



HAL
open science

Influence des hétérogénéités intragranulaires sur le comportement des matériaux métalliques sous sollicitations mécaniques

Jamal Fajoui

► **To cite this version:**

Jamal Fajoui. Influence des hétérogénéités intragranulaires sur le comportement des matériaux métalliques sous sollicitations mécaniques. Mécanique des structures [physics.class-ph]. Université de Nantes (UNAM), 2008. Français. NNT: . tel-01801561

HAL Id: tel-01801561

<https://theses.hal.science/tel-01801561>

Submitted on 28 May 2018

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.

UNIVERSITE DE NANTES

ECOLE DOCTORALE

**Sciences Pour l'Ingénieur, Géosciences, Architecture
ED 498**

Année : 2008

Thèse de Doctorat de l'Université de Nantes

Spécialité : Génie Mécanique

Présentée et soutenue publiquement par

Jamal FAJOU

Le 03 décembre 2008
à Saint-Nazaire - C.R.T.T.

**Influence des hétérogénéités intragranulaires sur le
comportement des matériaux métalliques sous
sollicitations mécaniques**

Jury :

Présidente :	Mme Hélène DUMONTET	Professeur, Université Paris VI
Rapporteurs :	Mme Salima BOUVIER	Maître de conférences (HDR), Université Paris XIII
	M. Xavier FEAUGAS	Professeur, Université de la Rochelle
Examineurs :	M. Pierre Olivier RENAULT	Maître de conférences (HDR), Université de Poitiers
	M. Ronald GUILLÉN	Professeur, Université de Nantes
	M. David GLOAGUEN	Maître de conférences, Université de Nantes
Invité :	M. Bruno COURANT	Maître de conférences, Université de Nantes

Directeur de thèse : M. Ronald GUILLÉN
Laboratoire : Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique (GeM), UMR CNRS 6183
Equipe : Etat Mécanique et Microstructure (EMM).

ED 498-19

Remerciements

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au sein de l'équipe État Mécanique et Microstructure (EMM) de l'institut de recherche en génie civil et mécanique (GeM). Elle c'est déroulée au Centre de Recherche et de Transfert de Technologie de l'IUT de Saint-Nazaire et à l'Ecole Centrale de Nantes.

Je tiens à remercier Monsieur Ronald GUILLEN pour avoir dirigé ce travail et Messieurs David GLOAGUEN et Bruno COURANT pour l'avoir co-encadré ainsi que de la confiance et de la patience qu'ils ont témoigné à mon égard pendant ces années.

Je remercie Madame la professeur Héléne DUMENTET, pour avoir accepté de présider le jury de ma thèse, les professeurs Salima BOUVIER et Xavier FEAUGAS, pour avoir assumé la lourde tâche de rapporter cette thèse et Pierre Olivier RENAULT pour sa participation au jury.

Je remercie vivement Monsieur Pierrick GUEGAN pour son intervention dans la partie expérimentale réalisée à l'Ecole Centrale de Nantes.

J'adresse également mes remerciements à Madame Marie-José MOYA HERNANDEZ qui a contribué activement à la réalisation de cette thèse, ainsi qu'à Madame Françoise HATE et à Madame Sabrina SAMSON qui ont veillé à son bon déroulement.

Je remercie tous les membres de l'équipe EMM : M^{me} Annick PERRONET et MM. Frédérique JACQUEMIN, Pascal CASARI, Sylvain FREOUR, Samuel BRANCHU, Vincent LEGRAND, Emmanuel GIRARD.

Enfin, je tiens à exprimer mes sentiments les plus chaleureux envers tous mes amis avec lesquels j'ai traversé cette expérience pour leur soutien et pour les bons moments que nous avons passé ensemble : A Abdellah LAAZIZI, Ziad YOUSSEF, Georges YOUSSEF, Emmanuelle LACOSTE, Hussam ELCHEIKH, Er-rafa AZZAZ, Modou FALL, Elhadji FALL, Mamadou FALL, Rachid CHEDRA, Ismail ALANSARI, Khalil NAJEH, Ali LAPSITA, Daoud PINTO, Najwa SIDQI, Ilham TAHIR, Marjorie ROYER, Amélie DANET, un grand merci.

Cette thèse est dédiée à mes parents, mes sœurs et mes frères pour leur soutien morale et financier pour arriver à ce niveau d'étude. Une pensée spéciale à mes grand-mères pour tout ce qu'elles ont fait pour moi.

SOMMAIRE

Introduction générale.....	1
Chapitre I : Synthèse bibliographique	7
I.1. Introduction	9
I.2. Hétérogénéités intragranulaires.....	9
I.2.1. Présentation	9
I.2.2. Glissement multiple hétérogène	10
I.2.3. Microstructures de dislocations.....	10
I.2.3.1. Cellules de dislocations	11
I.2.3.2. Evolutions de la structure de dislocations	12
I.2.3.3. Vitesse de dislocations	14
I.2.3.4. Les facteurs influençant la structure de dislocations.....	15
I.2.4. Microbandes de cisaillement.....	22
I.2.4.1. Microbandes de première génération	22
I.2.4.2. Microbandes de deuxième génération.....	23
I.2.5. Bandes de cisaillement	23
I.3. Modélisation.....	23
I.3.1. Modélisation des précipités intragranulaires	24
I.3.2. Modèles polycristallins	24
I.3.3. Méthode des éléments finis	26
I.3.4. Méthode d'homogénéisation	27
I.3.4.1. Introduction	27
I.3.4.2. Principe d'homogénéisation.....	28
I.3.5. Modèle de Sachs.....	30
I.3.6. Modèle de Taylor	30
I.3.7. Modèle autocohérent	30
I.3.7.1. Hypothèses	31
I.3.7.2. Plasticité du grain	32
I.3.7.3. Loi d'écrouissage	34
I.3.7.4. Modélisation du comportement macroscopique	36
I.3.7.5. Résultats numériques.....	37
I.4. Conclusion.....	47
Chapitre II : Modélisation élastoplastique du comportement des matériaux cubiques.....	51
II.1. Introduction	53
II.2. Modèle Kröner-Autocohérent	55
II.2.1. Transition d'échelle micro-mésoscopique	55
II.2.1.1. Expression des déformations des cellules et des parois	55
II.2.1.2. Evolution de la densité de dislocations	56
II.2.1.3. Ecrouissage.....	57
II.2.1.4. Loi de comportement non local pour le monocristal.....	59
II.2.1.5. Taux de glissement.....	61
II.2.1.6. Contraintes d'ordre deux	62
II.2.1.7. Fraction volumique	63
II.2.1.8. Réorientation des grains	64
II.2.2. Transition d'échelle méso-macro	65
II.2.3. Décharge élastique	65

II.2.4.	Résultats numériques.....	66
II.2.4.1.	Comportement mécanique en chargement monotone	66
II.2.4.2.	Influence de la scission critique	68
II.2.4.3.	Influence de la densité de dislocation initiale des parois	69
II.2.4.4.	Influence de la fraction volumique.....	69
II.2.4.5.	Influence du paramètre d'écroutissage ζ	71
II.2.4.6.	Influence du paramètre de la fonction K_{α}^g	71
II.2.4.7.	Influence du libre parcours moyen.....	72
II.2.4.8.	Influence de la distance d'annihilation y_c	73
II.2.4.9.	Influence de la morphologie de la microstructure de dislocations.....	74
II.2.4.10.	Influence des contraintes intragranulaires.....	76
II.2.5.	Conclusion.....	77
II.3.	Modèle Autocohérent-Autocohérent.....	79
II.3.1.	Transition d'échelle micro-méso.....	79
II.3.1.1.	Taux de glissement :.....	79
II.3.1.2.	Contraintes d'ordre deux :.....	82
II.3.2.	Procédure de calcul	83
II.3.3.	Résultats numériques.....	85
II.3.2.1.	Simulation d'un monocristal	85
II.3.2.2.	Simulation d'un polycristal	89
II.3.4.	Conclusion.....	91
II.4.	Modèle Mori-Tanaka-Autocohérent	92
II.4.1.	Présentation du modèle	92
II.4.2.	Résultats numériques.....	93
II.4.2.1.	Simulation du comportement mécanique de monocristaux de fer	94
II.4.2.2.	Simulation du comportement mécanique d'un polycristal.....	96
II.4.3.	Conclusion.....	98
II.5.	Modèle Peeters-Autocohérent	99
II.5.1.	Introduction	99
II.5.2.	Présentation du modèle	99
II.5.2.1.	Echelle microscopique : structure de dislocations	99
II.5.2.2.	Echelle mésoscopique	103
II.5.3.	Résultats numériques.....	105
II.5.3.1.	Chargement monotone	105
II.5.3.2.	Chargement complexe.....	108
II.5.4.	Conclusion.....	108
II.6.	Conclusion du chapitre.....	110
Chapitre III : Présentation de l'étude expérimentale.....		113
III.1.	Introduction	115
III.2.	Présentation des matériaux.....	115
III.2.1.	Acier inoxydable	115
III.2.2.	Aluminium 6060	116
III.3.	Essais mécaniques	117
III.4.	Contraintes Résiduelles	118
III.4.1.	Définition	119
III.4.2.	Méthodes d'analyses des contraintes résiduelles	120
III.4.3.	Diffractions des rayons X.....	121
III.4.3.1.	Principe.....	121
III.4.3.2.	Pic de diffraction	122

III.4.3.3.	Détermination des contraintes résiduelles par DRX	123
III.4.3.4.	Conditions expérimentales	129
III.4.3.5.	Texture cristallographique.....	134
III.5.	Conclusion.....	135
Chapitre IV :	Résultats expérimentaux	137
IV.1.	Introduction	139
IV.2.	Essais mécaniques	139
IV.2.1.	Acier inoxydable	139
IV.2.1.1.	Chargement monotone	139
IV.2.1.2.	Chargement complexe.....	143
IV.2.2.	Alliage d'aluminium	146
IV.2.2.1.	Chargement monotone	146
IV.2.2.2.	Chargement complexe.....	149
IV.3.	Analyses des contraintes résiduelles	151
IV.3.1.	Acier inoxydable austénitique (AISI 316L).....	152
IV.3.2.	Alliage d'aluminium	157
IV.3.2.1.	Contraintes longitudinales.....	158
IV.3.2.2.	Contraintes transverses.....	162
IV.4.	Conclusion.....	164
Chapitre V :	Confrontation expériences - modélisation.....	167
V.1.	Introduction	169
V.2.	Comportement mécanique.....	169
V.2.1.	Aluminium	169
V.2.2.	Acier inoxydable	173
V.3.	Déformations résiduelles.....	176
V.3.1.	Aluminium	178
V.3.2.	Acier inoxydable	180
V.4.	Conclusion.....	183
Conclusions générales et perspectives		185
Références		191
Annexes.....		203

Introduction générale

L'avancement technologique et la compétitivité des entreprises exigent la conception, la mise en œuvre et le suivi de systèmes de plus en plus complexes, ayant une réelle valeur ajoutée. Dans ce cadre, la maîtrise des propriétés des matériaux est indispensable pour élaborer une structure donnée. Les diverses méthodes de fabrication et de mise en forme peuvent être génératrices de transformations structurales influençant fortement le comportement des matériaux métalliques. Ainsi par exemple, les métaux peuvent servir à fabriquer des structures tridimensionnelles à parois fines par pliage ou emboutissage, ce qui implique de grandes déformations plastiques. Ces processus, très contraignants pour le matériau, sont limités par l'apparition et le développement d'instabilités plastiques et/ou d'endommagement.

Les matériaux polycristallins métalliques sont souvent caractérisés par une forte hétérogénéité : orientations des cristallites, taille et morphologie des grains, dislocations, précipités, etc. Cette hétérogénéité est présente à toutes les échelles de la structure macroscopique (polycristal), mésoscopique (grain) et microscopique (structure de dislocations). Elle induit un comportement anisotrope (élastique, plastique et/ou thermique) quand le matériau est soumis à des sollicitations mécaniques. Par conséquent, elle influe grandement sur les propriétés des matériaux et ne peut pas être négligée. L'étude du comportement des métaux nécessite une bonne compréhension et une maîtrise des phénomènes physiques mis en place lors de la déformation.

Des modèles polycristallins introduisent des entités aux échelles très diverses : atome, molécule, grain, inclusion, ..., outil et pièce. Pour une majorité de modèles, une analyse considérant un comportement moyenné sur l'ensemble du système isolé, à l'échelle du système, est suffisante. Cependant, certaines pièces, sur lesquelles des problèmes apparaissent à cause des nouveaux procédés d'élaboration, nécessitent une analyse plus fine avec une prise en compte du couplage fort entre le comportement des entités à l'échelle inférieure (échelle microscopique) et la réponse globale du système (échelle macroscopique).

Ainsi, des approches de transition d'échelles ont été développées sur les matériaux hexagonaux (zirconium, titane, matériaux composites) dans l'équipe Etat Mécanique et Microstructure (EMM) de l'Institut de recherche en Génie Civil et Mécanique (GeM). Par exemple, elles permettent de prédire l'état mésomécanique résiduel d'un matériau hexagonal à partir de ses mécanismes de déformation cristallographiques et de sa texture, puis d'en déduire les conséquences sur son comportement mécanique macroscopique ou pseudo-macroscopique. Cette modélisation est couplée aux résultats de diffraction des rayons X. Cette approche permet l'analyse du matériau sur des volumes représentatifs des différentes échelles (grains, polycristal). Cette technique fournit des informations sur les relations entre les propriétés mécaniques et la microstructure du matériau. Les approches utilisées permettent de décrire relativement fidèlement le comportement des matériaux soumis à des grandes déformations, en mettant en évidence les mécanismes responsables de la déformation. Cependant, les modèles développés nécessitent d'être confortés afin de mieux prendre en considération les mécanismes locaux à l'intérieur du grain, qui contribuent de manière non négligeable aux résultats macroscopiques.

Les transitions d'échelles peuvent être effectuées avec différents modèles. Ainsi, ont vu le jour, successivement, les modèles de Sachs [*Sachs 28*] et de Taylor [*Taylor 38*]. Afin d'obtenir une évaluation réaliste du comportement interne du polycristal, déformé de manière élastoplastique, s'est ouverte une voie nouvelle avec le modèle autocohérent. Ce schéma s'est révélé être un outil puissant et performant d'un point de vue numérique [*Lipinski et Berveiller*

89]. Ainsi, il a été utilisé avec succès pour décrire des trajets de chargement simple et prédire la texture cristallographique et les contraintes résiduelles.

Par contre, un schéma autocohérent basé sur une description uniforme des grains est incapable de prédire l'évolution de la microstructure intragranulaire d'un matériau métallique, que ce soit en trajet monotone ou complexe.

Notre travail de thèse a pour but de développer des modèles micromécaniques capables de prédire et d'analyser le comportement mécanique à différentes échelles en chargement monotone ou séquentiel.

Par conséquent, nous nous intéressons plus particulièrement à la modélisation du comportement des matériaux cubiques en trajets monotones et complexes à partir des considérations sur le processus d'hétérogénéité intragranulaire. Ce mécanisme, détaillé dans le chapitre I, se traduit par une organisation progressive des dislocations sous forme de cellules de dislocations. Ces structures de dislocations présentent des actions à grandes distances et sont fortement reliées à la sollicitation mécanique appliquée (forme et orientation).

La prise en compte du phénomène d'hétérogénéisation intragranulaire, due à la mise en place d'une structure de dislocations hétérogène, rendra nos modèles plus réalistes et plus pertinents dans le cas de chargements complexes. Cette hétérogénéité est introduite à travers des approches de double transition d'échelles dont l'échelle de départ est la structure de dislocations et l'échelle d'arrivée est le polycristal en passant par l'échelle mésoscopique (grain). Cette double transition d'échelles a été assurée par plusieurs types de schémas : autocohérent, Kröner ou Mori-Tanaka.

Un autre type de modèle, basé sur le couplage entre la méthode autocohérente et la modélisation monocristalline, a été étendu. En effet, nous avons développé une modélisation à l'échelle intragranulaire s'inspirant de travaux antérieurs [Peeters *et al.* 02]. La description de la microstructure intragranulaire et de son évolution reposent sur l'observation expérimentale de structures de dislocations particulières présentes dans des grains de structure cubique. Ensuite, ce modèle intragranulaire est introduit dans le modèle autocohérent afin de réaliser une transition d'échelle.

Pour valider et alimenter les modèles développés, des matériaux de type industriels cubiques à faces centrées (aluminium et acier) seront analysés. Un chargement complexe de type Bauschinger (traction + compression) sera utilisé pour mettre en évidence l'influence des déformations intragranulaires et leurs rôles sur le comportement mécanique macroscopique des matériaux étudiés. Des analyses par diffraction des RX (contraintes) seront également menées sur les échantillons métalliques pour comparer la modélisation mise en place avec ces résultats expérimentaux et mieux appréhender ainsi le développement des déformations résiduelles sous une sollicitation complexe.

Ce mémoire s'articule en cinq chapitres. Le premier chapitre est une synthèse bibliographique sur les différents mécanismes de déformation élastoplastique dans les matériaux cubiques. Une présentation des différentes hétérogénéités intragranulaires et les modèles associés y sont également présentés.

Le chapitre II décrit les approches d'homogénéisation retenues pour rendre compte du comportement mécanique des matériaux cubiques. Le lecteur y trouvera les premières validations de nos modèles : des simulations numériques validées par des résultats expérimentaux issus de la bibliographie.

Dans le chapitre III, sont décrites les procédures expérimentales utilisées. Nous présentons les appareils utilisés lors des essais expérimentaux et nous expliquons la technique de diffraction des rayons X et les choix réalisés pour les analyses effectuées.

Le chapitre IV présente les principaux résultats expérimentaux obtenus durant ce travail ainsi qu'une première analyse de ceux-ci.

Le chapitre V expose et commente une première confrontation entre expériences et simulations. Les lois de comportement mécaniques y sont validées par nos modèles. Les déformations résiduelles calculées à partir de nos modèles sont comparées aux résultats obtenus par diffraction des rayons X.

Une conclusion sur les résultats obtenus nous permettra également de dresser des perspectives, afin de continuer l'analyse du comportement des matériaux, en prenant en considération d'autres phénomènes physiques que ceux du présent travail.

Chapitre I : Synthèse bibliographique

I.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous présenterons, de manière non exhaustive, les différents mécanismes responsables de la plasticité cristalline. Ceci permettra d'introduire la notion d'hétérogénéités intragranulaires qui traduit l'ensemble des défauts présents au sein des grains (dislocations, lacunes, cavités, précipités, etc.). Plus spécifiquement, nous nous intéresserons, dans le cadre de ce travail, à la mise en place et à l'évolution des microstructures de dislocations au cours de la plasticité. Le but est de mieux appréhender le rôle et l'influence de ce type d'hétérogénéités sur le comportement global du matériau métallique. Pour cela, l'origine et l'évolution des structures de dislocations seront étudiées dans le deuxième paragraphe du chapitre. La modélisation du comportement mécanique des matériaux métalliques tenant compte de ces microstructures fera l'objet du troisième paragraphe. L'accent sera mis sur les méthodes de transition d'échelles comme le modèle autocohérent. Ceci permettra de définir un cadre de modélisation adapté à cette problématique. A la lumière de ces différentes présentations, nous fixerons les principaux objectifs de ce travail.

I.2. Hétérogénéités intragranulaires

I.2.1. Présentation

L'ensemble des défauts des grains peut être exprimé par le terme « hétérogénéité intragranulaire ». Cette présence d'hétérogénéités est un problème majeur auquel les chercheurs doivent faire face en termes d'innovation et de développement industriel. Cette problématique est de plus en plus pertinente avec le progrès technologique et le développement de structures de plus en plus complexes. Les avancées dans la mécanique des matériaux (expérience et modélisation) permettent de mieux comprendre (et prévenir) les risques introduits par les hétérogénéités intragranulaires sur les installations industrielles notamment en terme d'endommagement. Cependant, beaucoup de mécanismes ainsi que leurs influences, sont encore mal connus surtout lorsque de nouveaux matériaux ou de nouveaux procédés de mise en forme sont utilisés.

On distingue généralement deux catégories d'hétérogénéités intragranulaires :

- Les défauts ponctuels :
 - les lacunes qui se traduisent par l'absence d'un atome. L'agglomération des lacunes conduit à la formation d'amas de défauts de type boucle de dislocations ou de cavités en présence de gaz.
 - Les défauts interstitiels dus à la présence d'un atome dans un interstice du réseau cristallin.
 - Les inclusions : particules en général non métalliques. Elles sont parfois indésirables mais dans certains cas, elles sont introduites pour améliorer les propriétés mécaniques du matériau. Elles sont issues de l'élaboration.
- Les défauts linéaires (dislocations) : le glissement multiple hétérogène (subdivision des grains en différentes zones à glissement multiple homogène), la structure de dislocations et les microbandes de cisaillement. Plusieurs études expérimentales et numériques ont tenté de comprendre la mise en place et le développement des microstructures de dislocations de certains matériaux (principalement les matériaux cubiques). Entre autres, plusieurs phénomènes restent ambigus. Par exemple, la plasticité dans les matériaux métalliques de structure hexagonale (zirconium) est encore mal comprise en terme de formation des structures de dislocations ou d'interaction entre les systèmes de déformation (glissement et/ou maclage) notamment [Proust *et al.* 07]. Les microstructures de dislocations seront présentées avec plus de détails dans la partie suivante pour une bonne compréhension. Une

schématisation simplifiée des hétérogénéités intragranulaires est donnée par la *figure I.1* ci dessous.

➤ Les précipités : imperfections cristallines volumiques correspondant à l'apparition, sous forme de particules, plus ou moins dispersées, d'une nouvelle phase quand la limite de solubilité de la matrice est dépassée. Ces précipités correspondent souvent à des composés définis.

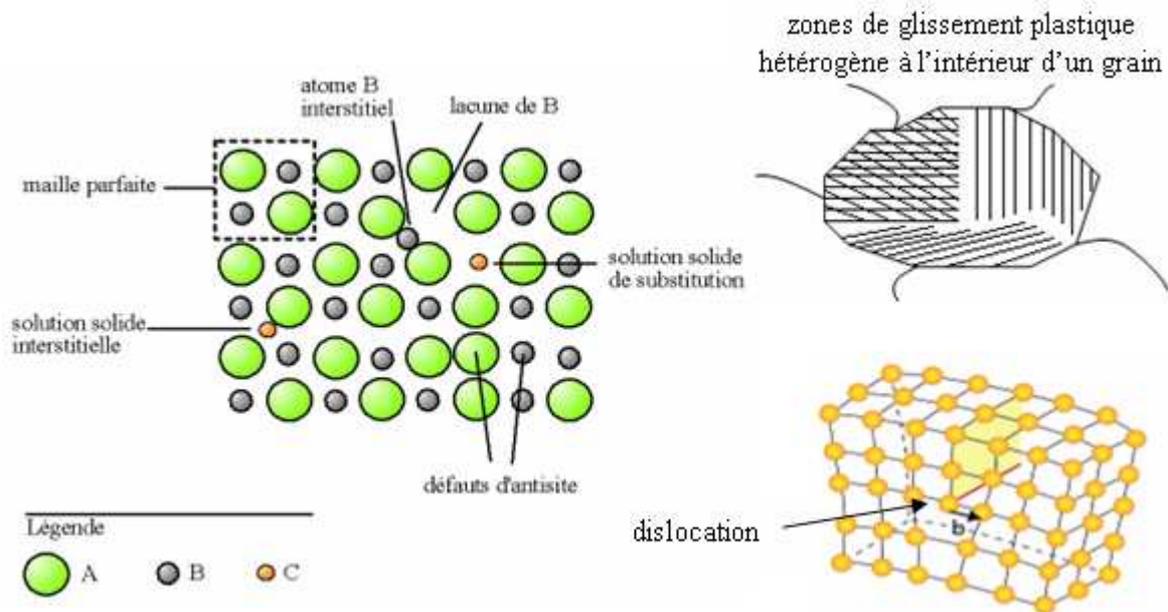


Figure I.1 : différents mécanismes responsables des hétérogénéités intragranulaires

I.2.2. Glissement multiple hétérogène

Durant la déformation plastique, les systèmes de glissement qui s'activent, ne sont pas souvent uniformes au sein du grain. Cependant cette hétérogénéité dans le mode de déformation plastique n'est pas aléatoire. Elle constitue des zones uniformes à l'intérieur des grains [Rey 88]. L'origine de cette hétérogénéité est liée à la désorientation relative du réseau cristallin au passage des joints de grains. Les différents systèmes de glissement requis pour accommoder le tenseur de déformation imposé s'activent simultanément mais dans différentes parties du grain. Le grain se divise en plusieurs volumes, chacun d'entre eux privilégiant la déformation sur un nombre restreint de systèmes (généralement en glissement simple). Contrairement aux joints de grains fixes par rapport à la matière, les frontières entre les zones de glissements sont mobiles et évoluent au cours de la déformation plastique.

Les contraintes internes relatives au glissement plastique sont difficiles à évaluer mais on peut les estimer du même ordre de grandeur que les contraintes d'ordre deux (suivant le classement de la diffraction des rayons X [Macherauch et al. 73]). Les conséquences sur le comportement semblent négligeables par rapport à d'autres hétérogénéités intragranulaires telles que les cellules de dislocations.

I.2.3. Microstructures de dislocations

Le but de ce paragraphe est de présenter des informations sur les dislocations afin de construire une base d'informations pour la mise en place d'une modélisation adéquate. Après

avoir défini les cellules de dislocations liées à la déformation plastique, nous nous intéresserons à certains facteurs influençant celles-ci tels que la température, la taille des grains et le type de chargement.

1.2.3.1. Cellules de dislocations

Lorsqu'un matériau est soumis à un chargement au-delà de la limite élastique, une activité plastique se met rapidement en place : elle est caractérisée par la création et le mouvement de dislocations à l'intérieur des grains suivant les plans de glissement. Ces dislocations sont définies par plusieurs paramètres : la densité de dislocations, un vecteur de Burgers qui traduit l'amplitude de déformation des réseaux cristallins et par le libre parcours des dislocations. On distingue trois types de dislocations : les dislocations coins, les dislocations vis et les dislocations mixtes.

L'augmentation de la déformation plastique est accompagnée par l'organisation des dislocations en cellules composées de zones à faible densité de dislocations limitées par des zones à forte densité. Les sources de dislocations (Franck et Read, joints de grains) produisent un grand nombre de dislocations mobiles, appelées dislocations primaires, sur le système de glissement principal [Morris et Martin 84]. Les défauts ponctuels (n'ayant pas été éliminés par le recuit) et d'autres dislocations gênent la propagation des dislocations [Libovicky et Sestak 83]. Ceci forme alors de petits amas de dislocations qui contribuent à l'écroutissage du matériau [Pollnow et al. 75]. Lorsque la déformation plastique augmente, les dislocations primaires et secondaires (provenant de systèmes de glissement moins actifs) peuvent se déplacer librement seulement dans des zones non perturbées par la présence d'obstacles. Ce processus conduit alors à la construction d'une microstructure cellulaire de dislocations constituée de zones à forte densité de dislocations (parois des cellules) et à faible densité de dislocations (intérieur des cellules) (figure I.2). Cette structure est caractérisée par une fraction volumique de la paroi f_w qui peut être alors déterminée à partir de son épaisseur e et de sa longueur L (figure I.2) [Sahal et al. 06] :

$$f_w = \frac{e}{e + L} \quad (I.1)$$

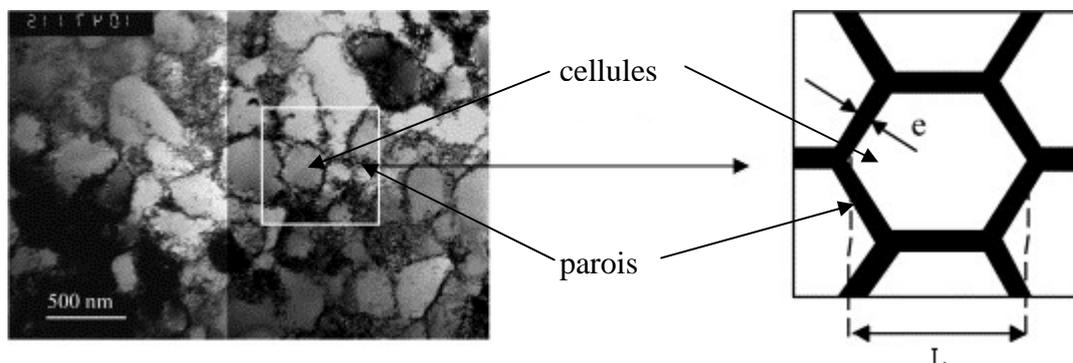


Figure I.2 : microstructure de dislocations d'un acier inoxydable 316L ; cellules et parois de dislocations [Sahal et al. 06]

Par MET, Gaudin [Gaudin 02] a déterminé l'évolution moyenne de la fraction volumique de zone « dure » dans un acier austénitique après traction uniaxiale en fonction de la déformation

plastique. f_w est nulle au stade d'érouissage I, augmente au stade II. A la transition entre les stades d'érouissage II et III (10 % de déformation), elle atteint une valeur maximale de l'ordre de 40 %, ordre de grandeur similaire à celui obtenu pour le cuivre.

I.2.3.2. Evolutions de la structure de dislocations

Contrairement aux joints de grains qui sont des frontières fixes par rapport à la matière, la microstructure de dislocations évolue au cours de la déformation plastique. Schmitt et al. [Schmitt 86, Fernandes et Schmitt 83] ont observé que l'épaisseur des parois diminue avec la déformation pour n'importe quel chemin de déformation. Ces zones à forte densité de dislocations deviennent également plus proches au cours de la plasticité. Leurs études ont été effectuées sur un acier doux ayant subi un trajet monotone pour trois types de chargements (traction uniaxiale, expansion équi-biaxiale et déformation plane). Morris et Martin [Morris et Martin 84] confirment cette observation pour un aluminium.

Schmitt [Schmitt 86] constate également une évolution des dimensions des cellules de dislocations : leur taille diminue avec la déformation plastique. La diminution de l'épaisseur des parois et de la taille des cellules est expliquée par la création, au cours de la déformation, de nouveaux murs de dislocations au sein même de la microstructure déjà existante. Il y a aussi un phénomène de réarrangement des dislocations dans les parois qui augmente avec la plasticité : l'annihilation augmente car plus probable avec la plasticité. C'est le phénomène de restauration dynamique. La stabilisation de la microstructure est obtenue généralement aux alentours de 40 % de déformation plastique. Elle est liée à l'équilibre entre les mécanismes de création et d'annihilation des dislocations.

L'évolution des densités de dislocations est très différente entre l'intérieur des cellules et les parois. La conséquence de cette hétérogénéisation intragranulaire est l'existence d'un fort gradient de contraintes internes avec un niveau plus élevé dans les parois (3 fois la limite d'écoulement macroscopique) que dans les cellules. Cette microstructure peut être alors assimilée en première approximation à un **milieu biphasé** constitué d'une phase molle (cellule) et d'une phase dure (parois) [Mughrabi 83]. Ungar et al. [Ungar et al. 84] et Ji et al. [Ji et al. 95], par exemple, ont utilisé la technique d'analyse des profils de raies, obtenus par la diffraction des rayons X, pour analyser les hétérogénéités liées à une forte densité de dislocations. Les cellules et les parois ont des comportements mécaniques différents et ces deux sous-structures peuvent être analysées par diffraction des rayons X comme deux phases différentes du matériau. Le principe de cette méthode est basé sur l'asymétrie d'un profil de raie de diffraction. Les deux sous-structures conduisent à deux profils de raies d'autant plus séparés que les contraintes y sont différentes. Différents développements théoriques permettent alors d'accéder aux contraintes (déduites des déplacements des profils) et aux densités de dislocations (déduites des largeurs de ces profils). Par exemple, Ungar et al. [Ungar et Groma 89] ont déformé plastiquement en traction des monocristaux de cuivre d'orientation [001]. L'analyse de raie a été effectuée sur la famille de plans (002). Pour une contrainte appliquée de 75 MPa, les contraintes résiduelles déterminées après décharge étaient de +40 et -17 MPa, respectivement, pour les parois et les cellules.

Feugas [Feugas 99] a suivi l'évolution de la densité de dislocations, dans la phase dure (parois) et la phase molle (cellules), durant la déformation plastique (ϵ_p) d'un matériau austénitique 316L lors d'un chargement monotone (traction). La densité initiale était d'environ 10^{10} m^{-2} dans des grains de taille moyenne de 53 μm . Elle évoluait plus rapidement dans les parois ($20 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ à $\epsilon_p=10 \%$) que dans les cellules ($2,5 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ à $\epsilon_p=10 \%$). Dans une autre étude, Feugas et Haddou [Feugas et Haddou 03] ont pu étudier l'influence de la

taille des grains sur le comportement en traction (écrouissage) d'un acier 316L et d'un nickel pur (99 % de nickel). La taille des grains variait de 13 à 107 μm pour l'acier 316L et de 18 à 168 μm pour le nickel. Les auteurs ont remarqué que la densité de dislocations pouvait varier suivant la taille des grains et l'état de la microstructure initiale du matériau. Sur la *figure I.3* sont rassemblés les résultats issus de la bibliographie concernant l'influence de la taille des grains sur l'évolution de la densité de dislocations pour l'aluminium, le cuivre, le nickel et l'acier austénitique 316L. Quel que soit le matériau considéré, l'augmentation de la densité de dislocations moyenne dans un grain est d'autant plus importante que la taille de grain est petite.

Durant la déformation plastique, l'accroissement de la densité de dislocations est dû au stockage dans les parois de dislocations ayant traversé les cellules. Ce phénomène de durcissement d'une région (parois) provoqué par la déformation plastique dans une autre région (cellules) correspond à un *écrouissage non local* [Muller 94, Muller et al. 94]. L'annihilation se produit essentiellement dans les murs de dislocations et correspond à l'annihilation des dipôles stockés, du fait de la structure dipolaire des parois (*figure I.4*), poussée par les contraintes internes dans les murs. Elle se produit en fonction d'une distance critique d'annihilation entre deux dislocations composant le dipôle.

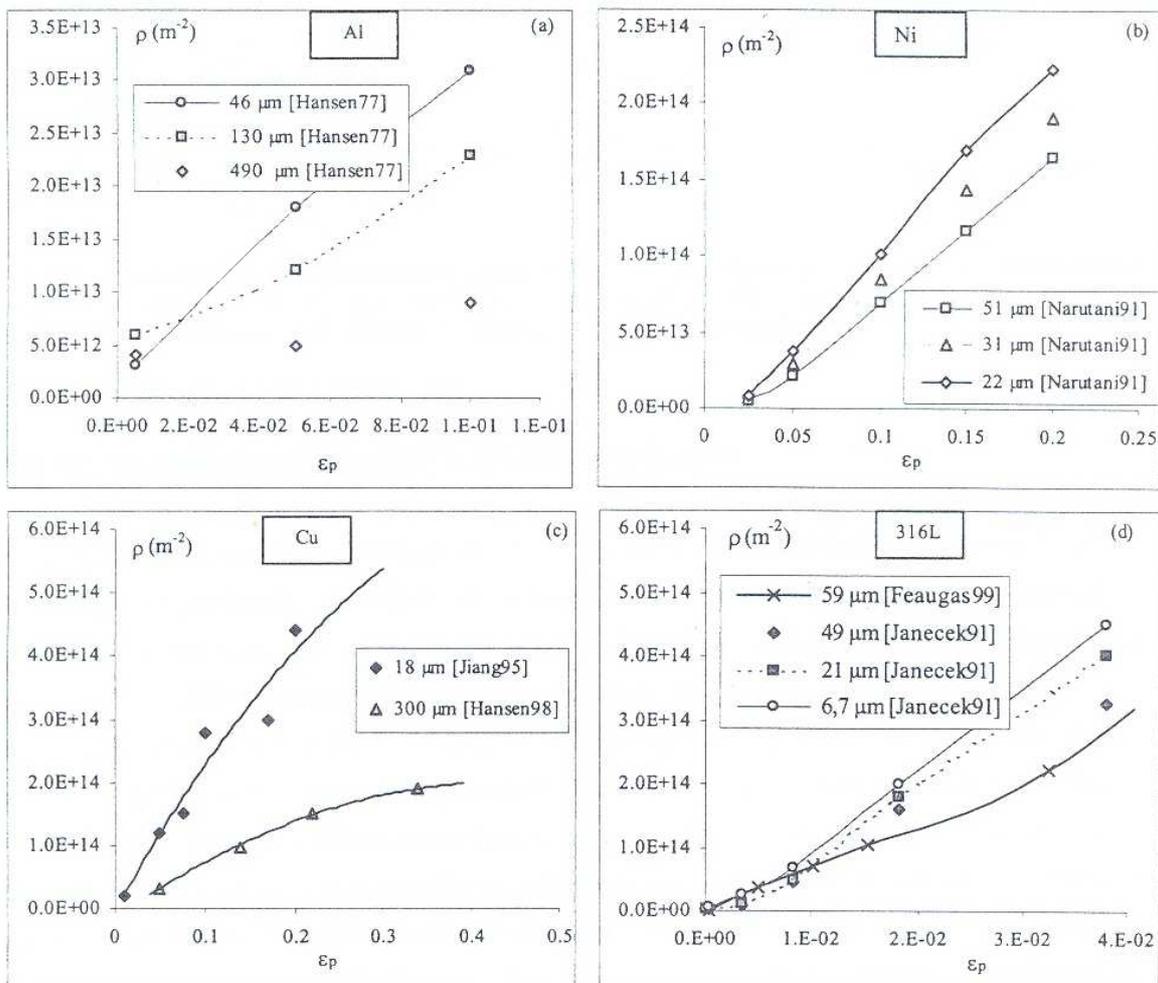


Figure I.3 : évolution de la densité de dislocations ρ en fonction de la déformation plastique pour différentes tailles de grain dans le cas de l'aluminium (a), du nickel (b), du cuivre (c) et de l'acier 316L (d) [Haddou 03]

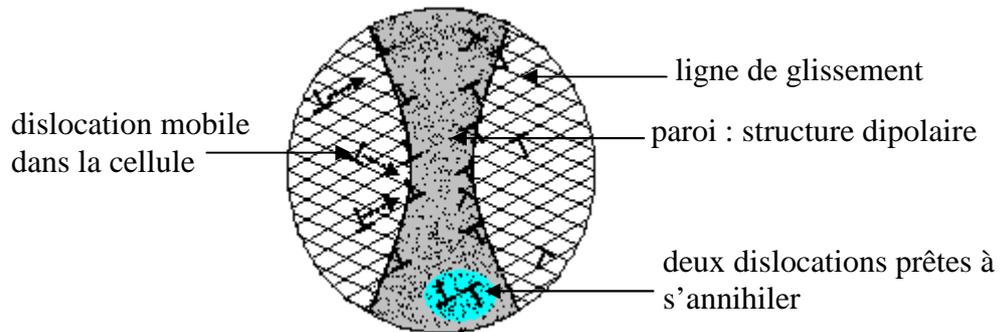


Figure I.4 : structures dipolaires des dislocations au niveau des parois

1.2.3.3. Vitesse de dislocations

Tabata et al. [Tabata et al. 82, Tabata et al. 78] ont étudié la structure cellulaire présente dans un monocristal d'aluminium en situation de glissements multiples. Ils ont observé des lignes de glissement dans la structure cellulaire apparaissant indépendamment dans chaque cellule (figure I.5). Ils indiquent aussi que la dislocation mobile naît à partir d'une source présente dans la paroi, prend une courbure, augmente sa longueur en restant attachée à ses deux extrémités aux points d'ancrage de la paroi. Lorsque la contrainte appliquée augmente, les points d'attache se rompent et la dislocation avance. Ensuite, la dislocation est stoppée à la paroi opposée et aucune ligne de glissement ne se propage à une cellule voisine au travers de la paroi (figure I.6). Leur conclusion est que le libre parcours moyen des dislocations correspond exactement à la taille des cellules. De plus, une forme allongée des cellules confère au libre parcours un caractère anisotrope (figure I.7). D'après Morris et Martin [Morris et Martin 84], les dislocations peuvent traverser plusieurs parois avant de s'arrêter si le libre parcours moyen est plus grand que la taille des cellules. Ils ont postulé cette remarque dans le cas du fluage pour un aluminium. Ils confirment néanmoins le mouvement plus rapide des dislocations à l'intérieur des cellules.

La figure I.8 présente l'évolution de la vitesse relative des dislocations dans la cellule (par rapport à la valeur maximale) d'un monocristal d'aluminium [Tabata et al. 82]. D'après cette figure, on constate que la vitesse des dislocations augmente rapidement au début de sa progression, puis décroît lentement avant d'atteindre la paroi opposée où elle s'arrête, stoppée par la forêt de dislocations.

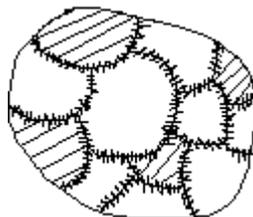


Figure I.5 : lignes de glissement dans la structure cellulaire

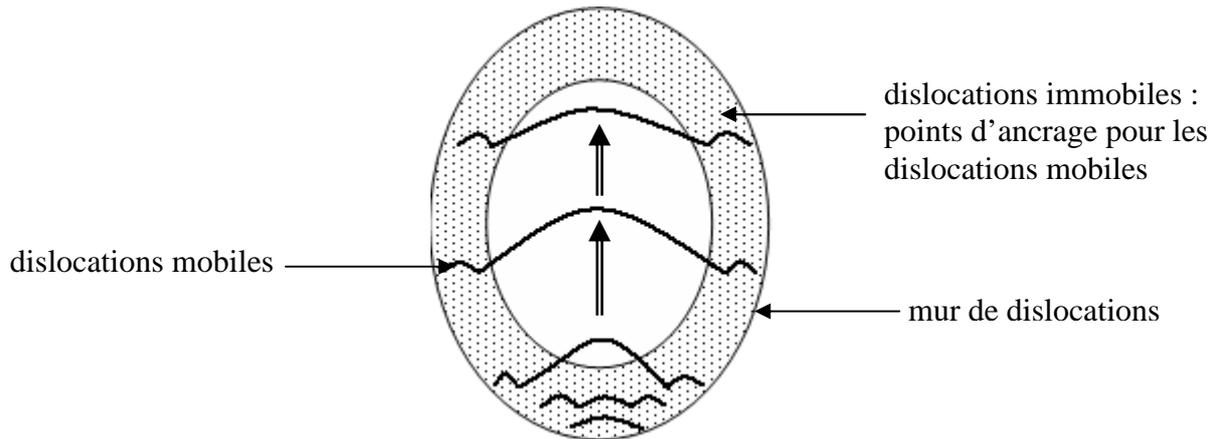


Figure I.6 : déplacement des dislocations dans les cellules

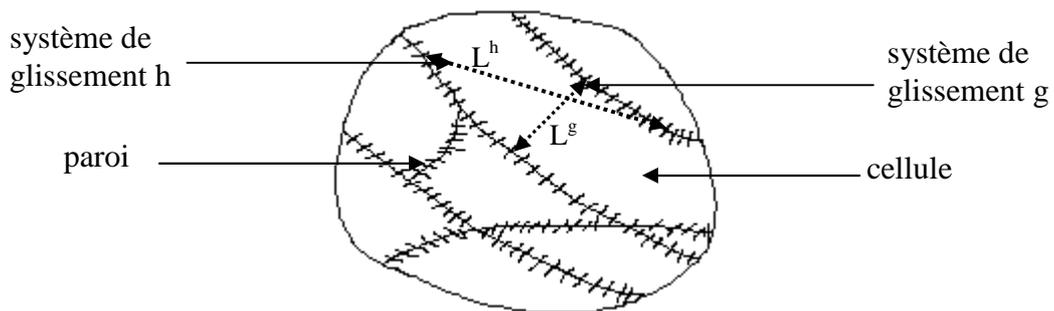


Figure I.7 : anisotropie du libre parcours moyen des dislocations L^g : paroi plane

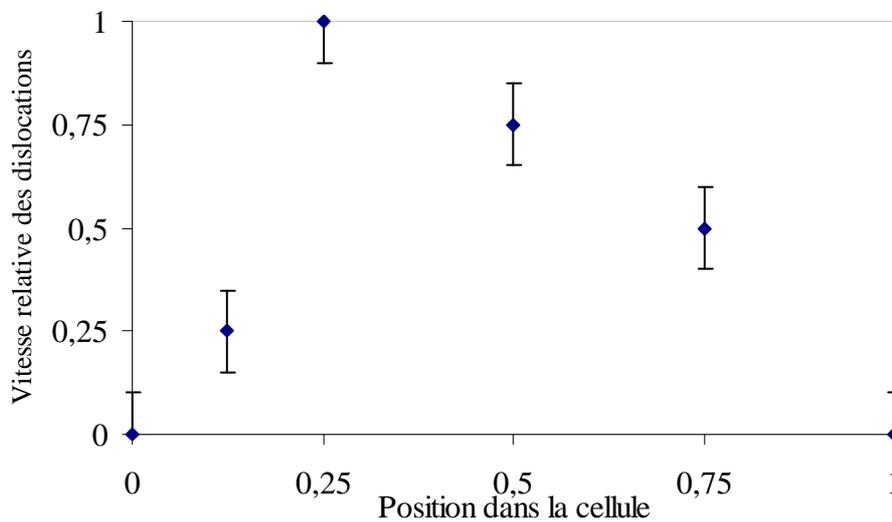


Figure I.8 : évolution de la vitesse d'une dislocation dans la cellule [Tabata et al. 82]

1.2.3.4. Les facteurs influençant la structure de dislocations

Dans ce paragraphe, nous présentons les mécanismes qui influencent directement le comportement des dislocations : la température de déformation, le type de chargement, etc.

• **Température**

La structure cellulaire de dislocations réagit différemment selon la température :

➤ Lorsque la température, à laquelle est produite la déformation d'un matériau cubique dépasse une température critique (T_c), on observe la formation de la structure cellulaire (cellule et paroi) décrite plus haut pour les matériaux cubiques. De nombreuses études confirment cette observation [Lan et al. 92, Luft 91, Keh et Weissmann 63]. Luft [Luft 91] a défini la température critique ou de transition (T_c) pour les métaux de structure cristalline cubique centrée, comme le molybdène, entre $0,1 T_f$ et $0,2 T_f$ (T_f décrit la température de fusion en kelvin du métal).

➤ Si la déformation plastique s'effectue à une température inférieure à T_c , la répartition des dislocations au cours de la déformation reste uniforme et on n'observe pas de réelle formation d'une structure cellulaire. Ainsi, la pente d'écrouissage dépend aussi de la température de déformation [Kim et al. 03, Mülders et al. 02]. Elle est plus faible lorsque la température augmente.

Gaudin [Gaudin 02] a étudié l'influence de la température sur l'évolution de la densité de dislocations dans les parois (ρ_w) et dans les cellules (ρ_s) en fonction de la déformation plastique (figure I.9). Cette étude a été menée sur des éprouvettes d'un acier inoxydable austénitique 316L. Les expériences ont été effectuées à la température ambiante (300 K) et à une autre température de 623 K. A la température ambiante, on observe une augmentation globale des densités de dislocations au fur et à mesure de la déformation du matériau. A 623 K, l'évolution de la densité de dislocations dans les parois est linéaire en fonction de la déformation avec une pente plus faible que celle obtenue à 300 K. La densité de dislocations dans les cellules est caractérisée par une évolution linéaire jusqu'à 5 % de déformation plastique. On constate aussi une saturation plus rapide de la densité de dislocations dans les cellules et une évolution moins rapide de la densité de dislocations dans les murs, probablement due à la restauration dynamique.

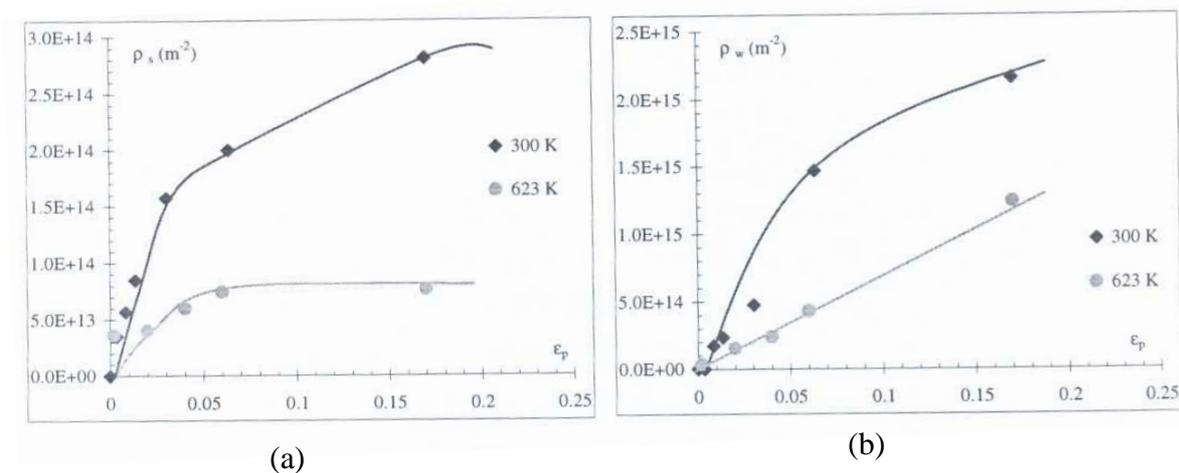


Figure I.9 : influence de la température sur l'évolution de la densité de dislocations dans les cellules (a) et dans les parois (b) en fonction de la déformation plastique [Gaudin 02]

- **Taille des grains**

La taille des grains a des conséquences sur les microstructures de dislocations. Plusieurs études montrent la formation d'une simple structure cellulaire de dislocations dans le cas de petits grains ($\ll 50 \mu\text{m}$), et la subdivision du grain en sous-domaines pour les grains de taille plus importante ($> 50 \mu\text{m}$). Ces sous-domaines sont constitués de cellules de dislocations et ils sont séparés les uns des autres par des murs de dislocations [Hansen 92]. Ces derniers accommodent les désorientations (de quelques degrés) causées par des activités plastiques différentes. Ainsi, la déformation est plus hétérogène pour des grains de grande taille, comme l'aluminium [Winther et Jensen 97, Hugues 93, Hansen 90, Jensen et Hansen 90] ou le nickel [Hugues et Nix 89], que pour des matériaux à petits grains. Ceci a pu être mis en évidence expérimentalement, par exemple, sur des aciers [Thuillier 92, Rauch et Schmitt 89, Fernandes et Schmitt 83, Oustau et Baudelet 77]. La figure I.10 présente l'effet de la taille sur les microstructures de dislocations.

Plusieurs auteurs ont étudié les effets de la taille des grains sur l'écroutissage des matériaux métalliques de structure cubique (316L et nickel) sous sollicitations monotones (traction) et cycliques, uniaxiales et multiaxiales non-proportionnelles [Haddou et al. 04, Feaugas et Haddou 03, Feaugas 99, Hansen et Huang 98, Clavel et Feaugas 94, Doquet 93, Doong et al. 90, Doquet et Pineau 90, Clavel et al. 89]. Des observations de l'évolution de la microstructure ont été réalisées. La taille des grains joue un rôle important au niveau des contraintes internes, du glissement dévié et de l'écroutissage des matériaux étudiés (densité de dislocations) [Vincent 02]. L'écroutissage est faible lorsque la taille des grains est grande. Ainsi, la densité de dislocations moyenne dans un grain est d'autant plus importante que la taille de grain est petite. Les contraintes internes sont importantes lorsque la taille des grains est petite. Enfin, une petite taille de grains favorise le glissement dévié.

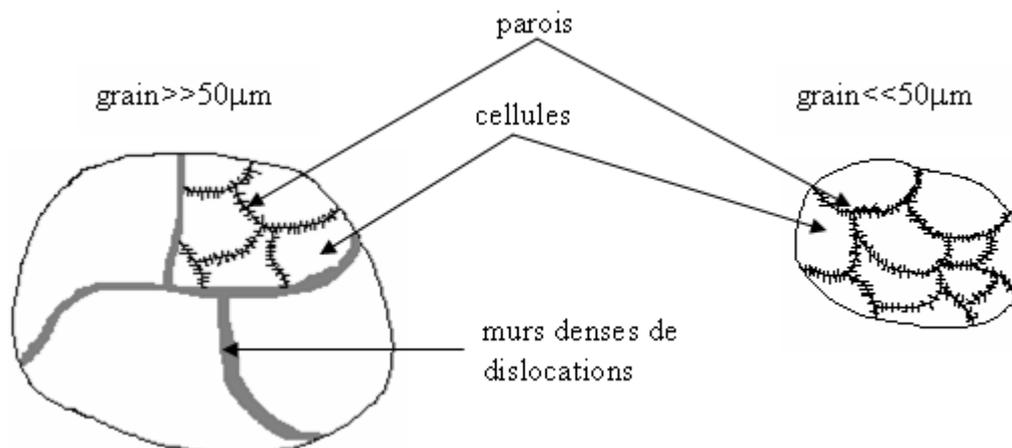


Figure I.10 : effet de la taille du grain

- **Effet du chargement**

L'objectif de cette partie est de voir l'influence du type de chargement sur la morphologie (la forme et l'orientation) des structures cellulaires de dislocations. Des études menées sur des monocristaux et des polycristaux ont permis de lier la forme et l'orientation de ces structures au type de chargement appliqué : traction [Winther 08, Feaugas et Haddou 03, Gaudin 02,

Feaugas 99, Liu et al. 93, Rauch et Schmitt 89, Schmitt 86, Fernandes et Schmitt 83, Libovicky et Sestak 83, Pollnow et al. 75, Takeushi 70, Keh et Weissmann 63], cisaillement [Gardey et al. 05, Vincze et al. 05, Nesterova et al. 01, Rauch et Schmitt 89], laminage [Winther 08, Hughes et al. 03, Klemm et al. 02, Liu et al. 98, Inagaki 89, Swann 63], expansion équibiaxiale [Schmitt 86, Fernandes et Schmitt 83, Oustau et Baudelet 77] et déformation plane [Schmitt 86, Fernandes et Schmitt 83].

○ Traction, cisaillement et laminage

Dans le cas d'un chargement monotone en traction, en cisaillement ou par laminage sur des monocristaux ou des polycristaux, on observe des cellules allongées et rectangulaires. Les parois de dislocations sont fines et bien définies, quelques enchevêtrements de dislocations peuvent exister entre les parois. Les cellules observées présentent un angle d'orientation (*figure I.11*) de 35° pour un essai de laminage, de 0° ou 90° pour un essai de cisaillement et un angle pouvant aller de 33° à 66° pour un essai de traction.

La *figure I.12* montre, à titre d'exemple, les différentes microstructures rencontrées lors des essais de laminage, de traction et de fatigue oligo-cyclique d'un alliage à base de nickel Inconel 600 [Ji 03]. Ces observations ont été réalisées au MET sur des échantillons soumis à différents taux de déformation plastique. A l'état initial, le nombre de dislocations est très limité (*figure I.12.a*) ; avec l'augmentation du taux de déformation, la densité de dislocations augmente. Quelque soit le mode de déformation, la distribution des dislocations est assez similaire pour un taux de déformation donné. A un taux faible de déformation, la distribution des dislocations est aléatoire et homogène. A un taux peu élevé, les dislocations ne se distribuent pas de façon uniforme ; les arrangements cellulaires commencent à se construire au fur et à mesure de l'augmentation de la déformation.

Les systèmes de glissement actifs dans le grain ont une influence directe sur l'orientation de la microstructure de dislocations. Les parois des cellules s'orientent quasiment parallèlement (à quelques degrés près) suivant le plan du glissement le plus actif dans le grain. L'écart constaté est dû à l'influence des systèmes de glissement secondaires au sein des cellules de dislocations.

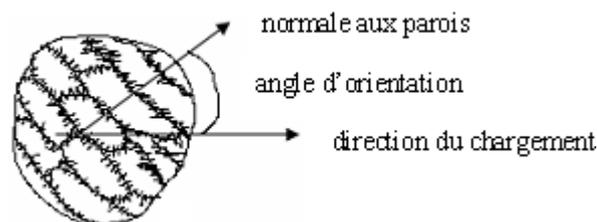


Figure I.11 : orientation des cellules de dislocations par rapport à la direction du chargement

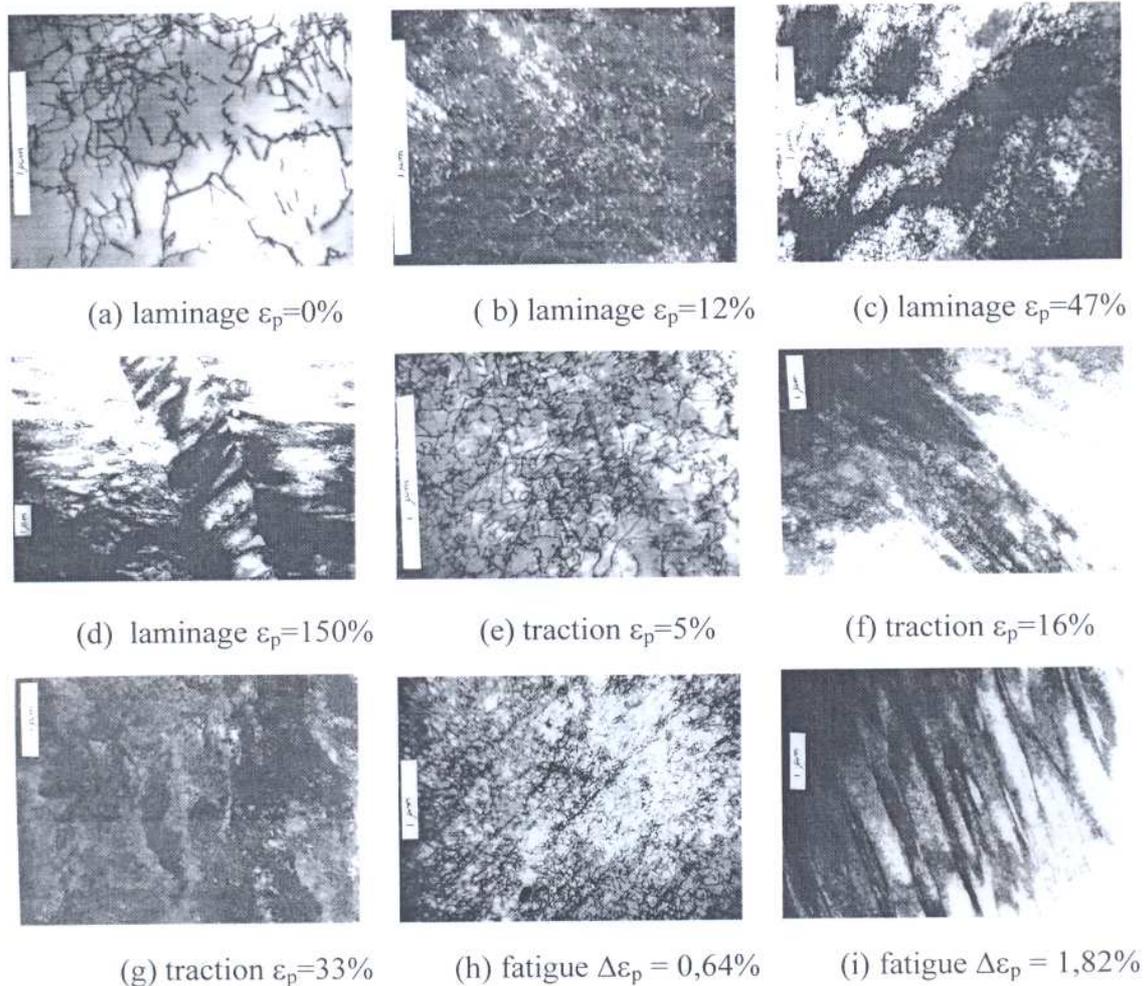


Figure I.12 : liste des différentes microstructures développées en traction, en laminage et en fatigue oligo-cyclique [Ji 03] à différents taux de déformation plastique

○ Expansion équibiaxiale

Un trajet de type expansion équibiaxiale est caractérisé par l'existence de plusieurs systèmes de glissement primaires avec des activités plastiques comparables. Il provoque la mise en place de cellules de forme équiaxiale à cause de l'absence d'une direction de glissement principale. Ainsi, on n'observe aucune orientation privilégiée de la structure cellulaire par rapport à la normale au plan de l'expansion.

○ Déformation plane

Dans le cas d'une déformation plane, les cellules de dislocations n'ont pas de forme particulière. D'après Schmitt et Fernandez [Schmitt 86, Fernandes et Schmitt 83], l'orientation de la structure cellulaire peut varier entre 0° et 15° par rapport à la direction de la déformation plane.

Les tendances décrites précédemment doivent être néanmoins nuancées : l'évolution de la microstructure dépend de l'orientation des grains par rapport à la direction de chargement. La morphologie de cette microstructure peut être très différente suivant l'orientation initiale du

grain liée à l'activation de mécanismes de déformation différents suivant les grains [Winther 08, Winther et al. 00]

- **Chargements complexes**

Les développements technologiques actuels nécessitent de plus en plus de formes complexes. Ainsi, l'élaboration de chaque pièce industrielle passe par différents chargements, appelés trajet complexe, chemin séquentiel ou changement de trajet, avant d'acquies la forme désirée. La maîtrise des mécanismes des trajets complexes s'avère très importante. Après avoir vu, dans ce qui précède, l'influence des trajets monotones sur la structure cellulaire, dans cette partie, nous présentons les différents types de trajets complexes et leurs influences sur la structure de dislocations. En rhéologie, les résultats expérimentaux des essais complexes sont classés en trois catégories indépendamment des modes de déformation (*figure I.13*) [Thuillier 92] :

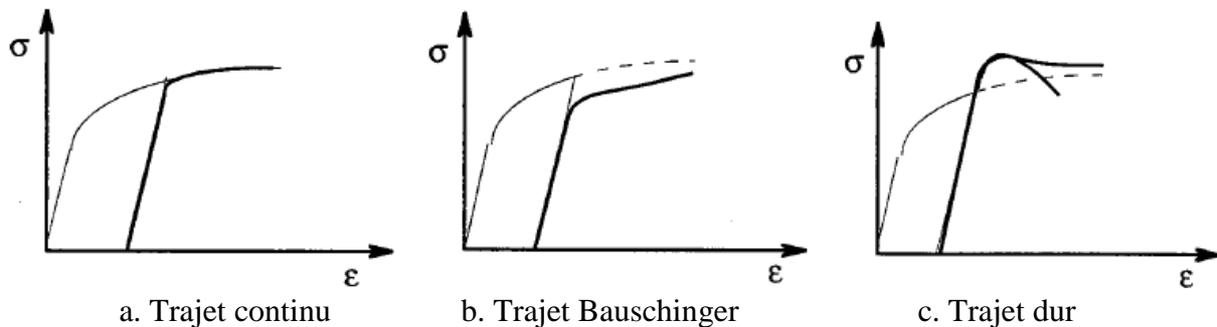


Figure I.13 : les trois types de comportement mécanique lors de trajets complexes

- Trajet continu

Ce trajet désigne la réponse d'une décharge puis recharge dans les mêmes conditions lors d'un chargement monotone. On retrouve quasiment les mêmes systèmes actifs lors du deuxième chargement. Ceci explique notamment l'aspect continu de la réponse macroscopique. Ainsi, la limite d'élasticité pour le second trajet est à peu près égale à celle obtenue à la fin du premier chargement. Le taux d'érouissage est positif tout au long du régime transitoire (*figure I.13.a*). Par conséquent on ne trouve pas une grande différence entre les microstructures du premier et du deuxième chargement.

Il est important de signaler que lorsque la déformation du deuxième chargement devient grande par rapport à celle de la pré-déformation, le matériau semble avoir perdu la mémoire de l'ancienne microstructure. Cette remarque est valable aussi pour les deux types de trajets présentés ci-dessous.

- Trajet Bauschinger

Ce trajet tient son nom de l'effet Bauschinger observé sur des métaux ayant subi une pré-déformation. Cet effet peut être défini comme l'existence de différences entre la courbe contrainte-déformation obtenue à partir d'un premier chargement dans un sens et celle

obtenue à partir d'un deuxième chargement dans le sens opposé (*figure I.13.b*). Il est caractérisé par [Rauch 97, Hasegawa et al. 86] :

- Une limite d'élasticité, pour le second chargement, réduite par rapport à celle du premier chargement.
- La présence d'un plateau plus ou moins important suivant la pré-déformation pendant le régime transitoire correspondant à un taux d'écroutissage proche de zéro. Ce stade peut être précédé ou non par un adoucissement du matériau sur un intervalle de 3 à 10 % de déformation [Beyerlein et Tomé 07].
- Souvent, un adoucissement permanent par rapport à la courbe d'écroutissage du premier chargement est constaté au dernier stade lors du second chargement.
- Les systèmes de glissement, activés lors du premier chargement, sont réactivés dans le sens contraire dans le deuxième chargement.

L'influence du trajet Bauschinger sur la structure cellulaire est marquée par la dissolution de la microstructure induite par le premier chargement. Après quelques pourcents de déformation suivant le deuxième trajet, les dislocations accumulées dans les murs par le premier chargement sont sollicitées en sens inverse. Elles se libèrent des murs et elles constituent, par interactions, un nouveau mur de dislocations entre deux autres déjà formés lors du premier trajet. Ensuite, elles suivent le même mode que pour un trajet monotone (*figure I.14*). La phase de dissolution de la microstructure explique la phase de transition observée lors du second chargement. La reprise d'écroutissage correspond à la reconstitution de murs de dislocations qui auront une polarité opposée à celle du pré-chargeement.

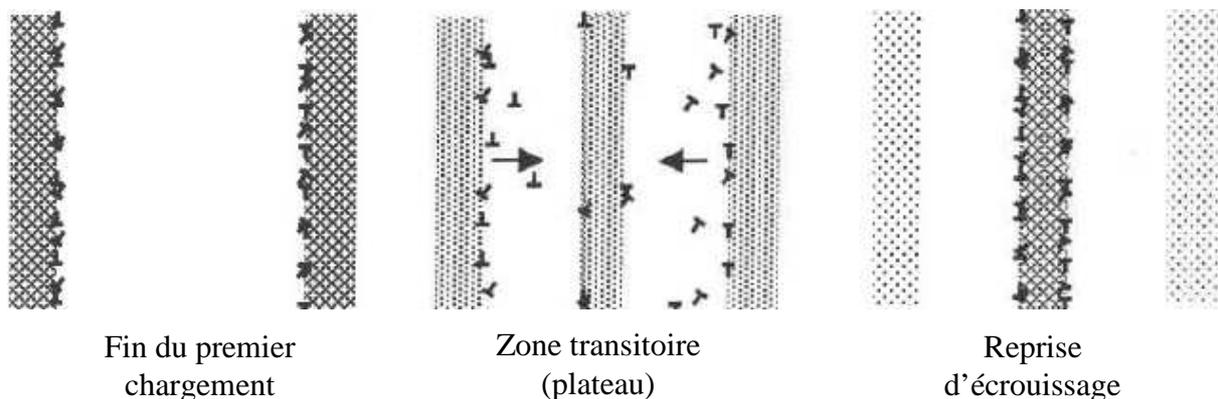


Figure I.14 : dissolution et reconstruction de la microstructure au cours d'un essai Bauschinger [Langlois 00]

○ Trajet dur

Les chargements complexes qui n'entrent pas dans le cadre des deux cas cités plus hauts s'appellent trajets durs (*figure I.13.c*). Ce type de chargement est caractérisé par :

- une limite d'élasticité plus élevée pour le deuxième chargement que celle obtenue à la fin du premier chargement ;
- un taux d'écroutissage négatif (adoucissement fort) pendant le régime transitoire ;
- la possibilité d'une éventuelle localisation de la déformation plastique.

L'évolution de la microstructure de dislocations lors des trajets durs est difficile à définir. La microstructure de dislocations ne peut s'adapter au nouveau chargement et la déformation se localise dans les grains sous la forme de microbandes de cisaillement qui peuvent conduire à

la ruine du matériau. La capacité du matériau à adapter sa configuration de dislocations dépend fortement de l'amplitude de la pré-déformation.

I.2.4. Microbandes de cisaillement

Au début de la déformation plastique, on observe la constitution d'une structure de dislocations sous forme de cellules et de parois. Si la déformation plastique devient grande ou change de sens (chargement complexe), une autre structure intragranulaire, appelée microbandes de cisaillement, se met en place. Cette structure est due à une localisation de la déformation plastique sous forme de microbandes (*figure I.15*). Hansen [*Hansen 90*] distingue les microbandes de première et de seconde génération.

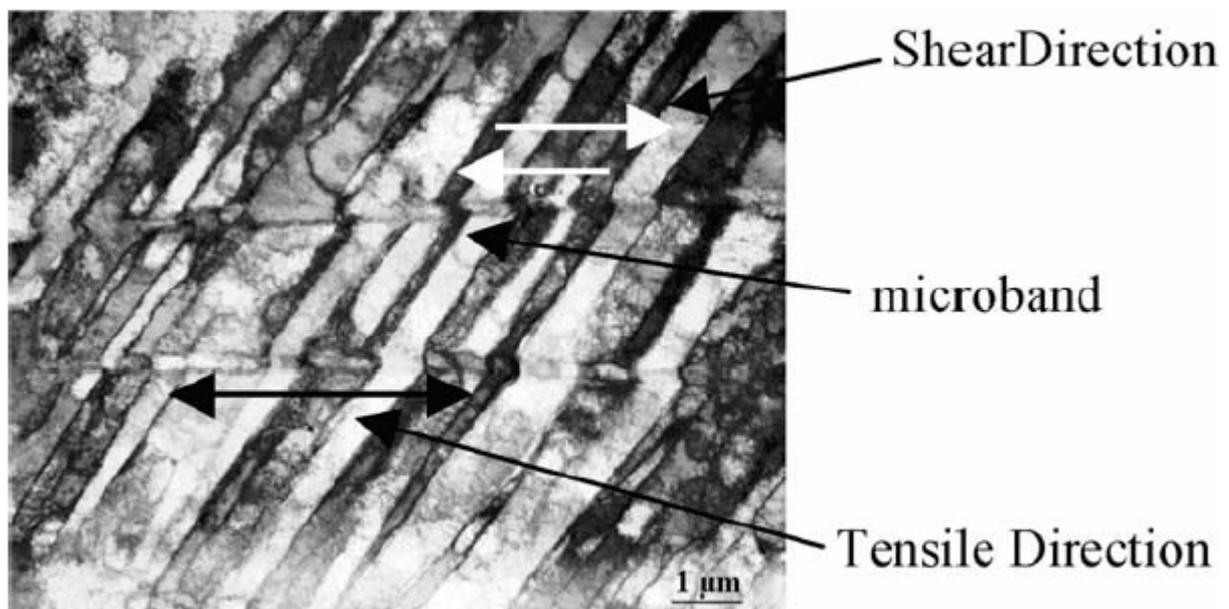


Figure I.15 : mise en évidence des microbandes à la fin d'un essai de cisaillement à 10 % après une pré-déformation en traction de 10 % [Bouvier et al. 03]

I.2.4.1. Microbandes de première génération

En étudiant un monocristal de Fe-Si, Hu [*Hu 62*] a pu définir une bande de déformation d'épaisseur 0,2 µm séparant deux régions de faible densité de dislocations d'un même grain ayant des orientations cristallographiques légèrement différentes (3 à 4°) l'une de l'autre. Ces microbandes sont favorisées dans les matériaux à gros grains [*Hansen 92, Thuillier 92*]. Elles naissent à partir des parois denses de dislocations ou des doubles parois [*Hansen 90*].

Dymeck et Blicharski [*Dymeck et Blicharski 84*] nomment « bandes de transition » des bandes entre deux domaines d'un même grain faiblement désorientés. Elles forment une sorte de joint de grain accommodant la déformation des différents domaines. D'autres auteurs [*Hugues 93, Hansen 92, Hansen 90, Jensen et Hansen 90, Kuhlmann 89, Bay et al. 89, Hansen et Wilsdorf 86*] appellent les bandes décrites par Hu [*Hu 62*], microbande de première génération. Ces bandes jouent le rôle de séparateur entre des régions appelées blocs de cellules, déformées par un petit nombre de systèmes de glissement. Elles ne sont pas toujours parallèles à un plan de glissement.

1.2.4.2. Microbandes de deuxième génération

Plusieurs auteurs [*Hugues 93, Hansen 92, Hansen 90, Jensen et Hansen 90,*] ont défini et étudié les microbandes de seconde génération. Elles doivent leur nom au fait qu'elles se superposent aux structures de dislocations déjà existantes. Ces microbandes se présentent comme une perturbation d'une autre structure de dislocations issue, par exemple, d'une pré-déformation dans le cas d'un second chargement.

Les microbandes de seconde génération ont une forme parallélépipédique (étroite et allongée) d'épaisseur variant entre 0,2 et 0,4 μm . Elles sont espacées de quelques micromètres et sont isolées les unes des autres par une structure de dislocations (cellules) [*Thuillier 92*]. Elles sont parallèles entre elles et aux plans de glissement.

Avec l'augmentation de la déformation plastique, une deuxième famille de microbandes peut apparaître dans un grain entraînant le cisaillement des microbandes anciennement activées. Ce cisaillement montre bien le phénomène de localisation de la déformation dans la microbande. Cette activité intense peut entraîner de graves répercussions sur l'échantillon car, si dans un premier temps les microbandes de seconde génération s'arrêtent aux joints de grains, elles y créent des concentrations de contraintes qui peuvent conduire au cisaillement du joint [*Malin et Hatherly 79*] et à la formation de bandes de cisaillement.

1.2.5. Bandes de cisaillement

Les bandes de cisaillement ne sont pas des hétérogénéités intragranulaires mais la conséquence de celles-ci. Elles sont les prémices de la ruine du matériau d'où la nécessité de maîtriser leurs mécanismes. Plusieurs auteurs se sont intéressés à ces bandes. Ils les définissent quasiment de la même façon mais ils diffèrent sur l'explication de leurs origines : une bande de cisaillement se définit [*Hatherly et Malin 84, Malin et Hatherly 79*] par une forme planaire résultant plus de la géométrie de l'échantillon et du procédé de déformation que de la déformation cristallographique. Ces bandes d'une épaisseur de quelques microns [*Hatherly et Malin 84*] traversent les joints de grain sans déviation.

L'origine de la constitution des bandes de cisaillement reste encore mal connue. La plupart des chercheurs supposent qu'une microstructure de dislocations (parois parallèles, ligne de glissement, microbande, cellules allongées) est la principale source de bande de cisaillement. Par contre, Déve et al. [*Deve et al. 88*] montrent par l'étude d'un monocristal de Fe-Ti-Mn que la bande de cisaillement est un assemblage de parois de cellules de dislocations parallèles au plan de glissement, mais indépendant des microbandes. Inagaki [*Inagaki 89*] propose une formation des bandes de cisaillement à partir des joints de grains. Korbel et Martin [*Korbel et Martin 86*] affirment que la microstructure s'étale à travers tout le grain, se propage dans le grain voisin et cela jusqu'à la formation d'une bande de cisaillement.

1.3. Modélisation

Après avoir présenté les différentes microstructures de dislocations caractéristiques des métaux et leur évolution au cours de la déformation plastique, on s'intéressera dans ce paragraphe aux différents modèles micromécaniques décrivant ces microstructures. Ceci permettra alors de définir l'approche choisie dans le cadre de ce travail pour décrire la plasticité cristalline.

L'intégration de la microstructure et des mécanismes de déformation des matériaux métalliques dans des approches micromécaniques permet de les rendre plus prédictifs en

termes de comportement global et de texture cristallographique par exemple. Des modèles prenant en compte la microstructure de dislocations ont été développés. Il existe plusieurs types d'approches comme les techniques d'homogénéisation et les modèles basés sur les éléments finis par exemple.

I.3.1. Modélisation des précipités intragranulaires

Les précipités intracrystallins, noyés dans la matrice cristalline, ont fait l'objet de travaux de Qiu et Weng [Qiu et Weng 91] dans le cas de l'élasticité. Ils ont simulé l'influence des précipités allongés sur le comportement d'un agrégat polycristallin (zinc et cobalt) en utilisant le schéma autocohérent. La déformation élastoplastique d'un polycristal caractérisé par des inclusions intragranulaires, a été abordée par plusieurs chercheurs [Bonfoh et Lipinski 07, Bonfoh et al. 03, Schmitt et al. 97]. Ils ont montré l'influence de ces défauts sur le comportement du matériau en utilisant une approche d'homogénéisation basée sur une double transition d'échelles où le niveau de départ est l'échelle microscopique (inclusion+matrice) en montant à l'échelle mésoscopique (grain) pour arriver aux caractéristiques mécaniques à l'échelle macroscopique (agrégat polycristallin). Ils ont pris en compte les interactions entre les dislocations et les précipités intragranulaires à travers une nouvelle description du comportement élastoplastique du grain hétérogène. Différents auteurs comme [Peultier et al. 08, Collard et al. 08, Peultier et al. 06] ont étudié les effets des précipités élastiques sur le comportement des alliages à mémoire de forme (AMF). Ils ont simulé l'influence d'un précipité de Zr sur un monocristal de Cu-Zn-Al en utilisant le modèle de Mori-Tanaka.

I.3.2. Modèles polycristallins

De nombreux travaux théoriques ont été entrepris pour essayer de décrire le comportement de la structure de dislocations [Sauzay 08, Viatkina et al. 07, Gloaguen et François 06, Peeters et al. 01, Roters et al. 00, Estrin et al. 98, Lemoine 95, Muller 94]. Ces modèles peuvent être classés suivant deux grandes catégories :

➤ Les approches liées à la densité de dislocations

Ce type d'approche définit l'érouissage du matériau et la contrainte d'écoulement en fonction de variables internes liées à la densité de dislocations totale [Viatkina et al. 07, Peeters et al. 02, Goerdeler et Gottstein 01, Estrin et al. 98, Hiwatashi et al. 97]. Par exemple, Peeters et al. [Peeters et al. 02] ont développé un modèle basé sur des observations expérimentales de l'évolution de la structure de dislocations (*figure I.16*) pour prédire le comportement mécanique de matériaux cubiques centrés. Cette structure de dislocations a été représentée par trois grandeurs :

- la densité de dislocations statiquement stockées à l'intérieur des cellules, modélisée par un scalaire pour l'ensemble des systèmes et notée ρ ,
- la densité de dislocations immobiles stockées dans les murs de dislocations, définie sur la famille (110) et notée ρ^{wd} ,
- la densité de dislocations dites polarisées définie sur la famille de plans (110) et notée ρ^{vp} .

Le glissement des plans cristallins est supposé avoir lieu uniquement sur les familles $(110)\langle 111 \rangle$ et $(112)\langle 111 \rangle$. Cette modélisation à l'échelle intragranulaire est introduite dans le modèle de Taylor afin d'assurer une transition d'échelle du grain au polycristal. La matrice d'érouissage a été éliminée du modèle. L'érouissage est pris en compte à travers l'évolution de la scission critique qui est exprimée en fonction des densités de dislocations. Les résultats de simulation du modèle sont en bon accord avec ceux de l'expérience lors de trajets complexes. Ce modèle nécessite néanmoins d'identifier plus de 15 paramètres. Viatkina et al. [Viatkina et al. 08, Viatkina et al. 07] ont développé un modèle tenant compte également de l'évolution de la densité de dislocations pour des matériaux de symétrie CFC. La morphologie de la structure est prise en compte en considérant chaque cellule de dislocations sous forme d'un cuboïde de dimensions $D_1 \times D_2 \times D_3$ (figure I.17). L'intérieur du cuboïde représente les cellules et les surfaces représentent les parois. Chaque surface du cube est définie par son vecteur normal \vec{n}_i , sa densité de dislocations ρ_{ω_i} et son épaisseur ω_i .

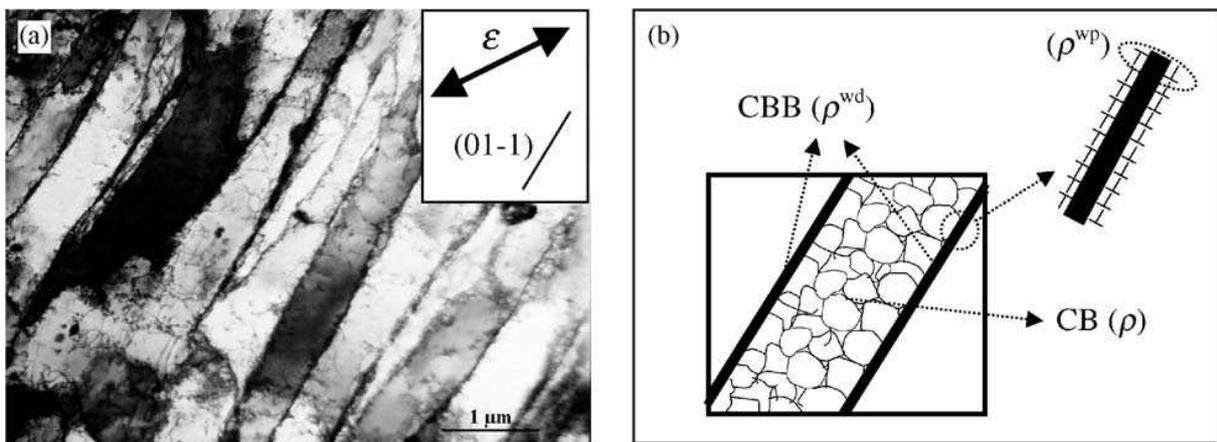


Figure I.16 : représentation de la microstructure intragranulaire [Peeters et al. 02]

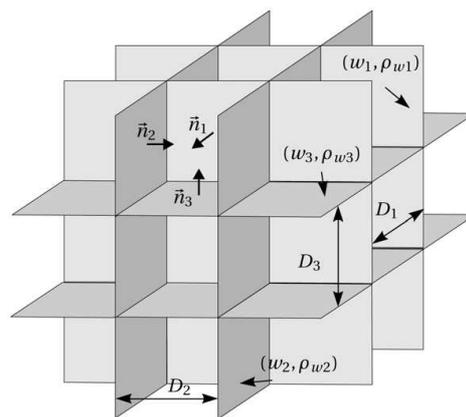


Figure I.17 : représentation de la structure de dislocations pour le modèle de [Viatkina et al. 07]

La comparaison avec différents résultats expérimentaux issus de la bibliographie a permis de valider cette approche et de mettre en lumière l'influence des contraintes internes et du changement de l'évolution de la densité de dislocations sur le deuxième chargement lors de trajets complexes.

➤ Les approches tenant compte de la morphologie des cellules de dislocations

D'autres modèles ont tenu compte de la géométrie (forme et orientation) de la structure cellulaire de dislocations [Sauzay 08, Gloaguen et François 06, Langlois 00, Lemoine 95, Muller 94, Mughrabi 87] en considérant la structure biphasée des cellules de dislocations. Ce type d'approche prend en compte la différence d'activité plastique entre les deux zones et décrit les interactions entre cellules et parois. Par exemple, Sauzay [Sauzay 08] a proposé un modèle basé sur l'approche thermoélastique de Kröner appliquée à un milieu biphasé. Le comportement de la phase molle est supposé élastoplastique et celui de la phase dure est élastique en raison de sa forte densité de dislocations. Cette approche est validée en utilisant des déterminations expérimentales des contraintes (diffraction des rayons X, mesure mécanique sur la courbe d'hystérésis déformation-contrainte, mesure des rayons de courbure des dislocations à l'aide d'un MET) issues d'essais monotones ou cycliques sur des monocristaux cubiques à faces centrées (CFC). Le cas des parois élastoplastiques a été traité aussi dans bibliographie par Muller [Muller 94], Lemoine [Lemoine 95], etc. Muller [Muller 94] a établi une approche avec une double transition d'échelle en tenant compte de l'hétérogénéité intragranulaire (structures de dislocations) basée sur la notion d'écrouissage non-local (l'influence de la phase molle sur la phase dure). Lemoine [Lemoine 95] a développé cette approche en prenant en compte l'évolution de la microstructure comme variable interne.

I.3.3. Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis permet de prédire le comportement mécanique anisotrope des matériaux polycristallins. Les cristallites représentatives du polycristal sont maillées individuellement. A chaque élément fini, les principes de la plasticité monocristalline sont appliqués et la loi constitutive macroscopique du polycristal est obtenue par le calcul mécanique sur les éléments finis. Les conditions d'équilibre et de compatibilité entre les grains sont respectées au sens des éléments finis. Le schéma de principe de cette approche est donné dans la *figure I.18*.

La méthode des éléments finis permet d'étudier :

- L'effet de l'interaction entre les grains sur les courbes de contraintes/déformation et sur l'évolution de texture.
- Les systèmes de glissement actifs et les densités de dislocations locales afin de discuter des impacts de l'accommodation intergranulaire et de l'hétérogénéité intragranulaire. Dans la bibliographie [Erieau et Rey 04, Delaire et al. 00, Beaudoin 95, Becker 91], on trouve plusieurs travaux qui ont utilisé les éléments finis pour étudier la microstructure des matériaux au niveau bidimensionnel (2D) ou tridimensionnel (3D).

Un couplage des modèles polycristallins à la méthode des éléments finis est réalisable. Ce couplage consiste à utiliser les éléments finis sur une structure de forme quelconque et appliquer la théorie de la plasticité comme loi de comportement à chaque point d'intégration du maillage (*figure I.19*). Le polycristal est représenté par un ensemble de monocristaux. A chaque fois que le code des éléments finis a besoin d'information sur le comportement mécanique aux points d'intégration de chaque élément fini, le modèle micromécanique (modèle polycristallin) est appelé. Pour plus de détails le lecteur pourra se référer à [Kocks et al. 98] et aux travaux de Dawson [Dawson et al.03].

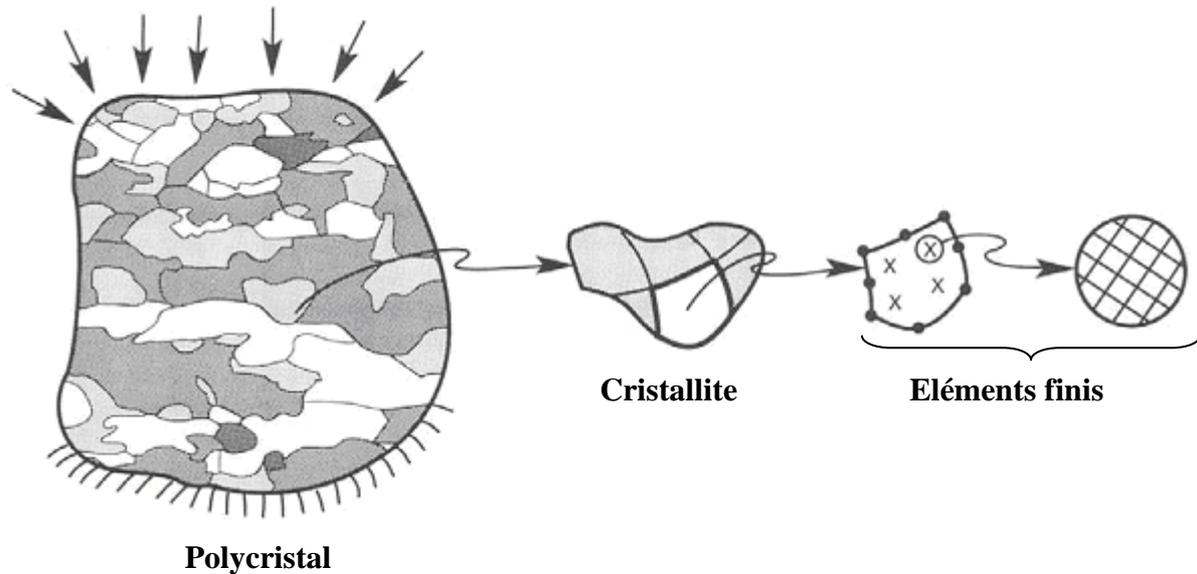


Figure I.18 : la méthode des éléments finis [Kocks et al. 98]

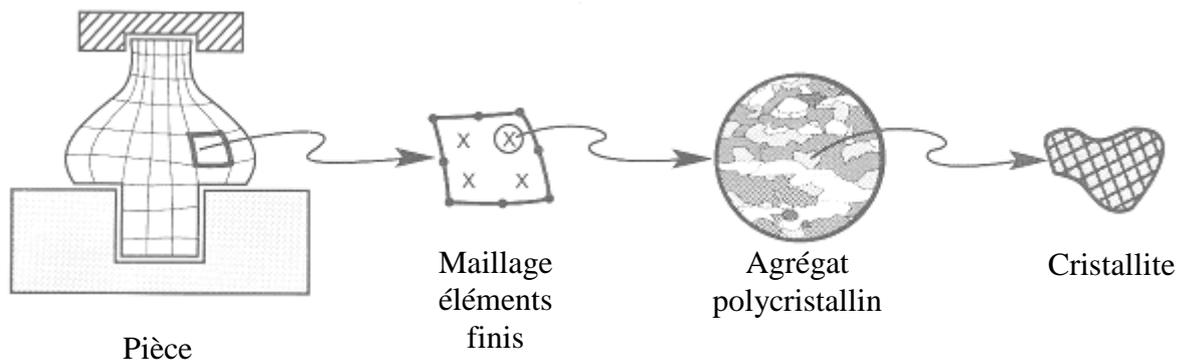


Figure I.19 : Couplage Méthode éléments finis et modèle polycristallin [Kocks et al. 98]

I.3.4. Méthode d'homogénéisation

I.3.4.1. Introduction

La technique d'homogénéisation permet d'obtenir une réponse du comportement macroscopique d'un agrégat polycristallin à partir des informations qu'on peut acquérir sur sa microstructure. Pour être pertinente, cette technique doit être capable de reproduire et d'expliquer le comportement mécanique et de permettre une meilleure compréhension des mécanismes de déformation activés durant un processus de mise en forme afin d'éventuellement mieux maîtriser le procédé de fabrication.

Les transitions d'échelle (du grain au polycristal) peuvent être effectuées avec différentes approches. Notre travail s'appuie sur un modèle autocohérent élastoplastique. Il se base sur la description cristallographique du comportement élastoplastique du matériau. Celui-ci est discrétisé en un nombre fini de cristallites de formes, d'orientations et de comportements donnés. Le matériau modèle (ou pseudo-matériau) ainsi constitué retient un certain nombre des propriétés des grains du matériau réel.

La méthode d'homogénéisation a été adoptée dans le laboratoire durant les travaux de thèse de Gloaguen [Gloaguen 01] : il a étudié les propriétés thermoélastiques et le comportement élastoplastique (essais de traction couplés à une analyse des contraintes résiduelles) de

matériaux hexagonaux monophasés (zirconium 702 et titane 40). D'autres études basées sur l'homogénéisation, ont eu lieu au sein du laboratoire sur les matériaux hexagonaux : la thèse de Fréour [Fréour 03] qui a travaillé sur des matériaux biphasés hexagonal-cubique (Ti 17) et la thèse de Berchi [Berchi 06] qui a étudié le comportement d'un alliage de zirconium en grandes déformations (laminage à pas de pèlerin). Nous avons entrepris de développer dans le cadre de cette approche micromécanique une loi de comportement locale qui tient réellement compte du rôle des hétérogénéités intragranulaires. Nous présenterons dans cette partie le principe de ce type de modèles en détaillant principalement le modèle autocohérent qui constitue le point de départ de notre travail. Quelques résultats numériques illustreront les faiblesses de ce modèle lors de simulations de trajets complexes.

1.3.4.2. Principe d'homogénéisation

La technique d'homogénéisation est basée sur l'étude d'un volume élémentaire, appelé Volume Élémentaire Représentatif (VER) du matériau hétérogène considéré. Ce volume doit être suffisamment petit par rapport aux dimensions caractéristiques des structures macroscopiques (pièces) et assez grand pour être représentatif du comportement macroscopique réel du matériau. Le milieu hétérogène réel pourra être remplacé par un Milieu Homogène Equivalent (MHE), de telle sorte que le calcul de la structure qui constitue ce milieu homogène donne des champs de contraintes et de déformations macroscopiques qui soient les moyennes des champs locaux (microscopiques) qui auraient pu être calculées sur la structure réelle. Les caractéristiques microscopiques (au niveau de la cristallite), comme le glissement plastique et la scission résolue, décrivent un Volume de Base (VB). Ce volume définit la plus petite échelle où l'on peut descendre car il est nécessaire de ne pas descendre inutilement à des niveaux plus fins que nécessaire et de conserver la validité des outils de la mécanique des milieux continus. Pour une bonne application de cette approche, il faut passer par trois étapes : la représentation, la localisation et l'homogénéisation [Bornert et al. 01].

➤ *Représentation :*

Il s'agit de définir le VER du milieu hétérogène considéré. Ce VER doit être un volume statistiquement représentatif du matériau modélisé. Son choix est conditionné par trois paramètres (figure I.20) :

L : la taille de la structure à analyser.

l : la taille du VER (quelques millimètres). Le rapport l/L doit être suffisamment petit ($l \ll L$) pour que l'influence des gradients macroscopiques soit négligeable. Cette condition est nécessaire pour que l'on puisse traiter la structure comme un milieu continu et y déterminer des champs continus de contraintes et de déformations (ou continu par morceaux).

d : la taille caractéristique des hétérogénéités et des propriétés sujettes à l'analyse (quelques micromètres). Le rapport d/l doit être suffisamment petit ($d \ll l$) pour que l'on puisse affecter aux points macroscopiques de la structure un comportement mécanique homogène si son matériau constitutif est considéré comme macroscopiquement homogène.

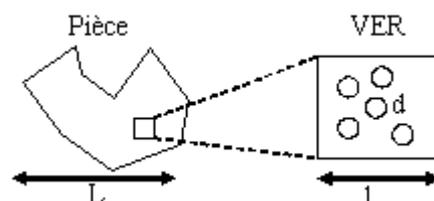


Figure I.20 : milieu hétérogène et son VER

➤ *Localisation :*

Dans cette deuxième étape, on détermine les grandeurs mécaniques microscopiques (contrainte et déformation) dans le VB à partir des grandeurs macroscopiques du VER (*figure I.21*). Ainsi, on peut formuler l'existence d'une loi de localisation des contraintes et des déformations qui prendra la forme :

$$\varepsilon^{\text{II}}(\Omega) = A(\Omega) : \varepsilon^{\text{I}} \quad (\text{I.2})$$

$$\sigma^{\text{II}}(\Omega) = B(\Omega) : \sigma^{\text{I}} \quad (\text{I.3})$$

où $\sigma^{\text{II}}(\Omega)$ et $\varepsilon^{\text{II}}(\Omega)$ sont respectivement les contraintes et les déformations mésoscopiques (au niveau du VB) et $\sigma^{\text{I}}(\Omega)$ et $\varepsilon^{\text{I}}(\Omega)$ les grandeurs macroscopiques (VER). Ω représente l'orientation cristallographique qui peut être définie pour chaque cristallite par trois angles de rotations (angles d'Euler $(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$). $A(\Omega)$ est le tenseur de localisation et $B(\Omega)$, le tenseur de concentration. Les différents modèles d'homogénéisation actuels diffèrent dans cette étape pour déterminer les expressions des tenseurs $A(\Omega)$ et $B(\Omega)$.

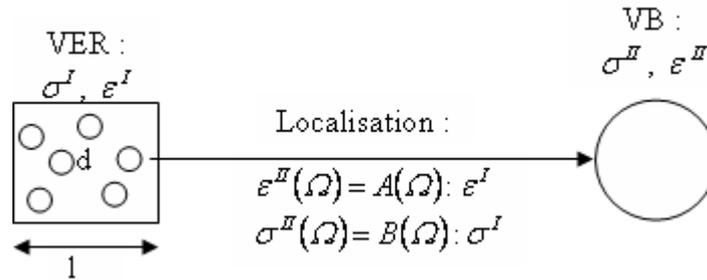


Figure I.21 : principe de localisation

➤ *Homogénéisation :*

Cette étape vise à trouver l'expression du comportement du milieu homogène équivalent (MHE). On considère que la contrainte (resp. la déformation) macroscopique est la moyenne des contraintes (resp. des déformations) locales de chaque VB (*Figure I.22*). Ainsi on peut écrire :

$$\varepsilon^{\text{I}} = \langle \varepsilon^{\text{II}}(\Omega) \rangle = \frac{1}{V_{\text{VER}}} \int_{V_{\text{VER}}} \varepsilon^{\text{II}}(\Omega) dV \quad (\text{I.4})$$

$$\sigma^{\text{I}} = \langle \sigma^{\text{II}}(\Omega) \rangle = \frac{1}{V_{\text{VER}}} \int_{V_{\text{VER}}} \sigma^{\text{II}}(\Omega) dV \quad (\text{I.5})$$

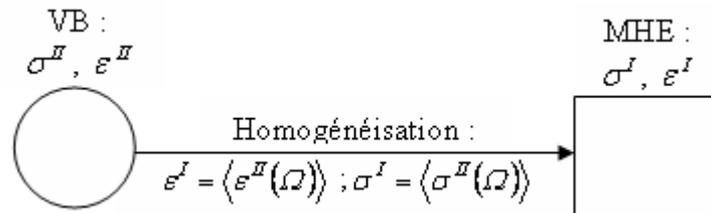


Figure I.22 : principe d'homogénéisation

La résolution analytique du problème d'une inclusion noyée dans une matrice est très complexe. Plusieurs auteurs ont fait des approximations afin de simplifier ce problème à savoir Sachs [*Sachs 28*], Taylor [*Taylor 38*], Eshelby [*Eshelby 57*] et Kröner [*Kröner 61*].

I.3.5. Modèle de Sachs

Sachs [*Sachs 28*] fut le premier à envisager le comportement du grain dans un polycristal. Il a considéré qu'un grain dans le polycristal se déforme de la même façon qu'un monocristal libre et de manière indépendante par rapport à ses voisins. Il détermine la déformation et la réorientation du grain à partir de la contrainte macroscopique qui est égale à la contrainte du grain (contrainte uniforme dans l'agrégat polycristallin). Ce modèle constitue une borne inférieure du comportement élastoplastique équivalent du polycristal. Il décrit en général assez mal la réponse des polycristaux de structure CFC, mais s'est avéré pertinent dans le cas de certains alliages de structure hexagonale. La non prise en compte de la compatibilité géométrique entre les grains constitue la faiblesse de ce modèle.

I.3.6. Modèle de Taylor

Taylor [*Taylor 38*] a supposé que la déformation est homogène dans le polycristal : tous les grains ont la même déformation que celle qui est imposée macroscopiquement (on néglige la partie élastique). Ainsi, ce modèle assure la compatibilité géométrique du champ de déformation. Il s'agit d'une borne supérieure de la réponse élastoplastique du polycristal. Il est très utilisé dans la pratique pour sa simplicité et son efficacité. Par contre, il ne satisfait pas aux conditions d'équilibre des contraintes. Le modèle de Taylor initial ne tient pas compte de la forme du grain, ni de l'interaction entre les grains. Différents modèles dérivés de l'hypothèse de Taylor permettent de pallier ces manques [*Van Houtte et Van Bael 04, Van Houtte et al. 05*].

I.3.7. Modèle autocohérent

Nous présentons dans cette section, le principe du schéma autocohérent à un site de manière rapide. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur aux différents articles présentant en détail ce type d'approche [*Mabilly 96, Lipinski et al. 90, Lipinski et Berveiller 89*]. Ce modèle permet de satisfaire les conditions d'équilibres et les compatibilités géométriques en tenant compte des interactions entre grains. Il découle du travail d'Eshelby [*Eshelby 57*] qui a permis de trouver la solution du problème suivant (*figure I.23*) : « une petite région (inclusion) au sein d'un milieu élastique homogène infini, est soumise à un changement de forme et de taille qui, sans la contrainte imposée par le milieu qui l'entoure (matrice), serait une déformation homogène arbitraire. Quel est l'état élastique de l'inclusion et de la matrice ? ». Ce problème fut résolu dans le cas d'inclusions ellipsoïdales, montrant que les contraintes résultantes sont uniformes dans l'inclusion. Ce formalisme a été repris par Kröner [*Kröner 61*] dans le cadre des déformations élastoplastiques. Il propose de représenter chaque grain, d'une orientation cristallographique donnée, par une inclusion sphérique noyée dans un Milieu Homogène Equivalent (MHE) élastique (*figure I.23*). Le modèle de Kröner néglige les interactions plastiques entre l'inclusion et la matrice qui l'entoure. Pour pallier à cette restriction, Hill [*Hill 65*] a proposé de linéariser le comportement élastoplastique, en résolvant le problème de manière incrémentale. On se ramènera donc à un cas analogue à celui de l'élasticité. Ce

travail a permis une accommodation plastique de l'interaction inclusion-matrice grâce à une linéarisation incrémentale du comportement élastoplastique du grain et de la matrice. Dans cette approche, la matrice, qui entoure l'inclusion, est supposée avoir un module uniforme. En réalité, l'écroutissage n'est pas uniforme autour de l'inclusion. L'approche a été implémentée par Hutchinson [Hutchinson 70] pour simuler un agrégat de grains CFC. Berveiller et Zaoui [Berveiller et Zaoui 79] ont développé une autre approche autocohérente afin de simplifier la loi d'interaction et tenir compte des interactions plastiques. Lipinski et al. [Lipinski et al. 90, Lipinski 93] ont utilisé le modèle autocohérent pour simuler les grandes déformations et l'évolution de la texture dans le cas des matériaux cubiques (CFC et CC).

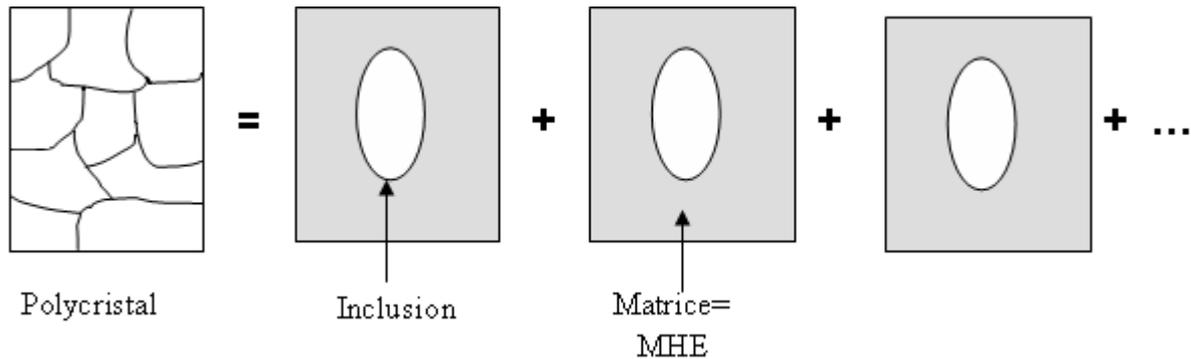


Figure I.23 : représentation du polycristal suivant le modèle autocohérent

1.3.7.1. Hypothèses

En se basant sur les travaux de Hill [Hill 65], on peut écrire la loi de comportement sous la forme :

$$\dot{\sigma}^n = l(\Omega) : \dot{\varepsilon}^n \quad (I.6)$$

où $\dot{\sigma}^n$ et $\dot{\varepsilon}^n$ sont respectivement les taux des contraintes (vitesse) et des déformations mésoscopiques (la dépendance de ces grandeurs en fonction de l'orientation Ω est omis pour alléger l'écriture). $l(\Omega)$ représente le tenseur des modules tangents élastoplastiques au niveau du monocristal et il dépend également de l'orientation cristallographique du grain. A chaque incrément (d'après (I.6)), on se trouve confronté à un problème d'homogénéisation linéaire que l'on sait résoudre dans le cadre de l'élasticité pure.

Le modèle autocohérent est basé sur les hypothèses suivantes :

- Chaque cristallite est assimilée à un ellipsoïde inclus dans un milieu homogène équivalent (MHE) qui possède les caractéristiques mécaniques du polycristal dont on cherche le comportement.
- Le comportement élastoplastique (les champs de contraintes et de déformations) est uniforme et homogène à l'intérieur de chaque grain.
- Les grandeurs macroscopiques sont déterminées par la moyenne des grandeurs mésoscopiques.
- Les grandeurs macroscopiques sont considérées comme homogènes.
- La texture est définie à partir de la fonction de distribution des orientations qui décrit la fraction du grain ayant une orientation donnée.

I.3.7.2. Plasticité du grain

I.3.7.2.1. Plasticité du grain

Le tenseur gradient de vitesse \dot{g}^{II} ($g_{ij}^{II} = u_{i,j}$) de la transformation élastoplastique d'une cristallite se décompose en une partie symétrique correspondant à la vitesse de déformation mésoscopique totale $\dot{\epsilon}^{II}$ et une autre antisymétrique \dot{w}^{II} se ramenant à une rotation. Chacun de ces facteurs se sépare en une partie élastique et une autre plastique, que l'on matérialisera par les indices e et p :

$$\dot{g}^{II} = (\dot{\epsilon}^{eII} + \dot{w}^{eII}) + (\dot{\epsilon}^{pII} + \dot{w}^{pII}) \quad (I.7)$$

avec :

$$\dot{\epsilon}^{pII} = \sum_g R^g \dot{\gamma}^g \text{ et } \dot{w}^{pII} = \sum_g Q^g \dot{\gamma}^g, [Lipinski et al. 90] \quad (I.8)$$

L'indice g fait référence au système de glissement g . $\dot{\gamma}^g$ indique la vitesse de glissement sur ce système. R^g est le tenseur de Schmid (symétrique) représentant la déformation causée par un glissement unité sur le système g . Ce tenseur caractérise l'anisotropie géométrique de l'écoulement plastique. Q^g est un tenseur antisymétrique décrivant la rotation totale pour un glissement unité. Ces tenseurs sont des constantes lorsqu'ils sont exprimés dans un référentiel lié à la cristallite.

Si \vec{n} et \vec{m} sont respectivement la normale au plan de glissement et la direction de glissement du système actif g :

$$R_{ij}^g = \frac{1}{2} (m_i^g n_j^g + m_j^g n_i^g) \text{ et } Q_{ij}^g = \frac{1}{2} (m_i^g n_j^g - m_j^g n_i^g) \quad (I.9)$$

La partie élastique du tenseur de la vitesse de déformation mésoscopique obéit à la loi de Hooke généralisée :

$$\dot{\epsilon}^{eII} = s(\Omega) : \dot{\sigma}^{II} \quad (I.10)$$

ou bien :

$$\dot{\sigma}^{II} = c(\Omega) : \dot{\epsilon}^{eII} \quad (I.11)$$

où s est le tenseur de souplesse et c , le tenseur de rigidité.

I.3.7.2.2. Gestion des systèmes actifs

D'après la loi de Schmid, un système de glissement g sera actif quand sa scission réduite τ^g atteindra une valeur critique notée τ_c^g dépendant de l'état d'écrouissage de la cristallite. En déformations élastoplastiques, cette condition sur les scissions réduites s'écrit sous la forme suivante :

$$\tau^g = R^g : \sigma^{II} = \sum_{i,j} R_{ij}^g \sigma_{ij}^{II} = \tau_c^g \quad (\text{I.12})$$

Si on se place dans le cas de petites déformations, la vitesse de rotation du réseau cristallin est négligeable. On a alors :

$$\dot{\tau}^g = R^g : \dot{\sigma}^{II} = \dot{\tau}_c^g \quad (\text{I.13})$$

Les critères de Schmid définissent la vitesse de glissement $\dot{\gamma}_r$ des n systèmes de glissement actifs et des $(N-n)$ systèmes inactifs (N étant le nombre de systèmes possibles pour la structure cristalline considérée). La formulation de l'activité d'un système de glissement est alors définie par :

- $\dot{\gamma}^r = 0$ si $\tau^r < \tau_c^r$
 - $\dot{\gamma}^r = 0$ si $\tau^r = \tau_c^r$ et $\dot{\tau}^r < \dot{\tau}_c^r$
 - $\dot{\gamma}^r > 0$ si $\tau^r = \tau_c^r$ et $\dot{\tau}^r = \dot{\tau}_c^r$
- (I.14)

Les relations I.14 définissent les critères d'écoulement plastique. A partir de ces critères on peut déterminer quelle sera la combinaison de systèmes de glissement réellement activés à n'importe quel moment de la déformation plastique. Un système de glissement sera actif quand sa scission réduite atteindra une valeur critique et le taux de scission réduite atteindra le taux de scission critique. Les inconvénients de cette analyse combinatoire sont liés aux temps de simulation du fait qu'il est nécessaire de chercher la solution parmi toutes celles possibles (systèmes potentiellement actifs) et à la perte d'unicité selon la structure de la matrice d'écrouissage choisie. Il est donc intéressant d'avoir une loi qui permette des temps de calculs faibles et qui soit facile à utiliser en donnant les mêmes résultats que la procédure précédente. Ben Zineb et al. [Ben Zineb et al. 01] ont développé une loi inspirée des lois de viscoplasticité en éliminant la notion de temps. Cette loi a d'abord été validée dans le cas d'un monocristal puis Lorrain et al. [Lorrain 05, Lorrain et al. 05] l'ont utilisée dans le cadre d'une modélisation polycristalline. En viscoplasticité, la vitesse de glissement est reliée à la scission résolue par une fonction K fortement non linéaire :

$$\dot{\gamma}^g = K^g(\tau^g) \tau^g \quad (\text{I.15})$$

Pour utiliser une formulation indépendante du temps, il faudrait une relation de la forme :

$$\dot{\gamma}^g = K^g(\tau^g, \tau_c^g) \dot{\tau}^g \quad (\text{I.16})$$

La fonction K^g assure ici la gestion de l'activation et de la désactivation des systèmes de glissement. Elle doit vérifier les conditions suivantes qui peuvent être déduites des relations I.14 :

- K doit admettre une valeur nulle ou éventuellement très faible lorsque le rapport $\tau/\tau_c < 1$.
- K demeure nul ou très faible lors de la décharge même si le rapport τ/τ_c est proche de 1.
- K doit permettre la description de l'écrouissage lorsque $\tau\dot{\tau} > 0$ et le rapport τ/τ_c proche de 1.

Il est possible de choisir plusieurs types de fonctions de régularisation (exponentielle, tangente hyperbolique, ...). La formulation adoptée, dans ce travail, est la suivante [Lorrain *et al.* 05] :

$$K^g = \frac{1}{\eta} \left(\frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(k \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} - 1 \right) \right) \right) \right) \left(\frac{1}{2} \left(1 + \tanh(\dot{\tau}^g) \right) \right) \left(\frac{1}{2} \left(1 + \tanh(\tau^g) \right) \right) \quad (\text{I.17})$$

où η est un paramètre fonction de l'auto-écrouissage. k est un paramètre purement numérique qui sera ajusté avec la courbe de chargement macroscopique. La fonction K^g dépend de deux paramètres (η et k) en plus des scissions réduite et critique et du taux de scission réduite. Un bon ajustement de η et de k impliquera une bonne simulation du modèle.

La gestion des systèmes activés étant déterminée, il faut établir la relation entre le taux de glissement sur un système actif g et le taux de contrainte mésoscopique :

$$\dot{\gamma}^g = K^g \dot{\tau}^g = K^g R^g : \dot{\sigma}^{II} \quad (\text{sans sommation sur } g) \quad (\text{I.18})$$

En insérant (I.11) dans (I.18), on trouve :

$$\dot{\gamma}^g = K^g R^g : c(\Omega) : \dot{\epsilon}^{eII} \quad (\text{I.19})$$

La vitesse de déformation totale au niveau des grains est fonction des déformations élastique et plastique :

$$\dot{\epsilon}^{II} = \dot{\epsilon}^{eII} + \dot{\epsilon}^{pII} \quad (\text{I.20})$$

En utilisant les relations I.19-I.20, on obtient :

$$\dot{\gamma}^g = K^g R^g : c(\Omega) : \left(\dot{\epsilon}^{II} - \dot{\epsilon}^{pII} \right) \quad (\text{I.21})$$

En remplace la vitesse de déformation plastique par son *expression* I.8, on obtient :

$$\dot{\gamma}^g = K^g R^g : c(\Omega) : \left(\dot{\epsilon}^{II} - \sum_h R^h \dot{\gamma}^h \right) \quad (\text{I.22})$$

En développant I.22, on trouve l'expression de la vitesse de glissement :

$$\dot{\gamma}^g = \sum_h \left(\delta_{gh} + K^g R^g : c(\Omega) : R^h \right)^{-1} K^h R^h : c(\Omega) : \dot{\epsilon}^{II} \quad (\text{I.23})$$

1.3.7.3. Loi d'écrouissage

L'écrouissage est un phénomène de durcissement observé sur les matériaux métalliques, dû à l'accroissement du nombre des dislocations lors de la déformation plastique et à l'interaction entre celles-ci. On distingue l'auto-écrouissage qui définit le durcissement du système considéré et l'écrouissage latent définissant les effets d'un système sur l'autre. L'écrouissage

est généralement décrit par une matrice d'écroissage H^{rs} reliant la variation de scission critique $\dot{\tau}_c^r$ d'un système r à la vitesse de glissement plastique d'un système s [Franciosi et al. 80] :

$$\dot{\tau}_c^r = \sum_{s=1}^n H^{rs} \dot{\gamma}^s \quad (\text{I.24})$$

H^{rs} permet de décrire phénoménologiquement, de manière plus ou moins simplifiée, les phénomènes de mouvement et de stockage des dislocations suivant les plans de glissement.

Le choix de la loi d'écroissage H^{rs} est une étape cruciale afin d'obtenir de bons résultats de modélisation du comportement du matériau simulé. A l'aide de cette loi, on peut tenir compte des différents phénomènes liés à l'écroissage du matériau pendant la phase de plasticité. La loi linéaire est la plus citée dans la bibliographie à cause de sa simplicité et de son efficacité dans certains cas (traction des matériaux cubiques). Mais elle décrit de manière très simplifiée l'écroissage du matériau. Plusieurs modèles [Paquin et al. 01, Franciosi et al. 80] ont été élaborés pour tenir davantage compte des différents processus physiques régissant l'écroissage comme le stockage et l'annihilation des dislocations au cours de la plasticité.

1.3.7.3.1. Equations constitutives du grain

En tenant compte de I.8-I.20, le tenseur du taux de contraintes s'écrit :

$$\dot{\sigma}^{II} = c(\Omega) : \dot{\varepsilon}^{eII} = c(\Omega) : (\dot{\varepsilon}^{II} - \dot{\varepsilon}^{pII}) = c(\Omega) : \left(\dot{\varepsilon}^{II} - \sum_g R^g \dot{\gamma}^g \right) \quad (\text{I.25})$$

En introduisant I.23 dans cette expression I.24, on obtient :

$$\dot{\sigma}^{II} = \left(c(\Omega) - \sum_g \sum_h c(\Omega) : R^g (\delta_{gh} + K^g R^g : c(\Omega) : R^h)^{-1} K^h R^h : c(\Omega) \right) : \dot{\varepsilon}^{II} \quad (\text{I.26})$$

Par comparaison entre I.6 et I.26, on trouve l'expression du tenseur des modules tangents élastoplastiques $l(\Omega)$ sous la forme :

$$l(\Omega) = c(\Omega) - \sum_g \sum_h c(\Omega) : R^g (\delta_{gh} + K^g R^g : c(\Omega) : R^h)^{-1} K^h R^h : c(\Omega) \quad (\text{I.27})$$

En combinant les expressions I.8, I.18 et I.20, on peut également déterminer l'expression, plus simple, de $l^{-1}(\Omega)$:

$$\dot{\varepsilon}^{II} = \left[s(\Omega) + \sum_g R^g K^g R^g \right] : \dot{\sigma}^{II} \quad (\text{I.28})$$

avec :

$$l^{-1}(\Omega) = \left[s(\Omega) + \sum_g R^g K^g R^g \right] \quad (\text{I.29})$$

1.3.7.4. Modélisation du comportement macroscopique

La vitesse de déformation mésoscopique est reliée à la vitesse de déformation macroscopique au travers de la relation suivante :

$$\dot{\varepsilon}^II = [I + E : (l(\Omega) - L)]^{-I} : \dot{\varepsilon}^I \quad (\text{I.30})$$

Le tenseur de localisation A est alors donné par :

$$A(\Omega) = [I + E : (l(\Omega) - L)]^{-I} \quad (\text{I.31})$$

où I est le tenseur unité d'ordre 4 et E , le tenseur de Morris au niveau du grain. Dans le cas d'inclusions de forme ellipsoïdale, ce tenseur peut s'écrire de la manière suivante [Morris 70] :

$$E_{ijkl} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \gamma_{ijkl} d\phi \quad (\text{I.32})$$

avec :

$$\gamma_{ijkl} = K_{ik}^{-1}(\xi) \xi_j \xi_l, \quad (\text{I.33})$$

$$K_{jp}(\xi) = l_{jpl} \xi_j \xi_p \quad (\text{I.34})$$

$$\xi_1 = \frac{\sin \theta \cos \phi}{a_1}, \quad \xi_2 = \frac{\sin \theta \sin \phi}{a_2}, \quad \xi_3 = \frac{\cos \theta}{a_3} \quad (\text{I.35})$$

où $2a_1, 2a_2, 2a_3$ sont les longueurs des axes principaux de l'ellipsoïde. Les rapports de ces trois paramètres décrivent la texture morphologique du matériau considéré.

Les taux de contraintes et de déformations mésoscopiques sont liés par la relation :

$$\dot{\sigma}^II = l(\Omega) : \dot{\varepsilon}^II = l(\Omega) : [I + E : (l(\Omega) - L)]^{-I} : \dot{\varepsilon}^I \quad (\text{I.36})$$

Au niveau macroscopique, la loi de comportement cinématique est donnée par :

$$\dot{\sigma}^I = L : \dot{\varepsilon}^I \quad (\text{I.37})$$

où L est appelé le tenseur des modules tangents élastoplastiques effectifs du polycristal. Ainsi, on trouve la relation de concentration suivante :

$$\dot{\sigma}^{\prime\prime} = l(\Omega) : [I + E : (l(\Omega) - L)]^{-1} : L^{-1} : \dot{\sigma}^{\prime} \quad (\text{I.38})$$

Le tenseur de concentration B est alors donné par :

$$B = l(\Omega) : [I + E : (l(\Omega) - L)]^{-1} : L^{-1} \quad (\text{I.39})$$

Les variables macroscopiques du polycristal sont obtenues par une opération de moyenne volumique sur l'ensemble des cristallites J de fraction volumique f^J :

$$\dot{\sigma}^{\prime} = \langle \dot{\sigma}^{\prime\prime} \rangle_V = \sum_{J=1}^M f^J \dot{\sigma}^{\prime\prime} = \langle l^J : A^J : \dot{\varepsilon}^{\prime} \rangle_{J=1,M} \quad (\text{I.40})$$

$$\dot{\varepsilon}^{\prime} = \langle \dot{\varepsilon}^{\prime\prime} \rangle_V = \sum_{J=1}^M f^J \dot{\varepsilon}^{\prime\prime} \quad (\text{I.41})$$

M est le nombre de cristallites de l'agrégat modèle. On obtient alors :

$$\dot{\sigma}^{\prime} = L : \dot{\varepsilon}^{\prime} \quad (\text{I.42})$$

où :

$$L = \langle l^J : A^J \rangle = \langle l(\Omega) : [I + E : (l(\Omega) - L)]^{-1} \rangle \quad (\text{I.43})$$

Soit :

$$L = \sum_J f^J l^J(\Omega) : [I + E : (l(\Omega) - L)]^{-1} \quad (\text{I.44})$$

L'équation I.44 est une équation implicite non linéaire car l'inconnue L figure des deux côtés de l'équation de façon complexe. En effet, les propriétés recherchées à partir du tenseur L figurent dans la forme du tenseur de Morris E et dans l'expression $(l(\Omega) - L)$. On résout cette équation de manière itérative en partant d'une première approximation de la valeur de L qui permet d'évaluer le deuxième membre et on réinsère le résultat de cette évaluation comme nouvelle valeur jusqu'à ce que la différence entre deux itérations atteigne la précision souhaitée.

1.3.7.5. Résultats numériques

Dans cette partie, différents résultats numériques sur des polycristaux d'aluminium et d'acier austénitique vont être présentés. Ces données vont être comparées à des résultats issus de différents travaux antérieurs [Clausen et al. 98, Choteau 99]. L'objectif est d'illustrer les acquis et les insuffisances de la modélisation autocohérente. Pour cela, une attention particulière sera portée à la matrice d'écrouissage afin d'étudier son influence sur le comportement du matériau aux différentes échelles. La pertinence d'un modèle micromécanique dépend de la justesse de la loi de localisation utilisée et de la description du comportement à l'échelle locale. Le choix de la loi d'écrouissage est par conséquent très importante. Nous avons donc comparé quatre lois d'écrouissages ; deux lois simples traduisant l'écrouissage latent et l'auto-écrouissage et deux lois plus complexes qui tiennent

davantage compte des dislocations et des différents mécanismes physiques responsables de l'écroissage.

1.3.7.5.1. *Présentation des lois d'écroissages*

• **Première loi d'écroissage**

La matrice d'écroissage H^{gh} (au travers de I.24) permet de traduire de manière simplifiée les phénomènes de mouvement et de stockage des dislocations dans les plans de glissement. On distingue l'auto-écroissage par l'intermédiaire des termes diagonaux H_1 (interactions faibles entre les dislocations) et l'écroissage latent grâce aux termes non diagonaux H_2 (interactions fortes entre les dislocations) :

$$H^{gh} = h_0 a^{gh} \quad (\text{I.45})$$

où a^{gh} est la matrice d'interaction entre les systèmes de glissement g et h et h_0 , le module d'écroissage initial. L'auto-écroissage et l'écroissage latent sont liés par : $a^{gh} = q.a^{gg}$ où q est un facteur (constant) d'anisotropie.

• **Deuxième loi d'écroissage**

La matrice proposée par Franciosi et al. [Franciosi et al. 80] fait intervenir deux termes. Le premier H_1 est lié à:

- ✓ L'écroissage propre à chaque système de glissement appelé auto-écroissage.
- ✓ L'écroissage dû aux interactions entre systèmes de glissement coplanaires. Cette réaction produit une jonction glissile.
- ✓ L'écroissage dû aux interactions colinéaires qui conduisent au glissement dévié.

Le second terme H_2 est lié aux autres types d'interactions, en particulier de type forêt de dislocations et les différents types de jonctions.

$$H^{(gh)} = \begin{bmatrix} H_1 & H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 \\ H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 \\ H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 \\ H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 \\ H_2 & H_1 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 \\ H_2 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 \\ H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_2 \\ H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_1 & H_2 \\ H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 \\ H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 \\ H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 \\ H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_2 & H_2 & H_1 & H_1 & H_1 & H_1 \end{bmatrix} \quad (\text{I.46})$$

- **Troisième loi d'écroissage**

Dans les troisième et quatrième lois, les matrices d'écroissages sont données en fonction des variables internes de la microstructure du matériau à savoir la densité de dislocations, l'annihilation des dislocations, le libre parcours moyen des dislocations et la scission critique.

Kocks [Kocks 76] a exprimé la densité de dislocations produite ρ^+ et la densité de dislocations d'annihilation ρ^- par :

$$\dot{\rho}^{g+} = \frac{I}{bL^{(g)}} \dot{\gamma}^g \text{ et } \dot{\rho}^{g-} = \frac{y_c}{b} \rho \dot{\gamma}^g \quad (\text{I.47})$$

L^g est donné par :

$$L^g = \frac{k}{\sqrt{\sum_{l \neq g} \rho^l}} \quad (\text{I.48})$$

y_c est la distance d'annihilation critique des dislocations. L^g est le libre parcours moyen des dislocations sur le système g considéré et k , un paramètre du matériau. Il correspond au stockage des dislocations : plus ce terme sera faible plus le nombre de dislocations stockées sera important. b désigne la norme du vecteur de Burgers du matériau.

Par conséquent, l'évolution de la densité de dislocations totale d'un système g est le résultat final des deux phénomènes présentés par l'équation I.47. On peut alors écrire :

$$\dot{\rho}^g = \frac{I}{b} \left(\frac{I}{L^g} - 2y_c \rho^g \right) \dot{\gamma}^g \quad (\text{I.49})$$

A partir du travail de Franciosi [Franciosi 85], l'expression de la scission critique τ_c^g pour un système de glissement g est :

$$\tau_c^g = \tau_{c0}^g + \alpha \mu b \sqrt{a^{gh} \rho^h} \quad (\text{I.50})$$

avec :

τ_{c0}^g désigne la scission critique initiale ;

a^{gh} représente la matrice des interactions entre systèmes de glissement ;

μ est le module de cisaillement du matériau et α , une constante du matériau.

En différenciant l'équation I.26, on trouve :

$$2(\tau_c^g - \tau_{c0}^g) \dot{\tau}_c^g = (\alpha \mu b)^2 a^{gh} \dot{\rho}^h \quad (\text{I.51})$$

En combinant les équations I.49 et I.51 entre elles, on trouve :

$$\dot{\tau}_c^g = \frac{(\alpha \mu)^2 b}{2(\tau_c^g - \tau_{c0}^g)} a^{gh} \left(\frac{I}{L^h} - 2y_c \rho^h \right) \dot{\gamma}^h \quad (\text{I.52})$$

Par conséquent, la matrice d'écrouissage est :

$$H^{gh} = \frac{(\alpha\mu)^2 b}{2(\tau_c^g - \tau_{c0}^g)} a^{gh} \left(\frac{1}{L^g} - 2y_c \rho^h \right) \quad (\text{I.53})$$

- **Quatrième loi d'écrouissage**

Le travail de Voce [Voce 48] est une autre manière de tenir compte de l'annihilation des dislocations. Il consiste à introduire dans la loi d'écrouissage une scission de saturation τ_s (la même pour tous les systèmes de glissement). Celle-ci correspond à l'état où le taux de la densité de dislocations $\dot{\rho}^g$ est nul. La densité de dislocations produite $\dot{\rho}^{g+}$ est alors égale à la densité de dislocations d'annihilation $\dot{\rho}^{g-}$:

$$\dot{\rho}^g = \dot{\rho}^{g+} + \dot{\rho}^{g-} \quad (\text{I.54})$$

En utilisant la définition de la scission de saturation (i.e : $\tau_s^g = \tau_c^g$ quand $\dot{\rho}^{g+} = \dot{\rho}^{g-}$) et en combinant les équations I.47-I.51 entre elles, on détermine la forme de la loi d'écrouissage suivante :

$$\dot{\tau}_c^g = h_0 \left(\frac{\tau_s - \tau_c^g}{\tau_s - \tau_{c0}^g} \right) a^{gh} \dot{\gamma}^g \quad (\text{I.55})$$

Par conséquent, la matrice d'écrouissage est :

$$H^{gh} = h_0 \left(\frac{\tau_s - \tau_c^g}{\tau_s - \tau_{c0}^g} \right) a^{gh} \quad (\text{I.56})$$

I.3.7.5.2. Chargement monotone

Pour étudier le rôle de l'écrouissage et l'influence de la matrice H^{gh} , des simulations numériques ont été menées sur un aluminium de structure CFC. Nous avons comparé les résultats de simulations avec les résultats expérimentaux issus des travaux de Clausen et al. [Clausen et al. 98]. Ils ont couplé un essai de traction uniaxiale avec la mesure in-situ par diffraction des neutrons des déformations internes, dans la direction de traction, pour trois plans cristallographiques durant le chargement : (220), (200) et (111). Le modèle dispose de suffisamment de paramètres pour pouvoir reproduire une courbe de chargement macroscopique et cette approche ne valide pas les simulations à l'échelle mésoscopique. Par contre, une évaluation des caractéristiques du matériau à cette échelle peut être obtenue par la détermination des déformations internes par les techniques de diffraction. Nous avons opté pour des mesures par diffraction des neutrons car elles permettent une analyse dans le volume de l'échantillon. De plus, des mesures in-situ durant un chargement permettent de s'affranchir du problème de la décharge élastique qui peut être accompagnée d'écoulement plastique, ce qui rend les comparaisons quantitatives avec les simulations plus délicates.

Dans le cas de la structure CFC, les glissements s'effectuent principalement dans les plans (111) (quatre plans) suivant les directions $\langle 110 \rangle$ (3x2 directions si on considère les deux sens de glissement). Nous distinguerons pour cette structure 24 systèmes de glissement (4x3x2 : *tableau I.1*). La scission critique initiale pour chaque système de glissement et pour chaque cristal est supposée être la même. La scission réduite initiale est nulle pour chaque système au départ. Les *tableaux I.2 et I.3* contiennent les paramètres du matériau et de la simulation.

	A			B			C			D		
Plan	$\bar{1}11$			111			$\bar{1}\bar{1}1$			1 $\bar{1}\bar{1}$		
Direction	$0\bar{1}1$	101	110	$0\bar{1}1$	$\bar{1}01$	$\bar{1}10$	011	101	$\bar{1}10$	011	$\bar{1}01$	110
N°	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

Tableau I.1 : notations de Schmid et Boas [Schmid et Boas 35] pour les systèmes de glissement

La texture initiale est définie par les angles d'Euler ($\varphi_1, \phi, \varphi_2$). Elle est supposée isotrope du fait que la texture expérimentale est relativement peu marquée. Les résultats de la modélisation autocohérente portent sur un matériau constitué de 900 cristaux dont 70 cristallites en position de diffraction suivant les plans (220), (200) et (111). Ce nombre de cristallites utilisées dans la modélisation a été justifié par une étude de l'influence du choix du nombre de cristallites en position de diffraction sur le comportement mécanique du matériau.

La *figure I.24* permet de comparer la courbe de traction expérimentale et celle obtenue par le modèle autocohérent pour les différentes lois d'écroutissage. D'après cette figure, on observe que le modèle arrive à reproduire, comme attendu, le comportement macroscopique de l'aluminium pour les quatre lois d'écroutissage. Les paramètres du modèle (scission critique, les paramètres de la fonction M^s , etc.) ont été déterminés par ajustement des courbes de chargement macroscopique expérimentales présentées sur la *figure I.24* (*tableau I.3*). Les mêmes paramètres ont été gardés pour les comparaisons avec les résultats de diffraction.

c_{11} (GPa)	c_{12} (GPa)	c_{44} (GPa)	b (m)	y_c (m)	ρ_0 (m ⁻²)
108,2	61,3	28,5	$2,86 \cdot 10^{-10}$	10^{-9}	10^9

Tableau I.2 : les paramètres du matériau

$H^{(gh)}$	τ_{c0} (MPa)	h_0 (MPa)	α	k	τ_s (MPa)
1 ^{ère} loi	10,09	50	0,31	45	
2 ^{ème} loi	10,12	50	0,31	45	
3 ^{ème} loi	9,9		0,31	45	
4 ^{ème} loi	10	56	0,31	45	20

Tableau I.3 : paramètres d'ajustement pour les différentes lois d'écroutissage

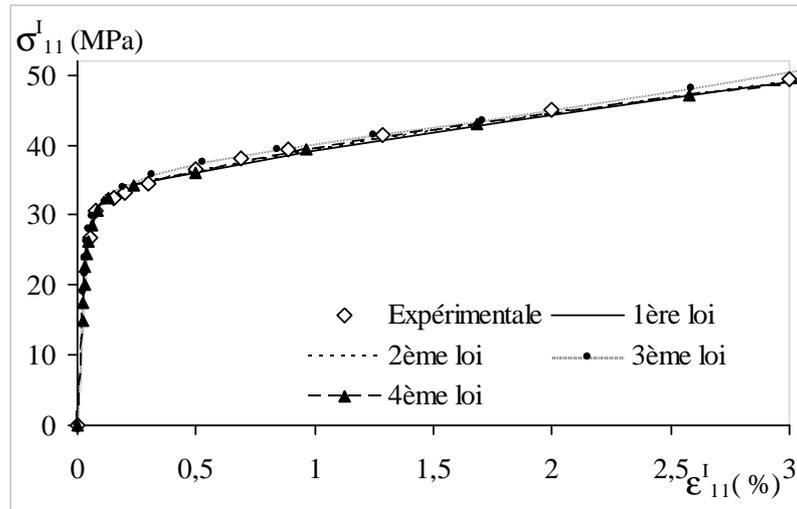


Figure 1.24 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentale et simulées

La *figure 1.25* présente les évolutions expérimentale et simulée de la déformation élastique interne pour le plan (220) en fonction de la déformation macroscopique avec les écarts types associés. D'après cette figure, on remarque un bon accord entre les courbes simulées et la courbe expérimentale dans la partie élastique et aussi après 1 % de déformation totale. Entre 0,4 % et 0,9 % de déformation macroscopique, les points expérimentaux sont dispersés mais les prédictions numériques, pour les quatre lois d'écroutissements choisies, sont en accord avec les résultats expérimentaux.

La *figure 1.26* donne une comparaison entre les courbes expérimentale et simulées concernant la déformation du plan (200) en fonction de la déformation totale. On constate que les paramètres du modèle, pour les quatre lois d'écroutissements, permettent de reproduire correctement la pente dans le domaine élastique. Par contre, les points expérimentaux sont au dessus du modèle dans le domaine plastique. Par exemple, l'écart relatif à 3 % de déformation totale peut atteindre 25 %. Dans le domaine plastique, les résultats prédits, pour les quatre lois d'écroutissements, ont presque la même pente. L'approche autocohérente est incapable de reproduire le comportement observé pour le plan (200) quelle que soit la loi d'écroutissage utilisée.

L'évolution de la déformation interne du plan (111) en fonction de la déformation macroscopique est donnée dans la *figure 1.27*. Jusqu'à 0,6 % de déformation totale, un bon accord est observé entre les résultats expérimentaux et les résultats du modèle, pour les quatre lois d'écroutissage. Entre 0,7 et 1,3 % de déformation totale, les points expérimentaux sont dispersés ce qui explique l'écart entre ceux-ci et les courbes du modèle. A 0,68 % de déformation totale, cet écart vaut 14 % (écart relatif). Enfin, à 3 % de déformation totale, l'écart relatif est de 9 %.

En comparant les résultats simulés et expérimentaux correspondant aux trois plans, on constate que les plans (220) et (111) (de forte multiplicité) sont mieux ajustés par rapport au plan (200). Pour le plan (220), à 0,9 % de déformation totale, la différence entre les courbes de simulation et de l'expérience est de 4 %; et à 3 % de déformation totale, la variation est de 6 %. Cette différence peut atteindre 25 % pour le plan (200) à 3 % de déformation totale. Ce résultat reste le même si on choisit un nombre de cristallites plus important. La prise en compte de la texture initiale même si elle est peu marquée permettrait d'améliorer les

simulations [Clausen *et al.* 03] mais elle n'explique pas à elle seule ces écarts. Ce phénomène pourrait être expliqué par la faiblesse du modèle utilisé en ce qui concerne la prise en compte de l'intégralité des interactions entre les plans de glissement. Cet écart a déjà été constaté dans la littérature [Clausen *et al.* 98, Clausen et Lorentzen 97] pour ce plan cristallin particulier.

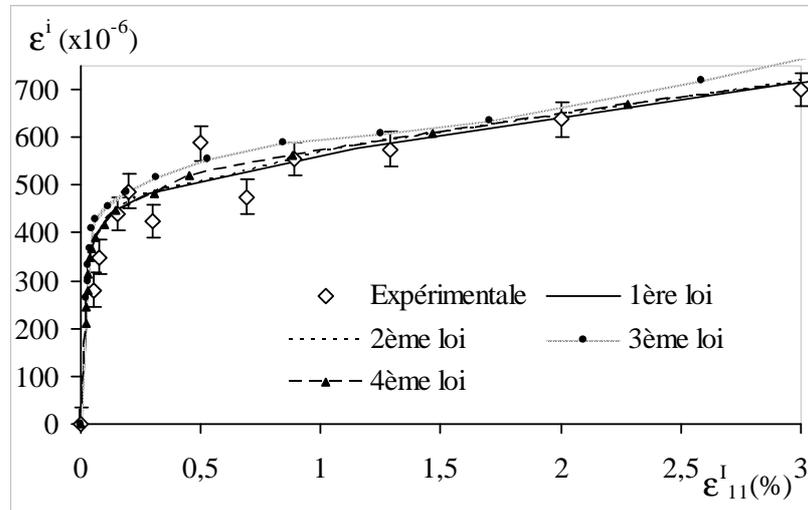


Figure I.25 : évolutions des déformations internes élastiques expérimentale et simulées pour le plan (220) en fonction de la déformation macroscopique

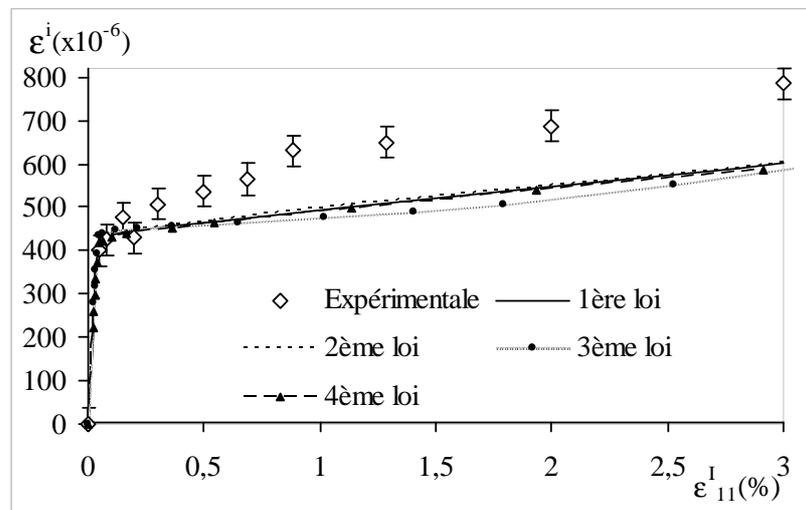


Figure I.26 : courbes expérimentale et simulées des déformations internes élastiques pour le plan (200) en fonction de la déformation macroscopique

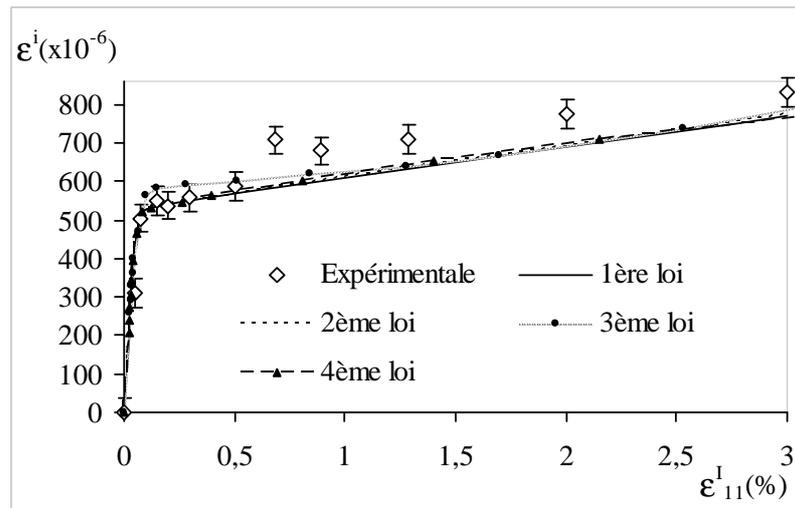


Figure I.27 : courbes expérimentale et simulées des déformations internes élastiques pour le plan (111) en fonction de la déformation macroscopique

Nous avons également déterminé la distribution des contraintes d'ordre II obtenues à la fin de l'essai de traction. La figure I.28 représente la distribution de la composante σ_{11}^{II} sur une figure de pôles (111). Le tableau I.4 montre les minima et maxima des contraintes obtenus à la fin de l'essai. On remarque que les résultats obtenus par les première, deuxième et quatrième lois sont homogènes. L'état de contrainte obtenu à l'aide de la troisième loi, à la fin du chargement, est très dispersé d'un grain à l'autre avec un différentiel de 353 MPa. De plus, le niveau de contraintes le plus élevé est obtenu lors de cette simulation malgré la même courbe de chargement macroscopique. Par contre, les distributions sont relativement similaires.

Lois	Maximum de σ_{11}^{II} (MPa)	Minimum de σ_{11}^{II} (MPa)
1 ^{ère} loi	606	419
2 ^{ème} loi	605	420
3 ^{ème} loi	843	490
4 ^{ème} loi	606	413

Tableau I.4 : maximum et minimum des contraintes d'ordre 2 à la fin de l'essai

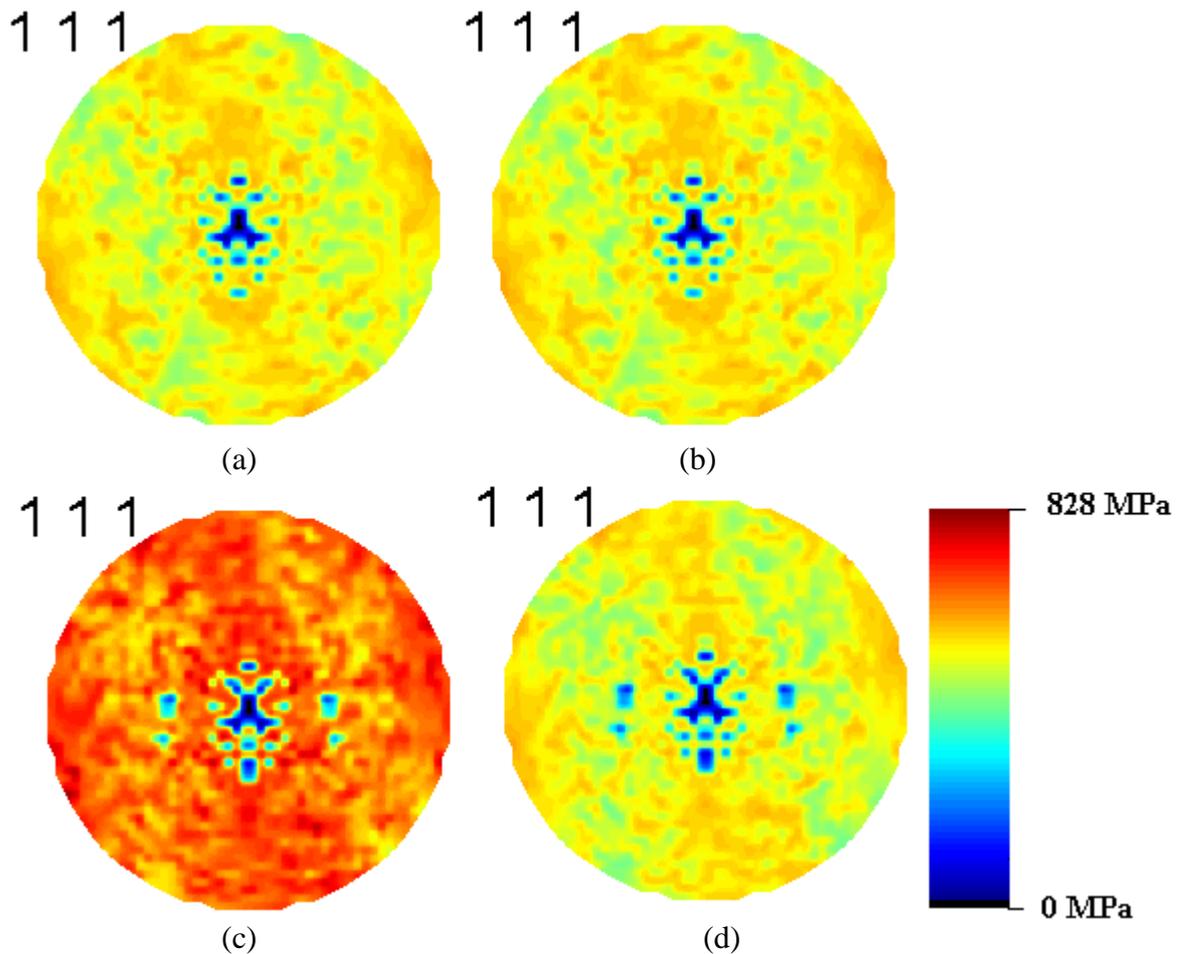


Figure I.28 : figure de pôles de σ_{11} avant décharge : a. 1^{ère} loi, b. 2^{ème} loi, c. 3^{ème} loi, d. 4^{ème} loi

En conclusion, les quatre lois utilisées ne présentent pas de différence significative au vu des résultats obtenus au cours d'un essai de traction sur un aluminium. Seule une hétérogénéité de contraintes plus forte est constatée pour la troisième loi avec des niveaux de contraintes internes plus élevés. Par contre, il est intéressant de voir les conséquences d'une description différente de l'écroutissage lors d'un trajet complexe.

I.3.7.5.3. Chargement complexe

Dans cette partie, nous avons simulé l'effet Bauschinger, présent dans un acier austénitique inoxydable 316L, en utilisant l'approche autocohérente. Les simulations ont été effectuées pour les différentes lois d'écroutissage présentées dans le paragraphe précédent. Elles permettent de tester la capacité du modèle à simuler un chargement complexe (traction-compression). Les résultats de simulations seront comparés avec ceux de l'expérimentation issus des travaux de Choteau et al. [Choteau 99].

Les simulations portent sur un matériau constitué de 1000 cristaux choisis aléatoirement. Ainsi, la texture initiale est supposée isotrope et elle est définie par les angles d'Euler (φ_1 , ϕ_1 , φ_2). Le choix du nombre de cristallites du matériau et de sa texture permet de représenter

l'agrégat polycristallin. La scission critique initiale pour chaque système de glissement et pour chaque cristallite est supposée être la même au départ. La scission réduite est initialement nulle pour chaque système. Les paramètres de simulations ont été déterminés à partir de la courbe expérimentale en traction et ils ont été gardés constants lors de la simulation du deuxième chargement (compression). Les valeurs de ces paramètres sont présentées dans le *tableau I.6*. Les paramètres liés au matériau sont présentés dans le *tableau I.7*. Une valeur arbitraire de 10^9 m^{-2} est choisie pour la densité initiale du matériau étant donné l'absence de données. Les valeurs de L^g et de y_c ont été choisies à partir des données disponibles dans la littérature [Lorrain 05]. La *figure I.29* présente les résultats des simulations ainsi que les données expérimentales. Cette figure confirme la capacité des lois d'écrouissage à reproduire le premier chargement au niveau macroscopique, cette fois pour un acier 316L. Par contre, on observe clairement la faiblesse du modèle pour les quatre lois d'écrouissages : il ne reproduit pas la transition élastoplastique lors du deuxième chargement. Cependant, la troisième loi arrive à prédire l'écrouissage de telle sorte que l'écart relatif est quasiment nul entre 2 % et 0 % de déformation totale. Ceci est probablement dû à une meilleure prise en compte de l'écrouissage intracristallin qui est régi, pour cette loi, par l'évolution de la densité de dislocations moyenne (en tenant compte des phénomènes de création, de stockage et d'annihilation des dislocations) par système de glissement. En revanche, la sous-estimation de l'effet Bauschinger est liée directement à l'hypothèse d'uniformité des champs de contraintes et de déformations au niveau du grain. On trouve alors des contraintes d'ordre deux de faible amplitude qui oscillent autour de zéro à l'équilibre et qui ne permettent pas d'obtenir un début de plastification réaliste. Pour cela, il vaudrait mieux prendre en compte les champs de contrainte profondément hétérogènes au niveau des parois et des cellules de dislocations constituant le grain plastifié. Cet exemple illustre clairement les limites des méthodes d'homogénéisation. La réelle prise en compte de l'arrangement cellulaire de dislocations apparaît alors évident, en vue de décrire le plus finement possible le comportement intracristallin et ses répercussions directes sur le comportement global du matériau.

$H^{(gh)}$	τ_{c0} (MPa)	h_0 (MPa)	α	k	τ_s (MPa)
1 ^{ère} loi	85	235	1,1		
2 ^{ème} loi	85	235	1,1		
3 ^{ème} loi	88		1,1	45	
4 ^{ème} loi	88	250	1,1		200

Tableau I.6 : paramètres d'ajustement pour les différentes lois d'écrouissage

c_{11} (GPa)	c_{12} (GPa)	c_{44} (GPa)	b (m)	ρ_0 (m^{-2})	y_c (m)
105	45	45	$2,86 \cdot 10^{-10}$	10^9	$5,87 \cdot 10^{-10}$

Tableau I.7 : paramètres du matériau

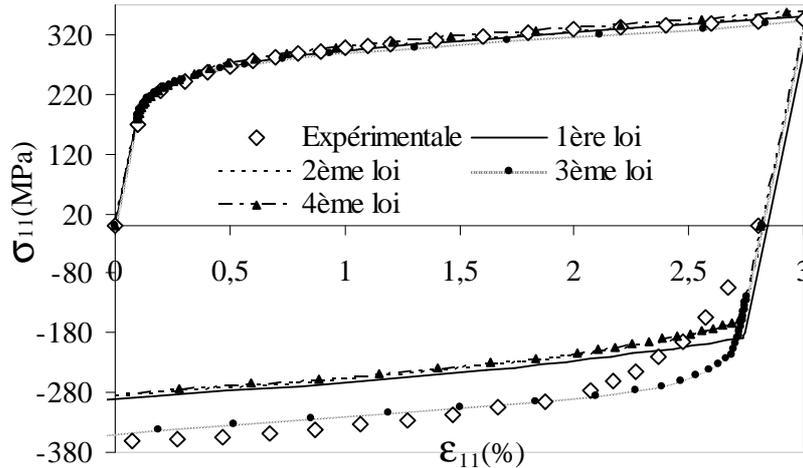


Figure I.29 : comportement macroscopique du 316L en trajet complexe

I.4. Conclusion

Nous avons présenté une étude bibliographique sur les hétérogénéités intragranulaires. D'après cette étude, il ressort que la microstructure de dislocations introduit une anisotropie forte pour les polycristaux et elle apparaît comme un facteur essentiel pour une meilleure compréhension du comportement d'un matériau ayant subi notamment un chargement complexe. Cette microstructure est absente pour un matériau vierge ou recuit. Elle apparaît au début de la déformation plastique en faisant du grain, un milieu biphasé constitué d'une phase dure (paroi) de forte densité de dislocations et une phase molle (cellule) de faible densité de dislocations. Le milieu biphasé engendré est caractérisé par une forme et une orientation qui résultent d'un effet global du chargement sur le polycristal.

Lorsque la déformation plastique augmente, les dislocations se déplacent vers les parois en traversant les cellules. Il apparaît ici la notion d'écrouissage non local, la déformation plastique dans les cellules induisant un durcissement des parois voisines. Si deux dislocations sont très proches, elles commencent à s'annihiler du fait de leurs structures dipolaires. Ainsi, la saturation de la dislocation est assurée en combinant les mécanismes d'accumulation et d'annihilation. Si la déformation plastique continue à augmenter pour un trajet monotone, les parois de dislocations s'amincissent et la taille des cellules diminue. En cas de trajet de Bauschinger ou pour quelques trajets durs, la microstructure de dislocations se dissout pour en reformer une nouvelle ou bien elle est déstabilisée ce qui peut conduire à la formation d'une microbande de cisaillement. Celle-ci peut alors provoquer la localisation de la déformation plastique macroscopique (bande de cisaillement) et conduire à la ruine du matériau.

Dans le cas d'un chargement complexe et en utilisant des lois d'écrouissages simples (les première, deuxième et quatrième lois), le modèle n'arrive pas à prédire l'écrouissage du deuxième chargement et ceci, malgré un taux de prédeformation faible (3 %). Certes, en utilisant une loi d'écrouissage qui tient compte de la microstructure de dislocations, d'une façon phénoménologique, le modèle arrive à mieux simuler l'écrouissage du deuxième chargement. Par contre, la transition élastoplastique est mal reproduite par le modèle avec une surestimation de la limite d'élasticité durant le second chargement. Ceci peut s'expliquer par une mauvaise description des contraintes résiduelles générées lors du premier chargement.

D'après cet exemple, on voit l'intérêt de développer une approche qui permette de traduire ce qui se passe durant la déformation plastique d'une façon plus réaliste en tenant compte de l'hétérogénéité intragranulaire.

La microstructure de dislocations paraît donc importante pour toute modélisation du comportement mécanique des matériaux métalliques. Il semble alors pertinent de choisir comme échelle de départ, non plus le grain, mais cette microstructure. Les approches d'homogénéisation comme le modèle autocohérent permettent de reproduire un grand nombre de résultats expérimentaux (texture, contraintes internes, anisotropie plastique, écrouissage monotone). Ce dernier tient compte, de manière simplifiée, de la microstructure de dislocations d'une façon phénoménologique à travers la matrice d'écrouissage [*Paquin et al. 01*]. Ainsi, il n'est pas capable de décrire, d'une façon plus réaliste, les mécanismes de la déformation plastique et il ignore tout effet explicite d'ordre 3 (au niveau de la microstructure de dislocations). Par conséquent, ce modèle reste faible dans le cas des trajets complexes. Il apparaît nécessaire de décrire de manière plus physique (et donc moins phénoménologique) la transition micro-mésoscopique.

Un des objectifs de cette thèse est de développer une loi de comportement monocristalline qui soit capable de prendre en compte les phénomènes qui ont lieu au niveau du grain et de développer un outil de transition d'échelles pertinent dans le but de prédire un comportement macroscopique réaliste en tenant compte des phénomènes d'interactions entre les grains.

Dans le cadre de ce travail, deux axes d'amélioration des approches d'homogénéisation peuvent se dégager :

- 1) La première amélioration consiste à considérer, en première approximation, le grain comme un matériau biphasé constitué d'une phase dure (les parois) et d'une phase molle (l'intérieure des cellules). Les interactions cellules-parois sont alors prises en compte au travers d'une matrice d'écrouissage non local du fait des différents phénomènes physiques décrits précédemment. De plus, la topologie (forme, orientation) des cellules pourra alors être prise en considération de manière explicite. Le comportement du grain (au travers d'une transition micro-méso) sera alors déterminé par une approche micromécanique à définir (Kröner, Mori-Tanaka, autocohérente) en fonction de la problématique.
- 2) Les approches qui utilisent comme variable la densité de dislocations [*Peeters et al. 02, Estrin et al. 98*] permettent de modéliser très finement les phénomènes physiques de la déformation en prenant en compte la description et l'organisation des dislocations. Les résultats donnés par ce type d'approche sont en bon accord avec ceux de l'expérience. Ce type de lois peut être pris en compte dans des approches à champs moyens comme le modèle autocohérent par une réécriture des lois d'écrouissage au niveau du grain.

Une confrontation ou une utilisation conjointe de ces deux types d'approches serait intéressante pour mieux appréhender et modéliser les mécanismes de déformation présents au sein du matériau. Ceci va amener une étude comparative des modèles de comportement en déterminant les limites de chacun et les adaptations à effectuer.

L'utilisation des modèles de transition d'échelles micro-macro ouvre de nouvelles perspectives pour l'optimisation de la mise en forme des matériaux par la prédiction de leur comportement sous sollicitation. Notre démarche s'appuiera sur l'utilisation combinée et complémentaire de la diffraction des rayons X et des modèles de transition d'échelles couplée à des essais mécaniques pour des trajets de chargement complexe. La diffraction des rayons X permettra de déterminer l'évolution des contraintes résiduelles en fonction du taux de

déformation et donc d'avoir des informations indirectes sur les mécanismes de déformation à l'échelle du volume diffractant. Elle agréera également la validité des simulations numériques et permettra de déterminer les différents paramètres de calculs (scissions critiques, matrice d'écroutissage...). En retour, les simulations permettront d'expliquer et d'interpréter les résultats expérimentaux obtenus. Ces derniers aideront à mettre en évidence l'anisotropie plastique et l'influence de la microstructure de dislocations sur des alliages CFC lors de chargements de type Bauschinger.

Chapitre II : Modélisation élastoplastique du comportement des matériaux cubiques - prise en compte de la microstructure de dislocations

II.1. Introduction

Dans ce chapitre, il s'agira de mettre en place des approches micromécaniques adaptées pour la détermination du comportement élastoplastique des matériaux métalliques en tenant compte des effets de la microstructure de dislocations (*figure II.1*). Elles permettront de mieux rendre compte du comportement réel des matériaux lors de chargements simples et complexes du fait de la prise en compte du phénomène prépondérant de l'hétérogénéisation intragranulaire décrit dans le chapitre précédent.

En se basant sur l'ensemble des résultats présentés dans le chapitre précédent, le modèle micromécanique que nous souhaitons mettre en place devra tenir compte d'un certain nombre de points :

- Pour décrire correctement les effets de la microstructure, l'échelle de départ du modèle doit être celle des **cellules de dislocations** pour pouvoir prédire certaines conséquences à l'échelle macroscopique.
- Le grain est un milieu fortement **hétérogène** (en terme de contrainte, de densité de dislocations, de déformation plastique) qui doit être pris en compte dans le formalisme développé dans le cadre de ce travail.
- La mise en place progressive de la microstructure résulte du stockage des dislocations ayant traversé les cellules. Plus spécifiquement, l'activité plastique dans les cellules entraîne une augmentation de la densité de dislocations dans les murs adjacents (**écrouissage non local**).
- Avec l'activité plastique, la microstructure de dislocations prend une **morphologie** particulière qui va jouer un rôle direct lors du changement de trajets. Cette structuration va contribuer à l'anisotropie du matériau et se superposer à la **texture cristallographique**.

La microstructure de dislocations est considérée comme un matériau biphasé. Les murs aussi appelés parois, à forte densité de dislocations et de fraction volumique f_w (w pour « walls »), constituent une phase dure. L'intérieur des cellules, à faible densité de dislocations et de fraction volumique $f_c=1-f_w$ (c pour « cells »), constitue une phase molle [David *et al.* 97] du point de vue mécanique. Dans ce chapitre, nous allons d'abord décrire la loi de comportement pour le milieu composite considéré en tenant compte des différents points abordés plus haut. Ensuite, pour la détermination du comportement global du grain, il est nécessaire d'effectuer une transition d'échelle (**micro-mésoscopique**). A cet effet, plusieurs formalismes sont proposés : modèle de Kröner, modèle de Mori-Tanaka et le schéma autocohérent. La transition d'échelle du grain au polycristal (**méso-macroscopique**) est ensuite mise en œuvre par l'intermédiaire du modèle classique autocohérent (*figure II.1*).

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous présenterons une autre approche élaborée à partir des observations expérimentales pour décrire, avec plus de détails, l'évolution de la microstructure de dislocations. Ce modèle a été proposé initialement par Peeters *et al.* [Peeters *et al.* 02] dans le cadre de matériaux cubiques centrés (CC). Il permet une description fine de l'organisation des dislocations lors de la plasticité (cf. *chapitre I*). Dans le cadre de ce travail, il a été utilisé pour des matériaux cubiques à faces centrées (CFC). Cette approche permettra l'écriture d'une nouvelle loi au niveau du grain puis le lien avec l'échelle macroscopique sera établi à l'aide de la méthode autocohérente.

Différents résultats numériques seront présentés afin d'étudier les principaux résultats de ces modèles. De plus, une étude paramétrique, pour évaluer les effets des différents mécanismes introduits dans ces approches, sera également entreprise.

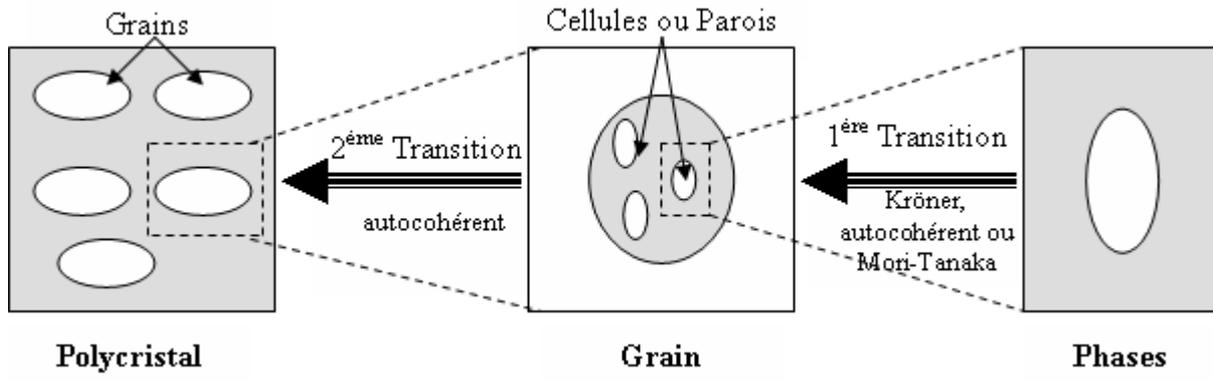


Figure II.1 : schématisation de l'approche à double transitions d'échelles

II.2. Modèle Kröner-Autocoherent

II.2.1. Transition d'échelle micro-mésoscopique

II.2.1.1. Expression des déformations des cellules et des parois

Cette partie présente la loi de comportement cristalline développée pour décrire le comportement du grain. On considère un matériau métallique de structure cubique. Le grain est considéré comme un milieu biphasé : une phase dure (les murs avec une forte densité de dislocations) et une autre molle (l'intérieur des cellules avec une faible densité de dislocations) (*figure II.2*). L'utilisation de l'approche de Kröner permet, en tenant compte des interactions entre les cellules et les parois, de simplifier dans un premier temps les équations constitutives du modèle. De plus, ce premier modèle permettra d'obtenir des premiers résultats numériques exploitables et cohérents avec la réalité physique de la plasticité intragranulaire.

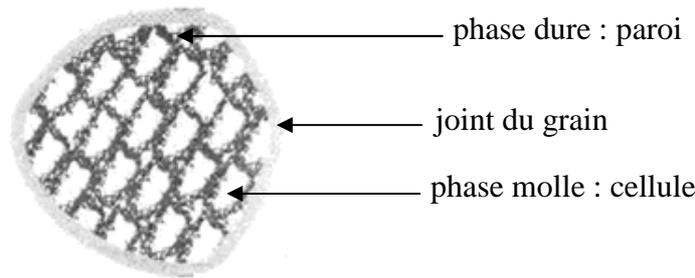


Figure II.2 : présentation des parois et des cellules d'un grain (milieu biphasé)

Etant donné la forte différence d'activité dans les deux phases considérées, on peut représenter le champ de contrainte ou de déformation par un champ uniforme par morceau. Dans chaque phase, les grandeurs considérées sont donc remplacées par leurs valeurs volumiques moyennes. A l'échelle du grain, la déformation plastique et la rotation plastique correspondante pour chaque phase sont alors :

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_{kl}^{pc} = R_{kl}^h \dot{\gamma}_c^h \\ \dot{\epsilon}_{kl}^{pw} = R_{kl}^h \dot{\gamma}_w^h \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

$$\begin{cases} \dot{\omega}_{kl}^{pc} = Q_{kl}^h \dot{\gamma}_c^h \\ \dot{\omega}_{kl}^{pw} = Q_{kl}^h \dot{\gamma}_w^h \end{cases} \quad (\text{II.2})$$

L'indice h fait référence à un système de glissement. $\dot{\gamma}_\alpha^h$ indique la vitesse de glissement (moyenne et uniforme) de la phase α (w, c) sur ce système. R^h est le tenseur de Schmid représentant la déformation causée par un glissement unité sur le système h . Ce tenseur caractérise l'anisotropie géométrique de l'écoulement plastique. Q^h est un tenseur antisymétrique décrivant la rotation totale pour un glissement unité. Ces deux tenseurs sont supposés uniformes sur tout le grain. On ne considère donc pas la désorientation entre les cellules et les parois.

Si l'élasticité est supposée homogène et isotrope dans le composite et si elle est représentée par le tenseur d'élasticité c alors la déformation plastique des grains ϵ^{pII} est définie par la moyenne pondérée des déformations des cellules ϵ^{pc} et des parois ϵ^{pw} (déformation d'ordre trois) :

$$\dot{\epsilon}^{pl} = f_w \dot{\epsilon}^{pw} + f_c \dot{\epsilon}^{pc} \quad (\text{II.3})$$

Avec : $f_w = 1 - f$ (fraction volumique des parois) et $f_c = f$ (fraction volumique des cellules).

On rappelle la loi de Hooke qui lie la partie élastique du tenseur de la vitesse de déformation mésoscopique et le taux de contrainte correspondant :

$$\dot{\epsilon}^{el} = s : \dot{\sigma}^{el} \quad (\text{II.4})$$

s est le tenseur de souplesse.

La loi de Hooke adaptée à un milieu biphasé est donnée par :

$$\dot{\epsilon}^{ec} = s : \dot{\sigma}^c \quad (\text{II.5})$$

$$\dot{\epsilon}^{ew} = s : \dot{\sigma}^w \quad (\text{II.6})$$

où $\dot{\sigma}^\alpha$ est le taux de contrainte dans la phase α (w, c).

II.2.1.2. Evolution de la densité de dislocations

Le principal mécanisme responsable de l'écroutissage met en jeu les dislocations. Lors du chargement, l'évolution des densités de dislocations ρ_α^g est liée principalement à deux phénomènes : le stockage et l'annihilation des dislocations dans les parois. Les dislocations sont d'abord créées à l'intérieur des cellules et / ou parois puis stockées ($\dot{\rho}_w^{g+}$) au niveau des parois opposées après un déplacement à l'intérieur des cellules avec une vitesse variable (*figure I.6*) : lorsque les dislocations deviennent de plus en plus nombreuses, elles ont tendance à s'annihiler ($\dot{\rho}_w^{g-}$) suivant une distance critique entre deux dislocations (distance caractéristique d'annihilation des dislocations).

Dans la modélisation des hétérogénéités intragranulaires, nous ne distinguerons pas, pour une première approche, les différents types de dislocations rencontrées dans les matériaux métalliques. L'évolution et la quantité des dislocations à l'intérieur des cellules sont très faibles par rapport à celle des dislocations présentes dans les parois [Mughrabi 83]. Le taux de dislocations stockées dans les parois peut alors être donné par [Essmann et Mughrabi 79] :

$$\dot{\rho}_w^{g+} = \frac{1}{bL^{(g)}} \dot{\gamma}_c^g \quad (\text{II.7})$$

où b représente la norme du vecteur de Burgers du matériau. Physiquement, elle représente la déformation du réseau cristallin. $L^{(g)}$ désigne le libre parcours moyen des dislocations dans les cellules sur le système g . Il dépend aussi de la force des obstacles et de la densité de dislocations. Alors :

$$L^g = \frac{k_L}{\sqrt{\sum_{l \neq g} \rho_w^l}} \quad (\text{II.8})$$

où k_L est un paramètre du matériau associé à la distribution des dislocations. Le phénomène d'annihilation qui tient compte du réarrangement des dislocations pendant la déformation est exprimé par :

$$\dot{\rho}_w^{g-} = -\frac{2y_c}{b} \rho_w^g \dot{\gamma}_w^g \quad (\text{II.9})$$

où y_c désigne la distance caractéristique d'annihilation des dislocations. Par conséquent, l'évolution de la densité de dislocations dans les parois est définie par (pas de sommation sur g) :

$$\dot{\rho}_w^g = \dot{\rho}_w^{g+} + \dot{\rho}_w^{g-} \quad (\text{II.10})$$

II.2.1.3. Écrouissage

Lors d'une déformation plastique, les dislocations se déplacent vers les parois et par conséquent leur densité augmente. Les parois deviennent, ainsi, de plus en plus rigides et leur limite élastique sera plus élevée que celle des cellules. Ce phénomène de durcissement d'une région provoqué par la déformation plastique d'une autre région s'appelle l'écrouissage non local. Cette notion a été introduite par Muller et al. [Muller et al. 94, Muller 94]. Si on considère le grain comme un milieu homogène, l'évolution du taux de scission critique sur un système g est donnée en tout point r par (cf. chapitre I) :

$$\dot{\tau}_c^g(r) = \sum_{s=1}^n H^{gs}(r) \dot{\gamma}^s(r) \quad (\text{II.11})$$

Cette relation ne permet pas de décrire le durcissement des parois provoqué par le mouvement des dislocations dans les cellules. Il faudrait introduire l'aspect non-local de l'écrouissage pour tenir compte de l'évolution du taux de scission critique en un point r provoqué par le glissement plastique $\dot{\gamma}^h(r')$ en un autre point r' . L'équation précédente s'écrit alors [Muller 94] :

$$\dot{\tau}_c^g(r) = \int_V H^{gs}(r, r') \dot{\gamma}^s(r') dV' \quad (\text{II.12})$$

V est le volume du grain et H , la matrice d'écrouissage non-locale. La microstructure peut être considérée comme un composite biphasé. Si on fait l'hypothèse simplificatrice de remplacer $\dot{\gamma}^h(r)$ et $\dot{\tau}_c^g(r)$ par leur valeur moyenne (hypothèse d'uniformité par morceau), l'évolution du taux de scission critique pour chaque phase $\alpha (= c, w)$ est alors donnée par :

$$\dot{\tau}_{c\alpha}^g = \frac{1}{V^\alpha} \left(\int_{V^\alpha} \int_{V^c} H^{gs}(r, r') dV' dV \right) \dot{\gamma}_c^s + \frac{1}{V^\alpha} \left(\int_{V^\alpha} \int_{V^w} H^{gs}(r, r') dV' dV \right) \dot{\gamma}_w^s \quad (\text{II.13})$$

Soit de manière plus condensée :

$$\dot{\tau}_{cc}^g = \sum_h H_{cc}^{gh} \dot{\gamma}_c^h + \sum_h H_{cw}^{gh} \dot{\gamma}_w^h \quad (\text{II.14})$$

$$\dot{\tau}_{cw}^g = \sum_h H_{wc}^{gh} \dot{\gamma}_c^h + \sum_h H_{ww}^{gh} \dot{\gamma}_w^h \quad (\text{II.15})$$

H_{cc}^{gh} et H_{ww}^{gh} traduisent l'influence locale du système h sur le système g de la même phase. H_{wc}^{gh} et H_{cw}^{gh} désignent l'aspect non local de l'écroutissage et l'influence d'une phase sur l'autre. La figure II.3 présente une schématisation de l'écroutissage non local.

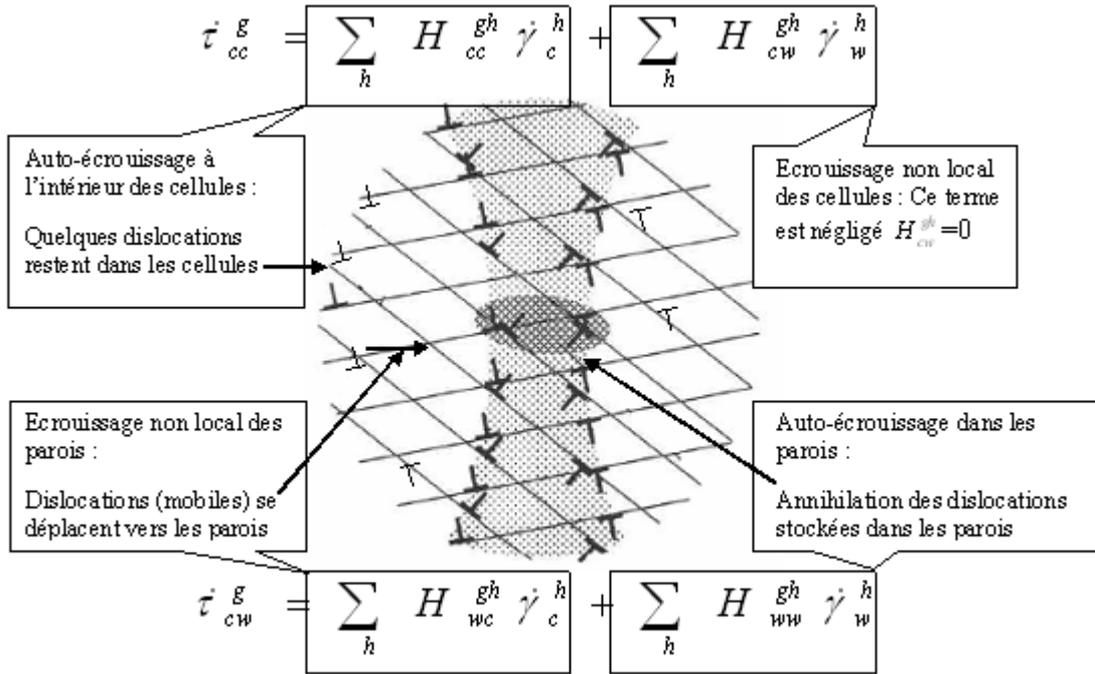


Figure II.3 : schéma des différents mécanismes d'écroutissage

Il reste maintenant à exprimer ces matrices en fonction de paramètres physiques liés au concept de dislocations. La scission critique pour chaque système et pour chaque phase ($\tau_{c\alpha}^g$) est obtenue à l'aide de la densité de dislocations et de la matrice décrivant l'anisotropie des interactions entre les systèmes de glissement g et h (a^{gh}) par [Franciosi 85] :

$$\tau_{c\alpha}^g = \tau_{c0\alpha}^g + \xi \mu b \sqrt{\sum_h a^{gh} \rho_w^h} \quad (\text{II.16})$$

où $\tau_{c0\alpha}^g$ est la scission critique initiale de la phase, ξ est une constante qui dépend des interactions élastiques entre dislocations. μ représente le module de cisaillement du matériau. En développant l'équation II.16, on a :

$$\left(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g\right)^2 = \xi^2 \mu^2 b^2 \sum_h a^{gh} \rho_w^h \quad (\text{II.17})$$

$$2\dot{\tau}_{c\alpha}^g \left(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g\right) = \xi^2 \mu^2 b^2 \sum_h a^{gh} \dot{\rho}_w^h \quad (\text{II.18})$$

or :

$$\dot{\rho}_w^h = \frac{1}{bL^h} \dot{\gamma}_c^h - \frac{2y_c}{b} \rho_w^h \dot{\gamma}_w^h \quad (\text{II.19})$$

Alors :

$$\dot{\tau}_{c\alpha}^g = \frac{\xi^2 \mu^2 b}{2(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g)} \frac{a^{gh}}{L^h} \dot{\gamma}_c^h - \frac{y_c \xi^2 \mu^2 b}{(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g)} a^{gh} \rho_w^h \dot{\gamma}_w^h \quad (\text{II.20})$$

On en déduit la relation suivante :

$$\dot{\tau}_{c\alpha}^g = \frac{\xi \mu}{2 \sqrt{\sum_h a^{gh} \rho_w^h}} \frac{a^{gh}}{L^h} \dot{\gamma}_c^h - \frac{y_c \xi \mu}{\sqrt{\sum_h a^{gh} \rho_w^h}} a^{gh} \rho_w^h \dot{\gamma}_w^h \quad (\text{II.21})$$

En comparant entre elles, les équations II.14, II.15 et II.21, on trouve ainsi les expressions des H_{wc}^{gh} et H_{ww}^{gh} sous les formes :

$$H_{wc}^{gh} = \frac{\xi^2 \mu^2 b}{2(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g)} \frac{a^{gh}}{L^h} \quad (\text{II.22})$$

$$H_{ww}^{gh} = -\frac{y_c \xi^2 \mu^2 b}{(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g)} \rho_w^h a^{gh} \quad (\text{II.23})$$

Schmitt et al. [Schmitt 86, Fernandes et Schmitt 83] ont observé, sur un acier doux, que l'épaisseur des parois et la taille des cellules diminuent avec la déformation plastique. Il attribue ce phénomène à la création, au cours du chargement, de nouveaux murs de dislocations au sein même de la microstructure déjà existante. Entre autre, la densité de dislocations dans les cellules reste faible par rapport à celle au niveau des parois [Mughrabi 83]. Par conséquent, le stockage des dislocations dans les cellules reste faible du fait du nombre peu élevé d'obstacles présents. Ainsi, il apparaît raisonnable de choisir une valeur faible pour H_{cc}^{gh} , ce qui traduit la faible augmentation de la densité de dislocations dans les cellules et une valeur nulle pour H_{cw}^{gh} pour négliger les effets non locaux des parois sur les cellules. Alors, on peut écrire les matrices H_{cc}^{gh} et H_{cw}^{gh} sous la forme empirique :

$$H_{cc}^{gh} = \frac{\zeta}{\tau_{cc}^g - \tau_{c0c}^g} a^{gh} \quad (\text{II.24})$$

$$H_{cw}^{gh} = 0 \quad (\text{II.25})$$

où ζ est une constante.

II.2.1.4. Loi de comportement non local pour le monocristal

Kröner [Kröner 61] s'est basé sur les travaux d'Eshelby [Eshelby 57] pour déterminer les contraintes internes d'une inclusion plongée dans une matrice de mêmes propriétés élastiques homogènes c . Il a considéré une inclusion ellipsoïdale, dans laquelle réside une déformation plastique uniforme ε^{lp} noyée dans une matrice infinie isotrope. Cette méthode consiste à considérer un grain particulier comme une inclusion et à étudier les interactions entre ce grain et

la matrice infinie, homogène et continue, formée par tous les autres grains, et qui aurait subi uniformément une déformation plastique donnée ε^{lp} . Les contraintes dans l'inclusion sont :

$$\sigma^II = c : (I - s^{esh}) : (\varepsilon^{lp} - \varepsilon^{IIp}) \quad (\text{II.26})$$

s^{esh} est le tenseur d'Eshelby dépendant de la géométrie de l'inclusion et I désigne le tenseur identité d'ordre 4. Dans cette approche, les incompatibilités de la déformation plastique sont accommodées par des déformations additionnelles purement élastiques dans la matrice. Ce modèle surestime donc les contraintes internes car l'accommodation doit être élastoplastique.

Ce modèle peut être généralisé au cas biphasé afin de décrire la microstructure de dislocations. Dans le cas d'une élasticité isotrope, les relations de moyenne sur les déformations et les contraintes peuvent s'écrire :

$$\varepsilon^II = (1 - f)\varepsilon^w + f\varepsilon^c \quad (\text{II.27})$$

$$\sigma^II = (1 - f)\sigma^w + f\sigma^c \quad (\text{II.28})$$

$$\varepsilon^{pII} = (1 - f)\varepsilon^{pw} + f\varepsilon^{pc} \quad (\text{II.29})$$

La contrainte dans une phase α donnée dans le cas d'un matériau composite s'écrit :

$$\sigma^\alpha = \sigma^II + c : (I - s^{esh}) : (\varepsilon^p - \varepsilon^{p\alpha}) \quad (\text{II.30})$$

A partir des relations précédentes, les contraintes dans chaque phase s'expriment alors de la façon suivante :

$$\sigma^w = \sigma^II + a^w : (\varepsilon^{pw} - \varepsilon^{pc}) \quad (\text{II.31})$$

$$\sigma^c = \sigma^II + a^c : (\varepsilon^{pw} - \varepsilon^{pc}) \quad (\text{II.32})$$

où a^α sont les tenseurs de localisation donnés par :

$$a^c = \alpha_T (1 - f) c : (I - s^{esh}) \quad (\text{II.33})$$

$$a^w = -\alpha_T f c : (I - s^{esh}) \quad (\text{II.34})$$

α_T est un facteur d'accommodation [Berveiller et Zaoui 79]. Il a été introduit par Berveiller et Zaoui afin d'assurer, de manière approximative, l'accommodation plastique autour de l'inclusion (cellule ou paroi). Ce facteur est supposé, par souci de simplicité, indépendant de la plasticité et sa valeur est fixée à 1/10 [Beradai et al. 87] pour avoir des niveaux de contraintes réalistes. Par la suite, ce facteur d'accommodation sera omis pour alléger l'écriture des équations. D'après les équations II.31 et II.32, on constate que les contraintes dans les phases dépendent de l'état de contrainte du grain (σ^II), de la géométrie de l'inclusion et de l'état de déformation des phases ($\varepsilon^{pw} - \varepsilon^{pc}$). Ce dernier terme montre clairement l'influence d'une phase sur l'autre. Par exemple, l'état de contrainte dans les cellules va dépendre non seulement de la déformation plastique locale ε^{pc} , mais aussi de ε^{pw} , déformation plastique induite dans les parois, soit dans

une autre partie du composite. En conséquence, on observe un écrouissage non local au niveau des contraintes internes.

La projection du taux des contraintes dans les phases sur les systèmes de glissement définit la scission réduite de chaque phase de la façon suivante :

$$\dot{\tau}_c^g = R^g : \dot{\sigma}^c \quad (\text{II.35})$$

$$\dot{\tau}_w^g = R^g : \dot{\sigma}^w \quad (\text{II.36})$$

II.2.1.5. Taux de glissement

L'activation des systèmes de glissement peut se faire à l'aide des conditions de Schmid : un système de glissement est actif si sa scission réduite pour une phase α (τ_α) atteint la scission critique de la même phase ($\tau_{c\alpha}$) et le taux de scission réduite est égal au taux de scission critique.

A l'aide de la loi d'érouissage (*relations II.14 et II.15*) et des critères de Schmid, on peut écrire les critères d'écoulement plastique sous la forme :

$$\triangleright \quad \dot{\gamma}_\alpha^g = 0 \text{ si } \tau_\alpha^g < \tau_{c\alpha}^g \quad (\text{II.37})$$

$$\triangleright \quad \dot{\gamma}_\alpha^g = 0 \text{ si } \tau_\alpha^g = \tau_{c\alpha}^g \text{ et } \dot{\tau}_\alpha^g < \dot{\tau}_{c\alpha}^g \quad (\text{II.38})$$

$$\triangleright \quad \dot{\gamma}_\alpha^g = 0 \text{ si } \tau_\alpha^g = \tau_{c\alpha}^g \text{ et } \dot{\tau}_\alpha^g = \dot{\tau}_{c\alpha}^g \quad (\text{II.39})$$

Il faut alors trouver la bonne combinaison sur 48 (24+24 en considérant les deux sens de glissement et les deux phases) systèmes simultanément pour un CFC sachant que les activités plastiques des deux phases sont corrélées du fait de l'érouissage non local. Pour optimiser le temps de calcul, on utilise ici la formulation développée par Ben Zeneb et al. [*Ben Zeneb et al. 01*] donnée par la *relation I.20* et étendue à un milieu biphasé :

$$\dot{\gamma}_\alpha^g = K_\alpha^g (\tau_{c\alpha}^g, \tau_\alpha^g) \dot{\tau}_\alpha^g \quad (\text{II.40})$$

Les expressions des fonctions K_α^g dans le cas de deux phases sont de la forme :

$$K_\alpha^g = \frac{1}{H_{\alpha\alpha}^{gg}} \left[\frac{1}{2} (1 + \tanh(\tau_\alpha^g)) \right] \left[\frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(k \left(\frac{\tau_\alpha^g}{\tau_{c\alpha}^g} - 1 \right) \right) \right) \right] \left[\frac{1}{2} (1 + \tanh(\dot{\tau}_\alpha^g)) \right] \quad (\text{II.41})$$

où k est un paramètre purement numérique. L'érouissage non local est pris en compte implicitement au travers des scissions critiques et de leurs taux correspondants. Nous supposons que l'expression II.41 choisie pour les fonctions K_α^g vérifie les conditions présentées dans le *paragraphe I.3.7.2.2*.

En combinant les *relations II.1 et II.28-II.41* entre elles, les taux d'activité pour chaque phase se réécrivent :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}_c^g = K_c^g \sum_{ij} R_{ij}^{cg} \dot{\sigma}_{ij}^{II} + K_c^g R_{ij}^{cg} a_{ijkl}^c \left(\sum_h R_{kl}^{wh} \dot{\gamma}_w^h - \sum_h R_{kl}^{ch} \dot{\gamma}_c^h \right) \\ \dot{\gamma}_w^g = K_w^g \sum_{ij} R_{ij}^{wg} \dot{\sigma}_{ij}^{II} + K_w^g R_{ij}^{wg} a_{ijkl}^w \left(\sum_h R_{kl}^{wh} \dot{\gamma}_w^h - \sum_h R_{kl}^{ch} \dot{\gamma}_c^h \right) \end{cases} \quad (\text{II.42})$$

En développant la relation II.42, on trouve :

$$\begin{cases} \left(\delta_{gh} + K_c^g R_{ij}^{cg} a_{ijkl}^c \sum_h R_{kl}^{ch} \right) \dot{\gamma}_c^h - K_c^g R_{ij}^{cg} a_{ijkl}^c \sum_h R_{kl}^{wh} \dot{\gamma}_w^h = K_c^g R_{ij}^{cg} \dot{\sigma}_{ij}^{II} \\ K_w^g R_{ij}^{wg} a_{ijkl}^w \sum_h R_{kl}^{ch} \dot{\gamma}_c^h + \left(\delta_{gh} - K_w^g R_{ij}^{wg} a_{ijkl}^w \sum_h R_{kl}^{wh} \right) \dot{\gamma}_w^h = K_w^g R_{ij}^{wg} \dot{\sigma}_{ij}^{II} \end{cases} \quad (\text{II.43})$$

δ_{gh} est le symbole de Kronecker. h et g varient de 1 à 24 pour une structure CFC et de 1 à 48 pour une structure CC.

L'équation II.43 peut se mettre sous une forme matricielle par blocs :

$$\begin{bmatrix} \delta_{gh} + K_c^g R_{ij}^{cg} a_{ijkl}^c \sum_h R_{kl}^{ch} & -K_c^g R_{ij}^{cg} a_{ijkl}^c \sum_h R_{kl}^{wh} \\ K_w^g R_{ij}^{wg} a_{ijkl}^w \sum_h R_{kl}^{ch} & \delta_{gh} - K_w^g R_{ij}^{wg} a_{ijkl}^w \sum_h R_{kl}^{wh} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\gamma}_c^h \\ \dot{\gamma}_w^h \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} K_c^g R_{ij}^{cg} \dot{\sigma}_{ij}^{II} \\ K_w^g R_{ij}^{wg} \dot{\sigma}_{ij}^{II} \end{Bmatrix} \quad (\text{II.44})$$

Ainsi, le taux d'activité des phases est donné par (quand l'inversion est possible) :

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_c^g \\ \dot{\gamma}_w^g \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} K_c^h R^{ch} : \dot{\sigma}^{II} \\ K_w^h R^{wh} : \dot{\sigma}^{II} \end{pmatrix} \quad (\text{II.45})$$

avec :

$$\begin{bmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{gh} + K_c^g R_c^g : a^c : R_c^h & -K_c^g R_c^g : a^c : R_w^h \\ K_w^g R_w^g : a^w : R_c^h & \delta_{gh} - K_w^g R_w^g : a^w : R_w^h \end{bmatrix}^{-1} \quad (\text{II.46})$$

En développant l'équation II.45, on peut trouver une expression condensée du taux de glissement sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}_c^g = T_c^g : \dot{\sigma}^{II} \\ \dot{\gamma}_w^g = T_w^g : \dot{\sigma}^{II} \end{cases} \quad (\text{II.47})$$

II.2.1.6. Contraintes d'ordre deux

Le taux de déformation au niveau des grains est décomposé en une partie élastique et une partie plastique :

$$\dot{\epsilon}^{II} = \dot{\epsilon}^{eII} + \dot{\epsilon}^{pII} \quad (\text{II.48})$$

Si l'élasticité est uniforme dans le grain de module c , on écrit $\dot{\epsilon}^{pl}$ de la façon suivante :

$$\dot{\epsilon}^{pl} = f\dot{\epsilon}^{pc} + (1-f)\dot{\epsilon}^{pw} \quad (\text{II.49})$$

En utilisant les relations II.1, II.47-II.49, on trouve :

$$\dot{\epsilon}^{II} = \left[s + \sum_g \left(fR_c^g : T_c^g + (1-f)R_w^g : T_w^g \right) \right] : \dot{\sigma}^{II} = l^{-1} : \dot{\sigma}^{II} \quad (\text{II.50})$$

Finalement, les modules élastoplastiques tangents mésoscopiques sont donnés par :

$$l^{-1} = \left[s + fR_c^g : T_c^g + (1-f)R_w^g : T_w^g \right] \quad (\text{II.51})$$

Cette équation II.51 nous permet donc d'avoir le comportement élastoplastique supposé local en moyenne au niveau du grain à partir des caractéristiques non locales au niveau des cellules et parois de dislocations. Cette loi permet de lier le taux de déformation des grains au taux de contrainte correspondant. Elle dépend des systèmes de glissement actifs, des propriétés élastiques, de l'état mécanique dans les phases et de la morphologie de la microstructure à travers le tenseur d'Eshelby.

II.2.1.7. Fraction volumique

La détermination de l'état mécanique du composite biphasé nécessite l'introduction d'une loi d'évolution de la fraction de zone dure f_w . Certains auteurs [Estrin et al. 98] ont proposé des expressions phénoménologiques de f_w dépendant de la déformation du système de glissement considéré. Durant la plasticité, on considère que la fraction volumique f des cellules pour un grain I donné évolue en fonction du glissement accumulé γ_{cl}^{acc} à travers la relation empirique suivante [Gloaguen et François 06, Toth 05, Estrin et al. 98] :

$$f = f(I) = f_\infty + (f_0 - f_\infty) e^{\left(\frac{\gamma_{cl}^{acc}}{\gamma^{par}} \right)} \quad (\text{II.52})$$

où f_0 est la fraction volumique initiale et f_∞ la valeur de saturation à grande déformation. γ^{par} est un paramètre qui définit la vitesse de diminution de f . γ_{cl}^{acc} représente le glissement accumulé dans le grain I . Cette relation permet, de plus, de prendre en compte l'hétérogénéité intergranulaire. En fonction de l'orientation cristallographique, la fraction volumique des cellules pour chaque cristallite évolue différemment suivant l'activité plastique. Cette relation permettra de reproduire, de manière qualitative, l'évolution de la fraction volumique des parois avec la déformation plastique. Une approche plus quantitative nécessiterait un développement qui sort de ce présent travail. Par exemple, Gaudin [Gaudin 02] a mesuré expérimentalement la fraction volumique de la zone dure (paroi) f_w d'un matériau austénitique inoxydable AISI 316L. Il a déterminé cette fraction volumique moyenne par grain à partir des clichés de MET pour différents niveaux de déformation plastique. Sur la figure II.4 est présentée l'évolution de cette fraction en fonction de $\frac{\tau - \tau_0}{\mu}$ pour différents métaux, où τ_0 la contrainte de cisaillement initiale.

La fraction volumique, pour l'acier, augmente (durcissement) en stade II jusqu'à la saturation puis elle diminue en stade III (adoucissement).

Finalement, afin d'obtenir des résultats exploitables mais cohérents avec la réalité physique de la microstructure de dislocations, nous nous baserons sur un ensemble de travaux expérimentaux antérieurs pour déterminer les paramètres de l'équation II.52.

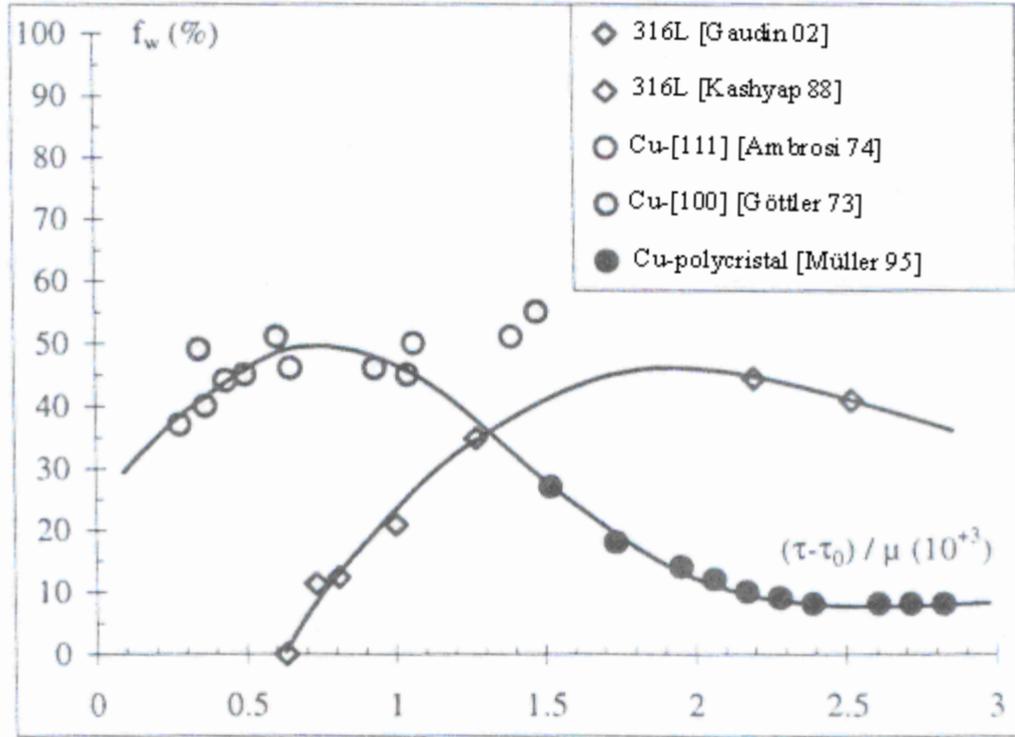


Figure II.4 : évolution de la fraction volumique des parois f_w dans différents matériaux [Gaudin 02]

II.2.1.8. Réorientation des grains

Toute modélisation du comportement polycristallin doit considérer l'état initial de la texture et en donner une représentation réaliste. Le modèle que nous avons choisi permet de considérer un nombre donné d'orientations, avec leur fraction volumique associée. Nous avons créé un pseudo-matériau de N grains. Chaque grain est pondéré par la valeur de la FDO correspondant à son orientation. L'orientation des grains se fait par le biais des angles d'Euler (notation de Bunge) φ_1, φ_2 tels que $\varphi_1 \in [0, 2\pi], \varphi_2 \in [0, 2\pi]$. La matrice de passage P qui permet de mettre en coïncidence le repère du cristal avec celui de l'échantillon s'écrit de la manière suivante :

$$P = \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi & \sin \varphi_2 \sin \phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi & \cos \varphi_2 \sin \phi \\ \sin \varphi_1 \cos \phi & -\cos \varphi_1 \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \quad (\text{II.53})$$

L'orientation du réseau cristallin est induite par la vitesse de rotation élastique supposée uniforme dans le grain. Pour pouvoir calculer, à chaque incrément de déformation macroscopique imposé, la réorientation de chaque cristallite due à la plasticité, nous avons utilisé dans le cadre de ce travail l'approche proposée par Lebenhson [Lebenhson 93]. Cette approche

permet de réactualiser pour chaque incrément la matrice de passage R de chaque cristallite en fonction des taux de rotation et de suivre la texture induite par le chargement plastique. Cette texture va contribuer à l'anisotropie du comportement élastoplastique du polycristal.

II.2.2. Transition d'échelle méso-macro

Dans la partie précédente nous avons développé une approche pour décrire le comportement du grain en utilisant le modèle Kröner et en tenant compte de la microstructure de dislocations et des effets non locaux au niveau des cellules. Une autre transition vers l'échelle macroscopique permettra d'analyser l'influence des hétérogénéités intragranulaires sur le comportement global du matériau. Un schéma autocohérent à un site classique est alors utilisé pour effectuer la transition depuis l'échelle mésoscopique (grain) jusqu'au niveau du polycristal (macroscopique). L'ajout principal est la loi de comportement mésoscopique résultant des propriétés non locales de la structure cellulaire permettant d'accéder aux grandeurs aux trois échelles du matériau. Les principales équations sont données dans la *partie I.3.7.4*. Pour plus de détails, le lecteur pourra se référer à [Mabally 96, Lipinski et al. 90, Lipinski et Berveiller 89].

II.2.3. Décharge élastique

Par soucis de simplification, dans le cadre d'une première approche, nous supposons que la décharge est purement élastique sans écoulement plastique.

Lors d'une décharge après un trajet de chargement ayant conduit à des déformations plastiques, il existe un champ de contraintes internes en équilibre appelées contraintes résiduelles. Nous considérons le cas d'une décharge sans écoulement plastique. La contrainte dans chaque grain après décharge s'écrit :

$$\sigma_0'' = \sigma'' - c : [I + T_e : (c - C)]^{-1} : C^{-1} : \sigma^I \quad (\text{II.54})$$

- c représente le tenseur de rigidité du monocristal, qui dépend de l'orientation du grain.
- C est le tenseur d'élasticité macroscopique du matériau.
- σ_0'' désigne les contraintes internes dans un grain après décharge.
- σ'' représente les contraintes dans un grain sous la charge σ^I après le chargement imposé.
- $c : [I + T_e : (c - C)]^{-1} : C^{-1} : \sigma^I$ correspond aux contraintes dans un grain dues à la contrainte macroscopique et à l'hétérogénéité de comportement élastique à travers le terme $(c - C)$.
- Le terme T_e est calculé pour un comportement élastique de la matrice défini par le tenseur C (et non plus le tenseur L).
- Pour un matériau élastiquement isotrope ($c = C$), on a simplement :

$$\sigma_0'' = \sigma'' - \sigma^I \quad (\text{II.55})$$

- Les contraintes dans chaque phase après décharge s'écrivent :

$$\sigma_0^\alpha = \sigma^\alpha - c : [I + T_e : (c - C)]^{-1} : C^{-1} : \sigma^I \quad (\text{II.56})$$

II.2.4. Résultats numériques

Dans la partie précédente, une première approche a été mise en place à partir d'une description simplifiée du fait de la complexité des phénomènes physiques présents. Le but de ce modèle est de pouvoir reproduire le comportement mécanique d'un matériau cubique soumis à un chargement cyclique en tenant compte de grandeurs microstructurales. Pour ce faire, cette partie présente des résultats obtenus d'après le modèle développé précédemment dans le cas de chargements simples et complexes. De plus, une étude paramétrique, destinée à connaître l'influence des principaux paramètres du modèle sur le comportement global, a également été effectuée. Elle détermine l'influence de :

- La scission critique initiale.
- La densité de dislocation initiale.
- La fraction volumique initiale.
- Le coefficient d'érouissage local.
- Les paramètres de la fonction $K_{\alpha\beta}^g$.
- Le libre parcours moyen.
- La distance d'annihilation.
- La morphologie des phases.
- La texture cristallographique.

Cette étude nous permettra de dégager une première tendance sur le choix des paramètres à utiliser dans le cadre d'une comparaison avec nos résultats expérimentaux (cf. *chapitre IV*). De plus, les modèles développés par la suite font appel au même jeu de paramètres. Les observations faites pourront être utilisées pour ces approches.

Les résultats numériques présentés sont obtenus suite à un essai de type Baushinger : traction - compression. Nous considérons un polycristal modèle en acier austénitique inoxydable AISI 316L, de structure CFC, composé de 100 cristallites avec une texture initiale isotrope. Ce nombre de cristallites est capable de représenter le comportement macroscopique d'un agrégat polycristallin [Gloaguen et François 06, Lemoine 95] pour ce type de texture. A l'état initial, les cristallites possèdent toutes la même forme sphérique et leurs orientations sont choisies de manière aléatoire. Les scissions critiques initiales de la phase molle (cellules) et de la phase dure (parois) sont choisies identiques sur tous les systèmes de glissement (*Tableau I.1*). La scission réduite initiale est nulle pour chaque système. Nous utilisons la matrice de Franciosi et al. [Franciosi et al. 80] qui ne fait intervenir que les interactions faibles (a^{gg}) et fortes (a^{gh}) entre systèmes de glissement : érouissage latent et auto-érouissage. L'élasticité est supposée isotrope ($\mu = 70$ GPa et $\nu=0,3$). Le module du vecteur de Burgers est $b=5 \cdot 10^{-10}$ m. Les grandeurs internes du matériau (densité de dislocations, distance d'annihilation, etc.) ont été déterminées par un ajustement entre les points expérimentaux et la courbe simulée. Nous avons présenté les paramètres de simulation dans le *tableau II.1*.

$\rho_{w0} (m^{-2})$	$y_c (m)$	$\tau_{c0} (MPa)$	$\zeta (MPa^2)$	a^{gg}	a^{gh}	k_L	f_0	f_∞	γ^{par}	ξ	k
$1 \cdot 10^9$	$2,8 \cdot 10^{-9}$	95	350	1	1,1	1	0,8	0,7	3,2	0,3	30

Tableau II.1 : paramètres de simulation

II.2.4.1. Comportement mécanique en chargement monotone

Nous commençons cette étude numérique par une simulation du comportement mécanique d'un acier austénitique inoxydable AISI 316L ayant subi un chargement en traction. Ces résultats sont

confrontés aux données expérimentales issues du travail de Choteau [Choteau 99]. La déformation totale est de 5 %. Cet exemple permettra de mettre en évidence les informations supplémentaires obtenues par le fait d'avoir comme échelle de départ la microstructure intragranulaire.

La figure II.5 montre une bonne corrélation entre les résultats expérimentaux et ceux de simulations pour la courbe de chargement. Sur cette figure, nous avons également présenté le comportement moyen ($\sigma_{22}^{I\alpha}, \epsilon_{22}^{I\alpha}$) des phases sur l'ensemble de l'agrégat donné par les relations suivantes :

$$\sigma_{22}^{I\alpha} = \sum_n f_n \sigma_{22}^{n\alpha} \quad (\text{II.57})$$

$$\epsilon_{22}^{I\alpha} = \sum_n f_n \epsilon_{22}^{n\alpha} \quad (\text{II.58})$$

où f_n est la fraction volumique du grain n . Avec :

$$\sigma^I = f_c \sigma^{Ic} + f_w \sigma^{Iw} \quad (\text{II.59})$$

Les nuages de points décrivent l'état des contraintes d'ordre II des grains (σ_{22}^{nII}) et l'état mécanique des deux phases ($\sigma_{22}^{n\alpha}$) dans chaque grain n (ordre III) avant et après la décharge élastique. L'exposant n est rajouté pour insister sur la dépendance de ces grandeurs en fonction du grain étudié et pour éviter toute ambiguïté, il sera omis, dans la suite du travail.

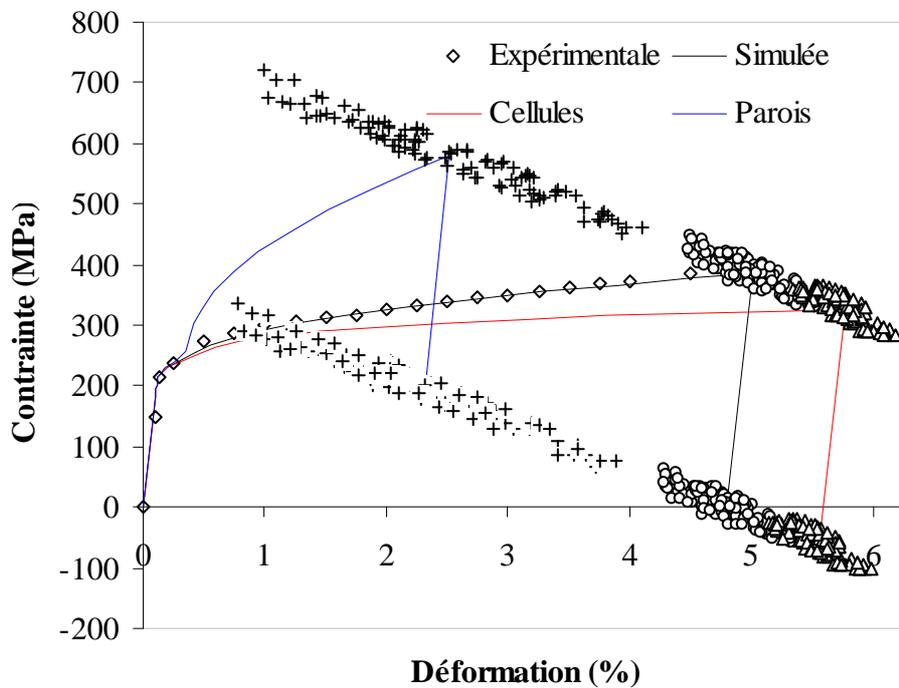


Figure II.5 : comportement mécanique macroscopique et en moyenne par phase de l'acier AISI 316L. Les points représentent l'état de contraintes des grains (ordre II) et des phases (ordre III) avant et après décharge : (\circ : $\sigma_{22}^{nII} / \epsilon_{22}^{nII}$, Δ : $\sigma_{22}^{nc} / \epsilon_{22}^{nc}$, $+$: $\sigma_{22}^{nw} / \epsilon_{22}^{nw}$)

Initialement, le matériau est supposé homogène. Ainsi, le comportement élastique et le champ des contraintes sont uniformes dans l'agrégat polycristallin. Le polycristal et les phases atteignent leurs limites d'élasticité au même moment, ce qui est une hypothèse qui pourrait être discutée. L'hétérogénéisation du matériau commence avec la création des parois qui sont caractérisées par des contraintes internes très élevées à cause de l'écroutissement non local. Le durcissement de cette phase est contrôlé par la plasticité des cellules correspondantes. La différence de contrainte entre les cellules et les parois semble cohérente avec les observations expérimentales [Ungar et Groma 89]. Le nuage de points présenté dans la *figure II.5* permet de révéler la forte contrainte présente dans les parois et le développement des hétérogénéités durant la plasticité. A la décharge élastique, les cellules se trouvent dans un état de compression marquée. Cet état mécanique particulier peut permettre d'initier très rapidement la plasticité lors d'un deuxième chargement en compression.

II.2.4.2. Influence de la scission critique

La scission critique est plus ou moins liée à la limite d'élasticité du matériau. Elle permet de déterminer un seuil de plastification pour un matériau donné. La *figure II.6* montre que cette scission n'a pas d'influence sur les valeurs de la pente d'écroutissement global et des phases. Cette remarque est valable pour le premier et le deuxième chargement. La transition élastoplastique est retardée lors du deuxième chargement quand la scission critique initiale augmente. Une bonne approximation de la valeur de la scission critique permet une simulation correcte de la transition élastoplastique. Généralement, on prend la moitié de la limite d'élasticité et on optimise cette valeur.

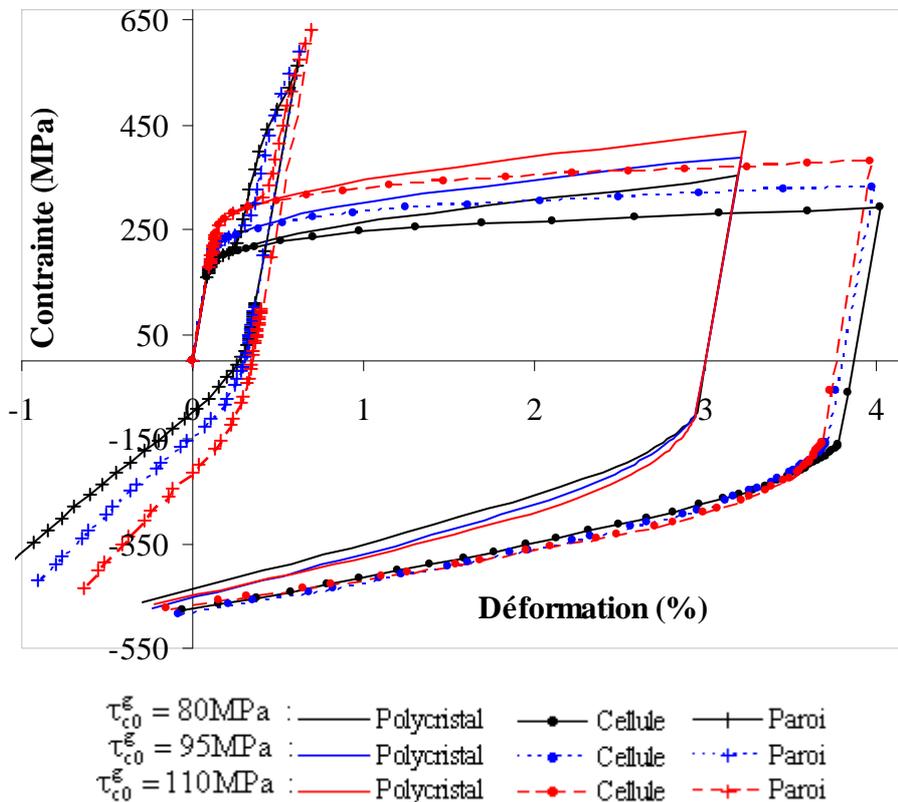


Figure II.6 : influence du choix de la scission critique sur le comportement mécanique macroscopique et en moyenne par phase de l'acier

II.2.4.3. Influence de la densité de dislocation initiale des parois

Nous avons simulé l'influence de la densité de dislocations initiale au niveau des parois (*relation II.10*) sur le comportement mécanique global et celui des phases (cellules et parois). Nous rappelons que la densité de dislocations intervient d'une façon directe dans la matrice d'auto-écrouissage (*relation II.23*) et dans la matrice d'écrouissage non-local (*relation II.22*). Par conséquent, elle intervient d'une façon indirecte, à travers ces matrices, dans l'expression de la scission critique des parois, la gestion des systèmes de glissements au niveau des parois, etc.

La *figure II.7* présente les résultats obtenus pour différentes valeurs de la densité de dislocations (10^5 m^{-2} , 10^{12} m^{-2} et 10^{15} m^{-2}), les autres paramètres restant inchangés (*tableau II.1*). Les effets sont marqués sur la réponse en moyenne des parois. D'après la *figure II.7*, on observe que la pente d'écrouissage des parois devient forte si la densité de dislocations initiale est grande. Les effets sur la réponse macroscopique sont moindres du fait d'une fraction volumique des parois faible ($f_w = 0,2$). On constate un durcissement du polycristal : l'écrouissage global varie lentement en fonction de cette densité.

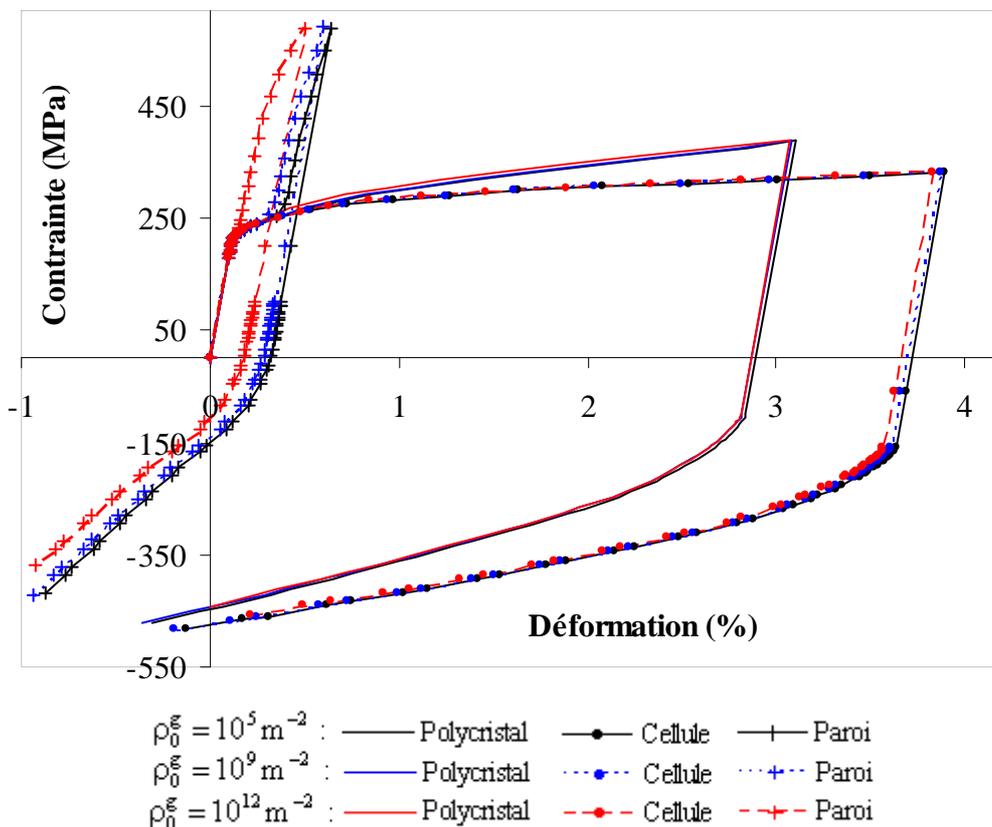


Figure II.7 : influence de la densité de dislocation sur le comportement mécanique macroscopique et en moyenne par phase de l'acier lors d'un essai de traction-compression

II.2.4.4. Influence de la fraction volumique

La fraction volumique évolue dans le cadre de nos simulations en fonction de l'activité plastique qui est fortement corrélée à l'orientation du grain d'après la *relation II.52*. La *figure II.8* présente l'évolution de la fraction moyenne des parois ($f_w = 1-f$) au niveau du polycristal et aussi pour les grains le plus et le moins déformé. La simulation a été effectuée jusqu'à 5 % de déformation afin de bien voir l'évolution des fractions volumiques. On observe que la fraction volumique augmente logiquement au cours de la déformation, ce qui semble cohérent avec la *relation II.52* et aussi avec les observations expérimentales réalisées par Feaugas [Feaugas 99] et Kashyap et

al. [Kashyap *et al.* 88] sur un acier inoxydable (AISI 316L). L'écart relatif de la fraction volumique des parois à 4 % de déformation totale entre le plus et le moins déformé est d'environ 5 %.

La *figure II.9* montre l'influence de la fraction volumique des cellules ($f_c=f$) sur le comportement mécanique (*relation II.43*). Trois valeurs initiales ont été choisies : 0,75 ; 0,8 ; 0,85. Les autres paramètres restent inchangés (*tableaux II.1*). Quelque soit le chargement (premier ou deuxième chargement), on constate que plus la fraction volumique des cellules est grande, plus la pente d'écrouissage global est faible : le matériau est plus dur pour une fraction volumique de cellules plus faible (cf. *relation II.28*). Par contre, elle a une influence moindre sur la réponse moyenne des cellules et des parois. Ces résultats sont logiques en partant du principe qu'un matériau quelconque est plus dur si le volume occupé par les dislocations est important.

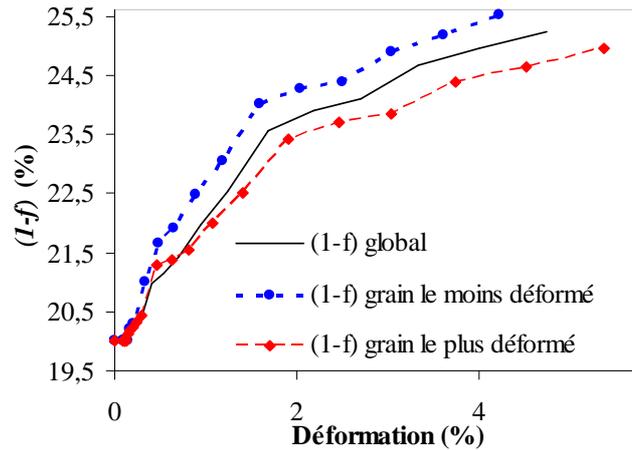


Figure II.8 : évolution de la fraction volumique en fonction de la déformation totale macroscopique

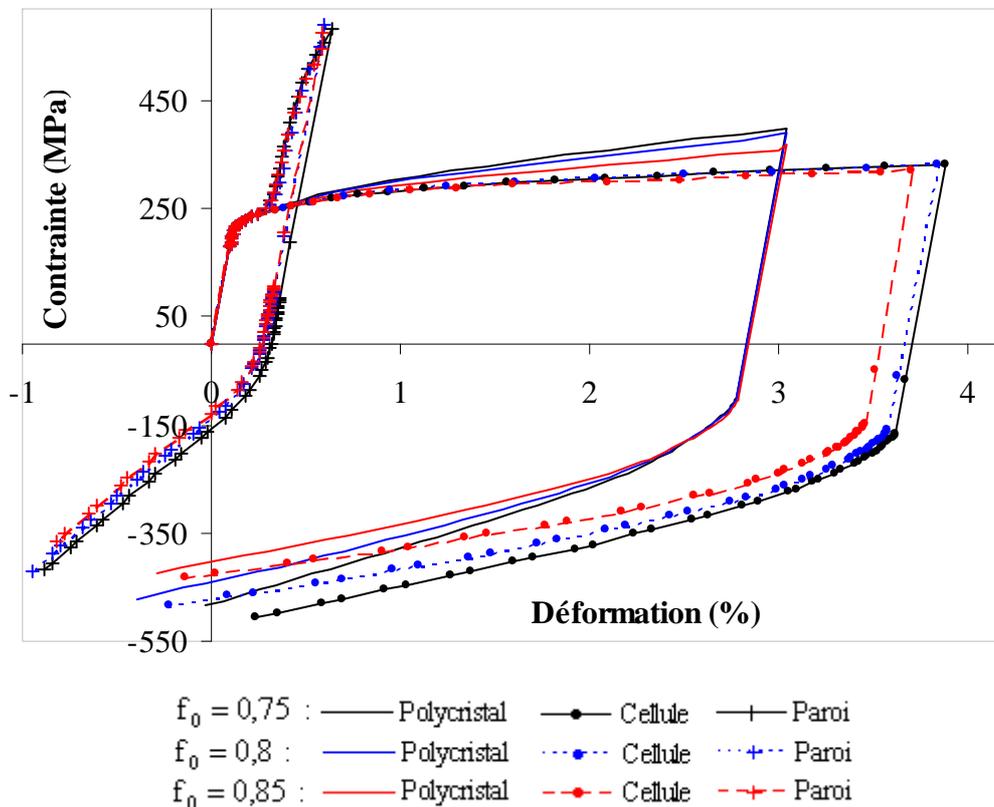


Figure II.9 : influence de la fraction volumique sur le comportement mécanique en traction - compression

II.2.4.5. Influence du paramètre d'écroissage ζ

Nous avons porté sur la *figure II.10* l'influence du coefficient ζ de la matrice d'écroissage H_{cc}^{gh} (*relation II.24*) sur le comportement mécanique. Nous avons choisi trois valeurs pour ce paramètre ζ : 25, 350 et 1200 MPa². Il a une influence, au travers de la scission critique des cellules, sur les taux de glissement des cellules par l'intermédiaire de la fonction K_c^g (*équation II.41*).

D'après la *figure II.10*, on observe que l'écroissage global et celui des phases du premier chargement augmentent avec ce coefficient. Par exemple, on observe une augmentation de la contrainte macroscopique de 15 MPa à $\epsilon_{22}=1$ % et de 30 MPa à $\epsilon_{22}=3$ % suivant la valeur de ce coefficient.

Par contre, la pente d'écroissage devient plus faible durant le second chargement en augmentant le coefficient d'auto-écroissage ζ avec des écarts marqués entre les différents cas. A $\epsilon_{22}=1$ %, cette différence atteint 100 MPa.

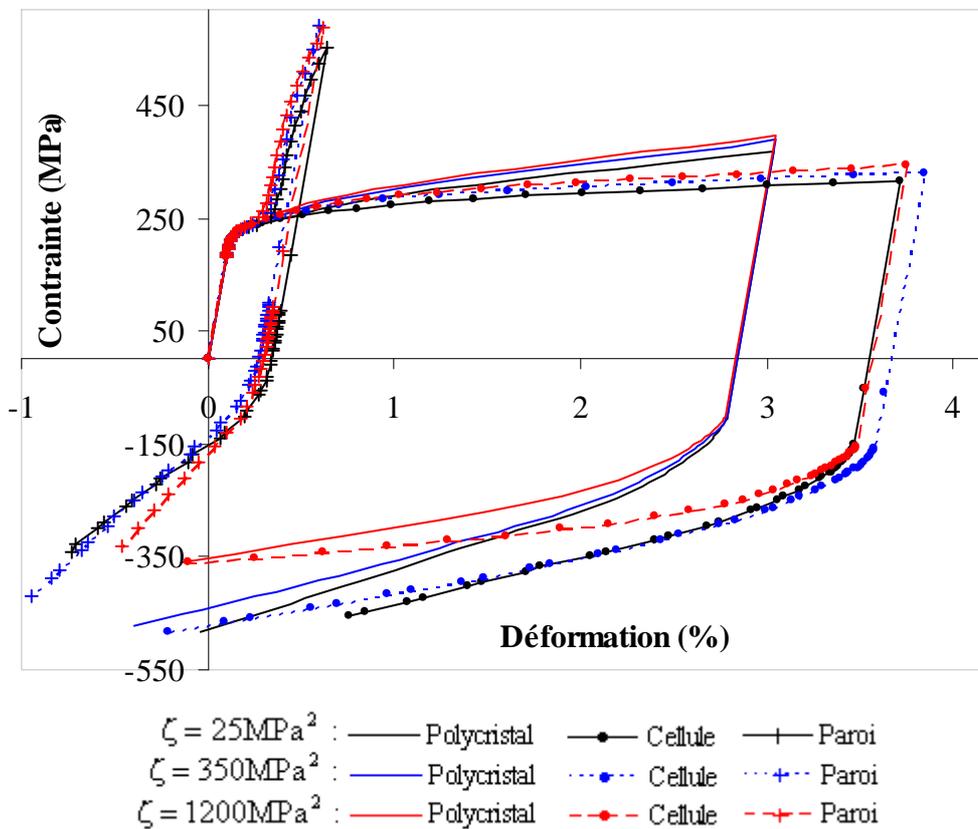


Figure II.10 : influence de l'écroissage local sur le comportement mécanique en traction - compression

II.2.4.6. Influence du paramètre de la fonction K_α^g

La fonction K_α^g est caractérisée par un paramètre qui est purement numérique (*relation II.41*). L'influence de ce paramètre, noté k , sur le comportement mécanique du polycristal et des phases est montrée sur la *figure II.11*.

Dans notre étude paramétrique, trois valeurs ont été choisies pour k : 8, 15 et 30 (*figure II.11*). Durant le premier chargement, on obtient une pente d'écroûissage forte en augmentant k pour les lois de comportement globale et locales. On observe aussi une saturation dans le comportement en fonction du paramètre k à partir de la valeur $k=30$.

Après la décharge élastique, nous obtenons une distribution des contraintes résiduelles (composante σ_{22}^H) plus dispersées dans l'espace (σ, ε) pour une valeur de k plus forte [*Annexe I, Figure AI.2*]. Les extremums de contraintes pour les trois cas sont relativement similaires.

Pour le second chargement, l'influence de k sur le comportement mécanique aux différentes échelles du matériau est quasiment similaire au premier chargement : les pentes d'écroûissages au niveau du polycristal et des phases sont plus fortes si la valeur de k augmente.

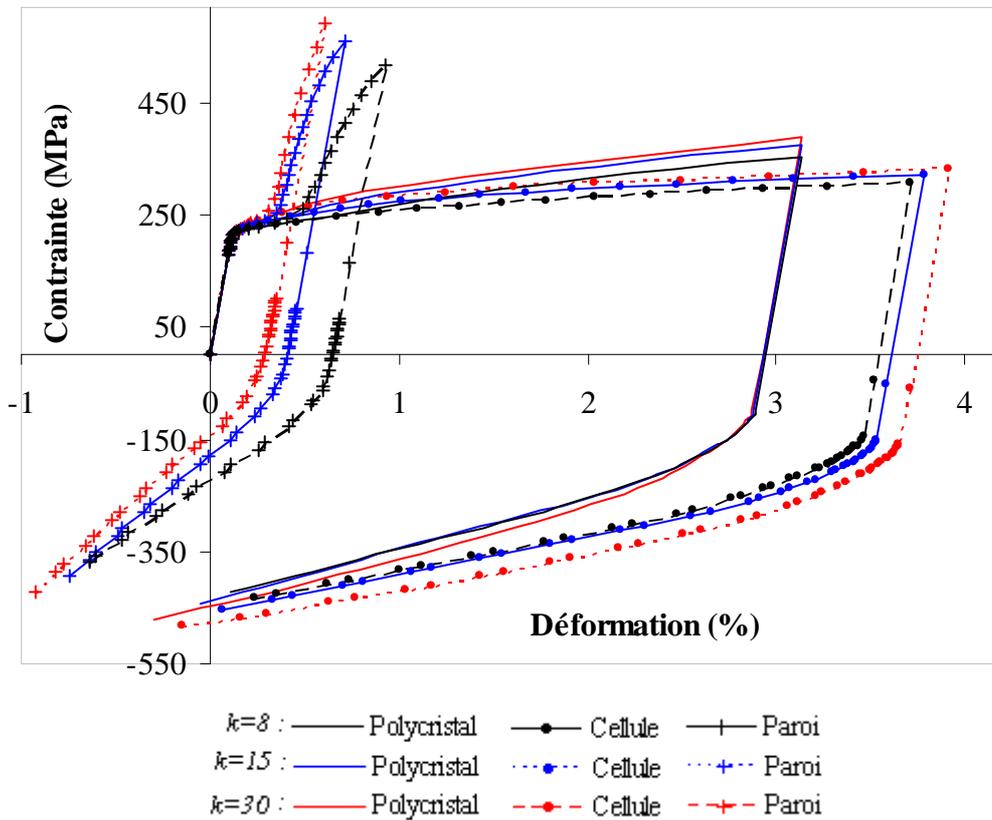


Figure II.11 : influence du paramètre k de la fonction K_{α}^s sur le comportement mécanique en traction - compression :

II.2.4.7. Influence du libre parcours moyen

Le libre parcours moyen des dislocations est caractérisé par une constante empirique noté k_L (*relation II.8*). Cette constante permet de gérer le stockage des dislocations dans l'agrégat polycristallin. D'après la *relation II.8*, le stockage des dislocations est important si k_L est petit (le taux de dislocations stockées dans les parois (*relation II.8*) est inversement proportionnel à L et donc à k_L). Nous avons choisi trois valeurs de k_L afin de vérifier cette remarque : 0,25, 1 et 3 (*figure II.12*).

La *figure II.12* montre que la constante k_L n'a pas d'influence sur la réponse macroscopique pour le premier chargement du polycristal dans l'intervalle de déformation choisi (≤ 3 %). Par contre,

elle influe logiquement sur les parois : cette phase subit un durcissement (cf. *relation II.22*) en diminuant la valeur de k_L . Les écarts observés pour les cellules sont logiquement plus faibles : l'écart relatif entre les réponses moyennes pour les cellules (pour $k_L=3$ et $k_L=0,5$) est d'environ 2,5 %.

Pour le second chargement, on constate que le comportement des cellules est moins rigide si k_L est élevé (12 % d'écart relatif à la fin de l'essai entre $k_L=3$ et $k_L=0,5$ pour les réponses moyennes au niveau des cellules). On remarque aussi un léger adoucissement du polycristal si k_L est grand (cf. *relation II.22*).

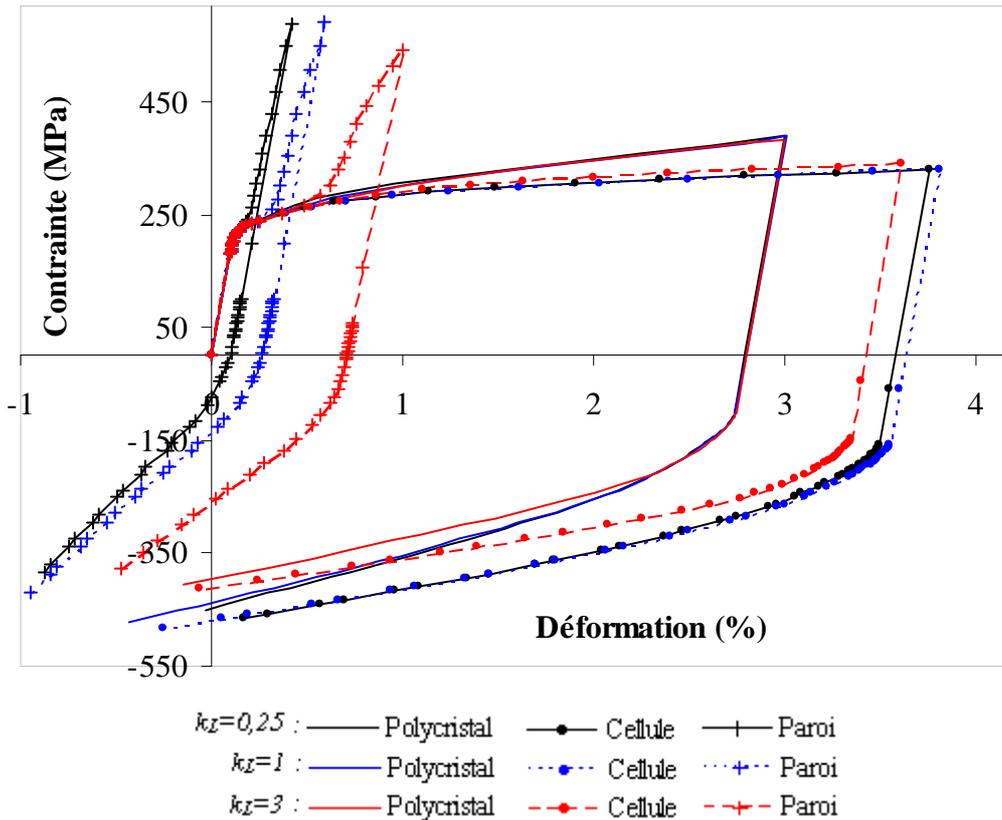


Figure II.12 : influence de k_L sur le comportement mécanique en traction-compression

II.2.4.8. Influence de la distance d'annihilation y_c

Cette grandeur permet de gérer l'évolution de l'annihilation durant la déformation plastique. Cette distance intervient dans les expressions du taux de la densité de dislocations (*relations II.10*), du taux de la scission critique (*relation II.20*) et de la matrice d'auto-écrouissage des parois H_{ww}^{gh} (*relation II.23*). Nous avons fait varier y_c suivant trois valeurs : 10^{-6} m, 10^{-9} m et $y_c=10^{-12}$ m. Si on augmente y_c , le matériau se durcit.

Sur la *figure II.13*, nous pouvons observer l'influence de la distance d'annihilation sur le comportement mécanique global et ceux des phases durant les deux chargements. Quelque soit le chargement, plus elle est grande, plus l'écrouissage est fort. On obtient le même comportement pour les valeurs 10^{-9} m et 10^{-12} m : on a une saturation au niveau du comportement à partir de $y_c=10^{-9}$ m. Lors du deuxième chargement, on observe aussi que la pente d'écrouissage des parois devient marquée pour les trois cas. Ceci est dû à la densité de dislocations au niveau des parois

qui devient élevée au deuxième chargement (10^{14} m^{-2}). Cette grandeur a une influence directe sur la matrice d'écroissage locale (cf. *relation II.23*) au niveau des parois.

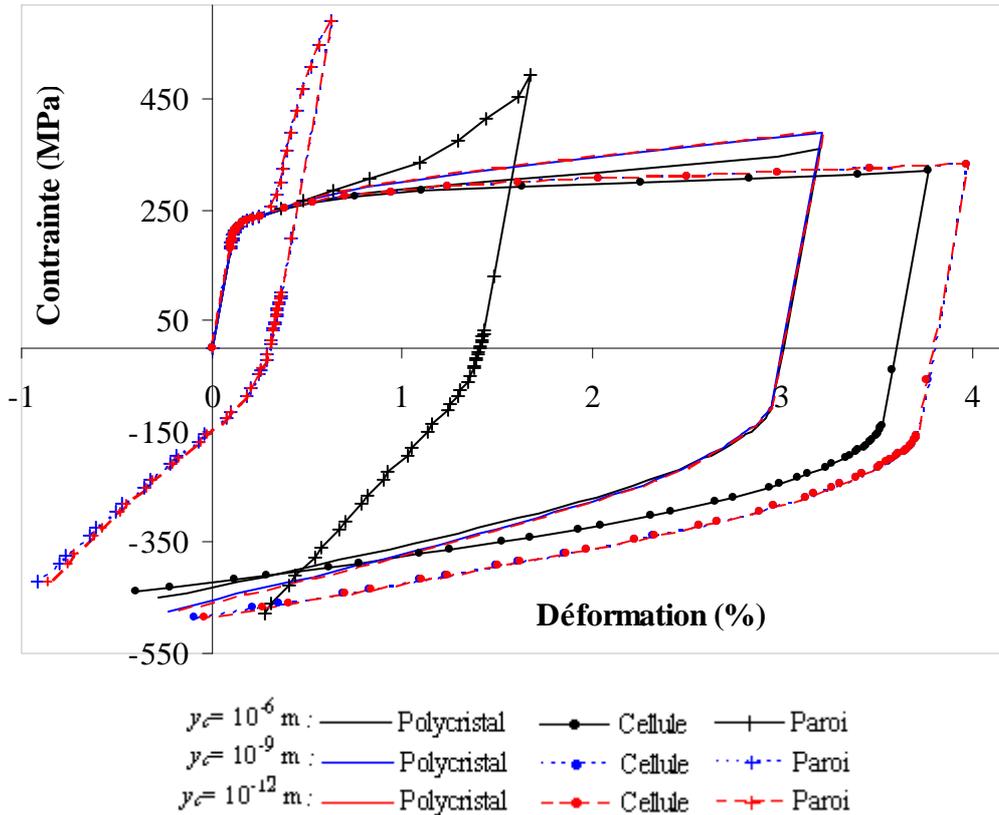


Figure II.13 : influence de la distance d'annihilation sur le comportement mécanique en traction suivie d'une compression

II.2.4.9. Influence de la morphologie de la microstructure de dislocations

Par l'intermédiaire du tenseur d'Eshelby, on peut imposer la géométrie des inclusions représentant les cellules de dislocations. En première approximation, on peut supposer que l'orientation principale des cellules correspond au système de déformation principal du grain (cf. *chapitre I*). Une simulation numérique sur un polycristal de 100 grains a montré que le système le plus actif demeure inchangé au cours d'un essai de traction pour 93 % des grains jusqu'à un taux de 5 % de déformation. Donc, nous avons projeté les ellipsoïdes sur le plan de glissement initialement le plus actif. Le tenseur d'Eshelby est alors calculé dans le repère de l'ellipsoïde. Pour le second chargement, nous avons supposé que ce sont les mêmes systèmes de glissement qui sont les plus actifs mais avec un sens de glissement opposé.

La *figure II.14* représente l'évolution de la contrainte macroscopique en fonction de la déformation macroscopique pour une morphologie sphérique et deux morphologies ellipsoïdales de dimension 5-5-1 et 10-10-1. Dans le cas du premier chargement, la nature de la morphologie a peu d'influence sur le comportement du polycristal pour l'intervalle de déformation étudié. Par contre, la forme sphérique accentue la différence entre les états mécaniques des deux phases : une différence en contrainte de 251 MPa à la fin du premier essai est constatée. L'influence de la morphologie est marquée pour la réponse macroscopique en compression (hétérogénéité entre phases de l'ordre de 221 MPa à la fin de l'essai). Pour les trois cas étudiés, la forme sphérique

induit le plus grand écart entre les deux phases avec, cette fois-ci, la plus faible pente d'écrouissage pour les parois. L'influence de la morphologie de la microstructure de dislocations, sur les contraintes internes mésoscopiques (niveau des grains) et microscopiques (niveau des cellules et des parois) pour la composante σ_{22} , est présentée sur les *figures AI.3-AI.5* (*annexe I*) après un essai de traction (et sans décharge élastique). La distribution des contraintes mésoscopiques est relativement similaire pour les trois cas. On constate néanmoins une dispersion progressive des nuages lorsqu'on passe d'une forme sphérique à une forme ellipsoïdale de l'inclusion. Les différences sont plus marquées lorsque l'on se place à l'échelle des phases. Le niveau moyen des contraintes est plus élevé pour les sphères au niveau des parois et plus faible pour les cellules. Les hétérogénéités de contraintes sont plus marquées pour les cas des inclusions 5-5-1 et 10-10-1. Les figures de pôles des contraintes internes mésoscopiques et internes sont données par les *figures AI.6-AI.8*. Etant donné les taux de déformation considérés, les orientations cristallographiques, pour les trois cas, sont évidemment identiques. Par contre, les distributions des contraintes et des extremums sont différentes suivant les cas, particulièrement au niveau des phases. L'effet de forme est donc important notamment lors d'un trajet complexe tant au niveau macroscopique que microscopique.

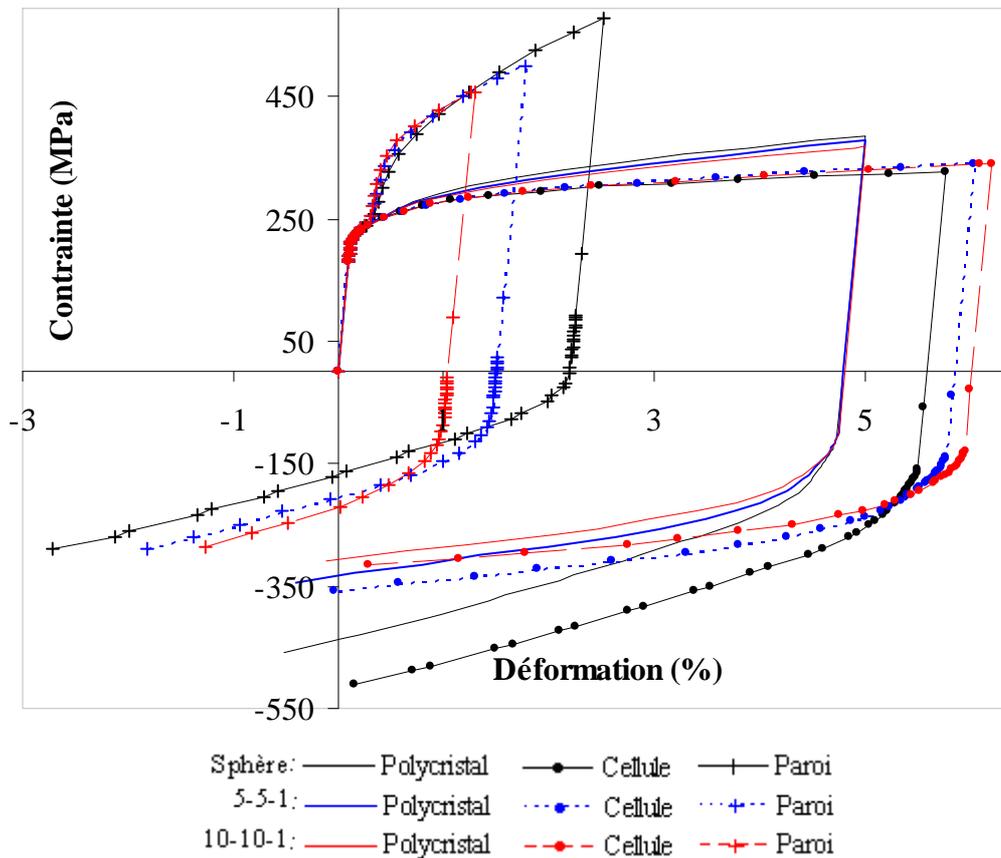


Figure II.14 : influence de la morphologie sur le comportement global et celui des phases

II.2.4.10. *Influence des contraintes intragranulaires sur le comportement mécanique lors d'un chargement complexe*

La *figure II.15* présente le comportement mécanique d'un acier lors d'un essai de traction-compression. Pour mettre en évidence l'importance de la prise en compte des hétérogénéités mécaniques intragranulaires, les contraintes résiduelles générées au niveau des phases et du polycristal lors du premier essai sont mises à zéro. Ces résultats sont comparés aux simulations précédentes. La limite d'élasticité en compression devient plus élevée sans la présence des contraintes résiduelles dues à la prédéformation avec un comportement très différent en plasticité. Ce changement de comportement est essentiellement dû aux cellules.

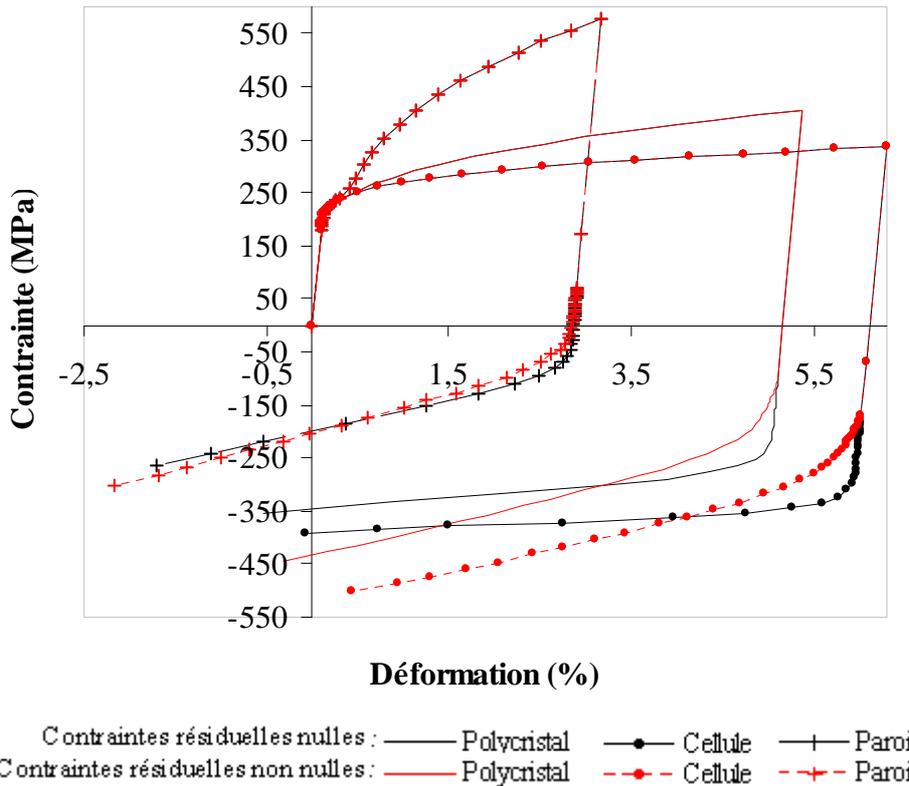


Figure II.15 : influence des contraintes résiduelles sur le deuxième chargement

Assurément, les effets provoqués par un chargement complexe sont dus à la combinaison de l'anisotropie plastique au niveau du grain et des contraintes internes du fait de la mise en place et de la présence de la microstructure de dislocations. Il peut être noté que la texture cristallographique va jouer un rôle mineur dans ce type de comportement [Viatkina 05] si elle n'est pas couplée à la prise en compte de cette microstructure.

La *figure II.16* présente l'évolution des contraintes internes lors de l'essai de traction-compression pour le plus déformé et le moins déformé des grains. A cause de l'anisotropie plastique, les contraintes aux échelles microscopiques et mésoscopiques dépendent fortement de l'orientation cristallographique au travers de l'activation de systèmes de déformation différents. L'orientation des grains, via les contraintes internes, va donc influencer le comportement des grains lors d'un changement de trajet.

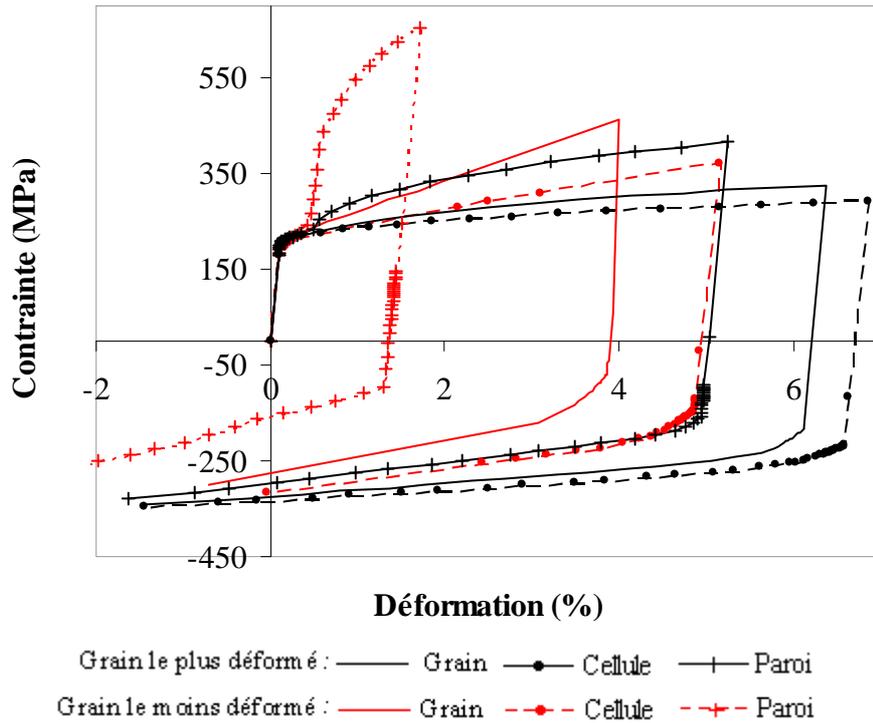


Figure II.16 : comportement du moins déformé et du plus déformé des grains

Dans le cas d'une texture non isotrope, des directions privilégiées sont présentes. Dans ces conditions, le comportement d'un groupe de grains caractérisé par une orientation donnée peut alors avoir une influence notable sur le comportement global du matériau (contrairement à un matériau non texturé). De plus, l'anisotropie plastique va jouer directement sur le niveau de contraintes internes dans les grains et elle va donc avoir une influence marquée sur le comportement mécanique global lors d'essais complexe pour des matériaux texturés. Dans les modèles que nous avons mis en place, nous avons pris en compte (au moins partiellement) ces différentes sources d'anisotropie : les hétérogénéités intragranulaires causées par la microstructure de dislocations, les contraintes internes résultantes de cette topologie cellulaire, l'anisotropie plastique et la texture cristallographique (cf. *chapitre V*).

II.2.5. Conclusion

Une première approche avec une double transition d'échelles a été développée afin de modéliser le comportement mécanique élastoplastique des matériaux métalliques durant des chargements monotones et complexes. Une approche de Kröner appliquée au cas d'un biphase représentant la microstructure cellulaire est utilisée. Le grain est considéré comme un milieu biphase : les parois avec une forte densité de dislocations et les cellules avec une faible densité. Cette densité est prise en tant que variable interne du modèle. La notion d'écrouissage non local, qui traduit l'influence des cellules sur les parois, est introduite au travers de quatre matrices d'écrouissage. L'évolution de la fraction volumique des cellules est également prise en compte de manière empirique.

Cette première approche a mis en lumière la forte hétérogénéité intragranulaire dans les grains suite au premier essai mécanique avec des contraintes de traction pour les parois et de compression pour les cellules. Dans cette thèse, nous avons utilisé le modèle pour effectuer une

étude paramétrique afin de comprendre l'importance et l'influence des paramètres internes choisis dans le cadre de notre modélisation comme la morphologie, les paramètres d'écroutissement ou la fraction volumique. Cette étude confirme la nécessité d'une détermination de ces paramètres pour une évaluation réaliste du comportement mécanique du matériau.

II.3. Modèle Autocoherent-Autocoherent

Dans la *partie II.2*, nous avons présenté un premier modèle dont la transition micro-mésoscopique est assurée par le modèle de Kröner. Le développement de cette approche est basé sur les incompatibilités plastiques entre phases. Ceci a permis dans un premier temps d'éviter des relations complexes pour la localisation. Par contre, ce modèle ne permet pas une description suffisante des interactions entre phases. De plus, il prévoit des niveaux de contraintes trop élevés qui nécessitent l'introduction d'un coefficient d'accommodation. Ainsi, il est incapable de décrire d'une façon plus réaliste l'évolution de la déformation plastique et l'évolution de la structure de dislocations.

Par conséquent, nous avons développé une deuxième approche en utilisant, cette fois-ci, le modèle autocoherent afin de corriger les hypothèses simplificatrices faites par la première. La modélisation de la deuxième transition (grain-polycristal) est identique à celle présentée dans les *sections II.2.2* et *II.2.3*.

II.3.1. Transition d'échelle micro-méso

II.3.1.1. Taux de glissement :

Dans le cadre de l'approche autocoherente, la mise en place d'un écrouissage non local va induire également une formulation non locale pour les modules tangents élastoplastiques du milieu biphasé étudié. On doit alors avoir :

$$\dot{\sigma}_\alpha = \frac{I}{V^\alpha} \left(\int_{V^\alpha} \int_{V^c} l(r, r') dV' dV \right) : \dot{\epsilon}_c + \frac{I}{V^\alpha} \left(\int_{V^\alpha} \int_{V^w} l(r, r') dV' dV \right) : \dot{\epsilon}_w \quad (\text{II.60})$$

ou de manière plus condensée :

$$\dot{\sigma}^c = l^{cc} : \dot{\epsilon}^c + l^{cw} : \dot{\epsilon}^w \quad (\text{II.61})$$

$$\dot{\sigma}^w = l^{wc} : \dot{\epsilon}^c + l^{ww} : \dot{\epsilon}^w \quad (\text{II.62})$$

où l^{cc} , l^{cw} , l^{wc} et l^{ww} sont appelés les modules tangents microscopiques.

Il reste à déterminer les expressions de ces tenseurs. Pour cela, il est alors nécessaire d'introduire de manière explicite la non-localité dans l'expression donnant le taux de glissement (cf. *relation II.40*)

Ainsi, le taux d'activité pour un système de glissement g donné peut se réécrire formellement sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}_c^g = K_{cc}^g \dot{\tau}_c^g + K_{cw}^g \dot{\tau}_w^g \\ \dot{\gamma}_w^g = K_{wc}^g \dot{\tau}_c^g + K_{ww}^g \dot{\tau}_w^g \end{cases} \quad (\text{II.63})$$

Les expressions des fonctions $K_{\alpha\alpha}^g$ traduisant l'aspect local dans le cas de deux phases peuvent se mettre sous la forme :

$$K_{\alpha\alpha}^g = \frac{I}{H_{\alpha\alpha}^{gg}} \left[\frac{I}{2} (I + \tanh(\tau_\alpha^g)) \right] \left[\frac{I}{2} \left(I + \tanh \left(k \left(\frac{\tau_\alpha^g}{\tau_{c\alpha}^g} - I \right) \right) \right) \right] \left[\frac{I}{2} (I + \tanh(\tau_\alpha^g)) \right] \quad (\text{II.64})$$

où k est toujours un paramètre purement numérique qui sera pris identique pour les deux phases.

Le problème consiste à déterminer les expressions de $K_{\alpha\beta}^g$ traduisant l'aspect non local de l'activité plastique pour chaque phase. Or, comme nous l'avons mentionné au *paragraphe II.2.1.3*, les parois n'influencent quasiment pas les propriétés des cellules. Nous avons donc choisi les expressions des fonctions $K_{\alpha\beta}^g$ ($\alpha \neq \beta$) sous la forme :

$$K_{cw}^g = 0 \text{ et } K_{wc}^g = \kappa K_{cc}^g \quad (\text{II.65})$$

où κ est une constante permettant de tenir compte de l'aspect non local de l'écroutissement au niveau du taux de glissement. Elle traduit, empiriquement, l'importance de l'influence des cellules sur les parois de manière simplifiée. Cette constante est inférieure à 1. En effet, les cellules se déforment aisément par rapport aux parois. Donc, le taux d'activité des cellules est plus grand que celui des parois :

$$\dot{\gamma}_c^g > \dot{\gamma}_w^g \quad (\text{II.66})$$

En insérant les *équations* de II.63 dans II.66, on trouve :

$$K_{cc}^g > K_{wc}^g > \kappa K_{cc}^g \quad (\text{II.67})$$

Alors :

$$1 > \kappa \quad (\text{II.68})$$

L'expression II.64 choisie pour les fonctions $K_{\alpha\beta}^g$ doit vérifier les mêmes conditions que celles de l'expression II.41.

On utilise alors les *équations* II.35, II.36 et II.63 pour réécrire les taux d'activité pour chaque phase :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}_c^g = K_{cc}^g R_{ij}^{cg} \dot{\sigma}_{ij}^c + K_{cw}^g R_{ij}^{wg} \dot{\sigma}_{ij}^w \\ \dot{\gamma}_w^g = K_{wc}^g R_{ij}^{cg} \dot{\sigma}_{ij}^c + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} \dot{\sigma}_{ij}^w \end{cases} \quad (\text{II.69})$$

Les expressions des taux de contrainte dans chaque phase sont données par :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{ij}^c = c_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl}^c - \dot{\epsilon}_{kl}^{pc}) \\ \dot{\sigma}_{ij}^w = c_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl}^w - \dot{\epsilon}_{kl}^{pw}) \end{cases} \quad (\text{II.70})$$

Une combinaison et un développement (cf. *annexe II*) des équations précédentes nous permettent de trouver les expressions des taux de glissement :

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_c^g \\ \dot{\gamma}_w^g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w \\ K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w \end{pmatrix} \quad (\text{II.71})$$

avec :

$$\begin{pmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{gh} + K_{cc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} & K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \\ K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} & \delta_{gh} + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \end{bmatrix}^{-1} \quad (\text{II.72})$$

L'expression II.71 montre que le taux d'activité de chaque phase est obtenu par le produit de deux matrices de dimension égale au nombre des systèmes de la structure étudiée (48 pour un CC et 24 pour un CFC. Tous les systèmes sont activés dans la formulation utilisée). A partir des hypothèses faites sur la matrice $H_{cw}^g = 0$ et sur la fonction $K_{cw}^g = 0$ (l'influence des cellules sur les parois est négligeable), la matrice M^{gh} est triangulaire inférieure par blocs et de blocs diagonaux carrés. Le terme M_{cw}^{gh} est nul et ceci simplifiera l'équation II.71 ainsi que plusieurs relations dans la suite de ce travail.

Les contraintes de chaque phase sont données sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{ij}^c = \left(c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \right) \dot{\epsilon}_{kl}^c + \\ \left(-c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \right) \dot{\epsilon}_{kl}^w \\ \dot{\sigma}_{ij}^w = \left(-c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \right) \dot{\epsilon}_{kl}^c + \\ \left(c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \right) \dot{\epsilon}_{kl}^w \end{cases} \quad (\text{II.73})$$

Nous comparons les relations II.73, II.61 et II.61, nous trouvons les expressions des modules tangents microscopiques sous la forme :

$$\begin{cases} l_{ijkl}^{cc} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{cw} = -c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{wc} = -c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{ww} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \end{cases} \quad (\text{II.74})$$

Ces modules tangents microscopiques permettent d'exprimer l'érouissage non local induit par la déformation plastique à l'intérieur des cellules qui entraîne un durcissement des parois. Ils dépendent des matrices d'érouissages locales et non locales. Ces matrices sont exprimées en fonction des paramètres internes (relations II.22 et II.23) définis dans le paragraphe précédent.

Puisque $H_{cw}^g = 0$ et $K_{cw}^g = 0$ et $M_{cw}^{gh} = 0$, ces tenseurs peuvent se simplifier :

$$\begin{cases} l_{ijkl}^{cc} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{cw} = 0 \\ l_{ijkl}^{wc} = -c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{ww} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \end{cases} \quad (\text{II.75})$$

Il reste maintenant à effectuer la transition d'échelle vers le grain pour obtenir la loi de comportement correspondante.

II.3.1.2. Contraintes d'ordre deux :

Les contraintes au niveau des grains sont liées aux contraintes dans les cellules et les parois par la relation de moyenne suivante :

$$\dot{\sigma}^H = f\dot{\sigma}^c + (1-f)\dot{\sigma}^w \quad (\text{II.76})$$

En insérant II.74 et II.75 dans II.78, on obtient :

$$\dot{\sigma}^H = f(l^{cc} : \dot{\epsilon}^c + l^{cw} : \dot{\epsilon}^w) + (1-f)(l^{wc} : \dot{\epsilon}^c + l^{ww} : \dot{\epsilon}^w) \quad (\text{II.77})$$

Après une opération de factorisation on trouve :

$$\dot{\sigma}^H = (fl^{cc} + (1-f)l^{wc}) : \dot{\epsilon}^c + (fl^{cw} + (1-f)l^{ww}) : \dot{\epsilon}^w \quad (\text{II.78})$$

Les déformations mésoscopiques et microscopiques sont liées par des tenseurs de localisations sous la forme :

$$\dot{\epsilon}^c = a^c : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{II.79})$$

$$\dot{\epsilon}^w = a^w : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{II.80})$$

avec a^c et a^w les tenseurs de localisation au niveau de la cellule et de la paroi. Ces deux tenseurs dans le cas d'un écrouissage non-local peuvent s'exprimer sous la forme :

$$\begin{cases} a^c = \left[I + s^{esh} : l^{-1} : \Delta l^{cc} + s^{esh} : l^{-1} : l^{cw} : (I + s^{esh} : l^{-1} : \Delta l^{ww})^{-1} : s^{esh} : l^{-1} : l^{wc} \right]^{-1} : \\ \left[I - s^{esh} : l^{-1} : l^{cw} : (I + s^{esh} : l^{-1} : \Delta l^{ww})^{-1} \right] \\ a^w = (I + s^{esh} : l^{-1} : \Delta l^{ww})^{-1} : (I - s^{esh} : l^{-1} : l^{wc} : a^c) \end{cases} \quad (\text{II.81})$$

Si on tient compte de la nullité de l^{cw} ($=0$), on trouve une expression simplifiée :

$$\begin{cases} a^c = \left[I + s^{esh} : l^{-1} : \Delta l^{cc} \right]^{-1} \\ a^w = (I + s^{esh} : l^{-1} : \Delta l^{ww})^{-1} : (I - s^{esh} : l^{-1} : l^{wc} : a^c) \end{cases} \quad (\text{II.82})$$

avec :

$$\Delta l^{cc} = l^{cc} - l \quad \text{et} \quad \Delta l^{ww} = l^{ww} - l \quad (\text{II.83})$$

s^{esh} le tenseur de d'Eshelby qui prend en compte l'influence de la morphologie de l'inclusion au niveau de chaque grain.

D'après les relations II.80 et II.81, on a alors :

$$\dot{\sigma}^n = \left((fl^{cc} + (I-f)l^{wc}) : a^c + (fl^{cw} + (I-f)l^{ww}) : a^w \right) : \dot{\varepsilon}^n \quad (\text{II.84})$$

Sachant que :

$$\dot{\sigma}^n = l : \dot{\varepsilon}^n \quad (\text{II.85})$$

Alors, le module tangent au niveau des grains est donné par :

$$l = \left(fl^{cc} + (I-f)l^{wc} \right) : a^c + \left(fl^{cw} + (I-f)l^{ww} \right) : a^w \quad (\text{II.86})$$

L'expression II.86 montre que le tenseur des modules tangents élastoplastiques d'un monocristal a une forme complexe dans le cas d'une description biphasée de la microstructure. Ce tenseur dépend de l'état de contrainte, des systèmes actifs, des matrices d'érouissages à travers les scissions critiques des phases et de toute l'histoire du chargement. On constate que l'équation obtenue est une équation fortement implicite. Par exemple, les tenseurs de localisation (a^c et a^w) dépendent de l . Pour résoudre cette équation, il sera nécessaire de procéder à une résolution par itérations successives pour **chaque grain** pour déterminer ce tenseur.

La transition du grain au polycristal est assurée par un modèle autocohérent classique présenté dans le chapitre I. La figure II.17 résume l'approche avec une double transition d'échelles utilisée dans ce travail.

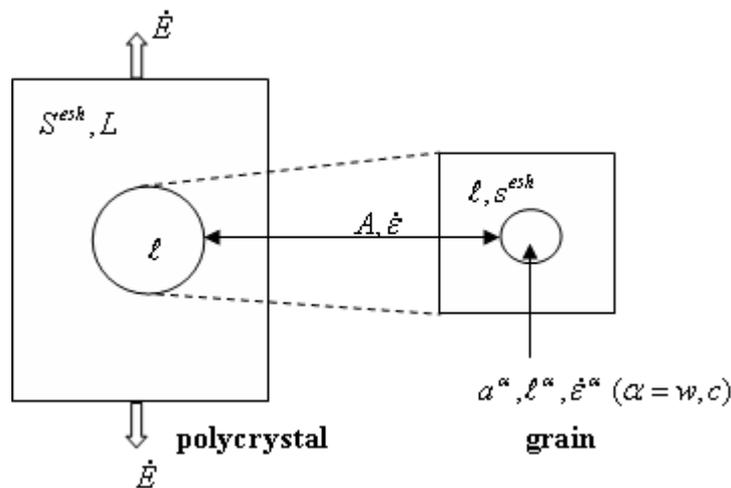


Figure II.17 : schématisation de l'approche avec une double transition d'échelle

II.3.2. Procédure de calcul

Après avoir présenté le modèle développé, nous allons maintenant préciser les différentes démarches qui ont permis sa mise en œuvre informatique. Tous les calculs ont été faits sur le logiciel Mathematica 5.1. La figure II.18 présente l'algorithme utilisé durant le calcul.

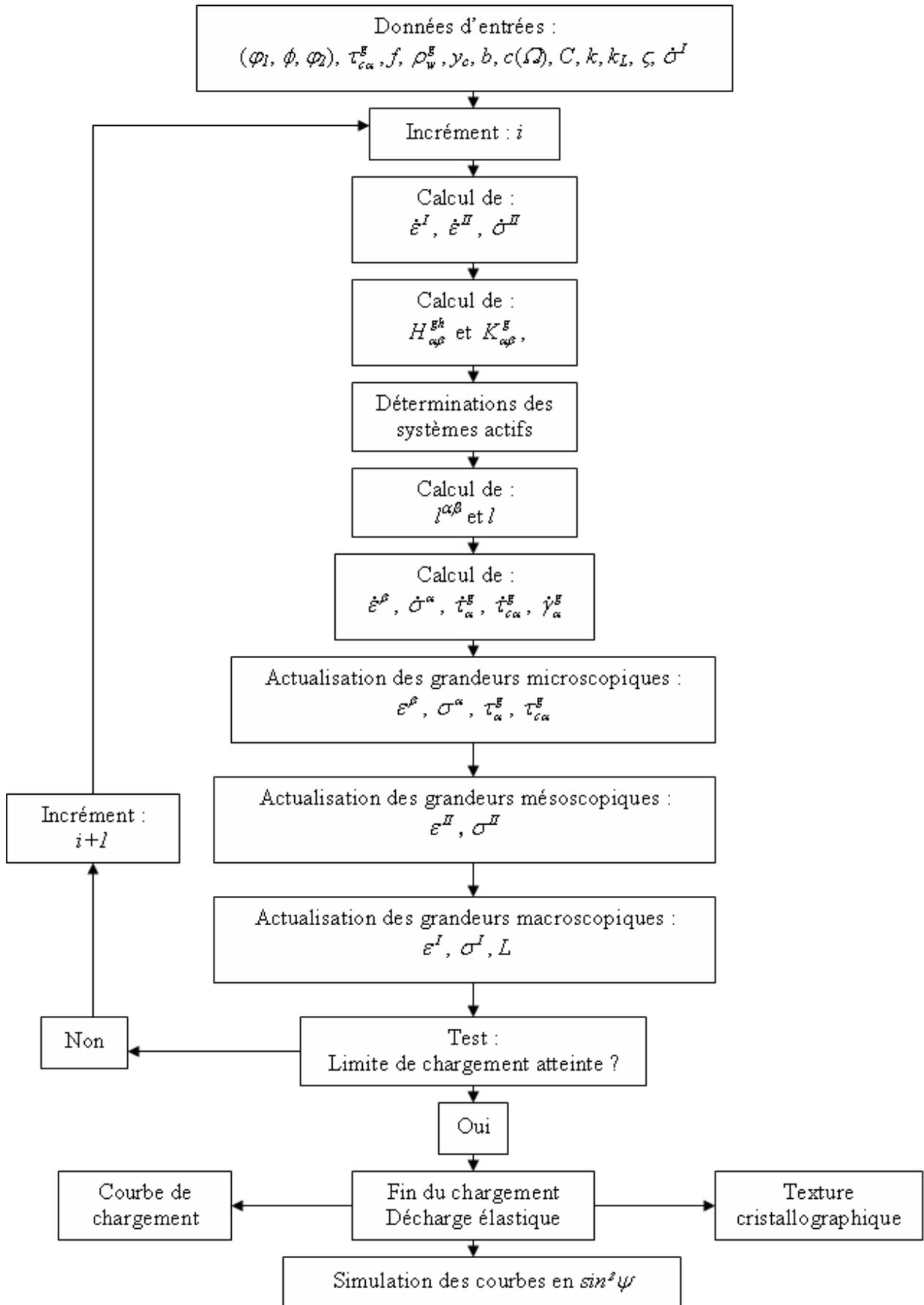


Figure II.18 : algorithme du modèle utilisé

II.3.3. Résultats numériques

Dans cette section, les résultats du modèle vont être comparés à des données expérimentales obtenues dans des travaux antérieurs sur des monocristaux dans le cas de chargements monotones et complexe. L'objectif est de vérifier la cohérence de la nouvelle loi de comportement monocristalline mise en place dans ce travail. Dans un second temps, quelques simulations numériques à l'échelle du polycristal seront également montrées.

II.3.2.1. Simulation d'un monocristal

Chargement monotone

Pollnow et al. [Pollnow et al. 72] ont réalisé des essais de traction uniaxiale sur des éprouvettes monocristallines de fer α (structure cubique centré). Nous avons simulé plusieurs orientations correspondant à celles des monocristaux étudiés par les auteurs. Dans leur article, seule la direction de traction indiquée dans le triangle standard est donnée par les auteurs. Elle ne permet de déduire que deux des trois angles d'Euler qui définissent l'orientation monocristalline. La troisième valeur a donc été considérée comme un paramètre à identifier (même valeur pour tous les essais) permettant d'avoir une adéquation entre théorie et expérience. Pour diminuer le nombre de variables à identifier, nous avons utilisé les mêmes valeurs des angles d'Euler que celles trouvées par Lorrain et al. [Lorrain 05, Lorrain et al. 05] dans le cadre d'une modélisation autocohérente élastoplastique classique.

Pour la validation du modèle présenté, un des essais de traction est utilisé comme essai de référence et les différents paramètres du modèle sont identifiés par l'intermédiaire de celui-ci. Ensuite, pour les autres essais, le jeu de paramètres reste évidemment identique. L'élasticité est supposée isotrope et elle est décrite par le module de cisaillement μ ($= 61,75$ GPa) et le coefficient de Poisson ν ($= 0,3$). Les cellules sont choisies de forme sphérique. Dans le cas d'un matériau CC, la déformation plastique est assurée par deux familles de glissement : $(112)\langle 111 \rangle$ et $(110)\langle 111 \rangle$. La scission critique initiale pour chaque système de glissement de chaque famille est supposée être la même. Elle est déterminée pour reproduire au mieux la limite d'élasticité du matériau. Très peu de données expérimentales sont disponibles sur les paramètres définissant l'évolution des dislocations et l'écroutissage. Dans un premier temps, ces paramètres sont choisis dans des intervalles cohérents avec ceux donnés dans la littérature (quand cela est possible). Puis ils sont ajustés pour reproduire au mieux les données expérimentales relatives à l'essai de traction. Ceci peut se justifier puisque les paramètres ρ_0 , y_c (Eq. II.9), k_L (Eq. II.8), ζ (Eq. II.24), et κ (Eq. II.68) définissent l'évolution de la densité de dislocations ainsi que de l'écroutissage du matériau. Par conséquent, ils peuvent être déduits de la réponse mécanique de ce dernier. Une valeur de $0,5$ est prise pour ξ (Eq. II.16). Pour la fraction volumique, une valeur typique observée pour les cellules de dislocations est choisie. La valeur de k (Eq. II.64) est déterminée par comparaison avec un modèle autocohérent classique pour un chargement monotone (en terme de système de déformation principale et de réorientation cristallographique). Cette valeur est ensuite ajustée pour reproduire au mieux l'essai de référence. La norme du vecteur de Burgers est prise égale à $5,82 \cdot 10^{-10}$ m.

Les paramètres de simulations sont donnés dans le *tableau II.2*. La *figure II.19.a* présente l'essai d'identification et les *figures II.19.b-d* présentent la validation du modèle. La *figure II.19.a* donne aussi le comportement des parois et des cellules.

De manière générale, les résultats simulés arrivent à reproduire le comportement général des monocristaux en traction. Les *figures II.19.c* et *II.19.d* présentent les plus grandes différences entre les résultats numériques et expérimentaux. Ceci peut s'expliquer par plusieurs raisons. Cette erreur peut provenir du fait que l'orientation exacte du monocristal n'est pas entièrement connue. Ce problème a été constaté également par Lorrain [Lorrain 05]. De plus, un formalisme en petites déformations a été utilisé dans cette étude. Une modélisation en grandes déformations plastiques du monocristal serait plus appropriée ici. Néanmoins, cette confrontation montre la capacité du modèle à reproduire qualitativement les données expérimentales.

Les figures montrent l'effet de l'écroutissage non local. Les contraintes internes dans les parois sont à peu près trois fois supérieures à celles présentes dans les cellules à la fin de l'essai mécanique. L'écart relatif, pour l'orientation cristallographique (0° , 82° , 54°) (*figure II.19.a*), varie de 0 à 10 % au maximum. Pour les autres cas, cet écart ne dépasse pas 20 %.

Nous avons également réalisé des simulations d'essais de cisaillement qui sont comparés aux résultats issus du travail de Keh et Nakada [Keh et Nakada 67] sur un monocristal de fer α . Comme pour le cas précédent, les angles d'Euler sont ceux utilisés par Lorrain et al. [Lorrain 05, Lorrain et al. 05] qui les ont déterminés de la même façon que dans le cas de la traction.

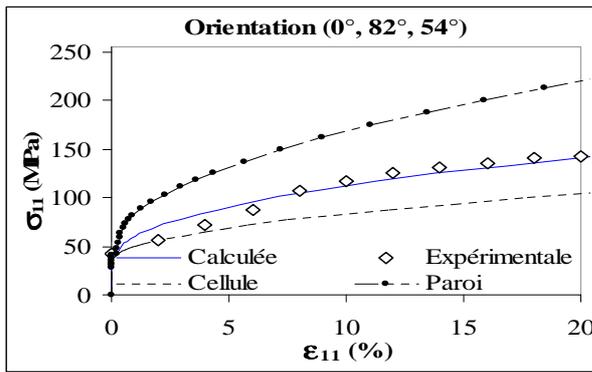
Les simulations ont été réalisées sur quatre orientations cristallographiques. Le *tableau II.2* présente les paramètres d'ajustement qui ont été déterminés par un essai de calage sur l'orientation (90° , 90° , 45°). Ensuite, pour les autres essais, le jeu de paramètres déterminé est gardé constant. Les résultats des simulations sont présentés sur les *figures II.20.a-II.20.d*. Sur ces figures, nous avons présenté la variation de la contrainte de cisaillement en fonction de la déformation.

D'après les *figures II.20.a-II.20.d*, le modèle prédit bien la limite élastique pour toutes les orientations étudiées. Sur les *figures II.20.a*, *II.20.c* et *II.20.d*, l'écart relatif entre la pente d'écroutissage simulée, et celle issue de l'expérience est assez faible : 12 % au maximum. Les niveaux des contraintes simulées dans la partie plastique pour l'orientation (90° , 86° , 45°) (cf. *figure II.20.b*) sont toujours inférieurs à ceux de la courbe expérimentale. L'écart relatif varie avec l'augmentation de la déformation : de l'ordre de 11 % à 5 % de déformation et de 8 % pour 10 % de déformation.

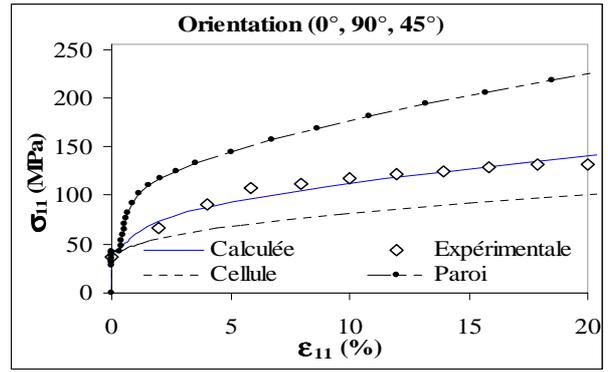
D'après les essais de traction et de cisaillement présentés ici, on peut conclure que le modèle permet de prédire le comportement du monocristal dans le cas d'un chargement simple. Dans ce qui va suivre, on va essayer de valider le modèle dans le cas d'un trajet Bauschinger pour un monocristal de fer : charge (cisaillement) - décharge (élastique) - recharge (cisaillement dans une autre direction).

	a^{gg}	a^{gh}	ρ_0 (m ⁻²)	y_c (m)	$\tau_{c0(112)}$ (MPa)	$\tau_{c0(110)}$ (MPa)	ζ (MPa ²)	k_L	f_0	f_∞	γ^{par}	ξ	k	κ
Traction	1	1,1	10^9	$2,8 \cdot 10^{-9}$	18	16	500	55	0,8	0,75	3,2	0,5	4,3	0,4
Cisaillement	1	1,1	10^9	$2,8 \cdot 10^{-9}$	17	15	450	55	0,86	0,75	3,2	0,5	4,3	0,4
Chargement complexe	1	1,1	10^9	$2,8 \cdot 10^{-9}$	6	5	450	55	0,85	0,75	3,2	0,5	20	0,4

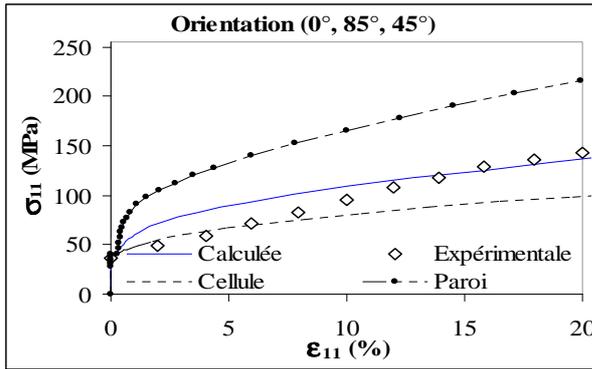
Tableau II.2 : paramètres des simulations



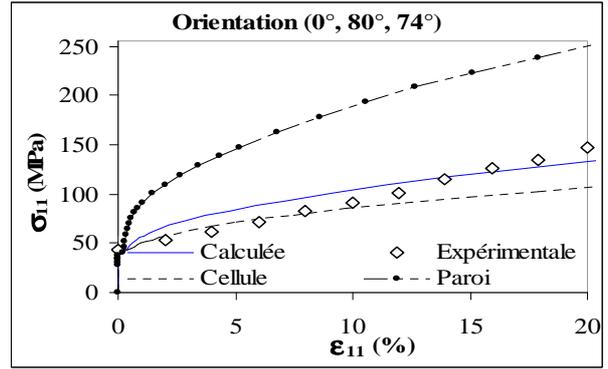
(a)



(b)

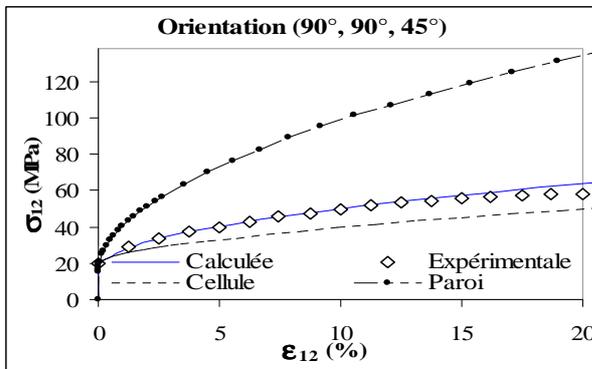


(c)

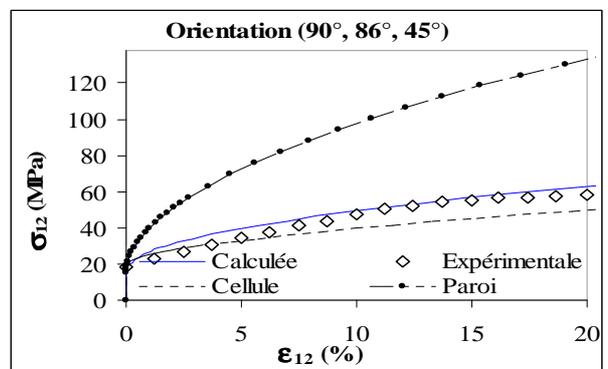


(d)

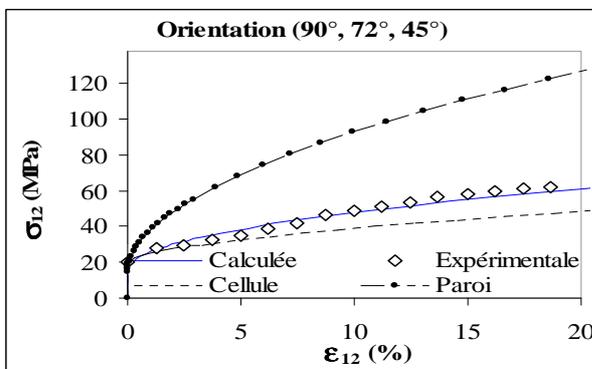
Figure II.19 : résultats expérimentaux [Pollnow et al. 72] et simulés pour des essais de traction : a : identification des paramètres ; b-d : validation du modèle



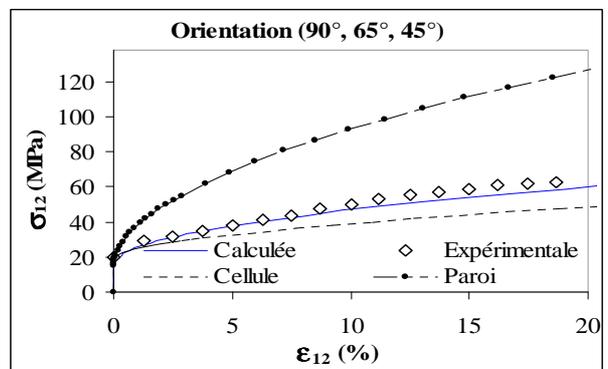
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure II.20 : résultats expérimentaux [Keh et Nakada 67] et simulés pour des essais de cisaillement : a : identification des paramètres ; b-d : validation du modèle

Chargement complexe

Comme pour le cas précédent, les essais réalisés par Keh et Nakada [Keh et Nakada 67] sur des monocristaux de fer seront comparés avec la simulation. Les auteurs ont réalisé un premier essai de cisaillement simple suivi d'un second cisaillement dans une autre direction ce qui correspond à un trajet Bauschinger. Pour nos simulations, nous avons utilisé les mêmes valeurs d'angles d'Euler que celles de Lorrain [Lorrain 05, Lorrain et al. 05]. Comme les deux cas précédents, seuls deux des trois angles d'Euler sont donnés dans l'article de Keh et Nakada [Keh et Nakada 67], le troisième a été calculé a posteriori. Le *tableau II.2* présente les paramètres des simulations. Les *figures II.21.a-II.21.d* présentent les résultats expérimentaux et simulés.

Les *figures II.21.a-II.21.d* montrent que les courbes simulées et expérimentales sont proches pour le premier et le deuxième chargement excepté pour la *figure II.21.b*. Dans ce cas, le modèle sous-estime la courbe de chargement expérimentale. Le changement de trajet est mal décrit par le modèle. Cette erreur peut venir de l'hypothèse forte selon laquelle le premier angle d'Euler est considéré comme constant d'un essai à l'autre.

Ces résultats montrent néanmoins que la loi de comportement permet de prédire des chargements complexes comme des essais Baushinger.

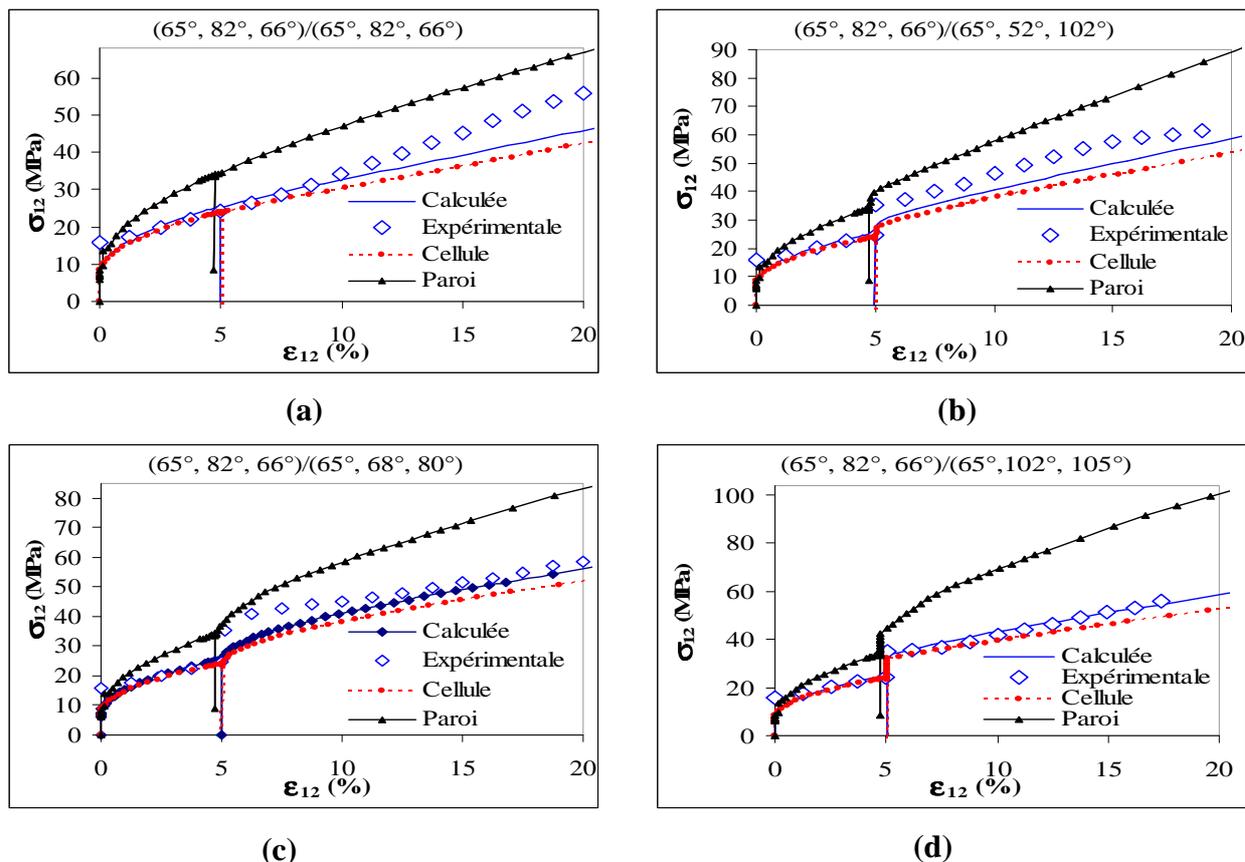


Figure II.21 : résultats expérimentaux [Keh et Nakada 67] et simulés pour des essais complexes : (a) identification des paramètres ; (b-d) validation du modèle

II.3.2.2. Simulation d'un polycristal

Dans cette section, nous présentons de premiers résultats numériques obtenus avec l'approche autocohérente pour des chargements simples et complexes pour un acier austénitique AISI 316L. Ces résultats sont confrontés à ceux issus du travail de Choteau [Choteau 99].

La texture initiale est supposée isotrope. Les résultats de la modélisation autocohérente portent sur un matériau constitué de 100 cristaux. Ce nombre de cristallites utilisées dans la modélisation a été choisi pour gagner du temps de calcul et aussi pour son aptitude à représenter l'agrégat polycristallin. La scission critique initiale pour chaque système de glissement et pour chaque phase est supposée être la même. La scission réduite initiale est nulle pour chaque système au départ. Le *tableau II.3* contient les paramètres du matériau. Les paramètres de simulations sont donnés dans le *tableau II.4*. Sur la *figure II.22*, nous pouvons observer l'évolution simulée et expérimentale de la contrainte macroscopique en fonction de la déformation totale de l'acier AISI 316L. Nous avons également représenté sur cette figure, l'état mécanique de chaque cristallite et de chaque phase (cellule et parois) selon le même principe que la *figure II.6*.

D'après la *figure II.22*, on remarque que le modèle prédit le comportement macroscopique du matériau durant le premier essai en traction. On observe une différence importante des réponses des deux phases. Les parois sont fortement durcies par rapport aux cellules. Les niveaux de contraintes dans les parois sont très élevés (500 MPa) par rapport à ceux observés dans les cellules (environ 300 MPa), ceci est lié à l'écrouissage non local introduit dans le modèle.

La *figure II.23* présente l'évolution des contraintes d'ordre 1 en fonction des déformations macroscopiques dans le cas de chargement complexe (essai de traction-compression) pour différents taux de prédéformation en traction. La *figure II.23* montre que le modèle développé ici est capable de prédire le comportement de l'acier AISI 316L en trajet séquentiel pour des taux de prédéformation qui seront utilisés dans le cadre de notre étude expérimentale (cf. *chapitre IV*).

Après l'essai de traction et la décharge élastique, les parois ont des contraintes de traction élevées alors que les cellules se trouvent en compression. A 4 % de déformation, la moyenne des contraintes résiduelles (composante σ_{II}^{α}) des parois est de 97 MPa (contraintes résiduelles en traction) et celle des cellules est de -39 MPa (contraintes résiduelles en compression). Pour le second chargement en compression, les cellules vont donc plastifier rapidement et en premier. Cet état de contraintes internes obtenu pour les cellules, après le premier chargement, permet de reproduire l'effet Baushinger observé expérimentalement sur le matériau. La courbe, obtenue après un essai de prédéformation de 4 % de déformation totale, présente un écart relatif un peu grand par rapport aux autres courbes. Cet écart atteint une valeur maximale à 2,5 % de déformation (en compression) et vaut 12 %. Ceci peut être expliqué par l'hypothèse que nous avons faite sur l'auto-écrouissage des cellules : nous avons considéré le numérateur (ζ) de la matrice H_{cc}^{gh} constant. Or, cette hypothèse devient fautive à des taux de déformation plus élevés du fait de l'écrouissage inévitable des cellules. Si on autorise une augmentation de ce facteur avec la déformation, on obtient des résultats proches de l'expérience et ce quelque soit la prédéformation.

$c_{11}(\text{GPa})$	$c_{12}(\text{GPa})$	$c_{44}(\text{GPa})$	$b(\text{m})$
245	105	70	$5 \cdot 10^{-9}$

Tableau II.3 : paramètres du matériau

a^{gg}	a^{gh}	$\tau_{c0}(\text{MPa})$	$\zeta(\text{MPa}^2)$	k_L	f_0	f_∞	γ^{par}	ξ	k	$\rho_0(\text{m}^{-2})$	$y_c(\text{m})$	κ
1	1,1	92	500	0,5	0,8	0,7	2,2	0,6	25	$1,5 \cdot 10^{10}$	$2,8 \cdot 10^{-9}$	0,5

Tableau II.4 : paramètres de simulation

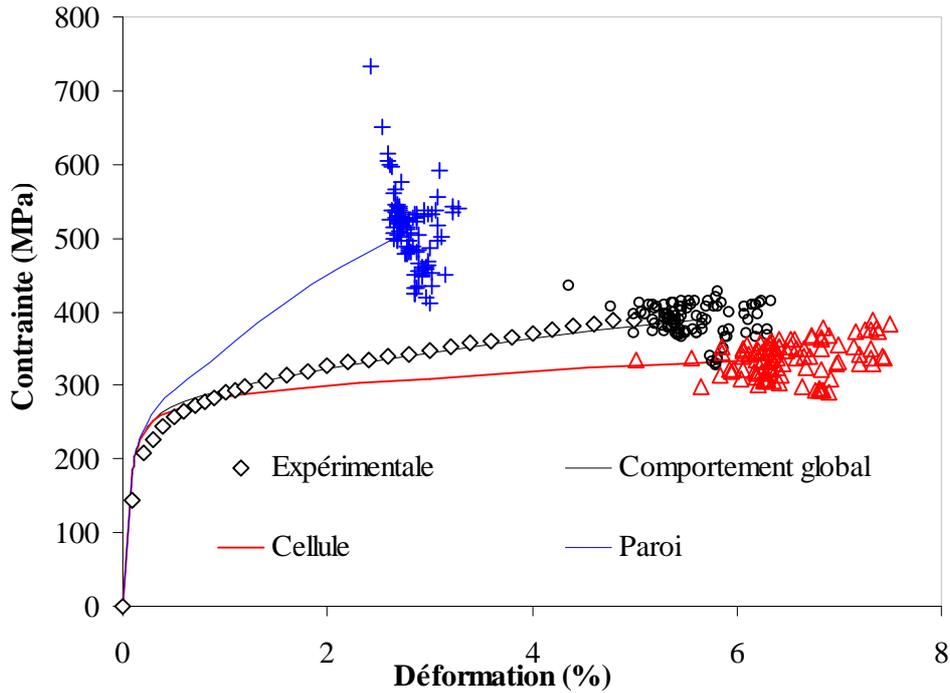


Figure II.22 : comportement mécanique macroscopique et en moyenne par phase de l'acier AISI 316L. Les symboles ($\circ : \sigma_{11}^{nl} / \epsilon_{11}^{nl}$, $\Delta : \sigma_{11}^{nc} / \epsilon_{11}^{nc}$, $+$: $\sigma_{11}^{nw} / \epsilon_{11}^{nw}$) représentent l'état des contraintes des grains et des phases.

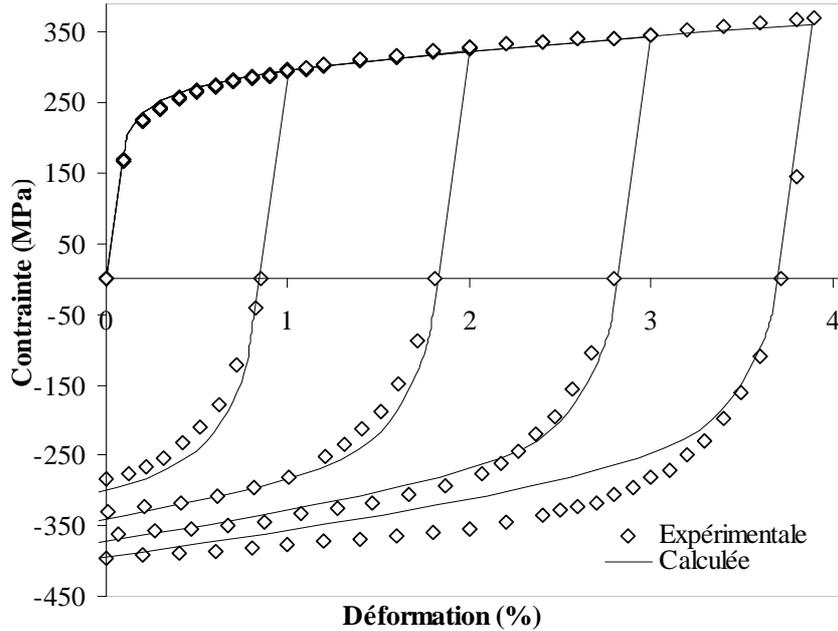


Figure II.23 : comparaison entre les simulations et l'expérience [Choteau 99] pour des essais de traction-compression

II.3.4. Conclusion

Une deuxième approche avec une double transition d'échelles a été exposée, dans cette partie, pour prédire le comportement mécanique des matériaux cubiques sous chargements monotones ou séquentiels. Une nouvelle loi de comportement cristalline a été développée avec une transition d'échelle micro-meso assurée, cette fois-ci, par une approche autocohérente. Le modèle décrit l'écrouissage d'une façon plus réaliste à travers l'introduction de la notion de l'écrouissage non local et la prise en compte de l'accommodation plastique entre l'inclusion et la matrice (milieu homogène équivalent). De nouvelles lois d'écrouissages et de comportements mécaniques des phases et du grain ont été formulées en fonction des grandeurs d'écrouissage comme la densité de dislocations. L'activation de systèmes de glissement est gérée par une fonction inspirée de la viscoplasticité suivant une formulation non locale. Ceci permet d'être efficace au niveau des temps de calcul et d'éviter l'introduction d'une analyse combinatoire extrêmement coûteuse en temps de calcul (l'activité plastique des deux phases sont corrélées).

Nous avons simulé différents résultats numériques concernant la prédiction du comportement mécanique de monocristaux et de polycristaux de symétrie cubique. Ces simulations sont en bonne concordance avec des résultats expérimentaux, issus de la bibliographie. Ces comparaisons ont permis une première validation de notre approche.

II.4. Modèle Mori-Tanaka-Autocoherent

Dans la *partie II.3*, les propriétés mécaniques du grain sont calculées à partir de celles des phases (parois et cellules) par une transition d'échelle assurée par le modèle autocoherent. Ce même modèle a été utilisé afin de connaître le comportement du polycristal à partir de celui des grains. Pour chaque incrément de déformation (ou de contrainte) macroscopique, il faut alors calculer le tenseur d'Eshelby pour chaque grain (*relation II.82*). Il est également nécessaire de déterminer le tenseur des modules tangents élastoplastiques l (*relation II.86*) au niveau de chaque grain. Ceci a pour conséquence d'engendrer des temps de calcul qui deviennent vite rédhibitoires pour un nombre de grains trop important ou des déformations macroscopiques trop élevées.

Dans cette partie, une troisième approche basée sur le modèle de Mori-Tanaka est alors proposée. La déduction du comportement du grain à partir de celui des parois et des cellules est calculée par cette approche. Ce modèle permet de calculer, sans itération, le tenseur des modules tangents au niveau du grain (l) qui est fonction du tenseur d'Eshelby, diminuant ainsi les temps de calcul. Il est adapté à étudier les matériaux composites présentant une microstructure matrice-particule avec une fraction volumique modérée d'inclusions (parois).

Comme dans les deux premières approches, la transition du grain au polycristal est toujours assurée par le modèle autocoherent. Ainsi, ce paragraphe présente uniquement le modèle de Mori-Tanaka.

II.4.1. Présentation du modèle

Le modèle de Mori-Tanaka est basé sur la solution d'Eshelby [*Eshelby 57*] pour une inclusion plongée dans un milieu infini. Une description détaillée de ce modèle peut être trouvée dans [*Derrien 95, Mercier et Molinari 08, Hu et Weng 00*].

On supposera que l'hypothèse $l^{cw} = 0$ est toujours valable. Le taux de déformation dans l'inclusion (ici les parois) en fonction du taux de déformation dans la matrice (cellules) (*figure II.24*) peut s'exprimer dans cette approche de la façon suivante [*Pesci 04*] :

$$\dot{\epsilon}^w = T : \dot{\epsilon}^c \text{ ou bien } \dot{\epsilon}^{inclusion} = T : \dot{\epsilon}^{matrice} \quad (II.87)$$

avec :

$$T = \left[I + s^{esh} : l^{-1} : (l^{ww} - l^{cc}) \right]^{-1} \quad (II.88)$$

s^{esh} est le tenseur d'Eshelby et I , le tenseur identité.

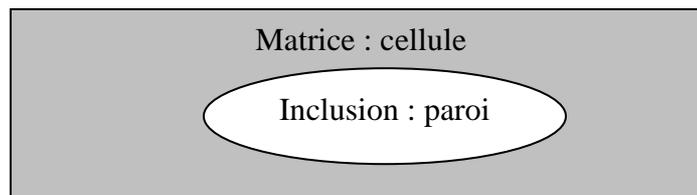


Figure II.24 : hétérogénéité intragranulaire représentée par le modèle de Mori-Tanaka

Le taux de déformation dans la matrice (cellule) est lié à celui du grain par la relation de localisation suivante :

$$\dot{\epsilon}^c = a^c : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{II.89})$$

a^c est le tenseur de localisation des cellules :

$$a^c = [fI + (1-f)T]^{-1} \quad (\text{II.90})$$

La relation II.89 nous permet de déduire la relation de localisation qui existe entre le taux de déformation des parois et celui des grains :

$$\dot{\epsilon}^w = a^w : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{II.91})$$

a^w est le tenseur de localisation des parois :

$$a^w = T : [fI + (1-f)T]^{-1} \quad (\text{II.92})$$

La gestion des systèmes de glissement est assurée par les fonctions $K_{\alpha\beta}^g$ (relations II.63 et II.64). On retrouve, avec la même procédure de calcul, les mêmes expressions des taux de glissements des phases données par les relations II.71. Ainsi, on pourra déduire les mêmes expressions des taux de contraintes des phases données par II.73. Les modules tangents microscopiques gardent les expressions de II.76.

Le taux de déformation totale peut être relié aux taux de déformation dans chaque phase, par la relation de moyenne suivante :

$$\dot{\epsilon}^H = f\dot{\epsilon}^c + (1-f)\dot{\epsilon}^w \quad (\text{II.93})$$

De la même façon, nous obtenons pour les contraintes :

$$\dot{\sigma}^H = f\dot{\sigma}^c + (1-f)\dot{\sigma}^w \quad (\text{II.94})$$

On peut déduire facilement le module tangent mésoscopique au niveau des grains :

$$l = (fl^{cc} + (1-f)l^{wc}) \cdot a^c + (fl^{cw} + (1-f)l^{ww}) \cdot a^w \quad (\text{II.95})$$

L'équation II.95 montre clairement que le tenseur des modules tangents élastoplastiques au niveau des grains l a une forme relativement simple. Ce tenseur dépend de l'état de contraintes, des systèmes actifs, des matrices d'écrouissage à travers les scissions critiques des phases et de toute l'histoire du chargement. On constate que l'équation obtenue est une équation explicite ne nécessitant pas un calcul itératif comme pour l'approche autocohérente.

II.4.2. Résultats numériques

Pour valider l'approche développée dans cette partie, nous avons utilisé les mêmes données expérimentales présentées dans le paragraphe II.3.3. Ainsi, nous avons simulé le

comportement mécanique de monocristaux de Fe- α de structure CC sous chargements monotone et séquentiel ainsi que le comportement mécanique d'un acier inoxydable AISI 316L (structure CFC) avec des chargements monotone et complexe de type Bauschinger.

II.4.2.1. Simulation du comportement mécanique de monocristaux de fer

Les simulations ont été faites en gardant les mêmes angles d'Euler utilisés précédemment dans le *paragraphe II.3.3*. Par conséquent, le seul changement dans la simulation de l'approche de Mori-Tanaka est le jeu de paramètres de simulations. Ces paramètres ont été déterminés par un essai de calage et ils sont regroupés dans le *tableau II.5*. Dans le cadre du modèle de Mori-Tanaka, nous avons fixé une fraction volumique des parois proche de 0,1 pour rester dans le cadre d'un milieu dilué.

Les courbes de simulations et expérimentales sont données dans :

- la *figure II.25* : résultats pour des essais de **traction**,
- la *figure II.26* : résultats pour des essais de **cisaillement**,
- la *figure II.27* : résultats pour des essais de **cisaillement complexe**.

A titre de comparaison, les courbes simulées par l'approche autocohérente sont également présentées sur ces figures.

D'après ces figures, il existe peu d'écart entre les courbes simulées et expérimentales. L'écart relatif le plus élevé est de 20 % et correspond à la *courbe II.25.b*. Les différences qui existent entre les résultats simulés et expérimentaux peuvent être expliquées par les raisons déjà avancées pour l'approche autocohérente :

- Les angles d'Euler ne sont pas connus de façon précise. La première composante des angles d'Euler (φ_1) est inconnue. Elle est considérée en tant qu'un des paramètres constants des simulations.
- Le modèle est élaboré dans le cadre des petites déformations.

Quelque soit le chargement, nous remarquons une évolution similaire entre l'approche autocohérente et celle de Mori-Tanaka notamment pour les trajets simples. Nous pouvons constater une légère différence entre les courbes ; la valeur maximale de cette différence est d'environ 18 MPa. Par contre, pour les trajets complexes, le modèle de Mori-Tanaka décrit mieux le changement de trajet (cf. *figures II.27-b et -c*) et il permet de reproduire de manière plus réaliste l'augmentation de la limite d'élasticité entre les deux chargements.

Le modèle basé sur l'approche de Mori-tanaka est donc capable de reproduire et d'expliquer le comportement de monocristaux sous chargements monotones ou bien complexes.

	a^{gg}	a^{gh}	$\tau_{c0(112)}$ (MPa)	$\tau_{c0(110)}$ (MPa)	$\zeta(\text{MPa}^2)$	k_L	f_0	f_∞	γ^{par}	ξ	k	κ
Traction	1	1,1	17,3	16	500	2	0,89	0,75	3,2	0,1	5,7	0,01
Cisaillement	1	1,1	17	15	450	0,5	0,85	0,75	3,2	0,6	5	0,2
Chargement complexe	1	1,1	6	5	400	4,5	0,9	0,75	3,2	0,6	10	0,01

Tableau II.5 : paramètres des simulations

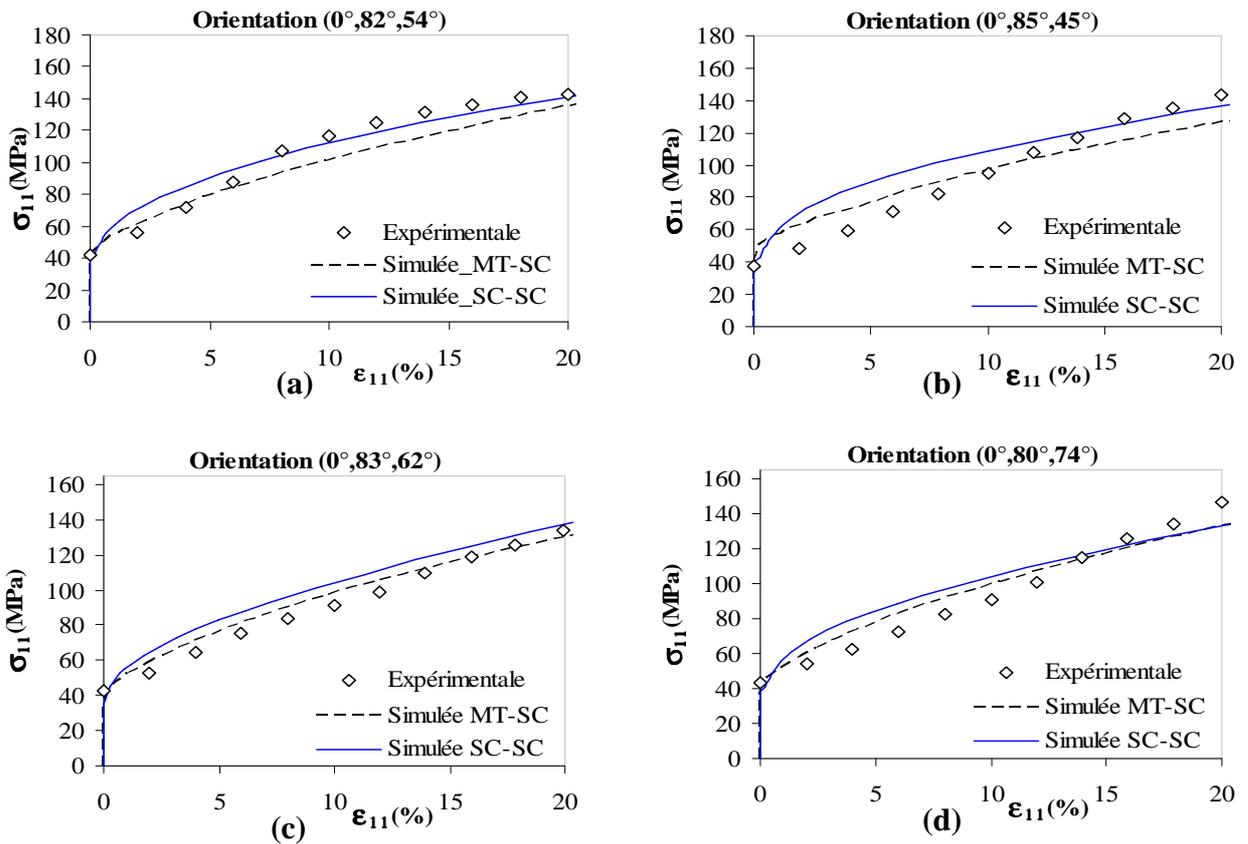


Figure II.25 : résultats expérimentaux [Pollnow et al. 72] et simulés pour des essais de traction : a : identification des paramètres ; b-d : validation du modèle

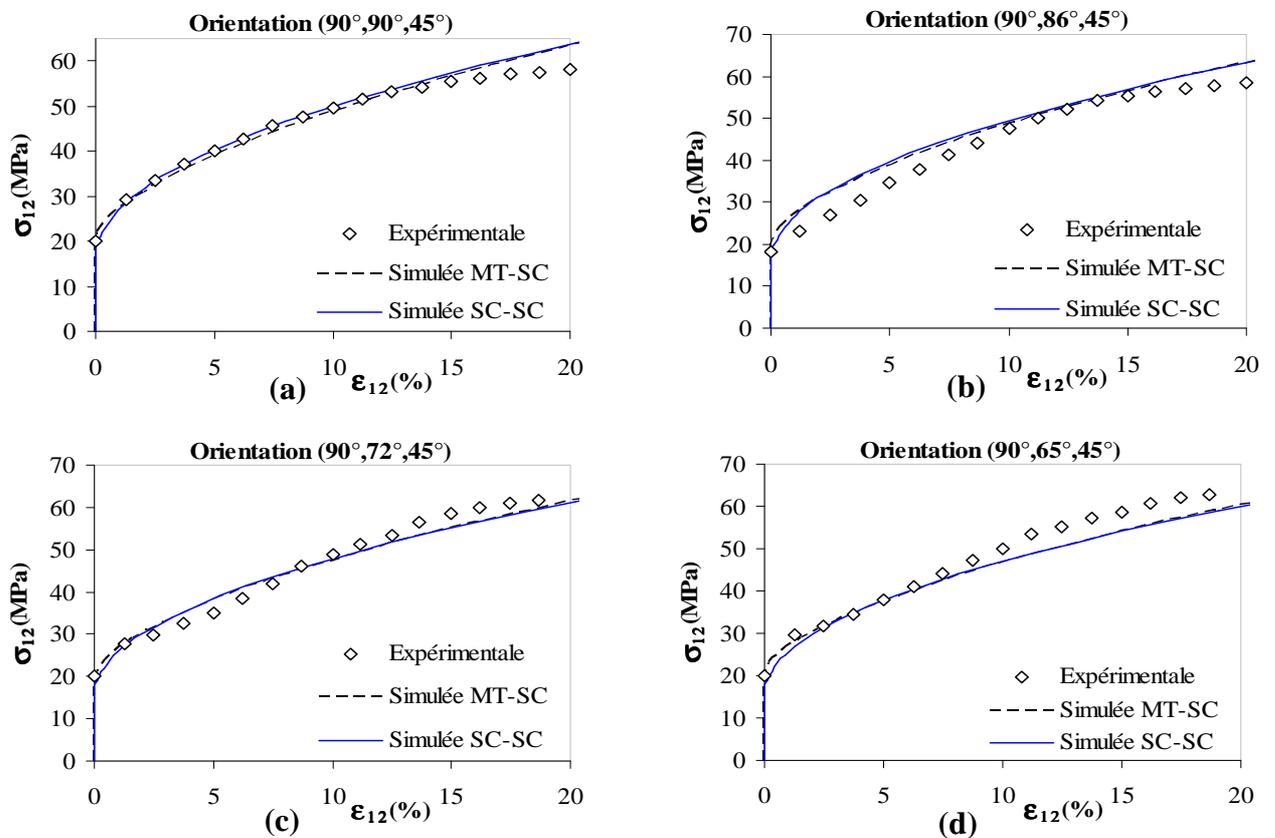


Figure II.26 : résultats expérimentaux [Keh et Nakada 67] et simulés pour des essais de cisaillement : a : identification des paramètres ; b-d : validation du modèle

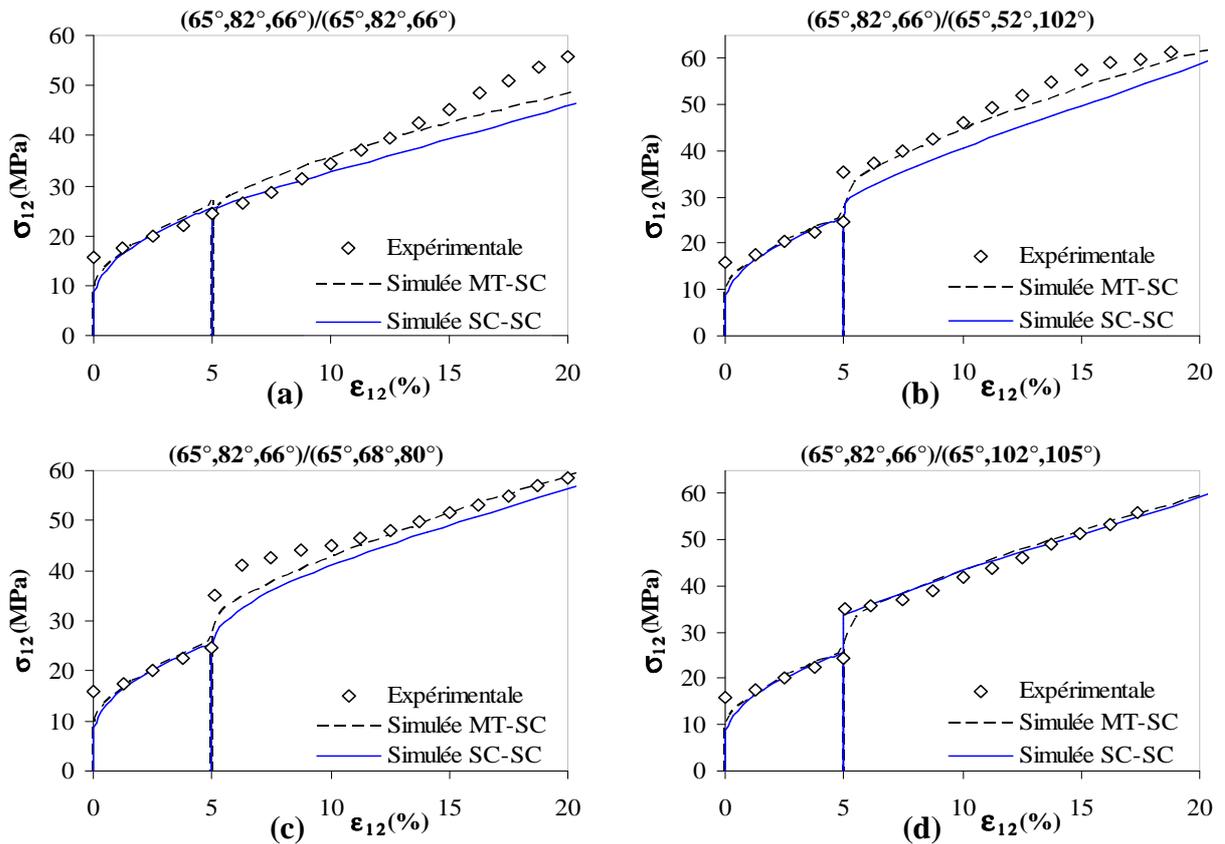


Figure II.27 : résultats expérimentaux [Keh et Nakada 67] et simulés pour des essais de cisaillement complexes : (a) identification des paramètres ; (b-d) validation du modèle

II.4.2.2. Simulation du comportement mécanique d'un polycristal

De manière similaire à l'approche autocohérente, la texture initiale est supposée isotrope. Ce choix est expliqué par la méconnaissance de la texture initiale du matériau simulé. Les scissions critiques initiales sont supposées identiques pour l'ensemble des systèmes de glissements. La scission réduite initiale est nulle. Les paramètres de simulations ont été déterminés par ajustement de la courbe de chargement macroscopique expérimentale présentée sur la figure II.28. Leurs valeurs sont présentées dans le tableau II.6.

La figure II.28 présente également le comportement mécanique aux différentes échelles du matériau (mésoscopique, microscopique et comportement moyen des phases) à la fin du chargement et après la décharge élastique.

Comme pour les approches autocohérente et de Kröner, ces résultats mettent en évidence l'écroutissage non local des parois de dislocations avec une profonde hétérogénéité mécanique entre les phases : -20 MPa pour les cellules et 65 MPa pour les murs.

Nous avons également testé la capacité du modèle à reproduire un chargement complexe (une traction suivie d'une compression) du polycristal (acier 316L) en se basant toujours sur les résultats expérimentaux de [Choteau 99]. Nous avons gardé les paramètres de simulations, donnés dans le tableau II.6 avec des taux de prédéformation différents : 1 %, 2 %, 3 % et 4 %. Les résultats numériques et expérimentaux sont présentés dans la figure II.29. Nous observons que le trajet Bauschinger et l'écroutissage sont bien reproduits par le modèle durant le premier et le second chargement aux différents taux de prédéformation choisis. L'écart relatif le plus élevé est observé à 4 % de prédéformation et environ 10 %.

a^{gg}	a^{gh}	τ_{c0} (MPa)	ζ (MPa ²)	k_L	f_0	f_∞	γ^{par}	ξ	k
1	1,1	90	600	25	0,8	0,7	2,2	0,3	10

Tableau II.6 : paramètres de simulation

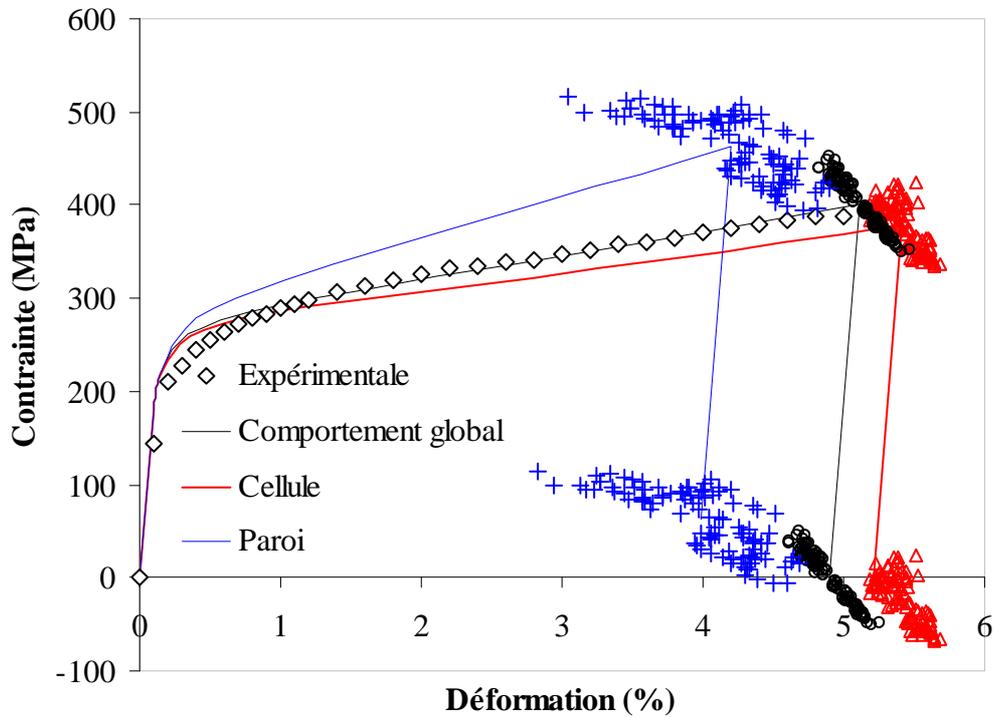


Figure II.28 : comportement mécanique global et des phases en traction. Les symboles (\circ : $\sigma_{11}^{nl} / \epsilon_{11}^{nl}$, Δ : $\sigma_{11}^{nc} / \epsilon_{11}^{nc}$, $+$: $\sigma_{11}^{nw} / \epsilon_{11}^{nw}$) représentent l'état de contraintes des grains et des phases.

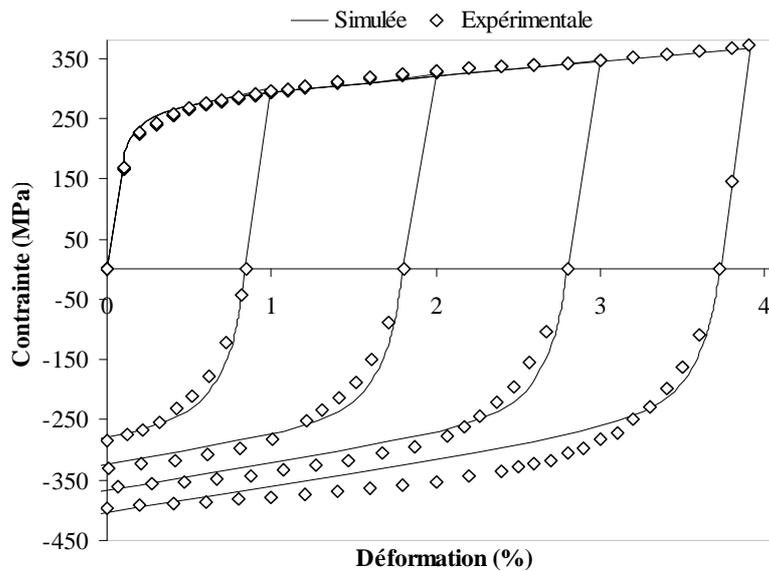


Figure II.29 : comportements expérimental [Choteau 99] et simulé de l'effet Bauschinger à différents pourcentages de prédéformations

II.4.3. Conclusion

Une troisième approche avec une double transition d'échelles a été développée dans cette partie afin de modéliser le comportement mécanique élastoplastique des matériaux de structure cubique sous sollicitations monotones ou complexes. Le comportement du grain est déduit de celui des phases à travers une transition d'échelle assurée cette fois-ci par le modèle de Mori-Tanaka. Ce dernier permet de réduire les temps de calcul au niveau du calcul du tenseur des modules tangents élastoplastiques mésoscopiques, et donc, d'envisager des simulations avec un plus grand nombre de cristallites et pour des taux de déformation macroscopiques plus importants. Le comportement du polycristal a été calculé à partir du grain par une deuxième transition d'échelles avec un modèle autocohérent.

Nous avons simulé le comportement mécanique des monocristaux de structure cubique centré, d'orientations différentes, sous chargements monotones (traction et cisaillement) et sous chargement complexe (cisaillement suivi d'un cisaillement dans une autre direction). Le comportement d'un polycristal d'acier 316L, a été également simulé dans le cas d'un trajet Baushinger. Ces résultats montrent qu'on obtient une bonne concordance entre les résultats du modèle et les essais expérimentaux choisis comme référence dans cette partie.

II.5. Modèle Peeters-Autocohérent

II.5.1. Introduction

Nous avons développé, dans les sections précédentes, différentes approches micromécaniques pour la prédiction du comportement mécanique à l'échelle du grain. Il nous a semblé intéressant de compléter notre étude en développant une approche différente des modèles d'homogénéisation pour la description de la microstructure de dislocations, en l'occurrence, une approche liée à la densité de dislocations a été utilisée. Ce type d'approche définit l'écroutissage du matériau et la contrainte d'écoulement en fonction de variables internes liées à la densité de dislocations totale.

Dans cette partie, nous présentons une modélisation à l'échelle intragranulaire basée sur les travaux de Peeters et al. [Peeters et al. 02]. La description de la microstructure intragranulaire repose sur l'observation expérimentale de structures de dislocations particulières présentes dans des grains dont la structure cristalline est cubique centrée. Nous avons étendu ce modèle au cas des matériaux à symétrie cubique faces centrées. La transition d'échelle du grain à l'agrégat polycristallin sera, une nouvelle fois, assurée par le modèle autocohérent élastoplastique présenté dans le *chapitre I*.

II.5.2. Présentation du modèle

II.5.2.1. *Echelle microscopique : structure de dislocations*

Nous présentons dans cette section, le principe du modèle de manière rapide. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur aux différents articles présentant en détail ce type d'approche [Peeters et al. 00, Peeters et al.02, Mahesh et al. 04].

Le modèle développé ici est basé sur la décomposition de la densité de dislocations totale du matériau sous la forme de trois termes (*figure II.31*) :

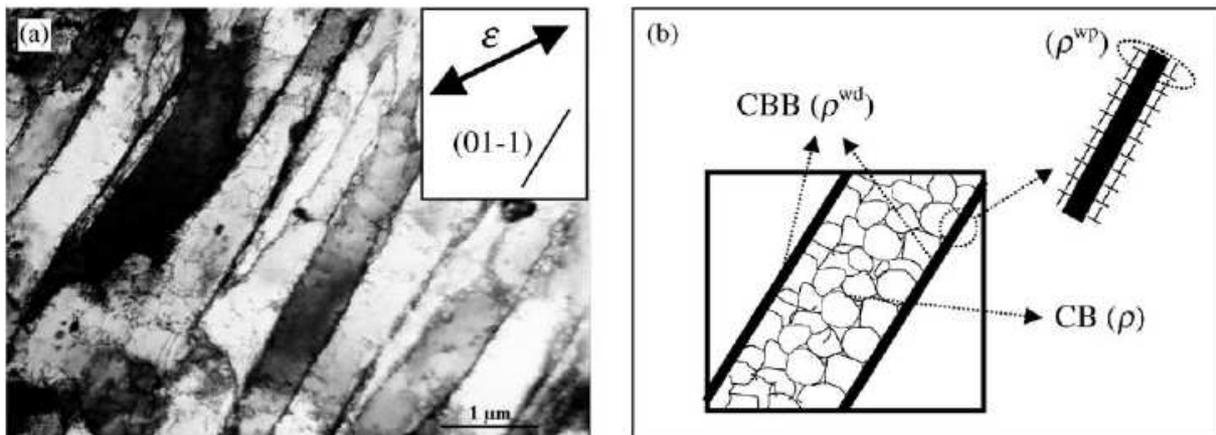


Figure II.30 : représentation de la microstructure intragranulaire [Peeters et al. 02]

- La densité de dislocations immobiles ($1/m^2$) stockées dans les murs de dislocations (cell-block boundaries (CBBs)), définie sur la famille de plans (111) : ρ^{wd} .
- La densité de dislocations mobile dites 'polarisées' définie sur la famille de plans (111) : ρ^{wp} . Cette densité est supposée avoir une polarité ou un signe : elle peut donc prendre une valeur positive ou négative. Durant la déformation plastique (*figure II.30*), on a une

polarisation des murs : un excédent de dislocations mobiles (avec un signe donné) est stoppé au niveau d'une face d'un mur et les dislocations de signe opposé sont arrêtées sur l'autre face. Ce phénomène va causer une asymétrie au niveau de la résistance au glissement plastique suivant le sens considéré. Pour les auteurs, ceci explique l'effet Baushinger et la différence de limite d'élasticité constatée lors d'un changement de trajet. Quand le chargement est inversé, les dislocations 'polarisées' peuvent sortir des murs et s'annihiler avec les dislocations présentes à l'intérieur des cellules ; ceci expliquant le régime transitoire observé durant le deuxième chargement. Ensuite, avec la déformation, ces murs deviennent polarisés à nouveau mais dans un sens opposé au premier chargement et on retrouve une courbe de chargement équivalente à celle du chargement monotone.

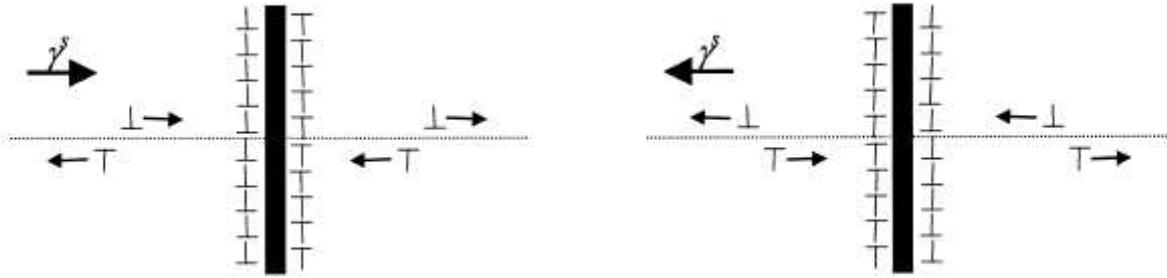


Figure II.31 : schématisation de la polarisation de la densité de dislocations mobiles ρ^{wp} [Peeters et al. 00]

➤ La densité de dislocations statistiquement stockées ($1/m^2$) à l'intérieur des cellules (cell boundaries (CBs)), modélisée par un scalaire pour l'ensemble des systèmes de glissement : ρ .

La forme des lois décrivant l'évolution de ces trois grandeurs de dislocations est similaire aux lois classiques pour la gestion de stockage et d'annihilation de dislocations [Kocks 76].

Un matériau CFC est caractérisé par quatre familles de murs de dislocations (tableau II.7) possibles. La normale de chaque mur est notée n_i^w ($i=1, \dots, 4$) et la direction de glissement est notée m_s ($s=1, \dots, 12$). A partir de la normale au mur et la direction de glissement, nous pouvons définir deux termes importants afin de calculer les densités de dislocations définies précédemment :

➤ Pour chaque mur actuellement généré pour un incrément de déformation donné, le flux de dislocations du réseau est décrit par l'expression :

$$\Phi_i = \sum_{s=1}^n \frac{\dot{\gamma}_s}{b} m_s \cdot n_i^w \quad (\text{II.96})$$

$\dot{\gamma}_s$ est la vitesse du glissement du système s (positive ou négative) et b , la norme du vecteur de Burgers. Si un système de glissement est coplanaire au mur, alors il ne contribue pas au flux Φ_i (le produit $m_s \cdot n_i^w$ est nul).

➤ Le taux de glissement total dans chaque mur :

$$\dot{\Gamma}_i = \sum_{\{s, m_s \cdot n_i^w = 0\}} |\dot{\gamma}_s| \quad (\text{II.97})$$

Dans une première approche, le modèle construit au maximum, à chaque incrément de déformation, deux familles de murs de dislocations parallèles aux plans (111) dont les activités de glissement sont les deux plus dominantes [Mahesh et al. 04]. Les autres plans correspondent aux murs générés précédemment, permettant ainsi de prendre en compte l'effet de la microstructure existante et donc l'histoire des chargements que subit le matériau.

N° de mur	Plan du mur
1	(111)
2	($\bar{1}$ 11)
3	($\bar{1}\bar{1}$ 1)
4	(11 $\bar{1}$)

Tableau II.7 : quatre familles de murs possibles pour un CFC

Evolution de la densité de dislocations immobiles dans les murs actuellement générés:

L'évolution de la densité de dislocations immobiles de chaque famille i de murs au pas actuel est définie par :

$$\dot{\rho}_i^{wd} = \left(I^{wd} \sqrt{\rho_i^{wd}} - R^{wd} \rho_i^{wd} \right) \frac{\dot{\Gamma}_i}{b}, \quad (i=1,2) \quad (II.98)$$

I^{wd} et R^{wd} sont des coefficients de stockage et de restauration des dislocations.

Evolution de la densité de dislocations polarisées dans les murs actuellement générés :

Le stockage et l'annihilation des dislocations polaires de chaque famille i de murs au pas actuel sont décrits par :

$$\dot{\rho}_i^{wp} = \left(I^{wp} \sqrt{\rho_i^{wd} + |\rho_i^{wp}|} \text{sign}(\Phi_i) - R^{wp} \rho_i^{wp} \right) |\Phi_i| \quad (II.99)$$

I^{wp} : coefficient de stockage des dislocations polaires, R^{wp} : coefficient de restauration des dislocations polaires. Ce sont deux paramètres à identifier.

Evolution de la densité de dislocations dans les murs non générés actuellement :

Un changement de trajet de déformation ou une rotation du monocristal peut engendrer l'activation de nouveaux systèmes de glissement. Les dislocations mobiles vont alors générer de nouveaux murs de dislocations correspondant au mode actuel de déformation et détruire (de manière progressive) les murs formés lors de la déformation précédente. Les évolutions des densités de dislocations immobiles et polaires pour les anciens murs sont décrites par :

$$\dot{\rho}_i^{wd} = -\frac{R_{ncg}}{b} \rho_i^{wd} \dot{\Gamma}_{new} \quad (II.100)$$

$$\dot{\rho}_i^{wp} = -\frac{R_{ncg}}{b} \rho_i^{wp} \dot{\Gamma}_{new} \quad (II.101)$$

où $\dot{\Gamma}_{new}$ est la vitesse de glissement totale sur les plans de glissement actuellement activés et R_{ncg} , un terme de restauration des murs non générés pour l'incrément de déformation donné.

Lorsque le flux associé au mur actuel est inversé (changement de signe), ce qui est le cas notamment lors d'un essai Bauschinger, les dislocations polarisées amassées le long de ces murs peuvent facilement se remettre en mouvement et être annihilées, ce qui peut se traduire par l'équation suivante :

$$\dot{\rho}_i^{wp} = -R_{rev} \rho_i^{wp} |\Phi_i| \quad (II.102)$$

où R_{rev} est la vitesse d'annihilation des dislocations polarisées.

Evolution de la densité de dislocations dans les cellules :

Durant le premier chargement, la loi d'évolution de la densité de dislocations dans les cellules est semblable à la loi II.98 :

$$\dot{\rho} = \left(I\sqrt{\rho} - R\rho \right) \frac{\sum_s |\dot{\gamma}^s|}{b} \quad (II.103)$$

I est un coefficient d'immobilisation et R un coefficient d'annihilation.

Durant un essai Bauschinger (deuxième chargement), la plupart des systèmes de glissement actifs lors de la pré-déformation le reste durant le second trajet, mais dans le sens opposé. Les dislocations polarisées amassées le long des murs peuvent facilement se mouvoir et être annihilées par les dislocations de signe opposé dans les cellules, engendrant une augmentation de la vitesse d'annihilation des cellules de dislocations. Un terme traduisant l'effet dû au changement de trajet a été rajouté à (II.101) :

$$\dot{\rho} = \left\langle \left(I\sqrt{\rho} - R\rho \right) \sum_s |\dot{\gamma}^s| - \psi R_2 \rho \frac{\rho_{bausch}}{\rho_{sat}^{wp}} \sum_s |\dot{\gamma}^s| \right\rangle \quad (II.104)$$

Le symbole $\langle y \rangle$ donne 0 si $y \leq 0$ et y si $y > 0$.

avec ψ , un terme qui doit être déterminé suivant trois cas possibles :

- $\psi=0$, si aucun flux n'est inversé
- $\psi=1$, si un flux de la famille i de murs est inversé. On a : $\rho_{bausch} = |\rho_i^{wp}|$
- $\psi=1$, si deux flux de la famille i de murs sont inversés. On a : $\rho_{bausch} = \sum_{i=1}^2 |\rho_i^{wp}|$

Le coefficient R_2 détermine l'importance de l'interaction des deux familles de dislocations sur les cellules. Le coefficient ρ_{sat}^{wp} est la valeur de saturation des dislocations polarisées. Nous renvoyons le lecteur aux articles de Peeters pour une explication détaillée de la justification physique de ces équations.

Le schéma ci-dessous présente une récapitulation du calcul de la densité de dislocations :

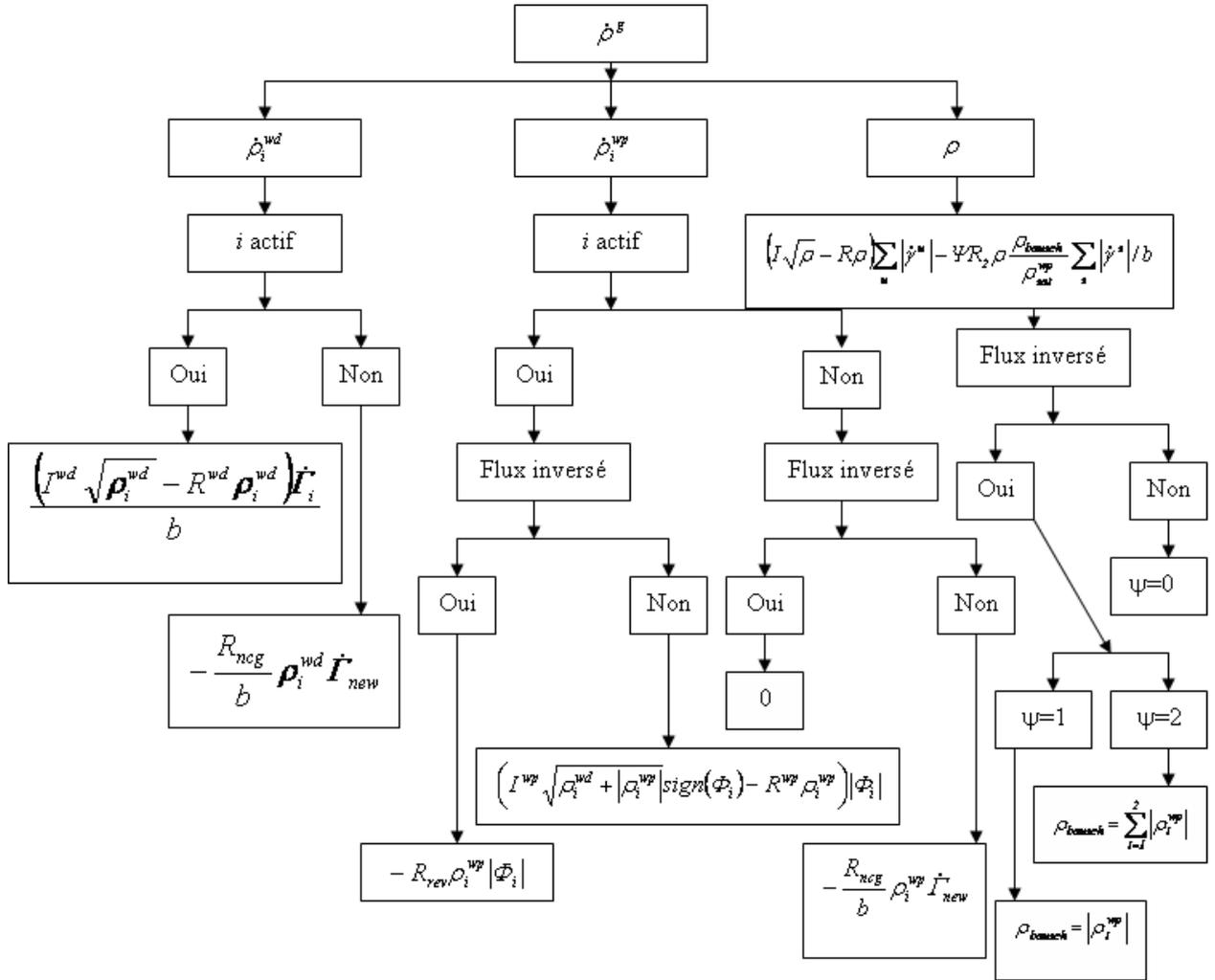


Figure II.32 : schéma explicatif du modèle microscopique

II.5.2.2. Echelle mésoscopique

Evolution de la scission critique :

La scission critique τ_c^s par un système de glissement s peut être définie en faisant intervenir la fraction volumique f des cellules, l'écroutissage isotrope dû aux cellules τ^{CB} , l'écroutissage latent et la polarité des murs τ^{CBB} et tous les aspects de la microstructure n'entrant pas en jeu dans les variables internes (tailles de grain, etc.) :

$$\tau_c^s = \tau_0 + (1-f)\tau^{CB} + f \sum_{i=1}^4 \tau_{is}^{CBB} \quad (\text{II.105})$$

où

$$\tau_{is}^{CBB} = \tau_{is}^{wp} + \tau_{is}^{wd} \quad (\text{II.106})$$

$$\tau_{is}^{wp} = \alpha \mu b \left\langle \sqrt{|\rho_i^{wp}|} m_s n_i \cdot \text{sign}(\rho_i^{wp}) \right\rangle \quad (\text{II.107})$$

$$\tau_{is}^{wd} = \alpha \mu b \sqrt{\rho_i^{wd}} |m_s n_i| \quad (\text{II.108})$$

$$\tau^{CB} = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (\text{II.109})$$

La gestion des systèmes actifs :

La formulation de Ben-Zineb et al. [Ben Zineb et al. 01] a été utilisée afin de gérer l'activation et la désactivation des systèmes de glissements :

$$\dot{\gamma}^g = K^g(\tau^g, \tau_c^g) \dot{\tau}^g \quad (\text{II.110})$$

L'expression de la fonction K^g est donnée par :

$$K^g = \frac{1}{\eta} \left(\frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(k \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} - 1 \right) \right) \right) \right) \left(\frac{1}{2} \left(1 + \tanh(\tau \dot{\tau}^g) \right) \right) \quad (\text{II.111})$$

k est paramètre numérique. η traduit l'auto-écrouissage. Dans le *chapitre I*, ce terme correspond au coefficient H^{gg} de la matrice d'écrouissage. Dans la formulation proposée, l'évolution de la scission critique n'est plus gérée par l'intermédiaire d'une matrice d'écrouissage mais par les densités de dislocations définies précédemment. Nous avons donc introduit une relation empirique pour cette grandeur liée au taux d'activité total. Son expression est donnée par :

$$\eta = k_f \left(1 + (k_r - 1) \text{Exp} \left(k_e \sum_g \dot{\gamma}^g \right) \right) \quad (\text{II.112})$$

Cette expression permet de faire varier η dans un intervalle $[k_f, k_r]$, avec une vitesse k_e .

Evolution du taux de glissement :

On peut montrer que l'expression du taux de glissement est sous la forme :

$$\dot{\gamma}^h = (\delta_{gh} + K^g R^g : c(\Omega) : R^h)^{-1} K^g R^g : c(\Omega) : \dot{\epsilon}^{II}(\Omega) = N^{hg} : \dot{\epsilon}^{II}(\Omega) \quad (\text{II.113})$$

Equations constitutives du grain

La vitesse de déformation totale au niveau des grains est fonction des déformations élastique et plastique :

$$\dot{\epsilon}^{II} = \dot{\epsilon}^{eII} + \dot{\epsilon}^{pII} \quad (\text{II.114})$$

La déformation plastique au niveau des grains est exprimée en fonction du tenseur de Schmid R^g et du taux de glissement $\dot{\gamma}^g$ sous la forme :

$$\dot{\epsilon}^{pII} = \sum_g R^g \dot{\gamma}^g \quad (\text{II.115})$$

Après quelques développements mathématiques, on trouve :

$$\dot{\epsilon}^H = \left(s + \sum_{g,h} R^g : N^{hg} : c \right) : \dot{\sigma}^H \quad (\text{II.116})$$

Nous rappelons que s et c dénotent le tenseur de souplesse et de rigidité respectivement. L'inverse du tenseur des modules tangents élasto-plastiques l^{-1} est sous la forme :

$$l^{-1} = s + \sum_{g,h} R^g : N^{hg} : c \quad (\text{II.117})$$

II.5.3. Résultats numériques

II.5.3.1. Chargement monotone

Comportement mécanique

Dans cette partie, nous avons testé la capacité du modèle développé à reproduire le comportement mécanique d'un acier inoxydable AISI 316L pour un chargement monotone (traction) et pour un trajet Bauschinger (traction-compression). Cette fois-ci, nous avons pris comme essais de référence, ceux effectués durant ce travail de thèse. Pour plus de détails, le lecteur pourra donc se référer à la partie expérimentale de ce rapport développé dans le *chapitre III*.

Nous avons utilisé la même méthodologie que les précédentes études numériques. La texture est supposée isotrope et le polycristal modèle est constitué de 200 grains de forme sphérique. Les paramètres de simulations ont été déterminés à partir de la courbe expérimentale en traction et ils ont été gardés constants lors de la simulation du deuxième chargement (compression). Les valeurs de ces paramètres sont présentées dans le *tableau II.8*. Les paramètres liés au matériau sont présentés dans le *tableau II.9*.

Nous avons présenté sur la *figure II.33* les comportements mécaniques simulé et expérimental de l'acier inoxydable AISI 316L déformé à 10 %, ainsi que l'état mécanique de chaque grain (contrainte-déformation) à la fin du chargement et après la décharge. D'après cette courbe, on observe que le modèle arrive logiquement à simuler le premier chargement en essai de traction étant donné le grand nombre de variables internes ajustables.

f	k	k_f	k_r	k_e	τ_{c0} (MPa)	α	I
0,8	20	$55 \cdot 10^{-5}$	18	$55 \cdot 10^4$	55	0,1	10^{-2}
I^{wd}	I^{wp}	R (m)	R^{wd} (m)	R^{wp} (m)	R_{ncg} (m)	R_{rev} (m)	R_2 (m)
$30 \cdot 10^{-2}$	$10 \cdot 10^{-2}$	10^{-9}	10^{-9}	10^{-9}	10^{-9}	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-9}$

Tableau II.8 : paramètres d'ajustement

c_{11} (GPa)	c_{12} (GPa)	c_{44} (GPa)	b (m)
245	105	70	$2,86 \cdot 10^{-10}$

Tableau II.9 : paramètres du matériau

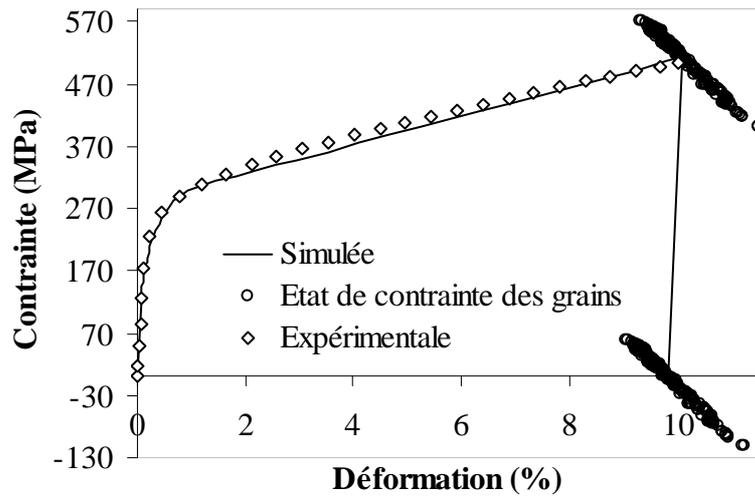


Figure II.33 : comportement macroscopique d'un acier AISI 316L pour un chargement en traction ; O : état mécanique de chaque cristallite (contrainte/déformation) dans la direction de traction

Evolution de la densité de dislocations

Les évolutions des trois densités de dislocations ρ , ρ_i^{wd} et ρ_i^{wp} pour un grain donné du polycristal, en fonction de la déformation totale sont présentées sur les figures II.34 et II.35, respectivement. L'orientation du grain (angles d'Euler) est (1,45 ; 0,83 ; 3,22°).

Les figures II.34 et II.35 montrent clairement qu'on a principalement un seul type de mur de dislocations parallèle au plan de glissement (111). La deuxième famille de murs parallèle au plan (11 $\bar{1}$) est minoritaire. Ceci peut être corrélé au fait que pour cette orientation donnée, on a l'activation majoritaire d'un système de glissement dans le plan (111). Les densités de dislocations ρ_i^{wd} et ρ_i^{wp} de ces deux murs évoluent d'une façon similaire pour le mur (111). A 10 % de déformation totale, un facteur 7 existe entre les deux types de dislocations de ce mur ($\rho_i^{wd} = 7\rho_i^{wp}$). Ce facteur est dû au choix des paramètres de stockage (I^{wd} , I^{wp}) et d'annihilation des densités de dislocations (R^{wd} , R^{wp}). Le mur de type (11 $\bar{1}$) atteint la saturation à 3 % pour les deux densités de dislocations mais leurs valeurs diffèrent ($\rho_i^{wp} = 6.10^{14} \text{ m}^{-2}$ et $\rho_i^{wd} = 2,5.10^{13} \text{ m}^{-2}$).

La figure II.36 montre l'évolution de la densité des dislocations dans les cellules (ρ). Cette évolution est rapide et passe de 10^9 à $2 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$.

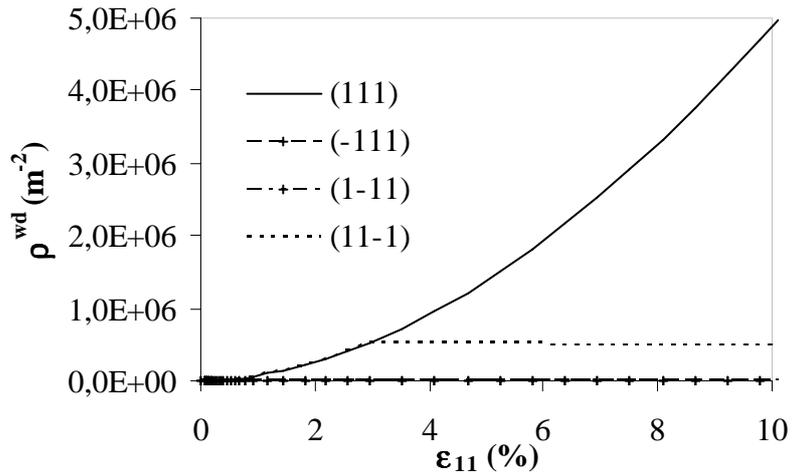


Figure II.34 : évolution de la densité de dislocations immobiles ρ^{wd} durant un essai de traction

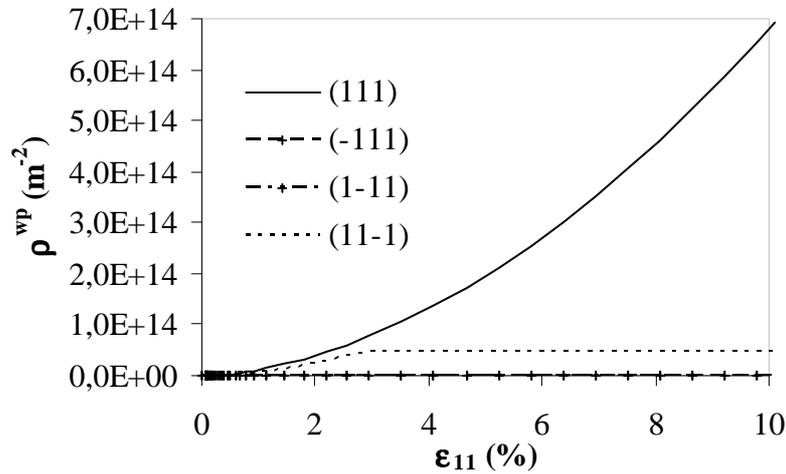


Figure II.35 : évolution de la densité de dislocations polarisées ρ^{wp} durant un essai de traction

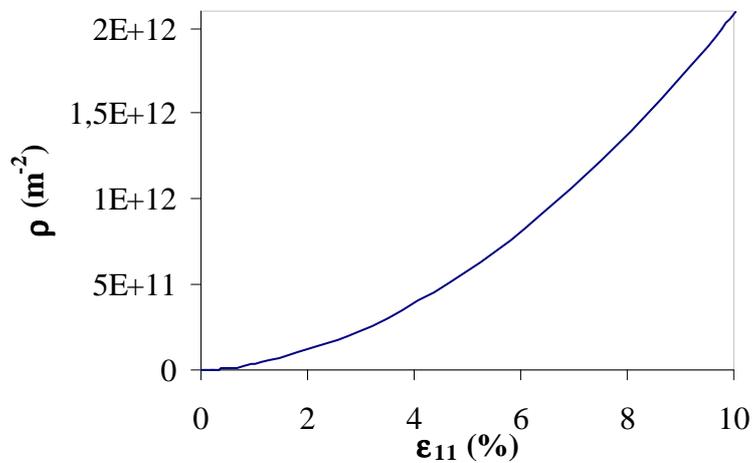


Figure II.36 : évolution de la densité de dislocations dans les cellules ρ durant un essai de traction

II.5.3.2. *Chargement complexe*

Les résultats expérimentaux et simulés pour un chargement Baushinger, à différents taux de prédéformations, sont présentés sur la *figure II.37*. Sur cette figure, on constate que le modèle est capable de reproduire la courbe expérimentale macroscopique dans le cas d'un chargement complexe. Les courbes d'écrouissement du premier et du second chargement sont bien reproduites par ce modèle pour l'ensemble des prédéformations considérées.

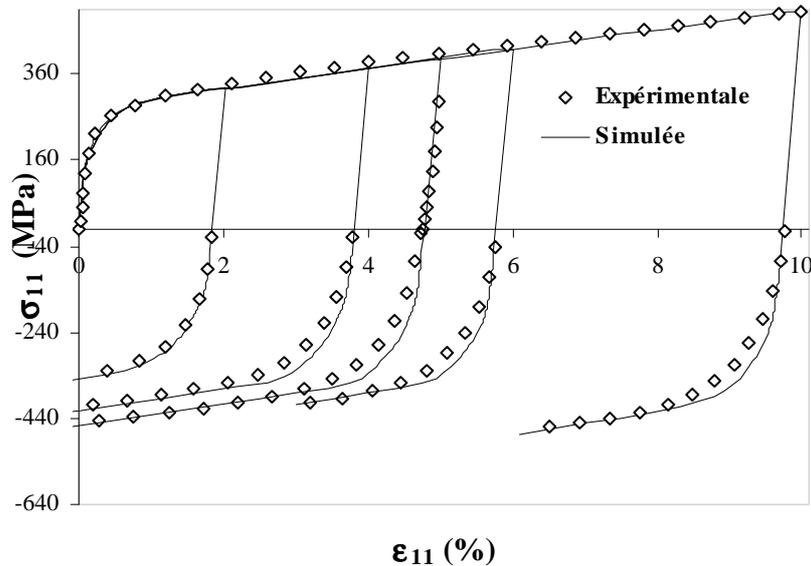


Figure II.37 : comportement macroscopique du AISI 316L pour des essais de traction-compression

Cette approche a comme principal inconvénient le nombre important de paramètres à identifier (16). De plus, une partie d'entre eux ne peut être déterminée expérimentalement. Peeters et al. [Peeters et al. 00] ont mis en place une campagne d'essais avec 5 trajets complexes différents pour trouver, par une procédure d'optimisation, le jeu de paramètres expliquant l'intégralité des résultats expérimentaux. Dans notre cas, ne disposant que d'un seul type de trajet complexe, nous avons déterminé un jeu de paramètres (de manière empirique) en partant des valeurs trouvées par Mahesh et al. [Mahesh et al. 04] sur un polycristal de cuivre après une étude sur l'influence et le rôle de chaque paramètre du modèle. Cette méthodologie ne garantit pas d'avoir trouvé le meilleur jeu (et unique) de paramètres.

II.5.4. Conclusion

Nous avons développé une quatrième approche élastoplastique pour prédire et expliquer le mécanisme de la déformation élastoplastique. Elle est basée sur un couplage entre une modélisation de la microstructure de dislocations et une approche autocohérente. La modélisation de l'hétérogénéité intragranulaire consiste à alimenter le modèle autocohérent par une description microscopique des mécanismes des dislocations. Trois densités de dislocations sont nécessaires pour définir ces mécanismes : la densité de dislocations des cellules, la densité de dislocations immobiles stockées dans les murs et la densité de dislocations polaires des murs.

Nous avons simulé un trajet Baushinger à différents taux de prédéformation. Les évolutions des densités de dislocations ont été également simulées. Les résultats des simulations ont été confrontés avec succès aux résultats expérimentaux au niveau macroscopique.

II.6. Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté quatre modèles élastoplastiques des matériaux de structure cubique afin de tenir compte de l'hétérogénéité intragranulaire. Ils peuvent se classer en deux familles :

➤ Trois approches avec une double transition d'échelles élastoplastique qui tiennent compte de la morphologie des cellules de dislocations. Dans la première approche, les deux transitions ont été assurées par le modèle de Kröner pour déduire le comportement du grain de ceux des phases (cellules et parois) et le modèle autocohérent afin de simuler le comportement du polycristal à partir de celui des grains. La deuxième approche est assurée par le modèle autocohérent. Elle a été développée afin de tenir compte de l'accommodation plastique entre l'inclusion (cellule ou paroi) et la matrice (grain) négligée (ou bien considérée d'une façon phénoménologique) par le modèle de Kröner. La troisième approche est assurée par le modèle Mori-Tanaka et le modèle autocohérent. Elle a permis de réduire le temps de calcul notamment au niveau du tenseur du module tangent des grains. De plus, cette approche est appropriée à la problématique du fait de la présence d'une phase minoritaire.

Dans ce type d'approches, l'hétérogénéisation intragranulaire est mise en évidence par un écrouissage non local, qui est représenté dans le cas d'une description biphasée, par la structure cellulaire de dislocations. Les grandeurs mécaniques liées aux structures de dislocations ont été prises en compte dans les approches. Une formulation mathématique inspirée de la viscoplasticité a été utilisée pour la gestion de l'activation des systèmes de glissements afin de lever les inconvénients d'une analyse combinatoire basée sur les critères de Schmid. Les modèles présentés dans ce chapitre donnent des renseignements complémentaires aux approches classiques. Ainsi, il est possible de suivre les évolutions des déformations du polycristal, des grains et des phases (cellules et parois) ou de la densité de dislocations.

Plusieurs simulations numériques ont été effectuées. Nous avons fait une étude paramétrique en utilisant l'approche de Kröner-autocohérent. Cette étude a permis de voir l'influence de chaque paramètre des modèles sur le comportement mécanique de l'agrégat polycristallin et sur celui des phases. Des confrontations avec des données expérimentales ont également été entreprises. Nous avons simulé le comportement de monocristaux et de polycristaux ayant subi des chargements monotones et séquentiels (effet Bauschinger) pour vérifier la cohérence des approches mises en place.

➤ La quatrième approche développée dans ce travail est basée sur la densité de dislocations comme variable principale. Ce type d'approche définit l'écrouissage du matériau et la contrainte d'écoulement en fonction de variables internes liées à la densité de dislocations totale. Celle-ci joue un rôle principal dans la gestion du stockage et de l'annihilation des dislocations durant la déformation plastique à travers trois termes : la densité de dislocations des cellules, la densité de dislocations immobiles stockées dans les murs et la densité de dislocations polarisées des murs. D'après les premières simulations, le modèle semble être capable de prédire le comportement d'un matériau de structure cubique à faces centrées.

Dans ce chapitre nous avons présenté et validé, avec des résultats expérimentaux bibliographiques, quatre modèles différents et complémentaires. Il reste à tester ces modèles avec nos résultats expérimentaux acquis au cours de cette thèse. Nous avons effectué des essais Bauschinger à différents taux de prédéformation sur un alliage d'aluminium 6060 et sur un acier austénitique AISI 316L. Des mesures ont été réalisées par diffraction des rayons X pour

suivre l'évolution des contraintes résiduelles en fonction du chargement. La diffraction nous permettra de valider nos modèles à une échelle intermédiaire entre les niveaux macroscopique et microscopique : les volumes diffractants.

Chapitre III : Présentation de l'étude expérimentale

III.1. Introduction

L'objectif de cette partie expérimentale est d'obtenir une description satisfaisante de l'état et du comportement du matériau étudié (microstructure, composition chimique, mécanismes de déformation, ...). Ceci doit permettre d'alimenter les modèles de transition d'échelles utilisés mais aussi de les valider aussi bien à l'échelle macroscopique qu'à l'échelle locale et aux différentes échelles intermédiaires. En utilisant ces informations et en corrélation avec les simulations, on pourra alors mieux appréhender le rôle de la microstructure de dislocations sur le comportement global du matériau.

L'essai Bauschinger est le mode de sollicitation mécanique privilégié dans notre étude. Les éprouvettes (acier AISI 316L et Al6060) ont subi des essais de traction-compression à divers taux de prédéformation. Ces essais permettent d'avoir les courbes contrainte-déformation macroscopiques du matériau. Celles-ci nous donnent alors des informations pour déterminer certains paramètres du modèle comme les scissions critiques. Elles permettent également une validation a posteriori de nos simulations du comportement global du matériau. La diffraction des RX (**DRX**) est la technique expérimentale privilégiée de notre travail. Elle donne accès à l'évolution des contraintes résiduelles suivant la déformation macroscopique imposée et permet la validation de nos calculs à l'échelle, plus fine, du volume diffractant.

III.2. Présentation des matériaux

III.2.1. Acier inoxydable

Le premier matériau sélectionné pour l'étude de la thèse est un acier inoxydable austénitique, appelé couramment, selon la norme américaine, AISI 316L. A cause de ses caractéristiques intéressantes de résistance à la corrosion, de déformation et de soudabilité, il est fréquemment utilisé comme acier de construction dans les industries nucléaire, chimique ou alimentaire. Cet acier possède une structure de type CFC, avec un paramètre de maille théorique a de 3,59 Å. Sa composition chimique et quelques-unes de ses propriétés mécaniques sont résumées dans les *tableaux III.1* et *III.2*.

Des observations ont été réalisées à l'aide d'un microscope optique (*figure III.1*) et d'un microscope électronique à balayage (MEB) (*figures III.2*). Après un polissage et une attaque chimique dans un bain de Keller, l'analyse montre que la microstructure est caractérisée par une matrice austénitique à grains relativement fins (taille moyenne de l'ordre de 15 μm). Le matériau ne présente pas de texture morphologique particulière et il est constitué de grains globalement équiaxes. On observe également la présence d'inclusions de sulfure de manganèse allongées.

C(%)	Si(%)	Mn(%)	P(%)	S(%)	Cr(%)	Ni(%)	Mo(%)	Cu(%)	N(%)	Co(%)
0,015	0,31	1,44	0,028	0,021	16,51	10,46	2,13	0,18	0,02	0,04

Tableau III.1 : composition chimique de l'acier AISI 316L

E (GPa)	μ (GPa)	ν	b (Å)	Dureté (HB)	A (%)	R_m (N/mm ²)	$R_{0,2\%}$ (N/mm ²)
189	81	0,26	5	137	59	588	333

Tableau III.2 : caractéristiques mécaniques de l'acier AISI 316L

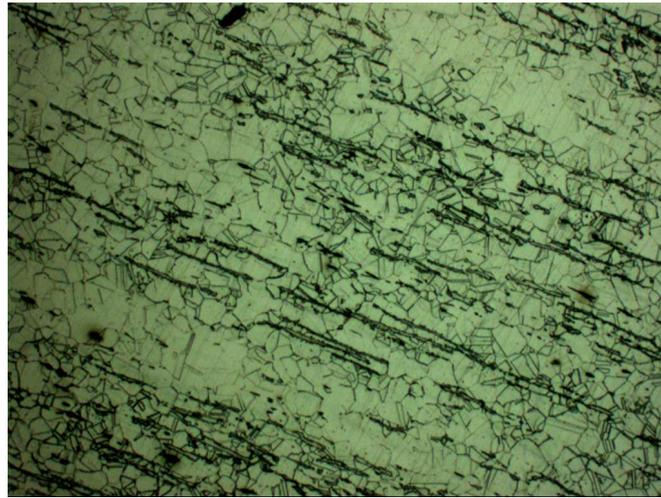


Figure III.1 : observation au microscope optique de l'acier AISI 316L

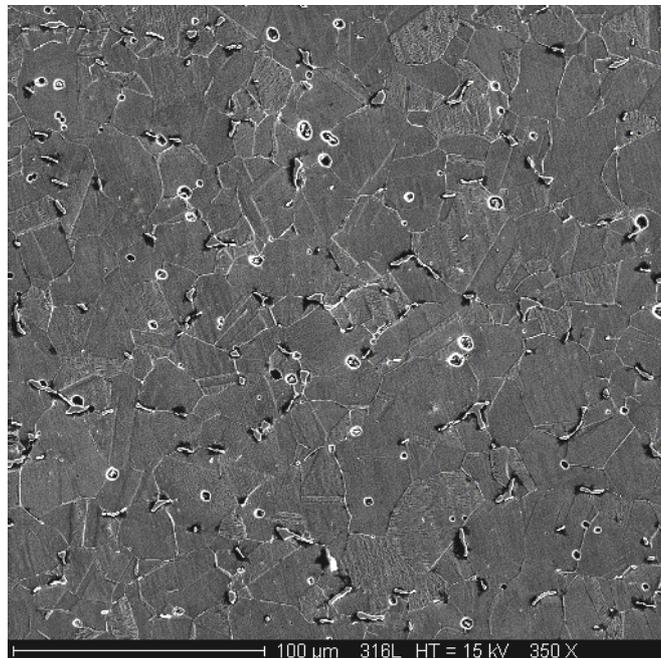


Figure III.2 : observation au microscope électronique à balayage de l'acier AISI 316L

III.2.2. Aluminium 6060

L'aluminium 6060 est le deuxième matériau sélectionné pour notre étude. Il est également caractérisé également par une structure cubique à faces centrées, sa composition chimique et ses propriétés mécaniques sont présentées dans les *tableaux III.3* et *III.4*, respectivement. La *figure III.3* présente un exemple des observations faites au microscope optique de l'aluminium 6060. La taille des grains est d'environ 90 μm.

Si(%)	Fe(%)	Ng(%)	Ti(%)
0,46	0,19	0,47	0,01

Tableau III.3 : composition chimique de l'Aluminium 6060

E (GPa)	μ (GPa)	ν	b (Å)	A (%)	R_m (N/mm ²)
69	32	0,3	2,86	17,6	222

Tableau III.4 : caractéristiques mécaniques de l'aluminium 6060

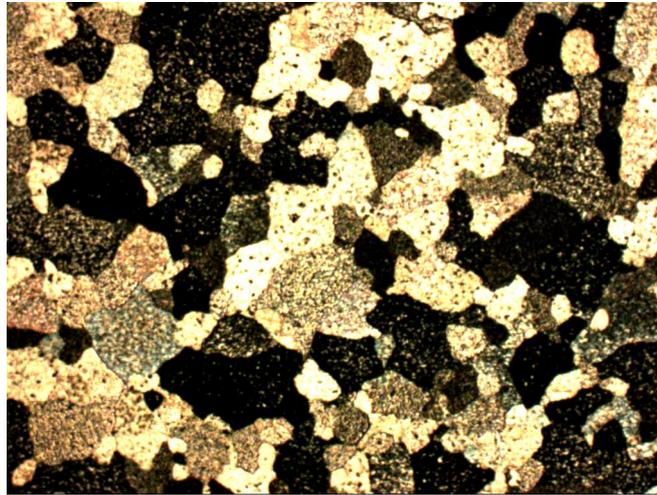


Figure III.3 : observation au microscope optique à balayage de l'aluminium 6060

III.3. Essais mécaniques

Nous avons réalisé des essais de traction-compression sur les deux alliages choisis. Ces essais ont été effectués sur une machine INSTRON type 5584 (*figure III.4*) équipée d'une cellule de force de capacité 500 kN. Un schéma des éprouvettes en acier 316L et en Al6060 utilisées lors des essais mécaniques est présenté sur la *figure III.5*. Les essais ont été effectués à une vitesse de déplacement imposée de 0,36 mm/min. Nous avons choisi de prendre un diamètre, pour la partie calibrée, relativement important (20 mm) pour s'affranchir le plus possible des erreurs géométriques en DRX. Après usinage des éprouvettes d'acier AISI 316L, des recuits thermiques (4 heures à 650°C) sous vide ont été effectués pour assurer une relaxation des contraintes résiduelles. Six éprouvettes d'aluminium ont subi des recuits thermiques (2 heures à 260°C) après usinage. Après les essais mécaniques, nous avons obtenu des résultats inhomogènes en termes de réponses mécaniques suite aux essais de traction sur ces éprouvettes. Ceci nous a obligé à travailler avec des éprouvettes d'aluminium non recuites pour obtenir des données cohérentes en terme de reproductibilité. Cependant, étant donné les taux de contraintes relativement faibles (-20 MPa) déterminés sur ces éprouvettes vierges, ceci ne sera pas un obstacle trop gênant pour une comparaison avec nos simulations. De plus, nous avons pris en compte cet état de fait dans les données initiales du modèle (cf. *chapitre V*).

L'objectif de ces expériences est de suivre le développement et l'évolution des déformations ou des contraintes résiduelles lors de la déformation plastique. Pour cela, nous avons d'abord prédéformé nos échantillons à divers taux en traction. Les contraintes résiduelles (σ^R) sont ensuite déterminées systématiquement après acquisitions par DRX sur l'ensemble des échantillons. Puis, les échantillons sont ensuite déformés en compression suivie d'une nouvelle analyse par DRX. Le *tableau III.4* récapitule l'ensemble des essais. Nous avons fixé le taux de déformation identique (à l'exception de deux cas) pour le deuxième chargement afin de n'avoir que le taux de prédéformation en traction qui varie.

D'autre part, des essais de chargement monotone en compression ont été effectués sur les deux alliages.

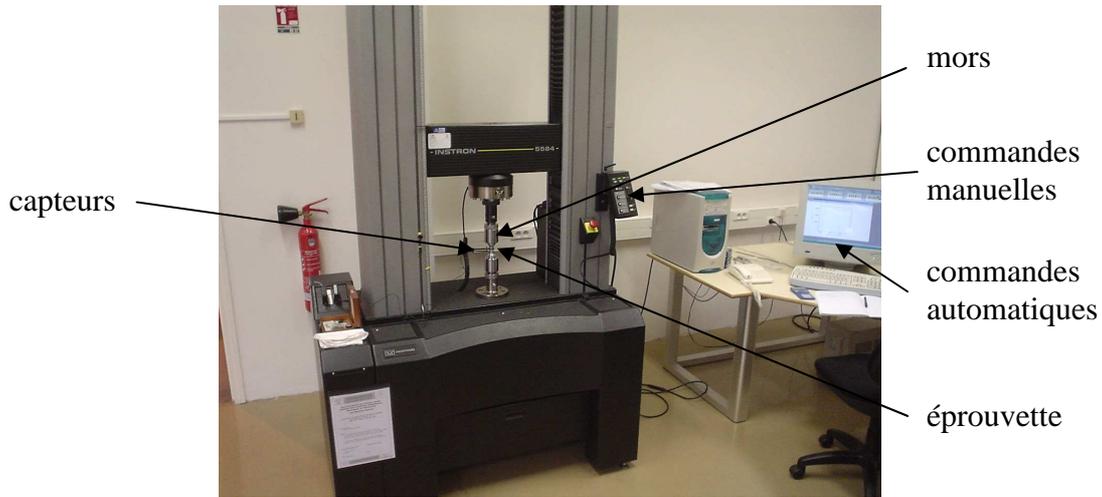


Figure III.4 : la machine INSTRON 5584

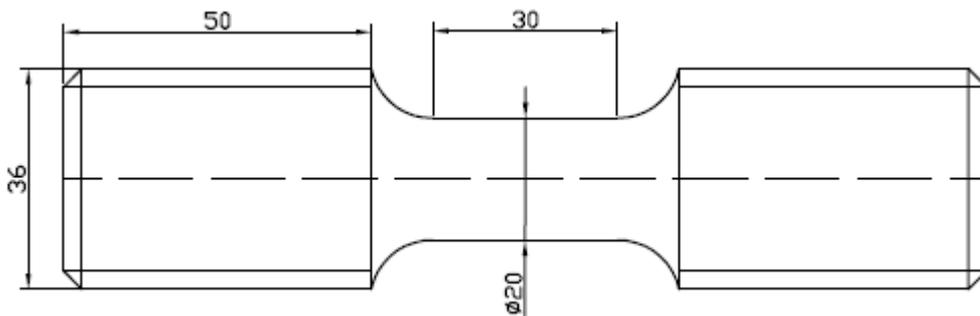


Figure III.5 : schéma des éprouvettes de traction-compression (les dimensions sont en millimètres)

Matériau	σ^R	1 ^{er} chargement (ε_{11}^I (%))	σ^R	2 ^{ème} chargement (ε_{11}^I (%))	σ^R
AISI 316L	Analyse des σ^R à l'état initial	2 ; 2 ; 3 ; 4 ; 5 ; -	Analyse des σ^R après le 1 ^{er} chargement	-5,2 ; -3 ; -3 ; -3 ;	Analyse des σ^R après le 2 ^{ème} chargement
Al6060		6,3 ; 10		-3 ; 3 ; -3	
		2 ; 3 ; 4 ; 5 ; -3		-3 ; -3 ; -3 ; -3 ; 3	

Tableau III.5 : essais mécaniques et analyses des contraintes résiduelles

III.4. Contraintes Résiduelles

La DRX a été la principale technique expérimentale utilisée dans notre travail. Elle permet de déterminer l'orientation cristallographique préférentielle (texture) au sein du matériau et donne accès au niveau de déformation (ou de contrainte) à l'échelle du volume diffractant. Nous expliquerons dans cette partie le principe de l'analyse par diffraction des rayons X des contraintes résiduelles et de la texture cristallographique. Nous détaillerons également les conditions expérimentales utilisées durant cette étude.

Nous préciserons notamment l'influence de l'anisotropie plastique et de sa nécessaire prise en compte pour la détermination des contraintes résiduelles.

III.4.1. Définition

Les contraintes résiduelles (CR) sont des contraintes multiaxiales statiques qui existent dans un système isolé soumis à aucune force ni moment extérieur et qui se trouve en équilibre mécanique. Elles sont dues à l'incompatibilité locale de déformation engendrée par trois sources : l'écoulement plastique, la dilatation thermique et les transformations de phase. Le schéma de la *figure III.6* montre que les contraintes résiduelles sont le résultat d'une sollicitation quelconque.

Selon le matériau et les conditions expérimentales, ces contraintes peuvent provenir de déformations aux échelles macroscopiques, mésoscopiques et microscopiques. Macherauch et al. [Macherauch et al. 73] ont proposé une classification des contraintes (*Figure III.7*) :

- Les contraintes résiduelles d'ordre I (σ^I) : correspondent aux contraintes macroscopiques. Elles sont uniformes sur un nombre suffisant de grains (de l'ordre de quelques millimètres). Ce type de contraintes peut être engendré à partir d'un traitement thermique ou une force mécanique.
- Les contraintes résiduelles d'ordre II (σ^{II}) : correspondent aux contraintes mésoscopiques. Elles sont homogènes à l'intérieur du grain. Leurs origines possibles sont les contraintes inter-granulaires.
- Les contraintes résiduelles d'ordre III (σ^{III}) : correspondent aux contraintes microscopiques. Elles varient sur quelques distances interatomiques (de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres). Elles sont dues à la présence des cellules de dislocations, aux interactions dislocations-précipitations, etc.

Dans certains cas de fabrications, les contraintes résiduelles peuvent être introduites volontairement dans un matériau pour améliorer ses performances. Mais en général, elles sont le résultat de procédés de fabrication et sont donc introduites involontairement.

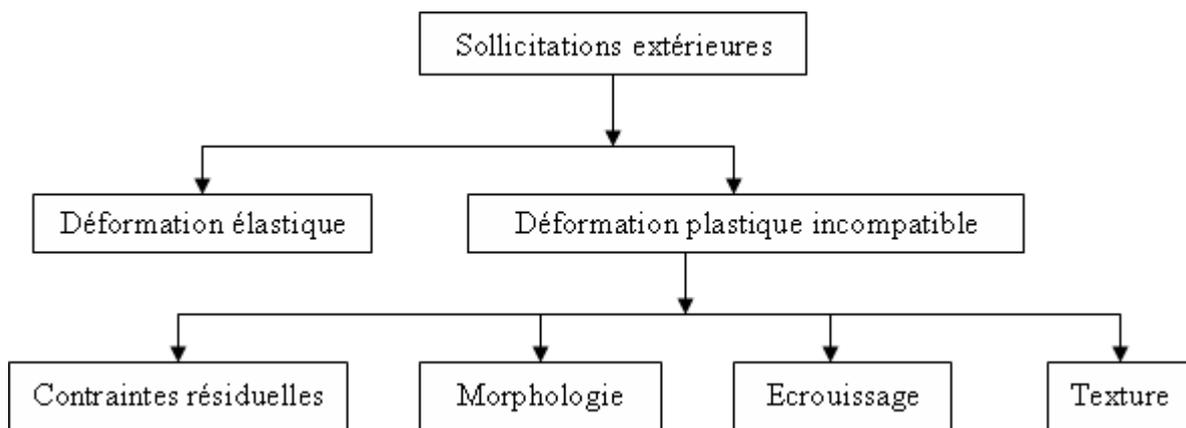


Figure III.6 : schéma des résultats des déformations plastiques

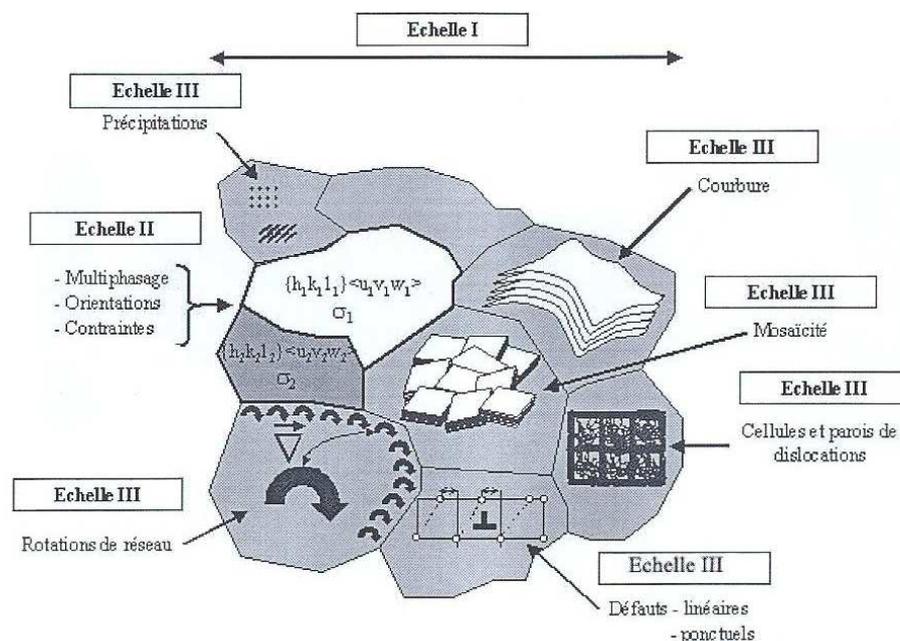


Figure III.7 : présentation schématique des trois ordres de contraintes résiduelle [Gourbesville 00]

III.4.2. Méthodes d'analyses des contraintes résiduelles

Les méthodes d'analyse des contraintes résiduelles se divisent en trois catégories : les méthodes mécaniques, de diffraction et physiques (tableau III.6) comme les mesures par la technique ultrasonore, la méthode de diffraction des rayons X ou des neutrons [Withers et Bhadeshia 01], etc.

Méthode	Pénétration	Résolution Spatiale	Précision sur la contrainte	Caractéristiques
Trou incrémental	≈1,2xdiamètre du trou	50 μm en profondeur	±50 MPa	Mesures dans un plan des contraintes du 1 ^{er} ordre. Semi-destructive.
DRX	<50 μm (Al) <5 μm (Ti) <1 mm (Fe) (si polissage)	1 mm latérale, 20 μm en profondeur	±20 MPa limité par les non-linéarités au niveau des courbes en $\sin^2\psi$ ou par les conditions de surface	Non destructive, Sensible à la surface, Contrainte de 1 ^{er} , 2 ^{ème} et 3 ^{ème} ordre.
Diffraction des neutrons	200 mm (Al) 4 mm (Ti) 30 mm (Fe)	500 μm	±2-5 MPa, limité par la statistique de comptage et la fiabilité de la référence	Contraintes de 1 ^{er} , 2 ^{ème} et 3 ^{ème} ordre. Tenseur complet de contrainte.
Ultrasons	>10 cm	5 mm	10 %	Contraintes de 1 ^{er} , 2 ^{ème} et 3 ^{ème} ordre. Sensible à la microstructure.
Magnétiques	10 mm	1 mm	10 %	Contraintes de 1 ^{er} , 2 ^{ème} et 3 ^{ème} ordre. Sensible à la microstructure. Pour des matériaux magnétiques seulement.
Raman	<1 μm	<1 μm env.	50 MPa	Contraintes de 1 ^{er} et 2 ^{ème} ordre.

Tableau III.6 : méthodes pour l'analyse des contraintes et leurs principales caractéristiques [Withers et Bhadeshia 01]

III.4.3. Diffractions des rayons X

III.4.3.1. Principe

Les rayons X interagissent avec le nuage électronique des atomes. Parmi les interactions possibles, il y a la «diffusion élastique», ou «diffusion Rayleigh». Dans la diffusion élastique, les rayons X rebondissent simplement sur le nuage électronique, ils sont diffusés dans toutes les directions de l'espace, en gardant la même énergie et la même longueur d'onde.

Lorsque les rayons X frappent un morceau de matière, ils sont donc diffusés par chacun des atomes de la cible. Ces rayons X diffusés interfèrent entre eux. Si les atomes sont ordonnés, c'est-à-dire placés à des intervalles réguliers (ce qui caractérise les cristaux), alors ces interférences vont être constructives dans certaines directions (i.e. les ondes s'additionnent), destructives dans d'autres (i.e. les ondes s'annulent). Ces interférences d'ondes diffusées forment le phénomène de diffraction.

Lorsqu'un matériau est exposé à un rayonnement X, seule une partie de l'échantillon reçoit le faisceau de rayons X : c'est le *volume irradié*. A l'intérieur de ce volume, seules les cristallites dont l'orientation est favorable vont diffracter (1 à 2 % du volume irradié). Ce sont les cristallites en position de diffraction qui constituent ce que l'on appelle le *volume diffractant*.

Les techniques de diffraction permettent seulement l'analyse des domaines périodiques du matériau. Or, la périodicité du cristal est altérée par des discontinuités du matériau (lacunes, joints de grain, précipités, ...) qui délimitent des volumes élémentaires sans défauts appelés domaines cohérents de diffraction (ou cristallites). Ce domaine est favorablement orienté pour respecter les conditions de Laue, la diffusion cohérente des rayons X se traduit par une interférence constructive (appelée pic de diffraction) dont la position angulaire $\theta_{hkl}(P, \Omega)$ dépend directement de la distance inter-réticulaire $d_{hkl}(P, \Omega)$ (loi de Bragg, *figure III.8*) :

$$n\lambda = 2 d_{hkl}(P, \Omega) \sin(\theta_{hkl}(P, \Omega)) \quad (\text{III.1})$$

où P et Ω sont la position et l'orientation du domaine cohérent, λ et hkl , la longueur d'onde du faisceau incident et les indices de Miller du plan diffracté et n , l'ordre d'interférence ($n \in \mathbb{N}^*$).

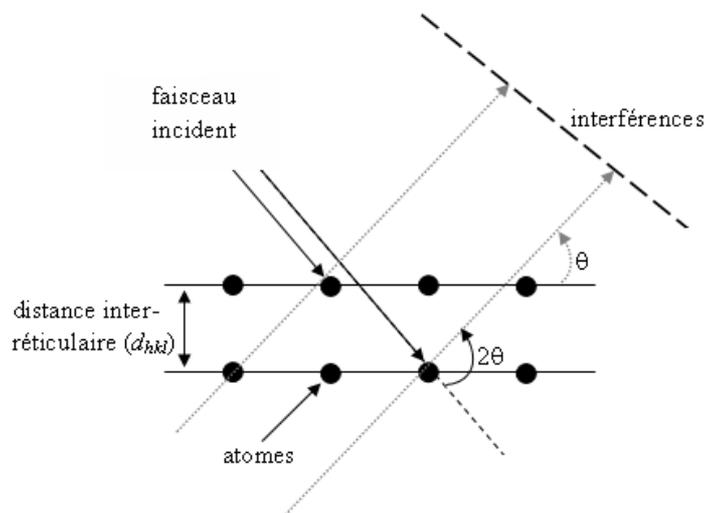


Figure III.8 : loi de Bragg donnant les directions où les interférences sont constructives

III.4.3.2. Pic de diffraction

Par la loi de Bragg, on peut alors associer chaque pic à un plan atomique. On sait que ces plans peuvent être désignés par des indices de Miller (hkl). On peut donc de même associer ces indices (hkl) aux pics de diffraction (figure III.9). On parle d'«indexation des pics».

Chaque cristallite correctement orientée donne un pic de diffraction élémentaire caractérisé par trois paramètres (tableau III.7) : sa position, son intensité et sa forme. La figure III.10 rappelle les principaux paramètres qui décrivent un pic de diffraction.

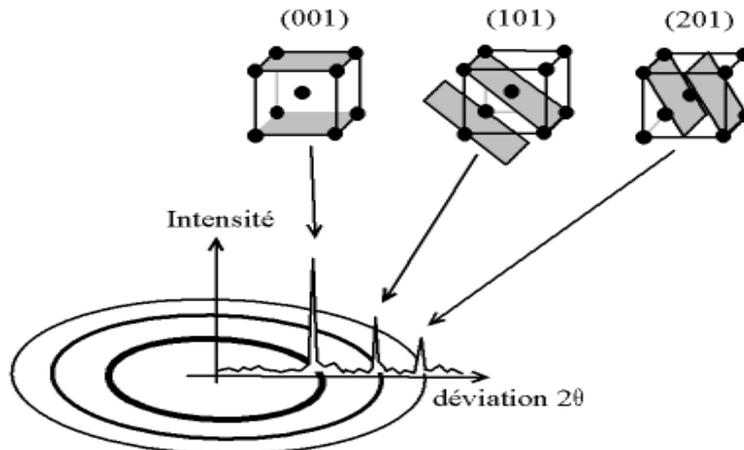


Figure III.9 : indexation des pics : association d'un pic de diffraction et d'un plan (hkl)

Caractéristique du pic	Facteurs explicatifs
Position du pic	Aberrations géométriques de l'appareillage Composition moyenne du volume diffractant Contraintes macroscopiques du volume diffractant
Intensité du pic	Cristallinité et répartition des phases Distribution des orientations des domaines cohérents
Elargissement et forme du pic	Elargissement instrumental Distribution des compositions chimiques Distributions des déformations des domaines cohérents Taille des domaines cohérents de diffraction

Tableau III.7 : liaison entre les caractéristiques principales d'un pic de diffraction et les facteurs qui influencent ces paramètres

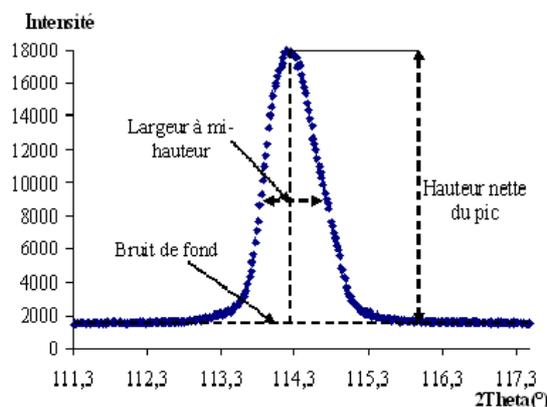


Figure III.10 : quelques paramètres d'un pic de diffraction

III.4.3.3. Détermination des contraintes résiduelles par DRX

L'état de contrainte peut être déterminé en utilisant le réseau cristallin comme jauge de la déformation *élastique*. Cette déformation $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ du volume diffractant dans la direction de mesure définie par l'angle de déclinaison ψ et l'angle azimut ϕ , peut être déterminée à partir de la position angulaire $\theta(\phi, \psi, hkl)$ du pic de diffraction correspondant à un plan cristallographique (hkl) :

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = 1 - \frac{\sin \theta(\phi, \psi, hkl)}{\sin \theta_0(\phi, \psi, hkl)} \quad (\text{III.2})$$

où $\theta_0(\phi, \psi, hkl)$ est l'angle de diffraction du matériau non contraint. $\langle \rangle_{V_d}$ correspond à une opération de moyenne sur le volume diffractant V_d .

On définit un repère lié à l'échantillon et caractérisé par trois directions : x_{1P} (dans la direction longitudinale des éprouvettes), x_{2P} (direction transverse) et x_{3P} (direction normale). (figure III.11). Le repère du laboratoire est noté (x_{1L}, x_{2L} et x_{3L}) avec x_{3L} , la direction de mesure $\phi\psi$ de coordonnées $(\sin\psi \cos\phi, \sin\psi \sin\phi, \cos\psi)$. Le passage du repère de la pièce au repère du laboratoire s'effectue par une rotation d'angle ϕ et d'axe x_{3P} suivie d'une rotation d'angle ψ et d'axe x_{2L} . La direction de mesure x_{3L} est la bissectrice des faisceaux incident et diffracté. Elle est normale aux plans (hkl).

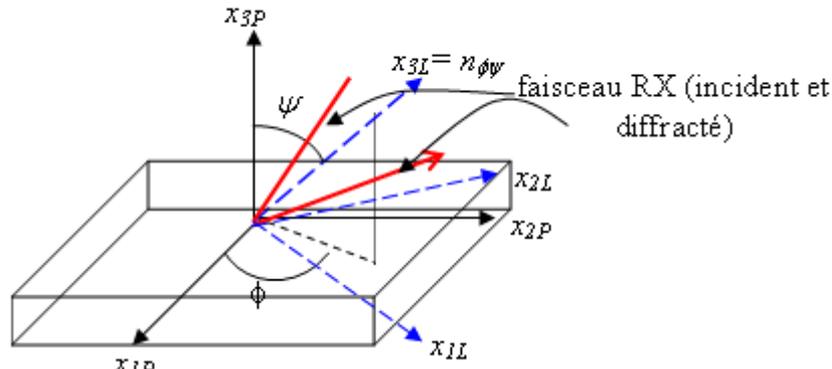


Figure III.11 : principe de la DRX

Il reste maintenant à définir la relation entre la déformation mesurée $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ et l'état de contrainte macroscopique.

Chaque cristallite est définie par son orientation Ω , sa forme, ses constantes d'élasticité locales $c(\Omega)$ et sa déformation élastique locale $\varepsilon^{lle}(\Omega)$. Cette déformation (ou sa contrainte associée $\sigma^l(\Omega)$) est le plus souvent différente de la déformation macroscopique ε^l (ou la contrainte macroscopique σ^l) pour deux raisons :

- Les constantes d'élasticité de la phase étudiée sont en général différentes de celles du matériau. Cette hétérogénéité élastique conduit à une localisation des contraintes macroscopiques.

- Des contraintes résiduelles locales peuvent être engendrées par des déformations libres de contrainte (dans le cadre de cette étude, seul le cas de la déformation plastique sera traité) qui sont incompatibles entre les différentes cristallites.

Ces deux constatations peuvent se traduire formellement, par exemple, par [Sprauel et al. 91] :

$$\sigma^H(\Omega) = t(\Omega) : \sigma^I + \sigma^{Hinc}(\Omega) \quad (III.3)$$

$\sigma^{Hinc}(\Omega)$ correspond aux incompatibilités locales de déformation et $t(\Omega)$ est un tenseur de polarisation.

En introduisant le tenseur de souplesse $s(\Omega)$ de la cristallite, la déformation du domaine cohérent est :

$$\varepsilon^H(\Omega) = s(\Omega) : \sigma^H(\Omega) = s(\Omega) : t(\Omega) : \sigma^I + s(\Omega) : \sigma^{Hinc}(\Omega) = p(\Omega) : \sigma^I + \varepsilon^{Hinc}(\Omega) \quad (III.4)$$

$p(\Omega)$ est un tenseur de polarisation qui localise la contrainte macroscopique à l'échelle de la cristallite.

Après projection sur la direction de mesure $n_{\phi\psi}$ et en moyennant sur le volume diffractant, la déformation mesurée $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ s'écrit :

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = n_{\phi\psi} \langle \varepsilon^H(\Omega) \rangle_{V_d} n_{\phi\psi}^t = \langle p(\Omega) : \sigma^I + \varepsilon^{Hinc}(\Omega) \rangle_{V_d, \phi, \psi} \quad (III.5)$$

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = \langle p(\Omega) \rangle_{V_d, \phi, \psi} : \sigma^I + \langle \varepsilon^{Hinc}(\Omega) \rangle_{V_d, \phi, \psi} \quad (III.6)$$

Soit :

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = F(\phi, \psi, hkl) : \sigma^I + \varepsilon_{\phi\psi}^{Hinc}(hkl) \quad (III.7)$$

Les composantes indépendantes $F(\phi, \psi, hkl)$ sont appelées constantes d'élasticité radiocristallographiques (CER). La déformation $\varepsilon_{\phi\psi}^{Hinc}(hkl)$ s'appelle la pseudo-macrodéformation et provient de la moyenne des déformations provoquées par les incompatibilités de déformation entre le volume diffractant et le volume non-diffractant. Ce formalisme tient compte de l'anisotropie élastique par le 1^{er} terme. Les CER dépendent du plan cristallographique (hkl) étudié, des constantes d'élasticité des cristallites, de la morphologie et de la texture. Elles expriment un effet d'anisotropie dans la localisation des contraintes liées à l'anisotropie élastique du cristal. L'anisotropie plastique des cristallites constituant le volume diffractant est prise en compte par le deuxième terme. En effet, il correspond aux compensations résiduelles élastiques dues aux incompatibilités locales de déformation plastique à l'échelle des cristallites.

Dans le cas d'un matériau homogène, macroscopiquement isotrope, en négligeant les incompatibilités de déformation plastique, on a alors :

$$F(\phi, \psi, hkl)_{ij} = \frac{1}{2} S_2(hkl) n_{\phi\psi i} \cdot n_{\phi\psi j} + S_1(hkl) \delta_{ij} \quad (III.8)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Pour un état triaxial de contrainte, on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = & \frac{1}{2} S_2(hkl) (\sigma_\phi^I - \sigma_{33}^I) \sin^2 \psi + \frac{1}{2} S_2(hkl) \sigma_{33}^I + S_1(hkl) \text{Tr}(\sigma^I) \\ & + \frac{1}{2} S_2(hkl) \tau_\phi^I \sin 2\psi \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

σ_ϕ^I et τ_ϕ^I sont respectivement la contrainte normale et la contrainte de cisaillement de surface dans la direction ϕ . Les CER, $\frac{1}{2}S_2$ et S_1 peuvent être calculées en modélisant le comportement de l'agrégat polycristallin. Ces grandeurs sont également accessibles par l'expérimentation. Cette approche est désignée « méthode des $\sin^2 \psi$ » et permet de déterminer l'état de contrainte.

Une fois définie cette relation contraintes-déformations pour le volume diffractant, il reste maintenant à déterminer comment l'utiliser pratiquement dans le cadre de notre étude.

- **Prise en compte de l'anisotropie élastique**

Les valeurs de CER peuvent être déterminées par des approches micromécaniques à condition de prendre en compte l'anisotropie élastique des cristallites ainsi que leur orientation respective. Ces valeurs peuvent être obtenues par le modèle autocohérent de Kröner-Eschelby [Eshelby 57, Kröner 58]. Ce modèle s'attache à estimer l'état de contrainte d'un grain subissant une déformation **élastique** différente de la déformation macroscopique. Il permet de localiser le chargement extérieur au niveau de chaque grain du polycristal connaissant son comportement élastique, son orientation cristallographique et sa morphologie.

La déformation $\varepsilon^{Ile}(\Omega)$ (ou la contrainte $\sigma^{II}(\Omega)$) de la cristallite de constantes d'élasticité $c(\Omega)$, s'exprime en fonction du tenseur de rigidité C du matériau macroscopique :

$$\varepsilon^{Ile}(\Omega) = [E : (c(\Omega) - C) + I]^{-1} : \varepsilon^{le} = A(\Omega) : \varepsilon^{le} \quad (\text{III.10})$$

$E (=S^{esh} : C^{-1})$ est le tenseur de Morris [Morris 70] qui exprime l'interaction entre la matrice et l'inclusion. Il est fonction de C et de la forme de l'inclusion. A est le tenseur de localisation des déformations. Chaque cristallite est assimilée à une sphère ou un ellipsoïde anisotrope de tenseur d'élasticité $c(\Omega)$, incluse dans un milieu homogène équivalent (matrice) qui possède les caractéristiques du polycristal (C).

L'apparition des contraintes d'ordre II est la conséquence des phénomènes suivants :

- L'orientation des grains et le comportement anisotrope de ces derniers induisent une hétérogénéité élastique $(c(\Omega) - C)$. Ce facteur reflète la texture cristallographique de l'agrégat polycristallin modélisé.
- La morphologie des grains induit des hétérogénéités au niveau des interactions locales qui sont représentées par le tenseur E .

C est obtenu à partir des constantes d'élasticité des cristallites au travers des conditions d'autocohérence. Elles reposent sur l'hypothèse ergodique qui assume l'équivalence entre les moyennes d'ensembles et les intégrales sur le volume.

$$\sigma^I = \langle \sigma^{II}(\Omega) \rangle \quad (\text{III.11})$$

et

$$\varepsilon^{Ie} = \langle \varepsilon^{IIe}(\Omega) \rangle \quad (\text{III.12})$$

D'où :

$$\sigma^I = \langle \sigma^{II} \rangle = \langle c(\Omega) : A(\Omega) \rangle = \langle c(\Omega) : \varepsilon^{Ie} \rangle \quad (\text{III.13})$$

Le tenseur d'élasticité effectif C du polycristal est alors donné par :

$$C = \langle c(\Omega) : A \rangle = \langle c(\Omega) : [I + E : [c(\Omega) - C]]^{-1} \rangle \quad (\text{III.14})$$

Cette équation ne contient comme inconnues que les composantes du tenseur C qui peuvent être déterminées par une procédure itérative. Lorsque C est connu, la déformation élastique d'une cristallite pour une déformation (et une contrainte) macroscopique donnée peut être calculée. La déformation mesurée par diffraction des rayons X est la moyenne des déformations élastiques des cristallites du volume diffractant projetée sur la direction de mesure :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} &= n_{\phi\psi} \cdot \langle \varepsilon^{IIe}(\Omega) \rangle_{V_d} \cdot n_{\phi\psi}^t = n_{\phi\psi} \cdot \langle [E : (c(\Omega) - C) + I]^{-1} \rangle_{V_d} : \varepsilon^{Ie} \cdot n_{\phi\psi}^t \\ &= F(\phi, \psi, hkl) : \sigma^I \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

Dans le cas d'un matériau texturé décrit par sa fonction de distribution des orientations (FDO) $f(\Omega)$, la texture intervient à plusieurs niveaux :

- Dans le calcul du tenseur d'élasticité C à partir des conditions d'autocohérence.
- Dans l'opération de localisation permettant le calcul de la déformation en fonction de la contrainte macroscopique.
- Dans l'opération de moyenne sur le volume diffractant qui doit être également pondérée par la FDO.

La relation reste valable pour un matériau macroscopiquement isotrope. L'équation se simplifie pour redonner la relation classique des $\sin^2 \psi$.

Pour un matériau texturé anisotrope élastiquement, les valeurs de CER sont déduites de la relation précédente en se fixant une contrainte macroscopique et en calculant les déformations des plans diffractants induites. La texture est prise en compte par l'incorporation de la FDO dans le modèle ($f(\Omega)=I$ pour un matériau macroscopiquement isotrope et pour toutes les orientations).

La première étape consiste donc à calculer le tenseur d'élasticité macroscopique des alliages de notre étude. Nous considérerons deux textures : une isotrope et l'autre correspondant à la texture expérimentale (*tableaux III.8-III.10*).

Les résultats de la modélisation autocohérente portent sur un matériau constitué de 2000 cristaux sphériques d'orientations aléatoires pour la texture isotrope. Pour la texture

expérimentale, nous avons utilisé la FDO pour choisir une distribution de 4000 cristallites d'orientation Ω et de fraction volumique f représentative de la texture expérimentale de nos échantillons. La prise en compte de la texture cristallographique va influencer le comportement élastique macroscopique du matériau à travers la modification de la valeur du tenseur d'élasticité macroscopique mais également de la relation en $\sin^2\psi$ en provoquant une modification de $\varepsilon^{le}(\Omega)$ et donc de $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{v_a}$ pour un (ϕ, ψ) donné ainsi que la suppression de certaines cristallites et donc de directions. Ces phénomènes seront d'autant plus marqués que l'anisotropie élastique sera forte.

Matériau	c_{11} (GPa)	c_{12} (GPa)	c_{44} (GPa)
Aluminium	108,2	60	28,5
Acier	204,6	137,7	126,2

Tableau III.8 : caractéristiques mécaniques élastiques du AISI 316L et de l'aluminium

C_{11}	C_{22}	C_{33}	C_{12}	C_{13}	C_{23}	C_{44}	C_{55}	C_{66}
Texture isotrope								
112,1			59,4			26,42		
Texture expérimentale								
111,6	111,4	110,6	59,2	60,1	60,1	27,1	27,1	26,2

Tableau III.9 : constantes d'élasticité de l'aluminium calculées par le modèle autocohérent (en GPa)

C_{11}	C_{22}	C_{33}	C_{12}	C_{13}	C_{23}	C_{44}	C_{55}	C_{66}
Texture isotrope								
261,2			109,4			75,9		
Texture expérimentale								
278,4	259,9	256,1	98,8	102,6	121,2	88,2	69,5	65,8

Tableau III.10 : constantes d'élasticité du AISI 316L calculées par le modèle autocohérent (en GPa)

Une fois déterminé le tenseur d'élasticité macroscopique, la déformation élastique $\varepsilon^{le}(\Omega)$ peut être calculée par l'approche autocohérente pour une déformation ε^{le} ou une contrainte σ^l macroscopique donnée. La simulation des déformations des plans de diffraction via les courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{v_a} = f(\sin^2\psi)$ peut alors être faite et les valeurs de CER déduites.

Pour l'étude et l'évaluation des CER, nous avons choisi le plan (220) pour l'acier et les plans (311), (220) et (422) pour l'aluminium. La figure III.12 présente l'évolution de $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{v_a}$ en fonction de $\sin^2\psi$ pour les deux matériaux. Une texture isotrope constituée de 2000 cristaux a été choisie. Les valeurs de S_1 et $1/2S_2$ ont été également calculées (tableau III.11) pour les cas isotrope et texturé. Dans le deuxième cas, ces constantes sont calculées également à partir de la droite de régression linéaire des courbes en $\sin^2\psi$ en faisant, de fait, une 'approximation isotrope'.

Pour le calcul de contraintes, nous avons opté pour l'utilisation des valeurs obtenues avec la texture expérimentale, pour $\phi = 0$ et 90° , en utilisant l'approximation isotrope.

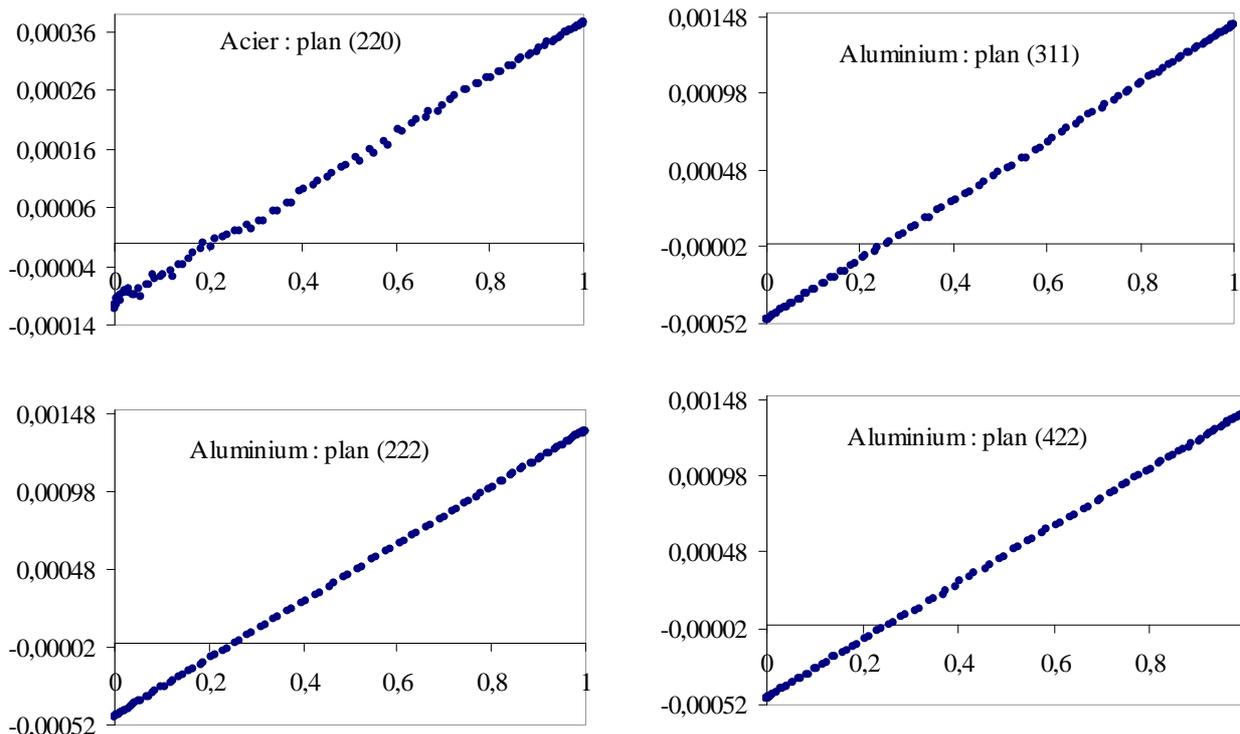


Figure III.12 : évolution des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{\psi} = f(\sin^2 \psi)$ pour chaque plan et chaque matériau ($\sigma = 100 \text{ MPa}$)

Matériau	Plan	S (10^{-6} MPa^{-1})	Texture isotrope	Texture expérimentale 'approximation isotrope'
			$\phi = 0^\circ$	$\phi = 0^\circ$
Acier	(220)	$\frac{1}{2} S_2$	6,157	4,356
		S_1	-1,384	-0,726
Aluminium	(311)	$\frac{1}{2} S_2$	19,187	19,506
		S_1	-4,945	-5,154
	(222)	$\frac{1}{2} S_2$	18,289	18,292
		S_1	-4,651	-4,653
	(422)	$\frac{1}{2} S_2$	18,701	18,936
		S_1	-4,787	-4,910

Tableau III.11 : détermination des constantes S_1 et $1/2S_2$ suivant le matériau et le plan cristallographique

Prise en compte de l'anisotropie plastique

La déformation mesurée par DRX peut être fortement influencée par l'anisotropie plastique. Dans le cas de l'élastoplasticité, l'état de contrainte microscopique dépend de toute l'histoire de chargement du matériau. Il n'est alors plus possible d'analyser les résultats expérimentaux à partir des seules mesures de la déformation élastique des cristallites. Il est nécessaire de modéliser les déformations plastiques subies par chaque cristallite.

Pour résoudre d'un point de vue pratique le problème de la détermination de contraintes en présence d'anisotropie plastique, Baczmański [Baczmański et al. 93, Baczmański et al. 94] a proposé une méthode basée sur l'analyse du comportement physique des grains. Cette

méthode permet d'évaluer quantitativement les contraintes macroscopiques et les contraintes d'incompatibilité plastique (second ordre) en utilisant les techniques de diffraction et un modèle micromécanique. Cette méthode a permis d'expliquer l'effet des contraintes du second ordre sur la non linéarité des courbes des $\sin^2\psi$ pour différentes familles de plans (hkl). La déformation mesurée par diffraction X est alors décrite sous la forme :

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = F(\phi, \psi, hkl) : \sigma^I + q \cdot \varepsilon_{\phi\psi}^{Iinc}(hkl) \quad (III.16)$$

F sont les CER calculées par la méthode décrite précédemment. $\varepsilon_{\phi\psi}^{Iinc}(hkl)$ est la déformation pseudo-macroscopique calculée par une approche de transition d'échelle à partir des $\varepsilon^{IIe}(\Omega)$ obtenues après la simulation du trajet de chargement. q est un scalaire d'ajustement déterminé par régression des moindres carrés de même que les six composantes de σ^I . Ce facteur est introduit pour corriger le fait que même si les modèles actuels arrivent à reproduire les ondulations des courbes expérimentales $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2\psi)$, ils surestiment généralement les contraintes et donc les ondulations des courbes. Ce facteur peut être considéré comme un indicateur de la qualité du modèle : plus il est proche de 1 et plus le modèle arrive à reproduire la réalité expérimentale.

III.4.3.4. Conditions expérimentales

- **Présentation du goniomètre**

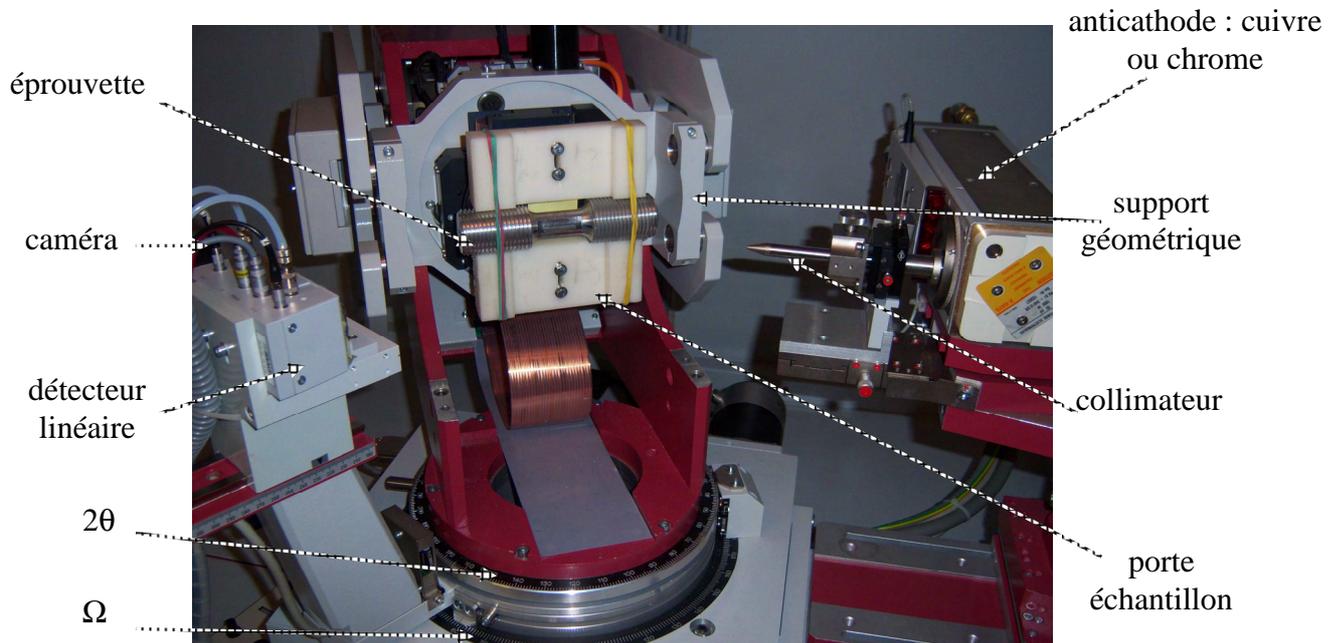
Les analyses des contraintes résiduelles et de la texture ont été effectuées avec un diffractomètre quatre cercles Seifert XRD 3003 PTS (*figure III.13*). Il permet quatre mouvements de rotation différents : une rotation de 2θ de 0° à 170° , une rotation en Ω , une rotation en ψ de -90° à 90° et une rotation en ϕ de 0° à 360° . Il est équipé d'une caméra permettant un positionnement aisé des échantillons, d'un collimateur circulaire (\varnothing variant de 0,5 à 3 mm et réglable horizontalement et verticalement) pour limiter la divergence du faisceau de rayons X et choisir les dimensions de la surface irradiée, d'un filtre positionné devant le détecteur (de vanadium pour une anticathode de chrome et de nickel dans le cas d'une anticathode de cuivre) et enfin d'un détecteur linéaire proportionnel avec un intervalle angulaire d'environ 9° pour 3500 canaux.

A l'aide du goniomètre Seifert, on peut réaliser deux types de montages différents : le montage *Khi* (ψ) et le montage *Omega* (Ω). Le premier montage est obtenu après une inclinaison de l'échantillon autour de l'axe correspondant à l'intersection du plan du faisceau et de la surface de l'échantillon d'un angle ψ , et, permet d'avoir la plus grande amplitude de mesure (ψ varie entre 0° et 90°). Le deuxième montage est obtenu selon une inclinaison de l'échantillon selon l'axe perpendiculaire au plan du faisceau d'un angle Ω et passant par le centre du goniomètre.

- **Conditions expérimentales**

Les conditions expérimentales dépendent du matériau (l'acier inoxydable AISI 316L ou l'alliage Al6060) et de l'anticathode utilisée (cuivre ou chrome). Le montage *Khi* a été utilisé pour l'ensemble des analyses. Les mesures ont été effectuées suivant les sens long et transverse des éprouvettes ($\phi = 0^\circ$ et 90°). Nous avons utilisé seize valeurs de l'angle d'inclinaison ψ variant entre -48° et $+45^\circ$. La longueur d'onde K_α du cuivre est $1,54184 \text{ \AA}$, et

celle du chrome est 2,28910 Å. La puissance du générateur a été choisie à 40 kV/40 mA pour l'anticathode du cuivre et 40 kV/30 mA avec le rayonnement du chrome. Un collimateur primaire de 1 mm de diamètre a été utilisé. Les plans cristallographiques et leurs angles 2θ correspondants sont donnés dans le *tableau III.12*.



	Anticathode de cuivre	Anticathode de chrome		
	Al6060	316L	Al6060	
Plans cristallographiques	(422)	(220)	(311)	(222)
$2\theta^\circ$	137,7	128,7	139,316	156,667

Tableau III.12 : plans cristallographiques utilisés

- **Dépouillement des pics**

Après avoir obtenu expérimentalement un ensemble de pics de diffraction pour différentes valeurs de ψ (et de ϕ), nous devons les traiter analytiquement afin de déterminer le décalage en 2θ . Ce traitement est composé de trois étapes très importantes avant de calculer les contraintes résiduelles : correction LP, soustraction du bruit de fond et ajustement des pics de diffraction.

Correction des facteurs de Lorentz et de Polarisation

La correction Lorentz-Polarisation correspond à deux facteurs : un facteur de Lorentz et un facteur de Polarisation. Le premier tient compte de l'interaction du cône de diffraction avec les éléments géométriques (la hauteur et la largeur de la fente de détection et le rayon du goniomètre). Le deuxième traduit le fait qu'un faisceau de rayons X n'est pas polarisé (interaction entre l'onde électromagnétique et l'électron). La correction Lorentz-Polarisation est donnée par l'expression :

- $\frac{I + \cos^2 2\theta}{\sin^2 2\theta \cos 2\theta}$: dans le cas où on veut déterminer la texture du matériau : on calcule l'intensité intégrée d'un pic de diffraction, c'est-à-dire la surface sous le pic.
- $\frac{I + \cos^2 2\theta}{\sin^2 2\theta}$: dans le cas d'analyse des contraintes : on détermine la position du pic.

Soustraction du bruit de fond

Le pic de diffraction expérimental est caractérisé entre autres par un fond continu ou bruit de fond. Il est nécessaire de soustraire ce bruit. Une bonne détermination du bruit de fond se base sur sa forme et les abords du profil expérimental. La fonction de correction du bruit de fond est obtenue par un ajustement polynomial de faible ordre (1 ou 2) des intensités du bruit de fond à gauche et à droite de la ligne d'interférence.

Parfois le bruit de fond n'est pas calculé car ce qui intéresse est la position du pic et si le bruit n'est pas trop inhomogène les méthodes de barycentre suffisent pour trouver la position du pic sans enlever le bruit de fond.

Ajustement des pics

La dernière étape du dépouillement des résultats expérimentaux est l'ajustement d'une fonction analytique sur le pic expérimental. Cette étape est cruciale car elle permet de déterminer la position en 2θ du pic de diffraction qui dépend des contraintes résiduelles. La fonction pseudo-Voigt est utilisée pour modéliser les profils de nos pics. Elle est caractérisée par les paramètres suivants : H la hauteur nette de la raie, B la largeur intégrale, p la position du pic et x la valeur de 2θ . Cette fonction est la somme d'une fonction de Gauss (G) et d'une fonction de Lorentz (L) :

$$PV(H, B, p, \eta, x) = (1 - \eta)L(H, B, p, x) + \eta G(H, B, p, x) \quad (\text{III.17})$$

où η est la proportion de la partie gaussienne, G est une fonction gaussienne donnée par :

$$G(H, B, px) = H \exp\left(-\pi \left(\frac{x-p}{B}\right)^2\right) \quad (\text{III.18})$$

et L est une fonction Lorentzienne sous la forme :

$$L(H, B, p, x) = \frac{H}{1 + \left(\pi \frac{x-p}{B}\right)^2} \quad (\text{III.19})$$

Dans la fonction de pseudo-Voigt, nous avons adopté l'hypothèse de Rachinger [Rachinger 48] pour tenir compte du doublet $K_{\alpha 1}$ et $K_{\alpha 2}$ du rayonnement sous la forme :

$$PV_{K_{\alpha 1}, K_{\alpha 2}}(H, B, p, \eta, x) = PV(H, B, p, \eta, x) + PV(kH, B, p + \delta, \eta, x) \quad (\text{III.20})$$

où k est le rapport de hauteur (proche de 0,5) et δ la distance entre les deux raies donnée par :

$$\delta = 2 \tan\left(\frac{\pi p}{180 \cdot 2}\right) \frac{K_{\alpha 2} - K_{\alpha 1}}{K_{\alpha 1}} \quad (\text{III.21})$$

- **Calcul des déformations**

Il se fait par la mesure des déplacements relatifs des pics de diffraction par rapport à l'état référentiel du matériau non contraint. L'expression **conventionnelle** de la déformation est :

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = \frac{d_{\phi\psi}^{hkl} - d_0}{d_0} = \frac{\sin \theta_0^{hkl}}{\sin \theta} - 1 \quad (\text{III.22})$$

où d_0 représente la distance interréticulaire et θ_0^{hkl} , l'angle de Bragg du matériau non contraint.

La déformation rationnelle en θ est obtenue directement à partir de l'expression rationnelle en fonction des distances interréticulaires :

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = \ln\left(\frac{d_{\phi\psi}^{hkl}}{d_0}\right) = \ln\left(\frac{\sin \theta_0^{hkl}}{\sin \theta^{hkl}}\right) \quad (\text{III.23})$$

Bien que mathématiquement très différentes, ces relations conduisent à des valeurs très voisines de la déformation. Cependant, elles constituent une source d'incertitudes au niveau du calcul des contraintes. Ces incertitudes peuvent être liées soit au formalisme même, soit à la propagation de l'incertitude sur la valeur de $2\theta_0$. La définition rationnelle est mécaniquement la plus rigoureuse et elle ne propage pas les erreurs sur $2\theta_0$ [Ferreira 04]. Notre choix s'est donc porté sur ce formalisme.

Pour calculer les contraintes résiduelles, l'hypothèse $\sigma_{33} = 0$ a été choisie étant donné la faible pénétration des RX (environ 7 μm pour l'aluminium et environ 4 μm pour l'acier). Les CER sont déduites des valeurs de $\frac{1}{2}S_2(hkl)$ et $S_1(hkl)$ calculées par la méthode décrite précédemment. Dans le cadre de nos essais, nous avons utilisé des sollicitations en traction-compression qui induisent des déformations macroscopiques homogènes : après une décharge élastique, les contraintes d'ordre I sont donc, a priori, nulles. Les déformations mesurées $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ sont donc égales à $\varepsilon_{\phi\psi}^{Iinc}(hkl)$.

Ceci permet une comparaison directe avec le modèle. Pour illustrer l'importance des déformations élastiques résiduelles engendrées durant le trajet mécanique, on utilisera la relation classique suivante :

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = F(\phi, \psi, hkl) : \sigma(hkl) \quad (\text{III.24})$$

Dans ce cas, la contrainte calculée sera notée $\sigma(hkl)$ du fait de la dépendance de la contrainte en fonction du plan de mesure choisi. On assume l'hypothèse que l'on puisse calculer un tenseur de contraintes. Ceci n'est pas évident étant donné la discontinuité du volume diffractant et sa variation avec la direction de mesure. Nous reviendrons sur ce point dans le *chapitre V*.

La déformation élastique dans la direction ($\phi\psi$) est alors égale à :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = & \frac{1}{2} S_2(hkl) \sigma_\phi(hkl) \sin^2 \psi + S_1(hkl) (\sigma_{11}(hkl) + \sigma_{22}(hkl)) \\ & + \frac{1}{2} S_2(hkl) \tau_\phi \sin 2\phi \end{aligned} \quad (\text{III.25})$$

avec

$$\sigma_\phi(hkl) = \sigma_{11}(hkl) \cos^2 \phi + \sigma_{12}(hkl) \sin 2\phi + \sigma_{22}(hkl) \sin^2 \phi \quad (\text{III.26})$$

et

$$\tau_\phi(hkl) = \sigma_{13}(hkl) \cos \phi + \sigma_{23}(hkl) \sin \phi \quad (\text{III.27})$$

Ce qui revient à :

$$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = A \sin^2 \phi + B \sin 2\phi + C \quad (\text{III.28})$$

Ce qui est l'équation d'une ellipse dont une branche correspond aux valeurs positives de ψ et l'autre aux valeurs négatives. La pente de cette ellipse est proportionnelle à $\sigma_\phi(hkl)$ et son ouverture est proportionnelle à $\tau_\phi(hkl)$. Par une méthode des moindres carrés linéaire, on peut alors déterminer A , B et C et en déduire l'état de contrainte dans une direction ϕ donnée.

La relation (III.25) est valide pour un échantillon plan. Dans le cas de pièces cylindriques comme nos éprouvettes, deux effets peuvent survenir :

- Le décentrement de l'échantillon, c'est-à-dire quand une partie de la zone irradiée de l'échantillon ne passe pas par le centre du goniomètre, ce qui sera perçu au niveau du détecteur comme un décalage de la position du pic de diffraction.
- Le décalage de la normale à la surface de l'échantillon : lors d'une détermination de contraintes, la position du pic de diffraction est mesurée pour différentes valeurs de l'angle ψ . Cet angle est défini comme l'angle entre la bissectrice des faisceaux incident et diffracté et la normale extérieure à la surface. Si l'échantillon est mal positionné (en rotation), l'angle ψ réel sera légèrement différent de l'angle ψ affiché sur le goniomètre. Ce décalage fera apparaître des contraintes de traction et de cisaillement fictives se superposant aux contraintes réelles existant dans l'échantillon.

Si l'influence de ces deux effets sur la contrainte mesurée est indéniable, la question que l'on peut se poser est : à partir de quel seuil doivent-ils être corrigés ? Il faut notamment avoir une surface irradiée la plus petite possible pour minimiser les erreurs dues à la géométrie des échantillons.

François et al. [François et al. 95, Dionnet et al. 99] ont étudié l'effet du décentrement et du décalage en ψ sur les courbes de contraintes déterminées pour des échantillons cylindriques et ont proposé une correction de ces effets. Les auteurs ont montré que pour que les erreurs dues à la géométrie de l'échantillon soient maintenues en dessous de 10 %, la taille maximale du spot qui peut être utilisée à $\psi = 0^\circ$ est $r_0/4$ pour la détermination des contraintes

circconférentielles et $r_0/2$ pour les contraintes longitudinales, avec r_0 le rayon de courbure de l'échantillon.

Ceci étant vérifié pour notre cas, nous avons considéré que les corrections n'étaient pas nécessaires pour l'analyse des contraintes et que les erreurs engendrées par la géométrie pouvaient être négligées pour les contraintes longitudinales. Pour les contraintes circconférentielles, un masquage a été utilisé (carré de 2 mm de côté dans la direction transverse).

III.4.3.5. *Texture cristallographique*

La texture cristallographique caractérise les orientations préférentielles des cristaux dans un polycristal. La détermination expérimentale de la texture d'un agrégat polycristallin donné peut se faire à l'aide de la diffraction des rayons X. En mesurant l'intensité du rayonnement diffracté suivant une direction définie par la loi de Bragg, on peut déterminer la densité de normales à la famille de plans retenue, parallèles au vecteur de diffraction, donc la fraction volumique de cristaux présentant une orientation donnée dans un référentiel lié à l'échantillon [Cullity 56]. Les orientations préférentielles, ou textures, sont généralement représentées par des figures de pôles. Elles consistent à mesurer l'intensité diffractée pour une famille de plans $\{hkl\}$ dans toutes les directions, et à en donner une représentation bidimensionnelle sous la forme d'une projection stéréographique, nommée figure de pôles. La mesure de figures de pôles pour plusieurs familles $\{hkl\}$ permet de calculer la Fonction de Distribution des Orientations (FDO) qui donne une représentation tridimensionnelle de la texture. Dans le cas de la détermination de la texture, la grandeur mesurée est donc l'intensité intégrale. Elle est définie, en unité arbitraire, par la surface mesurée sous le pic de diffraction :

$$I_{\text{int}} = \int_{2\theta_{\text{min}}}^{2\theta_{\text{max}}} PV_{K\alpha_1, K\alpha_2}(2\theta) d2\theta \quad (\text{III.29})$$

$2\theta_{\text{min}}$ et $2\theta_{\text{max}}$ sont les bornes du pic acquis.

Cette texture alimentera nos modèles en paramètres d'entrée (orientations) de sorte à approcher le plus possible les conditions expérimentales de départ. En l'occurrence trois familles de plans (111), (200) et (220) ont été utilisées pour caractériser la texture cristallographique. Les acquisitions ont été effectuées pour des angles de déclinaison variant de 0° à 65° par pas de 5° et des angles azimutaux variant de 0 et 355° par pas de 5° . Le tracé des figures de pôles et le calcul de la FDO ont été réalisés avec le logiciel BEARTEX[®]. La méthode utilisée pour ce calcul est la méthode WIMV [Matthies et al. 82, Matthies 88].

Dans le cas de nos échantillons cylindriques, une correction géométrique est indispensable. Elle dépend également de la courbure, de l'angle ψ et de l'angle de rotation azimutal. Il faut donc trouver une fonction $G(\psi, \varphi)$ qui permette de corriger l'intensité du pic de diffraction. Nous avons repris ici le modèle proposé par Guillén & al. [Guillén et al. 99] de cette fonction $G(\psi, \varphi)$. La présentation de cette méthode est développée dans l'annexe III.

La texture initiale de l'acier austénitique (AISI 316L) et celle de l'aluminium (Al6060) déterminées dans cette étude sont présentées sur les figures III.14 et III.15.

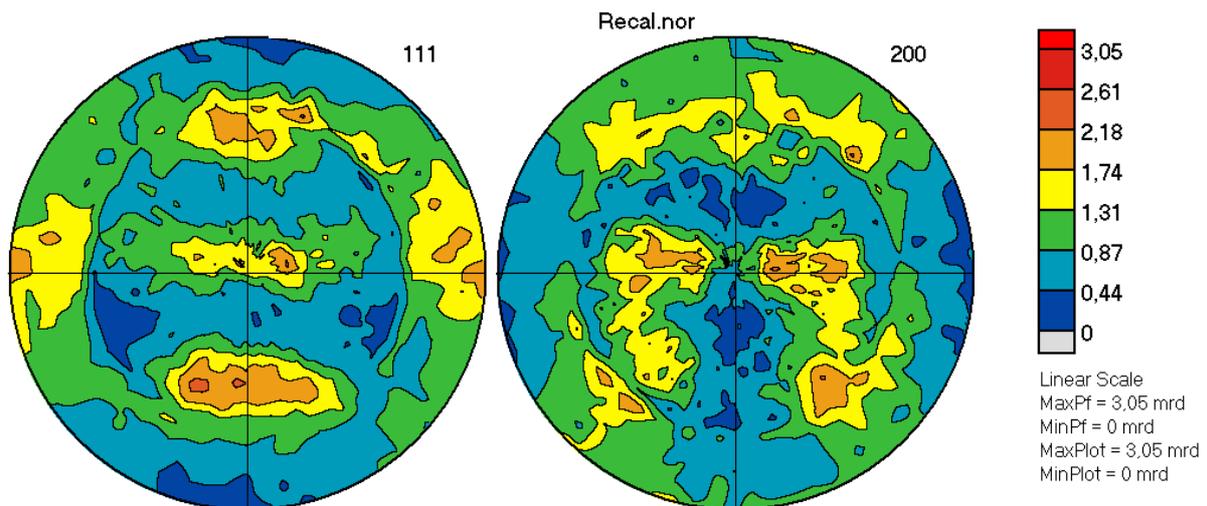


Figure IV.14 : figures de pôles expérimentales initiales de l'acier AISI 316L

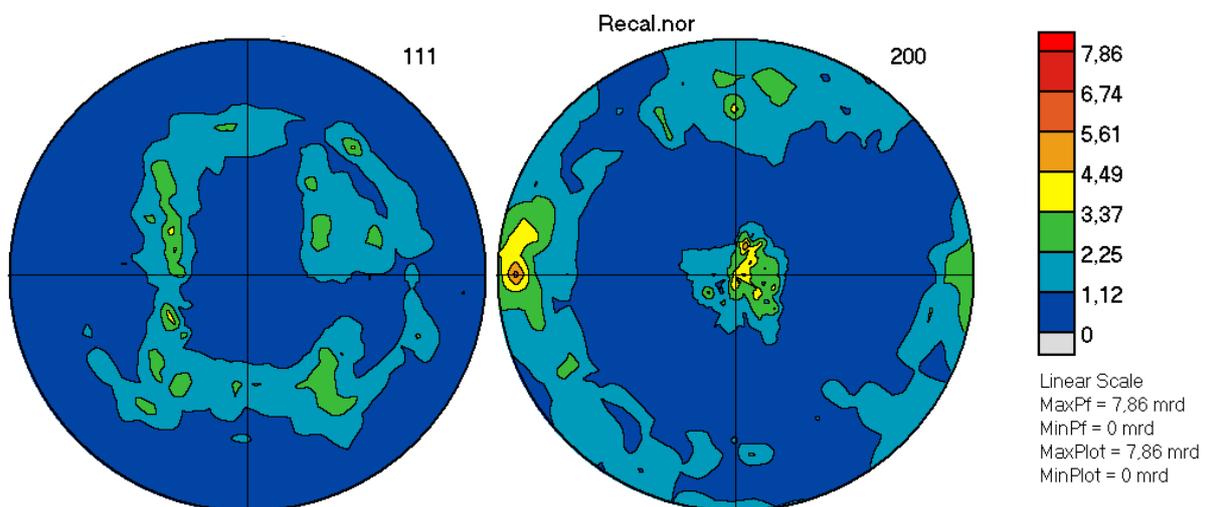


Figure IV.15 : figures de pôles expérimentales initiales de l'aluminium (Al6060)

III.5. Conclusion

Ce chapitre résume les différentes techniques expérimentales utilisées durant la thèse. Elles sont organisées en deux étapes. La première consiste à déformer nos éprouvettes (aluminium 6060 et acier 316L) à différents taux de prédéformation sous chargement monotone (traction) puis de faire des essais de compression (trajet Bauschinger). La deuxième étape permet de suivre l'évolution des déformations (ou des contraintes) résiduelles en fonction de la déformation macroscopique choisie en utilisant la technique de la diffraction des rayons X. Les principaux résultats sont présentés dans le *chapitre IV*.

Chapitre IV : Résultats expérimentaux

IV.1. Introduction

Ce chapitre est consacré aux principaux résultats expérimentaux obtenus durant cette étude. Dans la première partie, nous présentons les résultats des essais mécaniques déterminés suite à des trajets monotones (traction ou compression) et complexes (essais Bauschinger) pour les deux matériaux, aluminium et acier.

Dans un deuxième temps, l'évolution des déformations ou des contraintes résiduelles en fonction de la déformation macroscopique a été analysée. Pour cela, la technique de la diffraction des rayons X, présentée dans le *chapitre III*, a été utilisée.

Ces différents résultats permettront une caractérisation de l'état mécanique ainsi qu'une meilleure compréhension des mécanismes de déformation de l'aluminium et de l'acier inoxydable austénitique par le couplage avec les approches micromécaniques développées dans le *chapitre II*.

IV.2. Essais mécaniques

Nous étudierons, dans cette partie, les différents résultats obtenus à partir des essais mécaniques effectués sur l'acier inoxydable austénitique 316L et sur l'alliage d'aluminium 6060.

Nous analyserons, dans un premier temps, les résultats obtenus à l'échelle macroscopique lors des essais monotones puis complexes au travers des courbes contrainte-déformation.

IV.2.1. Acier inoxydable

IV.2.1.1. *Chargement monotone*

Traction

Nous avons réalisé neuf essais à différents taux de déformation. Les courbes contraintes - déformations des différents essais effectués sont présentées dans la *figure IV.1*. Si on compare l'ensemble des essais, on remarque qu'il y a peu de dispersion entre les résultats obtenus sur les différentes éprouvettes. Le plus grand écart absolu est de 17 MPa pour une déformation de 5 %. La partie transitoire élastoplastique est caractérisée par un écart absolu de 5 MPa.

Nous avons également étudié la dispersion des résultats obtenus pour le module d'Young E , la limite d'élasticité $R_{0,02}$ % à 0,02 % et la limite d'élasticité $R_{0,2}$ % à 0,2 % de déformation. Le *tableau IV.1* présente ces grandeurs mécaniques calculées à partir des courbes de la *figure IV.1*. Nous avons présenté la variation de ces grandeurs en fonction de la déformation macroscopique pour chaque essai mécanique en traction sur la *figure IV.2*. Il existe une relative dispersion des résultats dans le cas de ces chargements monotones notamment pour le module d'Young. Cette différence peut être expliquée par le processus de fabrication des éprouvettes, le traitement thermique, l'usinage induisant une certaine hétérogénéité mécanique. Il faut également prendre en compte les incertitudes de mesures. En tout état de cause, cette dispersion reste acceptable.

Pour obtenir une courbe de référence pour la comparaison avec nos modèles, nous avons alors déterminé une courbe moyenne obtenue à partir de ces essais. La *figure IV.3* montre cette courbe finale pour l'acier inoxydable austénitique (AISI 316L). Nous allons donc prendre, comme référence, cette figure dans la partie « confrontation expérience-modélisation » (*chapitre V*).

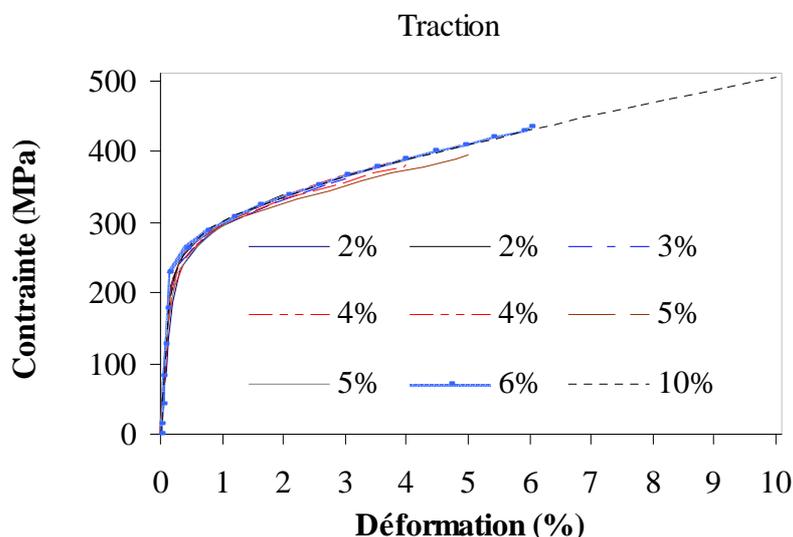


Figure IV.1 : essais de traction à différents taux de déformation

ϵ_{11} (%)	E (GPa)	$R_{0,02\%}$ (MPa)	$R_{0,2\%}$ (MPa)
2	205	195	250
2	195	188	250
3	188	186	250
4	185	205	260
4	180	185	250
5	182	195	255
5	178	186	250
6	220	205	255
10	175	190	260
Moyenne	190	193	253
Ecart type	15	8	4

Tableau IV.1 : valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % et de la limite d'élasticité à 0,2 % déterminées pour chaque essai en traction

Des essais de répétabilité ont été effectués à 2 et 4 % de déformation pour ce matériau afin de s'assurer de la cohérence dans l'évolution des valeurs mesurées (aux échelles macroscopique et du volume diffractant par DRX) en fonction du taux de déformation imposé. Pour un taux de déformation donné, des résultats proches ont été observés au niveau des courbes contrainte-déformation.

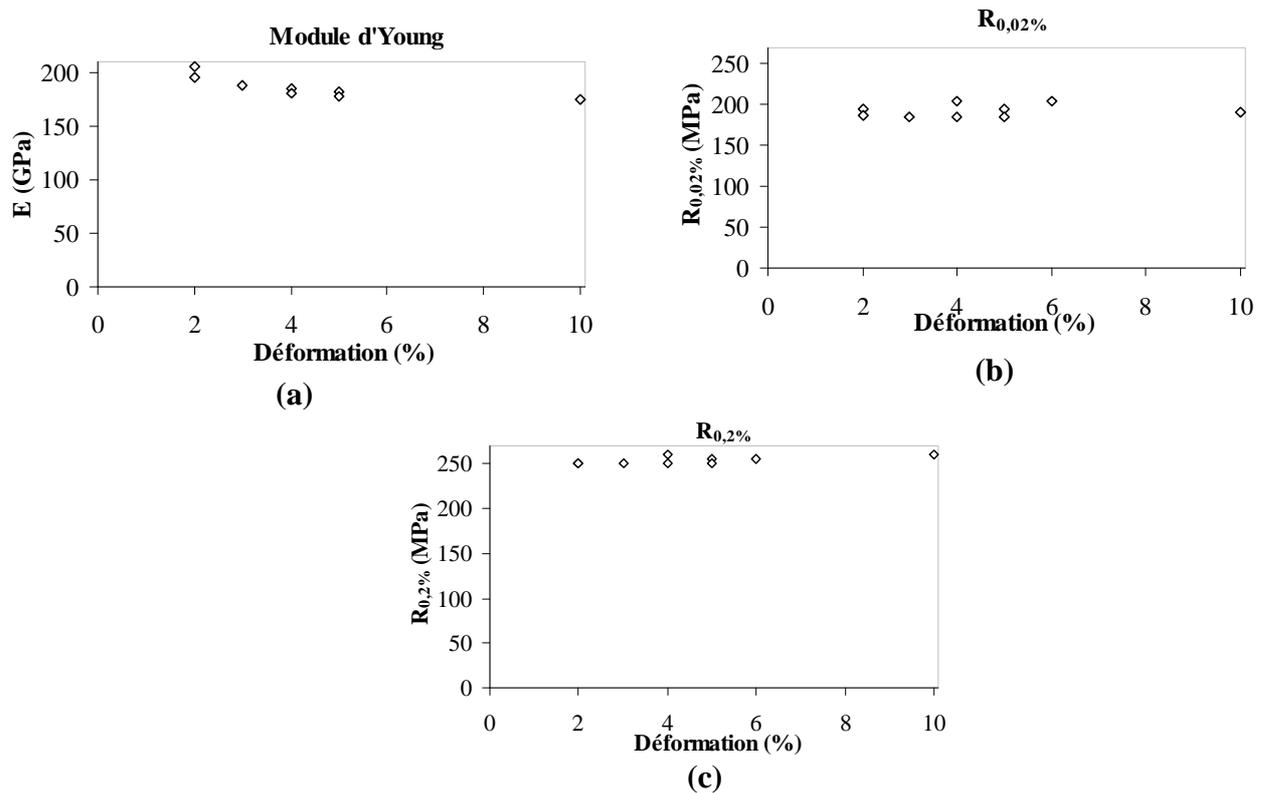


Figure IV.2 : variation du module d'Young (a), de la limite d'élasticité à 0,02 % (b) et de la limite d'élasticité à 0,2 % (c) en fonction de la déformation en traction

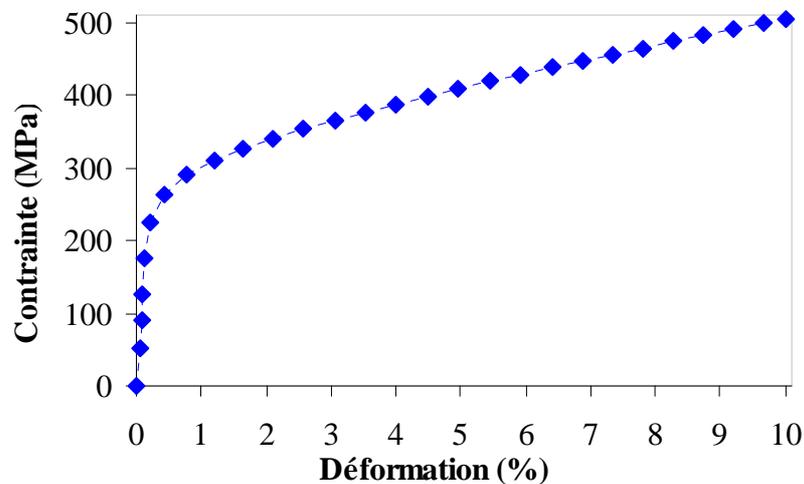


Figure IV.3 : courbe de référence en traction pour l'acier inoxydable (AISI 316L)

Compression

La figure IV.4 donne le résultat d'un essai de compression de l'acier inoxydable austénitique (AISI 316L). Dans le cadre de cette thèse, un seul essai de compression monotone a été effectué pour chaque matériau. Cette courbe servira également de résultat de référence pour la détermination des paramètres initiaux de nos modèles. Le tableau IV.2 présente le module

d'Young E , la limite d'élasticité à 0,02 % ($R_{0,02}$ %) et la limite d'élasticité à 0,2 % ($R_{0,2}$ %) calculés à partir de la *figure IV.4*.

ϵ_{11} (%)	E (GPa)	$R_{0,02}$ % (MPa)	$R_{0,2}$ % (MPa)
-6,3	195	-225	-285

Table IV.2 : valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % et de la limite d'élasticité à 0,2 % calculées à partir de la *figure IV.4*

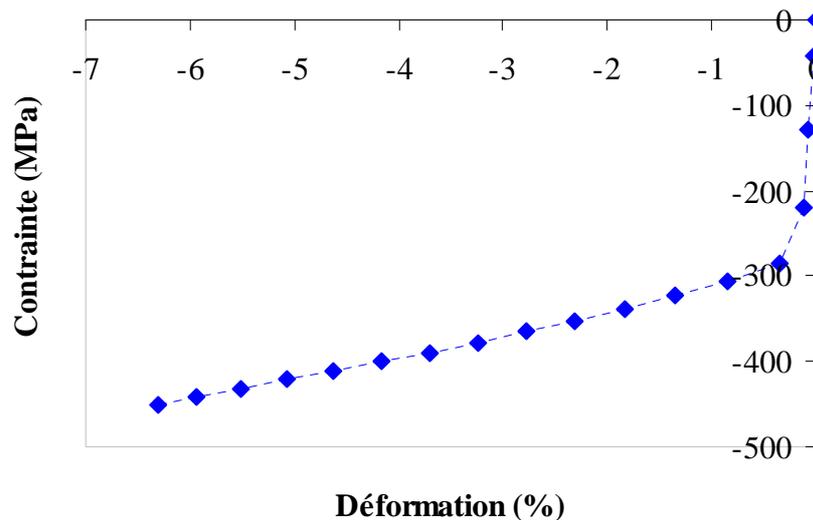


Figure IV.4 : essai de compression pour l'acier inoxydable (AISI 316L)

Comparaison des résultats de traction et de compression

Nous avons comparé les courbes de chargement en traction et en compression (en valeurs absolues) (*figure IV.5*). D'après la *figure IV.5*, on observe que le module d'Young n'est pas significativement différent et la limite d'élasticité en compression est un peu plus grande que celui obtenu durant les essais de traction. La partie transitoire de la courbe de traction possède un rayon de courbure plus élevé que celui de la courbe de traction. Les niveaux de contraintes dans la partie plastique de la courbe de traction sont toujours inférieurs à ceux de la courbe en compression.

La limite d'élasticité plus importante dans le cas de la compression que celle obtenue par la traction (32 MPa de différence). Cet écart peut s'expliquer (en partie) par la présence de contraintes résiduelles non négligeables dans les éprouvettes à l'état initial (cf. *section II.3.1*). Ceci peut alors engendrer une asymétrie au niveau des résultats macroscopiques [Dakhlouï 06]. Il aurait fallu également déterminer cette grandeur avec plusieurs essais mécaniques pour obtenir avec certitude des valeurs représentatives.

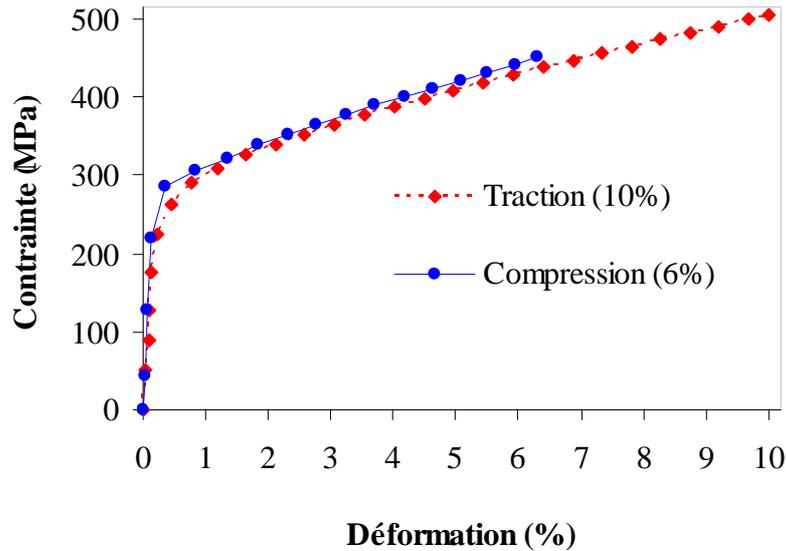


Figure IV.5 : comparaison entre l'essai de traction et l'essai de compression de l'acier inoxydable (AISI 316L)

IV.2.1.2. Chargement complexe

Nous avons ensuite réalisé un deuxième chargement (traction ou compression) sur les 9 éprouvettes prédéformées. Les figures IV.6 et IV.7 donnent les résultats pour les essais de traction-compression et les figures IV.8 et IV.9 montrent le résultat pour l'essai de compression-traction. Les valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % ainsi que de la limite d'élasticité à 0,2 % sont données dans les tableaux IV.3 et IV.4.

Un certain nombre de remarques peuvent être faites à partir des résultats présentés dans les figures IV.6-IV.9 et les tableaux IV.3-IV.4 :

- Les parties transitoires des courbes de premier chargement ont des rayons de courbure plus faibles que ceux des courbes obtenues lors du second chargement.
- Lors du second chargement, la partie transitoire possède un rayon de courbure d'autant plus important que la prédéformation est élevée.
- Lors du second chargement, les niveaux de contrainte (en valeurs absolues) sont plus élevés que ceux en chargement initial, à même valeur absolue de prédéformation.

Globalement, malgré certaines irrégularités, on observe une diminution, en valeur absolue, de la limite d'élasticité lorsque la prédéformation en traction est plus importante. Ceci est conforme aux résultats expérimentaux observés sur des aciers austénitiques [Choteau 99] lors d'essais Bauschinger. Le module d'Young moyen calculé sur l'ensemble des essais effectués est de 198 ± 12 GPa. L'écart-type obtenu est du même ordre de grandeur que celui déterminé lors des essais en traction. Les incertitudes sont données avec un élargissement de 1.

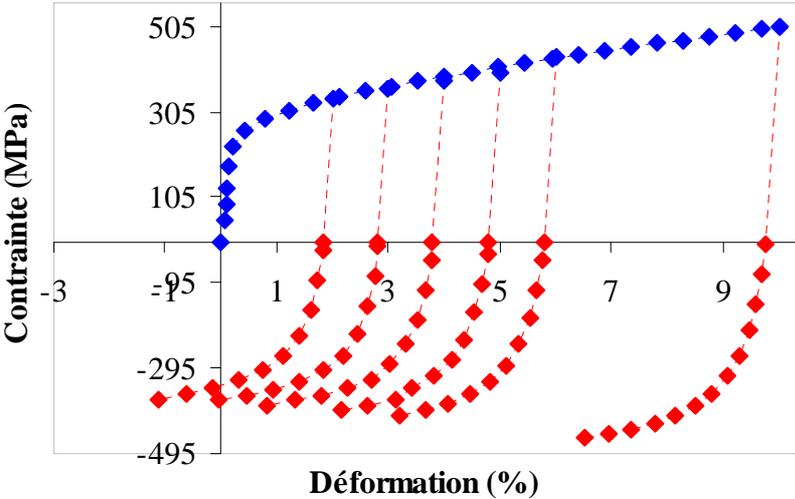


Figure IV.6 : essais de prédéformation en traction suivis d'une compression pour l'acier inoxydable austénitique (AISI 316L), valeurs absolues [**◆** : premier chargement en traction ; **◆** : deuxième chargement en compression]

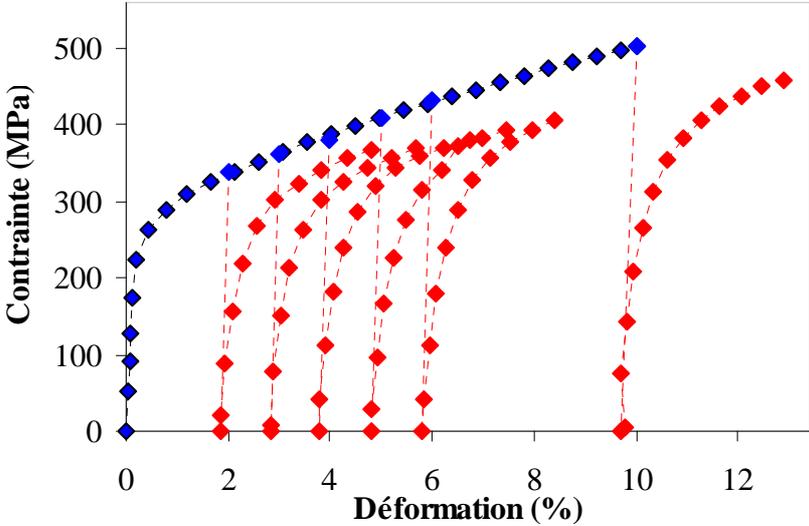


Figure IV.7 : essais de prédéformation en traction suivis d'une compression pour l'acier inoxydable austénitique (AISI 316L), valeurs absolues [**◆** : premier chargement en traction ; **◆** : deuxième chargement en compression]

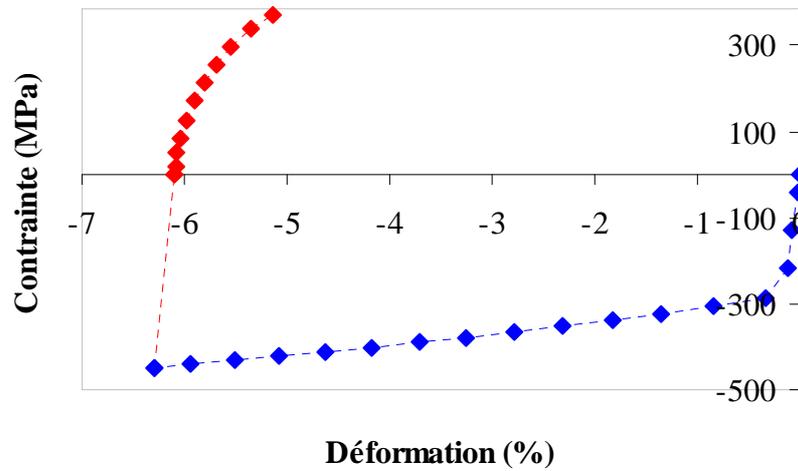


Figure IV.8 : essai de prédéformation en compression suivi d'une traction pour l'acier inoxydable austénitique (AISI 316L)

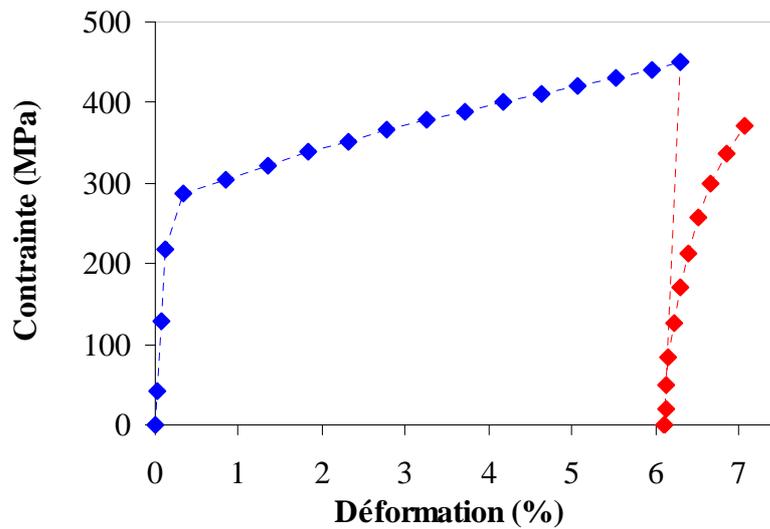


Figure IV.9 : essai de prédéformation en compression suivi d'une traction pour l'acier inoxydable austénitique (AISI 316L) : valeurs absolues

Prédéformation (ϵ_{11} (%))	E (GPa)	$R_{0,0.2\%}$ (MPa)	$R_{0,2\%}$ (MPa)
2	220	-70	-260
2	210	-80	-255
3	185	-60	-230
4	185	-45	-213
4	188	-50	-217
5	195	-40	-203
5	197	-38	-205
6	200	-33	-193
10	205	-25	-173

Tableau IV.3 : valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % et de la limite d'élasticité à 0,2 % pour chaque essai présenté dans la figure IV.6

Prédéformation (ϵ_{11} (%))	E (GPa)	$R_{0,02\%}$ (MPa)	$R_{0,2\%}$ (MPa)
-6,3	185	40	230

Tableau IV.4 : valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % et de la limite d'élasticité à 0,2 % pour chaque essai présenté dans la figure IV.9

IV.2.2. Alliage d'aluminium

Nous avons également réalisé des essais Bauschinger similaires à ceux effectués sur l'acier austénitique inoxydable (AISI 316L), sur un alliage d'aluminium (Al6060). Ceci nous permettra de comparer les résultats expérimentaux et simulés pour deux matériaux différents en terme de comportement mécanique aux échelles macroscopique et du volume diffractant.

IV.2.2.1. Chargement monotone

Traction

Quatre éprouvettes d'aluminium (Al6060) ont subi des essais de traction à différents taux de déformation : 2 %, 3 %, 4 % et 5 %. Les résultats sont présentés dans la *figure IV.10*. Une certaine dispersion de résultats entre les essais (*tableau IV.5*) a été obtenue. Le module d'élasticité varie entre 53 GPa et 68 GPa et la limite d'élasticité à 0,02 % varie entre 157 MPa et 172 MPa. Néanmoins, les écart-types obtenus sur les valeurs moyennes restent raisonnables : ils sont inférieurs à 10 %.

D'après la *figure IV.10*, nous remarquons aussi l'existence de deux groupes de résultats en terme de limite d'élasticité. Deux courbes (2 et 5 %) ont la même limite d'élasticité (environ 153 MPa). D'autre part, les courbes à 3 et 4 % de déformation ont une limite d'élasticité plus petite (environ 138 MPa). A 4 % de déformation totale, l'écart relatif entre les deux groupes est de 5 %. Il convient de noter ici que les éprouvettes n'ont pas subi de traitement thermique de détente contrairement à l'acier. En effet, cette dispersion, en terme de comportement mécanique, était plus accentuée quand nous avons procédé à des essais préalables de traitement thermique sur les éprouvettes d'aluminium. Nous avons obtenu dans ce cas des écarts absolus pouvant atteindre 50 MPa pour la limite d'élasticité.

De manière similaire à l'acier nous avons également, à partir de l'ensemble des essais, déterminé une courbe de référence pour permettre une comparaison avec nos simulations numériques (*figure IV.11*). Par contre, pour une comparaison quantitative de nos résultats, il conviendra de tenir compte de la dispersion initiale.

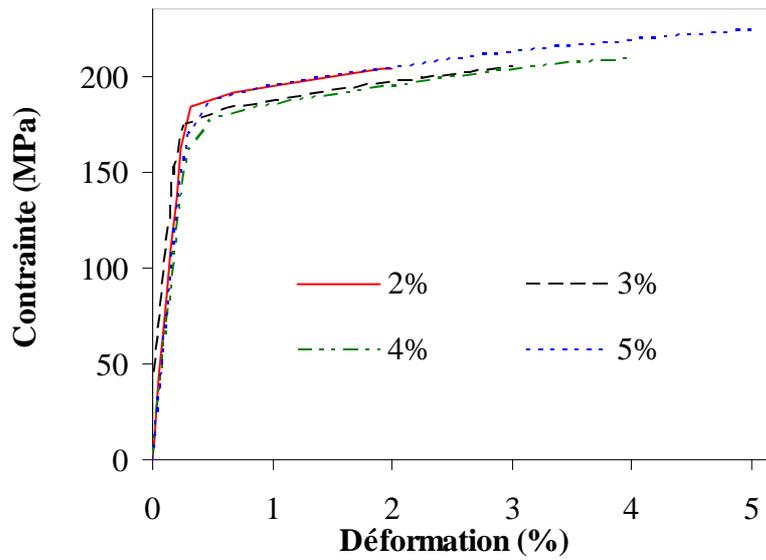


Figure IV.10 : essais de traction pour l'aluminium (Al6060)

ϵ_{11} (%)	E (GPa)	$R_{0,02\%}$ (MPa)	$R_{0,2\%}$ (MPa)
2	64	153	189
3	58	137	176
4	55	141	178
5	65	156	191
Moyenne	61	147	184
Ecart type	5	9	8

Table IV.5 : valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % et de la limite d'élasticité à 0,2 % pour chaque essai de traction présenté sur la figure IV.10

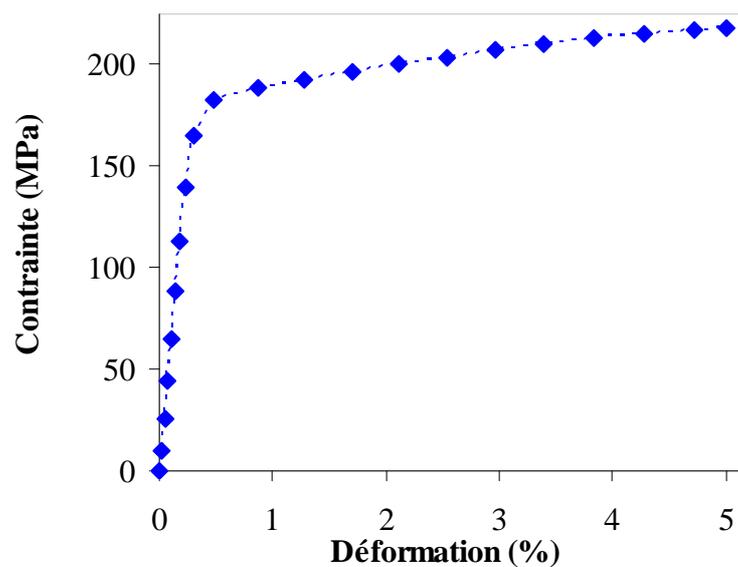


Figure IV.11 : courbe de référence pour l'aluminium (Al6060)

Compression

Comme pour l'acier, un seul essai de compression a été effectué pour l'aluminium. Le résultat de cet essai est présenté dans la *figure IV.12*. Le module d'Young, la limite d'élasticité à 0,02 % et la limite d'élasticité à 0,2 % ont été calculés à partir de la *figure IV.10* (tableau IV.6).

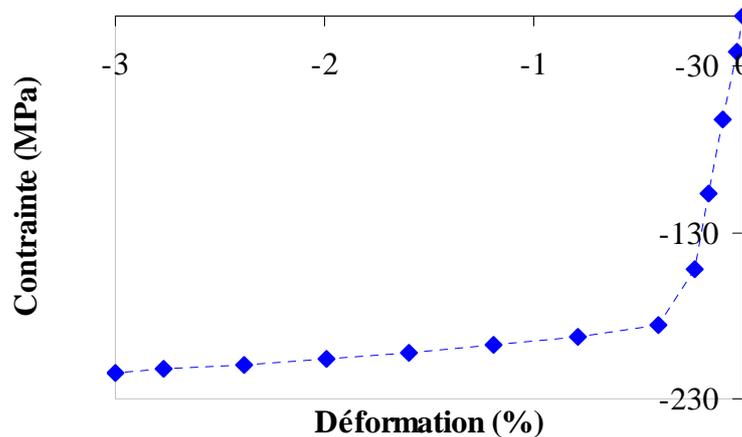


Figure IV.12 : essais de compression de l'aluminium (Al6060)

ϵ_{11} (%)	E (GPa)	$R_{0,02}$ % (MPa)	$R_{0,2}$ % (MPa)
3	60,00	-160	-188

Tableau IV.6 : valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % et de la limite d'élasticité à 0,2 % pour l'essai de compression-traction

Comparaison des résultats de traction et de compression

La *figure IV.13* montre les courbes en traction et en compression (en valeur absolue) afin de comparer les deux essais. Les modules élastiques obtenus en traction et en compression sont égaux. La limite d'élasticité à 0,02 % est plus élevée en compression qu'en traction (10 MPa de différence). Comme nous l'avons expliqué pour l'acier austénitique inoxydable (AISI 316L), cette différence entre la courbe en traction et en compression peut être expliquée par la présence de contraintes résiduelles auxquelles se rajoutent les incertitudes inhérentes aux mesures. A 3 % de déformation totale, l'écart relatif entre les deux courbes est de 4 %.

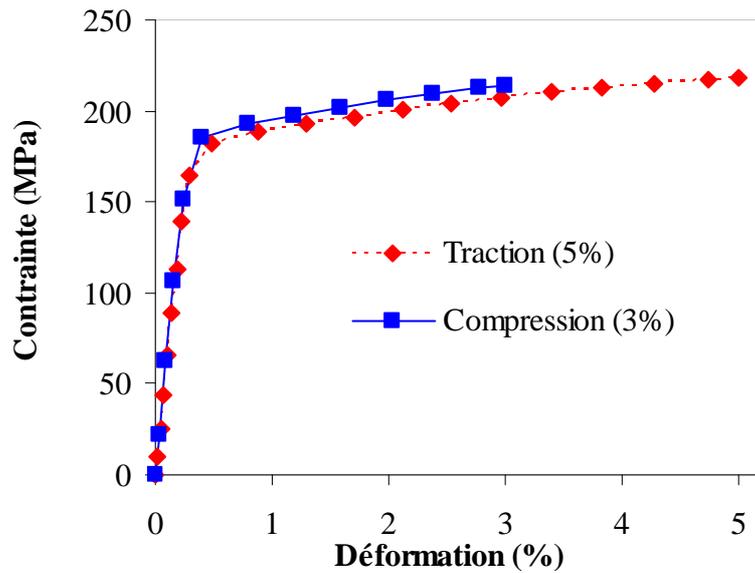


Figure IV.13 : comparaison entre l'essai de traction et l'essai de compression de l'aluminium (Al6060)

IV.2.2.2. Chargement complexe

Les courbes du chargement complexe sont présentées dans la *figure IV.14* pour des chargements en traction suivis d'une compression et dans la *figure IV.15*, pour un essai en compression suivi d'une traction. Les parties transitoires des courbes de premier chargement ont des rayons de courbure plus faibles que celles des courbes de second chargement. Le rayon de la courbure, du second chargement, est plus important si la prédéformation est élevée. De manière similaire à l'acier, les essais mécaniques permettent de mettre en évidence l'effet Baushinger.

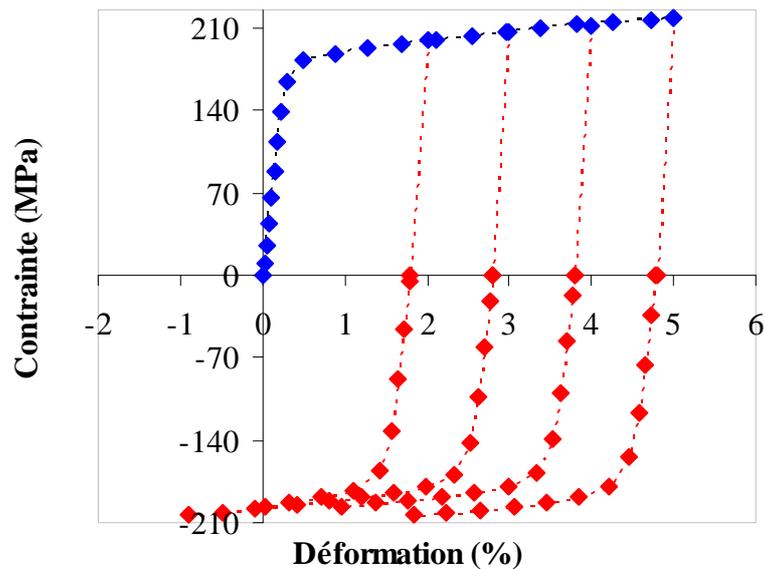


Figure IV.14 : essais de traction suivis d'une compression pour l'aluminium
 [◆ : premier chargement en traction ; ◆ : deuxième chargement en compression]

A partir de ces courbes, nous avons calculé le module d'Young et la limite d'élasticité à 0,02 % et à 0,2 % de déformation du second chargement (*tableaux IV.7 et IV.8*). Comme dans le cas de l'acier, une évolution des résultats est observée. La limite d'élasticité diminue avec l'augmentation de la prédéformation. La dispersion des valeurs pour le module d'Young est correcte avec une valeur moyenne de 59 ± 4 GPa.

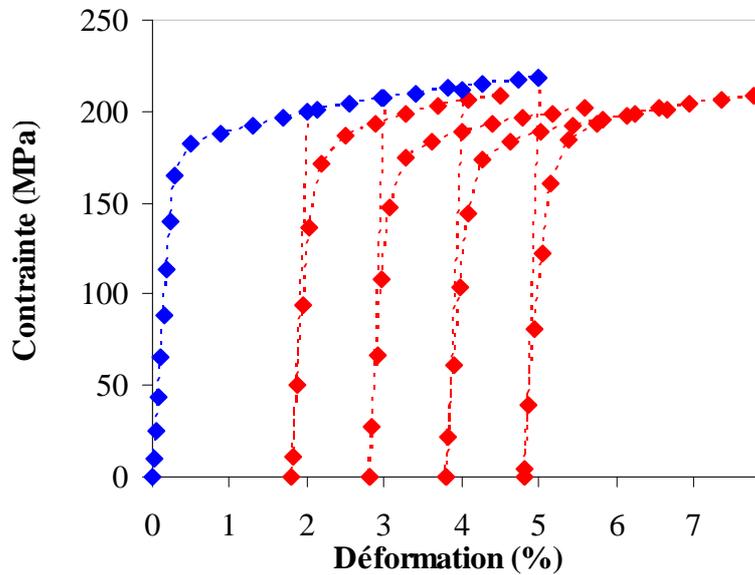


Figure IV.15 : essais de prédéformation en traction suivie d'une compression pour l'aluminium, valeurs absolues

[◆ : premier chargement en traction ; ◆ : deuxième chargement en compression]

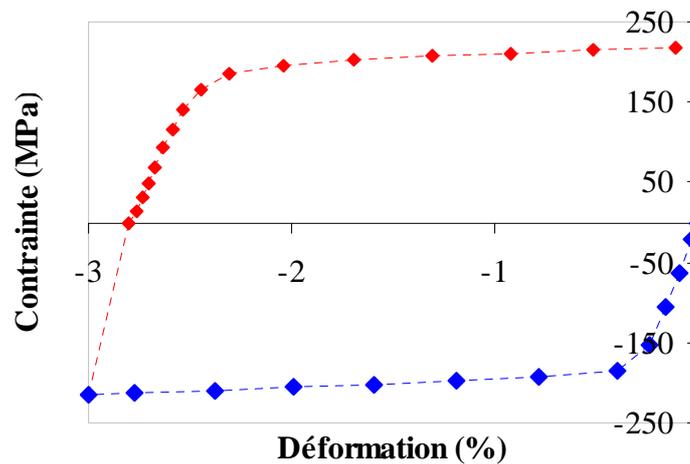


Figure IV.16 : essai de prédéformation en compression suivie d'une traction pour l'aluminium

[◆ : premier chargement en compression; ◆ : deuxième chargement en traction]

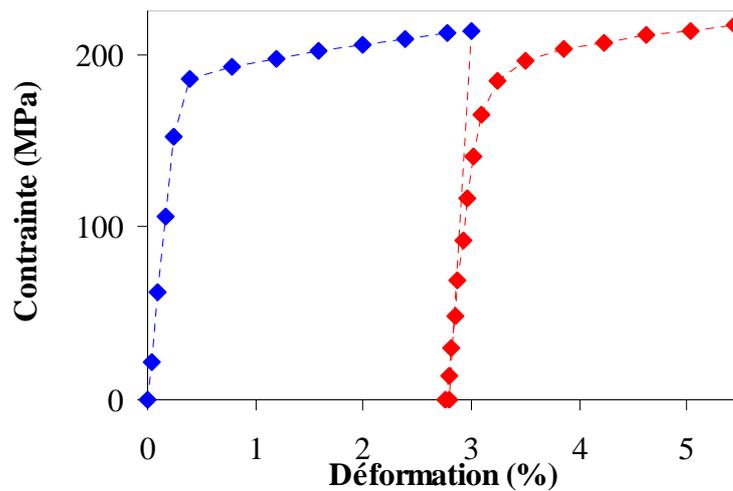


Figure IV.17 : essai de prédéformation en compression suivie d'une traction pour l'aluminium, valeurs absolues

[◆ : premier chargement en compression; ◆ : deuxième chargement en traction]

Prédéformation (ϵ_{11} (%))	E (GPa)	$R_{0,02\%}$ (MPa)	$R_{0,2\%}$ (MPa)
2	60	-111	-190
3	64	-92	-183
4	58	-85	-178
5	55	-80	-174
Moyenne	59	143	178

Tableau IV.7 : valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % et de la limite d'élasticité à 0,2 % pour chaque courbe de la figure IV.14

Les limites conventionnelles d'élasticité des seconds chargements à 0,02 % de déformation rémanente diffèrent en valeur absolue de 42 MPa selon que le premier chargement à lieu en traction ou en compression (cf. Tableaux IV.7 et IV.8) alors que cette différence disparaît lorsque la limite d'élasticité est évaluée à 0,2 % de déformation rémanente.

Prédéformation (ϵ_{11} (%))	E (GPa)	$R_{0,02\%}$ (MPa)	$R_{0,2\%}$ (MPa)
-3	61	-50	-180

Tableau IV.8 : valeurs du module d'Young, de la limite d'élasticité à 0,02 % et de la limite d'élasticité à 0,2 % pour l'essai de compression-traction

IV.3. Analyses des contraintes résiduelles

Concernant les mesures de contraintes par DRX, des analyses ont été faites, pour différents plans, sur les éprouvettes d'acier austénitique inoxydable (plan (220)) et sur celles d'aluminium (plans (311), (222) et (422)). Pour étudier l'évolution des contraintes résiduelles en fonction du chargement mécanique (figure IV.14), deux directions de mesures ont été choisies pour chaque plan et pour chaque matériau : la direction longitudinale (σ_{11} avec $\phi = 0^\circ$) et la direction transverse (σ_{22} avec $\phi = 90^\circ$).

Afin de vérifier l'homogénéité des contraintes résiduelles initiales, nous avons analysé l'ensemble des éprouvettes avant d'effectuer les essais mécaniques. De plus, une étude de

l'homogénéité spatiale de l'état mécanique, sur la partie calibrée des éprouvettes, a été réalisée sur différentes génératrices pour des éprouvettes vierges et déformées. Une étude de répétabilité a aussi été faite.

Une fois ces études (homogénéité, répétabilité) réalisées, les éprouvettes ont ensuite été déformées en traction (premier chargement) à différents taux de déformation puis elles ont été analysées par diffraction des rayons X. Ces éprouvettes prédéformées ont alors subi un chargement en compression suivi d'une nouvelle analyse des contraintes résiduelles (*figure IV.18*). La même méthodologie a été employée dans le cas de l'essai de compression-traction. L'objectif est de caractériser le développement et l'évolution des déformations ou des contraintes intergranulaires lors d'un trajet complexe. Ces expériences nous permettront d'obtenir des données complémentaires aux essais mécaniques. En effet, la DRX permet d'acquérir des informations à une échelle intermédiaire entre les niveaux mésoscopique et macroscopique. Les grandeurs accessibles à cette échelle permettent d'avoir des renseignements (indirects) sur les mécanismes de déformation plastique activés à l'échelle du grain [*Gloaguen et al. 07*]. Cet ensemble constituera une base pour une validation des modèles mis en place durant ce travail.

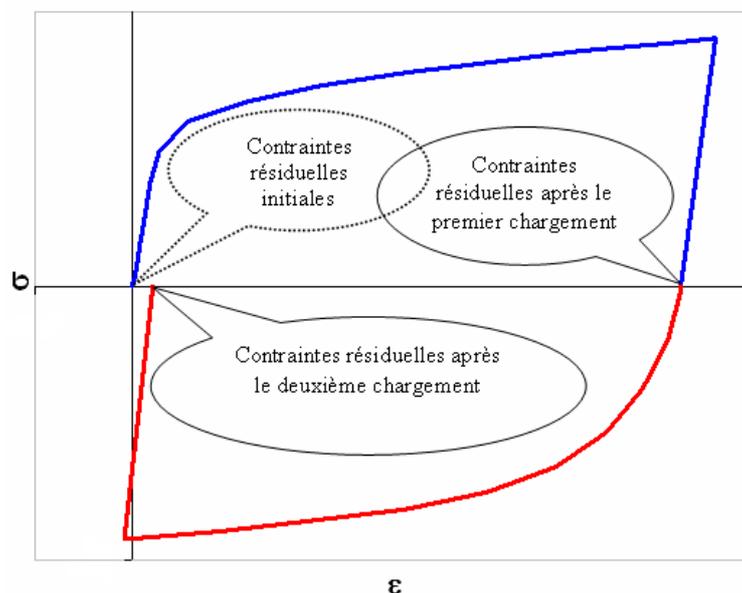


Figure IV.18 : points d'analyses des contraintes résiduelles lors d'un essai de traction-compression

IV.3.1. Acier inoxydable austénitique (AISI 316L)

Comme cela a été indiqué dans le *chapitre III*, dans le cas de l'acier inoxydable austénitique, nous avons étudié le plan (220) avec l'anticathode du chrome.

Le tableau *IV.9* présente l'état de contraintes initial moyen des éprouvettes avant et après le traitement thermique (650°C pendant 6 heures). Malgré une diminution significative du niveau des contraintes, celles-ci ne sont pas négligeables et ce, particulièrement dans la direction longitudinale. Des essais complémentaires ont alors été effectués en modifiant le temps du traitement, la température ou la vitesse de refroidissement. Ces essais n'ont pas permis de relaxer totalement les contraintes. Cependant, les contraintes étant globalement identiques sur l'ensemble des éprouvettes, elles ne génèrent pas la comparaison entre les essais. Par contre, cet état initial devra être pris en compte dans nos modèles (cf. *chapitre V*).

	σ_{11} (MPa)	σ_{22} (MPa)
Avant traitement thermique	-600 ± 33	-180 ± 50
Après traitement thermique	-180 ± 40	-50 ± 80

Tableau IV.9 : caractérisation des contraintes résiduelles avant les essais mécaniques

L'évolution des contraintes résiduelles avec leur incertitude associée, en fonction du pourcentage de déformation macroscopique totale lors du premier chargement, est donnée par la figure IV.19.

Les contraintes résiduelles longitudinales ($\phi = 0^\circ$) passent d'un état de compression (-180 ± 40 MPa) à un état de traction lors du premier chargement. Elles augmentent en fonction du taux de déformation macroscopique. A 10 % de déformation totale, la contrainte à $\phi = 0^\circ$ est de 709 ± 29 MPa. Seul le point à 6 % ne correspond pas à cette tendance observée. Dans le cas de l'essai de compression avec un taux de déformation de $-6,3$ %, la contrainte résiduelle longitudinale est, cette fois-ci, faible avec une valeur positive de 28 ± 17 MPa.

Les contraintes résiduelles transversales ($\phi = 90^\circ$) présentent un comportement opposé : elles sont en compression quelque soit le taux de déformation en traction. Les contraintes résiduelles au début de la déformation augmentent en valeur absolue entre 0 et 2 % de déformation totale : elles passent de -50 ± 80 MPa à -205 ± 58 MPa. Ensuite ces contraintes diminuent progressivement avec la déformation appliquée pour atteindre -90 ± 22 MPa à 10 % de déformation. Dans le cas de l'essai de compression, nous avons logiquement un état de contrainte opposé, en traction, avec une valeur de 111 ± 21 MPa (cf. figure IV.20).

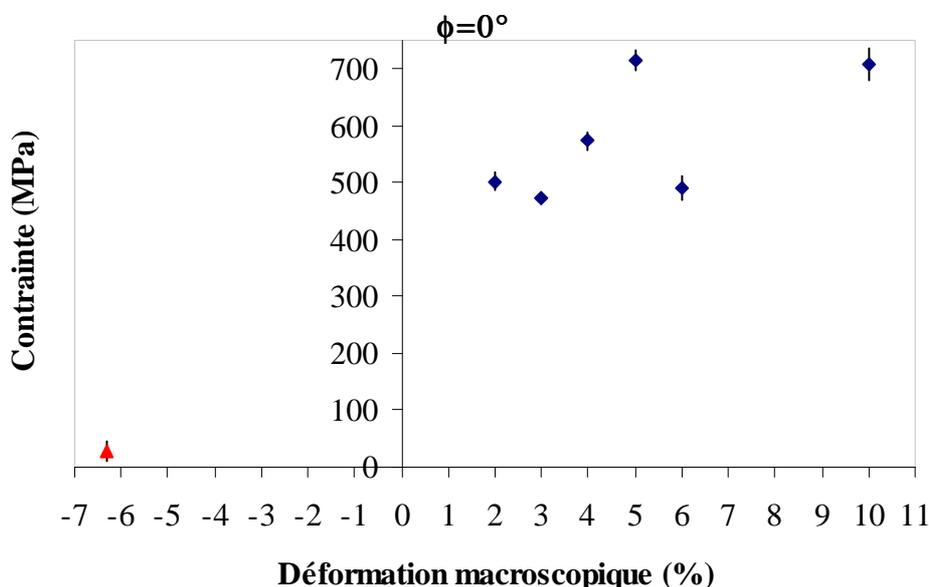


Figure IV.19 : évolution des contraintes résiduelles longitudinales après le premier chargement en fonction de la déformation macroscopique. ▲ : essai de compression ; ◆ : essai de traction

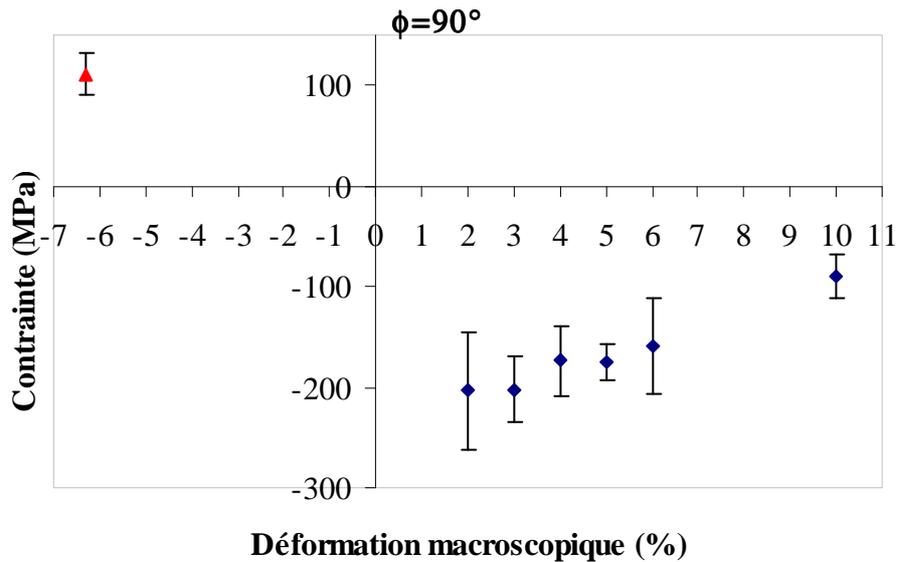


Figure IV.20 : évolution des contraintes résiduelles transversales après le premier chargement en fonction de la déformation macroscopique \blacktriangle : essai de compression ; \blacklozenge : essai de traction

La figure IV.21 présente l'évolution des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ dans la direction longitudinale en fonction de la déformation subie par les éprouvettes d'acier. On constate une variation marquée de ces courbes en fonction de la déformation en terme de pente et d'ondulation des courbes. A l'état initial, la pente est négative puis augmente progressivement en concordance avec les valeurs de contraintes normales données précédemment. Les ondulations des courbes et leurs amplitudes sont liées à l'hétérogénéisation intergranulaire dépendant directement de la plasticité au niveau des grains constitutifs du volume diffractant. Ces ondulations varient donc avec la déformation macroscopique. Nous reviendrons sur l'interprétation de ces résultats à la fin de la section.

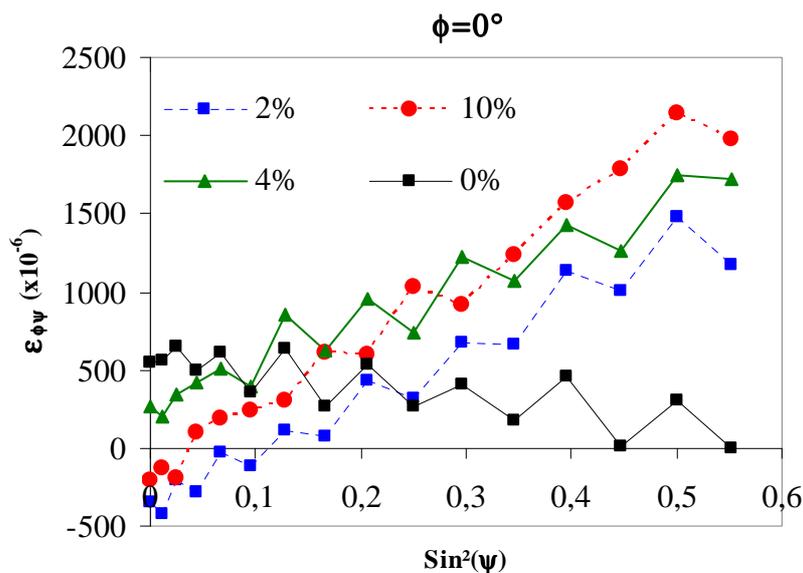


Figure IV.21 : évolution expérimentales des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ après le premier chargement en fonction de la déformation totale pour le plan (220)

Nous avons également analysé les contraintes résiduelles créées par le deuxième chargement. Pour la compression, le taux de déformation totale a été fixé à -3% pour ne faire varier que le taux de prédéformation. Pour deux échantillons prédéformés à 2 et 4%, nous avons fixé un taux de déformation en compression à -6% et -5% pour analyser l'évolution des contraintes en fonction du niveau de compression fixé. Les contraintes transversales et longitudinales sont données dans les *figures IV.22* et *IV.23*.

Les contraintes longitudinales passent d'un état de traction (après le premier chargement) à un état de compression (à la fin du deuxième chargement) avec des niveaux de contraintes relativement similaires. Les valeurs des contraintes augmentent en valeur absolue avec la déformation du second chargement. Par exemple, si on analyse deux éprouvettes prédéformées à 4 % mais ayant subi des taux de déformation en compression différents (-3 et -5 %), le niveau de contrainte passe de -529 ± 13 MPa à -623 ± 17 MPa. Pour les éprouvettes déformées à 3 % en compression, les contraintes varient de -450 ± 17 MPa à -593 ± 14 MPa. L'éprouvette qui a subi le taux de prédéformation le plus grand (10 %) a la contrainte longitudinale la plus faible. Pour les autres, on constate des états de contraintes relativement similaires malgré des taux de prédéformation différents au départ. Ceci laisse supposer que l'état mécanique généré lors des essais en traction n'influence le comportement du matériau lors du second essai qu'au début en terme de limite d'élasticité et de transition élastoplastique. Puis, avec la déformation plastique, ces contraintes sont remplacées par les contraintes internes générées lors du deuxième essai.

Pour les analyses suivant la direction transverse pour le plan (220), les contraintes, suite au deuxième essai, diminuent en valeurs absolues par rapport au premier essai pour tendre vers un état de traction (38 ± 16 MPa pour l'éprouvette prédéformée à 10 %). L'analyse quantitative de leur évolution est plus délicate étant donné les écart-types élevés obtenus pour plusieurs points. Ils varient entre 100 et -100 MPa.

Pour l'essai de compression-traction, on passe, pour le plan cristallographique étudié, d'un état de traction à un état de compression avec le changement de trajet de déformation. Par exemple, la contrainte suivant la direction transverse varie de 111 ± 21 à -80 ± 20 MPa à la fin du chargement séquentiel.

A ce stade de la présentation, il convient ici de restituer les résultats obtenus dans ce travail dans le cadre de l'analyse des contraintes par diffraction et notamment de remettre en perspective les hypothèses sous-jacentes de ce type d'analyse.

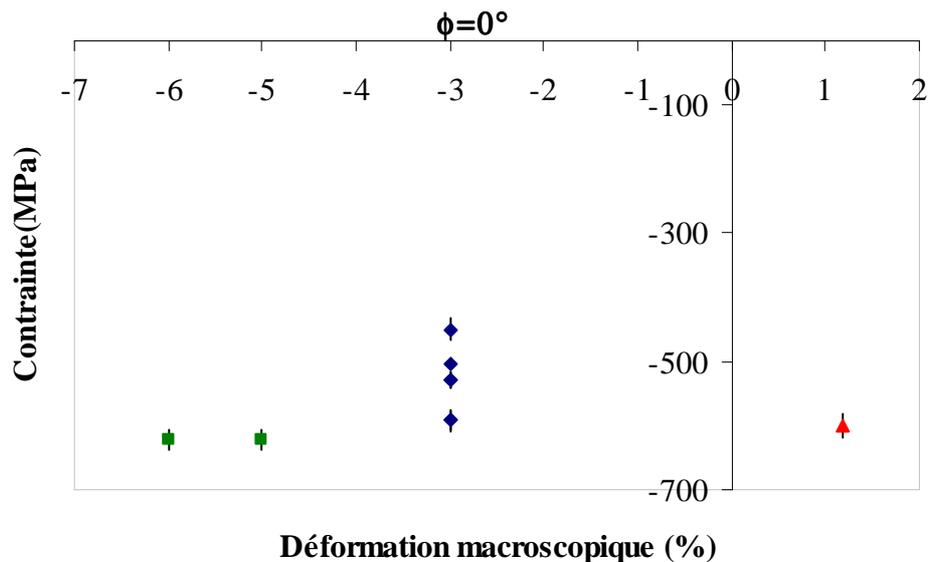


Figure IV.22 : contraintes résiduelles longitudinales après le deuxième chargement pour chaque éprouvette. ▲ : essai de traction ; ◆ : essai de compression ; ■ : essais de compression à -5 % et -6 %.

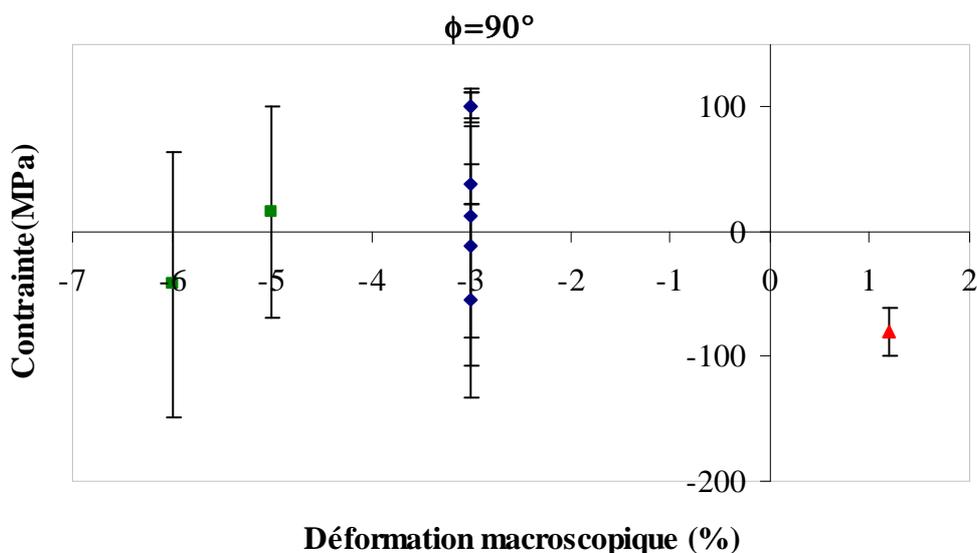


Figure IV.23 : contraintes résiduelles transversales après le deuxième chargement pour chaque éprouvette. ▲ : essai de traction ; ◆ : essai de compression ; ■ : essais de compression à -5 % et -6 %.

En effet, dans cette méthode, on suppose le matériau polycristallin quasi-isotrope. Si les grains constitutifs du matériau sont élastiquement anisotropes, l'isotropie élastique est réalisée statistiquement si les grains sont orientés de façon aléatoire et s'ils sont de taille suffisamment petite. La première condition assure que le nombre de grains en position de diffraction sera sensiblement indépendant de la direction de mesure et la seconde condition garantit que ce nombre sera suffisant pour que le volume diffractant constitue un échantillon du matériau statistiquement représentatif. La déformation élastique mesurée par diffraction est une

moyenne pondérée des déformations existant sur tout le volume diffractant. On suppose alors que le tenseur de contraintes est constant à l'intérieur de ce volume et qu'il est représentatif de la contrainte macroscopique. L'anisotropie élastique est prise en compte, dans cette approche, au travers des constantes radiocristallographiques (cf. *chapitre III*). Pour les matériaux anisotropes (en particulier ceux qui possèdent une texture cristallographique, et/ou ceux qui ont subi de fortes déformations), la linéarité des courbes en $\sin^2\psi$ n'est plus respectée : une ondulation assez marquée traduit dans ce cas l'anisotropie élastique et plastique des grains, ainsi que l'hétérogénéité des déformations par orientation cristallographique. La texture peut être prise en compte dans cette approche. Il suffit de calculer les constantes radiocristallographiques pour un plan (hkl) donné pour chaque direction de mesure (ϕ, ψ) en tenant compte de la Fonction de Distribution des Orientations (FDO) expérimentale [Inal 96]. La prise en compte des déformations intergranulaires est plus complexe. Il faut alors coupler les mesures aux résultats d'un modèle théorique (cf. *chapitre III*). On peut alors séparer les contraintes d'ordre I et II [Berchi 06]. Dans notre étude, les éprouvettes ont subi une déformation plastique homogène donc après décharge, les contraintes résiduelles d'ordre I sont nulles. Les résultats expérimentaux obtenus sont donc représentatifs des déformations résiduelles d'ordre II. La méthode ici n'est plus valable. Il faudrait supposer l'existence d'un tenseur de contraintes pseudo-macroscopique au niveau du volume diffractant (qui est non connexe) qui varie pour chaque direction de mesure. Ce n'est pas le cas pour des matériaux cubiques.

Par contre, les contraintes déterminées ainsi, permettent, de façon commode, la quantification et la représentation du développement des hétérogénéités intergranulaires liées directement à l'anisotropie plastique au niveau du grain. Les pentes des courbes en $\sin^2\psi$ (cf. *figure IV.21*) ne sont donc pas reliées à une contrainte macroscopique mais à des contraintes mésoscopiques. On obtient alors des contraintes apparentes : ce sont finalement les contraintes macroscopiques qu'il faudrait appliquer en l'absence d'anisotropie plastique pour retrouver les pentes des courbes dues aux hétérogénéités d'ordre II.

IV.3.2. Alliage d'aluminium

Dans le cas de l'alliage d'aluminium, la campagne de mesures s'est déroulée en deux étapes. Les plans cristallographiques (311) et (222) ont été étudiés avec un rayonnement de chrome pour déterminer les contraintes résiduelles apparentes aux différents taux de déformation choisis. Puis, dans un second temps, une analyse similaire a été faite sur le plan (422) en utilisant, cette fois-ci, un rayonnement de cuivre. Cette possibilité d'analyser l'état mécanique du matériau suivant trois plans cristallographiques permet d'obtenir un maximum d'informations sur les déformations générées lors des différents chargements et de quantifier plus précisément l'anisotropie plastique du matériau. De manière similaire à l'acier, une étude systématique a été effectuée sur les éprouvettes vierges pour vérifier l'homogénéité de l'état mécanique initial. Le *tableau IV.10* présente les contraintes résiduelles initiales.

Plan cristallographique	σ_{11} (MPa)	σ_{22} (MPa)
(311)	-29±10	-18±8
(222)	-25±15	-17±7
(422)	-70±10	-25±10

Tableau IV.10 : contraintes résiduelles moyennes obtenues avant les essais mécaniques

IV.3.2.1. Contraintes longitudinales

La *figure IV.24* présentent les contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan (311) après le premier chargement mécanique. Après les essais de traction, les contraintes ont alors une valeur positive. Elles diminuent avec l'augmentation du pourcentage de la déformation macroscopique appliquée. Elles passent de 22 ± 3 MPa, à 2 % de déformation mécanique, à 7 ± 3 MPa à 5 % de déformation mécanique. L'essai de compression a donné un état de contrainte en compression de -11 ± 6 MPa.

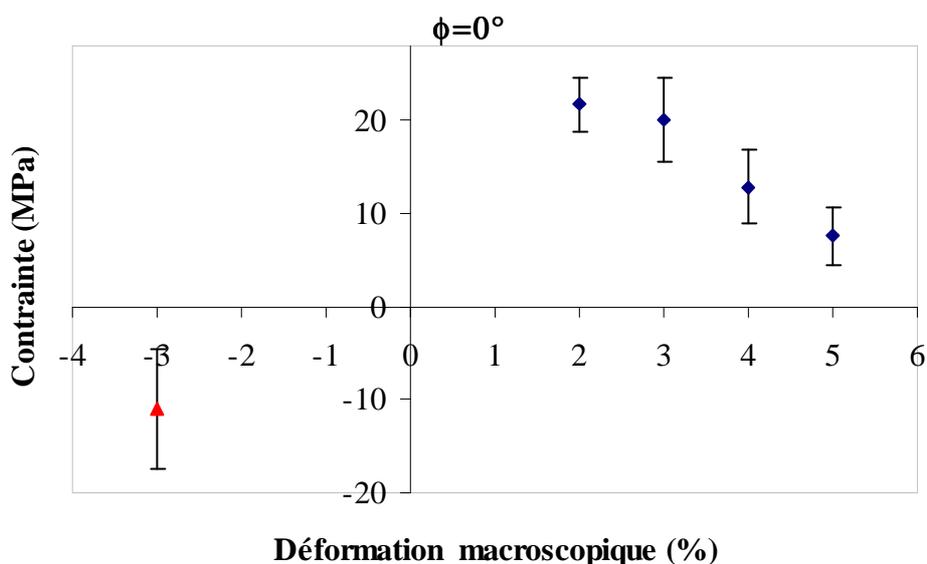


Figure IV.24 : contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan (311) après le premier chargement pour chaque éprouvettes. ◆ : essai de traction ; ▲ : essai de compression ;

L'évolution des contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan cristallographique (222), après le premier chargement mécanique, est présentée dans la *figure IV.25*. Dans le cas des essais en traction, les contraintes longitudinales de traction obtenues varient de 20 ± 5 MPa à 40 ± 4 MPa. Dans le cas des essais en compression, la contrainte longitudinale en compression atteint -41 ± 5 MPa.

La *figure IV.26* montre la variation des contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan cristallographique (422). Ces contraintes ont une tendance à passer à un état de traction. Dans le cas d'un chargement en compression, une valeur de -7 ± 14 MPa a été déterminée. Pour ce plan, les écart-types trouvés sont plus importants : ils peuvent atteindre une valeur de 17 MPa. Ceci rend difficile la détermination d'une tendance. Ce problème est lié à la qualité des pics de diffraction pour ce plan cristallin.

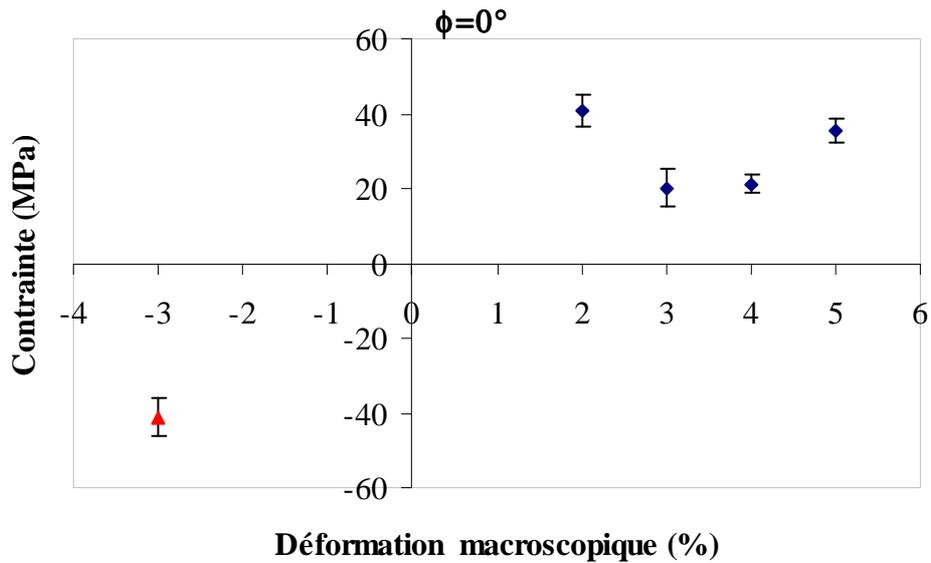


Figure IV.25 : contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan (222) après le premier chargement pour chaque éprouvette. ◆ : essai de traction ; ▲ : essai de compression ;

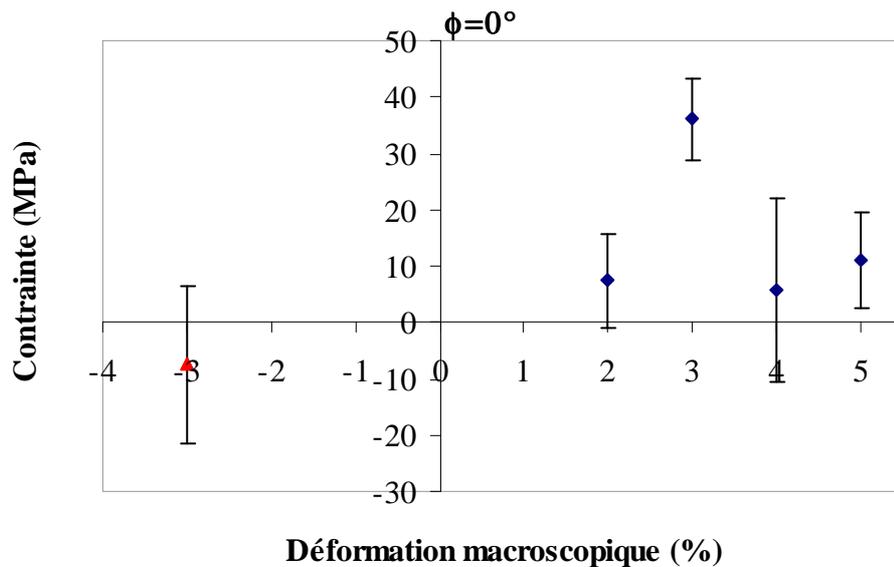


Figure IV.26 : contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan (422) après le premier chargement pour chaque éprouvette. ◆ : essai de traction ; ▲ : essai de compression ;

Contrairement à l'acier, le niveau des contraintes apparentes est beaucoup plus faible même si les tendances (signe des contraintes) observées sont les mêmes. Par contre, on n'observe pas d'évolution nette du comportement en fonction de la déformation subie. Le niveau de la contrainte macroscopique appliquée à l'aluminium est environ deux fois plus faible que pour l'acier. Il est alors normal que le niveau des déformations élastiques additionnelles (à l'origine des contraintes résiduelles) servant à accommoder les incompatibilités de déformations plastiques entre grains soit moins important. Il se rajoute à ce constat des différences en terme

de texture, d'anisotropie élastique et plastique. La *figure IV.27* donne l'évolution des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ dans la direction longitudinale en fonction de la déformation subie.

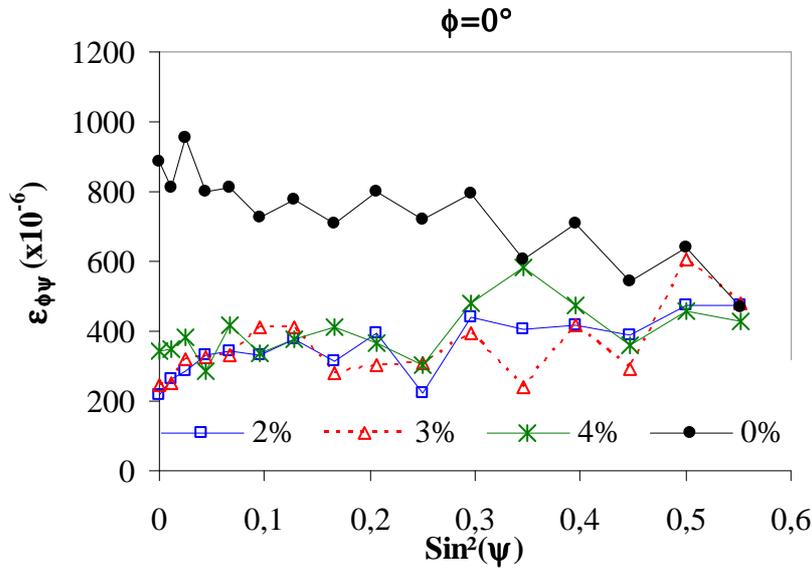


Figure IV.27 : évolution expérimentale des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ dans la direction longitudinale en fonction de la déformation totale pour le plan (311)

On constate des variations de déformations plus faibles que celles obtenues avec l'acier en corrélation avec les valeurs obtenues pour les contraintes.

Après le deuxième chargement, les contraintes résiduelles longitudinales pour le plan (311) passent en compression (aux alentours de -15 MPa) pour une prédéformation en traction et en traction (5 MPa) pour un premier chargement en compression (*figure IV.28*).

Pour les plans (222) et (422), un comportement similaire est observé (cf. *figures IV.28* et *IV.29*) : le signe des contraintes apparentes (et des courbes de déformations associées) change.

Le niveau moyen des contraintes et des déformations est différent d'un plan à l'autre pour un même essai. Ceci peut s'expliquer par l'anisotropie plastique du matériau. Les groupes de grains participant au volume diffractant ne sont pas les mêmes pour chaque plan. Ils n'ont pas, a priori, subi la même déformation plastique. Cette différence reste toutefois faible et elle n'est pas comparable aux résultats obtenus sur des matériaux hexagonaux comme le zirconium dont l'anisotropie plastique est très marquée [*Gloaguen 01*].

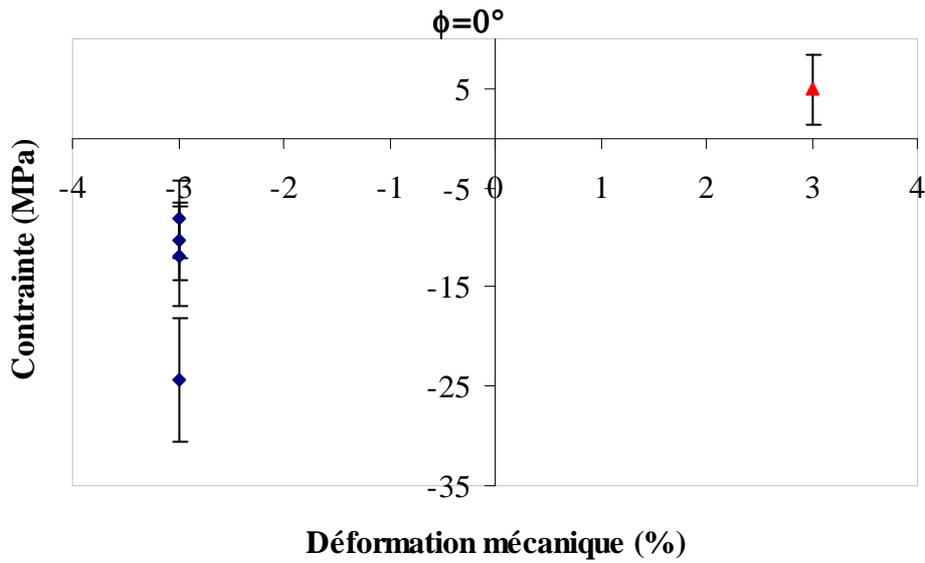


Figure IV.28 : contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan (311) après le deuxième chargement pour chaque éprouvette. ◆ : essai de compression ; ▲ : essai de traction ;

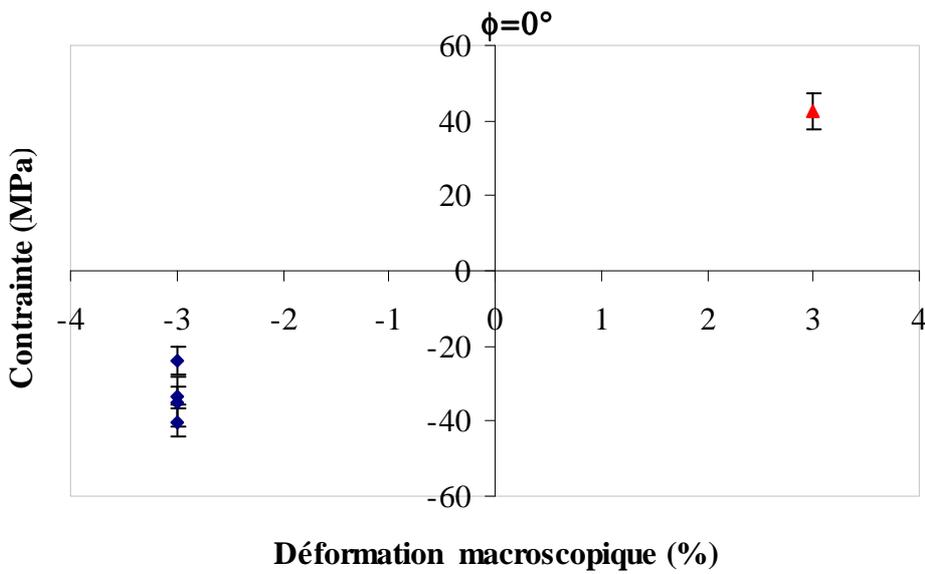


Figure IV.29 : contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan (222) après le deuxième chargement pour chaque éprouvette. ◆ : essai de compression ; ▲ : essai de traction ;

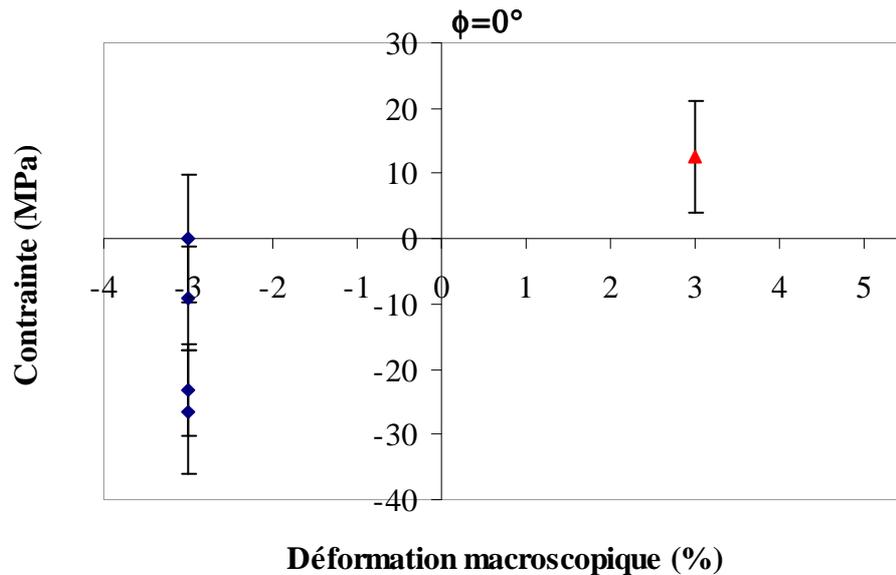


Figure IV.30 : contraintes résiduelles longitudinales suivant le plan (422) après le deuxième chargement pour chaque éprouvette. ◆ : essai de compression ; ▲ : essai de traction ;

IV.3.2.2. Contraintes transverses

Pour la direction transverse, nous avons étudié le comportement mécanique des plans (311) et (222) de l'aluminium. La qualité des pics du plan (422) n'était pas suffisante en terme d'intensité et de définition pour en tenir compte.

Comme pour l'acier, les contraintes résiduelles transversales suivant le plan (311) sont aussi en compression après le premier chargement en traction (*figure IV.31*). Le niveau de contraintes est plus faible : elles varient de -37 ± 8 MPa à -20 ± 3 MPa entre 0 et 5 % de déformation macroscopique. Pour l'essai en compression, un résultat en traction est obtenu avec une contrainte finale de 17 ± 5 MPa.

L'évolution des contraintes résiduelles suivant le plan cristallographique (222), après le premier chargement mécanique, est présentée dans la *figure IV.32*. Dans le cas des essais en traction, nous obtenons également des contraintes transverses en compression. Elles varient entre -5 ± 10 MPa et -35 ± 7 MPa. Dans le cas des essais en compression, nous avons une contrainte transverse en traction de 18 ± 6 MPa.

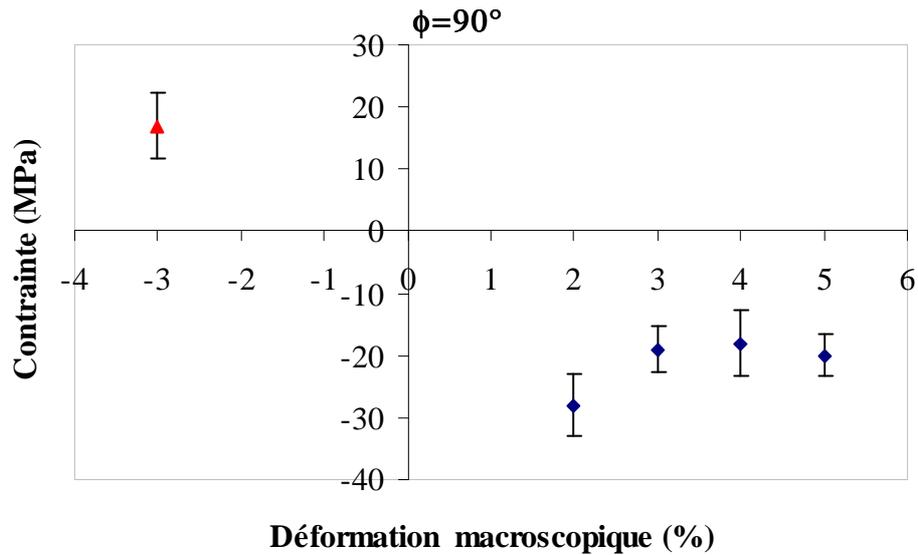


Figure IV.31 : contraintes résiduelles transverses suivant le plan (311) après le premier chargement pour chaque éprouvette. ◆ : essai de traction ; ▲ : essai de compression ;

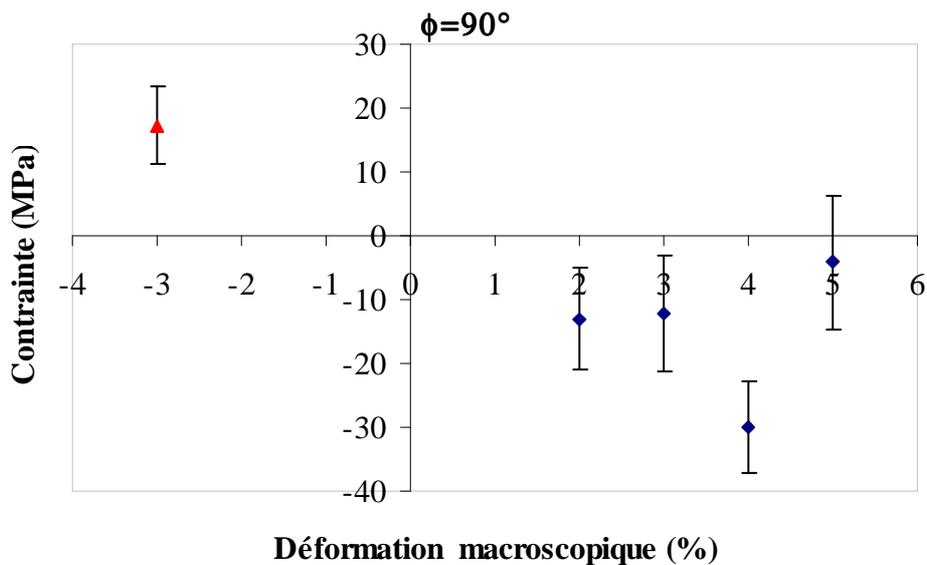


Figure IV.32 : contraintes résiduelles transverses suivant le plan (222) après le premier chargement pour chaque éprouvette. ◆ : essai de traction ; ▲ : essai de compression ;

Les figure IV.33 et IV.34 donnent l'évolution des contraintes apparentes suivant les plans (311) et (222) à la fin du deuxième essai. Les contraintes passent en traction. Pour le plan (311), leurs valeurs varient entre 10 ± 9 MPa et 27 ± 5 MPa pour un même taux de déformation en compression (-3 %). Par contre, elles passent en compression (-21 ± 5 MPa pour le plan (311)) pour l'essai compression-traction.

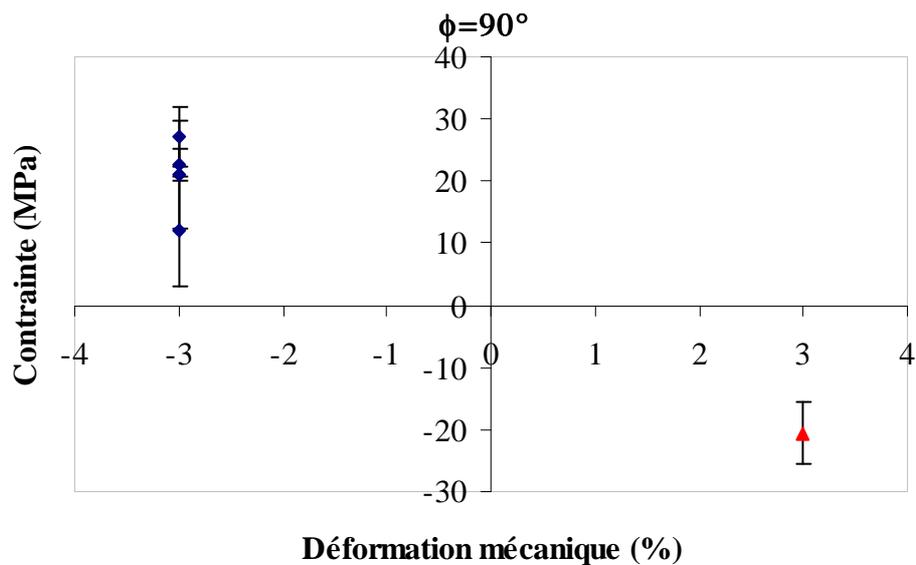


Figure IV.33 : contraintes résiduelles transverses suivant le plan (311) après le deuxième chargement pour chaque éprouvette. ◆ : essai de compression ; ▲ : essai de traction ;

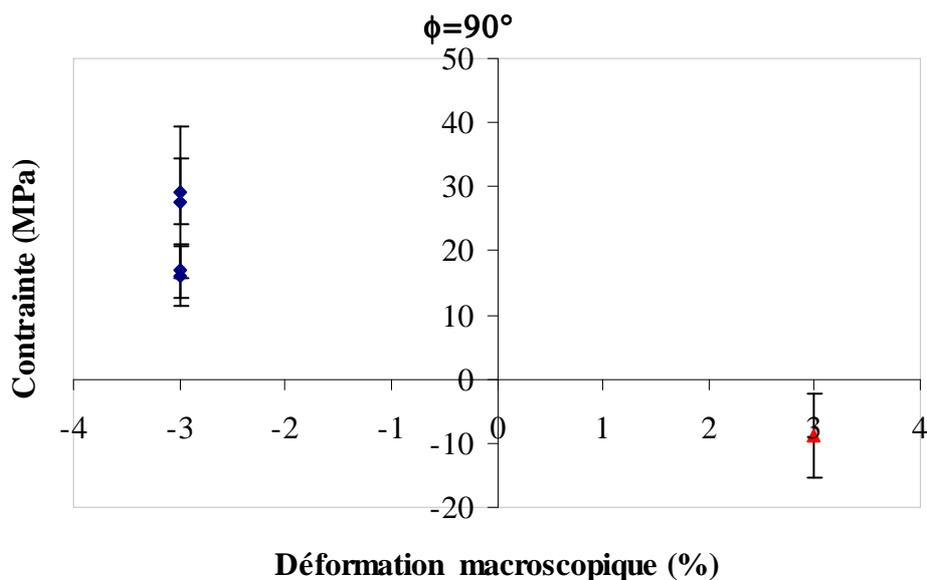


Figure IV.34 : contraintes résiduelles transverses suivant le plan (222) après le deuxième chargement pour chaque éprouvette. ◆ : Essai de compression ; ▲ : essai de traction ;

IV.4. Conclusion

L'étude expérimentale réalisée dans ce chapitre a permis d'analyser le comportement mécanique de deux alliages cubiques : l'acier 316L et l'aluminium 6060. Le couplage des essais mécaniques avec la diffraction des rayons X a permis de caractériser l'état mécanique de ces matériaux en fonction de la déformation plastique du matériau à deux échelles : macroscopique et le volume diffractant. Les essais mécaniques ont mis en évidence l'effet Bauschinger au sein de ces matériaux lors d'essai de traction-compression. La diffraction des

rayons X donne des informations riches sur l'état mécanique du matériau aux différentes échelles. Les déformations moyennes mesurées à l'échelle du volume diffractant sont le résultat des mécanismes de déformation plastique (lié à l'anisotropie plastique des grains) activés au niveau des groupes de grains participant au phénomène de diffraction. Néanmoins, l'analyse traditionnelle des contraintes ne s'applique plus ici. En effet, seules les contraintes d'ordre II sont présentes. Nous avons alors introduit la notion de contrainte apparente pour permettre de quantifier plus aisément nos résultats. Les courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ ou les contraintes apparentes (proportionnelles à la pente des courbes) ont permis de montrer une évolution équivalente pour l'acier et l'aluminium mais avec des niveaux différents. Ces évolutions observées semblent logiques et dépendent du type d'essai (traction ou compression) et de la direction d'analyse ($\phi = 0$ ou 90°). Il sera intéressant de voir si nos modèles arrivent à reproduire (et à expliquer) simultanément l'ensemble de ces résultats pour les deux échelles caractérisées dans cette étude expérimentale.

Chapitre V : Confrontation expériences - modélisation

V.1. Introduction

Nous avons développé des modèles micromécaniques afin de simuler le comportement mécanique d'un matériau polycristallin lors d'essais complexes. Dans ce chapitre, nous nous proposons de confronter les résultats expérimentaux aux simulations. Dans un premier temps, il s'agit d'alimenter les modèles utilisés. Il faut donc leur fournir les différents paramètres nécessaires pour une description réaliste du comportement mécanique du matériau. Certains paramètres sont facilement identifiables : la texture initiale, les constantes d'élasticité du monocristal et celles du polycristal texturé. Par contre, les matrices d'écrouissage, la fraction volumique des cellules ainsi que leur évolution, par exemple, sont des paramètres plus difficiles à fixer de manière univoque.

Néanmoins, les constatations issues de la bibliographie, complétées par les résultats expérimentaux nous permettent d'avoir une base à ce travail qui devra être affinée et fixée par une confrontation avec les résultats expérimentaux. Les courbes de traction valident les simulations à l'échelle macroscopique et les analyses par diffraction des rayons X à une échelle intermédiaire des niveaux macroscopique et microscopique : les volumes diffractants. Une fois cette étape franchie, le modèle peut non seulement simuler le comportement mécanique du matériau mais aussi compléter l'étude expérimentale en donnant des éléments de réflexion supplémentaires pour une meilleure compréhension des différents phénomènes présents au sein du matériau étudié.

Dans une première partie, nous présenterons les résultats obtenus à l'échelle macroscopique pour l'aluminium 6060 et l'acier 316L. Nous aborderons dans un second temps, la comparaison des résultats de nos simulations aux données obtenues par diffraction X.

V.2. Comportement mécanique

Les approches numériques développées permettent de simuler la loi de comportement macroscopique du matériau polycristallin texturé. Avant de comparer nos simulations avec les résultats de DRX, il faut essayer de trouver la loi expérimentale en introduisant les paramètres les plus réalistes possibles. Dans le cadre de ce travail, nous avons utilisé les modèles Kr-SC, Peeters-SC et SC-SC (SC : Self-Consistent : autocohérent). Le premier permet d'obtenir des résultats numériques pertinents aux différentes échelles du matériau (cf. *annexe III*) en utilisant un nombre correct de cristallites représentatives de la texture expérimentale du matériau. Le modèle basé sur l'approche autocohérente a été utilisé seulement dans le cas de l'acier pour permettre une comparaison avec le modèle de Kröner.

V.2.1. Aluminium

Pour la détermination des paramètres des modèles nous avons utilisé les essais mécaniques en chargement monotone (traction et compression) comme essais de référence. Ensuite, pour les autres essais (chargements complexes et résultats de diffraction), le jeu de paramètres reste évidemment identique. L'élasticité est supposée isotrope et elle est décrite par le module de cisaillement μ (= 30 GPa) et le coefficient de Poisson ν (= 0,3). Les cellules sont choisies de forme sphérique. Dans le cas d'un matériau CFC, la déformation plastique est assurée par une famille de glissement : $(110)\langle 111 \rangle$. La scission critique initiale pour chaque système de glissement est supposée être la même. Elle est déterminée pour reproduire au mieux la limite

d'élasticité du matériau. La scission réduite initiale est supposée nulle pour chaque système. En effet, les résultats de diffraction ont montré que les déformations élastiques résiduelles (et donc, les contraintes associées) sont faibles à l'état initial. Très peu de données expérimentales sont disponibles sur les paramètres définissant l'évolution des dislocations et l'écroutissage. Dans un premier temps, ces paramètres sont choisis dans des intervalles cohérents avec ceux donnés dans la littérature (quand cela est possible). Puis ils sont ajustés pour reproduire au mieux les données expérimentales relatives à l'essai de traction. Ceci peut se justifier puisque les paramètres ρ_0 (densité de dislocation initiale), y_c (distance d'annihilation, Eq. II.9), k_L (paramètre du matériau lié au libre parcours moyen des dislocations, Eq. II.8), ζ (constante d'autoécrouissage des cellules, Eq. II.24), et κ (constante liée à l'écroutissage non local, Eq. II.68) définissent l'évolution de la densité de dislocations ainsi que l'écroutissage du matériau. Par conséquent, ils peuvent être déduits de la réponse mécanique de celui-ci. Une valeur de 0,5 est prise pour ξ (Eq. II.16). Pour la fraction volumique, une valeur typique ($f_0 = 0,85$) observée pour les cellules de dislocations est choisie. Dans toute cette étude, nous avons gardé cette valeur identique pour l'ensemble de nos modèles. La valeur de k (Eq. II.64) est déterminée par comparaison avec un modèle autocohérent classique pour un chargement monotone (en terme de système de déformation principale et de réorientation cristallographique). Cette valeur est ensuite ajustée pour reproduire au mieux l'essai de référence. Les tableaux V.1 et V.2 résument les paramètres utilisés pour simuler le comportement de l'aluminium. Le module du vecteur de Burgers est $b=5 \cdot 10^{-10}$ m.

a^{gg}	a^{gh}	f_∞	γ^{par}	k_L	k	$\zeta(MPa^2)$	$\rho_0(m^{-2})$	$y_c(m^{-2})$	$\tau_{c0}(MPa)$
1	1,1	0,75	3,2	0,1	2	400	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-9}$	76

Tableau V.1 : paramètres d'ajustement pour le modèle Kr-SC

k	k_f	k_r	k_e	α	I	I^{wd}
1,5	$12 \cdot 10^{-5}$	3	$-1,9 \cdot 10^4$	0,1	10^{-2}	$3 \cdot 10^{-1}$
I^{wp}	$R(m)$	$R^{wd}(m)$	$R^{wp}(m)$	$R_{ncg}(m)$	$R_{rev}(m)$	$R_2(m)$
10^{-1}	10^{-9}	10^{-9}	10^{-9}	10^{-9}	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-9}$

Tableau V.2 : paramètres d'ajustement pour le modèle de Peeters-SC

Le modèle de Peeters a comme principal inconvénient le nombre important de paramètres à identifier (16). De plus, une partie d'entre eux ne peut être déterminée expérimentalement. Il devient donc problématique de partir d'un intervalle de valeurs possible et d'affiner ensuite les paramètres. Pour résoudre cette difficulté, Peeters et al. [Peeters et al. 00] ont mis en place une campagne d'essais avec 5 trajets complexes différents pour trouver, par une procédure d'optimisation, le jeu de paramètres expliquant l'intégralité des résultats expérimentaux. Dans notre cas, ne disposant que d'un seul type de trajet complexe, nous avons déterminé un jeu de paramètres (de manière empirique) en partant des valeurs trouvées par Mahesh et al. [Mahesh et al. 04] sur un polycristal de cuivre après une étude sur l'influence et le rôle de chaque paramètre du modèle. Cette méthodologie ne garantit absolument pas d'avoir trouvée le meilleur jeu (et unique) de paramètres (cf. section V.3) mais constitue une première approche intéressante. La même procédure a été utilisée pour l'acier.

A partir de la FDO expérimentale, nous avons sélectionné 800 orientations représentatives de la texture effective du matériau pour les deux modèles. A chacune d'elles est associé un poids (fraction volumique) $f_i(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$. Nous reviendrons sur ce choix dans la section consacrée à la diffraction.

Les courbes de traction-compression simulées avec les modèles de Kröner et de Peeters sont présentées, respectivement sur les *figures V.1* et *V.2*. Les valeurs choisies pour les scissions critiques et les paramètres d'écroissage permettent de retrouver la loi de comportement de l'aluminium. Le module d'Young calculé est identique à celui déterminé expérimentalement. Le module d'Young du polycristal représente la réponse élastique moyenne de l'ensemble des cristallites. Le fait que ce module soit correctement reproduit implique que les orientations cristallographiques et les fractions volumiques choisies pour nos simulations sont une représentation réaliste de la texture expérimentale. Concernant les résultats lors du deuxième chargement en compression, le modèle de Peeters arrive à reproduire l'intégralité des résultats expérimentaux. Néanmoins, un écart est observé pour la dernière courbe (avec une prédéformation de 5 %) en terme de transition élastoplastique. Un écart relatif de 14 % est constaté dans cette partie. Par contre, le modèle reproduit le régime plastique quel que soit le taux de déformation considéré.

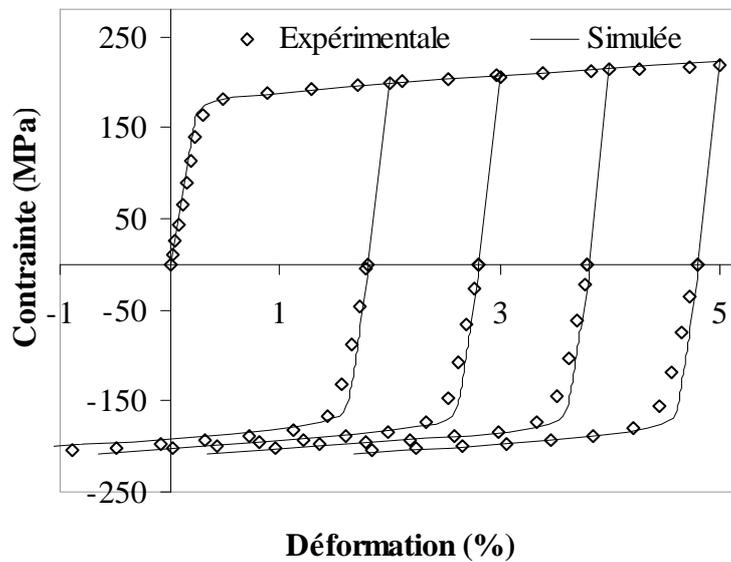


Figure V.1 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées (modèle Peeters-SC)

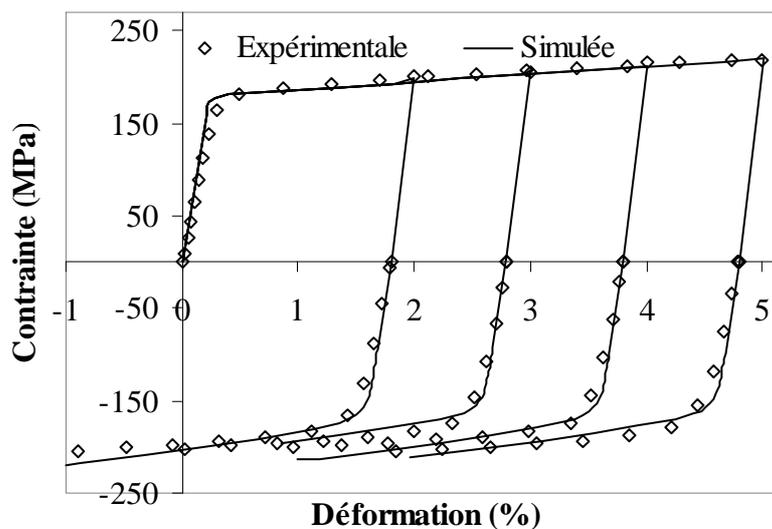


Figure V.2 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées (modèle Kr-SC)

Le modèle de Kröner arrive également à reproduire le comportement de l'aluminium pour des trajets complexes. Pour les chargements en compression, il conduit à de légères différences avec les données expérimentales dans la partie plastique (écart relatif de 6 % à -0,4 % de déformation totale).

Nous avons également simulé l'essai de compression-traction obtenu sur l'alliage d'aluminium avec le même jeu de paramètres que précédemment. Les deux modèles reproduisent correctement l'essai de compression. Par contre, ils décrivent de manière trop rigide la première partie du chargement en compression avec une activation des systèmes de glissement trop tardive. Néanmoins, le régime plastique est correctement reproduit avec un écart relatif de 7 % à la fin de l'essai pour le modèle de Kröner.

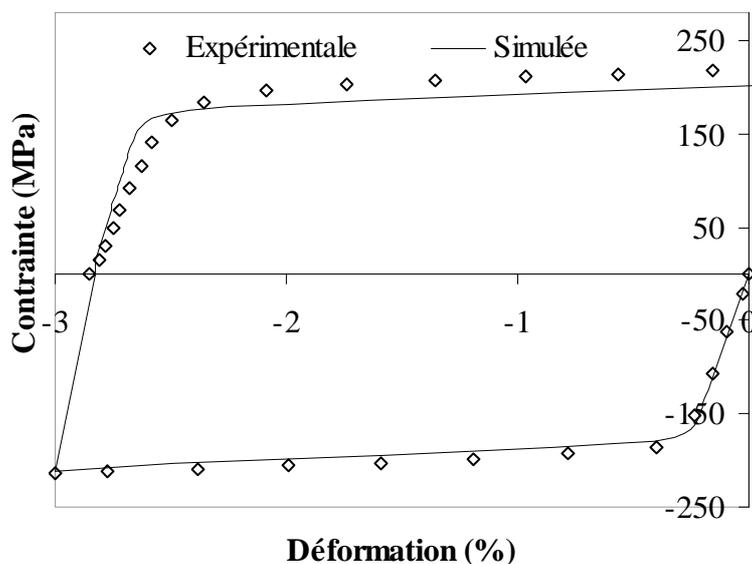


Figure V.3 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées pour un chargement en compression-traction avec le modèle Peeters-SC

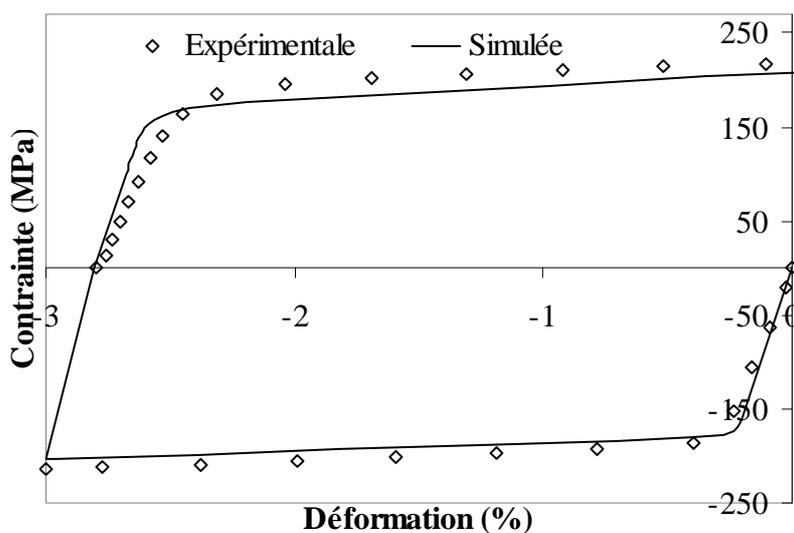


Figure V.4 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées pour un chargement en compression-traction avec le modèle Kr-SC

V.2.2. Acier inoxydable

Pour ce matériau, nous avons procédé à une étude similaire à celle réalisée pour l'aluminium. Dans un premier temps, les paramètres à rentrer dans le modèle sont déterminés par comparaison avec la réponse macroscopique du matériau suite à des chargements monotones. Nos simulations sont ensuite comparées avec les résultats obtenus lors des essais complexes. Pour cet acier, nous avons utilisé les approches autocohérente et de Kröner ainsi que le modèle de Peeters. Pour l'approche autocohérente, nous avons sélectionné 200 orientations représentatives de la texture expérimentale. Ce nombre de cristallites constitue un compromis entre la représentativité des simulations et des temps de calculs (relativement) raisonnables (24 heures pour 3 % de déformation macroscopique).

Les tableaux V.3 et V.4 résument les paramètres utilisés dans le cadre des simulations du comportement mécanique de l'acier 316L lors d'essais complexes. Les constantes d'élasticité sont celles données dans le chapitre II. Une fraction volumique initiale de cellules de 0,8 a été choisie.

Modèle	a^{gg}	a^{gh}	f_{∞}	γ^{par}	k_L	k	$\zeta(\text{MPa}^2)$	$\rho_0(\text{m}^{-2})$	$y_c(\text{m}^{-2})$	$\tau_{c0}(\text{MPa})$
Kr-SC	1	1,1	0,75	3,2	0,1	20	270	10^9	$2,85 \cdot 10^{-9}$	77
SC-SC	1	1.1	0,75	2,5	0,2	20	120	$5 \cdot 10^9$	$2,85 \cdot 10^{-9}$	90

Tableau V.3 : paramètres d'ajustement pour les modèles Kr-SC et SC-SC

f	k	k_f	k_r	k_e	$\tau_{c0}(\text{MPa})$	α	I
0,8	20	$55 \cdot 10^{-5}$	18	$55 \cdot 10^4$	55	0,1	10^{-2}
I^{wd}	I^{wp}	$R(m)$	$R^{wd}(m)$	$R^{wp}(m)$	$R_{ncg}(m)$	$R_{rev}(m)$	$R_2(m)$
$30 \cdot 10^{-2}$	$10 \cdot 10^{-2}$	10^{-9}	10^{-9}	10^{-9}	10^{-9}	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-9}$

Tableau V.4 : paramètres d'ajustement pour le modèle Peeters-SC

Contrairement à l'alliage d'aluminium, les courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{v_a} = f(\sin^2 \psi)$ pour les éprouvettes d'acier présentent, à l'état initial, des niveaux et une évolution de déformations relativement marqués. Ceci indique la présence de contraintes résiduelles non négligeables. Afin de décrire le comportement mécanique à l'échelle du volume diffractant, il paraît utile d'introduire ces contraintes dans les calculs afin d'identifier correctement les paramètres de plasticité. Ces contraintes seront superposées aux contraintes appliquées lors du chargement en traction.

Pour tenir compte partiellement de cet état initial, nous avons supposé que la méthode d'analyse des contraintes par la loi des $\sin^2 \psi$ était valable et que les contraintes analysées par diffraction étaient donc à l'état initial des contraintes macroscopiques. Puis, nous avons considéré que chaque grain (et chaque phase) avait le même tenseur de contraintes correspondant aux contraintes résiduelles initiales mesurées :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11}(311) & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22}(311) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{V.1})$$

Bien qu'imparfaite, cette méthode permet de reproduire les niveaux de déformations initiales déterminées par diffraction.

Les figures V.5, V.6 et V.7 montrent les résultats expérimentaux et prédits lors des essais de traction-compression jusqu'à un taux de prédéformation de 10 %. Les modèles arrivent à reproduire le comportement en traction du matériau. Seule l'approche autocohérente présente des différences pour des taux de déformation totale supérieurs à 8 % : un écart relatif de 9 % est constaté à 10 % de déformation totale.

On constate que le modèle de Peeters est capable de reproduire la réponse macroscopique du matériau dans le cas d'un chargement complexe. Les courbes d'écrouissage du premier et du second chargement sont bien reproduites par ce modèle pour l'ensemble des prédéformations considérées. Par contre, pour les deux autres approches, les simulations présentent des différences pour un taux de prédéformation de 10 %. Le modèle de Kröner arrive à prédire le début du chargement en compression mais il donne un comportement trop rigide pour la partie plastique de la courbe : à la fin de l'essai, un différentiel de 110 MPa est constaté. L'approche autocohérente décrit mal la transition élastoplastique pour ce taux de déformation.

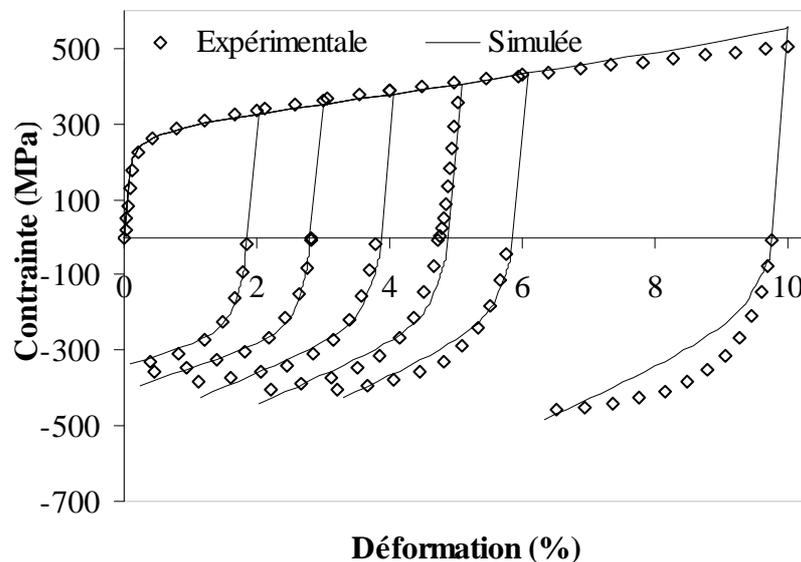


Figure V.5 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées (modèle SC-SC)

Il convient de noter que les approches de Kröner et autocohérente arrivent à reproduire correctement le comportement de l'acier jusqu'à un pourcentage de 6 % et ceci pour nos essais ainsi que pour ceux réalisés par Choteau [Choteau 99] (cf. chapitre II). Cette disparité observée pour des taux de déformation plus élevés met en lumière les lacunes de certaines hypothèses simplificatrices adoptées pour nos approches. Par exemple, nous ne tenons pas compte de l'évolution de la microstructure ainsi que de la dissolution et de la reconstruction de la microstructure de dislocations au cours de l'essai Bauschinger. Dans nos modèles, l'effet Bauschinger est essentiellement piloté par les contraintes internes. Pour des déformations plus importantes, il faudrait prendre en considération, explicitement, ces phénomènes de dissolution au cours du second chargement au travers des matrices non locales. Le modèle de Peeters intègre, au travers de la loi d'évolution des dislocations, ce type d'effet. Ceci peut expliquer pourquoi il donne des résultats plus satisfaisants quelque soit la déformation considérée.

De plus, nous avons supposé une morphologie sphérique (et constante) pour la modélisation de la microstructure. Les résultats du *chapitre II* ont montré l'influence de ce paramètre sur le comportement global du matériau. Il serait alors nécessaire d'avoir des informations sur la microstructure initiale du matériau et de son évolution au cours de l'essai Bauschinger par des observations au MET par exemple.

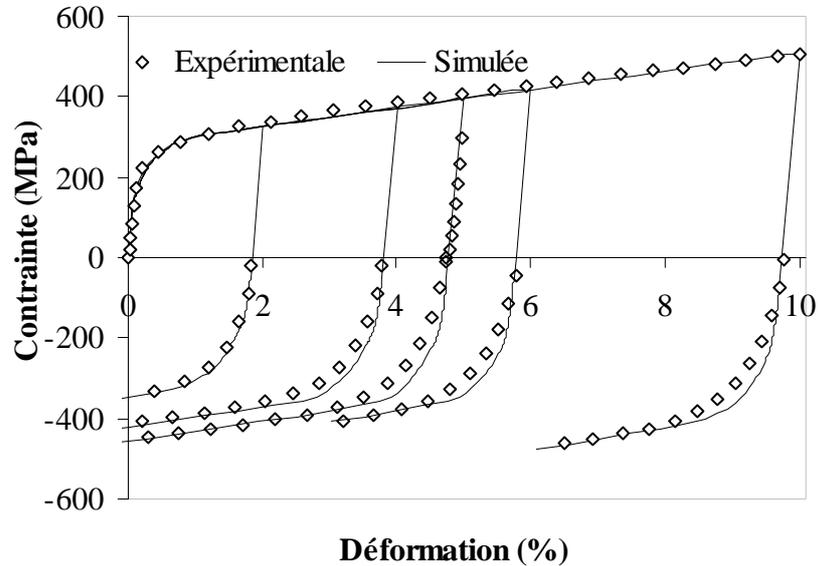


Figure V.6 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées (modèle Kr-SC)

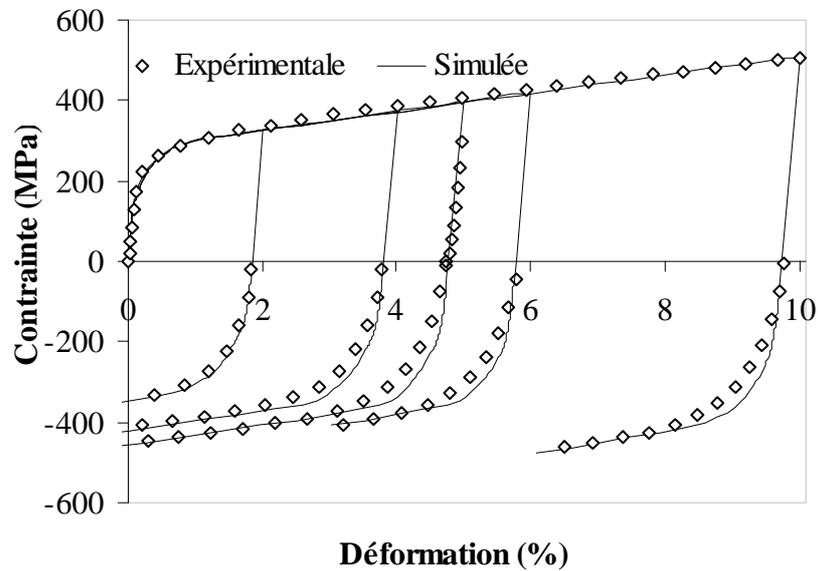


Figure V.7 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées (modèle Peeters-SC)

Les figures V.8 et V.9 montrent les résultats obtenus pour l'essai de compression-traction avec les modèles de Peeters et celui de Kröner. Le premier arrive à reproduire le comportement global du matériau. Par contre, l'approche de Kröner sous-estime le niveau de contrainte au début de la plastification en traction. Il serait nécessaire, ici, de procéder à d'avantage d'essais

mécaniques avec des taux de déformation plus importants pour le second essai pour tirer davantage de conclusions.

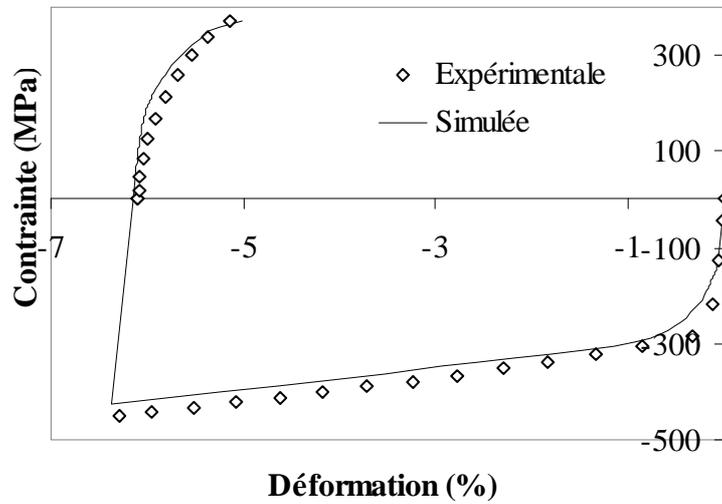


Figure V.8 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentale et simulée en compression-traction (modèle Peeters-SC)

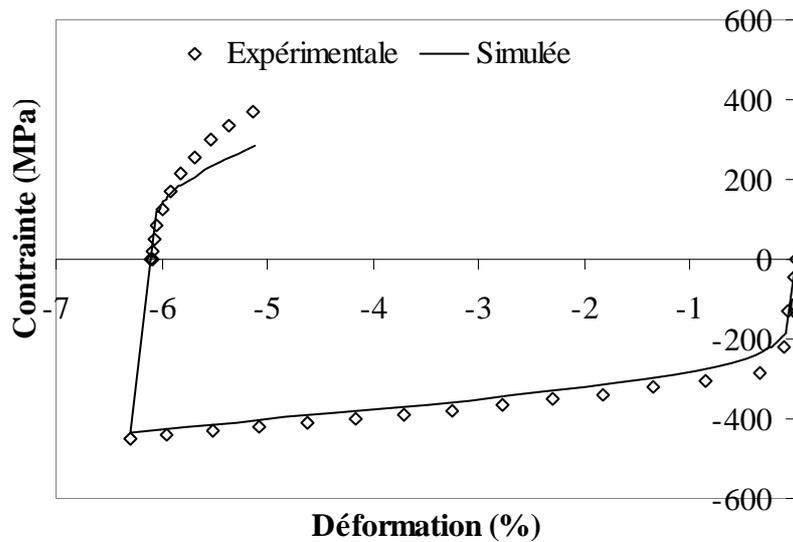


Figure V.9 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentale et simulée en compression-traction (Kr-SC)

V.3. Déformations résiduelles

La section précédente a montré la validité des modèles à l'échelle macroscopique. La comparaison avec les résultats expérimentaux a permis de déterminer les paramètres de nos simulations. L'étape suivante est de valider notre modèle à l'échelle des volumes diffractants. La projection des déformations d'ordre II calculées après la décharge élastique sur les directions de mesure (ϕ, ψ) pour un plan cristallin donné, nous permet alors de simuler les courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$. Les résultats prédits sont ensuite comparés aux mesures

expérimentales afin d'établir leur validité et de discuter et interpréter la distribution des déformations déduites.

Pour cette étude, nous avons décidé d'utiliser le modèle de Kröner. En effet, le modèle autocohérent, du fait de la complexité des équations constitutives de cette approche, ne permet pas l'emploi d'un nombre suffisant de cristallites et représentatif de la texture expérimentale. Une comparaison fiable avec les déformations obtenues à l'échelle du volume diffractant devient alors problématique. Le modèle de Kröner a montré (cf. *chapitre II* et *annexe III*) qu'on pouvait obtenir des résultats exploitables et cohérents avec la réalité physique. De plus, il autorise l'emploi d'un nombre plus important de cristallites permettant une comparaison plus fiable avec la diffraction.

Pour le modèle de Peeters, c'est le nombre de paramètres initiaux difficilement identifiables qui pose problème. En effet, des études préliminaires ont montré que plusieurs jeux de paramètres permettent de reproduire les mêmes réponses à l'échelle macroscopique avec des résultats différents à l'échelle du volume diffractant. Il faudrait soit, augmenter le nombre d'essais mécaniques pour identifier de manière unique les paramètres du modèle soit, utiliser simultanément l'intégralité de nos résultats expérimentaux pour l'identification avec une procédure d'optimisation. Dans le cadre d'une première validation des outils numériques développés dans ce travail avec la diffraction, nous nous sommes donc focalisé sur l'approche de Kröner.

Le modèle polycristallin est capable de calculer les déformations $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ dans le matériau après décharge par une opération de moyenne des déformations élastiques appartenant à l'orientation ψ considérée. Une cristallite est en position de diffraction quand la normale au plan (hkl) étudié est colinéaire au vecteur x_{3L} (cf. *chapitre III*). Afin de sélectionner les cristallites en position de diffraction au sein d'un matériau modèle comprenant N cristallites, nous utilisons l'angle Λ entre la normale au plan diffractant et la direction de mesure. Cet angle se calcule à partir du produit scalaire $\vec{n}_{\phi\psi} \cdot \vec{x}_{3L}$. Si la normale se trouve dans un cône défini par la direction de mesure et par l'angle Λ_{\max} alors la cristallite diffracte. Pour nos calculs, nous nous sommes fixés un angle Λ_{\max} égal à 3° . Physiquement, cet angle peut être interprété comme la divergence du faisceau des rayons X. Cette valeur est proche de la valeur expérimentale de la divergence et permet d'obtenir un nombre suffisant de cristallites diffractant pour les plans à faible multiplicité si le nombre de cristallites est assez élevé.

Dans le cadre de nos simulations, nous avons utilisé des pseudo-matériaux comportant 1000 cristaux. Pour obtenir un nombre de cristallites en position de diffraction statistiquement fiable, nous avons déterminé, à partir de la Fonction de Distribution des Orientations expérimentale, les cristallites participant au volume diffractant pour chaque plan et chaque direction de mesure. Parmi ces cristallites, nous avons choisi un nombre suffisant pour avoir toujours au moins 20 cristallites en position de diffraction pour chaque direction de mesure. Ces cristallites sont alors noyées dans un ensemble de grains représentatif du matériau global.

V.3.1. Aluminium

La figure V.10 présente l'évolution simulée des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ dans la direction longitudinale pour les plans (311) et (422) pour des déformations totales de 2 et 5 % après un chargement en traction. Ces figures permettent de comparer l'allure, l'amplitude des oscillations et les pentes calculées et mesurées. Chaque point représente la moyenne des déformations d'ordre II pour une direction de mesure donnée.

On constate une correspondance entre l'expérience et la simulation. Les valeurs de déformations sont du même ordre de grandeur. En revanche, les courbes expérimentales présentent des oscillations plus marquées que les courbes simulées. Dans les deux cas, les pentes ont sensiblement la même valeur. Les déformations résiduelles engendrées par la traction restent faibles. Le modèle capture le niveau et le signe des déformations résiduelles expérimentales qui sont différents pour les deux plans présentés.

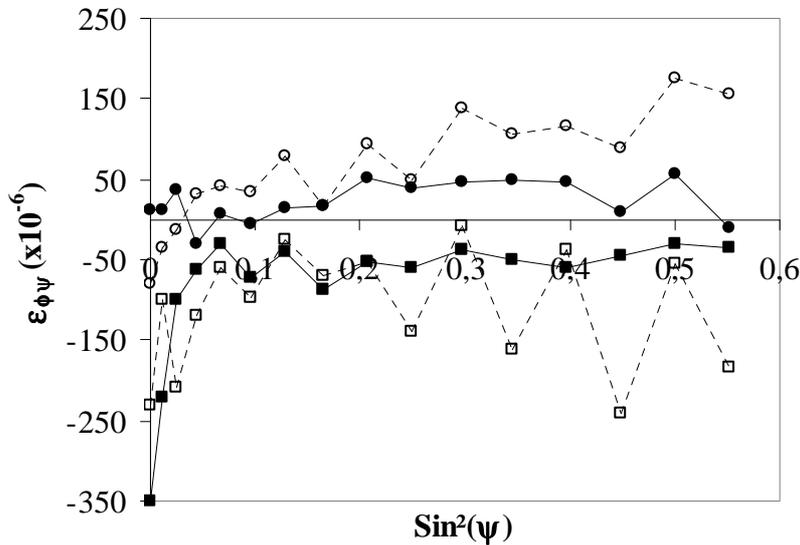


Figure V.10 : comparaison des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ mesurées et calculées dans la direction longitudinale ($\phi = 0^\circ$) pour le plan (311) et (422) après le premier chargement
 ○ : 2 % de déformation – expérience ; ● : 2 % de déformation – simulation (plan (311))
 □ : 5 % de déformation – expérience ; ■ 5 % de déformation – simulation (plan (422))

Les écarts observés peuvent être expliqués par plusieurs raisons :

✓ *Présence de la surface libre*

La pénétration des RX est généralement très faible dans nos matériaux (quelques micromètres). Pour satisfaire aux conditions aux limites, la composante $\sigma_{33} = 0$ doit être nulle à la surface libre du matériau (la direction 3 étant la normale à la surface de la pièce).

Si les gradients de surface $\frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_1}, \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_2}$ sont négligeables, alors, par suite des

équations d'équilibre $\sigma_{ij,j} = 0$, le gradient $\frac{\partial \sigma_{33}}{\partial x_3}$ doit être nul. Dans ce cas de figure, on

a un état biaxial de contraintes. En revanche, le modèle suppose un milieu infini et

donc un champ de contrainte triaxial. A la surface de la matière, la présence de la surface libre donne lieu à des phénomènes de relaxation qui diminuent les contraintes résiduelles et provoquent des interactions différentes entre les grains. Des mesures par diffraction des neutrons permettraient d'avoir accès aux contraintes en profondeur et permettraient d'éviter ces inconvénients. De plus, le fait de déterminer des contraintes résiduelles peut accentuer les écarts. En effet, on suppose dans ce cas une décharge élastique suite à la sollicitation, ce qui n'est pas toujours le cas.

✓ *Simplifications de la description de l'écrouissage dans le modèle*

La détermination des paramètres d'écrouissage s'effectue par simple comparaison avec les courbes de traction. On a supposé, pour limiter le nombre d'inconnues, que les termes d'écrouissage latent sont égaux aux termes d'auto-écrouissage. Ces valeurs ne reposent pas sur des observations expérimentales du comportement réel du matériau. Le fait de descendre d'une échelle dans la description complique la détermination des différents paramètres d'écrouissage.

✓ *Description des orientations cristallographiques*

La discrétisation de la distribution continue des orientations caractérisant le matériau réel en un nombre de grains fini et limité, nécessaire à la modélisation ne permet pas une description suffisante de la texture réelle.

La *figure V.11* montre un exemple de courbes obtenues après le deuxième chargement en compression pour le plan (311) après une prédéformation à 5 %. De manière similaire au cas précédent, les simulations permettent de retrouver la tendance observée expérimentalement. Néanmoins, on constate que les simulations ne décrivent pas quantitativement les ondulations expérimentales pour les raisons invoquées plus haut.

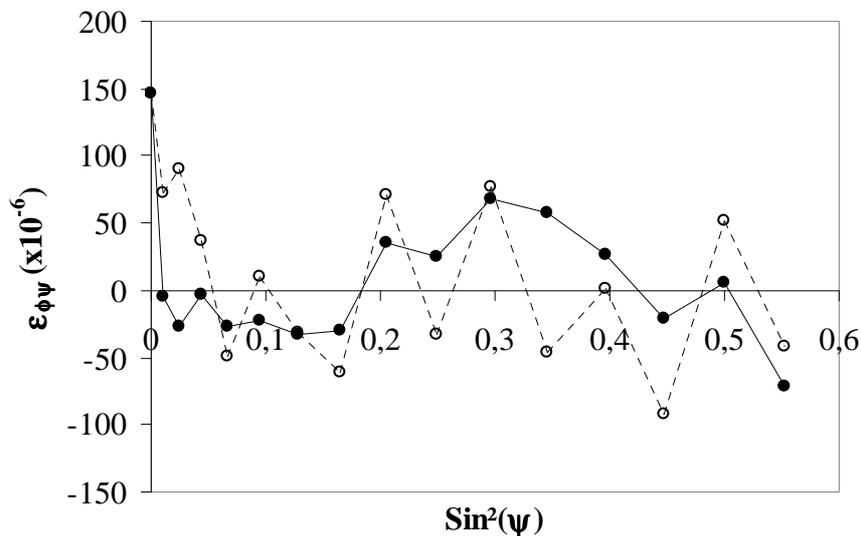


Figure V.11 : comparaison des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ mesurée et calculée dans la direction longitudinale ($\phi = 0^\circ$) pour le plan (311) après le deuxième chargement pour une prédéformation de 5 %
 \circ : expérience ; \bullet : simulation

A partir des pentes des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$, nous avons calculé une estimation de la contrainte apparente pour le matériau modèle en fonction de la déformation totale. Le *tableau V.5* montre l'évolution de cette grandeur pour deux plans dans la direction longitudinale ($\phi = 0^\circ$).

Plan (222)						
Premier chargement	Taux de déformation (%)	2 %	3 %	4 %	5 %	-3 %
	Contrainte apparente (MPa)	11	17	20	25	-18
Second chargement	Taux de déformation (%)	-3 %				
	Contrainte apparente (MPa)	-10	-9	-10	-10	13
Plan (422)						
Premier chargement	Taux de déformation (%)	2 %	3 %	4 %	5 %	-3 %
	Contrainte apparente (MPa)	10	13	14	18	-13
Second chargement	Taux de déformation (%)	-3 %				
	Contrainte apparente (MPa)	-15	-5	-9	-8	15

Tableau V.5 : estimation de la contrainte apparente dans le matériau modèle en fonction de la déformation totale pour les plans (222) et (422) dans la direction longitudinale

Il est intéressant de constater que le modèle permet de retrouver les résultats expérimentaux observés au *chapitre IV* :

- Avec le même jeu de paramètres défini dans la première section, le modèle arrive à prédire un comportement en traction pour les plans étudiés après un premier chargement en traction.
- Pour une première sollicitation en compression, des contraintes négatives sont trouvées conformément aux résultats expérimentaux.
- Le modèle arrive également à reproduire le comportement durant le second chargement avec le changement de signe de la contrainte apparente.
- Il est à noter également que nos simulations reproduisent correctement le comportement mécanique observé dans la direction transverse. Des contraintes de compression sont prédites suite à un chargement en traction. Ensuite, un état de traction est obtenu pour le second chargement. Un comportement opposé est constaté pour l'essai de compression-traction conformément aux résultats du *chapitre IV*.

V.3.2. Acier inoxydable

Pour ce matériau, nous avons procédé de manière similaire à l'étude sur l'alliage d'aluminium.

Contrairement à l'aluminium, les simulations obtenues avec le modèle de Kröner ne permettent pas de retrouver l'ensemble des résultats obtenus expérimentalement par diffraction X.

Dans la direction transverse, nous retrouverons de manière qualitative le comportement expérimental observé avec des niveaux de contraintes et d'amplitude similaires à ceux obtenus par diffraction des rayons X. La *figure V.12* montre un exemple de courbes

$\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ obtenues dans cette direction à la fin de l'essai complexe pour un préchargement en traction de 4 %.

Par contre, en ce qui concerne les simulations dans la direction longitudinale, les résultats numériques obtenus sont différents de ceux déterminés dans le *chapitre IV*. La *figure V.13* présente les courbes prédites par le modèle dans la direction longitudinale pour un chargement en traction à différents taux de déformation totale. Si on compare aux résultats expérimentaux (cf. *figure IV.20*), les différences sont très marquées en terme de niveaux de déformations résiduelles et de pente. Les courbes simulées présentent des ondulations causées par les hétérogénéités de déformations par orientation cristallographique. Celles-ci s'accroissent logiquement avec la déformation plastique appliquée. Pour le second chargement, la diffraction donne des contraintes apparentes en compression (de l'ordre de -500 MPa) alors que les simulations prédisent des contraintes apparentes plus faibles que le premier essai mais toujours en traction.

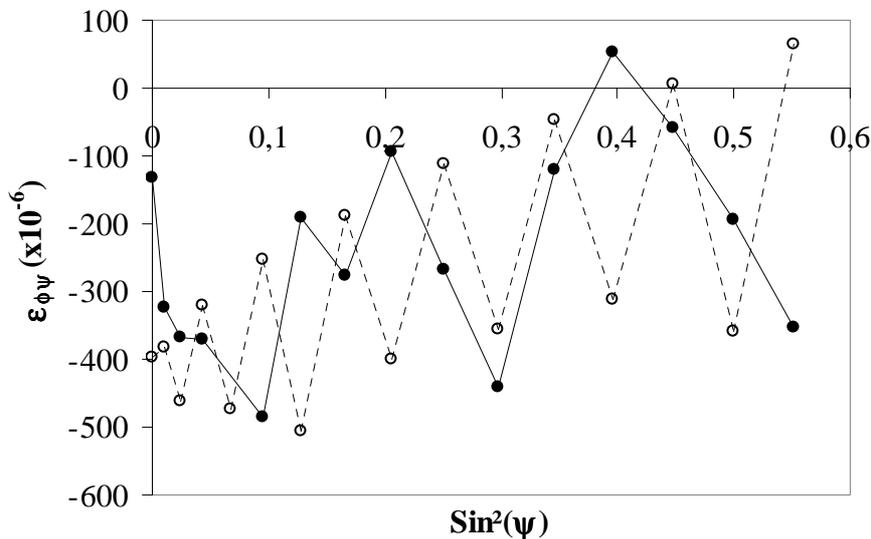


Figure V.12 : comparaison des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ mesurée et calculée dans la direction transversale ($\phi = 90^\circ$) pour le plan (220) après le deuxième chargement pour une prédéformation de 4 %

\circ : expérience ; \bullet : simulation

D'un point de vue expérimental, les niveaux de déformations résiduelles ainsi que les pentes des courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ sont importants suite à un simple essai de traction jusqu'à 10 % de déformation. Pour les matériaux cubiques, la présence et le développement des déformations d'ordre II d'origine plastique influencent l'amplitude des oscillations avec également une évolution de la pente de ces courbes. Le niveau des contraintes apparentes reste néanmoins élevé par rapport à ce que l'on peut trouver dans la bibliographie. Par exemple, Krier [Krier 93] a étudié par diffraction X le comportement plastique en traction uniaxial d'un acier doux IFHR 400 avec une texture initiale de laminage. Pour 10 % de déformation, il a trouvé des contraintes apparentes de -257 MPa pour le plan (310) et proche de 0 MPa pour le plan (211) dans la direction de laminage.

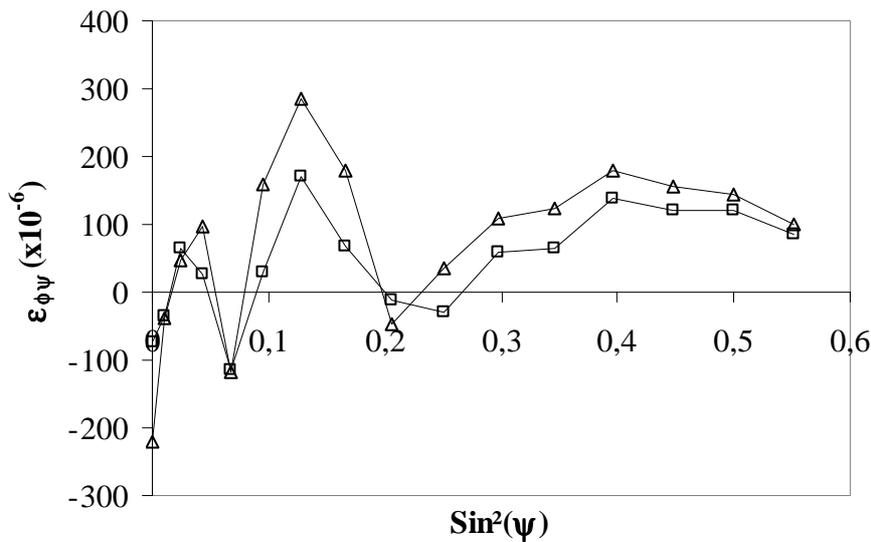


Figure V.13 : courbes $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{v_d} = f(\sin^2 \psi)$ calculées dans la direction longitudinale ($\phi = 0^\circ$) pour le plan (220) après le premier chargement déformation de 2 () et 10 % (Δ)

Il serait donc utile, pour valider la cohérence de nos résultats expérimentaux de vérifier un certain nombre de points :

- Dans le cadre de notre étude, nous n'avons pu étudier qu'un seul plan de diffraction contrairement à l'aluminium. Il serait nécessaire dans un premier temps, d'analyser de nouveau nos échantillons avec d'autres longueurs d'onde pour vérifier si le comportement est le même.
- Comme la diffraction des rayons X est une technique de surface, il serait ensuite utile de vérifier que les résultats obtenus sont représentatifs du comportement au cœur de l'échantillon en terme de déformations élastiques résiduelles mais également de texture cristallographique. Un effet de surface pourrait conduire à ce type de comportement observé sur les éprouvettes d'acier. Mais il est étonnant qu'il ne se dissipe pas avec la déformation plastique qui a tendance à homogénéiser le comportement suivant l'épaisseur en terme de déformation. Par contre s'il existe un gradient de texture initiale, il devrait être le même vu les taux de déformation utilisés. Une modification de texture initiale induira alors au niveau des modèles de fortes différences en terme de résultats obtenus à l'échelle du volume diffractant.
- En terme de modélisation, bien que l'approche utilisée ait été validée par un certain nombre de résultats expérimentaux, il pourrait être intéressant de vérifier que notre modèle arrive à reproduire les résultats obtenus par Krier sur un acier doux dans le cas d'un chargement simple. Une optimisation plus poussée du jeu de paramètres utilisé constituerait une voie d'investigation utile (coefficient d'érouissage latent, morphologie...). La confrontation avec les autres approches pour les deux matériaux pourra également apporter des éléments de réponse.

Néanmoins, il convient de rappeler les différentes validations effectuées sur le modèle de Kröner. En effet, ce modèle a permis de prédire un certain nombre de résultats expérimentaux.

Il a pu reproduire, par exemple, le comportement de monocristaux lors de chargements simple et complexe. De plus, cette approche a expliqué correctement le comportement de l'alliage d'aluminium 6060 à l'échelle macroscopique et au niveau du volume diffractant pour l'ensemble des plans et des directions analysés.

V.4. Conclusion

Dans le cadre de ce travail, une première confrontation entre les modèles et des résultats expérimentaux a été effectuée. Nous avons étudié les déformations résiduelles dans deux matériaux cubiques, l'acier 316L et l'alliage d'aluminium 6060 après des essais complexes en traction-compression. Ce chapitre a montré que les modèles développés permettent d'expliquer un certain nombre de phénomènes observés expérimentalement aussi bien à l'échelle macroscopique (essai mécanique) qu'à l'échelle mésoscopique (diffraction des rayons X).

- Sur l'acier, les approches autocohérente et de Kröner reproduisent le comportement macroscopique du matériau jusqu'à des taux de déformation de 6 %. Au-delà, une certaine différence est présente, due aux hypothèses simplificatrices utilisées. Le modèle de Peeters permet une meilleure description de la réponse du polycristal quelque soit le taux de déformation considéré. Ceci peut être attribué au fait que cette approche tient mieux compte, lors du changement de trajet de chargement, des phénomènes d'annihilation et de restructuration de la microstructure au niveau des lois d'évolution de la densité de dislocations. Contrairement à l'aluminium, des résultats contradictoires ont été obtenus pour les déformations résiduelles. Des essais complémentaires doivent être effectués pour éclaircir ce problème. Cependant, les avancés accomplies permettent la mise en place d'un travail expérimental et de calcul prometteurs et prenant en considération des phénomènes peu pris en considération jusqu'au présent.
- Concernant l'aluminium, les trois modèles utilisés (Peeters, Kröner, autocohérent) permettent de reproduire l'intégralité des essais mécaniques effectués durant ce travail. A l'échelle du volume diffractant, les simulations numériques effectuées avec le modèle de Kröner sont en bon accord avec les données expérimentales obtenues par diffraction. Plus précisément, le modèle arrive à reproduire le comportement pour les trois plans cristallographiques étudiés et pour les deux directions d'analyse.

Conclusions générales et perspectives

Les approches de transitions d'échelle (autocoherente, Kröner, Mori-Tanaka), ont permis une meilleure représentation du comportement des matériaux métalliques hétérogènes et l'obtention de résultats satisfaisants tant au niveau macroscopique que mésoscopique ou microscopique. De plus, ils présentent l'avantage d'être des approches prédictives contrairement aux formulations phénoménologiques.

Notre travail avait pour objectif d'étudier l'influence des hétérogénéités intragranulaires (structure de dislocations) sur le comportement mécanique, à différentes échelles, sous chargements monotones et complexes. D'après cette étude, il ressort que la microstructure de dislocations introduit une anisotropie forte pour les polycristaux et elle apparaît comme un facteur essentiel pour une meilleure compréhension du comportement d'un matériau ayant subi notamment un chargement complexe. Cette microstructure est absente pour un matériau vierge ou recuit. Elle apparaît au début de la déformation plastique en faisant du grain, un milieu biphasé constitué d'une phase dure (paroi) de forte densité de dislocations et une phase molle (cellule) de faible densité de dislocations. Le milieu biphasé engendré est caractérisé par une forme et une orientation qui résultent d'un effet global du chargement sur le polycristal. Lorsque la déformation plastique augmente, les dislocations se déplacent vers les parois en traversant les cellules. La déformation plastique dans les cellules induit alors un durcissement des parois voisines. Ce phénomène est connu sous le nom ***d'écrouissage non-local***. La microstructure de dislocations paraît alors importante pour toute modélisation du comportement mécanique des matériaux métalliques. Il est intéressant de ne plus considérer le grain comme un milieu uniforme et de choisir comme échelle de départ la microstructure de dislocations. Nous avons proposé des modélisations du comportement des métaux soumis à des chargements diverses qui tiennent compte de la microstructure intragranulaire de dislocations.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés plus spécifiquement à des matériaux de structure cubique. Notre attention s'est portée sur le rôle et l'influence des différentes sources d'hétérogénéités intragranulaires dans ces matériaux.

Dans un premier temps, nous avons développé trois modèles avec une double transition d'échelles élastoplastiques qui tiennent compte de la morphologie des cellules de dislocations. Le grain a été considéré comme un matériau biphasé constitué d'une phase dure (les parois) et d'une phase molle (l'intérieure des cellules). Les matrices d'écrouissage non-local ont été introduites afin de prendre en compte les interactions cellules-parois. De plus, la topologie (forme, orientation) des cellules a été prise en considération de manière explicite. Ainsi, nous avons déterminé le comportement des cellules, des parois et du grain par une première transition d'échelle (Kröner, Autocoherente, Mori-Tanaka) et celui du polycristal par une deuxième transition (au travers du schéma autocoherent).

Dans un deuxième temps, nous avons développé un autre type d'approche qui utilise comme variable interne la densité de dislocations. Elle est inspirée des travaux de Peeters et al. [Peeters et al. 02]. Cette approche a permis de modéliser très finement les phénomènes physiques de la plasticité en prenant en compte la description et l'organisation des dislocations. L'écrouissage du matériau et la contrainte d'écoulement sont donnés en fonction de variables internes liées à la densité totale de dislocations. Celle-ci joue un rôle principal dans la gestion du stockage et de l'annihilation des dislocations durant la déformation plastique à travers trois termes : la densité de dislocations des cellules, la densité de dislocations immobiles stockées dans les murs et la densité de dislocations polarisées des murs.

Les techniques expérimentales utilisées ici sont les essais mécaniques et la diffraction des rayons X (DRX). La première a permis d'étudier nos matériaux sous les différentes sollicitations suivantes : traction, compression et trajet Bauschinger (traction-compression). Nous avons effectué des essais mécaniques à différents taux de prédéformation sur un alliage d'aluminium 6060 et sur un acier austénitique AISI 316L. La DRX permet de déterminer les contraintes résiduelles à une échelle intermédiaire entre les niveaux mésoscopique et macroscopique. Des mesures ont été réalisées pour suivre l'évolution des contraintes résiduelles en fonction du chargement. De plus, cette technique nous a donné accès à des informations sur la texture du matériau permettant ainsi, en alimentant les modèles numériques, d'avoir une prédiction plus réaliste du comportement du polycristal.

La validation de nos modèles s'est déroulée en deux temps. La première étape a consisté à valider les modèles avec les résultats expérimentaux issus de la bibliographie. Nous avons reproduit le comportement mécanique de monocristaux et de polycristaux cubiques ayant subi des chargements monotones et complexes. Ainsi, nous avons validé les approches à l'échelle mésoscopique avec la simulation de cristallites d'orientations cristallographiques différentes sous diverses sollicitations : traction, cisaillement et complexe. L'écrouissage du polycristal avec un trajet de type Bauschinger a été également simulé. Une validation avec la diffraction des neutrons a également été effectuée.

La deuxième étape a consisté à comparer les simulations obtenues à partir de nos modèles avec nos propres résultats expérimentaux (essais mécaniques et DRX). Un bon accord a été observé pour l'alliage d'aluminium aux différentes échelles d'observation. Le modèle de Kröner a permis de reproduire le comportement du matériau à l'échelle macroscopique pour l'ensemble des essais mécaniques. De plus, cette approche explique l'ensemble des résultats de diffraction pour les trois plans étudiés et pour les deux directions d'analyse. Pour l'acier, un travail supplémentaire d'investigation semble nécessaire pour pouvoir faire une comparaison fiable avec les données expérimentales à l'échelle du volume diffractant. Ce matériau présente un comportement mécanique à l'échelle du volume diffractant différent de l'Aluminium avec des niveaux et des évolutions de déformations résiduelles marquées.

Durant ce travail, nous avons réalisé les points suivants :

➤ Nous avons développé des modèles avec une double transition d'échelles en utilisant des lois de localisation (Kröner, autocohérent, Mori-Tanaka) plus réalistes. Avec le modèle de Kröner, nous avons présenté les phénomènes physiques d'une façon simplifiée et obtenu de bons résultats au niveau micro, méso et macroscopiques. Le modèle autocohérent permet de traduire la plasticité avec plus de réalité en tenant compte des interactions entre les phases d'une part et les interactions entre les grains d'une autre part. Le modèle de Mori-Tanaka donne des résultats satisfaisants en considérant une phase minoritaire (paroi) noyée dans une matrice (cellule). L'ensemble de ces modèles permettent de mieux décrire l'écrouissage intracristallin de matériaux cubiques.

➤ Nous avons réalisé un couplage entre les lois d'évolution des dislocations et le modèle autocohérent. Ce genre de couplage tient compte de l'évolution de la microstructure de dislocation et de l'interaction entre les grains.

➤ Nous avons mis en place un travail expérimental de mettre en lumière un certain nombre de phénomènes d'écrouissage des métaux.

Nous disposons maintenant d'outils numériques et expérimentaux permettant une analyse plus fine du comportement plastique des matériaux métalliques sous sollicitations mécaniques. Les résultats présentés en trajets monotones et complexes et en DRX se révèlent très encourageants.

Cette thèse ouvre la voie à plusieurs développements possibles :

➤ Tenir compte des précipités qui font partie des hétérogénéités intragranulaires. Ceci peut se faire en considérant le grain comme un milieu polyphasé. Pour cela, il faut trouver un moyen de traduire de manière réaliste les interactions cellules-parois-inclusions pour une implémentation dans nos modèles.

➤ Le modèle de Peeters-SC possède beaucoup de paramètres à identifier. Il faudrait donc essayer de le simplifier pour qu'il soit plus facilement utilisable. L'utilisation de procédures de minimisation semble également nécessaire pour une détermination moins empirique des paramètres des simulations.

➤ Étendre les approches à double transition d'échelles sur les matériaux hexagonaux. Il serait intéressant d'étudier ce type de matériau qui présente la particularité d'avoir une anisotropie plastique forte, caractérisée par une grande variété de modes de déformation possibles. Ce développement nécessitera de mieux appréhender les mécanismes de déformations, les interactions entre systèmes de déformation (maclage-glisement) et de mieux comprendre la constitution de la microstructure de dislocations.

➤ Il serait intéressant de tenir compte de l'évolution de la morphologie de la structure de dislocations au cours de la déformation plastique.

➤ Avec les moyens expérimentaux du laboratoire GeM-EMM, nous pourrions développer un outil numérique et expérimental afin de déterminer les paramètres d'écrouissages. L'analyse des raies de diffraction peut donner accès à l'évolution de la densité de dislocations et la déformation des domaines diffractants.

➤ Des observations expérimentales à l'aide de la microscopie électronique permettraient de mieux décrire le mouvement des dislocations afin de mieux les intégrer dans les modèles.

➤ La diffraction constitue un outil de validation des modèles très intéressants. Ce travail a montré les limites d'une analyse après les essais. Il serait intéressant de développer des analyses in-situ lors des essais mécaniques pour une analyse plus fiable et plus directe.

➤ La diffraction des rayons X permet seulement une analyse surfacique de l'état mécanique d'un matériau. Les données ne sont pas toujours représentatives du comportement en cœur de l'échantillon. Cette technique est de plus limitée par le nombre de plans cristallographiques qu'on peut étudier ou par des caractéristiques expérimentales (texture, taille de grains). Il serait donc intéressant pour obtenir des données plus précises de développer des analyses en utilisant la diffraction des neutrons. Nous pourrions obtenir des informations en volume sur un grand nombre de plans différents. De manière similaire, de nouvelles techniques sur grands instruments comme la microdiffraction ouvre de nouvelles perspectives extrêmement intéressantes pour l'étude mécanique des hétérogénéités intragranulaires.

Références

A

[Ambrosi 74]

P. Ambrosi, E. Göttler, C. Schwink
Scripta Metall., Vol. 8, pp. 1093-1097, 1974.

[Aubert 98]

I. Aubert
Thèse de l'université de Metz, 1998.

B

[Baczmanski et al. 94]

A. Baczmanski, K. Wierzbanski, P. Lipinski, R. B. Helmholtz, G. Ekambaranathan, B. Pathiraj
Phil. Mag. A, Vol. 69, pp. 437-449, 1994.

[Baczmański et al. 93]

A. Baczmański, K. Wierzbanski, W.G. Haije, R. Helmholtz, G. Ekambaranathan & B. Pathiraj
Cryst. Res. Technol., Vol. 28, pp. 229-243, 1993.

[Bay et al. 89]

B. Bay, N. Hansen, D. Kuhlmann-Wilsdorf
Mat. Sci. Eng., Vol. 113A, pp. 385-397, 1989.

[Bajo et Cumbreira 97]

F. S. Bajo, F. L. Cumbreira
J. Appl. Cryst., Vol. 30, pp. 427-430, 1997.

[Beaudoin 95]

A. J. Beaudoin, P. R. Dawson, K. K. Mathur, U. F. Kocks
Int. J. Plasticity, Vol. 11, pp. 501-521, 1995.

[Becker 91]

R. Becker
Acta Metall. Mater., Vol. 39, pp. 1211-1230, 1991.

[Ben Zeneb et al. 01]

T. Ben Zeneb, S. Arbab Chirani, M. Berveiller
XV^{ème} Congrès Français de Mécanique, Nancy, 2001.

[Beradai et al. 87]

C. Beradai, M. Berveiller, P. Lipinski
Int. J. Plast., Vol. 3, pp. 143-162, 1987.

[Berchi 06]

T. Berchi
Thèse de l'université de Nantes, 2006.

[Bertaut 50]

E. F. Bertaut
Acta Cryst., Vol. 3, pp. 14-18, 1950.

[Berveiller et Zaoui 79]

M. Berveiller, A. Zaoui
J. Mech. Phys. Solids, Vol. 26, pp. 325-344, 1979.

[Beyerlein et Tomé 07]

I. J. Beyerlein, C. N. Tomé
Inter. J. Plasticity, Vol. 23, pp. 640-664, 2007.

[Bonfoh et Lipinski 07]

N. Bonfoh, P. Lipinski
Int. J. Mech. Sci., Vol. 49, pp. 151-160, 2007.

[Bonfoh et al. 03]

N. Bonfoh, A. Carmasol, P. Lipinski
Int. J. Plasticity, Vol. 19, pp. 1167-1193, 2003.

[Bornert et al. 01]

M. Bornert, T. Bretheau, P. Gilormini
Hermes Sci. Publication, T1, 2001.

[Bouvier et al. 03]

S. Bouvier, C. Teodosiu, H. Haddadi, V. Tabacaru
J. Phys. IV France, Vol. 105, pp. 215-222, 2003.

[Budianski et Wu 62]

B. Budianski, T.T. Wu
Trans. of the ASME. pp. 1175-1185, 1962.

[Bunge 82]

H.G. Bunge
Quantitative Texture Analysis. Ed. H.J. Bunge et C. Esling, DGM-SFM, 1982

[Burger et V Cittert 32]

H. C. Burger, P. H. Van Cittert
Phys., Vol. 79, pp. 722-730, 1932.

T

- [Ceretti 04] M. Ceretti
Rapport de HDR, Paris Sud, 2004.
- [Choteau et al. 05] M. Choteau, P. Quaegebeur, S. Degallaix
Mech. Mater., Vol. 37, pp. 1143-1152, 2005.
- [Choteau 99] M. Choteau
Thèse de l'université de Lille, 1999.
- [Clausen et al.03] B. Clausen, T. Leffers, T. Lorentzen
Acta Mater., Vol. 51, pp. 6181-6188, 2003.
- [Clausen et al. 98] B. Clausen, T. Lorentzen et T. Leffers
Acta. Mater. Vol. 46, pp. 3087-3098, 1998.
- [Clausen et Lorentzen 97] B. Clausen, T. Lorentzen
Meta. Mat. Transactions A. Vol. 28 A, pp. 2537-2541,
1997.
- [Clavel et Feaugas 94] M. Clavel, X. Feaugas
4th Inter. Conf., SF2M, pp. 17-30, 1994.
- [Clavel et al. 89] M. Clavel, P. Pilvin, R. Rahouadj
Compte-rendu Acad. Sci. Paris, série II, Métall., 309, pp.
689-694, 1989.
- [Collard et al 08] C. Collard, T. Ben Zineb, E. Patoor, M. Ouadi Ben Salah
Mater. Sci. Eng. A, Vol. 481, pp. 366-370, 2008.
- [Cullity 56] B.D. Cullity
Elements of X-Ray Diffraction, 1956

D

- [Dakhlaoui 06] R. Dakhlaoui
Thèse de l'ENSAM de Paris, 2006.
- [Dasgupta 00] P. Dasgupta
Fizika A, Vol. 9, pp. 61-66, 2000.
- [David 86] W. I. F. David
J. Appl. Cryst. Vol. 19, pp. 63-64, 1986.
- [David et al. 97] F. David, I. Aubert, X. Lemoine, M. Berveiller
Comp. Mat. Sc., Vol. 9, pp. 188-198, 1997.
- [Dawson et al. 03] P. Dawson, S. MacEwen, P. Wu
Inter. Mater. Review, Vol. 48(2), pp. 86-122, 2003.
- [Delaire et al. 00] F. Delaire, J. L. Raphanel, C. Rey
Acta Mater., Vol. 48, pp. 1075-1087, 2000.
- [Derrien 95] K. Derrien
Thèse de l'ENSAM de Paris, 1995.
- [Deve et al. 88] H. Deve, S. Harren, C. McCullough, R. J. Asaro
Acta Met. Vol. 36, pp. 341-365, 1988.
- [Dionnet et al. 99] B. Dionnet, M. François, J.M. Sprauel, E. Nardou
J. Appl. Cryst., Vol. 32, pp. 883-891, 1999.
- [Doong et al. 90] S. H. Doong, D. F. Socie, I. M. Robertson
J. Eng. Mate. Tech., Vol. 112, pp. 456-464, 1990.
- [Doquet 93] V. Doquet
Acta Metall., Vol. 41, pp. 2451-2459, 1993.
- [Doquet et Pineau 90] V. Doquet, A. Pineau
Scripta Metall. Mater., Vol. 24, pp. 433-438, 1990.

[Dymeck et Blicharski 84]

S.Dymeck, M. R. Blicharski
Scripta Met., Vol. 18, pp. 99-104, 1984.

Æ

[Erieau et Rey 04]

P. Erieau, C. Rey
Int. J. Plasticity, Vol. 20, pp. 1763-1788, 2004.

[Ergun 68]

S. Ergun
J. Appl. Phys. Vol. 1, pp. 19-23, 1968.

[Eshelby 57]

J.D. Eshelby
Proc. R. Soc. Lond. Vol. A 241, pp. 376-396, 1957.

[Essmann et Mughrabi 79]

U. Essmann, H. Mughrabi
Phil. Mag. Vol. 40, pp. 731-756, 1979.

[Estrin et al. 98]

Y. Estrin, L. S. Toth, A. Molinary, Y. Brechet
Acta Mater. Vol. 46, pp. 5509-5522, 1998.

[Evenschor et Hauk 75]

P. D. Evenschor, V. Hauk
Z. Metallked, Vol. 66, pp. 167-168, 1975.

F

[Feugas et Haddou 03]

X. Feugas, X. Haddou
Metall. Mater. Trans. A, Vol. 34, pp. 2329-2340, 2003.

[Feugas et Gaudin 01]

X. Feugas, C. Gaudin
Mater. Sci. Eng., Vol. A309-310, pp. 382-385, 2001.

[Feugas 99]

X. Feugas
Acta Mat., Vol. 47, pp. 3617-3632, 1999.

[Fernandes et Schmitt 83]

J. V. Fernandes, J. H. Schmitt
Phil. Mag., Vol. 48A, pp. 841-870, 1983.

[Ferreira 04]

C. Ferreira
Thèse de l'université de Nantes, 2004.

[Franciosi et al. 80]

P. Franciosi, M. Berveiller, A. Zaoui
Acta Metall., Vol. 28, pp. 273-283, 1980.

[Franciosi 85]

P. Franciosi
Acta Metall., Vol. 33, pp. 1601-1612, 1985.

[François et al. 95]

M. François, B. Dionnet, J.M. Sprauel, E. Nardou
J. Appl. Cryst, vol. 28, pp. 761-767, 1995.

[Fréour 03]

S. Fréour
Thèse de l'université de Nantes, 2003.

G

[Gardey et al. 05]

B. Gardey, S. Bouvier, V. Richard, B. Bacroix
Mater. Sci. Eng., Vol. 400-401, pp.136-141, 2005.

[Gaudin et Feugas 04]

C. Gaudin, X. Feugas
Acta Mater., Vol. 52, pp.3097-3110, 2004.

[Gaudin 02]

C. Gaudin
Thèse de l'Université de Tech. Compiègne, 2002.

[Gloaguen et al. 07]

D. Gloaguen, T. Berchi, E. Girard, R. Guillén
Acta Mater., Vol. 55, pp. 4369-4379, 2007.

[Gloaguen et François 06]

D. Gloaguen, M. François
Phys. Stat. Sol. (a), Vol. 203, pp. 1940-1953, 2006.

[Gloaguen et al. 04]

D. Gloaguen, M. François, R. Guillén

- [Gloaguen et al. 02] J. Appl. Cryst., Vol. 35, pp. 934-940, 2004.
D. Gloaguen, M. François, R. Guillén, J. Royer
Acta Mater., Vol. 50, pp. 871-880, 2002.
- [Gloaguen 01] D. Gloaguen
Thèse de l'université de Nantes, 2001.
- [Goerdeler et Gottstein 01] M. Goerdeler, G. Gottstein
Mater. Sci. and Eng., Vol. 309A, pp. 377-381, 2001.
- [Göttler 73] E. Göttler
Phil. Mag.A, Vol. 28, pp. 1057-1076, 1973.
- [Gourbesville 00] O. Gourbesville
Thèse de l'ENSAM Paris, 2000.
- [Guillen et al. 99] R. Guillén, C. Cossu, T. Jacquot, M. François, B. Bourniquel
J. Appl. Cryst. Vol. 32, pp. 387-392, 1999.
- H**
- [Haddou et al. 04] H. Haddou, M. Risbet, G. Marichal, X. Feaugas
Mat. Sci. Eng. A, Vol. 379, pp. 102-111, 2004.
- [Haddou 03] H. Haddou
Thèse de l'université de Tech. Compiègne, 2003.
- [Hansen 92] N. Hansen
Scripta Metall. Mat., Vol. 27, pp. 1447-1452, 1992.
- [Hansen 77] N. Hansen
Acta Metall., Vol. 25, pp. 863-869, 1977.
- [Hansen 90] N. Hansen
Mat. Sci. Tech., Vol. 6, pp. 1039-1046, 1990.
- [Hansen et Huang 98] N. Hansen, X. Huang
Acta Mater., Vol. 46, pp. 1827-1836, 1998.
- [Hansen et Wilsdorf 86] N. Hansen, D. K. Wilsdorf
Mat. Sci. Eng., Vol. 81, pp. 141-161, 1986.
- [Hasegawa et al. 86] T. Hasegawa, T. Yakou, U. F. Kocks
Mater. Sci. Eng., Vol. 81, pp. 189-199, 1986.
- [Hatherly et Malin 84] M. Hatherly, A. S. Malin
Scripta Met., Vol. 18, pp. 449-454, 1984.
- [Hershey 54] A. V. Hershey
J. Appl. Mech., Vol. 21, pp. 236-240, 1954.
- [Hill 65] R. Hill
J. Mech. Phys. Solids, Vol. 13, pp. 89-101, 1965.
- [Hiwatashi et al. 97] S. Hiwatashi, A. Van Bael, P. Van Houtte, C. Teodosiu
Comp. Mater. Sc., Vol. 9, pp. 274-284, 1997.
- [Hu 62] H. Hu
Acta. Met., Vol. 10, pp. 1112-1116, 1962.
- [Hu et Weng 00] G. K. Hu, G. J. Weng
Mech. Mater., Vol. 32, pp. 495-503, 2000.
- [Huang 97] X. Huang, N. Hansen
Scripta Mater., Vol. 37, pp. 1-7, 1997.
- [Hughes et al. 03] D. A. Hughes, N. Hansen, D. J. Bammann
Scripta Mater., Vol. 48, pp. 147-153, 2003.
- [Hugues 93] D. A. Hugues
Acta Met., Vol. 41, pp. 1421-1430, 1993.

[Hugues et Nix 89]

D. A. Hugues, W. D. Nix
Mat. Sci. Eng., Vol. 122A, pp. 153-172, 1989.

[Hutchinson 76]

J. W. Hutchinson
Proc. R. Soc. Lond., Vol. A348, pp. 101-127, 1976.

[Hutchinson 70]

J. W. Hutchinson
Proc. R. Soc., Vol. 319 A, pp. 247-272, 1970.

J

[Ida et al. 00]

T. Ida, M. Ando, H. Toraya
J. Appl. Cryst., Vol. 33, pp. 1311-1316, 2000.

[Inal 96]

K. Inal
Thèse de l'université de Metz, 1996.

[Inagaki 89]

H. Inagaki
z. Metalkde, pp. 474-483, 1989.

[Iwakuma et Nemat-N 84]

T. Iwakuma, S. Nemat-Nasser
Proc. R. Soc. Lond., Vol. A394, pp. 87-119, 1984.

[Iwakuma et Nemat-N 83]

T. Iwakuma, S. Nemat-Nasser
Technical Report 83-3-51, Earthquake Research Laboratory, March, 1983.

L

[Janecek et tangri 91]

P.J. Janecek, K. Tangri
Mat. Sci. Eng., Vol. A138, pp. 237-245, 1991.

[Jensen et Hansen 90]

D. Juul-Jensen, N. Hansen
Acta. Met., Vol. 38, pp. 1369-1380, 1990.

[Ji 03]

V. Ji
HDR, Université des sciences et technologies de Lille, 2003.

[Ji et al. 95]

V. Ji, J.L. Lebrun, B. Marty, M. Bessiere, B. Chenal
J. Mater. Sc. Letters, Vol. 14, pp. 674-675, 1995.

[Jiang et al. 95]

Z. Jiang, J. Lian, B. Baudelet
Acta. Met., Vol. 43, pp. 3349-3360, 1995.

K

[Karaman et al. 00]

I. Karaman, H. Sehitoglu, A. J. Beaudoin., Y. I Chumlaykoov, H. J. Maier, C. N. Tome
Acta. Mater. Vol. 48, pp. 2031-2047, 2000.

[Kashyap et al. 88]

B. P. Kashyap, K. McTaggart, K. Tangri
Phil. Mag. A, Vol. 57, pp. 97-114, 1988.

[Keh et Nakada 67]

A. S. Keh, Y. Nakada
Canadian J. Phy., Vol. 45, pp. 1101-1120, 1967.

[Keh et Weissmann 63]

K. S. Keh, S. Weissmann
G. thomas et Washburn eds, Intersc., N.York, pp. 231-300, 1963

[Krier 93]

J. Krier
Thèse de l'université de Metz, 1993.

[Klemm et al. 02]

V. Klemm, P. Klimanek, M. Motylenko
Mat. Sc. Eng., Vol. 324A, pp. 174-178, 2002.

[Kim et al. 03]

J. H. Kim, T. K. Ha, Y. W. Chang et C. S. Lee
Metall. Mater. Trans. A, Vol. 34, pp. 2165-2176, 2003.

- [Klug et Alexandre 74] H.P. Klug, L. E. Alexander
X - Ray Diffraction procedures, Wiley, London, 1974.
- [Kocks 76] U.F. Kocks
ASME J. Engng. Mat. Tech. 98, 76-85, 1976.
- [Kocks et al. 98] U.F. Kocks, C.N. Tomé and H.R. Wenk
Texture and anisotropy, Press, Cambridge, 1998.
- [Korbel et Martin 86] A. Korbel, P. L. Martin
Acta Met., Vol. 34, pp. 1905-1909, 1986.
- [Kröner 61] E. Kröner
Acta Metall., Vol. 9, pp. 155-161, 1961.
- [Kröner 58] E. Kröner
Z. Phys., Vol. 151, pp. 504-518, 1958.
- [Kuhlmann-Wilsdorf 89] D. Kuhlmann-Wilsdorf
Mat. Sci. Eng., Vol. 113A, pp. 1-41, 1989.
- L**
- [Lan et al. 92] Y. Lan, H. J. Kloor, W. Dohl
Metall. Trans., Vol. 23A, pp. 537-544, 1992.
- [Langlois 00] L. Langlois
Thèse de l'université de Metz, Juillet 2000.
- [Lebensohn 93] R. Lebensohn
Thèse de l'Universidad Nacional de Rosario, 1993.
- [Lebensohn et Tomé 93] R. A. Lebensohn, C. N. Tomé
Acta Metall. Mater., Vol. 41, pp. 2611-2624, 1993.
- [Lebrun 77] J.L. Lebrun,
Thèse de l'université d'Orsay, 1977.
- [Lemoine 95] X. Lemoine,
Thèse de l'université de Metz, décembre 1995.
- [Lemoine et al. 94] X. Lemoine, M. Berveiller, D. Muller
Mat. Science forum 157-162, 1821, 1994.
- [Libovicky et Sestak 83] S. Libovicky, B. Sestak
Phil. Mag. A, Vol.43, pp. 63-78, 1983.
- [Lipinski 93] P. Lipinski
Thèse de l'université de Metz, 1993.
- [Lipinski et al. 90] P. Lipinski, J. Krier, M. Berveiller
Rev. Phys. Appl., Vol. 25, pp. 361-388, 1990.
- [Lipinski et Berveiller 89] P. Lipinski, M. Berveiller
Int. J. Plast., Vol. 5, pp. 149-172, 1989.
- [Liu et al. 93] Y. Z. Liu, D. Y. Dong, K. Yuan
J. of Mat. Process. Tech., Vol. 39, pp. 133-143, 1993.
- [Liu et al. 98] Q. Liu, D. Juul Jensen, N. Hansen
Acta Mater., Vol. 46, pp. 5819-5838, 1998.
- [Lorrain 05] J. P. Lorrain
Thèse de l'université de Metz, 2005.
- [Lorrain et al. 05] J. P. Lorrain, T. Ben Zeneb, F. Abd Meriam, M. Berveiller
Int. J. Proc, 8 (2), 2005.
- [Louboutin et Louër 72] R. Louboutin, D. Louër
Acta. Cryst., Vol. 28 pp. 396-400, 1972.
- [Louër et al. 69] D. Louër, D. Weigel, R. Louboutin
Acta. Cryst., A25, pp. 335-338, 1969.

[Luft 91]

A. Luft
Progress in Mat. Sci., Vol. 35, pp. 97-204, 1991.

M

[Mabelly 96]

P. Mabelly
Thèse de l'ENSAM de Centre d'Aix en Provence, 1996.

[Macherauch et al. 73]

E. Macherauch, H. Wohlfahrt, U. Wolfstieg
HTM 28, pp 201- 211, 1973.

[Mahesh et al. 04]

S. Mahesh, C. N. Tomé, R. J. McCabe, G.C. Kaschner, I.J. Beyerlein, A. Misra
Metall. Mater. Trans., Vol. 35A, pp. 3763-3774, 2004.

[Malin et Hatherly 79]

A.S. Malin, M. Hatherly
Metal Sci., Vol. 13, pp. 463-472, 1979.

[Marty 96]

B. Marty
Thèse ENSAM de Paris, 1996.

[Matthies 88]

S. Matthies
J. Appl. Cryst., Vol. 21, pp. 285-304, 1988.

[Matthies et al 82]

S. Matthies, G.W. Vinel
Phys. Stat. Sol. (b), Vol. 112, pp. K111-K120, 1982.

[Mercier et Molinari 08]

S. Mercier, A. Molinari
Inter. J. Plasticity, Accepted Manuscript, 2008.

[Molinari et al. 87]

A. Molinari, G. R. Canova, S. Ahzi
Acta Metall., Vol. 35, pp. 2983-2994, 1987.

[Morris 70]

R. Peter Morris
Int. J. Eng. Sci., Vol. 8, pp. 49-61, 1970.

[Morris et Martin 84]

M. A. Morris, J. L. Martin
Acta Met., Vol. 32, pp. 549-561, 1984.

[Mughrabi 87]

H. Mughrabi
Phys. Stat. Sol. (a), Vol. 104, pp. 107-120, 1987.

[Mughrabi 83]

H. Mughrabi
Acta Meta. Vol. 31, pp. 1367-1379, 1983.

[Mülders et al. 02]

B. Mülders, M. Zehetbauer, G. Gottstein, P. Les, E. Schafner
Mater. Sci. Eng. A, Vol. 324, pp. 244-250, 2002.

[Müller et al. 95]

M. Müller, M. Zehetbauer, A. Borbely, T. Ungar
Z. Metallk., Vol. 86, pp. 827-831, 1995.

[Muller 94]

D. Muller
Thèse de l'université de Metz, 1994.

[Muller et al. 94]

D. Muller, X. Lemoine, M. Berveiller
J. Eng. Mat. Tech., Vol. 116, pp. 378-383, 1994.

N

[Narutani et Takamura 91]

T. Narutani, J. Takamura
Acta Metall., Vol. 39, pp. 2037-2049, 1991.

[Nesterova et al. 01]

E. V. Nesterova, B. Bacroix, C. Teodosiu
Mater. Sci. Eng., Vol. 309, pp. 495-499, 2001.

O

[Ortiz et Pochettino 96]

M. Ortiz, A.A. Pochettino

- [Oustau et Baudelet 77] J. nuclear mat., Vol. 229, pp. 65-72, 1996
F. R. Oustau, B. Baudelet
Acta. Metall., Vol. 25, pp. 1523-1529, 1977.
- P**
- [Paquin et al. 01] Paquin A., Berbennib S., Favierb V., Lemoinec X. M.
Berveiller
Int. J. Plasticity, Vol. 17, pp. 1267-1302, 2001.
- [Peeters et al. 02] B. Peeters, S. R. Kalidindi, C. Teodosiu, P. Van Houtte, E.
Aernoudt
J. Mech. Pys. Sol., Vol. 50, pp. 783-807, 2002.
- [Peeters et al. 01.a] B. Peeters, M. Seefeldt, C. Teodosiu, S. R. Kalidindi, P.
Van Houtte, E. Aernoudt
Acta. Mater., Vol. 49, pp. 1607-1619, 2001.
- [Peeters et al. 01.b] B. Peeters, M. Seefeldt, C. Teodosiu, S. R. Kalidindi, P.
Van Houtte, E. Aernoudt
Acta. Mater., Vol. 49, pp. 1621-1632, 2001.
- [Peeters et al. 01.c] B. Peeters, M. Seefeldt, P. Van Houtte, E. Aernoudt
Scripta. Mater., Vol. 45, pp. 1349-1356, 2001.
- [Peeters et al. 00] B. Peeters, S. R. Kalidindi, P. Van Houtte, E. Aernoudt
Acta. Mater., Vol. 48, pp. 2123-2133, 2000.
- [Pesci 04] R. Pesci
Thèse de l'université de Metz, 2004.
- [Peultier et al. 08] B. Peultier, T. Ben Zineb, E. Patoor
Mater. Sci. Eng. A, Vol. 481, pp. 384-388, 2008.
- [Peultier et al. 06] B. Peultier, T. Ben Zineb et E. Patoor
Mater. Sci. Eng. A, Vol. 438, pp. 454-458, 2006.
- [Pollnow et al. 72] D. Pollnow, R. Penelle, P. Lacombe
Mém. Sci. Revue Metall., Lxx n° 10, pp. 703-714, 1973.
- [Pollnow et al. 75] D. Pollnow, R. Penell, P. Lacombe
Mém. Sci. Revue Metall., pp. 491-500, 1975.
- [Proust et al. 07] G. Proust, C.N. Tomé, G.C. Kaschner
Acta Mater., Vol. 55, pp. 2137-2148, 2007.
- Q**
- [Qiu et Weng 91] Y.P. Qiu, G. J. Weng
Mech. Mater. Vol.12, pp.1-15, 1991.
- R**
- [Rachinger 48] W. A. Rachinger
J. Sci. Instrum., Vol. 25, pp. 254-255, 1948.
- [Rauch 97] E. F. Rauch
Mater. Sci. Eng., Vol. 234A, pp. 653-656, 1997.
- [Rauch et Schmitt 89] E. F. Rauch, J. H. Schmitt
Mat. And Sci., Vol. 113A, pp. 441-448, 1989.
- [Reuss 29] A. Reuss
Math. Mech., Vol. 9, pp. 49-58, 1929.
- [Rey 88] C. Rey
Revue Phys. Appl., Vol.23, pp. 491-500, 1988.
- [Roters et al. 00] F. Roters, D. Raabe, G. Gottstein

- Acta Mater., Vol. 48, pp. 4181-4189, 2000.
- S**
- [Sachs 28] G. Sachs
Z. Ver. Dtsch. Ing., Vol. 72, pp. 734-736, 1928.
- [Sahal et al. 06] M. Sahal, J. Creus, R. Sabot et X. Feugas
Acta. Mater., Vol. 54, pp. 2157-2167, 2006.
- [Sauzay 08] M. Sauzay
Int. J. Plasticity, Vol. 24, pp. 727-745, 2008.
- [Sauzay 03] M. Sauzay
Colloque du GFAC, ENSAM de Metz, 2003.
- [Schmitt 86] J. H. Schmitt
Thèse de l'université de Grenoble, 1986.
- [Schmid et Boas 35] E. Schmid, W. Boas
Kristallplastizität, Berlin, Spinger Verlag, 1935.
- [Schmitt et al. 97] C. Schmitt, P. Lipinski, M. Berveiller
Int. J. Plasticity, Vol.13, pp. 183-199, 1997.
- [Sprauel et Castex 94] J.M. Sprauel, L. Castex
CEA, pp. 45-64, 1994
- [Stockes 48] A. R. Stockes
Phys. Soc. Lond., Vol. 61, pp. 382-391, 1948.
- [Swann 63] P. R. Swann
In electron Microscopy and Strength of Crystal, eds G. Thomas, J. Washburn, pp. 131-181, 1963.
- T**
- [Tabata et al. 82] T. Tabata, H. Fujita, M. Hirooka, S. Miyake
Philo. Mag. A, Vol. 46, pp. 801-816, 1982.
- [Tabata et al. 78] T. Tabata, S. Yamanaka, H. Fujita
Acta. Metall., Vol. 26, pp. 405-411, 1978.
- [Takeushi 70] T. Takeushi
Japanese J. of App. Phys., Vol. 9, pp. 391-400, 1970.
- [Taylor 38] G. I. Taylor
J. Inst. Metals, Vol. 62, pp. 307-324, 1938.
- [Thuillier 92] S. Thuillier
Thèse de l'université de Grenoble, 1992.
- [Toth 05] L.S. Toth
Comp. Mater. Sc., Vol. 32, pp. 568-576, 2005.
- U**
- [Ungar et Groma 89] T. Ungar, I. Groma
J. Appl. Cryst., Vol. 22, pp. 26-34, 1989.
- [Ungar et al. 84] T. Ungar, H. Mughrabi, D. Ronnpagel, M. Wilkens
Acta Met., Vol. 32, pp. 333-342, 1984.
- V**
- [Van Houtte et al. 05] P. Van Houtte, S. Li, M. Seefeldt, L. Delannay
Int. J. Plasticity, Vol. 21, pp. 589-624, 2005.
- [Van Houtte et Van Bael 04] P. Van Houtte, A. Van Bael

- [Viatkina et al. 08] Int. J. Plasticity, Vol. 20, pp. 1505-1524, 2004.
E.M. Viatkina, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers
J. Mat. Proc. Techn., Vol. x(x), available on line, 2008.
- [Viatkina et al. 08] E.M. Viatkina, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers
Comp. Mech., Vol. 41(3), 391-405, 2008.
- [Viatkina et al. 07] E.M. Viatkina, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers
Eur. J. Mech. A/Solids, Vol. 26(6), 982-998, 2007.
- [Viatkina et al. 07] E.M. Viatkina, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers
Int. J. Solids Structures, Vol. 44(18-19), 6030-6054, 2007.
- [Viatkina 05] E.M. Viatkina
Thèse de doctorat de l'université d'Heindhoven, 2005.
- [Vincent 02] L. Vincent
Thèse de l'école normale supérieure de Cachan, 2002.
- [Vincze et al. 05] G. Vincze, E.F. Rauch, J.J. Gracio, F. Barlat, A.B. Lopes
Acta. Mater., Vol. 53, pp. 1005-1013, 2005.
- [Voigt 28] W. Voigt
Lehrbuch der kristallphysik, Teubner, Verlag, 1928
- [Voce 48] E. Voce
J. of the Inst. of Metals, Vol. 74, pp. 537-562, 1948.
- W**
- [Warren 69] B.E. Warren
X Ray Diffraction. Addison Wesley, London 1969.
- [Warren et Averbach 50] B. E. Warren, B.L. Averbach
J. Appl. Phys. Vol. 21, pp. 585-592, 1950.
- [Winther 08] G. Winther
Mater. Sci. Eng. A, Vol. 483, pp. 40-46, 2008.
- [Winther et al. 00] G. Winther, X. Huang, N. Hansen
Acta. Mater., Vol. 48, pp. 2187-2198, 2000.
- [Winther et Jensen 97] G. Winther, D. J. Jensen
Comp. Mater. Sci., Vol. 9, pp. 251-260, 1997.
- [Withers et Bhadeshia 01] P. J. Withers, H. K. D. H. Bhadeshia
Mater. Sci. Tech., Vol. 17, pp 335-365, 2001
- [Wu et al. 05] P. D. Wu, S. R. Mac Ewen, D. J. Lloyd, M. Jain, P. Tugcu,
K. W. Neale
Int. J. Plasticity. Vol. 21, pp. 723-739, 2005.

Annexes

Annexe I : Etudes paramétriques : contraintes résiduelles

Influence du paramètre d'écroissage ζ

L'influence du paramètre d'écroissage sur le calcul des contraintes résiduelles au niveau des grains est montrée sur la *figure AI.1*. Chaque point correspond à la contrainte calculée dans un grain du matériau. Ces points sont plus dispersés pour une valeur de ζ faible. Ces courbes sont discutées dans le *paragraphe II.2.4.5*.

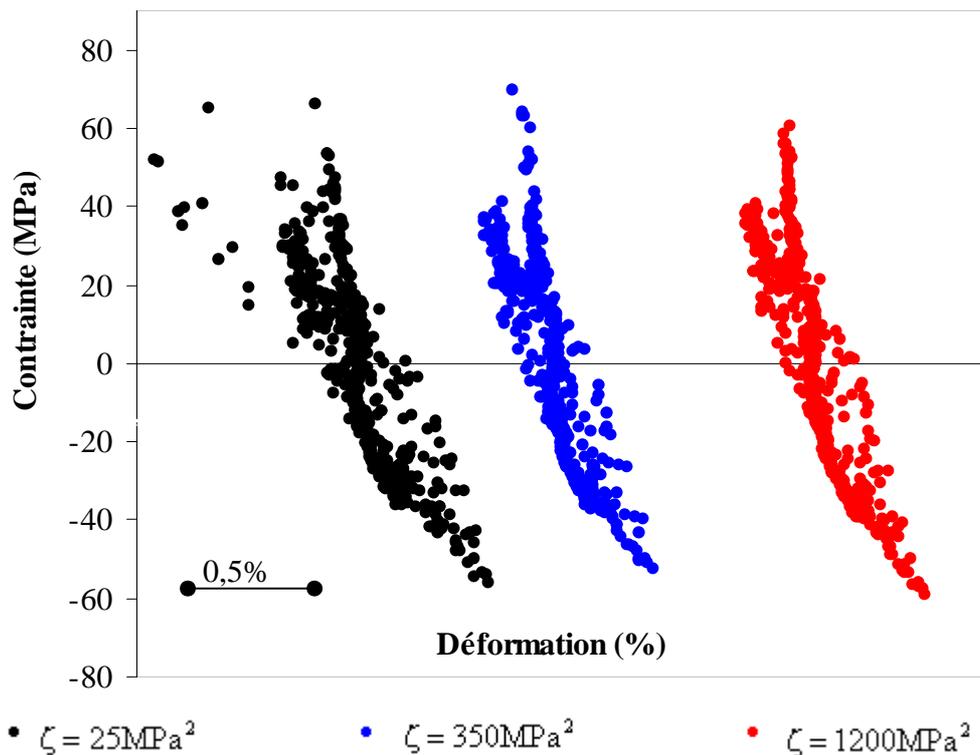


Figure AI.1 : influence de l'écroissage local sur les contraintes résiduelles pour un essai de traction

Influence du paramètre de la fonction K_α^g

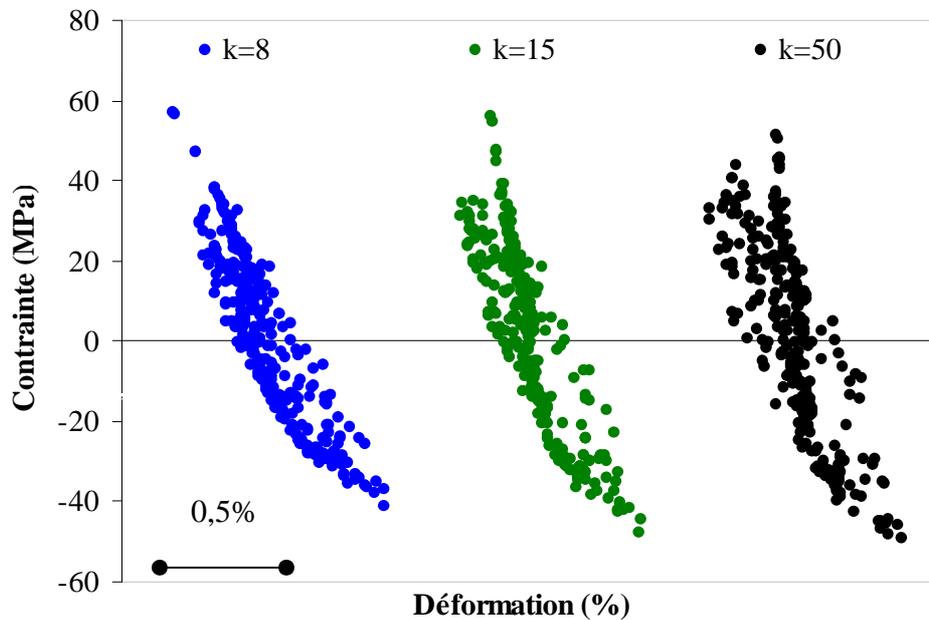


Figure AI.2 : influence du paramètre k de la fonction K_α^g sur les contraintes résiduelles (σ_{22}^H) après un essai de traction

Influence de la morphologie de la microstructure de dislocations

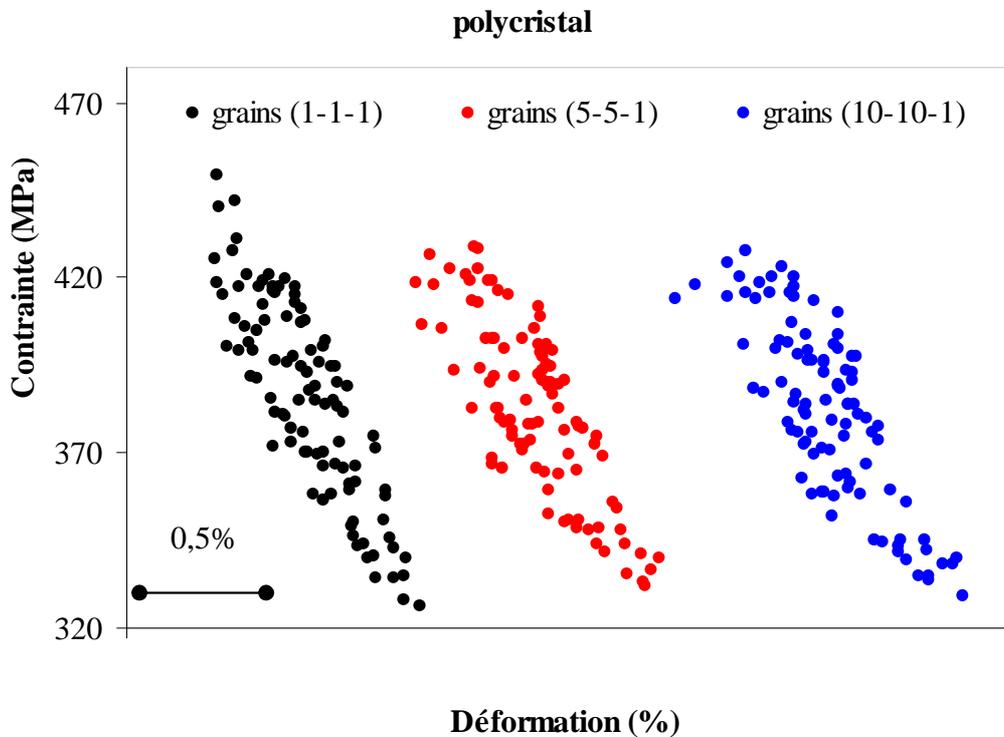


Figure AI.3 : influence de la morphologie sur les contraintes internes des grains pour un essai de traction

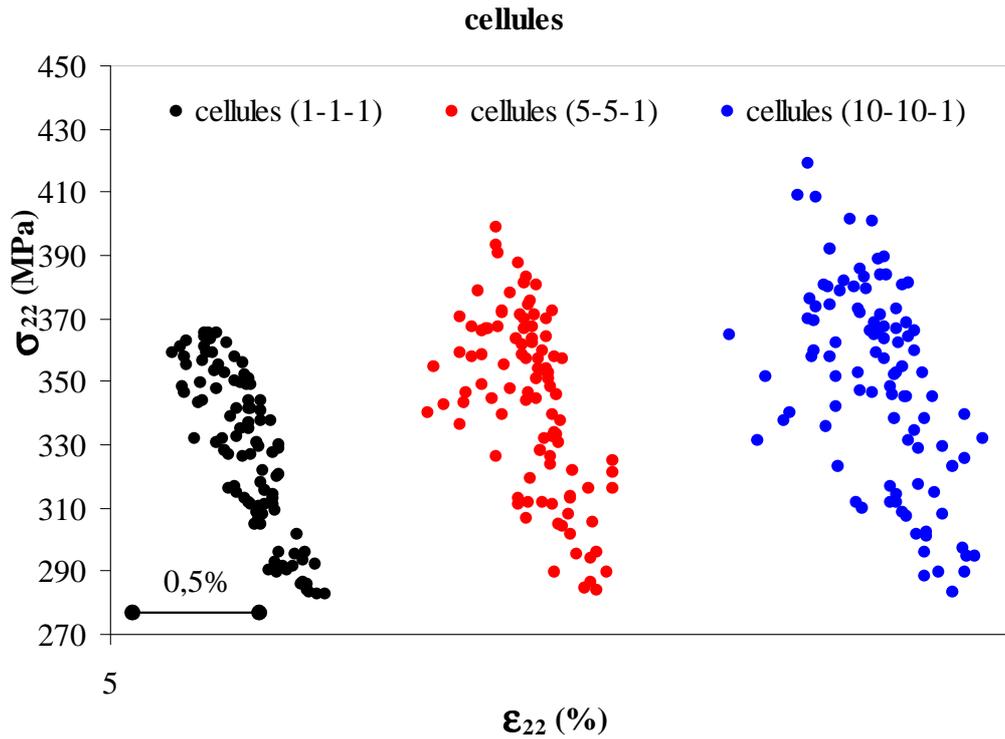


Figure AI.4 : influence de la morphologie sur les contraintes internes des cellules pour un essai de traction

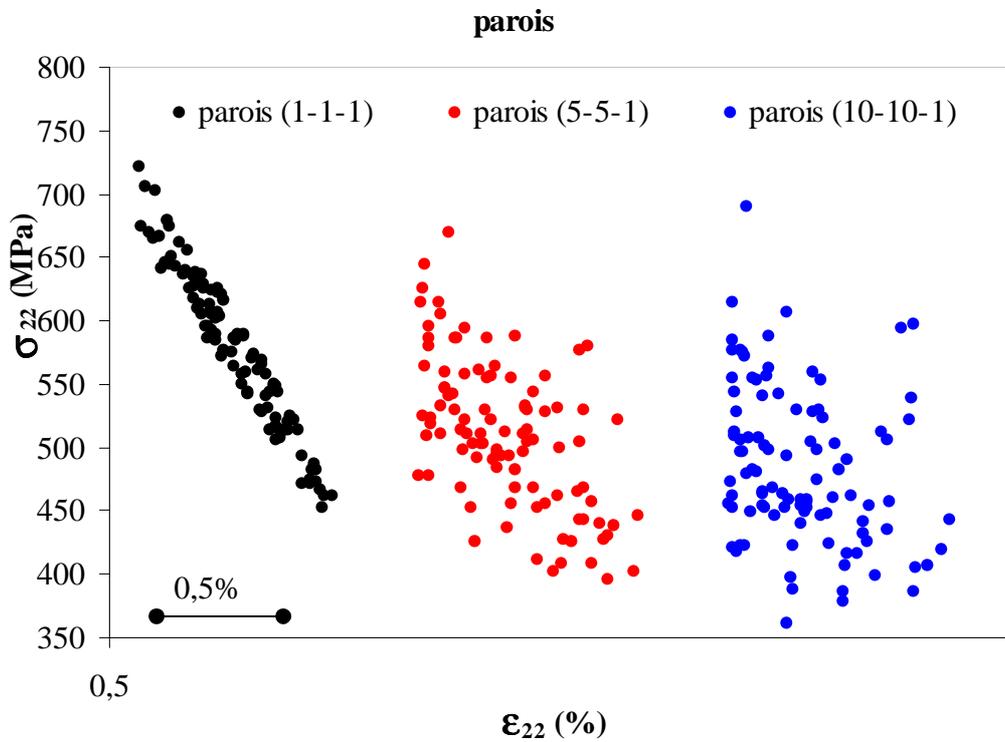


Figure AI.5 : influence de la morphologie sur les contraintes internes des parois pour un essai de traction

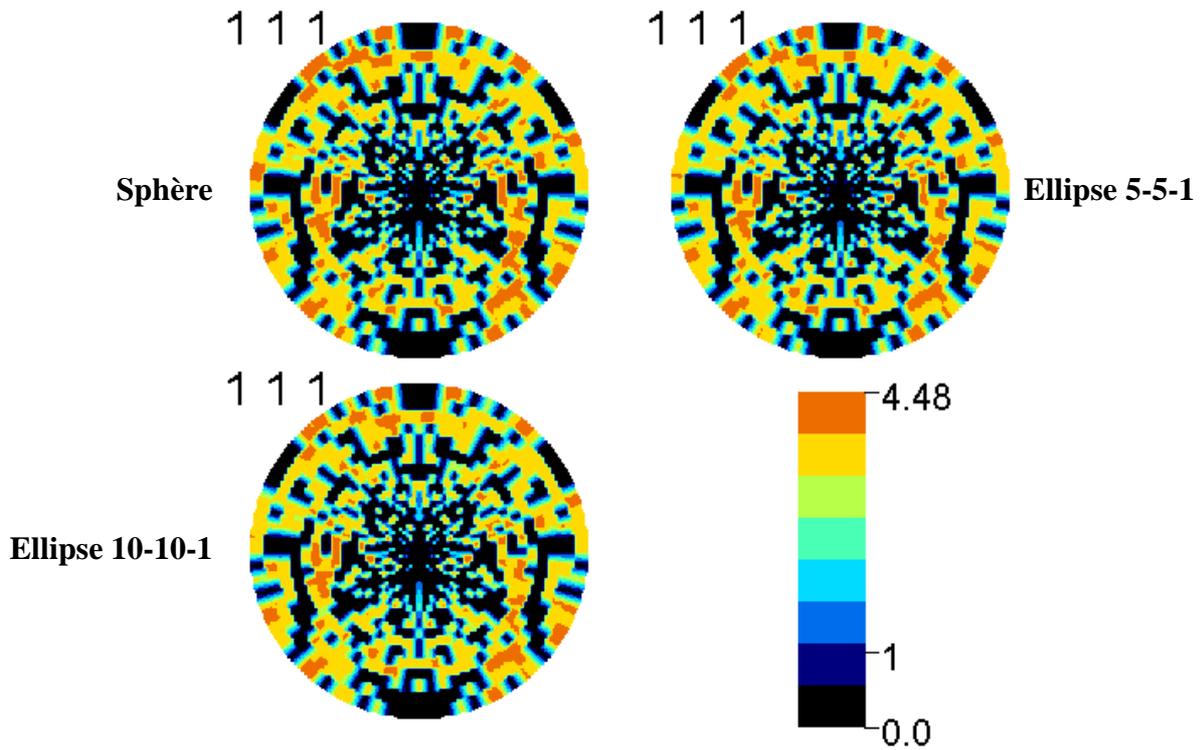


Figure AI.6 : figures de pôles des contraintes internes des grains pour un essai de traction

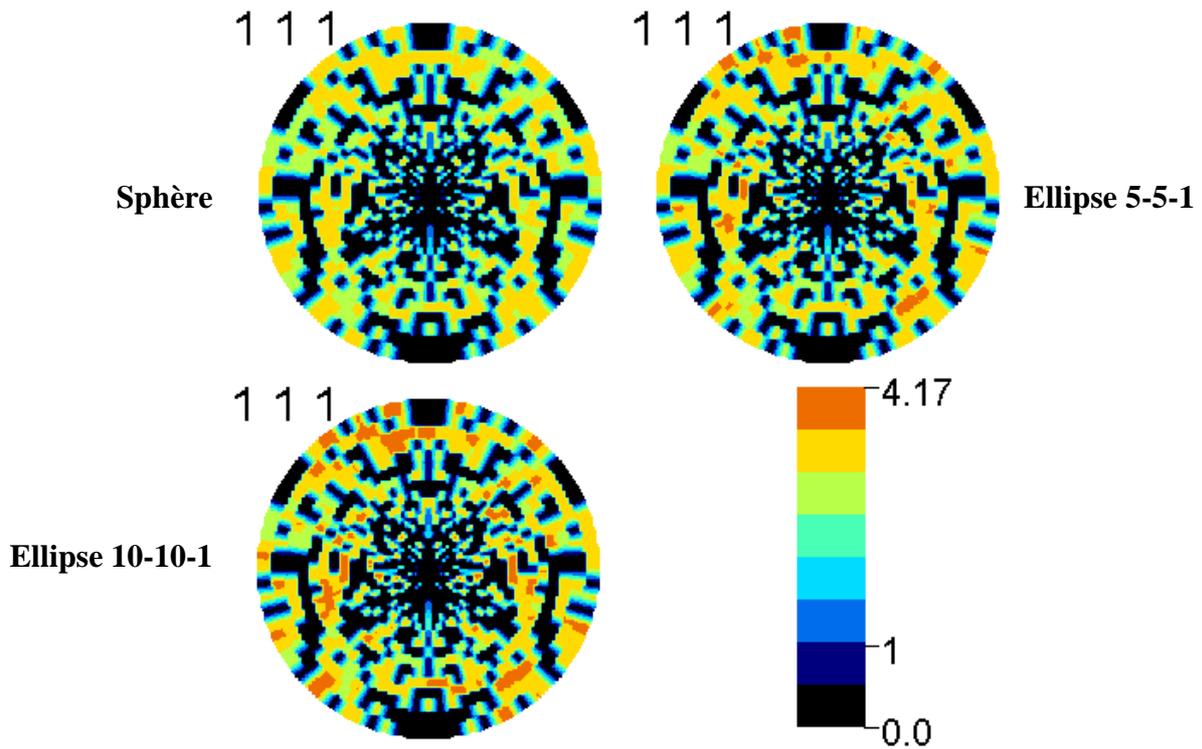


Figure AI.7 : figures de pôles des contraintes internes des cellules pour un essai de traction

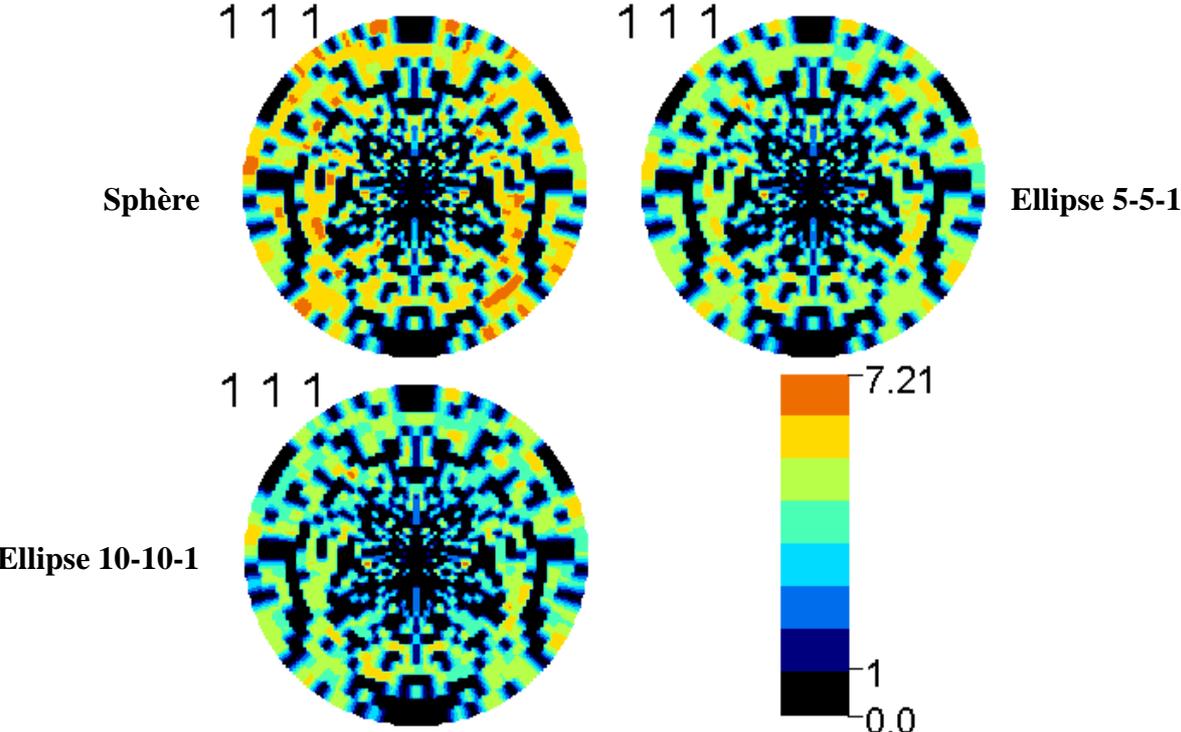


Figure AI.8 : figures de pôles des contraintes internes des parois pour un essai de traction

Annexe II : Modèle autocohérent-autocohérent

Pour faciliter la lecture des équations de l'approche autocohérente, nous reprenons dans cette annexe l'intégralité des équations du modèle présentées dans le *chapitre II*.

Equation de base

Le taux de contrainte des phases :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{ij}^c = c_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl}^c - \dot{\epsilon}_{kl}^{pc}) \\ \dot{\sigma}_{ij}^w = c_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl}^w - \dot{\epsilon}_{kl}^{pw}) \end{cases} \quad (\text{AII.1})$$

Le taux de déformation plastique des phases :

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}^{pc} = R^{ch} \dot{\gamma}_c^h \\ \dot{\epsilon}^{pw} = R^{wh} \dot{\gamma}_w^h \end{cases} \quad (\text{AII.2})$$

Le taux de la scission réduite :

$$\begin{cases} \dot{\tau}_c^g = R_{ij}^{cg} \dot{\sigma}_{ij}^c \\ \dot{\tau}_w^g = R_{ij}^{wg} \dot{\sigma}_{ij}^w \end{cases} \quad (\text{AII.3})$$

La vitesse de glissement des phases :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}_c^g = K_{cc}^g \dot{\tau}_c^g + K_{cw}^g \dot{\tau}_w^g \\ \dot{\gamma}_w^g = K_{wc}^g \dot{\tau}_c^g + K_{ww}^g \dot{\tau}_w^g \end{cases} \quad (\text{AII.4})$$

avec :

$$\begin{cases} K_{cc}^g(\tau_c^g, \tau_{cc}^g) = \frac{1}{\eta} \left[\frac{1}{2} \left(I + \tanh \left(k_0 \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_{cc}^g} - I \right) \right) \right) \right] \left[\frac{1}{2} (I + \tanh(\tau_c^g)) \right] \left[\frac{1}{2} (I + \tanh(\dot{\tau}_c^g)) \right] \\ K_{ww}^g(\tau_w^g, \tau_{cw}^g) = \frac{1}{\eta} \left[\frac{1}{2} \left(I + \tanh \left(k_0 \left(\frac{\tau_w^g}{\tau_{cw}^g} - I \right) \right) \right) \right] \left[\frac{1}{2} (I + \tanh(\tau_w^g)) \right] \left[\frac{1}{2} (I + \tanh(\dot{\tau}_w^g)) \right] \\ K_{wc}^g(\tau_w^g, \tau_{cc}^g) = \kappa K_{cc}^g(\tau_c^g, \tau_{cc}^g) \\ K_{cw}^g(\tau_c^g, \tau_{cc}^g) = 0 \end{cases}$$

Le taux de la scission critique des phases :

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\tau}}_{cc}^g = H_{cc}^{gh} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^h + H_{cw}^{gh} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^h \\ \dot{\boldsymbol{\tau}}_{cw}^g = H_{wc}^{gh} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^h + H_{ww}^{gh} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^h \end{cases} \quad (\text{AII.5})$$

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c = a^c : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{II} \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^w = a^w : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{II} \end{cases} \quad (\text{AII.6})$$

avec :

$$\begin{cases} a^c = [I + s^{esh} : l^{-1} : \Delta l^{cc}]^{-1} \\ a^w = (I + s^{esh} : l^{-1} : \Delta l^{ww})^{-1} : (I - s^{esh} : l^{-1} : l^{wc} : a^c) \end{cases} \quad (\text{AII.7})$$

La relation de moyenne du taux de contrainte du grain en fonction de celui des contraintes des phases :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{II} = f \dot{\boldsymbol{\sigma}}^c + (1-f) \dot{\boldsymbol{\sigma}}^w \quad (\text{AII.8})$$

Développement du modèle : autocohérent-autocohérent

En combinant entre les équations AII.1, AII.3 et AII.4, nous trouvons :

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^g = K_{cc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^c - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^{pc}) + K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^w - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^{pw}) \\ \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^g = K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^c - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^{pc}) + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^w - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^{pw}) \end{cases} \quad (\text{AII.9})$$

L'insertion de l'expression AII.2 dans AII.9, nous donne :

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^g = K_{cc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^c - R_{kl}^{ch} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^h) + K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^w - R_{kl}^{wh} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^h) \\ \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^g = K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^c - R_{kl}^{ch} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^h) + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^w - R_{kl}^{wh} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^h) \end{cases} \quad (\text{AII.10})$$

En développant AII.10, nous obtenons :

$$\begin{cases} \left(\delta_{gh} + K_{cc}^g \sum_{ij} R_{ij}^{cg} \sum_{kl} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} \right) \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^h + K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^h = K_{cc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^c + K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^w \\ K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^h + \left(\delta_{gh} + K_{ww}^g \sum_{ij} R_{ij}^{wg} \sum_{kl} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \right) \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^h = K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^c + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^w \end{cases} \quad (\text{AII.11})$$

ou bien :

$$\begin{bmatrix} \delta_{gh} + K_{cc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} & K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \\ K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} & \delta_{gh} + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_c^h \\ \dot{\boldsymbol{\gamma}}_w^h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{cc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^c + K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^w \\ K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^c + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{kl}^w \end{bmatrix} \quad (\text{AII.12})$$

Ainsi la vitesse de glissement est sous la forme :

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_c^g \\ \dot{\gamma}_w^g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w \\ K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w \end{pmatrix} \quad (\text{AII.13})$$

ou bien :

$$\begin{cases} \dot{\gamma}_c^g = (M_{cc}^{gh} K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} + M_{cw}^{gh} K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl}) \dot{\epsilon}_{kl}^c + (M_{cc}^{gh} K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} + M_{cw}^{gh} K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl}) \dot{\epsilon}_{kl}^w \\ \dot{\gamma}_w^g = (M_{wc}^{gh} K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} + M_{ww}^{gh} K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl}) \dot{\epsilon}_{kl}^c + (M_{wc}^{gh} K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} + M_{ww}^{gh} K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl}) \dot{\epsilon}_{kl}^w \end{cases} \quad (\text{AII.14})$$

avec :

$$\begin{pmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{gh} + K_{cc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} & K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \\ K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} & \delta_{gh} + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \end{bmatrix}^{-1} \quad (\text{AII.15})$$

En multipliant par R_{kl}^{cg} dans AII.16, nous obtenons :

$$\begin{pmatrix} R_{kl}^{cg} \dot{\gamma}_c^g \\ R_{kl}^{wg} \dot{\gamma}_w^g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{kl}^{cg} & R_{kl}^{wg} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w \\ K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w \end{pmatrix} \quad (\text{AII.16})$$

Nous développons AII.16 :

$$\begin{cases} R_{kl}^{cg} \dot{\gamma}_c^g = R_{kl}^{cg} M_{cc}^{gh} (K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w) + R_{kl}^{cg} M_{cw}^{gh} (K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w) \\ R_{kl}^{wg} \dot{\gamma}_w^g = R_{kl}^{wg} M_{wc}^{gh} (K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w) + R_{kl}^{wg} M_{ww}^{gh} (K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w) \end{cases} \quad (\text{AII.17})$$

En utilisant AII.1, AII.2 et AII.17, nous trouvons :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{ij}^c = c_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl}^c - R_{kl}^{cg} M_{cc}^{gh} (K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w) - R_{kl}^{cg} M_{cw}^{gh} (K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w)) \\ \dot{\sigma}_{ij}^w = c_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl}^w - R_{kl}^{wg} M_{wc}^{gh} (K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w) - R_{kl}^{wg} M_{ww}^{gh} (K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w)) \end{cases} \quad (\text{AII.18})$$

Nous développons AII.18 :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_{ij}^c = \left(c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} \sum_g R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \right) \dot{\epsilon}_{kl}^c + \\ \left(-c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \right) \dot{\epsilon}_{kl}^w \\ \dot{\sigma}_{ij}^w = \left(-c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \right) \dot{\epsilon}_{kl}^c + \\ \left(c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \right) \dot{\epsilon}_{kl}^w \end{cases} \quad (\text{AII.19})$$

On peut réécrire l'expression AII.19, sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}^c = l^{cc} : \dot{\varepsilon}^c + l^{cw} : \dot{\varepsilon}^w \\ \dot{\sigma}^w = l^{wc} : \dot{\varepsilon}^c + l^{ww} : \dot{\varepsilon}^w \end{cases} \quad (\text{AII.20})$$

avec :

$$\begin{cases} l_{ijkl}^{cc} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{cw} = -c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{wc} = -c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{ww} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \end{cases} \quad (\text{AII.21})$$

On combine les *relations AII.8* et *AII.20* entre elles :

$$\dot{\sigma}^H = f(l^{cc} : \dot{\varepsilon}^c + l^{cw} : \dot{\varepsilon}^w) + (1-f)(l^{wc} : \dot{\varepsilon}^c + l^{ww} : \dot{\varepsilon}^w) \quad (\text{AII.22})$$

En insérant les équations de *AII.6* dans *AII.22*, on trouve :

$$\dot{\sigma}^H = ((fl^{cc} + (1-f)l^{wc}) : a^c + (fl^{cw} + (1-f)l^{ww}) : a^w) : \dot{\varepsilon}^H \quad (\text{AII.22})$$

Ainsi le module tangent du grain est :

$$l = ((fl^{cc} + (1-f)l^{wc}) : a^c + (fl^{cw} + (1-f)l^{ww}) : a^w) \quad (\text{AII.23})$$

Dans le cas d'un écoulement local au niveau des cellules, on a :

$$K_{cw}^g = K_{wc}^g = 0 \Rightarrow M_{cw}^{gh} = M_{wc}^{gh} = 0 \quad (\text{AII.24})$$

Alors :

$$\begin{cases} l_{ijkl}^{cc} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ l_{ijkl}^{cw} = 0 \\ l_{ijkl}^{wc} = 0 \\ l_{ijkl}^{ww} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \end{cases} \quad (\text{AII.25})$$

Annexe III : **Etude comparative des modèles**

Dans cette partie, nous présentons une étude comparative des quatre modèles développés dans ce travail (Kröner-Autocohérent (Kr-SC), Autocohérent-Autocohérent (SC-SC), Mori-Tanaka-Autocohérent (MT-SC) et Peeters-Autocohérent (Peeters-SC)). Pour cela, nous avons utilisé comme référence les résultats expérimentaux de Clausen et al. [Clausen et al. 98] présentés dans le *chapitre I*. Ces auteurs ont analysé par diffraction des neutrons et in-situ le comportement mécanique de l'aluminium durant un essai de traction. Cette comparaison se fera au travers de certains critères quantitatifs :

- Courbe macroscopique de l'aluminium.
- Contraintes internes suivant la direction de traction (contraintes longitudinales) et perpendiculairement à celle-ci (contraintes transverses).
- Contraintes internes des phases (cellules et parois).
- Déformations élastiques internes suivants trois plans cristallographiques : (220), (200) et (111).

Comportement macroscopique

Dans un premier temps, nous avons simulé le comportement macroscopique en traction de l'aluminium. Les courbes simulées ont été comparées à la courbe expérimentale obtenue par Clausen et al. [Clausen et al. 98]. De manière similaire aux simulations numériques du chapitre I, nous considérons une texture isotrope constituée, cette fois-ci, de 100 cristallites. La scission réduite initiale est nulle pour les 24 systèmes de glissement et pour chaque cristallite. La scission critique initiale est, pour chaque système de glissement et pour chaque cristallite, supposée être la même. Les paramètres du matériau sont donnés dans le *tableau AIII.1*. Les paramètres de simulation de chaque modèle sont donnés dans les *tableaux III.2* et *AIII.3*.

ν	μ (MPa)	ρ_0 (m ⁻²)	y_c (m)	τ_{c0} (MPa)	f_0	b (m)
0,3	28,5	10 ⁹	10 ⁻⁹	9,7	0,85	2,86 10 ⁻¹⁰

Tableau AIII.1 : paramètres du matériau

Modèle	a^{gg}	a^{gh}	f_∞	γ^{par}	ζ (MPa ²)	k_L	ξ	k
Kr-SC	1	1,1	0,75	3,2	60	10	0,1	20
MT-SC	1	1,1	0,75	3,2	30	5,2	0,6	10
SC-SC	1	1,1	0,75	3,2	45	60	0,25	15

Tableau AIII.2 : paramètres d'ajustement pour les modèles Kr-SC, MT-SC et SC-SC

k	k_f	k_r	k_e	α	I	I^{wd}
10	8 10 ⁻⁵	10 ⁻⁹	1,2	10 ⁻²	10 ⁻²	3 10 ⁻¹
I^{wp}	R (m)	R^{wd} (m)	R^{wp} (m)	R_{ncg} (m)	R_{rev} (m)	R_2 (m)
10 ⁻¹	10 ⁻⁹	10 ⁻⁹	10 ⁻⁹	10 ⁻⁹	5 10 ⁻⁹	5 10 ⁻⁹

Tableau AIII.3 : paramètres d'ajustement pour le modèle de Peeters-SC

Nous avons choisi de prendre les paramètres matériaux identiques pour tous les modèles afin de permettre une comparaison directe entre les modèles. Par contre, cette restriction ne permettra pas d'optimiser les écarts avec les données expérimentales.

La *figure AIII.1* présente les courbes macroscopiques expérimentale et simulées par chaque modèle. Nous remarquons que les quatre modèles arrivent logiquement à reproduire correctement la courbe expérimentale. Dans un deuxième temps, nous avons comparé les modèles au même taux de déformation macroscopique (3 %) aux différentes échelles caractéristiques du matériau.

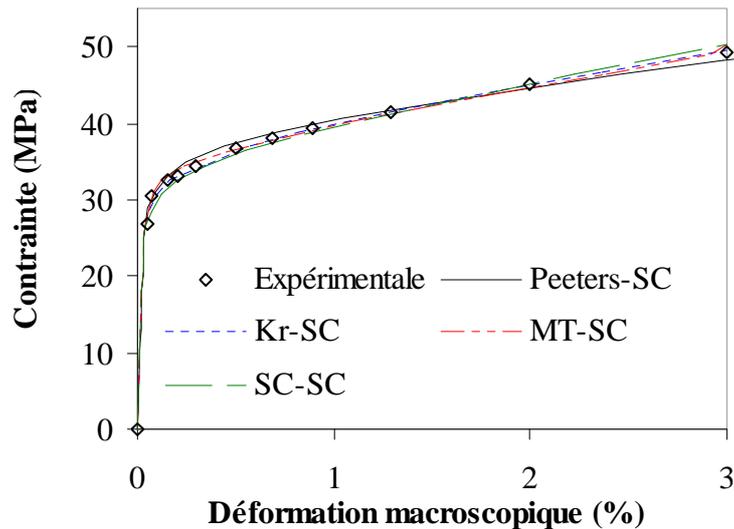


Figure AIII.1 : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentale [Clausen et al. 98] et simulées : essai de traction

Contraintes internes mésoscopiques

Les contraintes internes mésoscopiques longitudinales et transversales sont présentées sur les *figures AIII.2* et *AIII.3*. Nous remarquons que les nuages de points obtenus par les approches avec une double transition d'échelles (Kr-SC, MT-SC et SC-SC) sont plus dispersés que celui obtenu par le modèle SC-Peeters. Par exemple le modèle SC-SC nous donne un niveau de contraintes longitudinales variant entre 38 MPa et 63 MPa et un niveau de contraintes transversales entre -11 MPa et 21 MPa. Ces différences restent néanmoins faibles.

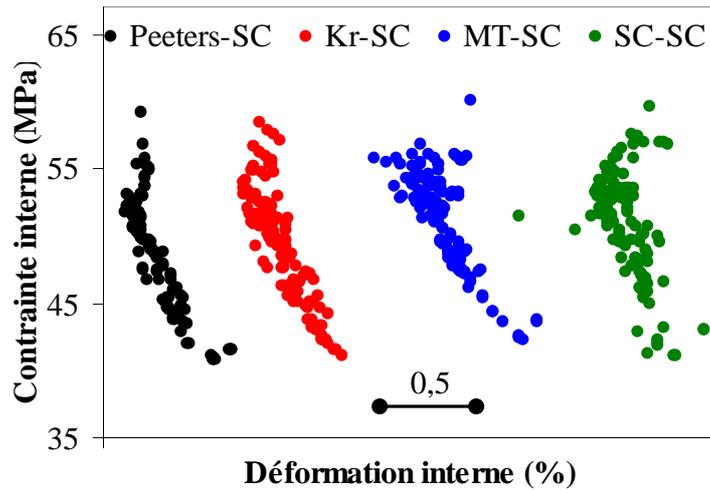


Figure AIII.2 : contraintes internes mésoscopiques longitudinales pour chaque modèle

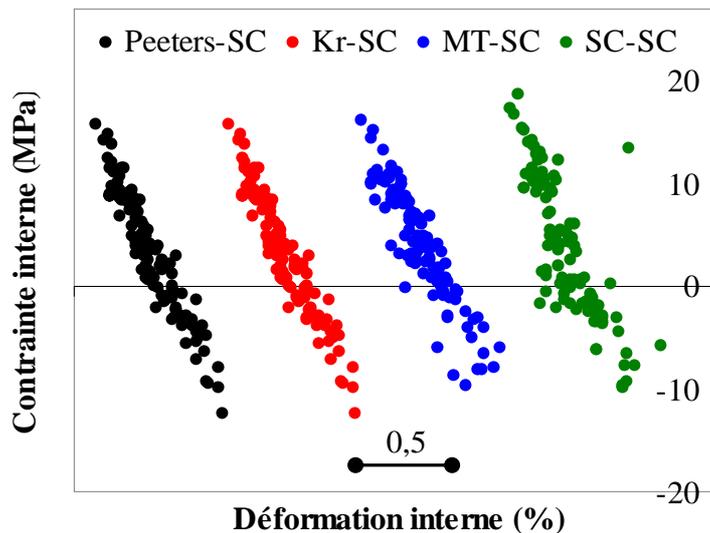


Figure AIII.3 : contraintes internes mésoscopiques transversales pour chaque modèle

Contraintes internes microscopiques

Nous avons également comparé la répartition des contraintes microscopiques au niveau des cellules et des parois pour les modèles Kr-SC, MT-SC et SC-SC (figures AIII.4 et AIII.5). Quelque soit la phase considérée, le nuage des points obtenu par le modèle MT-SC est le plus dispersé. Les contraintes internes microscopiques des cellules sont comprises entre 31 MPa et 61 MPa, celles des parois variant entre 48 MPa et 105 MPa pour le modèle MT-SC.

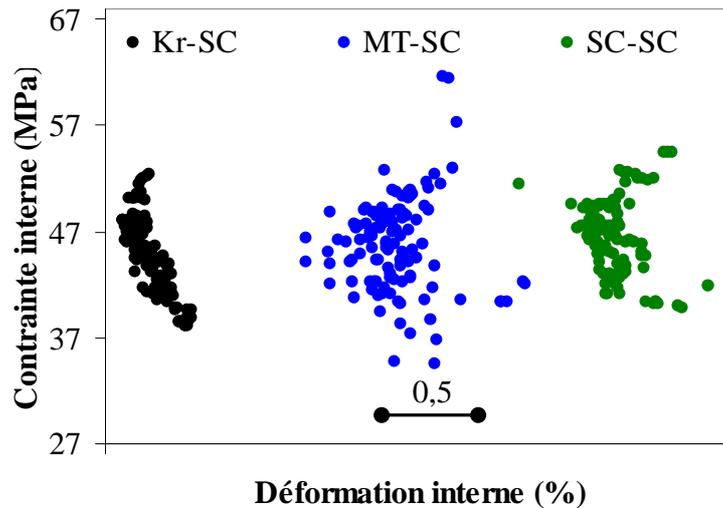


Figure AIII.4 : contraintes internes microscopiques longitudinales au niveau des cellules pour les modèles Kr-SC, MT-SC et SC-SC

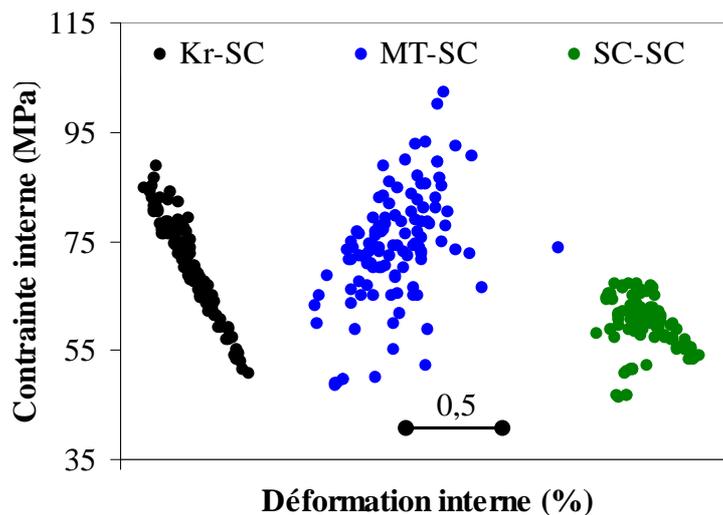


Figure AIII.5 : contraintes internes microscopiques longitudinales au niveau des parois pour les modèles Kr-SC, MT-SC et SC-SC

Bien que l'état mécanique au niveau mésoscopique soit similaire pour les différents modèles, on constate à l'échelle inférieure, des distributions très différentes d'un modèle à l'autre.

Evolution des contraintes internes

Dans ce paragraphe, nous avons testé la capacité des quatre modèles à suivre l'évolution des contraintes internes suivant trois plans cristallographiques (220), (200) et (111). Les résultats de simulations ont été comparés aux données expérimentales obtenues par diffraction des neutrons. Nous avons utilisé les mêmes résultats présentés au *paragraphe 1.3.7.5.2*. Nous précisons qu'on ne cherche pas à valider les modèles avec ces données expérimentales. Nous ne cherchons qu'à comparer les approches entre elles.

Les quatre modèles arrivent bien à reproduire, le comportement du plan cristallographique (220) (*figure AIII.6*) malgré le nombre peu important (et insuffisant) de cristallites utilisé.

La *figure AIII.7* présente l'évolution des contraintes internes suivant le plan cristallographique (200). Les quatre modèles n'arrivent pas à simuler la partie de transition et la partie plastique. Néanmoins, le modèle Kr-SC est le plus proche des résultats expérimentaux. A 0,5 % de déformation totale, l'écart relatif est de 12 % et à 3 % l'écart relatif est de 23 %. Comme nous l'avons vu au *chapitre I* (section I.3.7.5.2), ce plan pose des difficultés pour les comparaisons avec les modèles d'homogénéisation [*Clausen et al. 98*]. Nous pourrions améliorer nos résultats de simulations en optimisant les paramètres du modèle et en prenant plus de grains.

La *figure AIII.8* donne l'évolution des contraintes internes suivant le plan cristallographique (111). Comme dans le cas du plan (200), le modèle Kr-SC est le plus performant parmi les approches utilisées pour le jeu de paramètres choisi. Si on tient compte des barres d'erreur expérimentales, ce modèle arrive quasiment à reproduire l'évolution des contraintes internes du plan (111). Les approches SC-SC et MT-SC donnent les plus grands écarts avec les données expérimentales. A 3 % de déformation, l'écart relatif est de 17 % pour le modèle MT-SC.

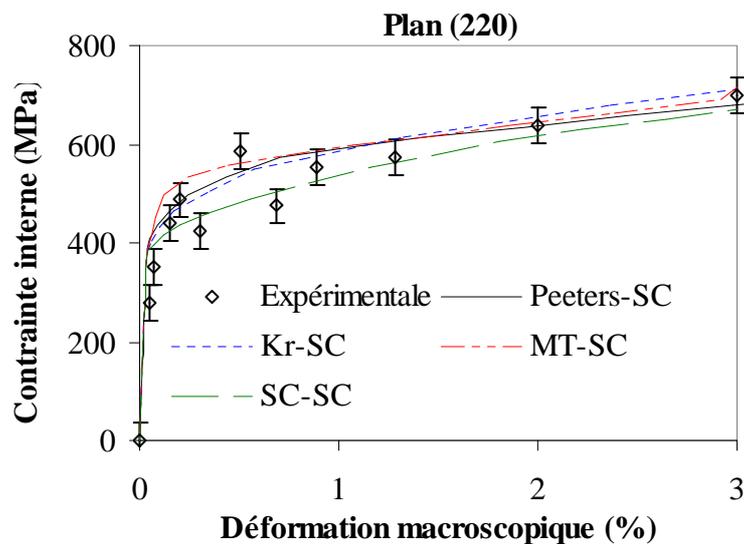


Figure AIII.6 : courbes expérimentale [Clausen et al. 98] et simulées des déformations internes élastiques pour le plan (220) en fonction de la déformation macroscopique

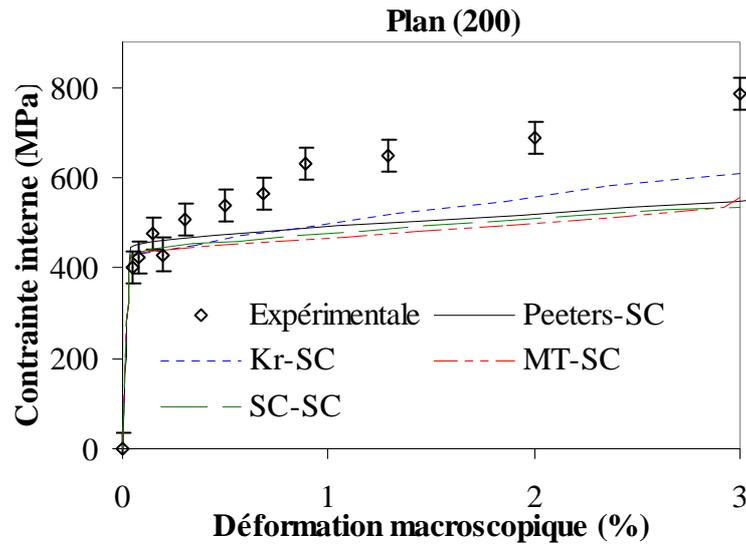


Figure AIII.7 : courbes expérimentale [Clausen et al. 98] et simulées des déformations internes élastiques pour le plan (200) en fonction de la déformation macroscopique

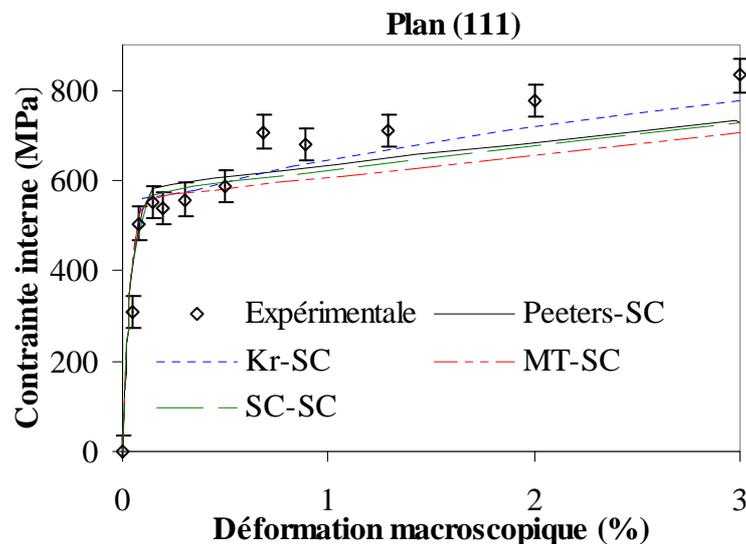


Figure AIII.8 : courbes expérimentale [Clausen et al. 98] et simulées des déformations internes élastiques pour le plan (111) en fonction de la déformation macroscopique

Discussion

Une étude comparative des approches développées durant ce travail de thèse a été effectuée. Les résultats sont satisfaisants pour les quatre modèles aux échelles macro, méso et microscopique. Les quatre modèles donnent les mêmes résultats à l'échelle macroscopique. Malgré un choix de paramètres proches, les approches à double transition d'échelles présentent une distribution des états mécaniques à l'échelle microscopique (cellules et parois) différente. Cette dispersion peut s'expliquer, d'une part, par l'écrouissage non local qui influence le comportement des cellules et des parois ainsi que celui des grains. Ce qui permet aux grains d'avoir des comportements très différents. D'autre part, cette différence s'explique par des lois de localisation différentes d'un modèle à l'autre.

L'approche Kr-SC permet d'avoir de bons résultats en terme de contraintes internes élastiques suivant les trois plans cristallographiques analysés (220), (200) et (111). Les résultats de simulations sont proches des résultats expérimentaux pour le jeu de paramètres choisi. Il sera intéressant d'optimiser nos paramètres pour voir si nos modèles arrivent à expliquer (contrairement aux approches classiques) le comportement au niveau du plan (200).

Annexe IV :

Diffraction des rayons X : erreurs géométriques

Les échantillons étudiés présentent une particularité les distinguant des échantillons couramment utilisés en analyse par DRX. Ceux-ci sont généralement considérés comme plans ou quasiment plans, or dans notre cas la courbure de la surface n'est pas sans effet sur l'intensité des pics de diffraction recueillis.

Texture

Bunge [Bunge 82] a décrit les types de corrections géométriques à réaliser sur les intensités expérimentales (géométrique, défocalisation, absorption). Il a noté que la correction géométrique pour un échantillon plan doit tenir compte de la partie du faisceau incident touchant l'échantillon. Dans le cas d'un échantillon cylindrique, la correction géométrique dépend également de sa courbure, de l'angle ψ et de l'angle de rotation azimutal. Il faut donc trouver une fonction $G(\psi, \varphi)$ qui permette de corriger l'intensité du pic de diffraction.

Nous allons reprendre ici le modèle proposé par Guillén et al. [Guillén et al. 99] de cette fonction $G(\psi, \varphi)$. Autour du point d'incidence des rayons X, on considère un élément de surface de l'échantillon dS suffisamment petit pour être considéré comme plan. Si on considère un élément de volume $dv = dS dz$ situé à une profondeur z , la distance parcourue par un rayon incident dans l'échantillon est $l_i = z / \cos \omega_i$, où ω_i représente l'angle entre un rayon incident et la normale à l'échantillon en ce point ($\omega_i < \pi/2$). De la même façon, pour le rayonnement diffracté, la distance parcourue est $l_d = z / \cos \omega_d$, où ω_d est l'angle entre la normale à l'échantillon et le rayon diffracté. Pour cet élément de volume, l'intensité émise est affectée par le facteur d'absorption $\exp[-\mu(l_i + l_d)]$, μ étant le coefficient d'absorption linéaire du matériau pour une longueur d'onde donnée du rayonnement X. Si I_0 est l'intensité du rayonnement incident dans sa section dS_i , la puissance diffractée est [Guinier 64] :

$$\begin{aligned} dP &= \left(\frac{I_0}{L_0} \right) dv \{ \exp[-\mu(l_i + l_d)] \} \\ &= \left(\frac{I_0}{L_0} \right) \cos \omega_i dS dz \{ \exp[-\mu(l_i + l_d)] \} \end{aligned} \quad (\text{AIV.1})$$

où L_0 est une constante (pour un angle de Bragg θ et une longueur d'onde λ donnés) et $dS_i = \cos \omega_i dS$.

Par intégration analytique sur toute la profondeur (z allant de 0 à ∞), on obtient la puissance diffractée par un rayon dP :

$$dP = (I_0 / L_0) \cos \omega_i dS \int_0^{\infty} dz \exp[-\mu(l_i + l_d)] \quad (\text{AIV.2})$$

Ce qui donne :

$$dP = \frac{I_0}{L_0} \frac{dS}{\mu} \frac{\cos \omega_i}{\frac{1}{\cos \omega_i} + \frac{1}{\cos \omega_d}} \quad (\text{AIV.3})$$

Avec la méthode de lancer de rayons, nous calculons la puissance diffractée totale pour une orientation (φ, ψ) donnée en additionnant numériquement la puissance diffractée par les N_r rayons formant le faisceau incident :

$$\Delta P(j) = \frac{I_0}{L_0} \frac{\Delta S}{\mu} \frac{\cos \omega_i(j)}{\frac{1}{\cos \omega_i(j)} + \frac{1}{\cos \omega_d(j)}} \quad (\text{AIV.4})$$

et

$$P = \sum_{j=1}^{N_r} \Delta P_j \quad (\text{AIV.5})$$

Comme ω_i et ω_d dépendent de ψ et φ , et comme $P = P_0 G(\psi, \varphi)$ on obtient :

$$G(\varphi, \psi) = \frac{1}{\sum m} \sum_{j=1}^{N_r} \frac{\cos \omega_i}{\frac{1}{\cos \omega_i(j)} + \frac{1}{\cos \omega_d(j)}} \quad (\text{AIV.6})$$

$\sum m$ est le coefficient de normalisation pour avoir $P_{max}=1$. D'après l'expression de $G(\psi, \varphi)$, il est évident que ce facteur dépend de l'orientation de chaque élément de surface de l'échantillon, et par conséquence de la géométrie de celui-ci.

Une surface cylindrique de rayon R_T décrite avec les coordonnées cylindriques (μ, R_T, Z_T) dans un système de référence xyz peut être définie par des coordonnées (X_T, Y_T, Z_T) (figure IV.1) :

$$C_T \begin{cases} X_T = R_T \sin \mu \\ Y_T = R_T \cos \mu - R_T \\ Z \end{cases} \quad \text{avec } \mu \in [0, 2\pi], Z_T \in \mathbb{R} \quad (\text{AIV.7})$$

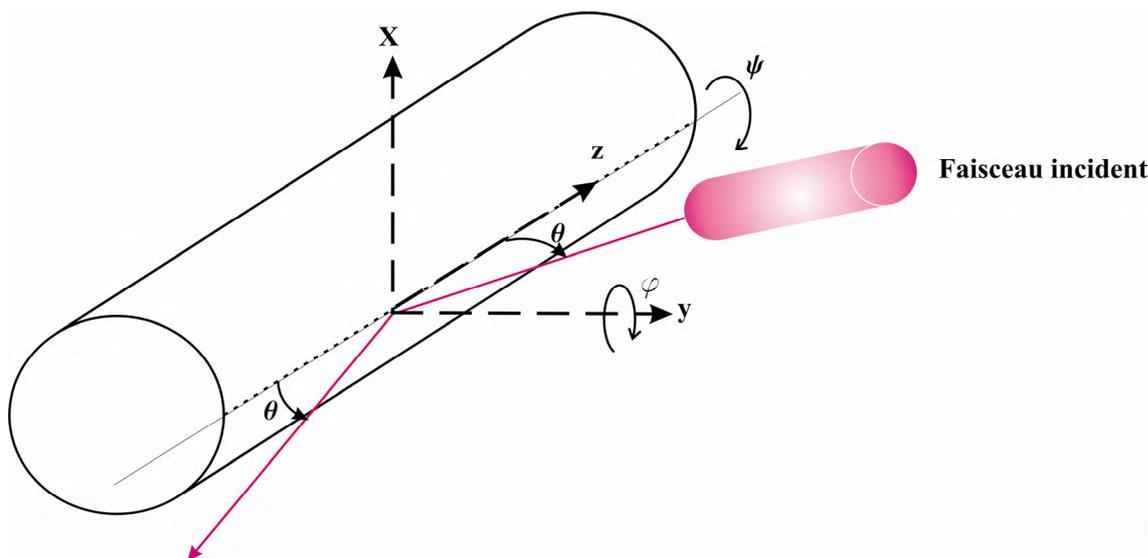


Figure AIV.1 : diffraction des rayons X sur une surface cylindrique. Cylindre en position horizontale. L'axe φ est perpendiculaire à la surface de l'échantillon. L'axe ψ se trouve dans le plan de diffraction et il est perpendiculaire à la normale de la surface du tube

Pour un angle de déclinaison ψ (l'axe ψ est dans le plan de diffraction et perpendiculaire à la normale de la surface de l'échantillon) et un angle azimutal φ (l'axe φ est parallèle à l'axe y dans la figure AIV.1), les coordonnées s'écrivent :

$$r_{\psi}r_{\varphi}C_T = \begin{cases} [R_T \sin \mu \cos \varphi - Z_T \sin \varphi] \cos \psi + [R_T \cos \mu - R_T] \sin \psi \\ -[R_T \sin \mu \cos \varphi - Z_T \sin \varphi] \sin \psi + [R_T \cos \mu - R_T] \cos \psi \\ R_T \sin \mu \sin \varphi + Z_T \cos \varphi \end{cases} \quad (\text{AIV.8})$$

r_{ψ} et r_{φ} sont les matrices de rotation pour ψ et φ .

Le faisceau de rayons X est également assimilé à un cylindre, composé d'un ensemble de rayons, décrit chacun comme un droite d'équation :

$$C_F = \begin{cases} X_F \\ Y_F \\ Z_F \end{cases} \text{ avec } -R_F < X_F < R_F, -R_F < Z_F < R_F \text{ et } X_F^2 + Z_F^2 < R_F^2 \quad (\text{AIV.9})$$

R_F étant le rayon du faisceau au centre du goniomètre. Comme le faisceau est incliné d'un angle θ par rapport à l'axe (OZ), l'équation d'un rayon X devient alors :

$$r_{\theta}C_F = \begin{cases} X_F \\ Y_F \cos \theta + Z_F \sin \theta \\ -Y_F \sin \theta + Z_F \cos \theta \end{cases} \quad (\text{AIV.10})$$

où r_{θ} est la matrice de rotation pour l'angle θ .

Le point d'impact d'un rayon X sur le cylindre est déterminé par la résolution du système :

$$r_{\psi} r_{\varphi} C_T = r_{\theta} C_F \quad (\text{AIV.11})$$

Pour déterminer les coefficients de correction il faut également savoir si le rayon incident est diffracté. Pour que cela soit vérifié, l'angle ω_d doit être inférieur à $\pi/2$. Un rayon donné n'est pris en compte dans le calcul des coefficients qu'après avoir vérifié l'inéquation $\omega_d > 0$, avec :

$$\cos \omega_d = [-\sin \mu \cos \varphi \sin \psi + \cos \mu \cos \psi] \sin \theta - \sin \mu \sin \varphi \cos \theta \quad (\text{AIV.12})$$

Tenant compte de l'ensemble des rayons du faisceau, nous obtenons les coefficients de correction pour chaque direction (ψ, φ) .

Pour obtenir un résultat stable, et en tenant compte de nos conditions expérimentales, diamètre du faisceau incident au centre du goniomètre (1mm), le nombre minimal de rayons à considérer est de $N_r = 10000$. Les coefficients obtenus sont normalisés pour avoir une intensité maximale égale à 1.

Il est à noter que cette correction géométrique présente un renforcement trop important de l'intensité dans les zones extérieures (valeurs élevées de ψ) [Guillén 98]. C'est pour cela que nous avons appliqué les valeurs pour $\psi = 0^\circ$ (figure AIV.2) à toutes les valeurs d'inclinaison.

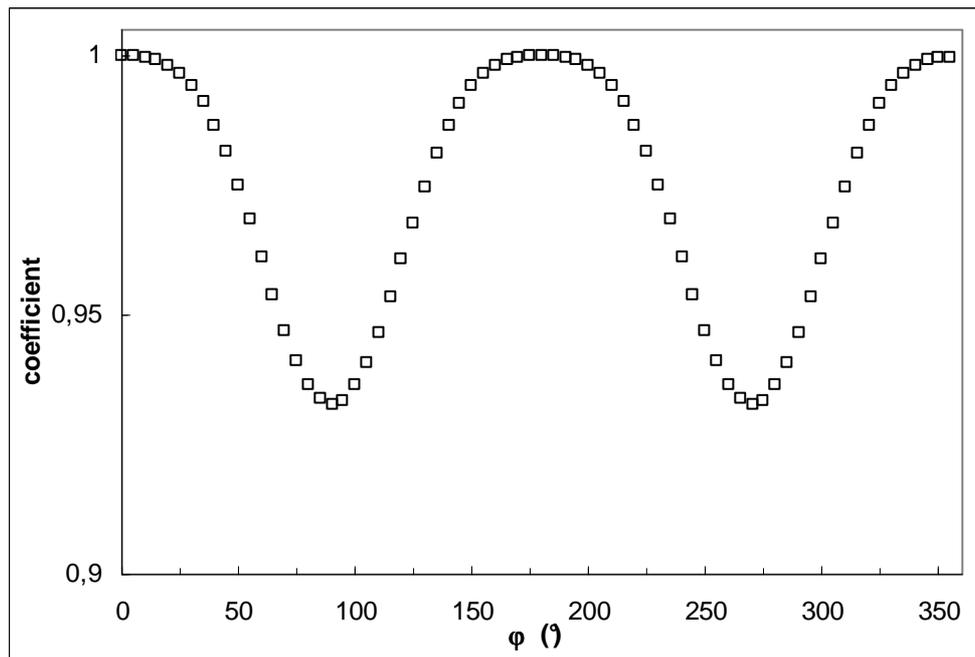


Figure AIV.2 : évolution du coefficient de correction géométrique en fonction de l'angle φ pour $\psi = 0^\circ$ pour les plans (111) (rayon du cylindre de 10 mm)

Résumé

Du fait de l'optimisation des structures, la mise en forme des matériaux nécessite des trajets de chargements dits complexes avec une sollicitation pouvant évoluer continûment lors du chargement. Ces processus, très contraignants pour le matériau, sont limités par l'apparition et le développement d'instabilités plastiques et/ou d'endommagement. Les approches mécaniques déductives basées sur des transitions d'échelles constituent des outils de compréhension pertinents. Nous avons développé des modèles à double transition d'échelles (de la cellule au grain et du grain au polycristal) qui ont permis de rendre compte du comportement réel des matériaux lors de chargements complexes (effet Bauschinger). Cette double transition d'échelles a été assurée par plusieurs types de schémas : autocohérent, Kröner ou Mori-Tanaka. L'hétérogénéisation intragranulaire est mise en évidence par un écrouissage non local, qui est représenté dans le cas d'une description biphasée de la structure cellulaire de dislocations. Des résultats numériques et expérimentaux (essais mécaniques, diffraction des rayons X) satisfaisants ont été obtenus sur des matériaux de symétrie cubique (Al6060 et acier 316L).

Mots Clé

Essais mécaniques, diffraction des rayons X, plasticité, transition d'échelles, dislocations, écrouissage non local.

Abstract

Metal forming may often involve intense forming sequences, leading to large strains and severe strain path changes. These processes, very constraining for material, are limited by the appearance and the development of plastic instabilities and/or damage. Deductive methods based on strain mechanisms and scale transitions constitute relevant tools for a better comprehension. Two-level homogenization approaches are developed for the micromechanical modelling of the elastoplastic material behaviour. At the microscopic level, the mechanical behaviour is described by different scale transition models like self-consistent, Kröner or Mori-Tanaka. The grain is considered as a two-phase material: dislocations walls (with high density dislocation) and cells (with low density dislocation). The intragranular heterogeneities are highlighted by a non-local work-hardening, which is linked to the two-phase description. Correct agreement is observed between simulations and experiments (X-ray diffraction, mechanical tests) results at the meso and macroscopic levels.

Keywords

Mechanical tests, X-ray diffraction, plasticity, scale transition models, dislocations, non-local work-hardening.