prismatique

c. Glissement basal (Bridier 2006)

d. Glissement prismatique (Bridier 2006)

Figure 5-20 : (a-b) Orientation des nodules présentant des traces de glissement basal ou prismatique (les points indiqués avec la mention « glissement multiple » signifient qu'au moins un des systèmes activés correspond à la famille considérée ; les points verts correspondent aux nodules analysés ne présentant pas de traces sur le système considéré) ; (c-d) Résultats issus de (Bridier 2006).

5.5.2 Résultats obtenus à faible grandissement (x150)

On présente ici les résultats de l'identification des systèmes de glissement activés après l'analyse des traces observées sur l'ensemble des zones 1 et 2 à faible grandissement. Afin de simplifier la phase d'identification, et compte-tenu de la prépondérance du glissement basal et du glissement prismatique, seuls le plan de base et les plans prismatiques sont pris en compte dans l'analyse. Les résultats obtenus pour les 2 zones sont indiqués dans le Tableau 5-6. A la fin de l'essai, au sein de la zone 1, 114 nodules présentent des traces de glissement, soit environ 20% de l'ensemble des 586 nodules analysés. Ce pourcentage est environ deux fois plus faible que celui obtenu à fort grandissement. Ainsi un nombre important de systèmes de glissement n'est pas détecté à faible grandissement. En revanche, la proportion des systèmes de glissement basal et prismatique activés parmi l'ensemble des nodules où des traces ont pu être détectées est semblable à celle constatée à fort grandissement. En effet, les nodules où un système de glissement basal s'est activé représentent un peu plus de la moitié des nodules activés (59/114). De même, les nodules où un système de glissement prismatique s'est activé représentent un peu moins d'un tiers des nodules activés (35/114). Dans ce cas, il s'agit toujours du système prismatique primaire. Cela indique que le biais induit pas le faible grandissement est le même quel que soit le type de système de

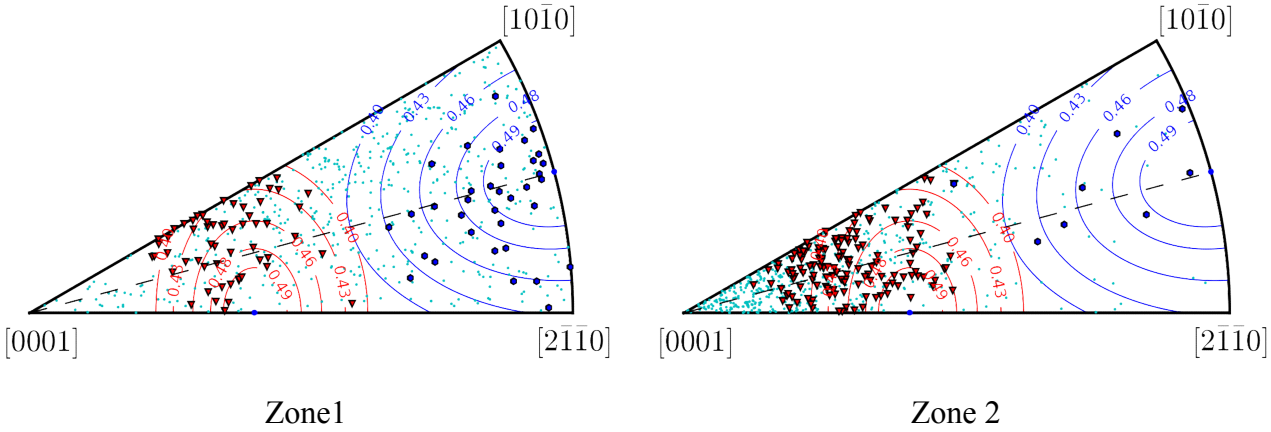
glissement. Le reste des nodules activés (~3.4%) ne correspond pas à du glissement basal ou prismatique.

Pour la zone 2, à la fin de l'essai, 148 nodules présentent des traces de glissement, soit environ 24% de l'ensemble des 624 nodules analysés. La fraction de nodules activés dans la zone est donc très légèrement supérieure à celle de la zone 2. Parmi l'ensemble des nodules activés, les nodules présentant des traces de glissement basal sont très largement prépondérants (88%). Les autres nodules activés se répartissent assez équitablement entre glissement prismatique (7 nodules) et glissement non-identifié (11 nodules).

	Zone 1		Zone 2	
	Nb de nodules	% de nodules	Nb de nodules	% de nodules
1 système de glissement activé	**114**	**19.5**	**148**	**23.7**
basal	59	10.1	130	20.8
prismatique (primaire)	35	6	7	1.1
non-identifié	20	3.4	11	1.8
2 systèmes de glissement activés	0	0	1	0.2

Tableau 5-6 : Systèmes de glissement activés au sein des nodules des zones 1 et 2.

Cette répartition des systèmes de glissement, radicalement différente de celle observée pour la zone 1, résulte de la texture particulière de la zone 2. En effet, seulement une trentaine de nodules (~5%) présente un facteur de Schmid supérieure à 0.4 sur un système de glissement prismatique. La Figure 5-21 illustre ce point. Pour la zone 1, la répartition des nodules activés dans le triangle standard est tout à fait similaire à celle constatée pour les 9 sous-fenêtres seulement (Figure 5-20). L'analyse avec les 2 grandissements conduit donc à l'identification des mêmes domaines d'orientation favorables au glissement. Pour la zone 2, les 7 nodules présentant uniquement du glissement prismatique se situent dans le domaine de facteur de Schmid prismatique supérieur à 0.4. Le domaine d'orientation favorable au glissement basal pour la zone 2 inclut celui identifié sur la zone 1. Mais, de plus, on observe plus de nodules activés dans la région où le facteur de Schmid basal est compris entre 0.3 et 0.4 plus proche du pôle [0001] (i.e. « à gauche » du pôle où le facteur de Schmid basal vaut 0.5). Mise à part cette différence, les domaines d'activation sont très proches pour les deux textures. La différence porte sur le nombre de nodules activés (ou sur la fraction de nodules par rapport à la totalité des nodules), ce qui résulte directement de la texture de chaque zone. La représentation des données mise en œuvre dans le paragraphe suivant vise à mieux prendre en compte les textures dans l'analyse. Il s'agit notamment d'analyser la fraction de nodules activés par classe d'orientation afin de comparer plus légitiment les résultats obtenus avec les deux textures différentes. De plus, l'information sur la chronologie d'activation, en termes de contraintes, permettra de déterminer si certains domaines d'orientation, associés à une texture, correspondent à une activation plus précoce.



Zone1 Zone 2

Figure 5-21 : Orientation des nodules présentant du glissement basal (rouge) ou prismatique (bleu) dans le triangle standard cartographié en iso-valeur du facteur de Schmid (tous les autres nodules analysés sont représentés en vert).

5.5.3 Influence du grandissement

La comparaison des résultats précédents, obtenus à fort grandissement sur 9 sous-fenêtres de la zone 1 et à faible grandissement sur l'ensemble de la zone 1, a montré que:

- On détecte presque deux fois moins de nodules activés à faible grandissement.
- Les domaines d'orientation favorables au glissement identifiés avec les 2 niveaux de grandissement sont très proches. De plus, les poids relatifs du glissement basal et prismatique restent très proches.

Afin d'affiner cette comparaison et avoir une meilleure lecture des résultats obtenus à faible grandissement, ces derniers ont été comparés à ceux obtenus à fort grandissement pour les mêmes 9 sous-fenêtres. Des traces de glissement y sont observés dans seulement 47 nodules, au lieu de 100 à fort grandissement. De plus, en se basant sur 15 traces de glissement basal et 15 traces de glissement prismatique détectées pour les 2 niveaux de grandissement, un peu moins de la moitié des traces est détectée au même niveau de contraintes. Les autres traces sont détectées en majorité à l'étape suivante. 3 traces sont observées à la deuxième ou troisième étape suivante. La Figure 5-22 décrit la distribution de l'écart de détection de ces 30 traces, séparément pour les systèmes de glissement basal et prismatique. L'écart de détection est donc sensiblement le même pour les 2 familles de systèmes.

Ainsi, le biais introduit par le faible grandissement, et donc la moindre résolution spatiale, porte sur le nombre total de nodules détectés et sur le seuil d'activation de ces nodules qui peut être estimé à environ 8 MPa en moyenne. Il est identique pour les traces de glissement basal et prismatique.

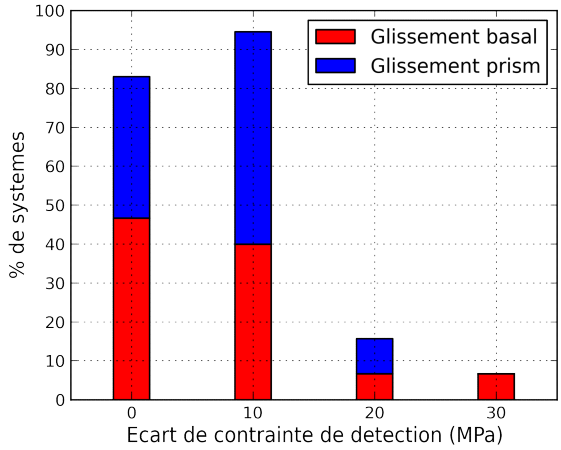


Figure 5-22 : Ecart entre la contrainte de détection des traces de glissement à faible grandissement et celle à fort grandissement (pour 30 traces de glissement).

5.5.4 Effet de la taille des nodules

La Figure 5-23 représente la distribution de la taille des nodules activant du glissement basal ou prismatique à la fin de l'essai, comparée à celle de tous les nodules analysés. Les données indiquées ici sont relatives aux nodules des 9 sous-fenêtres de la zone 1 observées à fort grandissement. On remarque que l' activation du glissement basal se produit globalement au sein de nodules plus gros. En revanche, la distribution de la taille des nodules activant du glissement prismatique est très proche de celle établie pour l'ensemble des nodules analysées.

L'activation plus importante du glissement basal devant le glissement prismatique pourrait être en partie expliquée par une différence des cissions critiques liée à un effet de taille de grain (effet Hall-Petch).

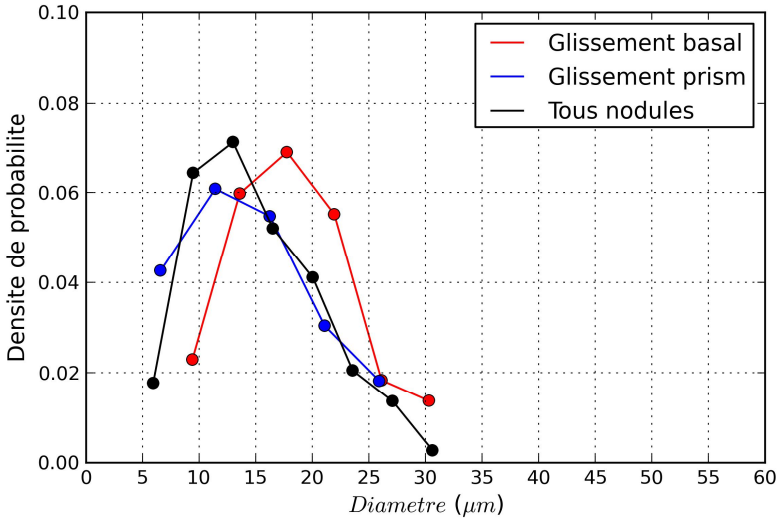


Figure 5-23 : Distribution de la taille des nodules pour tous les nodules analysés, pour les nodules activant du glissement basal et pour les nodules activant du glissement prismatique (observation des 9 sous-fenêtres de la zone 1 à fort grandissement).

5.6 Analyse de la chronologie d'activation du glissement en relation avec l'orientation cristallographique

5.6.1 Résultats obtenus à fort grandissement (x1000)

La Figure 5-24 illustre la chronologie d'activation des systèmes de glissement basal et prismatique en fonction du niveau de contrainte. Pour chaque plage de contraintes, on représente:

- la fraction totale de nodules au sein desquels des traces de glissement basal ou prismatique sont observées à l'étape considérée (fraction cumulée de nodules activés)
- la fraction de nodules au sein desquels des traces d'un nouveau système de glissement basal ou prismatique sont apparues dans la plage de contraintes considérée (fraction de nouveau nodules activés).

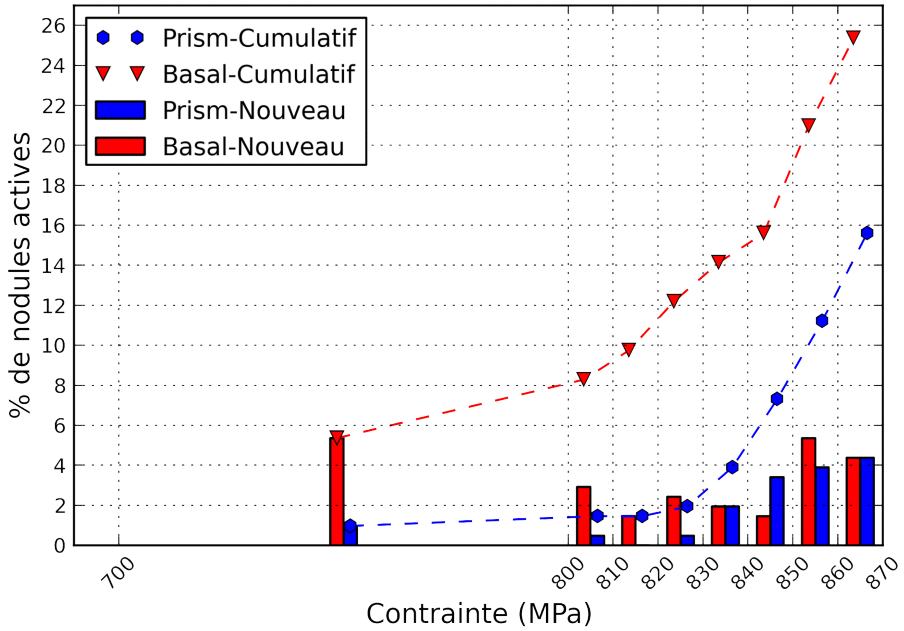


Figure 5-24 : Chronologie de l'activation des systèmes de glissement basal et prismatique.

Avant de décrire ces données, 2 remarques préalables sont nécessaires. Dans le but de faciliter la comparaison de ces résultats à ceux obtenus à faible grandissement, les données sont représentées en pourcentage de nodules. On veillera à garder à l'esprit que ces informations résultent d'un échantillon d'environ 200 nodules, ainsi 1% correspond seulement à 2 nodules. La première plage de contraintes comprise entre 700 et 800 MPa est plus large que les autres qui correspondent à des incréments constants de 10MPa.

On constate que le taux d'activation des systèmes de glissement augmente progressivement avec le niveau de contraintes. Considérons tout d'abord les systèmes de glissement basal. Entre 700 et 800 MPa, des systèmes de glissement s'activent dans 5% des

nodules. Ensuite, entre 800 et 850 MPa, la fraction de nouveaux nodules activés augmente de 10% (c'est-à-dire 1% à 3% de nouveaux nodules activés à chaque étape). Enfin, au cours des 2 dernières étapes (850 - 870 MPa), la fraction de nodules activés augmente à nouveau de 10% (soit environ 5% par étape).

Une cinétique d'activation du glissement prismatique similaire mais « décalée » est observée. En effet, celle-ci semble plus lente et probablement plus tardive (il aurait fallu réaliser quelques étapes supplémentaires entre 700 et 800 MPa pour étayer ce dernier point). Dans la plage 700-830 MPa, 2% des nodules seulement sont activés, alors que 12% de nodules ont activés du glissement basal au même niveau de contrainte. De plus, la texture dans la zone 1 ne privilégie pas les orientations favorisant a priori le glissement basal. Chaque étape correspond à l'activation de 0, 1 ou 2 nouveaux nodules seulement. Ces fluctuations traduisent le fait que les premiers nodules activés correspondent à des événements rares associés aux valeurs extrêmes de la cission résolue dans le nodule, en regard du nombre total de nodules analysés. Ensuite, entre 830 et 870 MPa, la fraction de nodules activés augmente de 13% (correspondant à une augmentation plus régulière de 2 à 4% par étape).

Plusieurs raisons peuvent expliquer la différence de l'activation du glissement basal et du glissement prismatique. La première est la suivante: la cission résolue critique sur les systèmes de glissement basal serait plus faible que celle des systèmes prismatiques. La seconde hypothèse est: l'état de contrainte des nodules favorablement orientés pour le glissement basal conduit à une activation plus précoce du glissement basal. La réalité est très certainement une combinaison de ces 2 explications. La texture peut également jouer un rôle. En effet, l'analyse précédente considérait la fraction de nodules activés. La tendance observée peut être expliquée par une texture telle que les nodules favorablement orientés pour le glissement basal sont plus nombreux que ceux favorablement orientés pour le glissement prismatique. Or, ce n'est pas le cas pour l'ensemble des nodules analysés. Pour mieux décrire cela, on s'intéresse dans ce qui suit à la chronologie d'activation par classe d'orientation.

L'analyse de la chronologie d'activation des systèmes de glissement en relation avec l'orientation cristallographique est décrite par la Figure 5-26. A chaque niveau de contrainte, on représente l'orientation des nodules dans le triangle standard indiquant également les iso-valeurs de facteur de Schmid, comme cela a été fait précédemment (cf. Figure 5-20). On y distingue ici les nodules activés aux étapes précédentes (symboles pleins) des nodules activés durant l'étape en cours (symboles mi-pleins). A côté de chaque figure de pôles inverse, on représente dans un graphique à barres la fraction de nouveaux nodules activés dans une classe d'orientation. Une classe d'orientation est définie par un intervalle d'angle θ entre l'axe c de la maille hexagonale et la direction de traction. Chaque barre associée à un intervalle d'angle θ indique alors la fraction de nouveaux nodules activés par rapport au nombre total de nodules dans cet intervalle. Par exemple, à 800 MPa, 2 nodules activent du glissement prismatique (points bleus non-pleins). L'un deux appartient à la classe $85 < \theta < 90$, et l'autre à la classe $75 < \theta < 80$. L'activation de chaque nodule représente 4-5% des nodules appartenant au même intervalle d'angle θ composé d'environ 20 nodules.

A 810 MPa, un 3ème nodule active du glissement prismatique, son facteur de Schmid étant compris entre 0.45 et 0.48, et l'angle θ entre 70° et 75°. Afin d'aider à faire le lien entre le triangle standard et le graphique à barres par classe d'angle θ, on rappelle en Figure 5-25 le triangle standard cartographié en iso-θ.

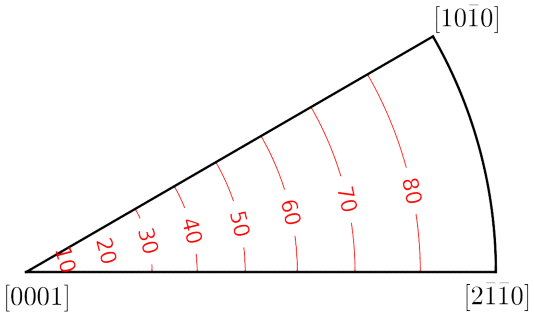
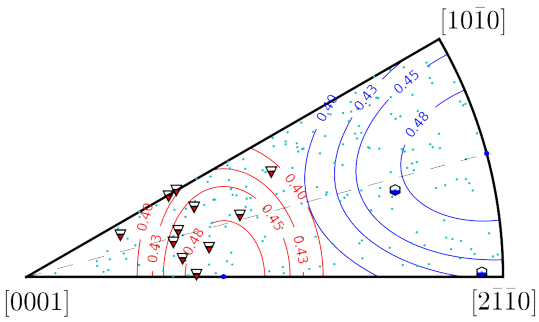
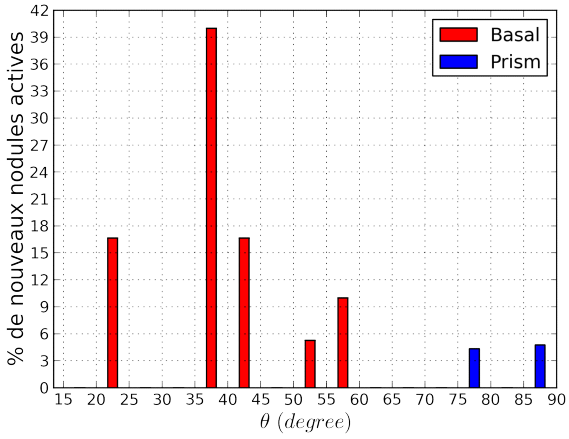
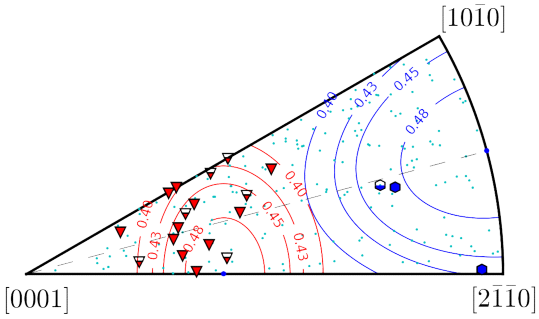


Figure 5-25 : Iso-valeur de l'angle θ dans le triangle standard.

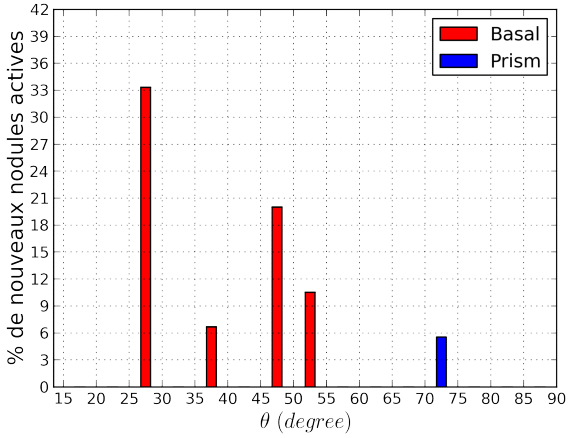


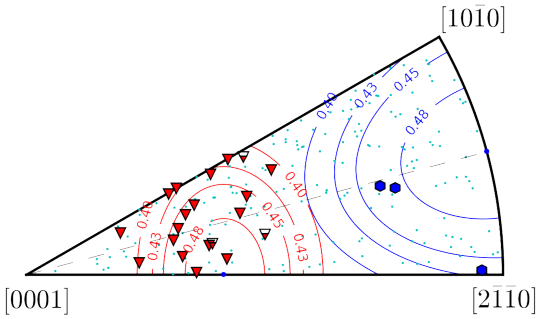
800 MPa



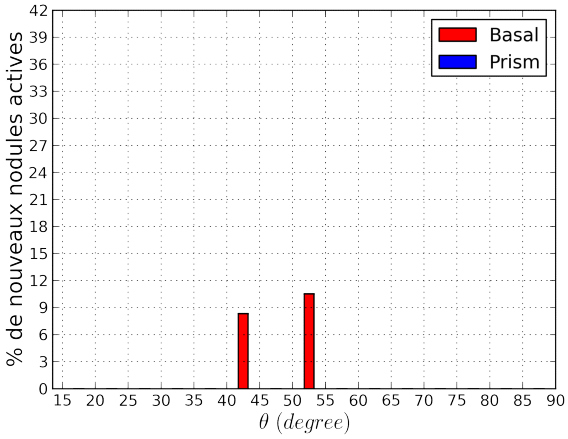


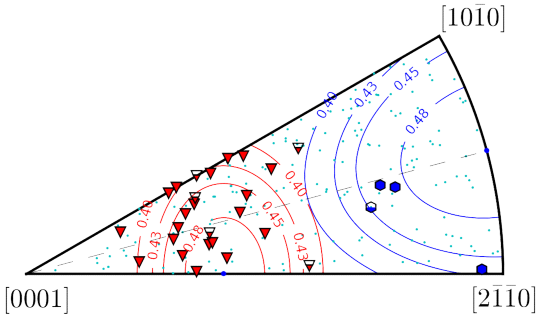
810 MPa



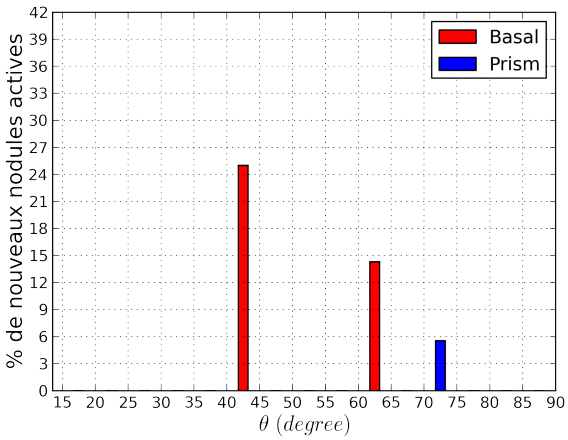


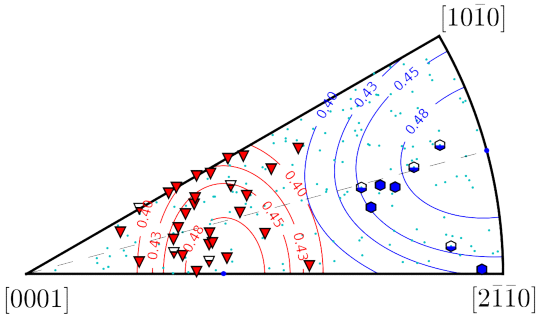
820 MPa



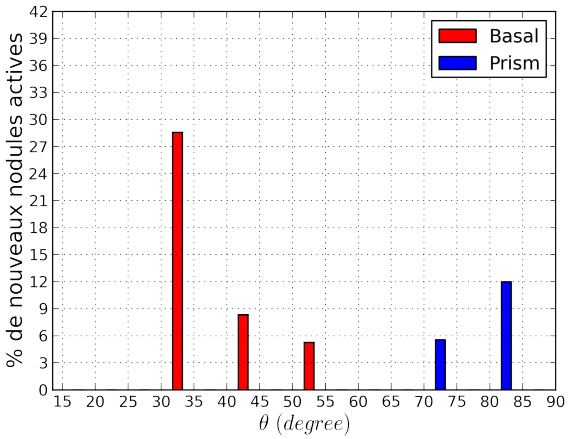


830 MPa





840 MPa



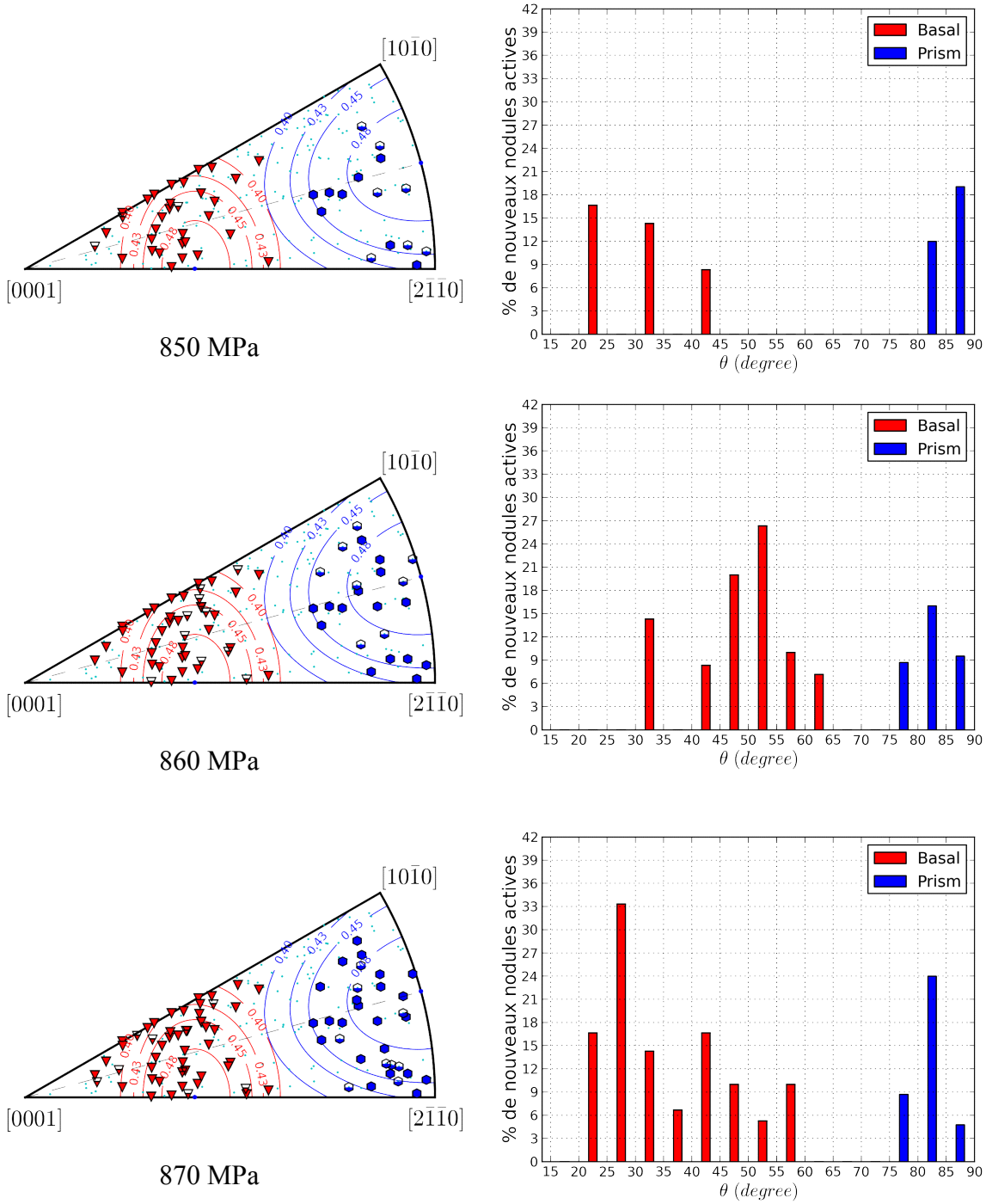


Figure 5-26 : Chronologie de l'activation des systèmes de glissement basal et prismatique.

De la lecture de cet ensemble de figures, ainsi que celle représentant la fraction total de nodules activés par classe d'angle θ à la fin de l'essai (Figure 5-27), on constate les principales tendances suivantes:

- Le glissement basal s'active plus et de façon plus précoce au sein des nodules dont l'angle θ est compris entre 20° et 55° environ. Pour les nodules avec θ compris entre 55° et 65°, le glissement basal est observé de façon moins

fréquente (rapporté, pour rappel, au nombre de nodules de cette classe d'orientation et non au nombre total).

- Aucun glissement basal n'a été observé pour des nodules présentant un angle $\theta < 20°$ ou $\theta > 65°$.
- Le glissement prismatique s'active de façon plus significative à partir de 840MPa. Cependant, quelques nodules se sont activés avant, mais de façon plus ponctuelle et irrégulière (2 nodules activés au maximum par étape). L'activation du glissement prismatique s'effectue pour des nodules avec $\theta > 70°$ mais elle est nettement plus marquée pour les nodules avec $\theta > 80°$. Vers la fin de l'essai, la vitesse d'évolution de la fraction des nodules activés en prismatique semble proche de celle pour le glissement basal (cf. Figure 5-24 en fonction des contraintes).

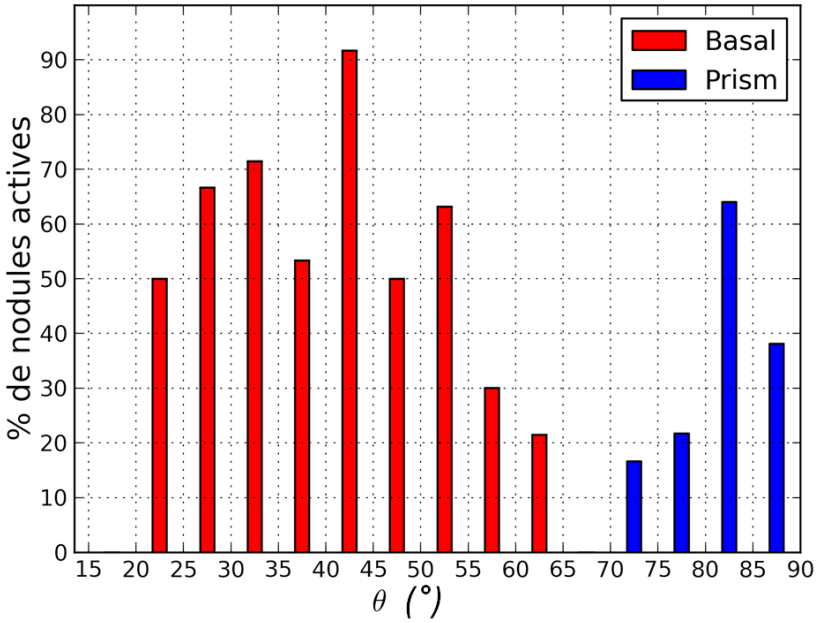


Figure 5-27 : Fraction totale de nodules activés par type de systèmes de glissement et par classe d'angle θ à la fin de l'essai (870 MPa).

L'analyse de la Figure 5-27 permet de dégager les conclusions suivantes.

- Le domaine $20° < \theta < 55°$ est très favorable à l'activation du glissement basal. A la fin de l'essai (870MPa), environ 60-65% des nodules de chaque classe d'orientation activent du glissement basal. En particulier dans la classe $40° < \theta < 45°$, les nodules activés représentent 91% des nodules de cette classe. On notera, que pour le domaine d'orientation $20° < \theta < 55°$, la fluctuation de la fraction de nodules activés par classe est certainement liée au faible nombre de nodules par classe (environ 10 à 20).

- Le domaine d'orientation 80° < θ < 90° est très favorable au glissement prismatique. En raison de l'activation plus tardive, la fraction de nodules activés en prismatique par classe d'orientation est globalement plus faible, comprise entre 40% et 60%.
- Dans le domaine 55° < θ < 65° (respectivement 70° < θ < 80°), l'activation du glissement basal (respectivement prismatique) s'active un peu plus tardivement et/ou lentement. Compte-tenu du faible nombre d'événements d'activation dans ces classes, les évolutions de chaque classe d'orientation (non-représentées ici) ne permettent pas de distinguer clairement le seuil d'activation. De plus, il aurait fallu quelques étapes supplémentaires avant 800MPa pour mieux capter les premières traces du glissement basal et après 870MPa pour mieux décrire la suite de l'activation du glissement prismatique (à un niveau équivalent à celui du glissement basal par exemple).

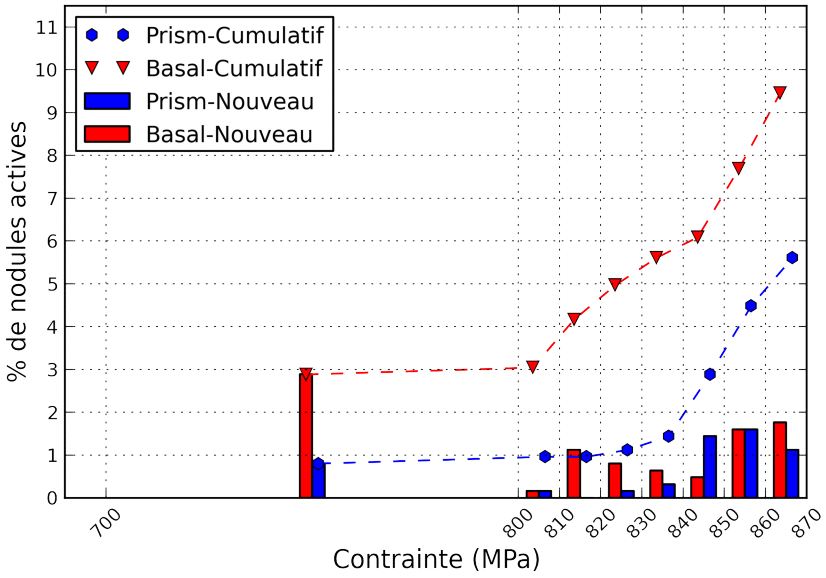
5.6.2 Résultats obtenus à faible grandissement (x150)

Les deux graphes de la Figure 5-28 représentent l'évolution de la fraction de nodules activés pour les zones 1 et 2 observées à faible grandissement. Il s'agit exactement du même type de graphe que la Figure 5-24 décrite au paragraphe précédent au sujet des 9 sous-fenêtres de la zone 1.

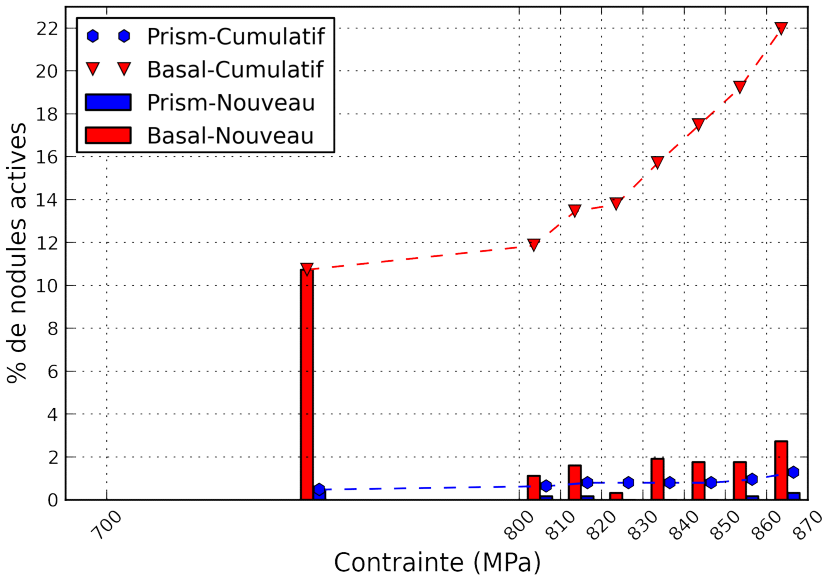
Tout d'abord, les données de la zone 1 entière à faible grandissement (Figure 5-28.a) sont tout à fait semblables à celles obtenues à partir des 9 sous-fenêtres à fort grandissement (Figure 5-24). L'analyse à faible grandissement sur l'ensemble de la zone 1 conduit donc aux mêmes conclusions que celles établies au paragraphe précédent quant à la cinétique de l'activation du glissement basal et prismatique en fonction de la contrainte. En effet, pour le glissement basal, on constate une évolution du taux de nodules activés en 3 étapes: lent entre 700 et 800MPa, un peu plus rapide entre 800 et 850MPa puis encore un peu plus rapide entre 850 et 880MPa.

La seule différence porte sur les valeurs de la fraction de nodules activés et correspond à un rapport de 2.5, ce qui est proche du biais constaté au paragraphe 5.5.3 sur le nombre d'activation détectées. Le biais sur le niveau de contrainte de détection des traces (discuté également au paragraphe 5.5.3) n'affecte donc pas trop la cinétique constatée.

Au sein de la zone 2, dès 800MPa, on constate une fraction relativement importante de nodules (~10%) présentant du glissement basal. Cela peut être interprété comme le signe d'une activité de glissement plus précoce au sein de la texture de la zone 2. Un ou deux étapes avant 800 MPa dans l'essai in situ auraient été utiles. Par ailleurs, le glissement prismatique s'y active très peu et très lentement au rythme de 0 à 3 nodules par étapes. Pour analyser correctement cette cinétique et la comparer à celle de la zone 1, il faut se rapporter à une fraction de nodules activés par classe d'orientation. En effet, en raison de la texture de la zone 2, la fraction de nodules occupant le domaine favorable au glissement basal est très élevée. Au contraire, la fraction (et le nombre total d'ailleurs) de nodules favorablement orientés pour le glissement prismatique est très faible.



a.



b.

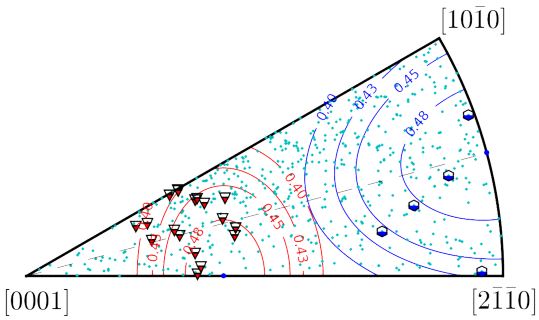
Figure 5-28 : Evolution de la fraction de nodules activés pour les zones 1(a) et 2 (b)

La Figure 5-29 et la Figure 5-30 décrivent la chronologie de l'activation de nodules au sein des zones 1 et 2, respectivement.

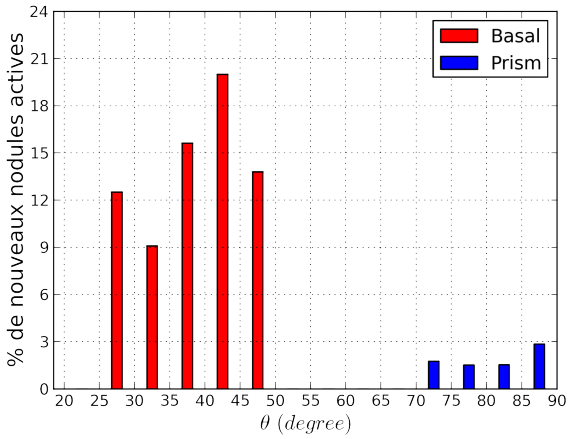
A 800MPa, pour la zone 1, les nodules qui présentent l'activation d'un système de glissement basal correspondent à 3% de l'ensemble des nodules analysés. L'orientation cristallographique de ces nodules est telle que l'angle θ est compris entre 25° et 50°, et ceux-ci représentent 10 à 20% des nodules appartenant à la même classe d'orientation. Les nodules au sein desquels un système de glissement prismatique s'est activé représentent environ 1.5 - 3% des nodules de la plage 70° < θ< 90°. Cela est globalement conforme à ce qui a été observé à fort grandissement (cf. Figure 5-26.a). La différence porte sur la fraction de

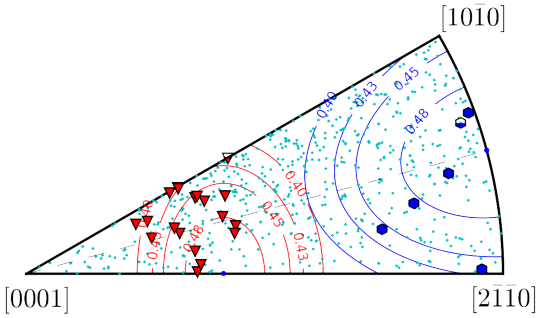
nouveaux nodules activés par classe d'orientation qui est plus faible pour les données obtenues à faible grandissement en raison du biais sur la détection des traces.

A 800MPa, pour la zone 2 (Figure 5-30), les nodules qui présentent l'activation d'un système de glissement basal correspondent à 10% de l'ensemble des nodules analysés. L'orientation cristallographique de ces nodules est telle que l'angle θ est compris entre 20° et 55°. Pour θ compris entre 30° et 45°, ces nodules représentent 20 à 40% des nodules appartenant à la même classe d'orientation. En dehors de cette plage, la fraction de nodules activés par classe d'orientation est inférieure à 12%. Une très faible fraction (<1%) des nodules présente une activation du glissement prismatique. Cette fraction correspond à 3 nodules seulement présentant un angle θ compris entre 55° et 90°. Le nodule activé dont l'angle θ est compris entre 85° et 90° représente à lui-seul environ 15% des nodules de cette classe d'orientation (car ils sont très peu nombreux en raison de la texture de la zone 2). Bien que cette donnée basée sur un seul nodule ne soit pas très représentative, elle correspond à une fraction par classe d'orientation largement supérieure à celle notée dans la zone 1 à la même étape. Il est également intéressant de noter qu'un des 3 nodules, dont θ est compris entre 55° et 60°, active du glissement prismatique dans un domaine où le facteur de Schmid basal est supérieur au facteur de Schmid prismatique. D'ailleurs, il s'agit du seul nodule qui présentera 2 systèmes de glissement, du glissement basal étant observé au sein de ce nodule à 840MPa.

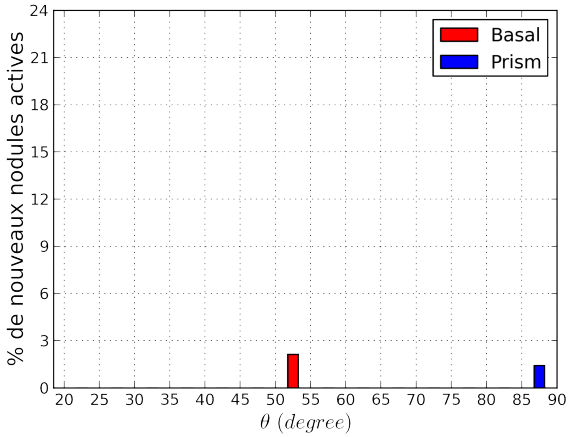


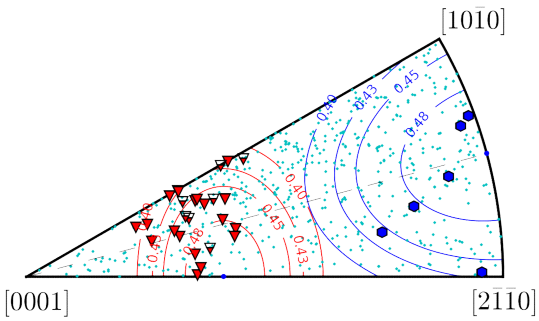
800 MPa, zone 1



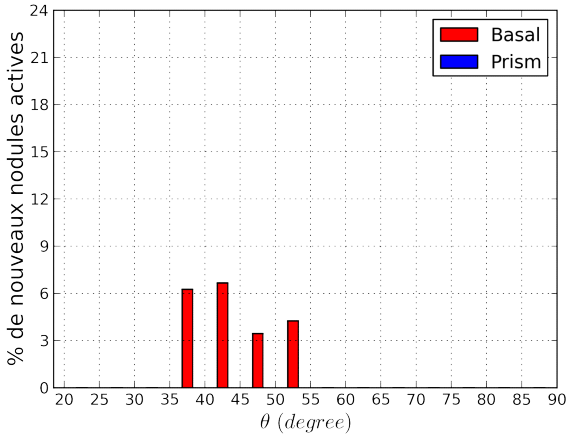


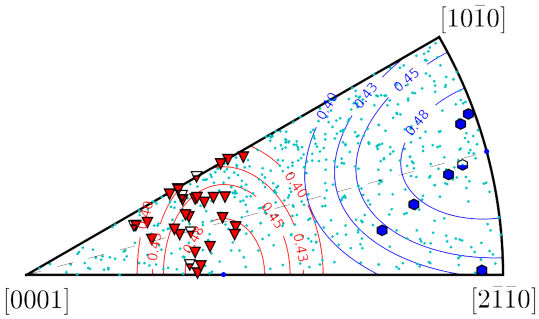
810 MPa, zone 1



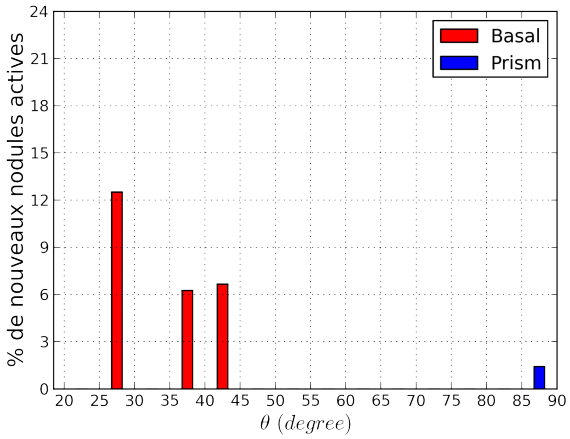


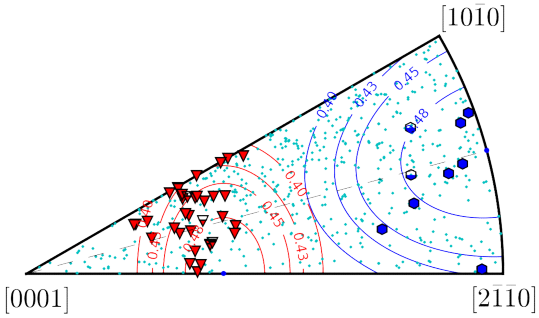
820 MPa, zone 1



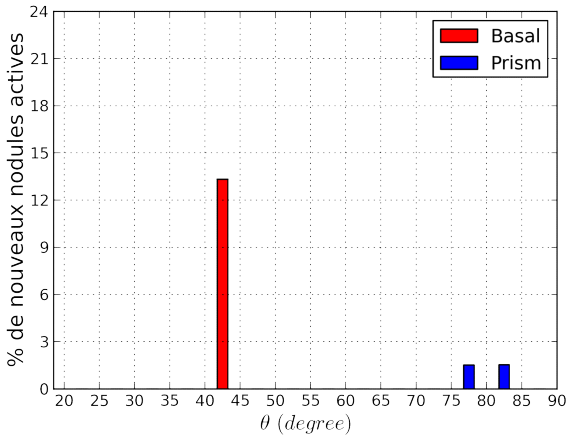


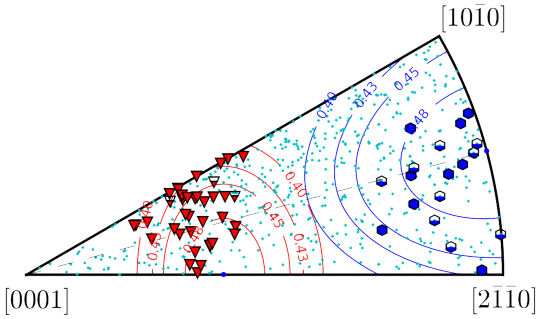
830 MPa, zone 1



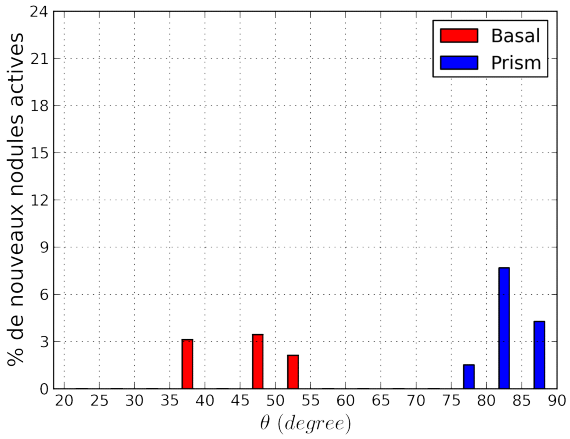


840 MPa, zone 1





850 MPa, zone 1



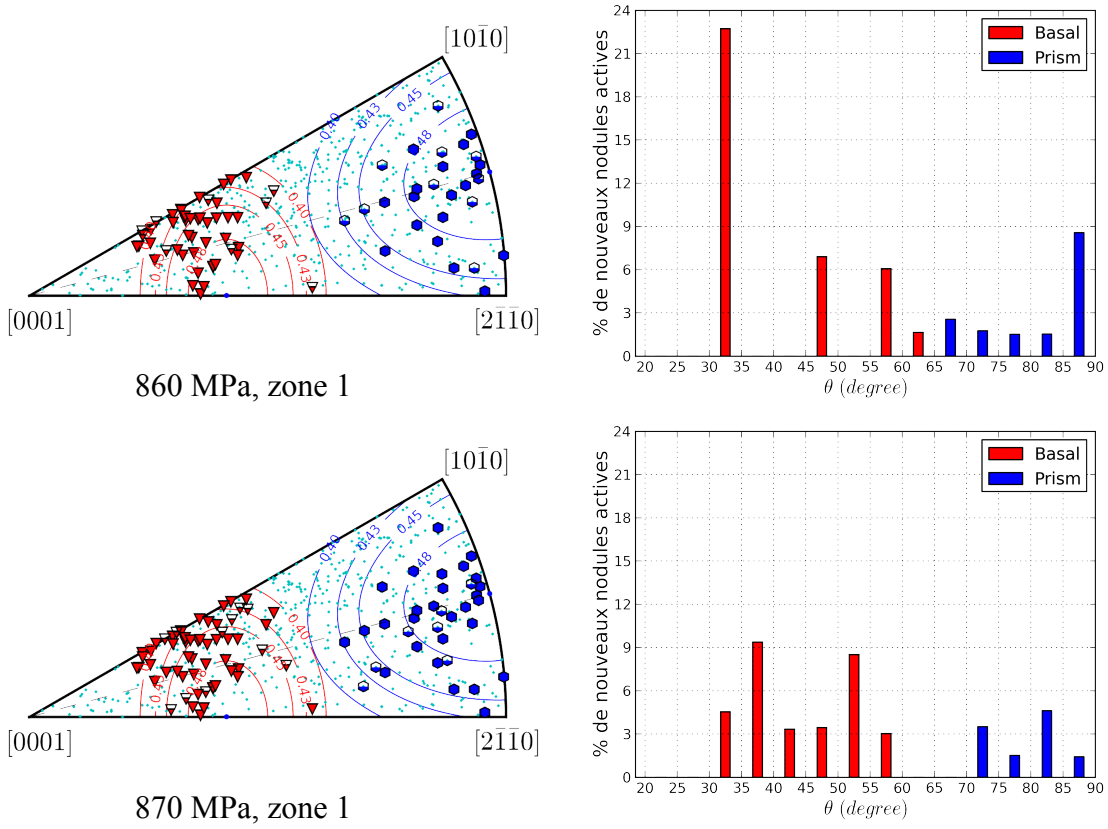


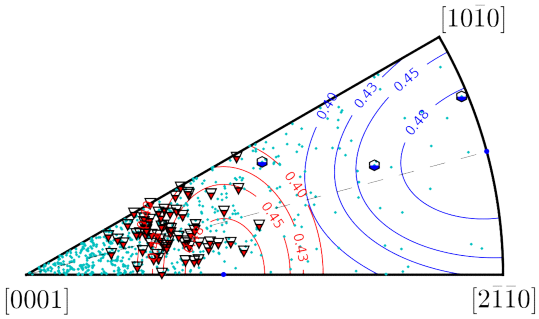
Figure 5-29 : Chronologie de l'activation du glissement dans la zone 1.

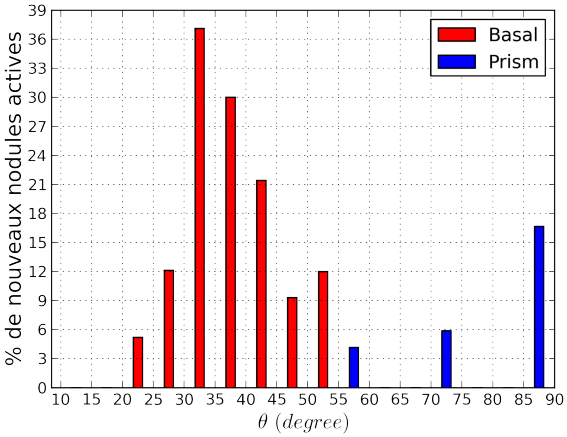
Après 800MPa et jusqu'à 850MPa, pour la zone 1, l'activation du glissement basal, qui concerne les nodules dont l'angle θ est compris entre 25° et 55°, est assez irrégulière. Celle-ci semble devenir plus rapide au cours des 2 dernières étapes dans une plage d'angle θ compris entre 30° et 65°.

De 800MPa à 840MPa, pour la zone 1, l'activation du glissement prismatique est observée sur les nodules dont l'angle θ est supérieur à 75°. Le taux d'activation est très faible dans cette plage de contrainte. A partir de 850MPa, celle devient plus significative et les nodules concernés présentent un angle θ supérieur à 65°. Cependant la fraction par classe d'orientation de nouveaux nodules activant du glissement prismatique est plus faible que pour le glissement basal.

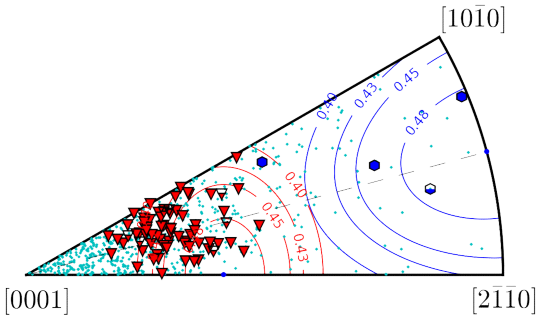
Au sein de la zone 2, après 800MPa et jusqu' 830MPa, l'évolution du glissement basal est assez faible et irrégulière. Elle semble devenir légèrement plus rapide et régulière à partir de 840MPa. Les nodules qui s'activent alors correspondent à un large domaine d'orientation puisque l'angle θ varie de 15° à 55°. Compte tenu des fluctuations d'une étape à une autre (et d'une classe d'orientation à l'autre), la transition entre ces 2 régimes est délicate à définir: elle provient de la lecture simultanée des différents graphiques à barres de la Figure 5-30 avec le graphique de la Figure 5-31 indiquant la fraction totale de nodules activés par classe d'orientation.

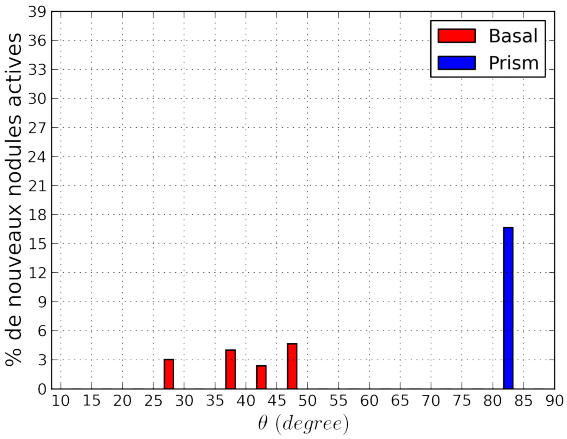
Quant au glissement prismatique, après 800MPa, on observe l'activation de 0, 1 ou 2 nodules par étapes jusqu'à la fin.



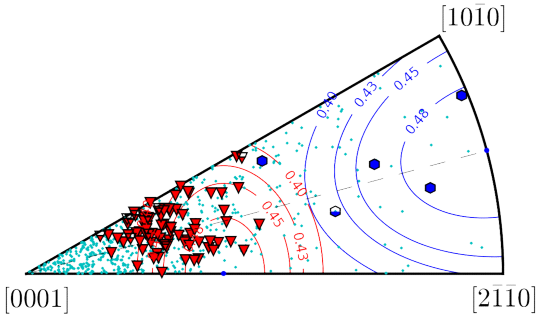


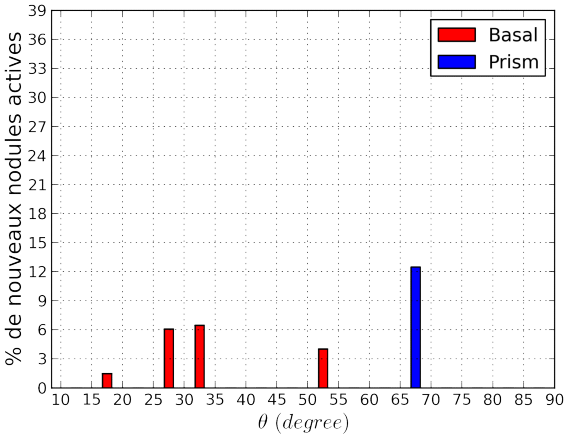
800 MPa, zone 2



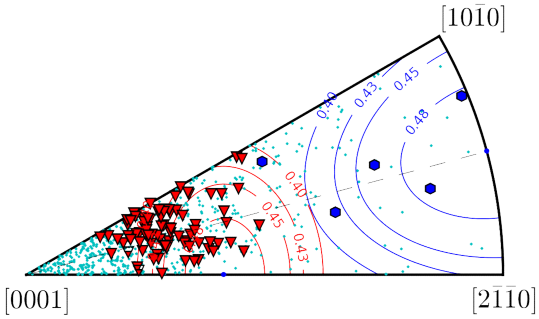


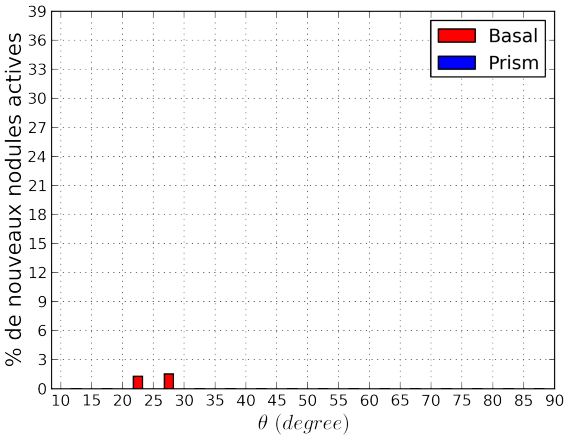
810 MPa, zone 2



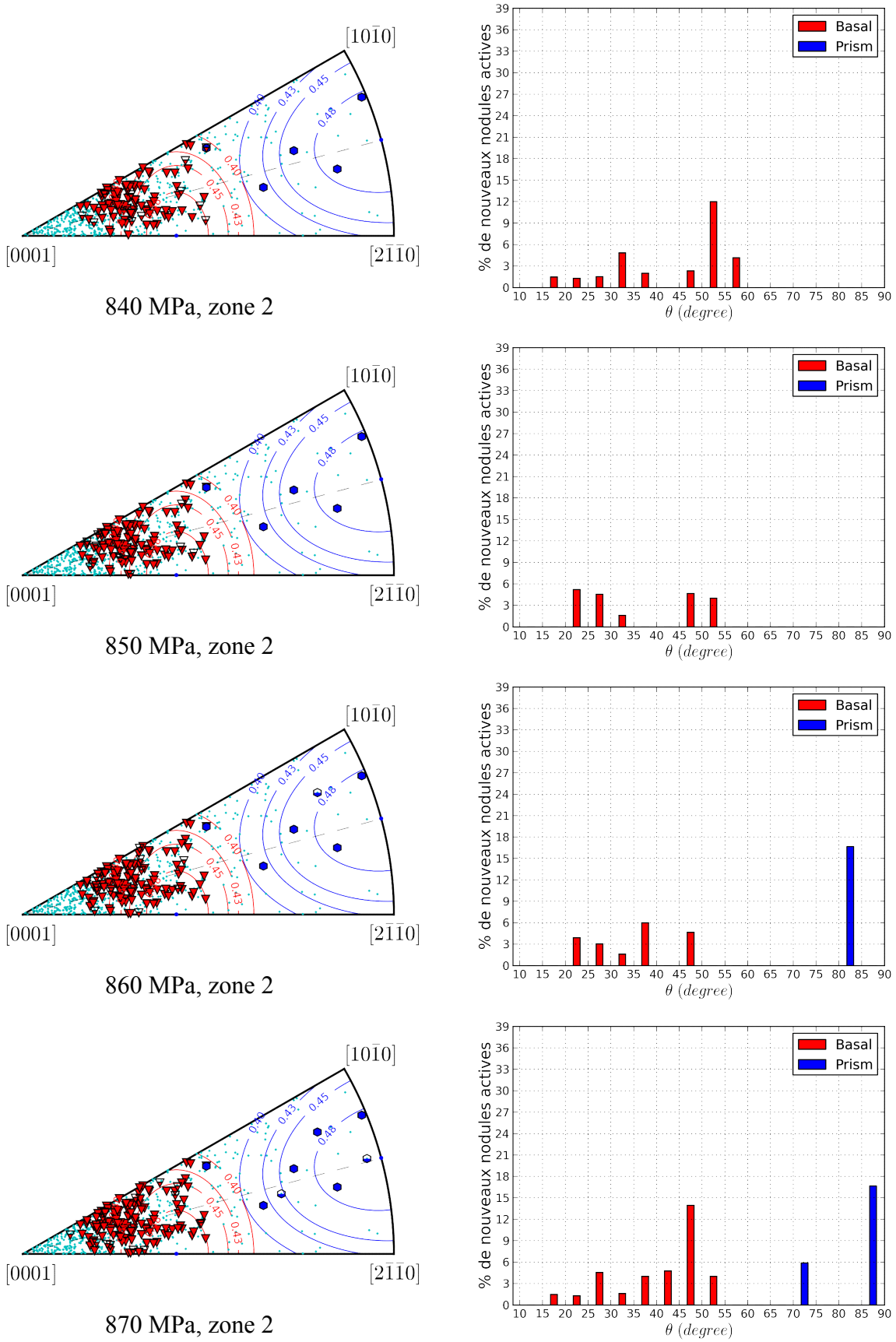


820 MPa, zone 2





830 MPa, zone 2



840 MPa, zone 2

850 MPa, zone 2

860 MPa, zone 2

870 MPa, zone 2

Figure 5-30 : Chronologie de l'activation du glissement dans la zone 2.

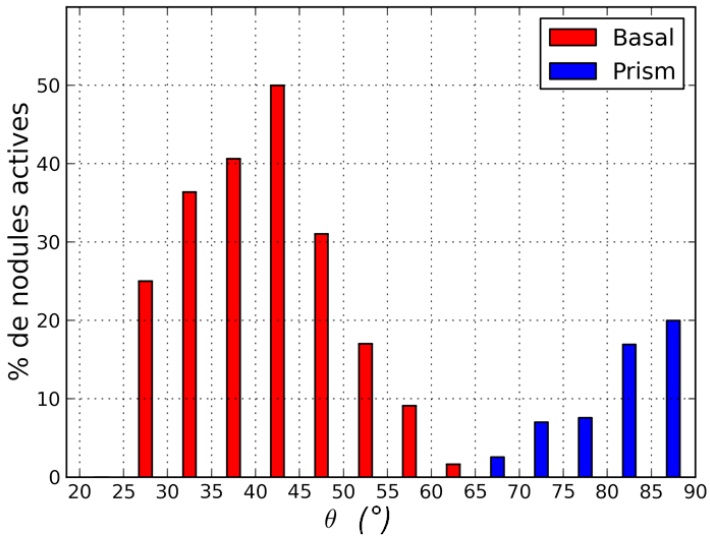
La Figure 5-31 représente, pour les 2 zones, la fraction totale de nodules activés par classe d'angle θ à la fin de l'essai (c'est-à-dire la somme des barres des graphiques précédents).

Les résultats obtenus pour la zone 1, en termes de répartition de l'activité plastique par classe d'orientation, sont tout à fait similaires à ceux basés sur les observations à fort grandissement (Figure 5-27), à l'écart systématique près sur la fraction de nodules.

Le domaine d'orientation favorable au glissement basal correspond à la plage d'angle θ comprise entre 25° et 65° avec un pic d'activation autour de la classe 40-45°. De plus la répartition n'est pas symétrique, l'activité de la plage 25°-40° étant plus importante que celle de la plage 45°-65°. La plage d'orientation favorable au glissement prismatique correspond aux valeurs de θ comprises entre 65 et 90°. L'activité semble croître avec la valeur de l'angle θ donc avec le facteur de Schmid. Il faut noter que pour ces variations d'angle θ, la variation du module d'Young est faible. La notion de niveau d'activité est en fait plutôt à considérer au sens de précocité d'activation et d'évolution de la fraction de nouveaux nodules activés.

On retrouve des tendances générales très similaires pour la zone 2. Pour le glissement basal, l'orientation la plus favorable (pic d'activation) semble plutôt se décaler vers des valeurs d'angle θ plus faibles 30°-40°. Globalement, sur l'ensemble de la plage des orientations activées, la fraction de nodules activant du glissement basal dans la zone 2 est un peu plus importante que dans la zone 1. Dans la zone 2, le glissement prismatique s'active dans la plage d'orientation correspondant à un angle θ supérieur à 55°, mais l'activité est nettement plus marquée pour θ supérieur à 80°. La fraction de nodules activant du glissement prismatique dans cette plage d'orientation est plus importante dans la zone 2 (30-35%) par rapport à la zone 1 (15-20%). Il faut cependant garder à l'esprit que ces données correspondent à un nombre très faible d'évènements (il y a très peu de nodules dans cette plage d'orientation au sein de la zone 2 à cause de sa texture).

a. Zone 1



b. Zone 2

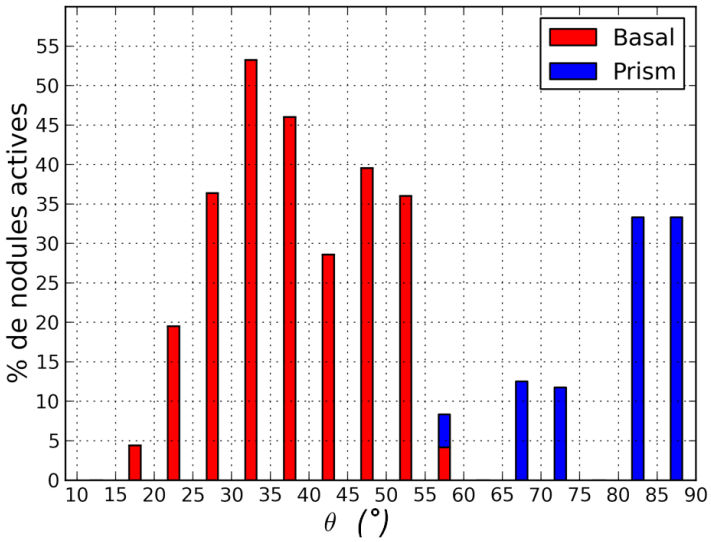
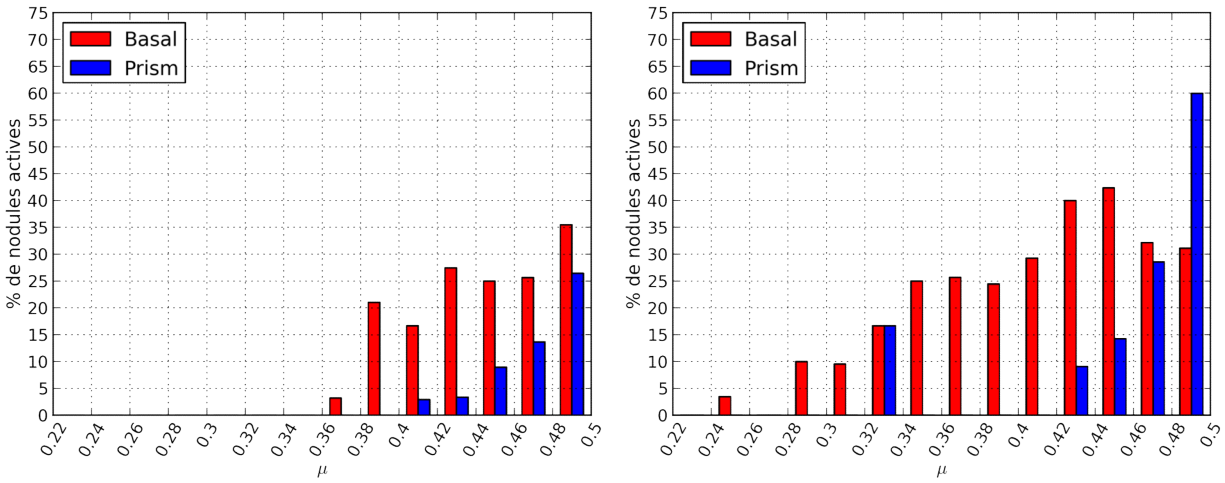


Figure 5-31 : Fraction totale de nodules activés par classe d'angle θ.

Une des perspectives à ce travail serait d'augmenter le nombre de nodules analysés et de tenter de mieux quantifier les tendances constatées à l'aide d'indices de confiance statistiques.

La Figure 5-32 représente, pour les 2 zones, la fraction totale de nodules activant du glissement basal ou prismatique par classe de facteur de Schmid μ à la fin de l'essai. Elle illustre clairement que l'activité de glissement basal est plus importante que l'activité de glissement prismatique. De plus, la texture de la zone 2 conduit intrinsèquement à une activité de glissement plus intense que celle observée dans la zone 1. Par classe d'orientation (décrite ici en termes de facteur de Schmid), la fraction de nodules activés y est plus élevée. De plus, l'activation du glissement (basal notamment) est observée sur un domaine d'orientation plus important; en effet elle est observée pour des nodules à facteur de Schmid plutôt faible (0.24-0.36) alors que ceux-ci ne présentent pas de traces de glissement dans la zone 1.



Zone 1 Zone 2

Figure 5-32 : Fraction totale de nodules activés par classe de facteur de Schmid μ.

5.6.3 Synthèse

On propose de récapituler les principales conclusions de l'analyse de l'activation du glissement en traction monotone issues des 2 derniers paragraphes (paragraphes 5.5 et 5.6).

- A la fin de l'essai (à 870MPa, c'est-à-dire en dessous de la limite d'élasticité conventionnelle) et en réalisant les observations à fort grandissement, environ la moitié des 200 nodules analysés présentent des traces de glissement, dont la grande majorité est activée suivant des plans de base ou prismatique. Les observations réalisées à plus faible grandissement ne permettent de détecter qu'un peu moins de la moitié des nodules activant du glissement (soit de 100 à 150 nodules sur 600 analysés environ).
- En rapportant le nombre de nodules activés au nombre total de nodules d'une classe d'orientation donnée (définie pour simplifier par l'angle θ ou le facteur de Schmid μ), il apparaît clairement que, pour un niveau de contraintes, le glissement basal est intrinsèquement activé de façon plus importante que le glissement prismatique. La chronologie d'activation montre que le glissement basal apparaît plus précocement. Cependant, bien que décalées en termes de contraintes, les cinétiques d'activation du glissement basal et prismatique semblent globalement très proches, compte tenu des données disponibles.
- Les domaines d'orientation favorisant le glissement basal ou prismatique sont tout à fait similaires à ceux identifiés par Florent Bridier (Bridier 2006). Pour le glissement basal, il correspond à la plage $20° < \theta < 55°$ à l'intérieur de laquelle la même cinétique d'activation est globalement observée. Compte-tenu de variabilité observée, il faudrait disposer d'un ensemble de données bien plus important pour déceler de façon fiable des différences par classe d'orientation. L'activation sur la plage $55° < \theta < 65°$ a également été observée mais de façon globalement plus tardive.
- L'activation du glissement prismatique est globalement plus précoce pour la classe d'orientation $80° < \theta < 90°$. Du glissement est également observé pour la plage $65° < \theta < 80°$ mais avec une activation globalement plus tardive ou lente bien que certains de ces nodules s'activent dès les 1ères étapes.
- La texture associée à la seconde zone d'observation, correspondant à une macrozone « rouge-orange » (i.e. la texture 2 utilisée dans les simulations du chapitre 4), conduit à une activation plus précoce du glissement, qu'il soit basal ou prismatique, comparativement aux résultats de la première zone d'observation correspondant à une macrozone « bleue-verte ». Ainsi, à la fin de l'essai, la fraction de nodules présentant des traces de glissement (par rapport au nombre total de nodules analysés) est légèrement plus élevée dans la zone 2. C'est également les cas, en majorité, par classe d'orientation. Notons que cette conclusion doit être nuancée pour le glissement prismatique car, compte-tenu de

la texture de la zone 2, les données correspondantes sont relatives à un très petit nombre de nodules.

Ces principaux résultats peuvent être mis en regard des distributions de la cission résolue évaluées pour quelques orientations seulement grâce aux séries de simulations présentées au chapitre 4. La prépondérance du glissement basal, devant le glissement prismatique, est tout à fait cohérente avec les distributions établies pour les orientations de type [B.O.b.] et [B.O.p.], i.e. présentant un facteur de Schmid « conventionnel » égal à 0.5 sur un système basal et prismatique, respectivement. En effet, en absence de texture, le facteur de Schmid effectif d'une orientation [B.O.b.] vaut environ 0.52 et celui d'une orientation [B.O.p.] environ 0.45. Le produit du facteur de Schmid et de la contrainte de traction macroscopique représente la cission résolue obtenue en moyenne dans un grain de l'orientation considérée pour toutes les configurations de voisinage possible. Les écarts de facteur de Schmid effectif pour ces 2 orientations restent du même ordre en considérant le cas de grains au sein d'une macrozone (bande texturée) pour les 2 textures étudiées. Ils sont plus élevés dans une macrozone de texture 2 et plus faibles dans le cas d'une macrozone de texture 1. Les facteurs de Schmid effectifs obtenus pour les orientations [5] et [6] sont pratiquement égaux et inférieurs à celui de l'orientation [B.O.b.], ce qui n'est pas cohérent avec les domaines d'activation du glissement basal.

Des tentatives de confrontation plus quantitative des résultats expérimentaux à ceux de simulations ont été engagées dans l'optique de l'identification inverse de la cission résolue critique qui sera discutée au paragraphe 5.8. Cependant, le temps aura manqué pour aborder cette confrontation d'une façon plus générale. La difficulté provient du fait que les simulations sont réalisées pour une orientation tandis qu'expérimentalement le nombre de nodules d'une orientation est très faible (quelques unités en introduisant une tolérance de désorientation acceptable). En élargissant la classe d'orientation à une classe de l'angle θ de 5° par exemple, le nombre de nodules peut atteindre 20, ce qui reste certainement trop peu pour décrire le spectre des états mécaniques que peuvent rencontrer différents grains de même orientation.

Afin de poursuivre cette analyse de façon semi-quantitative, et afin d'introduire celle présentée au paragraphe 5.8, on commentera les distributions de cissions résolues de la Figure 5-33. Cette figure représente, pour 4 niveaux de contraintes macroscopiques (Σ_{11} = 700, 800, 850 et 870MPa), la distribution cumulée de la cission résolue simulée au sein de N grains centraux d'orientation [B.O.b.A.] dans une macrozone de texture 1. Les courbes sont tracées, en supposant que la distribution suit une loi normale, à partir des données du Tableau 4-33 du chapitre 4 (paragraphe 4.3.4): le facteur de Schmid effectif (= 0.508) et l'écart-type total (= 0.023) correspondent à la moyenne et à l'écart-type de la distribution pour une contrainte macroscopique unitaire. En considérant l'écart-type total, l'ordonnée de la courbe, associée à une cission τ en abscisse, représente la fraction volumique de matériau au sein des N grains centraux simulés dont la cission est localement inférieure à τ.

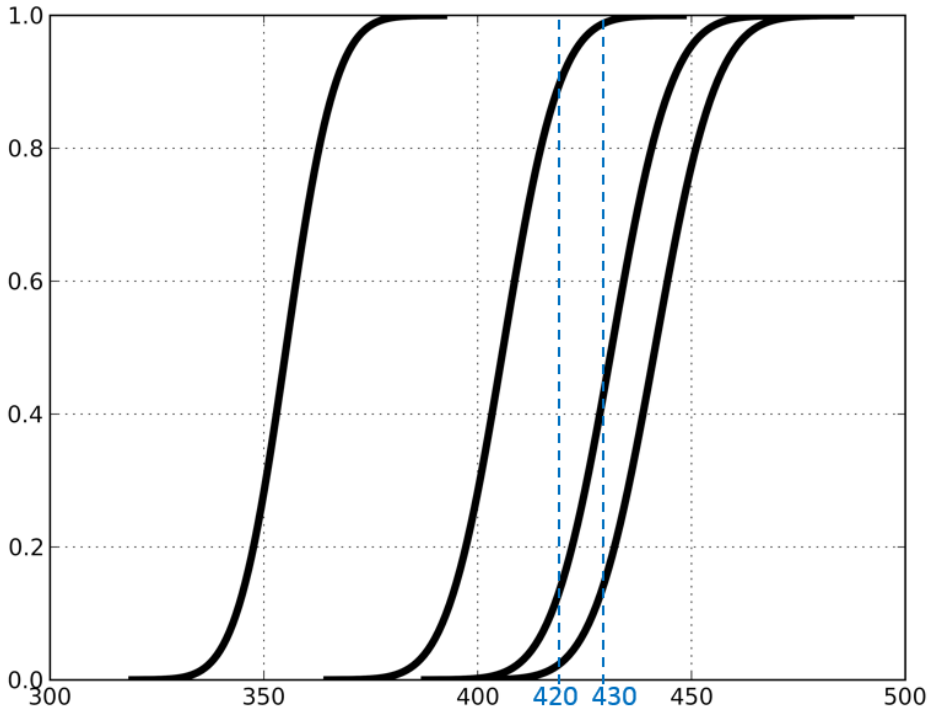


Figure 5-33 : Distribution cumulée de la cission résolue pour l'orientation [B.O.b.A.] au sein de la texture 1 à 4 niveaux de contraintes (700, 800, 850 et 870MPa).

L'évolution des distributions permet de rendre compte, assez globalement, de l'évolution de la fraction de nodules activés. Les premières activations observées à 800MPa correspondent au moment où la queue de distribution des cissions commence à franchir la cission critique que l'on peut imaginer suivant ce graphe dans le domaine 420-430 MPa. La probabilité d'avoir observé des traces à 700MPa est donc clairement nulle. L'évolution de la distribution aux niveaux de contraintes supérieures illustre l'activation progressive de la fraction de nodules activés.

Notons que, dans cette analyse, qui demeure assez qualitative bien que basée sur une évaluation chiffrée de la distribution des cissions, on ne compare pas directement les mêmes grandeurs. Expérimentalement, l'information accessible est la fraction de nodules ayant activé du glissement avant un niveau de contrainte macroscopique donné. A travers les distributions simulées, on compare cette information à la fraction volumique de matière (au sein d'un ensemble de grains) dont la cission est supérieure à une valeur donnée au niveau de contrainte macroscopique considéré.

5.7 Analyse de configurations de voisinages

A la suite de l'analyse de l'activation des systèmes de glissement, il est intéressant d'analyser des configurations de voisinage des nodules activés en premier ou ceux ne présentant pas de traces de glissement à la fin de l'essai. On rappelle également que les zones d'observation avaient été définies pour contenir plusieurs nodules d'orientation proches de celles utilisées dans les simulations afin de comparer leur niveau d'activation de glissement en relation avec leur configuration de voisinage respective. L'objectif est de comparer les

configurations de voisinage constatées expérimentalement à celles identifiées à l'aide des simulations pour rendre la cission résolue extrémale dans un grain.

L'analyse individuelle des différentes configurations sélectionnées (environ un vingtaine) n'a pas permis de dégager de tendance remarquable. La difficulté de ce type d'analyse provient de la plus grande complexité des morphologies réelles et donc de la diversité des configurations à étudier, comparativement à celles obtenues en simulation avec des morphologies idéalisées. La détermination d'une démarche d'analyse adaptée est une perspective à ce travail.

Afin d'illustrer le travail réalisé, on propose d'indiquer 2 exemples ayant montré des caractéristiques proches des configurations extrémales identifiées avec les simulations. Ils portent sur 2 nodules présentant un facteur de Schmid supérieur à 0.48 sur un système de glissement basal, mais n'ayant montré aucune trace de glissement à la fin de l'essai.

Sur la Figure 5-34, le nodule en question est le numéro 22. On voit qu'il présente des voisins latéraux rigides (grains 9, 30, 32, 37). Les voisins 21 et 28, plus alignés avec le grain 22 suivant l'axe de traction (direction horizontale) ont un module d'Young faible. Une configuration analogue à celle identifiée à l'aide des simulations est donc ici globalement retrouvée.

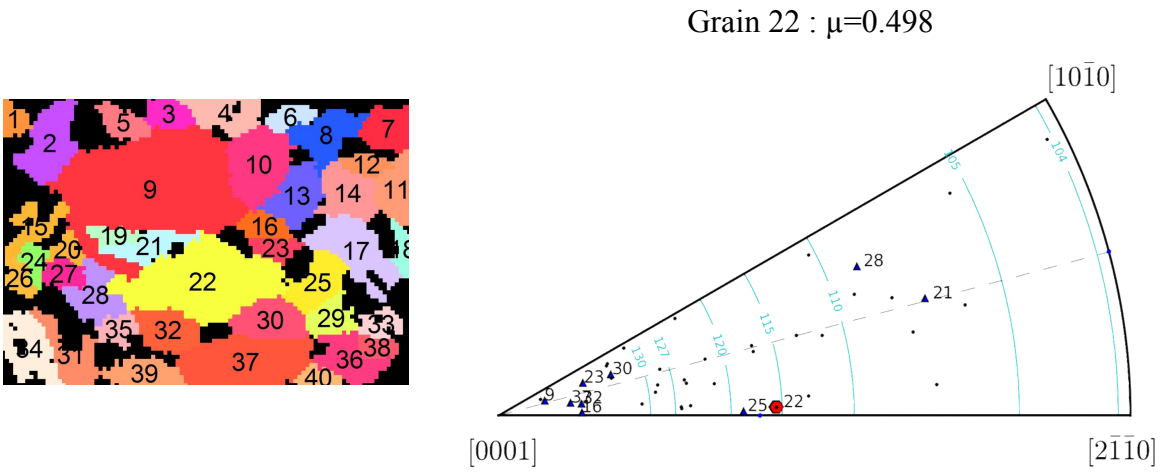


Figure 5-34 : Voisinage du grain 22 présentant un facteur de Schmid égal à 0.498 et n'ayant pas activé de glissement à la fin de l'essai.

Dans l'exemple suivant (Figure 5-35), le grain analysé est le numéro 29. Il présente 2 grains latéraux, en bas, rigides (voisins 33 et 37). Au contraire, le module d'Young du voisin 19, dont la partie inférieure est alignée avec le grain 29 dans l'axe de traction, a pratiquement la plus faible valeur possible.

Grain 29 : μ=0.486

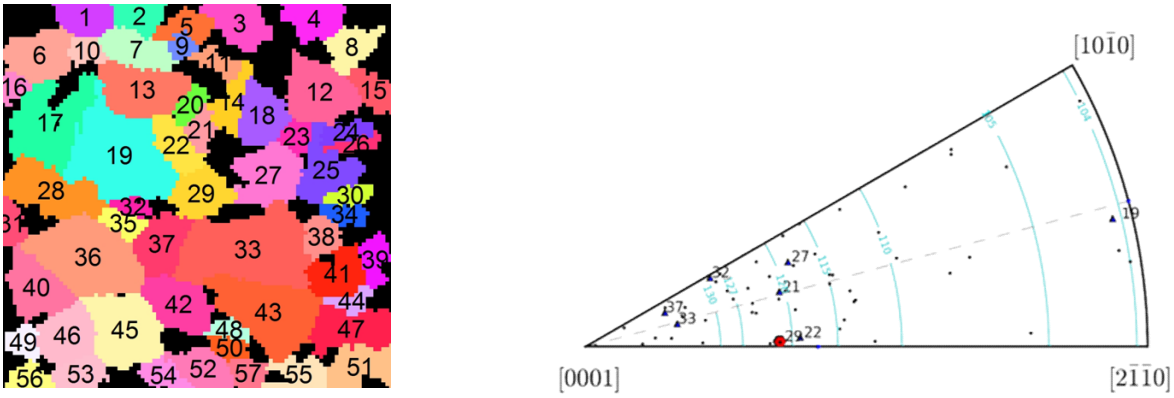


Figure 5-35 : Voisinage du grain 9 présentant un facteur de Schmid égal à 0.486 et n'ayant pas activé de glissement à la fin de l'essai.

5.8 Identification de la cission résolue critique

L'identification directe de la cission critique nécessiterait de réaliser, par exemple, des essais de traction avec des éprouvettes monocristallines constitués uniquement de la phase α hexagonale compacte de l'alliage TA6V considéré. L'obtention d'une matière adaptée à ce type d'expérience constitue un challenge en tant que tel. On propose ici d'évaluer la cission critique à partir des données sur l'apparition des traces de glissement en surface d'une éprouvette polycristalline. Trois méthodes seront mises en œuvre. La première est basée sur l'hypothèse de contraintes homogènes au sein du polycristal, utilisée par Florent Bridier (Bridier 2006) ou Zaefferer (Zaefferer 2003). Les deux autres méthodes utilisent les résultats des simulations du chapitre 4.

5.8.1 Méthode 1 basée sur le facteur de Schmid

L'objectif est d'appliquer la même méthode que celle utilisée par Florent Bridier afin de confronter les résultats obtenus à partir des 2 essais différents. Cette méthode est basée sur l'hypothèse de contraintes uniformes au sein du polycristal, hypothèse évidemment fausse comme cela a été illustré par les résultats des simulations.

Pour chaque nodule i activant un système de glissement basal à la contrainte de traction macroscopique Σ_{11}, on détermine une valeur de cission résolue critique τ_c du glissement

basal comme le produit de la contrainte Σ_{11} et du facteur de Schmid « conventionnel » de ce grain μ. On calcule la moyenne d'ensemble, ainsi que l'écart-type, de la liste de valeurs obtenues pour tous les nodules présentant des traces de glissement basal. La même procédure est effectuée pour les nodules présentant du glissement prismatique.

Les résultats obtenus sont présentés dans le Tableau 5-7 de façon séparée en fonction de la zone d'observation considérée et du grandissement utilisé.

	zone 1 (x1000)		zone 1 (x150)		zone 2 (x150)		(Bridier 2006)	
Système	τ_c	SD	τ_c	SD	τ_c	SD	τ_c	SD
Basal	370	39	371	29	349	43	373	45
Prismatique	392	38	405	22	391	27	388	34

Tableau 5-7: Cissions résolues critiques et écart-type (SD) déterminées à partir du facteur de Schmid (hypothèses de contraintes uniformes, méthode 1). Valeurs en MPa.

A partir des données issues des 9 sous-fenêtres de la zone 1 observée à fort grandissement, on obtient une cission résolue critique de 370MPa sur les systèmes de glissement basal et de 392MPa sur les systèmes de glissement prismatique. Ces valeurs sont très proches de celle obtenues par Florent Bridier. Ceci est également vrai en termes d'écart-type. La différence des valeurs obtenues pour les 2 types de glissement reflète l'activation plus précoce observée pour le glissement basal. Or, cette observation résulte en réalité à la fois d'une éventuelle différence des cissions critiques mais également de la différence des cissions moyennes dans les grains favorablement orientés pour le glissement basal et prismatique. Ce dernier point a été étayé par les simulations : le facteur de Schmid effectif, décrivant la cission moyenne, d'un grain dont le facteur de Schmid vaut 0.5 sur un système de glissement basal (orientation [B.O.b.]) est supérieur à celui d'un grain dont le facteur de Schmid vaut 0.5 sur un système de glissement prismatique (orientation [B.O.p.]).

La dispersion obtenue sur les cissions critiques calculées reflète l'hétérogénéité des contraintes réelles d'un nodule à l'autre alors que le calcul est fait en les supposant uniformes.

A partir des données issues de la zone 1 observée à plus faible grandissement, la cission critique sur les systèmes de glissement basal est quasiment identique à celle obtenue précédemment. Pour le glissement prismatique, elle vaut 405MPa alors qu'elle avait été évaluée à 392MPa à plus fort grandissement. Cet écart provient probablement du biais de détection des traces de glissement à faible grandissement. Le biais moyen avait été estimé à 8MPa sur la contrainte de traction macroscopique d'activation à partir de l'analyse de 30 nodules seulement. Toutefois le biais moyen était le même pour les traces de glissement basal et prismatique.

Les cissions critiques déterminées à partir des observations à faible grandissement de la zone 2 sont de 349MPa pour le glissement basal et de 391MPa pour le glissement

prismatique. Ces valeurs sont inférieures à celles obtenues à partir de la zone 1 à même grandissement. L'écart constaté, égal à 22MPa pour le glissement basal et à 14MPa pour le glissement prismatique, provient du fait que, pour un niveau de contrainte macroscopique donné, les cissions réelles dans la zone 2, dont la texture favorise les orientations rigides, sont en moyenne plus élevées que dans la zone 1.

5.8.2 Méthode 2 basée sur le facteur de Schmid effectif

Cette méthode est identique à la précédente en remplaçant le facteur de Schmid « conventionnel » par le facteur de Schmid effectif déterminé pour ce matériau à l'aide des simulations présentées au chapitre 4. Cela revient à travailler avec l'hypothèse de contraintes uniformes par phase, i.e par ensemble des nodules de même orientation cristallographique. La cission résolue supposée constante dans chaque ensemble de nodules est alors égale au produit du facteur de Schmid effectif et de la contrainte de traction macroscopique.

Cependant le facteur de Schmid effectif n'a pas été déterminé pour toutes les orientations possibles mais uniquement pour quelques orientations particulières. De plus, le facteur de Schmid effectif à utiliser doit tenir compte de la présence de macrozones présentant les 2 textures étudiées, ce qui n'a été réalisé que pour 5 orientations seulement. Dans les zones d'observation, seuls quelques nodules au maximum présentent la même orientation qu'une des 5 étudiées, à une tolérance de désorientation acceptable. De plus, la durée de simulations et de leur dépouillement ne permettait pas d'envisager dans le cadre de cette thèse la réalisation d'une campagne de séries de simulations relatives à un nombre d'orientations comparable à celui des nodules présentant des traces. Il a été supposé que tous les nodules suffisamment proches du pôle d'une orientation simulée dans le triangle standard pouvait être associés à cette orientation. Par exemple, pour l'orientation de type [B.O.b.], 14 nodules dont le facteur de Schmid est compris entre 0.48 et 0.5, parmi lesquels 9 ont présenté du glissement basal, ont été analysés dans les 9 sous-fenêtres de la zone 1 et ont été associés à cette orientation (Figure 5-36). Avec cette méthode, la cission critique évaluée, basée sur les premières activation du glissement, est une borne inférieure de la cission critique réelle. En effet, la valeur calculée correspond à la cission moyenne de tous les nodules de même orientation alors que la cission réelle du nodule où la trace apparaît est nécessairement supérieure à la moyenne s'il s'agit d'un des premiers nodules activés. Il faut pour cela que le nombre de nodules analysés soit suffisant pour avoir une probabilité importante que les nodules activés correspondent à des configurations de voisins qui conduisent à une cission résolue effectivement supérieure à la moyenne. Cependant, le fait d'associer à l'orientation [B.O.b.] des nodules présentant un facteur de Schmid compris entre 0.48 et 0.5 introduit un biais dans l'analyse qui est difficile à évaluer.

5.8.2.1 Résultats obtenus à fort grandissement (x1000)

L'analyse a été faite pour les 4 orientations suivante: [B.O.b.], [B.O.p.], [5] et [6]. Les nodules analysés associés à ces orientations sont représentés sur la Figure 5-36. Pour chacun de ces nodules présentant des traces de glissement basal, une valeur de cission critique est

calculée en multipliant la contrainte de traction macroscopique pour laquelle la première trace est apparue avec le facteur de Schmid effectif de l'orientation de référence à laquelle le nodule a été associé. Pour chaque orientation, la moyenne et l'écart-type des cissions critiques calculées pour chaque nodule sont reportées dans le Tableau 5-8. Le facteur de Schmid effectif utilisé, dont la valeur est reportée dans le tableau, correspond à celui déterminé pour un nodule à l'intérieur d'une macrozone présentant la texture de la zone d'observation considérée, i.e. la texture 1 (chapitre 4, paragraphe 4.4, Tab. 4.32).

La cission résolue critique du glissement prismatique, obtenue par la seule orientation [B.O.p.], est de 388MPa, ce qui est très proche de la valeur obtenue avec le facteur de Schmid « conventionnel ».

Pour le glissement basal, la valeur de la cission critique obtenue dépend assez fortement de l'orientation considérée. La valeur obtenue est de 367MPa pour les orientations [5] et [6], et de 425MPa pour l'orientation [B.O.b.]. La différence est liée au fait que les simulations ont prédit que le facteur de Schmid effectif de l'orientation [B.O.b.] était nettement supérieur à ceux obtenus sur les orientations [5] et [6] (par ailleurs très proches entre eux), alors qu'il n'a pas été constaté expérimentalement une différence d'activation aussi forte.

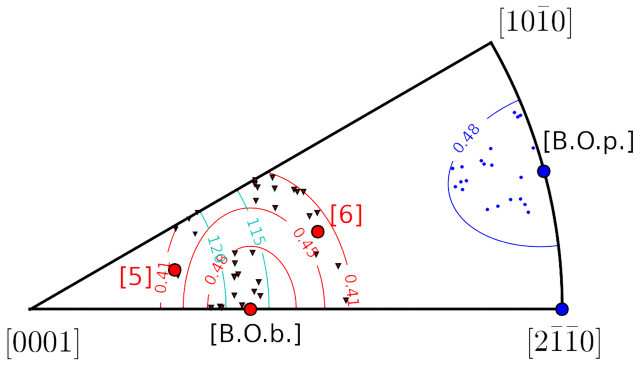


Figure 5-36 : Orientation des nodules analysés dans les 9 sous-fenêtres de la zone 1 (observée à fort grandissement) associés à l'une des 4 orientations de référence considérée ([B.O.b.], [B.O.p.], [5] et [6]).

Comme évoqué au chapitre 4, une erreur sur l'évaluation des facteurs de Schmid effectifs pourrait provenir d'une description erronée de l'élasticité cristalline, notamment pour ces 3 orientations relativement proches. En effet, le module d'Young E_t varie beaucoup dans cette région du triangle standard. On imagine bien que le facteur de Schmid effectif pourrait être affecté de façon non-négligeable si le comportement élastique réel ne correspondait pas exactement à celui décrit avec les constantes d'élasticité utilisées.

Système	Orientation de référence	Nb nodules activés	μ_{eff}	τ_c (MPa)	SD (MPa)
Basal	*[B.O.b.A]*	9	0.508	**425**	15

	[5]	4	0.438	**367**	17
	[6]	7	0.437	**367**	13
Prismatique	*[B.O.p.B]*	10	0.451	**388**	5

Tableau 5-8: Cissions résolues critiques et écart-type (SD) déterminées à partir du facteur de Schmid effectif (méthode 2) dans les 9 sous-fenêtres de la zone 1 observée à fort grandissement.

La cission critique obtenue avec les orientations [5] et [6] est proche de celle obtenue sous l'hypothèse des contraintes uniformes, alors que la valeur obtenue avec l'orientation [B.O.b.] est significativement plus élevée. On remarque que les écarts-types constatés sont plus faibles qu'avec la méthode 1. Cela résulte du fait que l'analyse porte sur des nodules d'orientations proches (du moins en termes de facteur de Schmid « conventionnel »). Les écarts-types sur la cission résolue critique reflètent la dispersion intra-orientation seulement alors que les données obtenues avec la méthode 1 pour tous les nodules activés incluent la dispersion inter-orientation. Par exemple, l'écart-type total du facteur de Schmid effectif de l'orientation [B.O.b.] est égale à 0.023. En multipliant cette valeur par la contrainte macroscopique (p. ex. 800MPa), on obtient un écart-type sur la cission résolue de 18MPa. Pour l'orientation [B.O.p.], on obtient un écart-type de 13MPa. Ces valeurs sont bien de l'ordre de celles obtenues sur la cission critique.

5.8.2.2 Résultats obtenus à faible grandissement (x150)

La Figure 5-37 représente les nodules analysés au sein de la zone 1 complète (observée à faible grandissement) et associés à l'une des 4 orientations de référence considérées. Les résultats obtenus, indiqué dans le Tableau 5-9, sont très proches, sur tous les points, à ceux obtenus dans la même région à fort grandissement dans seulement 9 sous-fenêtres.

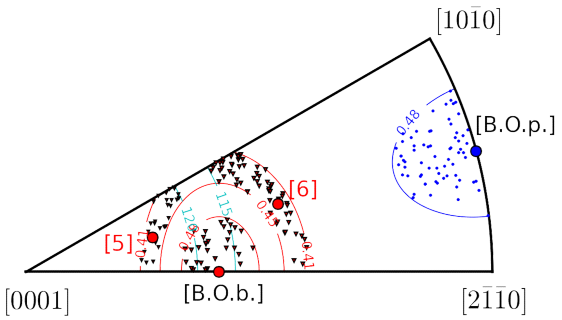


Figure 5-37 : Orientation des nodules analysés dans la zone 1 (observée à faible grandissement) associés à l'une des 4 orientations de référence considérée ([B.O.b.], [B.O.p.], [5] et [6]).

Système	Orientation de référence	Nb nodules activés	μ_{eff}	τ_c (MPa)	SD (MPa)

Basal	*[B.O.b.A]*	11	0.508	**419**	14
	[5]	10	0.438	**365**	14
	[6]	10	0.437	**374**	11
Prismatique	*[B.O.p.B]*	19	0.451	**385**	11

Tableau 5-9: Cissions résolues critiques et écart-type (SD) déterminées à partir du facteur de Schmid effectif (méthode 2) dans la zone 1 observée à faible grandissement.

La Figure 5-38 représente les nodules analysés au sein de la zone 2 complète (observée à faible grandissement) et associés à l'une des 4 orientations de référence considérées. Les résultats obtenus, indiqué dans le Tableau 5-9, sont assez proches de ceux obtenus dans la zone 1. Pour le glissement basal, on obtient des valeurs plus élevées que celles obtenues pour la zone 1 avec un écart de 10-15 MPa. Pour le glissement prismatique, la valeur est inférieure de 10MPa. Si les macrozones n'avaient pas été prises en compte, des valeurs plus faibles que celles obtenues dans la zone 1 aurait été constatées comme cela a été le cas sous l'hypothèse de contraintes uniformes (méthode 1). La prise en compte de l'effet des macrozones, et plus précisément l'écart entre la cission d'un grain dans une macrozone de texture 1 et celle dans une macrozone de texture 2, corrige ce biais dans le bon sens bien que l'influence des macrozones soit probablement surestimée.

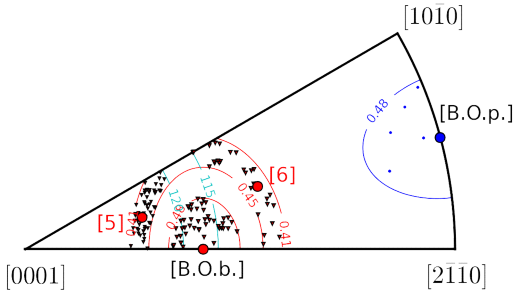


Figure 5-38 : Orientation des nodules analysés dans la zone 2 (observée à faible grandissement) associés à l'une des 4 orientations de référence considérée ([B.O.b.], [B.O.p.], [5] et [6]).

Système	Orientation de référence	Nb nodules activés	μ_{eff}	τ_c (MPa)	SD (MPa)
Basal	*[B.O.b.A]*	14	0.535	**437**	14
	[5]	31	0.460	**375**	12
	[6]	4	0.462	**383**	10
Prismatique	*[B.O.p.B]*	3	0.473	**374**	16

Tableau 5-10: Cissions résolues critiques et écart-type (SD) déterminées à partir du facteur de Schmid effectif (méthode 2) dans la zone 2 observée à faible grandissement.

5.8.3 Méthode 3 basée sur la distribution de la cission résolue

Avec la méthode proposée ici, on souhaite identifier la cission résolue critique en tenant compte de la distribution de la cission résolue d'un ensemble de grains de même orientation, tel que cela a été suggéré dans la discussion du paragraphe 5.6.3.

En considérant un ensemble de grains de même orientation (ou supposés l'être en associant des nodules à une orientation de référence comme précédemment), les données des essais permettent de déterminer la fraction de nodules activés *f* à une contrainte donnée Σ_{11}. On suppose que la fraction de nodules activés *f* est du même ordre que la fraction volumique de l'ensemble des grains de même orientation dont la cission résolue est supérieure à la cission résolue critique τ_c. Celle-ci peut être obtenue à l'aide de la distribution du facteur de Schmid effectif local. Le Tableau 5-11 donne l'exemple du calcul de la cission résolue critique des systèmes de glissement basal effectué avec les nodules associés à l'orientation [B.O.b.] (il s'agit des 14 nodules déjà analysés avec la méthode 2, cf. Figure 5-36). Par exemple, à 870MPa, 9 nodules ont été activés, soit 64%. Sur la distribution du facteur de Schmid effectif local représentée sur la Figure 5-39 en probabilité cumulée, on détermine le facteur de Schmid effectif critique μ_{eff}^{c} associé à cette fraction de nodules activés (ici égal à 0.502). La cission résolue critique correspondante est 441MPa. Pour une orientation étudiée, on reporte la moyenne des valeurs obtenues à chaque niveau de contraintes, ainsi que l'écart-type.

Σ_{11} (MPa)	Nb. de grains activés	% de grains activés	μ_{eff}^{c}	τ_c (MPa)
800	2	14 %	0.521	416
810	3	21 %	0.516	418
820	4	29 %	0.513	421
830	5	36 %	0.511	425
840	6	43 %	0.509	429
860	7	50 %	0.507	439
870	9	64 %	0.502	441

Tableau 5-11: Illustration de la méthode 3 pour calculer la cission résolue critique à partir de la distribution du facteur de Schmid effectif (sur la base de 14 nodules d'orientation [B.O.b.] dans les 9 sous-fenêtres de la zone 1 observée à fort grandissement).

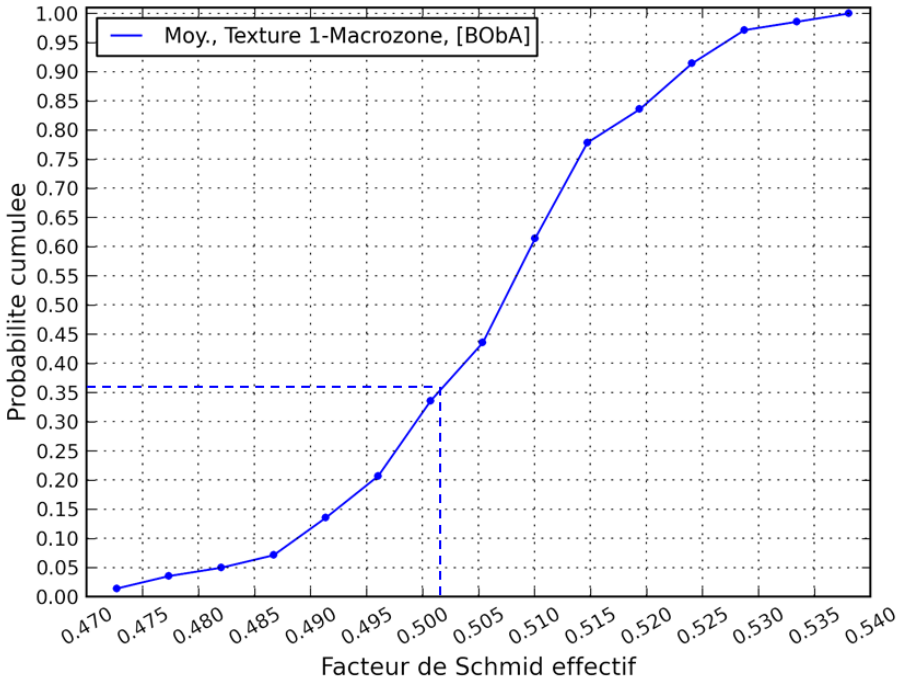


Figure 5-39 : Distribution du facteur de Schmid effectif local dans N grains centraux d'orientation [B.O.b.A.] au sein d'une macrozone de texture 1.

Les résultats obtenus dans la zone 1, à fort grandissement dans les 9 sous-fenêtres ou à faible grandissement dans la zone entière, sont très proches (Tableau 5-12 et Tableau 5-13), avec des valeurs plus importantes de 5 à 10 MPa à faible grandissement pour le glissement basal. Cela résulte certainement du fait que moins de traces sont détectées à plus faible grandissement. Ces valeurs sont légèrement plus élevées que celle obtenues avec la méthode 2, ce qui est cohérent puisque celle-ci doit fournir une estimation basse comme cela a été discuté. La différence entre la cission critique déterminée pour l'orientation [B.O.b.] et celles obtenues pour les orientations [5] et [6] est proche de celle observée avec la méthode 2.

Système	Orientation de référence	Nb nodules	Nb nodules activés	τ_c (MPa)	SD (MPa)
Basal	*[B.O.b.A]*	14	9	**427**	9
	[5]	5	4	**361**	11
	[6]	14	7	**370**	8
Prismatique	*[B.O.p.B]*	21	10	**392**	2

Tableau 5-12: Cissions résolues critiques et écart-type (SD) déterminées à partir de la distribution du facteur de Schmid effectif (méthode 3) dans les 9 sous-fenêtres de la zone 1 observée à fort grandissement.

Système	Orientation de référence	Nb nodules	Nb nodules activés	τ_c (MPa)	SD (MPa)
Basal	*[B.O.b.A]*	31	11	**432**	11
	[5]	28	10	**373**	10
	[6]	59	10	**382**	9
Prismatique	*[B.O.p.B]*	68	19	**389**	10

Tableau 5-13: Cissions résolues critiques et écart-type (SD) déterminées à partir de la distribution du facteur de Schmid effectif (méthode 3) dans la zone 1 entière observée à faible grandissement.

Les écarts-types sont globalement un peu plus faible que ceux obtenus avec la méthode 2. Cela est naturel puisque la dispersion des cissions d'un nodule à l'autre est prise directement en compte.

Les cissions résolues critiques obtenues à partir des données de la zone 2 (Tableau 5-14) sont supérieures de 15 à 20 MPa à celles obtenues dans la zone 1 pour le glissement basal. La valeur obtenue pour le glissement prismatique est quasiment identique à celle de la zone 1. La différence des valeurs entre les 2 zones est du même ordre que celle obtenue avec la méthode 2.

Système	Orientation de référence	Nb nodules	Nb nodules activés	τ_c (MPa)	SD (MPa)
Basal	*[B.O.b.A]*	45	14	**454**	12
	[5]	58	31	**386**	11
	[6]	28	4	**396**	9
Prismatique	*[B.O.p.B]*	5	3	**393**	13

Tableau 5-14: Cissions résolues critiques et écart-type (SD) déterminées à partir de la distribution du facteur de Schmid effectif (méthode 3) dans la zone 2 entière observée à faible grandissement.

Il est délicat de ne retenir qu'une valeur malgré les différences constatées en fonction des méthodes, des zones d'observation et, dans le cas du glissement basal, de l'orientation de référence considérée.

Si l'on considère la moyenne des valeurs obtenues avec la méthode 3 dans les différentes zones d'observation et pour les différentes orientations de référence, on obtient une cission résolue critique de 405MPa pour le glissement basal et de 392MPa pour le glissement prismatique.

5.9 Bilan

Ce chapitre a été consacré à l'analyse de l'activation du glissement observé en surface du TA6V au cours d'un essai de traction in situ. Le protocole d'essai et le matériau étudié sont identiques à ceux mis en jeu dans les travaux de Florent Bridier dont ce travail est une suite logique. Un soin particulier a été apporté au choix des zones d'observations pour permettre une comparaison plus directe des observations aux résultats de simulation du chapitre 4. Une réelle confrontation quantitative n'a pas été possible car la stratégie de simulation n'avait pas été envisagée principalement dans ce sens. Les travaux futurs viseront à améliorer ce point en réalisant de nouvelles séries de simulations avec l'orientation des nodules analysés (éventuellement en imposant l'orientation des grains en surface de l'agrégat) ou en définissant autrement les séries de simulations et la classe d'orientation du grain central associé. En revanche, les deux zones d'observations ont été choisies au sein de macrozones dont la texture est très proche de celles utilisées dans les simulations du chapitre 4.

Les nouvelles données acquises ont permis de confronter et préciser les conclusions issues des études précédentes. En particulier, les domaines d'orientations favorables aux glissement basal et prismatique sont très proches de ceux identifiés par Florent Bridier. Il est apparu clairement que le glissement basal s'active de façon plus précoce que le glissement prismatique. La cinétique d'activation de chaque type de glissement a été caractérisée. Celle-ci illustre bien le caractère stochastique des toutes premières activations. La prépondérance intrinsèque du glissement basal a été dégagée en considérant la fraction de nodules activés par classe d'orientation (essentiellement définie par l'angle θ entre la direction de traction et l'axe c du cristal). Cela permet de comparer l'activation respective de chaque système sans le biais d'une sur-représentation d'une orientation associée à la texture de la zone considérée. Une activité de glissement plus importante a été observée dans la zone 2 correspondant à une macrozone « rouge ».

Une démarche d'identification inverse de la cission critique basée sur les statistiques de cissions simulées a été proposée. La démarche de simulation n'ayant pas été pensée directement dans ce sens, les résultats obtenus sont sujets à discussion et visaient à illustrer la méthodologie mise en place. Néanmoins, les dernières conclusions conduisent à une cission critique basal de 405MPa légèrement supérieure à la cission critique prismatique de 392MPa. Rappelons qu'il s'agit d'une information très importante dans la perspective des simulations dans le domaine élasto-plastique appliquées à l'amorçage en fatigue.

La réalisation des observations à différents grandissements a également permis de dégager des conclusions, d'ordre plus techniques, importantes pour les travaux futurs. Les observations réalisées à faible grandissement (permettant d'analyser rapidement un nombre élevé de nodules) induisent un biais sur le nombre d'activations détectées: il a été estimé qu'environ la moitié des activations seulement, voire un peu moins, sont détectées à ce faible grandissement. En revanche, les mêmes domaines d'orientation et les mêmes allures de cinétique d'activation ont été obtenus avec les 2 grandissements. En termes de cissions critiques, les résultats obtenus avec les 2 grandissements sont également très proches. Le

biais sur la contrainte de détection des traces, évalué grossièrement ici, pourrait être mieux quantifié et inclus dans l'analyse.

Conclusion

Les travaux présentés dans ce mémoire ont porté sur l'évaluation et l'analyse des champs de contraintes qui se développent au sein des grains de surface des matériaux métalliques polycristallins. Cette étude s'est concentrée uniquement sur la réponse élastique. L'hétérogénéité des champs de contraintes impacte en effet fortement l'activation de la plasticité et sa variabilité dont les conséquences, en fatigue notamment, sont importantes. Cette hétérogénéité est due à l'anisotropie élastique cristalline et à la microstructure polycristalline du matériau considéré. De plus, bien que la plasticité n'a pas été directement modélisée au cours de ces travaux, son anisotropie a été prise en compte à travers l'existence de différents systèmes de glissement potentiellement activables. La méthodologie générale retenue pour cette étude est basée sur la simulation numérique par éléments-finis de la réponse élastique d'un ensemble d'agrégats polycristallins dont les orientations cristallines sont tirées aléatoirement.

Deux matériaux support ont été choisis : un acier austénitique 316L de structure cristalline cubique à faces centrées (CFC) et un alliage de titane TA6V dont la phase principale est de structure hexagonale compacte (HC). Les différenciations intéressantes vis-à-vis de la problématique d'étude, motivant d'ailleurs le choix de ces 2 matériaux, sont associées à l'anisotropie élastique et plastique. Cette dernière n'est prise en compte qu'à travers l'analyse de grandeurs mécaniques définies, dans la réponse élastique du matériau, sur les systèmes de glissement. Les principales constatations expérimentales issues de la littérature et relatives à l'activation du glissement et à l'amorçage en fatigue pour ces deux matériaux ont permis de préciser les principaux objectifs de l'étude. L'analyse bibliographique des travaux de simulations par éléments-finis, en champs complets, de la réponse mécanique d'agrégats polycristallins a fait état d'un faible nombre de travaux sur les alliages de titane et les matériaux hexagonaux en général.

La démarche de simulation adaptée aux questions posées précédemment a été définie. Elle est basée sur le tirage de N agrégats polycristallins présentant un grain central dont l'orientation cristallographique est fixée. La caractérisation de la distribution des champs mécaniques au sein des N grains centraux de même orientation, mais de voisinages différents, est réalisée par post-traitement des simulations. A travers un exemple (grain favorablement orienté pour le glissement dans le cas de l'austénite CFC), la distribution des contraintes a été analysée. Une dispersion importante est observée au sein des N grains centraux. La distribution de la cission résolue, à travers un facteur de Schmid effectif déjà introduit par (Sauzay 2007) dans le cadre d'une démarche tout à fait similaire, a été décrite, de même qu'un indicateur d'amorçage tenant compte de la cission et de la contrainte normale sur les systèmes de glissement.

Cette démarche de simulation est, dans un premier temps, appliquée à l'acier austénitique 316L de structure CFC. La distribution des champs mécaniques a été évaluée et analysée pour 8 orientations cristallographiques. En fonction de l'orientation considérée, la contrainte axiale moyenne varie de ~70% (pour l'orientation [100] la plus souple) à ~120% (pour l'orientation [111] la plus rigide) de la contrainte de traction macroscopique. En moyenne dans les grains centraux, les autres composantes du tenseur des contraintes restent inférieures à 10% de la contrainte macroscopique. Le facteur de Schmid effectif définit la cission moyenne d'un ensemble de grains normalisée par la contrainte macroscopique. Une valeur comprise entre 0.4 et 0.43 est obtenue pour l'orientation dont le facteur de Schmid « conventionnel », c'est-à-dire défini pour un monocristal de même orientation, vaut 0.5 (orientation [B.O.]). La valeur maximale de 0.44 est atteinte pour une orientation dont le facteur de Schmid « conventionnel » vaut 0.487, située plus au centre du triangle standard (orientation [Q.]). La dispersion de la cission résolue au sein de N grains de même orientation a été décrite par un écart-type intra-granulaire (décrivant la dispersion moyenne de la cission au sein d'un grain) et par un écart-type inter-granulaire (décrivant la dispersion de la moyenne des cissions d'un grain à un autre). Globalement, l'écart-type intra-granulaire sur la cission résolue correspond à ~5-6% de la contrainte macroscopique. Il est légèrement supérieur à l'écart-type inter-granulaire qui est de l'ordre de ~3-4%. Par ailleurs, la distribution des cissions résolues peut être décrite de façon acceptable par une loi normale. L'analyse des voisins du grain central des réalisations ayant conduit aux valeurs extrémales de la cission (en moyenne dans un grain) a confirmé les configurations identifiées par (Sauzay 2006). Un nouvel élément qui se dégage de notre étude concerne l'influence de l'orientation du voisin du grain central sous la surface qui peut être considéré comme un voisin latéral particulier. Dans la majorité des cas étudiés, la cission maximale est atteinte lorsque le module d'Young de ce voisin prend des valeurs particulièrement faibles.

Dans un second temps, la même démarche a été appliquée à la phase α des alliages de titane de structure HC. La caractérisation de la distribution des contraintes, ainsi que celle de la cission résolue et de la contrainte normale sur les systèmes de glissement, obtenues dans le cas d'agrégats non-texturés, fournissent des résultats qualitativement semblables à ceux obtenus dans le cas du 316L. Mais, la plus faible anisotropie élastique du titane conduit à une hétérogénéité des champs beaucoup plus faible. En raison de l'existence de 2 type de glissement (basal ou prismatique) dont l'activation est associée à des domaines d'orientation bien distincts, les distributions de la cission résolue des différentes orientations présentent des zones de recouvrement plus faibles que dans le cas du 316L. Ceci est cohérent avec une activation du glissement associée, pour chaque orientation, à des domaines d'orientations et des niveaux de contraintes mieux définis. Les orientations favorables au glissement prismatique sont associées à la plus faible valeur du module d'Young de la maille cristalline dans la direction de traction, qualifiées d'orientations souples. En conséquence, dans un polycristal en traction, la cission résolue moyenne des grains de cette orientation est plus faible que la cission du monocristal de même orientation soumis à la même contrainte macroscopique. La situation inverse est constatée pour les orientations favorables au glissement basal ce qui peut expliquer, en partie, la plus grande précocité de l'activation de

ce type de glissement. Certaines orientations particulières, notamment l'orientation [5], avaient été choisies pour expliquer les domaines d'activation favorables au glissement basal identifiés expérimentalement. Les champs prédits pour ces orientations ne sont pas toujours cohérents avec les observations passées, ainsi que celles réalisées dans ce travail. Ceci pourrait s'expliquer par une description imprécise de la réponse élastique du monocristal de l'alliage étudiée. L'influence des constantes élastiques pourra être évaluée numériquement afin d'étayer cette hypothèse. Des travaux expérimentaux sont actuellement en cours sur ces aspects au sein du laboratoire d'accueil. La démarche de simulation a été ensuite appliquée à des agrégats présentant une texture cristallographique. Deux textures cristallographiques ont été définies à partir de celles observées expérimentalement dans les macrozones. Une stratégie, volontairement simple, a été mise en place afin de rendre compte de la distribution spatiale de ces deux textures. Pour cela, une simulation annexe permet d'évaluer l'état mécanique moyen d'une macrozone en fonction de sa texture. Une échelle intermédiaire est donc introduite: celle des macrozones entre l'échelle du grain et du polycristal sans texture globale contenant plusieurs macrozones. L'état moyen de la macrozone est reporté sur les agrégats texturés utilisés précédemment. Des hypothèses simplificatrices relativement fortes ont été faites afin d'éviter de réaliser des simulations supplémentaires. Les résultats obtenus rendent compte de façon cohérente de l'influence des macrozones. Ce travail préliminaire doit être poursuivi pour obtenir des évaluations ayant une valeur prédictive plus riche.

Enfin, une étude expérimentale a conclu ce travail essentiellement numérique. L'analyse de l'activation du glissement au sein du TA6V en traction monotone a été réalisée en suivant la démarche mise en œuvre par (Bridier 2006). Les nouvelles données acquises ont permis de conforter et préciser les conclusions issues des études précédentes. En particulier, les domaines d'orientations favorables aux glissement basal et prismatique sont très proches de ceux identifiés par (Bridier 2006). Il est apparu clairement que le glissement basal s'active de façon plus précoce que le glissement prismatique. Le choix des zones d'observation ayant été fait pour étudier l'influence de la texture, une activité de glissement plus précoce et plus importante a été observée dans les macrozones « rouges », favorisant les orientations telles que l'axe c du cristal est proche de la direction de traction (i.e. les orientations les plus rigides). Une démarche d'identification inverse de la cission critique basée sur les statistiques de cission simulée a été proposée. Les cissions critiques d'activation du glissement basal et prismatique ont été évaluées à 405MPa et à 392MPa, respectivement. Les perspectives dégagées sur les travaux de simulation et la stratégie d'identification permettront d'obtenir des estimations plus fiables.

La principale perspective générale de ce travail est la prise en compte de la plasticité cristalline cyclique dans les simulations et dans l'analyse statistique des champs simulés. Cependant, cela se traduira par une augmentation significative du coût numérique en raison de la plus grande complexité du comportement et de la nécessité de considérer un nombre de cycles suffisamment important. Cette étude préalable en élasticité pourra servir de guide afin

de cibler les configurations pertinentes à étudier prioritairement. Une étape intermédiaire pourrait consister à tenir compte de la plasticité dans le grain central uniquement et, éventuellement, dans ses premiers voisins. De plus, les résultats mériteraient d'être analysés dans un cadre statistique adapté à l'étude des valeurs extrêmes (Przybyla 2010, Hor 2014).

Du point de vue de l'étude consacrée au titane, une des principales perspectives serait d'enrichir et/ou de redéfinir légèrement la stratégie de simulation, du moins dans la définition des séries, afin de permettre une confrontation plus directe des champs simulés aux données expérimentales relatives à l'activation du glissement. Une piste de travail serait de simuler les champs pour les orientations de quelques nodules analysés expérimentalement, éventuellement en imposant également l'orientation de ses voisins en surface. Cela permettrait de réduire la variabilité de la cission résolue et donc une identification plus fiable de la cission critique d'activation.

Annexes

A. Notions de cristallographie

A.1 Structure cristallographique, directions et plans cristallographiques

Les notations cristallographiques utilisées sont présentées dans le Tableau A-1.

	Cristal à symétrie cubique	Cristal à symétrie hexagonale
Notations	Indices de Miller	Notations à 4 indices
Direction cristallographique	[p q r]	[u v t w]
Famille de directions	⟨p q r⟩	⟨u v t w⟩
Plan cristallographique	(h k j l)	(h k j l)
Famille de plans	{h k l}	{h k j l}

Tableau A-1: Notations cristallographiques utilisées (j=-(h+k)).

La Figure A-1 illustre deux types de cristaux étudiés. La maille cubique à faces centrées présente la symétrie cubique (Figure A-1.a) et la maille hexagonale compacte présente la symétrie hexagonale (Figure A-1.b).

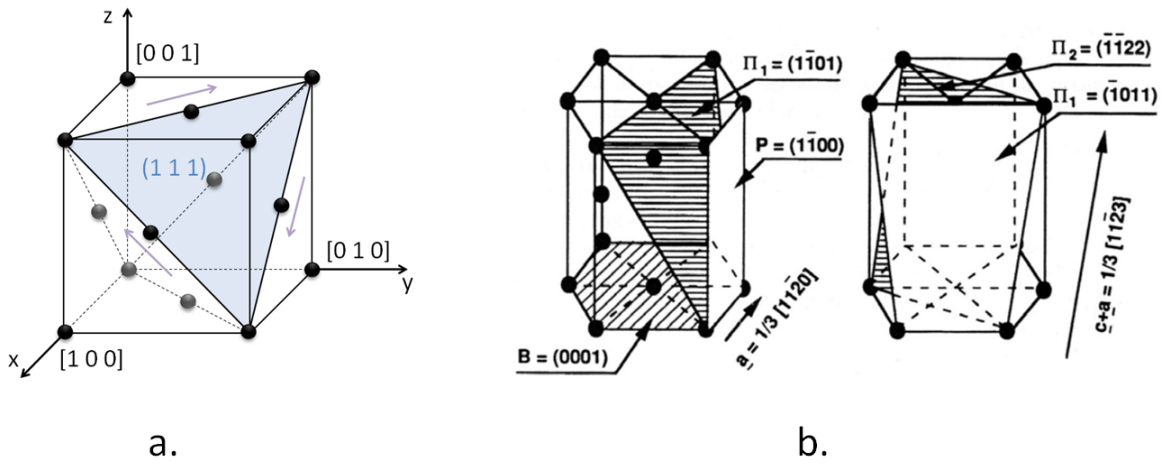


Figure A-1 : 2 types de cristaux étudiés, a : cristal à symétrie cubique, b : cristal à symétrie hexagonale.

A.2 Description de l'orientation cristalline, angles d'Euler

A.2.1 Description de trois rotations successives, angles d'Euler

Les angles d'Euler sont les trois angles utilisés pour décrire le passage entre le repère cristallin Oxyz (c comme cristal) et le repère attaché à l'échantillon Ox'y'z'. En suivant la convention de Bunge, ces angles sont obtenus par trois rotations successives autour des axes du repère attaché à l'échantillon pour faire coïncider les deux repères :

- la première rotation d'angle φ_1 autour de l'axe z : Oxyz → Ouvz
- la deuxième rotation d'angle ϕ autour de l'axe u: Oxvz → Ouwz'
- la troisième rotation d'angle φ_2 autour de l'axe z' : Ouwz' → Ox'y'z'

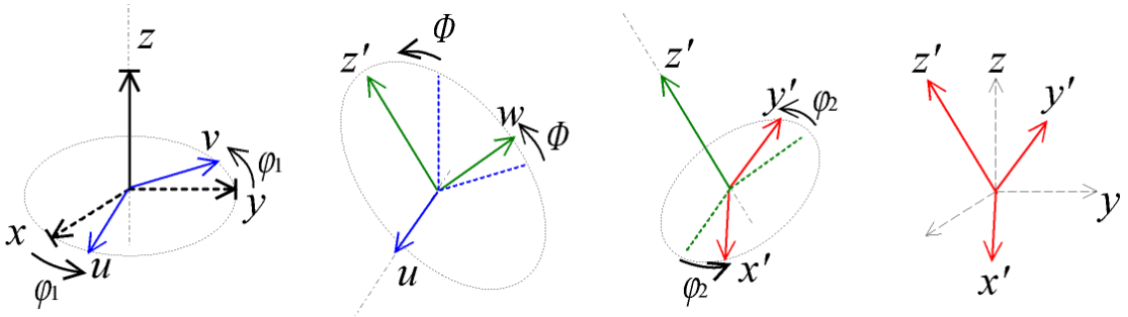


Figure A-2 : Angles d'Euler selon la convention de Bunge (Guilhem 2011).

Une orientation cristallographique est représentée par un jeu de trois angles d'Euler: $\varphi_1 \in [0, 2\Pi]$, $\phi \in [0, \Pi]$, $\varphi_2 \in [0, 2\Pi]$.

Le tirage aléatoire des angles d'Euler est réalisé de la manière suivante (la méthode en $\sin\Phi$):

- tirage aléatoire de 2 nombres $\varphi_1 \in [0, 360], \varphi_2 \in [0, 360]$
- tirage aléatoire de 1 nombre $X \in [-1, 1]$, et $\phi = |arc\cos(X)|$

A.2.2 Matrice de passage et matrice d'orientation

Soit un vecteur $\vec{x}$, on note :

- x_i^c composantes dans le repère cristallin (c comme cristal)
- x_i^s composantes dans le repère d'échantillon (s comme sample)

Avec les angles d'Euler dans la convention de Bunge (φ_1, ϕ, φ_2), la matrice de passage d'un repère à l'autre est telle que : $x_i^s = P_{ij} x_j^c$ avec :

$$P_{ij}=\begin{pmatrix} \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \sin\varphi_1 \cos\phi \sin\varphi_2 & -\cos\varphi_1 \sin\varphi_2 - \sin\varphi_1 \cos\phi \cos\varphi_2 & \sin\varphi_1 \sin\phi \\ \sin\varphi_1 \cos\varphi_2 + \cos\varphi_1 \cos\phi \sin\varphi_2 & -\sin\varphi_1 \sin\varphi_2 - \sin\varphi_1 \cos\phi \cos\varphi_2 & -\cos\varphi_1 \sin\phi \\ \sin\phi \sin\varphi_2 & \sin\phi \cos\varphi_2 & \cos\phi \end{pmatrix}$$

L'inverse de la matrice de passage est appelé la matrice d'orientation : $G = P^{-1}$

A.2.3 Désorientation

La désorientation entre 2 cristaux A et B est déterminée par une rotation d'angle Φ autour d'un axe pour faire coïncider ces 2 cristaux. La matrice de désorientation $G_{A/B}$ entre ces 2 cristaux est définie comme suit :

$$G_{A/B}=G_B.G_A^{-1} = G_B.G_A^T$$

avec G_A et G_B les matrices d'orientation du cristal A et B.

La matrice $G_{A/B}$ peut être exprimée comme une rotation d'angle Φ autour d'un axe tel que :

$$G_{A/B}=\begin{pmatrix} \cos\Phi & -\sin\Phi & 0 \\ \sin\Phi & \cos\Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{Tr}(G_{A/B}) = 2\cos\Phi + 1$$

La désorientation absolue Φ entre 2 cristaux est donc :

$$\Phi = \mathrm{arcos}\left(\frac{\mathrm{Tr}(G_{A/B})-1}{2}\right)$$

Chaque réseau cristallin présente certaines symétries cristallines associées aux opérateurs de symétries O_i (24 opérateurs pour le réseau CFC et 12 pour le réseau HC). En tenant compte de ces symétries, la matrice de désorientation est exprimée comme :

$$G_{A_i/B_j} = O_j.G_B.G_A^T.O_i^T$$

La valeur minimale entre les désorientations obtenues en prenant en compte les symétries cristallines est appelée la désorientation cristalline $\Delta\Phi$:

$$\Delta\Phi = \min_{i,j}\left[\mathrm{arcos}\left(\frac{\mathrm{Tr}(G_{A_i/B_j})-1}{2}\right)\right]$$

A.3 **Orientation des systèmes de glissement par rapport à la surface**

Pour identifier les traces de glissement observées en surface, on calcul l'angle Π entre la direction de traction et la trace du plan de glissement sur la surface libre (Figure A-3). On définit également l'angle α entre la normale au plan de glissement et la normale à la surface libre. L'angle β quant à lui est défini entre la direction de glissement et la normale à la surface libre (Figure A-4). On a donc :

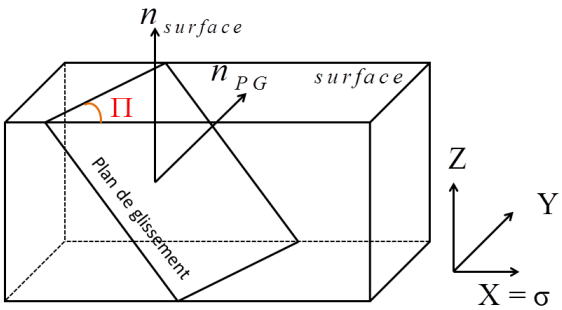


Figure A-3 : Représentation de l'angle Π.

$$\cos\Pi = \frac{\left(\overrightarrow{n_{PG}} \wedge \overrightarrow{n_{surface}}\right)}{\left\|\left(\overrightarrow{n_{PG}} \wedge \overrightarrow{n_{surface}}\right)\right\|} \cdot \vec{\sigma}$$

Avec $\vec{\sigma}$: vecteur unitaire colinéaire à la direction de sollicitation

$\overrightarrow{n_{PG}}$: vecteur unitaire colinéaire à la normale au plan de glissement

$\overrightarrow{n_{surface}}$: vecteur unitaire colinéaire à la normale à la surface libre

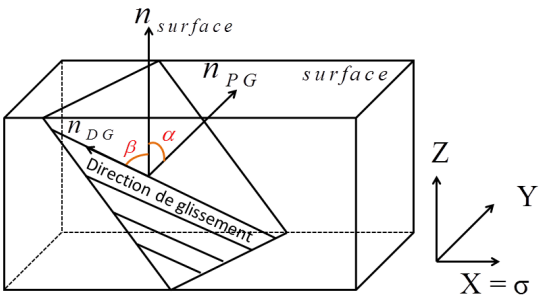


Figure A-4 : Représentation de l'angle α *et* β.

$$\cos\alpha = \overrightarrow{n_{PG}} \cdot \overrightarrow{n_{surface}}\ ,\ \cos\beta = \overrightarrow{n_{DG}} \cdot \overrightarrow{n_{surface}}$$

Avec $\overrightarrow{n_{DG}}$: vecteur unitaire colinéaire à la direction de glissement

A.4 Représentation graphique des orientations

Il existe différents outils pour illustrer de manière visuelle les orientations et les textures cristallographiques. En sciences des matériaux, on utilise les figures de pôles directes et inverses obtenues par projection stéréographique.

A.4.1 Projection stéréographique

La projection stéréographique est la projection d'une sphère sur un plan qui sépare les deux hémisphères, nord et sud, de la sphère, qu'on appelle plan équatorial. Soit S le point situé au pôle sud de la sphère à projeter. L'image P d'un point M de cette sphère sera définie par l'intersection entre le plan équatorial et la droite SM (Figure A-5).

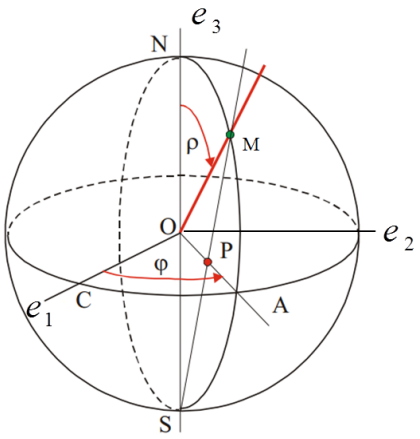


Figure A-5 : Projection stéréographique.

Si on considère une sphère de rayon unitaire et de centre O, le point M de coordonnées

(x,y,z) dans le repère (e_1, e_2, e_3) et le point P de coordonnées (X,Y) dans le repère (e_1, e_2), on a donc :

$$\begin{cases} X = \dfrac{x}{1+z} \\ Y = \dfrac{y}{1+z} \end{cases} \quad et \quad \begin{cases} x = \dfrac{2X}{1+X^2+Y^2} \\ y = \dfrac{Y}{1+X^2+Y^2} \\ z = \dfrac{1-X^2-Y^2}{1+X^2+Y^2} \end{cases}$$

A.4.2 Figure de pôles directe

Les figures de pôle directes consistent à effectuer, pour une famille de plans cristallographiques {hkl}, la projection stéréographique des points correspondant aux intersections entre la sphère unitaire et les vecteurs normaux des plans en question. Cette projection se fait généralement sur le plan équateur défini par les directions de l'échantillon : RD, TD et ND. Pour un matériau polycristallin, en réalisant cette opération sur tous les

grains, on obtient un nuage de points. On peut soit représenter chaque point de ce nuage ou bien représenter les isovaleurs de densité de ces points. La Figure A-6 présente les isovaleurs de densité de ces points pour trois familles de plans différentes dans le cas d'un matériau hexagonal.

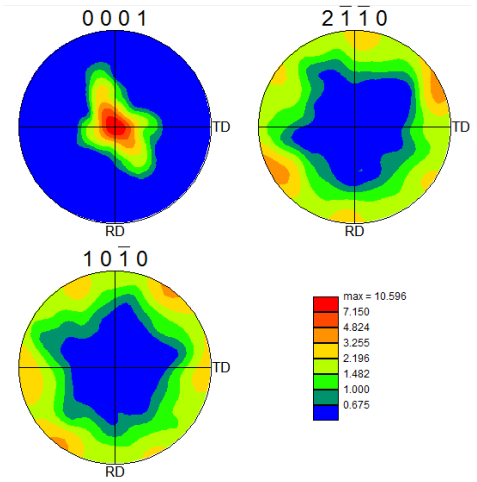


Figure A-6 : Exemples de figures de pôles directes.

A.4.3 Figure de pôles inverse et triangle standard

Comme son nom l'indique, la figure de pôles inverse consiste à réaliser l'opération inverse. On réalise donc la projection stéréographique d'une certaine direction propre à l'échantillon, généralement la direction de chargement sur le repère associé à la maille cristalline. Les réseaux cristallins comportant des symétries, il est possible de réduire le plan de projection équatorial à une zone se rapprochant d'un triangle, appelé triangle choisi comme standard. Suivant les symétries, le triangle standard sera différent. La Figure A-7 donne un aperçu, pour le cas des différents types de réseau, des zones symétriques et du triangle standard. L'ensemble des points du nuage obtenu par projection stéréographique est reporté par symétrie dans ce triangle.

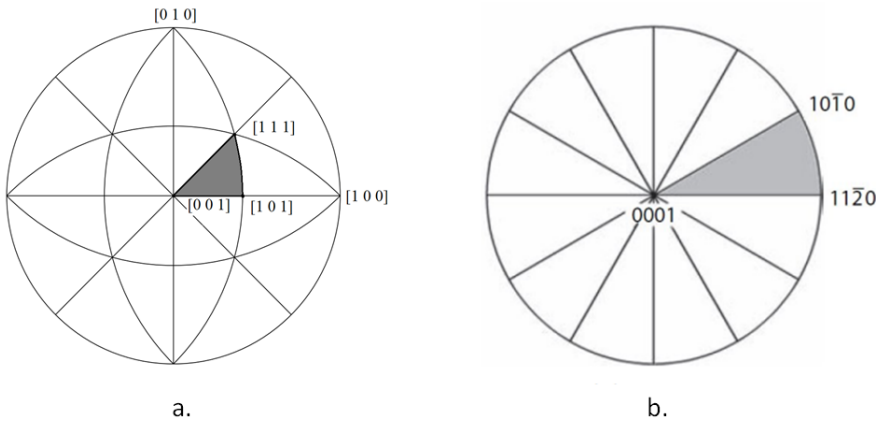


Figure A-7 : Découpage du plan équatorial en triangles stéréographiques standards pour les réseaux cristallins CFC (a) et HC (b) (Randle 1992).

A.5 Orientations étudiées

Un nombre réduit d'orientation de grain central a été choisi en raison du coût en temps des simulations et de l'analyse des résultats. Dans cette étude, des orientations particulières choisies sont 3 orientations aux sommets du triangle standard, des orientations biens orientées (directions de traction qui conduisent à un facteur de Schmid conventionnel maximal $\mu = 0.5$) et quelques autres.

A.5.1 Orientations étudiées pour les CFC

Les six orientations particulières suivantes ont été retenues (Figure A-8) :

- Orientations aux sommets du triangle : [100], [110], [111]
- Orientation [B.O.] (bien orienté), facteur de Schmid maximal μ=0.5
- Orientation [R.] : direction de traction qui conduit au rapport minimal entre le deuxième plus grand facteur de Schmid et le plus grand facteur de Schmid (de façon à favoriser le plus longtemps le glissement simple)
- Orientation [Q.] : orientation quelconque qui se situe au centre de triangle standard entre les directions [R] et [BO].

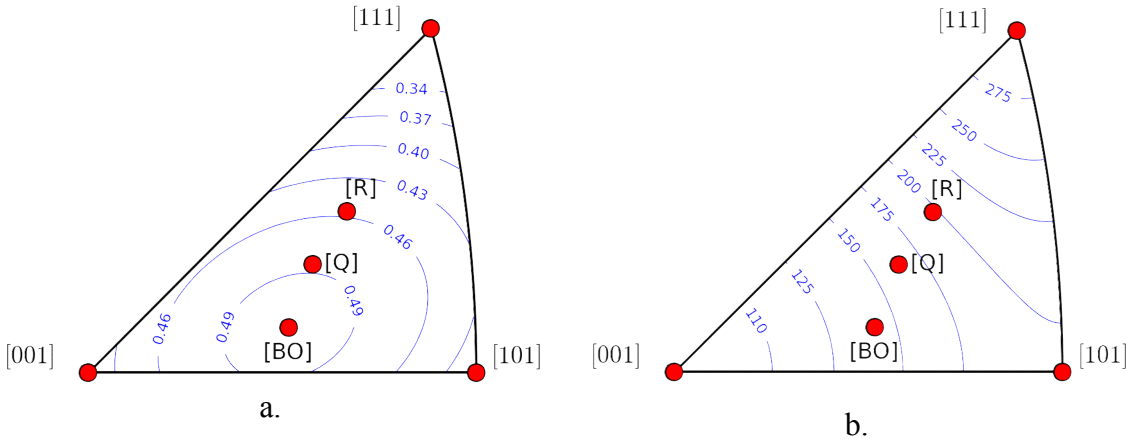


Figure A-8 : Orientations étudiées.

Les isovaleurs du rapport entre les 2 facteurs de Schmid maximaux μ_2/μ_1 sont présentées sur la Figure A-9.

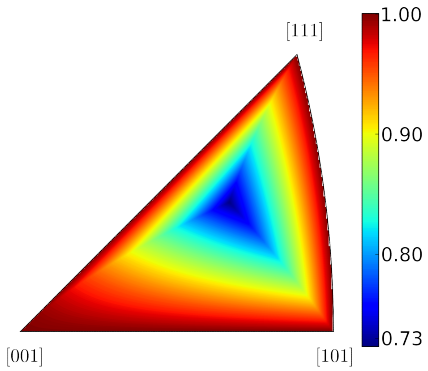


Figure A-9 : Isovaleur du rapport entre 2 facteurs de Schmid maximaux μ_2/μ_1.

En réalité, les définitions ci-dessus ne caractérisent pas une orientation unique mais une infinité par rotation autour de l'axe de traction. Le choix final de l'orientation particulière est arbitraire pour les orientations de type [100], [110], [111], et [Q.].

Pour les orientations de type [B.O.] et [R.], 2 orientations particulières ont été étudiées :

- Orientation B.O. de type A : la normale au plan de glissement et la direction de glissement du système de glissement dont le facteur de Schmid vaut 0.5 forment un angle de 90° avec la normale à la surface libre.
- Orientation B.O. de type B : la normale au plan de glissement et la direction de glissement du système de glissement dont le facteur de Schmid vaut 0.5 forment un angle de $\pm 45^o$ avec la normale à la surface libre.

Le Tableau A-2 récapitule des informations associées aux orientations étudiées pour les CFC. Pour 3 orientations [100], [110] et [111] on a plusieurs systèmes de glissement avec le même facteur de Schmid.

Le Tableau A-3 rapporte le module d'Young et les facteurs de Schmid de chaque orientation étudiée. Pour calculer le module d'Young E dans la direction de traction, on utilise la formulation de Hayes :

$$\frac{1}{E(n)} = \sum_{ijkl} S_{ijkl}.n_i.n_j.n_k.n_l$$

avec n : vecteur unitaire colinéaire à la direction de traction et S : matrice de souplesse.

La matrice souplesse S est calculée en utilisant des constantes de rigidité élastique : C_{11}=198000, C_{12}=125000, C_{44}=122000 MPa.

	Angle Euler (°)			SG	α	β	μ	$\frac{\mu_2}{\mu_1}$	υ	I
	φ_1	ϕ	φ_2							
[1 0 0]	0.00	0.00	0.00	A3	55	45	0.41	1	0.33	0.54
[1 1 0]	0.00	0.00	315	B2	55	45	0.41	1	0.67	0.68
[1 1 1]	90.00	35.26	225.00	A3	62	73	0.27	1	0.11	0.3
[B.O.A.]	135.00	35.26	225.00	B5	90	90	0.5	0.94	0.5	0.75
[B.O.B.]	26.57	65.91	354.23	B5	45	45	0.5	0.94	0.5	0.75
[R.A.]	97.70	125.28	225.00	D4	70.5	90	0.456	0.72	0.33	0.61
[R.B.]	125.90	93.10	297.5	D4	36	54	0.456	0.72	0.33	0.61
[Q.]	60.20	90.00	244.40	B4	39.6	50.4	0.487	0.87	0.4	0.68

Tableau A-2: Récapitulatif des orientations étudiées : valeurs calculées sur le système de glissement primaire (facteur de Schmid maximal).

SG		[100]	[110]	[111]	[BOA]	[BOB]	[RA]	[RB]	[Q]
1	(A2)	0.000	0.000	0.000	0.121	0.122	0.330	0.330	0.262
2	(A3)	**0.408**	0.000	**0.272**	0.318	0.319	0.126	0.126	0.408
3	(A6)	**0.408**	0.000	**0.272**	0.197	0.197	0.204	0.204	0.146
4	(B2)	0.000	**0.408**	0.000	0.250	0.251	0.000	0.000	0.189
5	(B4)	**0.408**	**0.408**	0.000	0.250	0.249	0.000	0.000	**0.487**
6	(B5)	**0.408**	0.000	0.000	**0.500**	**0.500**	0.000	0.000	0.298
7	(C1)	0.000	**0.408**	**0.272**	0.053	0.052	0.204	0.204	0.341
8	(C3)	**0.408**	**0.408**	**0.272**	0.219	0.218	0.330	0.330	0.169
9	(C5)	**0.408**	0.000	0.000	0.167	0.166	0.126	0.126	0.172
10	(D1)	0.000	0.000	**0.272**	0.182	0.181	0.126	0.126	0.110
11	(D4)	**0.408**	0.000	0.000	0.288	0.288	**0.457**	**0.457**	0.091
12	(D6)	**0.408**	0.000	**0.272**	0.469	0.469	0.330	0.330	0.020
E_t (MPa)		101	197	288	141	141	198	198	163

Tableau A-3: Facteur de Schmid et module d'Young des orientations étudiées.

A.5.2 Orientations étudiées pour les HC

Le tableau A-4 récapitule des informations associées aux orientations étudiées pour les HC. Les orientations au milieu du triangle standard sont noté 5, 6, 7, 8 (Figure A-10).

Le Tableau A-5 rapporte le module d'Young et les facteurs de Schmid de chaque orientation étudiée. On calcule le module d'Young comme pour les CFC avec des constantes de rigidité élastique : C_{11}=162400, C_{33}=180700, C_{44}=46700, C_{12}=92000, C_{13}=69000 MPa. Les orientations 5 et 6 ont le même facteur de Schmid maximal sur le système de glissement basal (0.43). L'orientation 8 a le même facteur de Schmid maximal que les orientations 5 et 6 mais sur le système de glissement prismatique. Ces orientations ont le même facteur de Schmid mais un module d'Young différent. L'orientation 7 a le facteur de Schmid maximal sur le système de glissement basal et prismatique. Avec des simulations pour ces orientations, on peut analyser le rôle des différents systèmes de glissement et du module d'Young sur le comportement du grain.

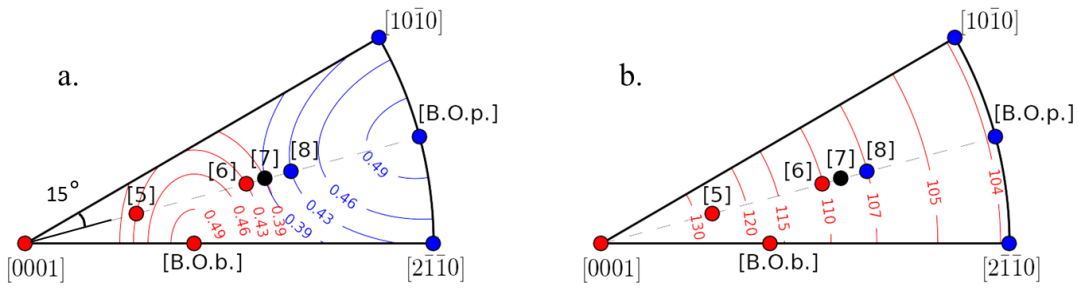


Figure A-10 : Les orientations particulières étudiées présentées dans le triangle standard avec les courbes d'isovaleur de facteur de Schmid (a) et de module d'Young (b).

	Angle Euler (°)			SG	α	β	μ	υ	I
	φ_1	ϕ	φ_2						
[0001]	90.00	90.00	90.00	B1	90	60	0	1	0
[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	0.00	0.00	0.00	P2	90	90	0.43	0.75	0.758
[1 0 $\bar{1}$ 0]	330.00	0.00	0.00	P2	90	90	0.43	0.25	0.541
B.O.b.A.]	225.00	90	120	B2	90	90	0.5	0.5	0.75
B.O.p.A.]	15.00	0	0	P1	90	90	0.5	0.5	0.75
[B.O.b.B.]	90	135	30	B2	45	45	0.5	0.5	0.75
[B.O.p.B.]	180	90	15	P1	45	45	0.5	0.5	0.75
[5]	58.51	90	345	B3	90	75	0.43	0.727	0.743
[6]	31.45	90	345	B3	90	75	0.43	0.272	0.547
[7]	27.36	90	345	B3	90	75	0.39	0.211	0.478
				P2	45	45	0.39	0.394	0.55
[8]	21.98	90	345	P2	45	45	0.43	0.43	0.615

Tableau A-4: Récapitulatif des orientations étudiées : valeurs calculées sur le système de glissement primaire (facteur de Schmid maximal).

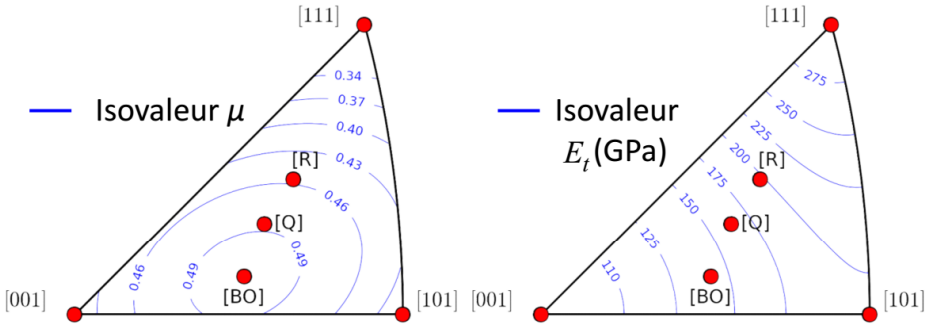
	μ_{B1}	μ_{B2}	μ_{B3}	μ_{P1}	μ_{P2}	μ_{P3}	E_t (MPa)
[0 0 0 1]	0	0	0	0	0	0	143.3
[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	0	0	0	**0.433**	**0.433**	0	104.4
[1 0 $\bar{1}$ 0]	0	0	0	0	**0.433**	**0.433**	104.4
[B.O.b] A/B	0.25	**0.5**	0.25	0.217	0	0.217	117
[B.O.p] A/B	0	0	0	**0.5**	0.25	0.25	104.4
[5]	0.115	0.315	**0.43**	0.068	0.136	0.068	126.6
[6]	0.115	0.315	**0.43**	0.182	0.364	0.182	110.1
[7]	0.106	0.289	**0.394**	0.197	**0.394**	0.197	108.6
[8]	0.09	0.245	0.335	0.215	**0.43**	0.215	107

Tableau A-5: Facteur de Schmid et module d'Young des orientations étudiées.

Les principales informations concernant les orientations étudiées dans cette étude sont récapitulées ci-dessous :

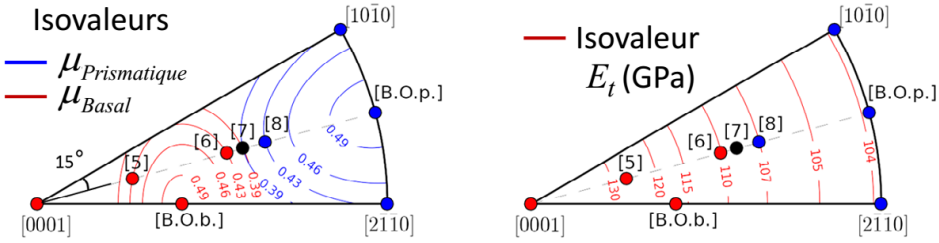
Orientations cristallographiques simulées pour les matériaux

Cubique à Faces Centrées (CFC)



	[100]	[110]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[R.A]	[R.B]	[Q.]
μ	0.408	0.408	0.272	0.500	0.500	0.456	0.456	0.487
E_t (GPa)	101	197	288	141	141	198	198	163

Hexagonal Compact (HC)



	[0001]	[$\bar{2}\bar{1}$10]	[10$\bar{1}$0]	[5]	[6]	[7]	[8]	[BObA]	[BObB]	[BOpA]	[BOpB]
SG	basal	prism.	prism.	basal	basal	b/p	basal	basal	basal	prism.	prism.
μ	0.000	0.433	0.433	0.430	0.430	0.394	0.430	0.500	0.500	0.500	0.500
E_t (GPa)	143	104	104	127	110	109	107	117	117	104	104
θ (°)	0	90	90	31	59	63	68	45	45	90	90

μ : facteur de Schmid conventionnel

E_t : module d'Young dans la direction de traction

θ : angle entre l'axe <c>du cristal et la direction de traction (matériau hexagonal seulement)

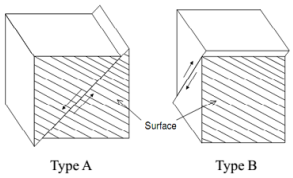
[BO] : orientation « Bien Orienté » (facteur de Schmid conventionnel μ=0.5)

[BOA] : orientation B.O. de type A

(plan de glissement perpendiculaire à la surface)

[BOB] : orientation B.O. de type B

(plan de glissement à 45° de la surface)



B. Morphologies étudiées

Les simulations sont réalisées avec 4 morphologies virtuelles, représentées sur la Figure B-1 dans laquelle les grains centraux (G.C.) apparaissent en rouge :

- Grains hexagonaux alignés en profondeur (Figure B-1a) (H.A.)
- Grains hexagonaux décalés en profondeur (Figure B-1b) (H.D.)
- Grains octaédriques tronqués avec le grain central coupé en 2, appelé « grain ouvert » (Figure B-1c) (G.O.). Chaque grain entier est un octaèdre dont on a tronqué les sommets, possédant 8 faces hexagones et 6 faces carrées.
- Grains octaédriques tronqués avec le grain central entier, appelé « grain fermé » (Figure B-1d) (G.F.)

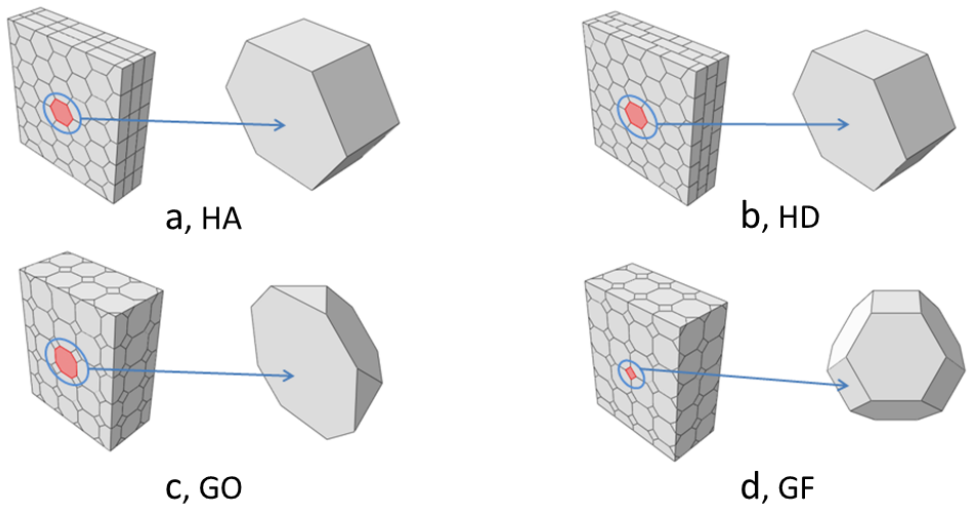


Figure B-1: Morphologies étudiées : (a) hexagones alignés (H.A.), (b) hexagones décalés (H.D.), (c) octaèdre tronqué « grain ouvert » (G.O.), d) octaèdre tronqué « grain fermé » (G.F.).

Les principales caractéristiques de morphologie de ces 4 agrégats sont présentées dans le Tableau B-1 (pour l'agrégat) et dans le Tableau B-2 (pour le grain central).

On trouve que le rapport S/L_z (surface/profondeur) du grain central entre la morphologie des hexagones et des octaèdres coupés est très proche (environ 35) et beaucoup plus élevé que pour un octaèdre entier (2,5). Pour le grain central octaédrique entier, la surface libre S est faible et L_z est 2 fois plus grand que les autres.

La Figure B-2 présente la mesure des dimensions du grain central.

Agrégat	H.A.	H.D.	G.O.	G.F.
L_x (µm)	104	104	80	80
L_y (µm)	120	120	100	100
L_z (µm)	30	30	40	40
V (μm^3)	374400	374400	320000	320000
S (μm^2)	12480	12480	8000	8000
Nb.G.	135	140	140	140
Nb.N.	47824	48834	54148	54183
Nb.E.	252999	258640	294244	294751
S/ L_z	416	416	200	200
S/V	0.033	0.033	0.025	0.025

Tableau B-1: Paramètres des 4 agrégats. L_x, L_y, L_z sont des longueurs dans des directions x, y, z. V est le volume, S est la surface libre, Nb.G. est le nombre de grains dans l'agrégat, Nb.N. est le nombre de nœuds et Nb.E. est le nombre d'éléments.

Grain central	H.A.	H.D.	G.O.	G.F.
L_x (µm)	23	23	20	20
L_y (µm)	20	20	20	20
L_z (µm)	10	10	10	20
V (μm^3)	3450	3450	2000	4000
S (μm^2)	345	345	350	50
Nb.V.	13	10	9	13
Nb.N.	584	605	551	768
Nb.E.	2258	2293	2138	3124
S/ L_z	34.5	34.5	35	2.5
S/V	0.100	0.100	0.175	0.013

Tableau B-2 : Paramètres de 4 grains centraux. L_x, L_y, L_z sont des longueurs dans des directions x, y, z. V est le volume, S est la surface libre, Nb.V. est le nombre de grains voisins, Nb.G. est le nombre de grains dans l'agrégat, Nb.N. est le nombre de nœuds et Nb.E. est le nombre d'éléments.

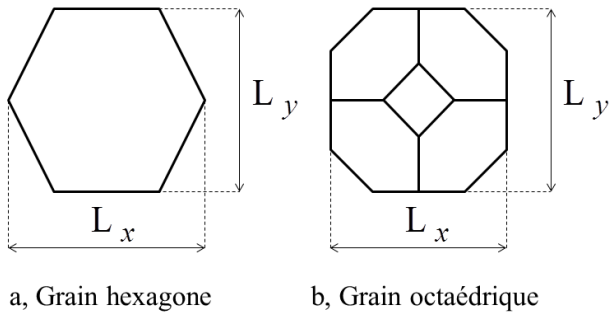


Figure B-2: Dimensions de grain hexagonal (a.) et de grain octaédrique (b.).

C. Etude de voisinage pour les cas de texture répartie uniformément

Cette annexe présente l'analyse des configurations extrémales obtenues avec des simulations réalisées sur les agrégats de texture répartie uniformément (paragraphe 4.3).

La Figure C-1 montre la numérotation des grains voisins du grain central 0, les numéros entre parenthèses désignent les grains en dessous de la surface.

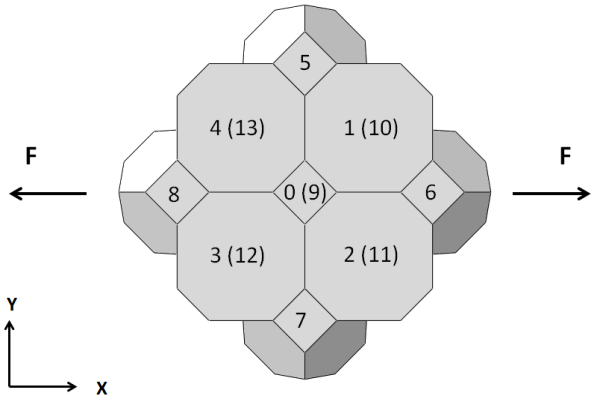


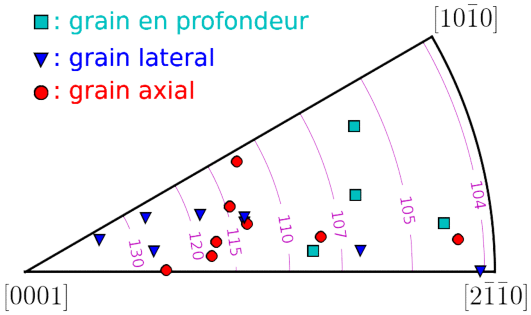
Figure C-1: Numérotaion des grains voisins.

Le Tableau C-1 présente les valeurs extrémales pour 5 orientations et 2 textures étudiées.

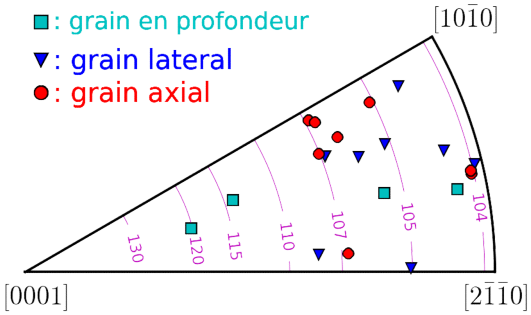
		[5]	[6]	[7]	[BObB]	[BOpB]
	μ	0.433	0.433	0.394	0.5	0.5
Texture 1	μ_{eff}	0.453	0.453	0.416	0.529	0.468
	μ_{max}	0.492	0.485	0.450	0.556	0.491
	μ_{min}	0.412	0.413	0.381	0.502	0.445
Texture 2	μ_{eff}	0.419	0.420	0.386	0.487	0.431
	μ_{max}	0.449	0.455	0.420	0.510	0.510
	μ_{min}	0.392	0.389	0.355	0.459	0.406

Tableau C-1 : Facteurs de Schmid effectifs extrêmes pour les 5 orientations pour les 2 textures étudiées.

L'orientation des grains voisins en surface de ces cas extrêmes est reportée sur la Figure C-2 et Figure C-3.

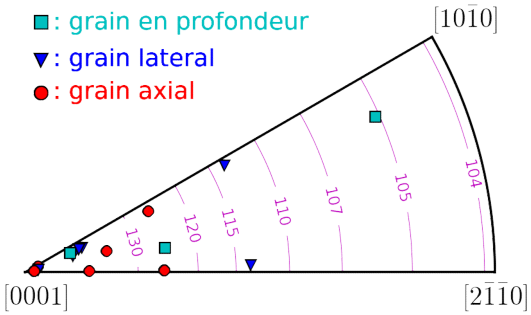


a. Texture 1, config. Max.

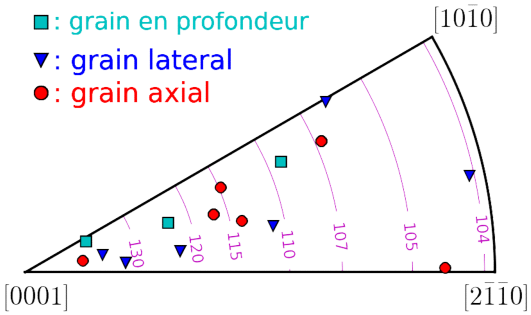


b. Texture 1, config. Min.

Figure C-2 : Grains voisins des configurations extrémales pour la texture 1.



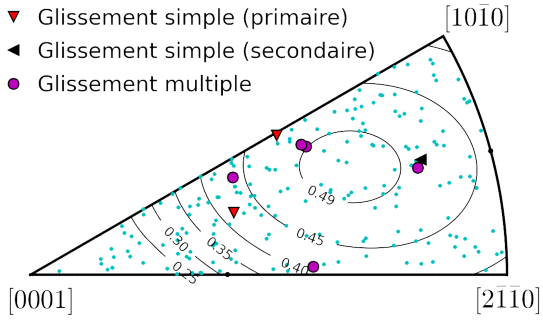
a. Texture 2, config. Max.



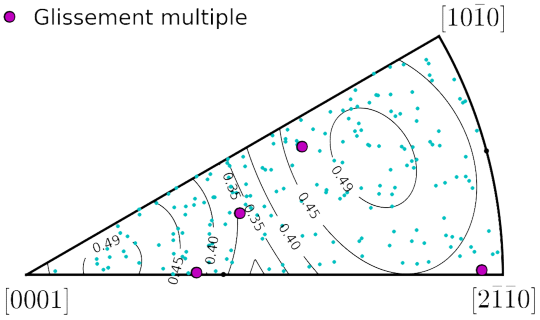
b. Texture 2, config. Min.

Figure C-3 : Grains voisins des configurations extrémales pour texture 2.

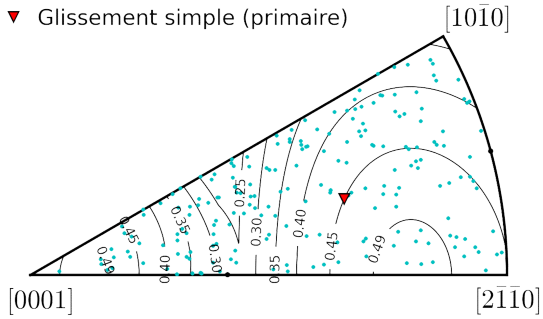
D. Glissement pyramidal observé dans le chapitre 5



a. Glissement pyramidal de 1ère espèce type <a>



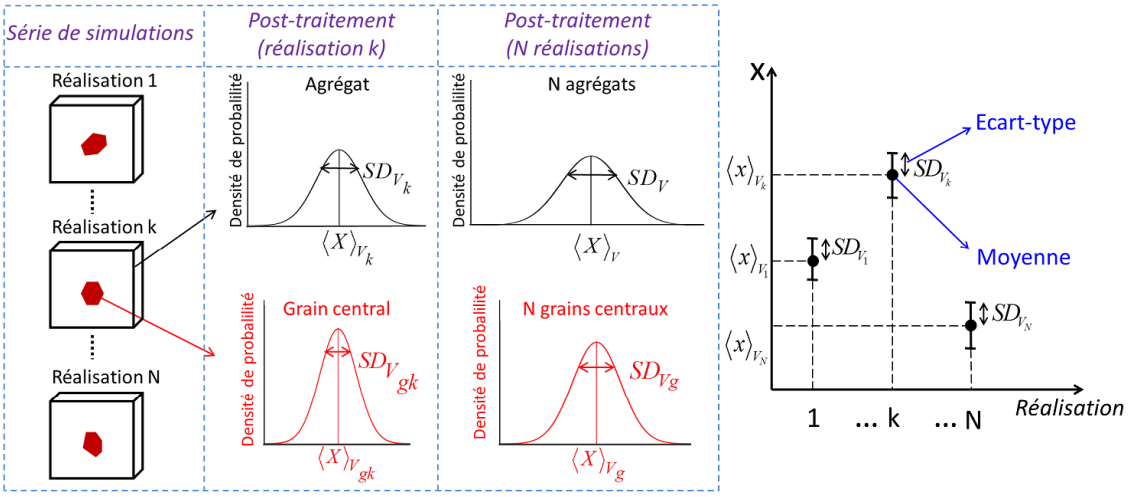
b. Glissement pyramidal 1ère espèce type <c+a>



c. Glissement pyramidal 2nde espèce type <c+a>

Figure D-1 : Orientation des nodules présentant des traces de glissement pyramidaux. Les points indiqués avec la mention « glissement multiple » signifient qu'au moins un des systèmes activés correspond à la famille considérée. Les points verts correspondent aux nodules analysés ne présentant pas de traces sur le système considéré.

E. Aide-mémoire



Moyenne et **écart-type** du champ X dans un domaine V : $\langle X \rangle_V = \frac{1}{V}\int_V X(\vec{x})dv$ et $SD_V(X) = \sqrt{\frac{1}{V}\int_V \left(X(\vec{x}) - \langle X \rangle_V\right)^2 dv}$

Variance intra-réalisation : moyenne des variances par réalisation $\left(\langle SD_{V_k} \rangle_V\right)^2$

Variance inter-réalisation : variance des moyennes par réalisation $\left(SD_V(\langle X \rangle_{V_k})\right)^2$

Notations : volume des domaines considérés

Volume d'**Agrégat**		Volume du **Grain central**	
Réalisation k	N réalisations	Réalisation k	N réalisations
V_k	$V = \sum_{k=1}^{N} V_k$	V_{gk}	$V_g = \sum_{k=1}^{N} V_{gk}$

Grandeurs post-traitées au sein de l'agrégat

Grandeur	Réalisation k	N réalisations
Contrainte moyenne	$\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_k}$	$\langle \sigma_{ij} \rangle_V$
Ecart-type	$SD_{V_k}^{intra}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_k}^{inter}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_k}(\sigma_{ij})$	$SD_V^{intra}(\sigma_{ij})$, $SD_V^{inter}(\sigma_{ij})$, $SD_V(\sigma_{ij})$

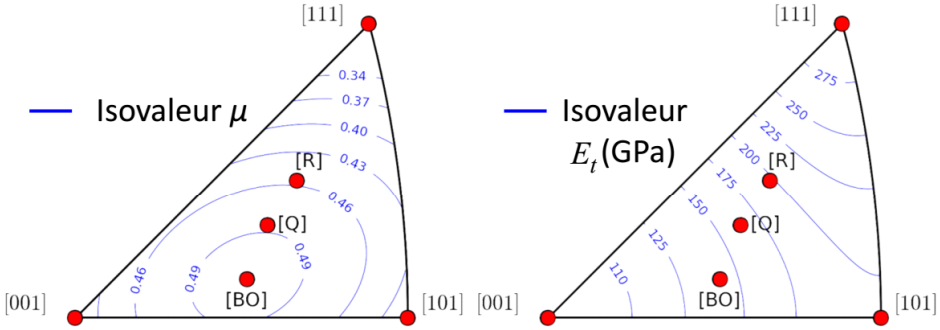
Grandeurs post-traitées au sein du grain central

Grandeur	Réalisation k	N réalisations
Contrainte moyenne	$\langle \sigma_{ij} \rangle_{V_{gk}}$	$\langle \sigma_{ij} \rangle_{Vg}$
Ecart-type de contrainte	$SD_{V_{gk}}^{intra}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_{gk}}^{inter}(\sigma_{ij})$, $SD_{V_{gk}}(\sigma_{ij})$	$SD_{Vg}^{intra}(\sigma_{ij})$, $SD_{Vg}^{inter}(\sigma_{ij})$, $SD_{Vg}(\sigma_{ij})$
Facteur de Schmid effectif moyen du GC	$\mu_{eff}^{gk} = \max_{\alpha}\left(\langle \mu_{eff}^{\alpha} \rangle_{V_{gk}}\right)$	$\mu_{eff} = \max_{\alpha}\left(\langle \mu_{eff}^{\alpha} \rangle_{V_g}\right)$

Facteur de Schmid effectif local (système de glissement α) : $\mu_{eff}^{\alpha} = \frac{\tau^{\alpha}}{\langle \sigma_{11} \rangle_V}$

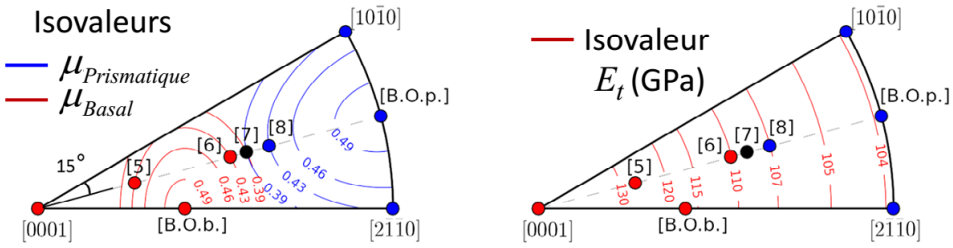
Orientations cristallographiques simulées pour les matériaux

Cubique à Faces Centrées (CFC)



	[100]	[110]	[111]	[B.O.A.]	[B.O.B.]	[R.A]	[R.B]	[Q.]
μ	0.408	0.408	0.272	0.500	0.500	0.456	0.456	0.487
E_t *(GPa)*	101	197	288	141	141	198	198	163

Hexagonal Compact (HC)



	[0001]	[2$\bar{1}\bar{1}$0]	[10$\bar{1}$0]	[5]	[6]	[7]	[8]	[BObA]	[BObB]	[BOpA]	[BOpB]
SG	basal	prism.	prism.	basal	basal	b/p	basal	basal	basal	prism.	prism.
μ	0.000	0.433	0.433	0.430	0.430	0.394	0.430	0.500	0.500	0.500	0.500
E_t *(GPa)*	143	104	104	127	110	109	107	117	117	104	104
θ (°)	0	90	90	31	59	63	68	45	45	90	90

μ : facteur de Schmid conventionnel

E_t : module d'Young dans la direction de traction

θ : angle entre l'axe <c>du cristal et la direction de traction (matériau hexagonal seulement)

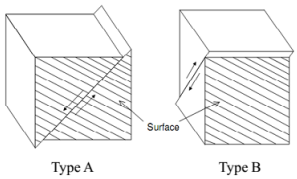
[BO] : orientation « Bien Orienté » (facteur de Schmid conventionnel μ=0.5)

[BOA] : orientation B.O. de type A

(plan de glissement perpendiculaire à la surface)

[BOB] : orientation B.O. de type B

(plan de glissement à 45° de la surface)



Bibliographie

(Bantounas 2007) I. Bantounas, T. C. Lindley, D. Rugg, et D. Dye, « Effect of microtexture on fatigue cracking in Ti–6Al–4V », *Acta Materialia*, vol. 55, p. 5655-5665, 2007.

(Bantounas 2010) I. Bantounas, D. Dye, et T. C. Lindley, « The role of microtexture on the faceted fracture morphology in Ti–6Al–4V subjected to high-cycle fatigue », *Acta Materialia*, vol. 58, p. 3908-3918, 2010.

(Barbe 2009) F. Barbe, R. Quey, A. Musienko, et G. Cailletaud, « Three-dimensional characterization of strain localization bands in high-resolution elastoplastic polycrystals », *Mechanics Research Communications*, vol. 36, p. 762-768, 2009.

(Bartali 2009) A. E. Bartali, V. Aubin, et S. Degallaix, « Surface observation and measurement techniques to study the fatigue damage micromechanisms in a duplex stainless steel », *International Journal of Fatigue*, vol. 31, p. 2049-2055, 2009.

(Basseville 2016) S. Basseville, G. Cailletaud, T. Ghidossi, Y. Guilhem, E Lacoste, H. Proudhonb, L.Signor, P. Villechaise, « Numerical analysis on the local mechanical fields in polycrystalline 316L stainless steel under cyclic fatigue loading :comparison with experimental results. », *article en préparation*, 2016

(Bennett 2003) V. P. Bennett et D. L. McDowell, « Polycrystal orientation distribution effects on microslip in high cycle fatigue », *International Journal of Fatigue*, vol. 25, p. 27-39, 2003.

(Bieler 2009) T. R. Bieler, P. Eisenlohr, F. Roters, D. Kumar, D. E. Mason, M. A. Crimp, et D. Raabe, « The role of heterogeneous deformation on damage nucleation at grain boundaries in single phase metals », *International Journal of Plasticity*, vol. 25, p. 1655-1683, 2009.

(Blochwitz 1996) C. Blochwitz, J. Brechbühl, et W. Tirschler, « Analysis of activated slip systems in fatigue nickel polycrystals using the EBSD-technique in the scanning electron microscope », *Materials Science and Engineering: A*, vol. 210, p. 42-47, 1996.

(Brahme 2006) A. Brahme, M. H. Alvi, D. Saylor, J. Fridy, et A. D. Rollett, « 3D reconstruction of microstructure in a commercial purity aluminum », *Scripta Materialia*, vol. 55, p. 75-80, 2006.

(Brenner 2009) R. Brenner, R. A. Lebensohn, et O. Castelnau, « Elastic anisotropy and yield surface estimates of polycrystals », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 46, p. 3018-3026, 2009.

(Bridier 2000) F. Bridier, « Effets de surface et d'anisotropie en fatigue multiaxiale ». *Thèse de doctorat*, 2000.

(Bridier 2005) F. Bridier, P. Villechaise, et J. Mendez, « Analysis of the different slip systems activated by tension in a α/β titanium alloy in relation with local crystallographic orientation », *Acta Mater.*, vol. 53, p. 555‑567, 2005.

(Bridier 2006) F. Bridier, « Analyse expérimentale des modes de déformation et d'endommagement par fatigue à 20°C d'alliage de titane : aspects cristallographiques à différentes échelles ». *Thèse de doctorat*, 2006.

(Bridier 2008) F. Bridier, P. Villechaise, et J. Mendez, « Slip and fatigue crack formation processes in an α/β titanium alloy in relation to crystallographic texture on different scales », *Acta Materialia*, vol. 56, p. 3951-3962, 2008.

(Bridier 2009) F. Bridier, D. L. McDowell, P. Villechaise, et J. Mendez, « Crystal plasticity modeling of slip activity in Ti–6Al–4V under high cycle fatigue loading », *International Journal of Plasticity*, vol. 25, p. 1066-1082, 2009.

(Cano 2004) F. Cano, A. Constantinescu, et H. Maitournam, « Critère de fatigue polycyclique pour des matériaux anisotropes : application aux monocristaux », *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 332, p. 115-121, 2004.

(Clausen 1999) 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*, vol. 259, p. 17-24, 1999.

(Dang Van 1999) K. Dang Van, « High cycle fatigue analysis in mechanical design », Laboratoire de Mécanique des Solides, CNRS URA 317, Ecole Polytecnique, 1999.

(Déprés 2006) C. Déprés, C. F. Robertson, et M. C. Fivel, « Low-strain fatigue in 316L steel surface grains: a three dimension discrete dislocation dynamics modelling of the early cycles. Part 2: Persistent slip markings and micro-crack nucleation », *Philos. Mag.*, vol. 86, p. 79‑97, 2006.

(Dunne 2005) F. Dunne, N. Petrinic, « Introduction to Computational Plasticity », *OUP Oxford*, 2005.

(Evrard 2010) P. Evrard, A. El Bartali, V. Aubin, C. Rey, S. Degallaix, et D. Kondo, « Influence of boundary conditions on bi-phased polycrystal microstructure calculation », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 47, p. 1979-1986, 2010.

(Feaugas 1997) X. Feaugas et M. Clavel, « Cyclic deformation behaviour of an α/β titanium alloy. Part 1 : Microlechanisms of plasticity under various loading paths », *Acta Materialia*, vol. 45, p. 2685-2701, 1997.

(Fisher 1964) E. S. Fisher et C. J. Renken, « Single-crystal elastic moduli and the hcp → bcc transformation in Ti, Zr, and Hf », *Phys. Rev.*, vol. 135, p. A482-A494, 1964.

(Fivel 2004) M. Fivel, S. Forest, « Plasticité cristalline et transition d'échelle », *Technique de l'ingénieur*, 2004.

(Forest 2001) S. Forest, P. Boubidi, et R. Sievert, « Strain localization patterns at a crack tip in generalized single crystal plasticity », *Scripta Materialia*, vol. 6, p. 953-958, 2001.

(Gey 2012) N. Gey, P. Bocher, E. Uta, L. Germain, et M. Humbert, « Texture and microtexture variations in a near-α titanium forged disk of bimodal microstructure », *Acta Materialia*, vol. 60, p. 2647-2655, 2012.

(Ghosh 2008) S. Ghosh, Y. Bhandari, et M. Groeber, « CAD-based reconstruction of 3D polycrystalline alloy microstructures from FIB generated serial sections », *Computer-Aided Design*, vol. 40, p. 293-310, 2008.

(Groeber 2008a) 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*, vol. 56, p. 1257-1273, 2008.

(Groeber 2008b) 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*, vol. 56, p. 1274-1287, 2008.

(Guéguen 2011) M. Guéguen, L. Signor, J. Dumoncel, P. Villechaise, « Simulations 3D d'agrégats polycristallins reconstruits par approche type CAO », *Actes du 10ème Colloque National en Calcul des Structures*, 2011, France.

(Guerchais 2014) R. Guerchais, « Influence d'accidents géométriques et du mode de chargement sur le comportement en fatigue à grand nombre de cycles d'un acier inoxydable austénitique 316L », *Thèse de doctorat*, 2014.

(Guilhem 2010) Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J.-M. Stéphan, et G. Cailletaud, « Investigation of the effect of grain clusters on fatigue crack initiation in polycrystals », *International Journal of Fatigue*, vol. 32, p. 1748-1763, 2010.

(Guilhem 2011) Y. Guilhem, « Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue », *Thèse de doctorat*, 2011.

(Hénaff 2005) G. Hénaff et F. Morel, « Fatigue des structures: endurance, critères de dimensionnement, propagation des fissures, rupture ». Ellipses, 2005.

(Héripré 2007) 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*, vol. 23, p. 1512-1539, 2007.

(Hor 2014) A. Hor, N. Saintier, C. Robert, T. Palin-Luc, F. Morel, « Assessment of multiaxial HCF criteria at the grain scale: Statistical analysis of morphology and texture effects », *International Journal of fatigue,* 2014.

(Huntington 1958) H.B. Huntington, « The elastic constants of crystals », *Solid State Physics*, vol. 7, p. 214-351, 1958.

(Jha 2012) S. K. Jha, C. J. Szczepanski, P. J. Golden, W. J. Porter III, et R. John, « Characterization of fatigue crack-initiation facets in relation to lifetime variability in Ti–6Al–4V », *International Journal of Fatigue*, vol. 42, p. 248-257, 2012.

(Kamaya 2010) M. Kamaya, « Influence of bulk damage on crack initiation in low-cycle fatigue of 316 stainless steel », *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, vol. 33, p. 94-104, 2010.

(Kanit 2003) T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, et D. Jeulin, « Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 40, p. 3647-3679, 2003.

(King 2010) A. King, M. Herbig, W. Ludwig, P. Reischig, E. M. Lauridsen, T. Marrow, et J. Y. Buffière, « Non-destructive analysis of micro texture and grain boundary character from X-ray diffraction contrast tomography », *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, vol. 268, p. 291-296, 2010.

(LeBiavant 2000) LeBiavant, « *Etude de l'amorçage de fissures de fatigue dans le Ti-6A1-4V*. » . Thèse de doctorat, 2000.

(LeBiavant 2002) K. LeBiavant, S. Pommier, et C. Prioul, « Local texture and fatigue crack initiation in a Ti-6Al-4V titanium alloy », *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, vol. 25, p. 527-545, 2002.

(Legrand 1984) P. B. Legrand, « Relations entre la structure électronique et la facilité de glissement dans les métaux hexagonaux compacts », *Philosophical Magazine Part B*, vol. 49, p. 171-184, 1984.

(Lewis 2006a) A. C. Lewis, J. F. Bingert, D. J. Rowenhorst, A. Gupta, A. B. Geltmacher, et G. Spanos, « Two- and three-dimensional microstructural characterization of a super-austenitic stainless steel », *Materials Science and Engineering: A*, vol. 418, p. 11-18, 2006.

(Lewis 2006b) A. C. Lewis et A. B. Geltmacher, « Image-based modeling of the response of experimental 3D microstructures to mechanical loading », *Scripta Materialia*, vol. 55, p. 81-85, 2006.

(Lienert 2004) U. Lienert, T.-S. Han, J. Almer, P. R. Dawson, T. Leffers, L. Margulies, S. F. Nielsen, H. F. Poulsen, et S. Schmidt, « Investigating the effect of grain interaction during plastic deformation of copper », *Acta Materialia*, vol. 52, p. 4461-4467, 2004.

(Liu 2013) J. Liu, « Prédictions multi-échelles de l'initiation des microfissures de fatigue « . *Thèse de doctorat*, 2013.

(Ma 1989) B.T. Ma, C. Laird, « Overview of fatigue behavior in copper single crystals-I.Surface morphology and stage I crack initiation sites for test at constant strain amplitude », *Acta Metall,* vol. 37, p. 325-336, 1989.

(Man 2002) J. Man, C. Blochwitz, et J. Polák, « Atomic force microscopy of surface relief in individual grains of fatigued 316L austenitic stainless steel », *Acta Materialia*, vol. 50, p. 3767-3780, 2002.

(Man 2002) J. Man, K. Obrtlík, C. Blochwitz, et J. Polák, « Atomic force microscopy of surface relief in individual grains of fatigued 316L austenitic stainless steel », *Acta Materialia*, vol. 50, p. 3767-3780, 2002.

(Man 2009a) J. Man, K. Obrtlík, et J. Polák, « Extrusions and intrusions in fatigued metals. Part 1. State of the art and history », *Philosophical Magazine*, vol. 89, p. 1295-1336, 2009.

(Man 2009b) J. Man, P. Klapetek, O. Man, A. Weidner†, K. Obrtlík, et J. Polák, « Extrusions and intrusions in fatigued metals. Part 2. AFM and EBSD study of the early growth of extrusions and intrusions in 316L steel fatigued at room temperature », *Philos. Mag.*, vol. 89, p. 1337‑1372, 2009.

(Kamaya 2009) M. Kamaya, « Influence of bulk damage on crack initiation in low-cycle fatigue of 316 stainless steel », *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.,* vol. 33, p. 94–104, 2009.

(McDowell 2008) D. L. McDowell, « Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials », *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 62, p. 67-123, 2008.

(Méric 1991.a) L. Méric, P. Poubanne, et G. Cailletaud, « Single Crystal Modeling for Structural Calculations. Part 1 : Model Presentation », *J. Eng. Mater. Technol*, vol. 113, p. 162-170, 1991.

(Méric 1991.b) L. Méric et G. Cailletaud, « Single Crystal Modeling for Structural Calculations. Part 2 : Finite Element Implementation », *J. Eng. Mater. Technol*, vol. 113, p. 171-182, 1991.

(Mineur 2000a) M. Mineur, « Conditions locales d'amorçage des fissures de fatigue dans un acier inoxydable de type 316L : aspects cristallographiques (EBSD) ». *Thèse de doctorat*, 2000.

(Mineur 2000b) M. Mineur, P. Villechaise, et J. Mendez, « Influence of the crystalline texture on the fatigue behavior of a 316L austenitic stainless steel », *Materials Science and Engineering: A*, vol. 286, p. 257-268, 2000.

(Monchiet 2008) V. Monchiet, O. Cazacu, E. Charkaluk, et D. Kondo, « Macroscopic yield criteria for plastic anisotropic materials containing spheroidal voids », *International Journal of Plasticity*, vol. 24, p. 1158-1189, 2008.

(Mu 2013) P. Mu, V. Aubin, I. Alvarez-Armas, et A. Armas, « Influence of the crystalline orientations on microcrack initiation in low-cycle fatigue », *Materials Science and Engineering: A*, vol. 573, p. 45-53, 2013.

(Mughrabi 1981) H. Mughrabi, « Cyclic Plasticity of Matrix and Persistent Slip Bands in Fatigued Metals », *Continuum Models for Discrete Systems 4North-Holland, Amsterdam*, p. 241, 1981.

(Osterstock 2010) S. Osterstock, C. Robertson, M. Sauzay, V. Aubin, et S. Degallaix, « Stage I surface crack formation in thermal fatigue: A predictive multi-scale approach », *Materials Science and Engineering: A*, vol. 528, p. 379-390, 2010.

(Partridge 1967) P. G. Partridge, « The crystallography and deformation modes of hexagonal close-packed metals », *Metallurgical Reviews*, vol. 12, p. 169-194, 1967.

(Pilchak 2010) A. L. Pilchak et J. C. Williams, « Observations of Facet Formation in Near-α Titanium and Comments on the Role of Hydrogen », *Metall and Mat Trans A*, vol. 42, p. 1000-1027, 2010.

(Pommier 2002) S. Pommier, « 'Arching' effect in elastic polycrystals: implications for the variability of fatigue lives », *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, vol. 25, p. 331-348, 2002.

(Poty 2011) A. Poty, « Etude de la plasticité dans les métaux hexagonaux à l'échelle atomique : dynamique des dislocations par dynamique moléculaire ». *Thèse de doctorat*, 2011.

(Pourian 2014) M. H. Pourian, P. Pilvin, F. Bridier, et P. Bocher, « Heterogeneous elastic behavior of HCP titanium polycrystalline aggregates simulated by cellular automaton and finite element », *Computational Materials Science*, vol. 92, p. 468-475, 2014.

(Priser 2011) M. Priser, « Analyses multi-échelles du comportement en fluage d'alliages de zirconium », phdthesis, Université de Bretagne Sud, 2011.

(Przybyla 2010) C. P. Przybyla et D. L. McDowell, « Microstructure-sensitive extreme value probabilities for high cycle fatigue of Ni-base superalloy IN100 », *International Journal of Plasticity*, vol. 26, p. 372-394, 2010.

(Przybyla 2012) C. P. Przybyla et D. L. McDowell, « Microstructure-sensitive extreme-value probabilities of high-cycle fatigue for surface vs. subsurface crack formation in duplex Ti–6Al–4V », *Acta Materialia*, vol. 60, p. 293-305, 2012.

(Qidwai 2009) M. A. S. Qidwai, A. C. Lewis, et A. B. Geltmacher, « Using image-based computational modeling to study microstructure–yield correlations in metals », *Acta Materialia*, vol. 57, p. 4233-4247, 2009.

(Quey 2011) 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*, vol. 200, p. 1729-1745, 2011.

(Randle 1992) V. Randle, « Microtexture Determination and its Applications ». *The Institute of Materials*, 1992.

(Repetto 1997) E. A. Repetto et M. Ortiz, « A micromechanical model of cyclic deformation and fatigue-crack nucleation in f.c.c. single crystals », *Acta Materialia*, vol. 45, p. 2577-2595, 1997.

(Robert 2012) C. Robert, N. Saintier, T. Palin-Luc, et F. Morel, « Micro-mechanical modelling of high cycle fatigue behaviour of metals under multiaxial loads », *Mechanics of Materials*, vol. 55, p. 112-129, 2012.

(Robertson 2012) C. Robertson, L. Vincent, S. Paradowski, P. Villechaise, « Micro-propagation des fissures de fatigue dans un acier 316L : effet de l'orientation cristallographique et de la contrainte moyenne », Rapport du projet AFGRAP, 2012.

(Sauzay 2002) M. Sauzay et P. Gilormini, « Influence of surface effects on fatigue of microcracks nucleation », *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, vol. 38, p. 53-62, 2002.

(Sauzay 2006a) M. Sauzay et T. Jourdan, « Polycrystalline microstructure, cubic elasticity, and nucleation of high-cycle fatigue cracks », *Int J Fract*, vol. 141, p. 431-446, 2006.

(Sauzay 2006b) M. Sauzay, « Effet de l'anisotropie élastique cristalline sur la distribution des facteurs de Schmid à la surface des polycristaux », *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 334, p. 353-361, 2006.

(Sauzay 2008) M. Sauzay et J. Man, « Influence of Crystalline Elasticity on the Stress Distribution at the Free Surface of an Austenitic Stainless Steel Polycrystal. Comparison with Experiments », *Materials Science Forum*, vol. 567-568, p. 149-152, 2008.

(Sauzay 2007) M. Sauzay, « Cubic elasticity and stress distribution at the free surface of polycrystals », *Acta Materialia*, vol. 55, p. 1193-1202, 2007.

(Schwartz 2011) J. Schwartz, « Approche non locale en plasticité cristalline : application à l'étude du comportement mécanique de l'acier AISI 316LN en fatigue oligocyclique « . *Thèse de doctorat*, 2011.

(Signor 2016) L. Signor, P. Villechaise, T. Ghidossi, E. Lacoste, M. Gueguen, et S. Courtin, « Influence of local crystallographic configuration on microcrack initiation in fatigued 316LN stainless steel: Experiments and crystal plasticity finite elements simulations », *Materials Science and Engineering: A*, vol. 649, p. 239-249, 2016.

(Simonovski 2011) I. Simonovski et L. Cizelj, « Computational multiscale modeling of intergranular cracking », *Journal of Nuclear Materials*, vol. 414, p. 243-250, 2011.

(Stinville 2015) J. C. Stinville, N. Vanderesse, F. Bridier, P. Bocher, et T. M. Pollock, « High resolution mapping of strain localization near twin boundaries in a nickel-based superalloy », *Acta Materialia*, vol. 98, p. 29-42, 2015.

(St-Pierre 2008) 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 O.I.M analysis », *International Journal of Plasticity*, vol. 24, p. 1516-1532, 2008.

(Szczepanski 2013) C. J. Szczepanski, S. K. Jha, P. A. Shade, R. Wheeler, et J. M. Larsen, « Demonstration of an in situ microscale fatigue testing technique on a titanium alloy », *International Journal of Fatigue*, vol. 57, p. 131-139, 2013.

(Tabourot 1992) L. Tabourot, « Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes transformations », *Thèse de doctorat*, 1992.

(Luther 2009) C. K. Torsten Luther, « Polycrystal models for the analysis of intergranular crack growth in metallic materials », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 76, p. 2332-2343, 2009.

(Uchic 2011) M. D. Uchic, « Serial Sectioning Methods for Generating 3D Characterization Data of Grain- and Precipitate-Scale Microstructures », *Springer US*, p. 31-52, 2011.

(Watanabe 2010) I. Watanabe, D. Setoyama, N. Iwata, et K. Nakanishi, « Characterization of yielding behavior of polycrystalline metals with single crystal plasticity based on representative characteristic length », *International Journal of Plasticity*, vol. 26, p. 570-585, 2010.

(Zaefferer 2003) Zaefferer S., « A study of active deformation systems in titanium alloys: and correlation with deformation texture « . *Material Science and Engineering*, vol. A344, p. 20-30, 2003.

(Zeghadi 2007a) 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*, vol. 87, p. 1401-1424, 2007.

(Zeghadi 2007b) A. Zeghadi et S. Forest, « Ensemble averaging stress-strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained surface microstructure- Part 2: crystal plasticity. Philos Mag », *Philosophical Magazine*, vol. 87, p. 1425-1446, 2007.

(Zhang 2010) M. Zhang, F. Bridier, P. Villechaise, J. Mendez, et D. L. McDowell, « Simulation of slip band evolution in duplex Ti–6Al–4V », *Acta Materialia*, vol. 58, p. 1087-1096, 2010.

(Zhang 2011) L. Zhang, R. Dingreville, T. Bartel, et M. T. Lusk, « A stochastic approach to capture crystal plasticity », *International Journal of Plasticity*, vol. 27, p. 1432-1444, 2011.

Etude numérique statistique des champs locaux de contraintes en surface de polycristaux cubiques et hexagonaux en élasticité

Résumé: Les premiers stades d'endommagement par fatigue au sein des matériaux métalliques polycristallins sont pilotés par les champs mécaniques locaux se développant à l'échelle des grains en surface. La formation de bandes de glissement persistantes est souvent à l'origine des fissures de fatigue. Cette localisation de la plasticité cyclique apparaît au sein de grains d'un polycristal dans lequel les champs de contraintes élastiques peuvent être fortement hétérogènes en fonction de la microstructure granulaire et de l'anisotropie élastique cristalline. La majeure partie de ce travail est consacrée à évaluer puis à analyser statistiquement les champs de contraintes au sein des grains de surface de polycristaux. Ce travail s'est concentré sur la réponse élastique des matériaux considérés afin d'étudier l'activation du glissement plastique et sa variabilité, puis, de façon un peu moins directe, ses conséquences vis-à-vis de la formation des fissures de fatigue. La méthodologie retenue est basée sur la simulation numérique en champs complets par éléments-finis de la réponse élastique d'un ensemble d'agrégats polycristallins dont les orientations cristallographiques sont tirées aléatoirement.

Deux matériaux très différents du point de vue de l'élasticité cristalline et des systèmes de glissement ont été choisis comme support de l'étude. Le premier est l'acier inoxydable austénitique 316L à structure cubique à faces centrées et le second l'alliage de titane TA6V à structure hexagonale compacte. Les distributions de la cission résolue au sein d'ensembles de grains de surface, par classe d'orientation, sont analysées en relation avec les configurations cristallographiques locales afin d'identifier celles qui favorisent - ou au contraire inhibent - l'activation du glissement plastique. Les résultats obtenus, dans le cas du TA6V, suggèrent notamment une activation plus précoce et importante du glissement basal devant le glissement prismatique. De plus, la stratégie de simulation a été adaptée pour rendre compte de la présence de zones texturées appelées « macrozones » dont l'influence sur l'activation de plasticité peut être qualitativement prédite. L'activation du glissement dans le TA6V est également étudiée expérimentalement par la réalisation d'un essai in situ sous MEB où la précocité du glissement basal est constatée. Cet essai a également permis de caractériser la cinétique d'activation des différents types de glissements. Ces données, couplées aux statistiques des cissions simulées, permettent une estimation de la cission résolue critique sur les 2 types de glissement.

Mots Clés: simulation par éléments-finis, agrégat polycristallin, anisotropie élastique, hétérogénéité des contraintes, analyse statistique de champs, acier austénitique, titane, voisinage granulaire

Statistical and numerical study of local elastic stress field at surface of cubic and hexagonal polycrystals

Abstract: The first stages of fatigue damage in metallic polycrystalline materials are governed by local mechanical field at the grain scale. Fatigue crack initiation is often related to the emergence of persistent slip band at surface. Localization of cyclic plasticity occurs within grains of polycristals in which elastic stress field can be highly heterogeneous due to the granular microstructure and crystalline anisotropic elasticity. The main goal of this study is to evaluate and analyse statistically the stress fields in surface grains of polycristals. In this work, the elastic regime only is considered in order to study the subsequent activation of plastic slip and its variability. The possible consequences regarding crack formation are also addressed but in a lesser extent. The methodology is based on full-field finite element numerical simulation of the elastic response of a set of polycrystalline aggregates in which grains orientation is chosen randomly.

The two materials chosen for this study exhibit different characteristics regarding crystal elasticity and slip systems. The first one is an austenitic stainless steels 316L (face centered cubic) and the second one a titanium alloy TA6V (hexagonal close packed). The distribution of resolved shear stress within several sets of surface grains, for different classes of crystal orientation, are analysed in relation to local crystallographic configurations in order to identify those which promote - or prevent from - plastic slip activation. For TA6V, the results suggest in particular that basal slip is activated earlier than prismatic slip. In addition, the simulation strategy has been modified to model the presence of some sharp band-like crystallographic textures named “macrozones” whose influence has been qualitatively predicted. Plastic slip activation in TA6V is also studied experimentally. In situ tensile test using SEM has shown the earlier activation of basal slip. Experimental data has been combined with simulated distribution of resolved shear stress in order to estimate the critical resolved shear stress of basal and prismatic slip systems.

Keywords: finite element simulation, polycrystalline aggregate, elastic anisotropy, stress heterogeneity, statistical analysis of field, austenitic steel, titanium, granular neighbourhood