



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



**INSTITUT SUPERIEUR DE GENIE MECANIQUE
ET PRODUCTIQUE**

THESE

Présentée à



UNIVERSITE DE METZ

PAR

Denis MULLER

**Pour l'obtention du grade de :
DOCTEUR de L'UNIVERSITÉ de METZ**

SPECIALITE : SCIENCES DE L'INGENIEUR

OPTION : MECANIQUE

**INFLUENCE DE L'ECROUISSAGE NON LOCAL
ET DE L'HETEROGENEISATION INTRAGRANULAIRE
SUR LE COMPORTEMENT DES ACIERS POLYCRISTALLINS**

Soutenue le 17 juin 1994 devant la commission d'examen :

M. M. Berveiller, Directeur de thèse

M. S. Heurtault

M. J. Kratochvil

M. E. Kröner

M. M. Potier-Ferry

M. J.H. Schmitt, Rapporteur

M.

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ



022 420470 1

-Laboratoire de Mécanique et Technologie des Matériaux URA CNRS 1215 -
Ile du Saulcy, 57045 Metz Cedex 01

VB 80400

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE
Section Technopole
Rue Marconi
57070 METZ

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE TECHNOPOLE - METZ -	
No Inv	19940785
Cote	S/MZ 94/26
Loc.	Magasin
Cat	OCLC

Table des Matières

<u>Notations</u>	5
I - <u>Introduction</u>	6
II - <u>Microstructures de dislocations</u>	13
1) Introduction.....	13
2) Microstructures de dislocations.....	15
2.1 Arrangement cellulaire de dislocations.....	15
2.2 Microbandes.....	20
2.3 Bandes de glissement persistantes.....	21
3) Structure cellulaire de dislocations.....	23
3.1 Mécanismes à l'échelle des dislocations.....	23
3.2 Evolution de la topologie cellulaire.....	29
3.3 Modélisations.....	33
4) Conclusions.....	35
III - <u>Loi de comportement non locale dans le monocristal</u>	37
1) Introduction.....	37
2) Ecouissage "isotrope" non local.....	38
2.1 Matrice d'écrouissage locale.....	41
2.2 Matrice d'écrouissage non locale.....	43
2.3 Cas du biphasé.....	44
3) Loi de comportement élastoplastique non locale.....	52
3.1 Aspects formels.....	52
3.2 Application au biphasé.....	52
4) Conclusions.....	59

IV - <u>Transitions d'échelle et localisations</u>	60
1) Introduction.....	60
2) Transition d'échelle micro-méso.....	61
2.1 Equation intégrale non locale pour le monocristal.....	61
2.1.1 Mise en oeuvre.....	61
2.1.2 Résolution formelle.....	66
2.1.3 Discussion.....	67
2.2 Approximation autocohérente pour le grain biphasé non local....	69
2.2.1 Introduction.....	69
2.2.2 Approximation autocohérente.....	71
2.2.3 Cas d'un biphasé non local isotrope et incompressible....	75
2.2.4 Conclusions.....	76
2.3 Application du formalisme d'inclusion enrobée au cas tangent élastoplastique non local.....	77
2.3.1 Introduction.....	77
2.3.2 Equation cinétique de localisation.....	78
2.3.3 Propriétés interfaciales de l'inclusion enrobée.....	79
2.3.4 Cas d'un biphasé non local isotrope et incompressible....	83
2.3.5 Conclusions.....	84
3) Cas du polycristal - Applications.....	84
3.1 Transition d'échelle méso - macro.....	84
3.2 Résultats.....	88
3.2.1 Hypothèses de travail.....	88
3.2.2 Représentation des effets d'ordre trois.....	90
3.2.3 Hétérogénéisation intragranulaire.....	95
4) Conclusions.....	98

V - <u>Approche globale biphasée non locale</u>	100
---	-----

Partie 1

1) Introduction.....	100
2) Loi de comportement du cristal biphasé non local.....	102
2.1 Approche énergétique.....	102
2.2 Application du modèle de Kröner au cas biphasé.....	106
2.2.1 Expression des contraintes internes.....	106
2.2.2 Ecriture du potentiel énergie libre.....	109
2.3 Description périodique de la structure cellulaire.....	110
2.3.1 Introduction.....	110
2.3.2 Expression des contraintes internes.....	111
2.3.3 Ecriture du potentiel énergie libre.....	117
2.3.4 Comparaison entre les deux approches.....	118
2.4 Loi de comportement non locale pour le monocristal.....	122
2.4.1 Discussion - Modèle partiel.....	122
2.4.2 Loi de comportement non locale.....	126

Partie 2

3) Applications au polycristal.....	130
3.1 Introduction.....	130
3.2 Etude paramétrique.....	131
3.2.1 Influence du formalisme utilisé.....	136
3.2.2 Influence de la forme des cellules.....	141
3.2.3 Influence de la texture cristallographique initiale.....	146
3.2.4 Influence des paramètres d'écrouissage.....	147
3.2.5 Influence de la fraction volumique de cellules.....	149
3.2.6 Synthèse.....	152
3.3 Trajets complexes.....	153
3.3.1 Essais de Traction-Compression.....	154
3.3.2 Séquence Double Réduction + Traction (ou Rétreint)...	158
3.3.3 Surfaces de plasticité après prédéformation.....	160
3.4 Application du formalisme non local à l'évaluation des contraintes internes.....	165
3.4.1 Evaluation des contraintes résiduelles d'ordre deux....	165
3.4.2 Obtention de raies de diffraction.....	173
4) Conclusions.....	177

VI - <u>Conclusions</u>	179
<u>Bibliographie</u>	182
<u>Annexes</u>	192
A1 Critère phénoménologique de projection des cellules sur le plan de glissement le plus actif d'un grain.....	192
A2 Détail des résultats de simulation.....	194
A3 Application du schéma non local à l'étude des contraintes résiduelles d'ordre deux par diffraction.....	210
A4 Application du schéma non local à l'obtention de raies de diffraction.....	212

Notations

* $A_{ij} B_{jk} \cong \sum_j A_{ij} B_{jk}$ (notation d'Einstein)

* $A : B$ (produit contracté de tenseurs)
 $= A_{ijkl} B_{klmn}$ si A et B sont des tenseurs symétriques d'ordre 4

* $\vec{n} \cdot \vec{m} = n_i m_i$ (produit scalaire de vecteurs)

* $A_{i(j)} B_{(j)k}$ (indice j non affecté par la sommation implicite)

Introduction

I - Introduction

L'utilisation courante des matériaux, lorsqu'ils servent à générer des structures abouties dites de consommation (automobiles, cuillères à café, manches à balai, ...), correspond généralement à un comportement de type élastique, réversible, accompagné suivant le cas de contraintes comme la tenue en fatigue ou à la corrosion.

Toutefois, l'obtention de la géométrie d'une structure fait intervenir d'autres propriétés des matériaux, en particulier les capacités d'écoulement plastique et viscoplastique.

Des matériaux comme les polymères ou les composites à matrice polymère présentent ainsi la propriété de pouvoir être amenés à la forme désirée lors de la conception par moulage (à chaud, sous pression).

Les métaux, en plus de la possibilité de moulage (en cas de parois d'épaisseurs intermédiaires), peuvent être mis en forme par forgeage (pour les objets volumiques) ou encore permettent de générer des structures tridimensionnelles à parois fines par pliage ou emboutissage, ce qui conduit à de grandes déformations plastiques.

Du fait des contraintes représentées par exemple par l'optimisation des structures ou leur esthétique, la forme désirée devient de plus en plus compliquée (carter d'huile de boîte de vitesse, boîte de conserve expansée, portière de voiture...). Le matériau subit alors des trajets dits complexes, la sollicitation pouvant évoluer continûment lors du chargement (emboutissage d'un godet). Un cas particulier correspond au trajet séquentiel, dans le cas où le procédé de mise en forme nécessite des reprises (cas des boîtes boisson où est opérée la séquence emboutissage-repassage).

Ces processus, très contraignants pour le matériau, sont limités par l'apparition et le développement d'instabilités plastiques et(ou) d'endommagement.

L'étude du comportement des métaux dans ces conditions est alors essentielle pour la compréhension et la maîtrise des phénomènes physiques en jeu, avec pour objectif une constante amélioration de la qualité des produits finis (rapports résistance/prix, résistance/poids...).

Des progrès considérables ont été réalisés dans les domaines informatique (augmentation de la puissance des ordinateurs au moyen d'augmentation de capacité mémoire ou de vitesse d'horloge, par structuration parallèle) et numérique (algorithmes de calcul). Ils sont responsables de l'ampleur prise par le calcul de structures à l'aide de la méthode des éléments finis et permettent maintenant d'utiliser des lois de comportement des matériaux très précises afin d'affronter des problèmes réels.

A ce niveau, deux familles apparaissent : les approches macroscopiques dites phénoménologiques et les méthodes basées sur une (ou des) transition(s) d'échelle.

Les modèles phénoménologiques sont adaptés à décrire le comportement élastoplastique des métaux, mais nécessitent de nombreuses identifications expérimentales, qui déterminent leur domaine de validité. Ainsi ces modèles ne peuvent prédire de façon fiable le comportement d'un matériau pour une situation de chargement n'ayant pas été prise en compte lors de la phase préliminaire d'identification, ce qui limite leur usage.

Une autre approche consiste à ne pas décrire le matériau à partir de considérations macroscopiques, mais à décrire son comportement, élastoplastique par exemple, à partir de phénomènes physiques essentiels, définis à une échelle plus petite. Ce type d'approche, plus riche que la précédente, évite le recours

systematique à l'identification de paramètres macroscopiques et peut permettre, en plus d'une meilleure description du comportement pour une microstructure donnée, de résoudre des problèmes inverses d'optimisation de la microstructure pour obtenir un comportement macroscopique donné. Par exemple, la prédiction de l'influence de la microprécipitation (état de cohérence, fraction volumique des précipités) sur la réponse mécanique peut faciliter la tâche de conception des matériaux par les métallurgistes.

Du fait de la géométrie bien définie des grains dans le cas polycristallin (présence de joints de grain créés lors du processus de recristallisation) ainsi que de l'anisotropie remarquable des phénomènes de plasticité intracristalline, le choix de l'échelle de départ pour ces méthodes à transition d'échelle s'est rapidement porté sur le niveau mésoscopique (échelle des grains) dans le cadre de la plasticité cristalline, basée sur une description uniforme du comportement des grains (glissement multiple homogène).

Ainsi ont vu le jour successivement les modèles de Sachs [S28], Taylor [T38], puis les différentes modifications du modèle de Taylor, l'extension de Lin [L57]. En vue d'obtenir une évaluation réaliste des contraintes internes dans le polycristal déformé élastoplastiquement en petites déformations s'est ouverte une voie nouvelle avec les modèles autocohérents, inaugurée par Kröner [K58, K61] et poursuivie ultérieurement dans [H65, BZ81]. Cette démarche a été étendue au cas des grandes transformations élastoplastiques [LKB92]. Le schéma autocohérent s'est révélé être un outil puissant et performant d'un point de vue numérique [LB89]. Ainsi, il a été utilisé avec succès pour décrire des trajets de chargement complexe (évolution de la texture lors de la séquence emboutissage-repassage à partir d'un état laminé initial, comparaison des limites d'écoulement en traction du matériau résultant avec l'expérience [R94], évolution de l'anisotropie des surfaces de plasticité prédites après prédéformation [LKB92])

ou encore intégré dans un code de calcul par éléments finis [S94]. De plus, le code de calcul polycristallin **CRYSTAL 1.0**, basé sur ce schéma autocohérent, a fait l'objet d'un transfert vers l'industrie sidérurgique [S94].

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

De même, si la comparaison qualitative des résultats fournis par une telle approche est cohérente avec l'expérience pour les trajets complexes, il n'en est pas de même en ce qui concerne la comparaison quantitative directe.

Un exemple de ces carences est constaté au travers de l'effet Bauschinger, observé lors de séquences inversées comme la traction-compression. Celui-ci est sous-estimé lors de l'utilisation d'un schéma autocohérent basé sur un comportement intragranulaire uniforme, du fait du faible niveau des contraintes internes induites dans ce cas (contraintes d'ordre deux, différentes de grain à grain) [MLBK93].

Ces divergences résultent d'une description imparfaite du comportement intracristallin, la plupart des phénomènes microstructuraux étant noyés dans une telle représentation en moyenne, adoptée par souci de simplification.

Un moyen de pallier ces déficiences est d'introduire des solutions phénoménologiques, éprouvées à l'échelle macroscopique [LC88], au niveau des grains [LPC92].

Néanmoins ce type de stratégie possède les mêmes défauts que les développements classiques à l'échelle macroscopique, ne prenant pas en compte la réalité physique de la plasticité intracristalline.

En fait, la particularité du comportement du cristal, non introduite dans les développements cités plus haut, provient du phénomène d'hétérogénéisation intragranulaire, caractérisé par la mise en place progressive d'un arrangement hétérogène des dislocations. Ce phénomène contribue à introduire une anisotropie prononcée du matériau qui se superpose à celle introduite par l'aspect granulaire du polycristal [BB87] et induit un champ de contraintes élevé à l'échelle microscopique de l'arrangement des dislocations (contraintes dites d'ordre trois) intragranulaire. Cette anisotropie, qui s'ajoute à la texture cristallographique du polycristal [L94], est responsable des éventuelles instabilités plastiques survenant dans des conditions "dures" de chargement.

L'enjeu de ce travail est une meilleure compréhension de ce phénomène d'hétérogénéisation intragranulaire qui permette, à partir d'une description micromécanique à l'échelle des glissements cristallographiques, d'obtenir une loi de comportement du monocristal apte à en traduire les conséquences mécaniques.

L'état interne du matériau (structure cristallographique, niveau de précipitation, taille des grains) est un paramètre déterminant pour l'initiation d'un arrangement ordonné des dislocations.

Le chapitre II est consacré à une présentation synthétique, non exhaustive, de différentes microstructures de dislocations caractéristiques des métaux et de leur évolution topologique au cours de la déformation plastique. Un phénomène essentiel de la structuration intragranulaire, l'écroûissage non local, est mis en évidence. De plus, une revue des modèles décrivant ces microstructures de dislocations permet de définir un cadre de modélisation adapté à la plasticité cristalline.

La nature non locale des mécanismes en jeu lors de l'hétérogénéisation intragranulaire conduit à l'introduction d'un formalisme intégral non local,

traduit en termes micromécaniques au travers d'une matrice d'écroutissage non locale, qui aboutit à l'écriture de la loi de comportement non locale en tout point du grain.

L'application à une description biphasée de la microstructure de dislocations, du fait des fortes hétérogénéités présentes, permet d'obtenir une expression explicite de cette matrice d'interaction, par l'intermédiaire de l'analyse du stockage et de l'annihilation des dislocations. Cette démarche conduit à l'écriture d'une loi de comportement non local pour le grain composite.

Ceci fait l'objet du chapitre III.

Le comportement du milieu intracristallin étant défini en tout point, il est nécessaire, pour déterminer le comportement élastoplastique global du grain, supposé local en moyenne, d'effectuer une transition d'échelle. A cet effet, une équation intégrale cinématique, possédant des propriétés non locales particulières du fait de la non localité du comportement, est mise en œuvre dans le chapitre IV.

Elle est appliquée au cas biphasé, tout d'abord à partir d'un schéma autocohérent, puis, afin de prendre en compte de façon plus précise les effets topologiques caractéristiques de la microstructure, à partir du problème de l'inclusion enrobée adapté au cas élastoplastique non local.

La transition d'échelle ultérieure, du grain au polycristal, est mise en œuvre par l'intermédiaire d'un schéma autocohérent classique [LB89] et permet de présenter des applications numériques pour le polycristal.

La connaissance imparfaite de la matrice d'écroutissage non locale restreint l'utilisation de la démarche développée dans le chapitre IV, l'évolution de la topologie microstructurale ne pouvant être prise en compte sans recourir à des critères phénoménologiques.

Dans le chapitre V, une approche énergétique de l'hétérogénéisation intragranulaire est donc proposée pour le cas biphasé, bien adapté du fait du faible nombre de variables internes. Dans ce travail, un modèle partiel est mis en œuvre, à partir de considérations topologiques relatives à la microstructure de dislocations. Il permet d'obtenir de nombreux résultats au niveau du polycristal, qui mettent en évidence les effets d'ordre trois et leurs conséquences mécaniques.

Chapitre II

II - Microstructures de dislocations

1) Introduction

Un matériau cristallin non déformé, à l'état recuit, présente lors d'une observation par microscopie électronique en transmission, une répartition homogène des défauts, en particulier des dislocations, sur les plans denses du réseau, appelés plans de glissement et spécifiques à la structure cristalline du matériau (cubique centrée, cubique à faces centrées, hexagonale compacte, ...), qu'il s'agisse d'un cas monocristallin ou polycristallin.

Au cours de la déformation plastique, cette distribution aléatoire tend vers un arrangement organisé, caractérisé par une répartition hétérogène des dislocations sur les plans de glissement.

De par cet effet de structuration progressive, ce phénomène, restreint au domaine du grain pendant la quasi-totalité de la déformation plastique, peut être qualifié d'hétérogénéisation intragranulaire.

De nombreuses études ont été menées, tant d'un point de vue théorique qu'expérimental, afin de comprendre les mécanismes de l'hétérogénéisation intragranulaire et de son influence sur le comportement macroscopique.

Plusieurs facteurs influencent la structuration du matériau.

Dans le cas des métaux à structure c.c, une température de transition existe, liée à la mobilité des dislocations, qui détermine la mise en place d'une structure cellulaire de dislocations. D'autre part, la taille de grain conditionne la complexité de l'agencement cellulaire se mettant en place:

- Pour les petits grains, un arrangement caractéristique des trajets monotones, dans le cas de taux de déformation faible à moyenne ($\epsilon < 30\%$), est constitué par les structures cellulaires de dislocations qui correspondent à une structuration du milieu en zones à faible densité de dislocations (l'intérieur des cellules) et en zones à forte densité de dislocations (les murs ou parois). Cette structure présente, sous certaines conditions, un aspect cristallographique.

- Pour les gros grains, on observe une subdivision du domaine intragranulaire en sous-domaines, délimités par des parois denses de dislocations, au sein desquels se développe une structure cellulaire de dislocations classique.

En général, les structures cellulaires n'induisent pas de localisation prononcée de la déformation plastique, mais contribuent à introduire une anisotropie microstructurale forte (notion de texture de la microstructure), qui constitue l'histoire du matériau en cas de changement de trajet de déformation ultérieur.

Pour les plus grandes déformations ou dans le cas de chargements complexes, un autre type de microstructure, dont les mécanismes de mise en place et d'évolution sont différents du problème de la structure cellulaire, peut se mettre en place. Ce sont les microbandes, qui font intervenir une forte localisation de la déformation plastique sous forme de glissement simple dans les microbandes.

- Dans le cas particulier de trajets cycliques (comme la fatigue oligocyclique par exemple), une structure similaire aux microbandes décrites plus haut se met en place : ce sont les bandes de glissement persistantes, où l'activité plastique est localisée dans des canaux, le reste du matériau ne participant pas à la déformation.

Ce travail correspondant à une première tentative de description de l'hétérogénéisation intragranulaire dans le cas polycristallin, à l'aide d'outils micromécaniques, la structure cellulaire y est étudiée plus en détail.

Ainsi, une analyse de résultats expérimentaux obtenus à une échelle fine, en vue de décrire le comportement individuel des dislocations dans la structure cellulaire, est effectuée au niveau des mécanismes de mouvement et de stockage des dislocations. Elle met en évidence un phénomène d'écroûissage non local dans les parois permettant de décrire l'hétérogénéisation intragranulaire.

D'autre part, l'évolution de la structure cellulaire de dislocations dans sa globalité a été observée au travers de plusieurs études expérimentales ; elle présente ainsi une forte dépendance topologique en fonction du trajet de déformation imposé (trajet monotone ou complexe).

Enfin, différentes modélisations existantes de la mise en place et de l'évolution de cette structure cellulaire sont brièvement rappelées et discutées. A la lumière de ces informations, un cadre de modélisation physiquement réaliste et mathématiquement correct est proposé.

2) Microstructures de dislocations

2.1 Arrangement cellulaire de dislocations

Après le recuit, un matériau cristallin constitue un milieu homogène (hormis les désorientations cristallines de grain à grain dans le cas du polycristal), caractérisé par une distribution aléatoire du faible nombre de défauts qui n'auraient pas disparu au cours du traitement thermique (lacunes, intersticiels, dislocations...), cf figure II.1 et planche II.1.



Planche II.1 : Absence de structure cellulaire de dislocations sur un acier SOLLAC (nuance E vieillie 10 jours à 42°C puis skin-passée à un taux de 1.5%) - Structure à coeur de la tôle donc très faiblement déformée - Présence de précipités de très petite taille destinés à piéger les dislocations au cours de la déformation plastique ultérieure.

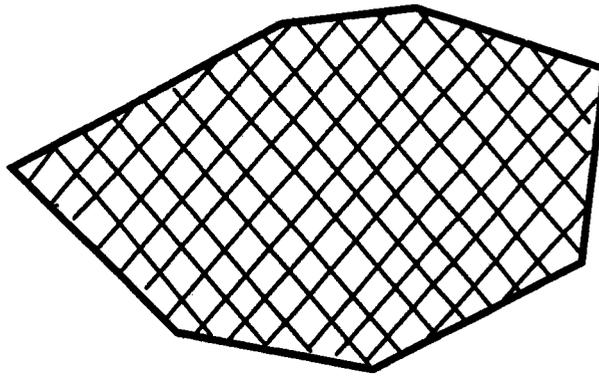


Figure II.1 : Systèmes de glissement dans un grain homogène

Lorsqu'un tel matériau est soumis à un chargement, une activité plastique se met rapidement en place ; elle est caractérisée par le mouvement de dislocations sur les plans de glissement du cristal. Initialement un faible nombre de sources (de type Frank et Read) produit un grand nombre de dislocations mobiles [MM84a, MM84b] appelées dislocations primaires, sur le système principalement activé. Les barrières déjà existantes (défauts ponctuels n'ayant pas été éliminés par le recuit, ou d'autres dislocations mobiles) gênent la propagation des dislocations [LS83], les dislocations primaires et secondaires (provenant de systèmes moins actifs) pouvant se déplacer librement seulement dans des zones non perturbées par la présence d'obstacles.

Les métaux à structure cubique centrée (c.c.) possèdent une température de transition déterminante pour l'initiation d'une structure cellulaire. Ainsi Lan et al. [LKD92] n'observent pas de réelle formation d'une structure cellulaire avant la striction lors d'un essai de traction sur un acier à 173K, alors qu'une structure cellulaire se forme très rapidement lorsque l'essai est répété à 293K.

De même, Tabata et al. [TMFI76] constatent que le libre parcours moyen des dislocations ne décroît pas de façon abrupte avec la déformation plastique dans le cas de monocristaux [110] de tungstène (c.c.) déformé à température ambiante, ce

comportement étant comparable à celui de l'acier à basse température, pour lequel on n'observe pas de structuration.

Ce phénomène est lié à la très faible mobilité des dislocations vis par rapport aux dislocations coins à basse température [L91, LKD92, EM79, TYF78]. Au-dessus de la température de transition, les mobilités des deux familles de dislocations deviennent comparables, du fait de l'activation thermique. Ceci entraîne la mise en place d'arrangements ordonnés de dislocations, comme dans le cas des métaux à structure cubique à faces centrées (c.f.c.), la restauration dynamique étant facilitée. La présence de précipités ou de solutés dans le matériau a des conséquences sur la température de transition [L91,H93].

Ces obstacles, véritables points d'ancrage des dislocations, deviennent, pour les c.f.c ou les c.c au-dessus de leur température de transition, les nœuds élémentaires de la microstructure encore embryonnaire qui se met en place ($\epsilon \approx 1\%$). Ils peuvent éventuellement se rejoindre quand la déformation plastique progresse ($\epsilon \approx 5\%$) [LKD92], du fait de l'enchevêtrement des dislocations mobiles dans la forêt de dislocations figées par rapport au réseau, entourant les obstacles. Une étude fine par microscopie en transmission montre tout de même de légers mouvements de ces dislocations forêt quand les dislocations mobiles viennent s'empêtrer dans l'écheveau constituant ces zones à forte densité de dislocations, du fait des interactions entre ces deux familles de défauts [TFHM82].

Une évolution continue s'opère donc, de la répartition homogène des dislocations sur les plans de glissement, aux tous premiers instants de la déformation plastique, sans présence de paroi ni de structure ordonnée à grande échelle, jusqu'à la mise en place de zones riches en dislocations, positionnées de façon privilégiée en couches sur un plan de glissement [ERW68], cf planches II.2 et II.3. Ces zones à grande densité de dislocations, appelées parois ou murs de dislocations, délimitent des cellules du matériau dans lesquelles la densité de

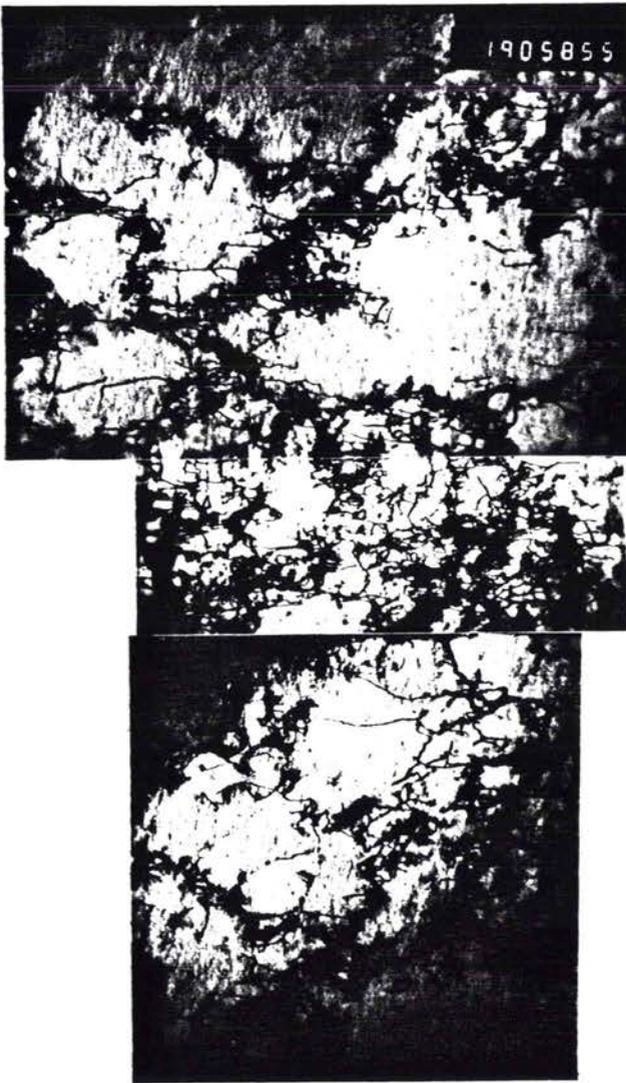


Planche II.2

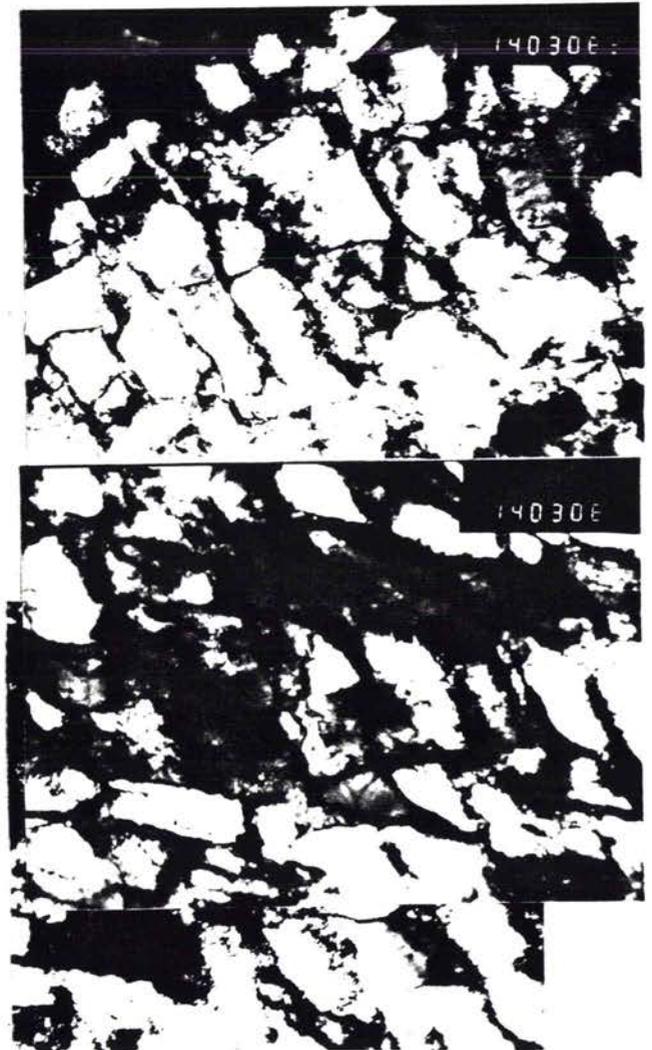


Planche II.3

Planche II.2 : Formation d'une structure cellulaire de dislocations - Acier SOLLAC id planche V.1 (+ traitement thermique 170°C / 20mns et skin-pass de 2%) - Structure observée à la surface de la tôle donc plus déformée que dans le cas de la planche V.1

Planche II.3 : Initiation d'une structure cellulaire de dislocations après une faible prédéformation en traction - Acier SOLLAC - On décèle un début d'organisation.

s'alignent d'elles-mêmes dans certaines directions cristallographiques [LKD92, FS83], suivant les systèmes actifs.

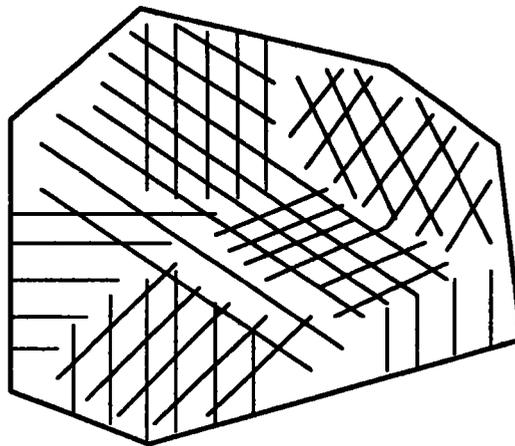


Figure II.2: Activité plastique différente dans les sous-domaines

La taille des grains a des conséquences sur la structuration du milieu intracristallin, la déformation semblant plus hétérogène pour des grains de grande taille ($\approx 100 \mu\text{m}$) que pour des petits grains ($\ll 50 \mu\text{m}$), cf Figure II.2, d'où la formation d'une simple structure cellulaire de dislocations dans le cas de petits grains, et la subdivision du grain en sous-domaines pour les grains de taille plus importante [R88, H90, FS83], comme cela est représenté schématiquement sur la figure II.3:

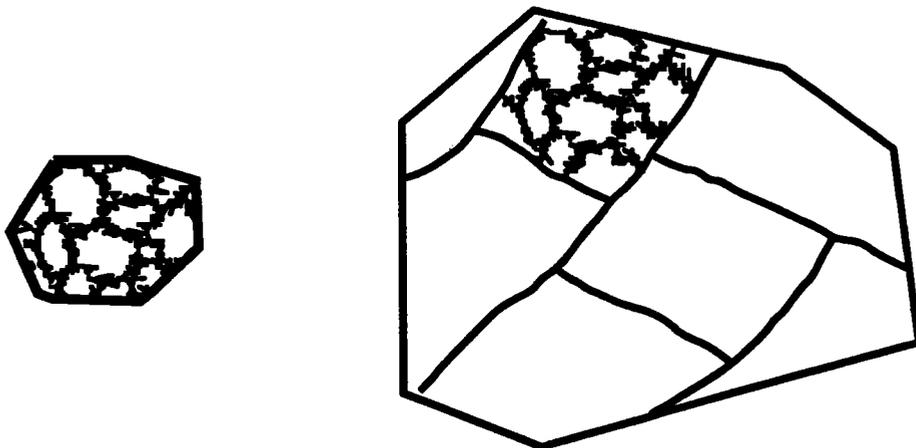


Figure II.3 : Influence de la taille de grain sur l'hétérogénéisation intragranulaire

Remarque : L'effet de taille de grain est confirmé par la comparaison de différentes données expérimentales de la littérature:

- Cas de subdivision du grain en sous domaines

+ Hughes et Nix	taille de grain	≈ de 50 à 100 μm
+ Hansen	taille de grain	≈ de 100 μm à 1 mm
+ Essmann, Rapp et Wilkens	taille de grain	≈ 50 μm .

- Cas de formation d'une simple structure cellulaire en trajet monotone

+ Fernandes et Schmitt	taille de grain	≈ 15 μm
+ Rauch et Schmitt	taille de grain	≈ 20 μm
+ Thuillier	taille de grain	≈ 10 et 25 μm .

Des phénomènes plus compliqués de structuration du milieu intragranulaire sont observés, en particulier dans le cas des matériaux à structure c.f.c. polycristallins (seules données expérimentales disponibles). Au début de la déformation plastique, un phénomène d'hétérogénéisation, du même type que celui décrit précédemment, se met en place, avec formation de strates riches en dislocations sur les plans de glissement primaires. Puis le grain se sépare en sous-domaines au sein desquels peu de systèmes sont actifs sur des plans particuliers à chaque sous-domaine, la déformation y semblant homogène avec formation d'une structure cellulaire très similaire au cas du monocristal [ERW68, H90].

Des dislocations s'entassent aux frontières entre sous-domaines, elles accommodent nécessairement la désorientation entre régions, causée par les activités plastiques différentes (cf Figure II.2), qui est de l'ordre de quelques degrés [H90] ; ce sont les parois denses de dislocations, parallèles aux plans (111). Pour les plus grandes déformations plastiques, les parois denses de dislocations et les microbandes de cisaillement conduisent à des bandes de cisaillement transgranulaires.

Hughes et Nix [HN89] observent le même type de structuration dans le cas de solutions solides Ni-Co, les parois denses de dislocations correspondant alors à des doubles parois de dislocations, induisant des désorientations cristallographiques, de sous région en sous région, alternatives de l'ordre de quelques dixièmes de degrés, suivant un principe de minimisation de l'énergie. Ces parois doubles, contenant des dislocations avec au moins cinq vecteurs de Burgers, ne peuvent être dipolaires, conformément à l'analyse de Kocks et al. [KHS800].

Ces parois doubles semblent être à l'origine des microbandes de cisaillement, lors de grandes déformations plastiques, étant alors le lieu d'une importante activité plastique.

Dans le cas polycristallin, la proximité des joints de grains a des effets sur la structure cellulaire de dislocations, le réseau cristallin étant fortement perturbé dans cette région du fait de l'accumulation de dislocations du même signe (effet Hall-Petch) et du glissement multiple, caractéristique des interactions entre grains [ERW68, BZ84].

2.2 Microbandes

Les microbandes apparaissent dans le milieu intragranulaire dans le cas de grandes déformations plastiques ou de chargements complexes dits "durs".

Elles sont généralement de structure planaire, leur forme tridimensionnelle correspondant à un parallépipède [T92]. Hansen [H90] distingue les microbandes de première et de seconde génération.

Les microbandes de première génération sont favorisées par une taille de grain importante. Elles naissent à partir des parois denses de dislocations citées plus

haut [H90] ou des doubles parois [HN89]. Leur nombre augmente avec la déformation plastique, les intersections entre parois denses de dislocations et microbandes de première génération contribuent à la formation d'une structure de type parallélogramme. Simultanément à l'augmentation du nombre de ces microbandes, la taille des cellules ordinaires diminue et la désorientation entre parois augmente [H90].

Les microbandes de seconde génération apparaissent plutôt comme la perturbation se superposant à une autre structure de dislocations déjà existante (cas de la structure cellulaire de dislocations initiée par une prédéformation [T92, RS89, H93]), dans le cas d'un second trajet de déformation "dur" par rapport au préchargement (cas de la séquence Traction dans la direction de laminage - cisaillement orthogonalement à cette direction).

Ces microbandes sont orientées approximativement sur les plans de glissement apparaissant sur les systèmes les plus sollicités [H90, T92]. Elles sont le siège d'un intense cisaillement localisé, le reste du matériau ne participant pas ou peu à la déformation.

Ce cisaillement localisé conduit rapidement à la ruine du matériau, avec l'initiation de bandes de microcisaillement, puis de bandes de cisaillement macroscopiques [K90].

2.3 Bandes de glissement persistantes

Dans le cas de la plasticité cyclique, en particulier de la fatigue oligocyclique, des structures de dislocations caractéristiques sont induites : ce sont les bandes de glissement permanentes. Elles ont des effets similaires aux microbandes décrites brièvement dans le paragraphe précédent. La figure II.4 représente schématiquement une telle structure.

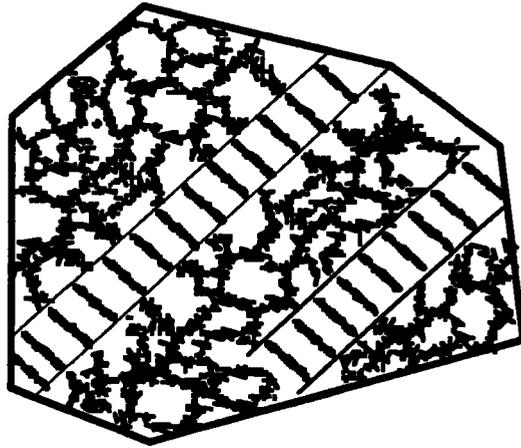


Figure II.4: Bande de glissement persistante en fatigue oligocyclique à faible amplitude.

La matrice contient un réseau dense de dislocations primaires, traversé par des canaux irréguliers de matériau non disloqué. Elle est inactive d'un point de vue plastique, et considérée comme dure, indéformable [WPR91]. La bande de glissement permanente constitue un réseau de parois dipolaires, parallèles, étroites et également réparties. Les parois ont une grande densité de dislocations, une faible fraction volumique (10%), et sont assez éloignées l'une par rapport à l'autre ($\sim 1,4 \mu\text{m}$). Elle correspond à une structure molle qui accomode une grande partie de la déformation plastique [M88].

L'orientation de ces bandes de glissement persistantes est intimement liée à la cristallographie, en particulier aux plans de glissement actifs [WPR91].

Dans le cas de monocristaux déformés en fatigue uniaxiale, ces bandes de glissement agissent "uniformément" dans tout l'échantillon (à cœur et en surface) [WPR91]. Par contre, les observations expérimentales dans le cas des polycristaux suggèrent des effets transgranulaires [CL74] ou, au contraire, une restriction des bandes de glissement persistantes au milieu intragranulaire [WPR91].

Une étude expérimentale portant sur des monocristaux orientés pour du glissement multiple laisse entrevoir des effets d'interactions entre les différentes structures citées plus haut, parois de dislocations, cellules et bandes de glissement

persistantes, et montre que les bandes de glissement persistantes ne sont pas les seules structures apparaissant lors de la fatigue oligocyclique [LKK84].

3) Structure cellulaire de dislocations

3.1 Mécanismes à l'échelle des dislocations

Pendant la déformation plastique des métaux et alliages, des obstacles au mouvement des dislocations sont formés. Ces dislocations sont alors stoppées ou tout au moins ralenties.

Ce phénomène conduit à la naissance de la structure cellulaire de dislocations.

Une analyse du comportement individuel des dislocations, éclairée de mesures expérimentales fines au microscope électronique en transmission, permet de mettre en évidence, d'un point de vue mécanicien, les mécanismes de structuration dans le milieu intragranulaire.

Tabata et al. [TYF78], étudiant la structure cellulaire présente dans un monocristal (111) d'aluminium en situation de glissement multiple, observent que les lignes de glissement visibles dans la structure cellulaire apparaissent indépendamment dans chaque cellule. Ceci est représenté schématiquement sur la figure II.5.

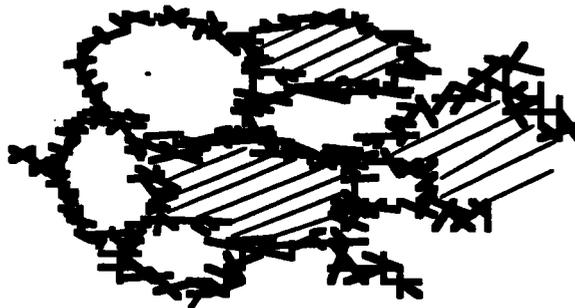


Figure II.5: Lignes de glissement dans la structure cellulaire d'après [T82]

D'autres micrographies montrent que les dislocations mobiles sont stoppées aux parois et qu'aucune ligne de glissement ne se propage à une cellule voisine au travers des parois. Leur conclusion est que le libre parcours moyen des dislocations correspond exactement à la taille des cellules.

Tabata et al. [THM82] suivent le mouvement individuel d'une dislocation dans la structure cellulaire, pour les mêmes conditions expérimentales que précédemment, à l'aide d'une caméra rapide.

La dislocation mobile est émise d'une source dans une paroi, prend une courbure, augmente sa longueur en restant attachée à ses deux extrémités aux points d'ancrage de la paroi. Quand la contrainte appliquée augmente, les points d'attache se rompent et la dislocation avance. Ce phénomène est décrit schématiquement sur la figure II.6.

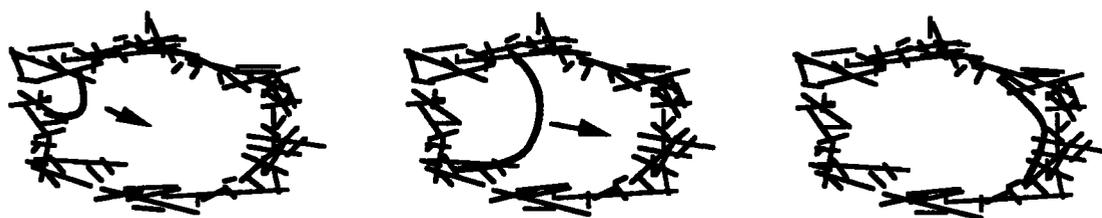


Figure II.6: Etats successifs du mouvement d'une dislocation d'après [T82]

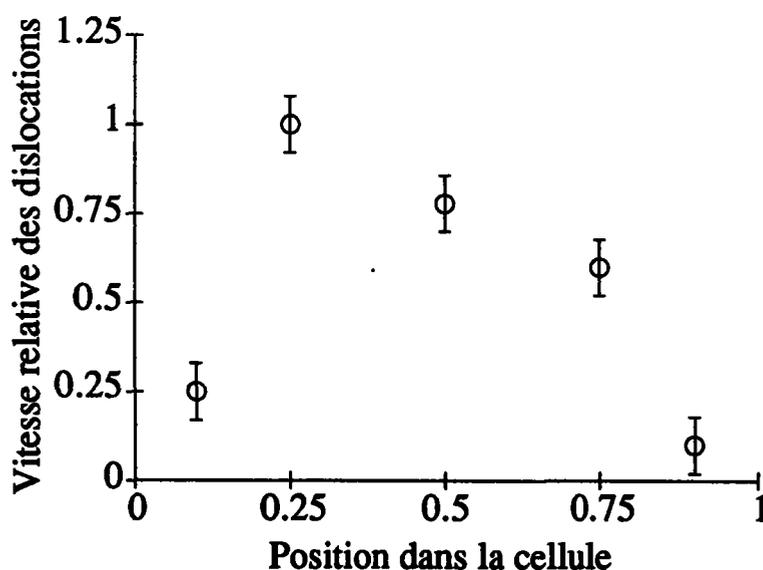


Figure II.7: Evolution de la vitesse d'une dislocation dans la cellule d'après [T82]

L'évolution de la vitesse relative des dislocations dans la cellule (par rapport à la valeur maximale) est présentée sur la figure II.7 [TFHM82].

La vitesse des dislocations augmente donc très rapidement au début de sa progression, puis décroît lentement avant d'atteindre la paroi opposée où elle s'arrête, empêtrée dans la forêt de dislocations.

Cette étude dynamique montre, pour les auteurs, que les dislocations ne peuvent évoluer dans les parois avec une vitesse correspondant au cisaillement imposé.

Si le matériau se trouve à une température supérieure à sa température de transition, la déformation plastique est contrôlée par les dislocations vis [L91] qui sont mobiles dans les cellules et contribuent au dépôt de dislocations coins dans les parois, lors de leur avancée [NGH89, MM84a, M73, P84, EM79].

Toutefois, malgré l'accumulation évidente des dislocations dans les parois, Morris et Martin [MM84] suggèrent, dans le cas du fluage, que le libre parcours moyen des dislocations est plus grand que la taille des cellules, les dislocations pouvant traverser plusieurs parois avant de s'arrêter. Ils confirment néanmoins le mouvement plus rapide des dislocations à l'intérieur des cellules.

Les parois sont constituées de dislocations coins et sont généralement de nature dipolaire (dans le cas de la structure cellulaire de dislocations) [EM79], présentant une grande densité locale de dislocations. Essmann et al. [ERW68] postulent que les dipôles de dislocations coins ayant une taille caractéristique inférieure à une distance critique du matériau s'annihilent spontanément par une décomposition en débris invisibles, du fait d'une grande instabilité, d'où le phénomène de restauration dynamique dans les parois, du fait de la compétition entre le stockage des dislocations (ce qui augmente leur densité) et leur annihilation.

Les observations expérimentales de mouvement et de stockage des dislocations montrent un couplage qui existe entre les deux régions caractéristiques de la structure cellulaire : l'intérieur des cellules et les parois de dislocations.

En effet, la déformation plastique à l'intérieur des cellules, initiée par le mouvement des dislocations sur les plans de glissement, contribue à l'augmentation de la densité de dislocations coins dans celles-ci. Ce phénomène est schématisé sur la figure II.8.

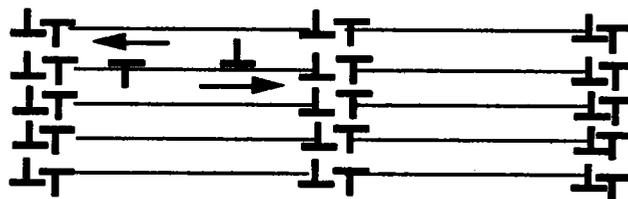


Figure II.8: Couplage entre déformation plastique dans les cellules et stockage des dislocations dans les parois.

En d'autres termes, la déformation plastique à l'intérieur des cellules induit un durcissement (lié à l'augmentation de la densité de dislocations) des parois, situées en un autre lieu géométrique.

En conséquence, ce phénomène peut clairement être qualifié d'écrouissage non local.

En résumé, lorsque la sollicitation mécanique augmente, une différence d'activité plastique est constatée dans la structure cellulaire avec des vitesses importantes pour les dislocations mobiles à l'intérieur des cellules, et des vitesses plus faibles pour les dislocations dans les parois.

Ce phénomène est lié à l'évolution des densités de dislocations qui sont très grandes dans les parois et beaucoup plus faibles ailleurs. Une tendance à la

saturation de la densité de dislocations dans les parois est néanmoins constatée dans les parois du fait de la restauration dynamique [EM79,UBM93].

En conséquence de ces hétérogénéités, des niveaux élevés de contraintes internes sont atteints dans les parois, comme indiqué sur la figure II.9 [M88] et sur la figure II.10 [MM84a].

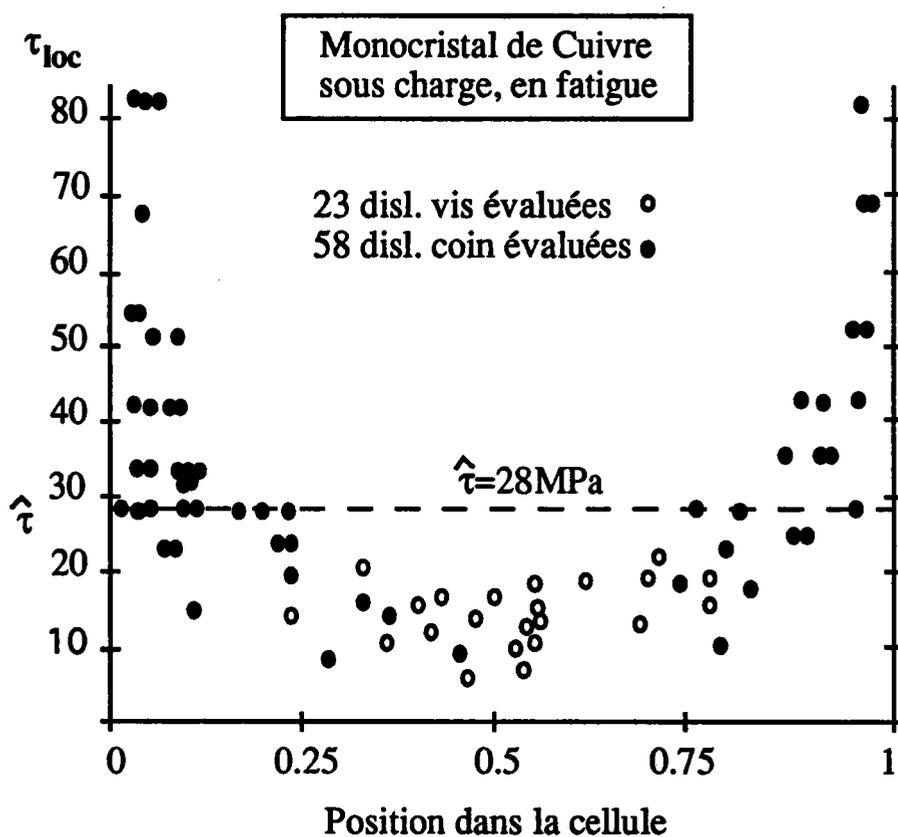


Figure II.9: Contraintes internes dans un arrangement de dislocations caractéristique de fatigue d'après [M88].

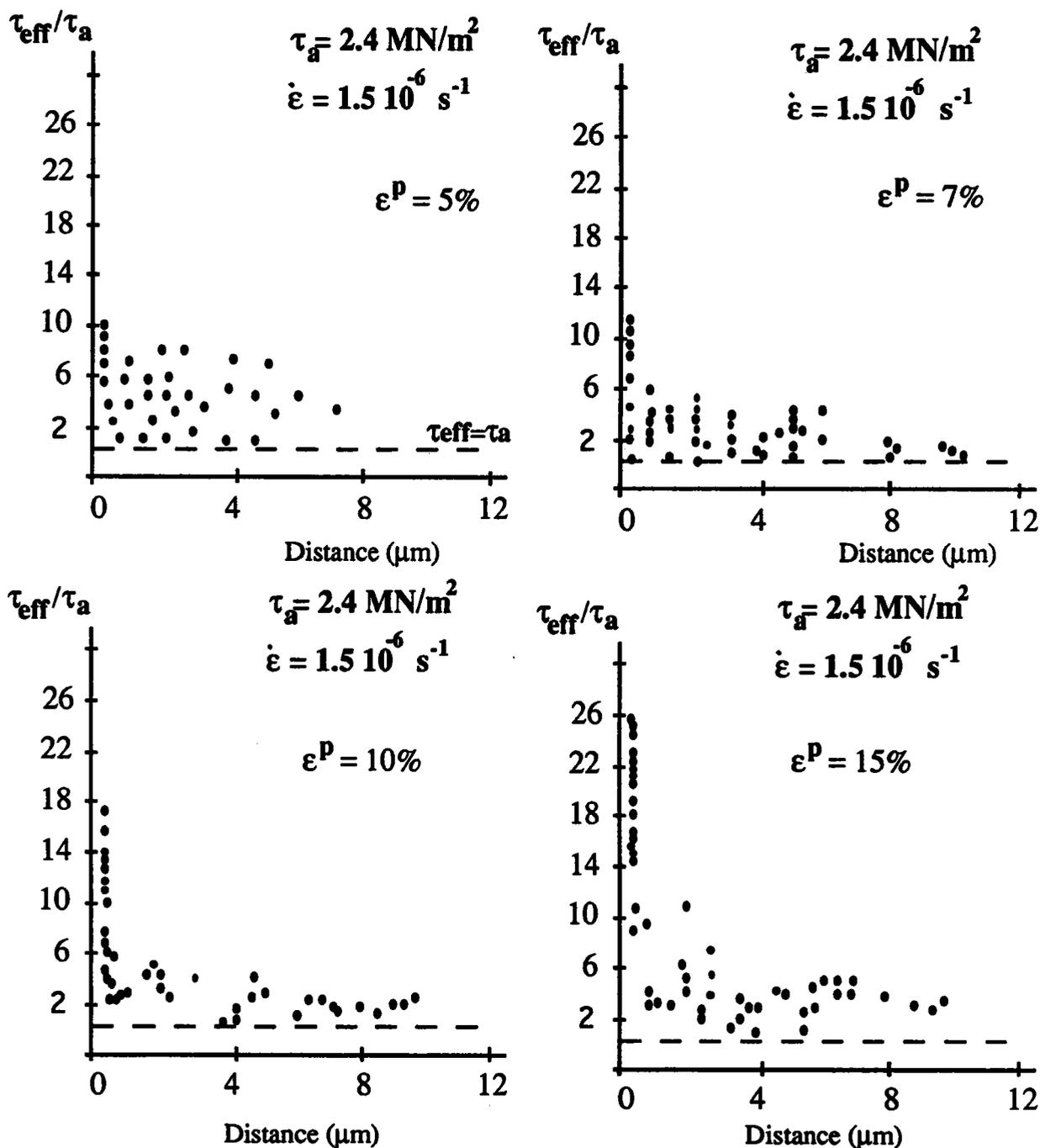


Figure II.10 : Contraintes internes dans un arrangement de dislocations caractéristique de fluage à des stades successifs ($\epsilon=5\%$, 7% , 10% et 15%) d'après [MM84].

Ces constatations de présence de hauts gradients montrent que la structure cellulaire de dislocations peut, en première approximation, être traitée comme un biphasé, dont il reste toutefois à déterminer la topologie (i.e la fraction

volumique des constituants et la morphologie). De plus, la sensibilité de la microstructure en fonction des conditions de sollicitation macroscopiques doit être étudiée. Ceci fait l'objet du paragraphe suivant.

3.2 Evolution de la topologie cellulaire

Dans le cas des métaux à grains fins, une structure cellulaire se met progressivement en place au cours de la déformation plastique.

Fernandes et Schmitt [FS83] ont étudié l'évolution de la topologie microstructurale dans le cas de trajets monotones et séquentiels. Ces travaux, de même que d'autres études expérimentales, ont abouti à plusieurs conclusions, utiles pour le mécanicien :

- La forme des cellules dépend du trajet de chargement

La traction uniaxiale entraîne la création de cellules allongées, aux parois fines et parallèles. Dans certains grains deux familles coexistent.

La déformation plane conduit à la mise en place de deux familles de parois, qui forment principalement des cellules parallépipédiques.

L'expansion équibiaxiale induit des cellules équiaxes, vu la multiplicité des systèmes de glissement actifs [FS83].

- L'orientation des parois est corrélée à l'activité des systèmes de glissement.

Le monocristal favorablement orienté pour le glissement simple présente une structure cellulaire de dislocations orientée parallèlement au système de glissement primaire [L91, LS83, KT80].

Le cas du polycristal est plus compliqué du fait de la présence du glissement multiple, conséquences des interactions entre grains. Néanmoins, une forte corrélation entre le nombre de familles de parois et l'activité des systèmes de glissement subsiste [FS83, H90].

Remarque : Dans leur étude, Fernandes et Schmitt [FS83] ont utilisé un modèle statique ainsi qu'un modèle de Taylor en vue de calculer l'activité des systèmes de glissement suivant les orientations des grains. Un modèle autocohérent serait plus adapté, et intégrerait de façon précise la texture de déformation (bien représentée par le modèle de Taylor), les effets des contraintes internes dues aux interactions entre grains ainsi qu'une loi de comportement intragranulaire qui soit, physiquement, la plus réaliste possible.

Le nombre de systèmes activés (résultat des modélisations) est égal au nombre de familles de parois observées expérimentalement, pour les trois essais monotones cités plus haut.

Les parois de dislocations semblent se former initialement sur le plan de glissement le plus actif, comme dans le cas des monocristaux. Toutefois l'activation de systèmes secondaires complique la microstructure, qui devient par conséquent moins aisée à analyser.

- La structure cellulaire crée une organisation au niveau du polycristal

La structure cellulaire de dislocations contribue à l'anisotropie du matériau en introduisant des directions privilégiées qui se superposent à la texture cristallographique du matériau (initiale et induite) ainsi qu'à la texture morphologique de celui-ci.

En effet, si l'on considère que les parois des cellules sont approximativement orientées sur les plans de glissement les plus actifs (avec des déviations de l'ordre de 10° [FS83]), la notion de texture de la microstructure apparaît naturellement [LMB93], du fait de l'orientation non aléatoire de l'activité des systèmes de grain à grain, les déviations étant causées par la texture cristallographique initiale. Ceci est confirmé sur la figure II.11 qui décrit la projection stéréographique des deux systèmes les plus actifs dans chaque grain pour un polycristal c.c. initialement

isotrope de 1000 grains, à différents instants de la déformation plastique (0%, 20% et 60%) dans le cas d'un essai de laminage simulé avec **CRYSTAL 1.0**.

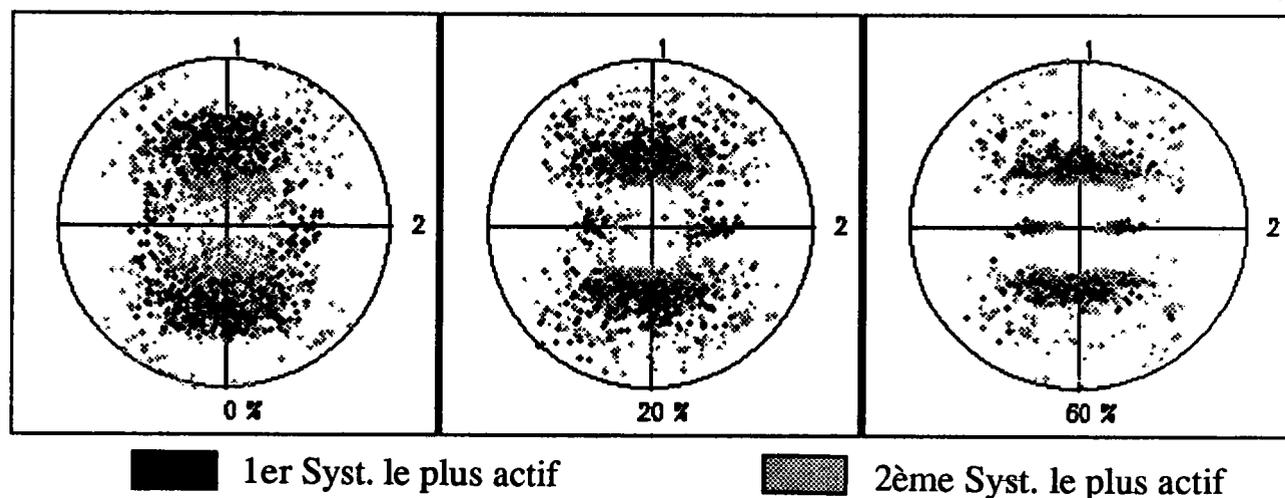


Figure II.11 : Texture de la microstructure.

Malgré la texture cristallographique initialement isotrope pour ce matériau non prédéformé, une orientation non aléatoire des systèmes les plus actifs est mise en évidence, la distribution s'affinant progressivement avec la déformation plastique (du fait de la texture cristallographique induite).

En cas de second trajet, cette mémoire constitue une histoire de la prédéformation, qui peut s'effacer progressivement en cas de séquence "douce" [S86] ou être détruite brutalement en cas de second trajet "dur" [T92].

- La taille des cellules décroît au cours de la déformation plastique [FS83, LKD92, TFHM82].

Cette diminution résulte de la formation de nouvelles cellules [KHS80] ou de changements de forme macroscopique de l'échantillon.

Une forte décroissance est observée aux premiers instants de la déformation plastique, puis une saturation progressive apparaît [LKD92, TMFI76], ce

phénomène semblant lié à la restauration dynamique, résultant de la compétition entre multiplication des dislocations et annihilation de celles-ci.

Les différentes observations expérimentales disponibles dans la littérature, suivant le matériau et le critère de mesure, indiquent des tailles de cellules de l'ordre de plusieurs micromètres aux premiers instants de la déformation plastique, évoluant vers des tailles de l'ordre du micromètre, voire inférieures, aux plus grandes déformations [LKD92, FS83, PA80, KT80]. L'épaisseur des parois diminue suivant la même évolution de plusieurs dixièmes de micromètres à plusieurs centièmes de micromètres [S86].

La désorientation relative entre cellules reste faible (de l'ordre du degré), mais augmente avec la déformation plastique [L91, MM84b].

- La topologie caractéristique d'une prédéformation disparaît au profit de celle représentative du second trajet, lors d'un chargement séquentiel de l'échantillon.

Cette constatation découle d'essais (Traction Uniaxiale - Expansion Equibiaxiale) et (Expansion Equibiaxiale - Traction Uniaxiale) et semble rester valide pour des prédéformations n'étant pas trop importantes. Ce phénomène provient de l'effet stabilisateur de la texture de la microstructure [LMB93], qui induit une anisotropie forte dans le matériau, du fait de la structure ordonnée qu'est la structure cellulaire.

Ainsi lors de séquences "dures" [RS89, T92], le matériau est fortement marqué par la prédéformation, avec une structure cellulaire bien définie qui ne peut se dissoudre lors du second trajet, d'où l'apparition de microbandes sur les systèmes nouvellement activés.

Pour des prédéformations modérées ($\epsilon < 0.3$), ces microbandes restent circonscrites au domaine intragranulaire [RS89], ce qui n'est pas le cas pour des prédéformations plus importantes [RG89].

3.3 Modélisations

De nombreuses études théoriques ont été menées en vue de décrire le comportement de la structure cellulaire. Ainsi dans le cadre de descriptions biphasées de celle-ci, le modèle de Taylor-Lin [L57] est adopté dans plusieurs d'entre elles [M88, NGH85, K85] en vue de décrire la plasticité dans l'arrangement cellulaire.

Cette démarche postule, pour des raisons de compatibilité, que la déformation totale est uniforme dans le milieu. Elle est adoptée par les modélisateurs pour des raisons de simplifications, évitant de recourir au processus de localisation des méthodes à transition d'échelle (qui nécessite une description de la topologie cellulaire i.e de la forme et de l'orientation).

Les mesures au microscope électronique en transmission rappelées brièvement plus haut montrent que l'activité plastique est très différente à l'intérieur des cellules et dans les parois. Or le modèle de Taylor-Lin n'autorise que de faibles hétérogénéités de la déformation plastique, sous peine d'obtenir par simulation des contraintes correspondantes énormes, sans commune mesure avec la réalité expérimentale.

Donc cette démarche n'est pas adaptée à la description de la structure cellulaire.

Les différents modèles présentés dans la littérature sont souvent très phénoménologiques, décrivant par exemple les phénomènes de façon scalaire [P84, NGH85, M88] ou trop relaxées [PBS81], sans prendre en compte les effets d'interactions dans le cas polycristallin, ni comme cela a été vu plus haut, la possibilité d'hétérogénéisation intragranulaire. Néanmoins, ils apportent des informations essentielles sur le stockage des dislocations dans les parois en traduisant le couplage entre intérieur des cellules et parois, décrit précédemment au travers de lois d'évolution des densités de dislocations [EM79] voire des

cissions critiques à l'échelle des glissements cristallographiques [NGH83, PA84] ou plus phénoménologiquement des limites d'écoulement [K85].

L'atout principal de ce type de descriptions biphasées de la structure cellulaire est qu'elles permettent d'obtenir des informations pouvant être comparées aux essais expérimentaux.

D'autres démarches, basées sur une description continue de la structure cellulaire, tentent d'exprimer l'hétérogénéisation intragranulaire à l'aide d'équations de champs générales [K88, GS94, GP94, CBK92, A93, Z92] mais demeurent trop compliquées pour aboutir à des résultats quantitatifs, susceptibles d'être comparés à l'expérience.

En vue de décrire le comportement du matériau présentant une localisation prononcée de la déformation sous forme de microbandes sont introduites des théories de gradients élevés, non locales par essence. A l'aide de développements basés sur la méthode des éléments finis, ces théories permettent de décrire le comportement du matériau après la localisation ainsi que l'évolution de la géométrie de la microbande, indépendamment de la taille caractéristique du maillage Eléments Finis (ce qui n'est pas le cas avec des lois de type local), qui accompagne l'adoucissement macroscopique [A93].

La difficulté de ces démarches réside dans la signification physique des coefficients phénoménologiques introduits.

4) Conclusions

Le cristal, milieu quasiment homogène après le recuit, présente une tendance forte à l'hétérogénéisation du fait d'interactions entre dislocations ou dislocations précipitées dès les premiers instants de la déformation plastique. Ceci se traduit par la mise en place d'un arrangement ordonné des dislocations.

Dans le cas des métaux à structure c.c., une température de transition existe, qui détermine l'initiation de cet arrangement. Ce phénomène est lié à la faible mobilité des dislocations vis à basse température.

La taille de grain (pour les polycristaux) est un paramètre influençant largement la complexité de la microstructure. On observe ainsi la formation de structures cellulaires "simples" pour de petites tailles de grain alors que de gros grains favorisent la subdivision du milieu intragranulaire en sous domaines au sein desquels une structure cellulaire bien établie est présente.

Lors de grandes déformations en trajet monotone ou au cours de trajets complexes dits "durs" apparaissent les microbandes qui naissent au niveau des frontières entre sous-domaines dans le cas de gros grains, et qui viennent largement perturber la structure cellulaire existante dans le cas des grains de petite taille. Elles sont le siège d'une localisation intense de la déformation plastique sous forme de glissement simple et peuvent conduire à la ruine du matériau.

Une dissolution progressive de la structure cellulaire caractéristique à une certaine prédéformation est observée au profit de celle propre au second trajet au cours d'un chargement séquentiel, dans le cas de polycristaux n'ayant pas de tendance prononcée à une localisation de la déformation.

La structure cellulaire de dislocations introduit une anisotropie forte pour les polycristaux, avec une notion d'ordre qui dépasse les frontières du grain. On parle alors de texture de la microstructure.

L'étude plus fine du comportement individuel des dislocations permet d'introduire la notion mécanique d'érouissage non local, la déformation plastique dans les cellules induisant un durcissement des parois adjacentes.

Au vu des différentes études expérimentales présentées ici, l'arrangement cellulaire de dislocations, induit dans les grains d'un polycristal, apparait comme un facteur structurant du matériau de première importance, organisé aux échelles intra- et intergranulaire.

La compréhension d'une telle structure est essentielle en vue de décrire le plus finement possible le comportement intracristallin.

Un cadre de modélisation de la structure cellulaire de dislocations est donc proposé ici :

- représentation biphasée (parois=zones dures, intérieur des cellules=zone molle) vu les hétérogénéités constatées, à tous niveaux,
- érouissage non local à l'origine de l'hétérogénéisation,
- topologie décrite par une fraction volumique de cellules (déduite de l'expérience), la forme moyenne des cellules ainsi que leur orientation approximative par rapport au réseau cristallin.

Chapitre III

III - Loi de comportement non locale du monocristal

1) Introduction

L'évidence expérimentale montre qu'un phénomène caractéristique d'écrouissage non local se produit par mouvement de dislocations depuis l'intérieur des cellules jusqu'aux parois avoisinantes. Dans les descriptions micromécaniques proposées à l'heure actuelle, ce phénomène est traité de façon globale, par exemple en moyenne sur le monocristal par l'intermédiaire d'une matrice d'écrouissage locale [LKB90].

En vue de décrire ces effets, une étude à l'échelle des cellules de dislocations (pour décrire un comportement collectif de celles-ci) s'impose si l'on désire observer certaines conséquences à l'échelle du polycristal (comme la réponse macroscopique, ou encore l'évolution de la texture cristallographique), sachant qu'une étude au niveau des dislocations prises individuellement ne permet pas, vu le développement actuel des théories de ce type, d'opérer la transition d'échelle jusqu'au niveau macroscopique [CBK92].

Dans ces conditions, la distance critique d'écrouissage non local, le libre parcours moyen des dislocations correspondant approximativement à la taille des cellules, est du même ordre de grandeur que la taille de l'élément représentatif choisi à l'échelle des cellules de dislocations.

La validité d'une théorie locale, basée sur des hypothèses d'effets à portée infiniment petite, devient alors extrêmement problématique.

Il devient donc nécessaire de prendre en compte les effets à grande distance apparaissant dans la structure cellulaire par l'intermédiaire d'une théorie non locale.

Un formalisme de type intégral, permettant de décrire de façon très naturelle les interactions dues au mouvement des dislocations, est développé dans ce travail [KD66, E83, BMK93] et préféré à l'introduction d'une théorie de gradients d'ordres élevés [A93] qui, s'ils décrivent les effets non locaux, restent très phénoménologiques et posent certains problèmes de conditions aux limites.

Les interactions à distance présentes dans la structure cellulaire de dislocations ont néanmoins une portée réduite au milieu constitué par le grain du fait, d'une part, de la présence de joints de grain bien définis qui empêche la propagation des dislocations au delà des frontières du grain et, d'autre part, de la présence de la texture cristallographique qui assure des désorientations de grain à grain dans le polycristal.

Le formalisme intégral porte donc sur un volume global correspondant au monocristal.

Une représentation phénoménologique, à l'échelle des glissements plastiques en vue de traduire le mouvement des dislocations, est adoptée : elle entraîne l'introduction formelle d'une matrice d'écroutissage non locale.

Cette démarche met en évidence la difficulté majeure inhérente aux théories non locales en vue d'applications pratiques : la détermination expérimentale de même que la connaissance théorique d'une telle fonction matérielle d'interaction constituent une tâche ardue.

En premier lieu, il s'agit d'en trouver une expression en tout point du milieu hétérogène; enfin, si tant est que cette première étape soit franchie avec succès, le traitement efficace de toutes les informations collectées pose problème quant à sa réalisation pratique.

Par souci de simplification, du fait de la présence de forts gradients aux abords des parois et de la relative uniformité de la distribution des dislocations à l'intérieur des cellules et dans les parois, une description biphasée non locale de la structure cellulaire est adoptée. En conséquence, par l'intermédiaire d'une description phénoménologique simple de la cinétique des dislocations dans la structure cellulaire, une expression approchée de la matrice d'écrouissage non locale est obtenue et permet d'acquérir la loi de comportement élastoplastique non locale pour chaque phase dans le monocristal [MKB92a].

2) Ecrouissage "isotrope" non local

Comme cela a été vu précédemment, la force critique sur une dislocation, correspondant au seuil de microplasticité, dépend de la densité locale de dislocations qui évolue avec la déformation plastique, constituant ainsi le phénomène d'écrouissage.

La théorie continue des dislocations de Kröner [K58], bien qu'étant à même d'effectuer la transition d'échelle entre les dislocations et le monocristal, n'est pas assez aboutie à l'heure actuelle pour traiter quantitativement le problème de la plasticité des métaux.

Ainsi, du fait de la mobilité importante des dislocations sur les plans de glissement, la plasticité est décrite de façon phénoménologique à l'échelle de ces mécanismes cristallographiques.

Au lieu de décrire le mouvement individuel des dislocations, on choisit une variable cinématique, le glissement plastique γ , qui prend en compte la mobilité anisotrope des dislocations sur les plans de glissement, la force thermodynamique conjuguée est alors la cission sur le système considéré.

On définit sur chaque système de glissement noté g un critère phénoménologique de plasticité, appelé critère de Schmid, qui introduit la surface de charge propre à chaque système.

Si $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ est le tenseur des contraintes de Cauchy en tout point \mathbf{r} du cristal étudié et $\mathbf{R}_{ij}^g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(m_i n_j + n_i m_j)$ le tenseur d'orientation du système de glissement g de normale unitaire $\bar{\mathbf{n}}^g$ et de direction $\bar{\mathbf{m}}^g$ appelé tenseur de Schmid, les lois d'évolution de ce domaine élastique sont données par les conditions de Schmid en ce point \mathbf{r} :

1) On définit la notion de systèmes potentiellement actifs

$$\tau^g = \tau_c^g$$

2) On introduit la règle de cohérence pour les systèmes actifs

$$\dot{\tau}^g = \dot{\tau}_c^g$$

où $\tau^g(\mathbf{r}) = \sigma_{ij}(\mathbf{r}) R_{ij}^g(\mathbf{r})$ est la cission résolue sur le système g en \mathbf{r} et $\tau_c^g(\mathbf{r})$ la cission critique sur le système g en \mathbf{r} .

La dérivation par rapport au temps de $\tau^g(\mathbf{r})$ nécessite de prendre en compte la dépendance de \mathbf{R} en fonction du temps qui introduit des termes non linéaires en σ .

En introduisant la dérivée corotationnelle de σ par rapport au réseau cristallin [F84], on a :

$$\dot{\tau}^g(\mathbf{r}) = \mathbf{R}_{ij}^g(\mathbf{r}) \overset{\nabla}{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) \quad (\text{III.1})$$

où $\overset{\nabla}{\sigma}_{ij} = \dot{\sigma}_{ij} - \dot{\omega}_{ik}^e \sigma_{kj} + \sigma_{ik} \dot{\omega}_{kj}^e$

et $\dot{\omega}^e$ est la vitesse de rotation élastique du réseau.

Par souci de simplification, en vue d'alléger les notations, les développements ultérieurs seront effectués dans un cadre de petites perturbations.

Dans ce cas, on a

$$\dot{\tau}^g(\mathbf{r}) = R_{ij}^g(\mathbf{r}) \dot{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) \quad (\text{III.2})$$

Le taux de cisssion résolue $\dot{\tau}^g(\mathbf{r})$ étant déterminé par le taux de contraintes correspondant, il reste à exprimer l'écroissage "isotrope" du cristal au travers de l'évolution des cisssions critiques sur chaque système.

2.1 Matrice d'écroissage locale

Il est commode de traduire l'évolution des taux de cisssion critique sur les systèmes g , $\dot{\tau}_c^g(\mathbf{r})$, en fonction des vitesses de glissement $\dot{\gamma}^h(\mathbf{r})$ sur les systèmes actifs h par l'intermédiaire d'une matrice d'interaction $H^{gh}(\mathbf{r})$ telle que l'on ait en tout point \mathbf{r} :

$$\dot{\tau}_c^g(\mathbf{r}) = H^{gh}(\mathbf{r}) \dot{\gamma}^h(\mathbf{r}) \quad (\text{III.3})$$

H permet de traduire phénoménologiquement, de manière plus ou moins simplifiée, les phénomènes de mouvement et de stockage des dislocations dans les plans de glissement évoqués précédemment [F84].

Expérimentalement, la forme et l'évolution de H ont été étudiées au travers d'essais d'écroissage latent (durcissement croisé de systèmes) qui montrent une forte anisotropie fonction de la structure cristalline du matériau (CC ou CFC) reliée aux interactions de contacts entre dislocations. H peut s'écrire de façon simplifiée, en moyenne sur le cristal :

$$H^{gh} = h^{(gh)} \mathbf{a}^{gh} \quad (\text{III.4})$$

où h sont les modules de H , dépendant de l'histoire du matériau, et \mathbf{a} est la matrice décrivant l'anisotropie des interactions entre systèmes de glissement.

Si la forme de \mathbf{a} semble bien définie par les essais d'écroissage latent [FBZ80], l'évolution des modules h avec la déformation plastique est un phénomène bien

plus complexe, d'où les diverses stratégies pour le modélisateur suivant ses préoccupations :

- Utiliser une expression simplifiée des modules [LKB90, L93]. Ce choix repose sur le constat suivant lequel ce type de description phénoménologique offre une vision très appauvrie de la physique réelle à l'échelle des défauts intragranulaires. Ainsi, dans le cas des modèles polycristallins comme le schéma auto-cohérent par exemple, très lourds par ailleurs, représenter ces modules par l'intermédiaire de fonctions de type saturantes (en $1/\tau$) voire constantes permet d'obtenir des résultats satisfaisants tant d'un point de vue macroscopique que microscopique [R94, S94].

- Développer des lois d'évolution plus complexes pour ces modules. Ce type de démarche, comme celle développée par FRANCIOSI [F88], vise à généraliser la loi classique d'écroutissage en séparant les effets des dislocations primaires (provenant directement de sources sur un système subissant une cisssion réduite suffisante) de ceux des dislocations secondaires (résultant d'interactions).

Cette approche constitue en première approximation la contribution spécifique à l'écroutissage de la sous-structure induite par les interactions entre dislocations au cours de la déformation plastique.

Ces différentes stratégies ne décrivent pas directement les cellules et s'avèrent donc être incapables d'appréhender le phénomène d'instabilité que peut être la naissance de bandes de cisaillement au cours d'un changement de trajet de chargement brutal par exemple. Il est alors nécessaire de décrire de façon précise les effets de sous-structures de dislocations induites et tout particulièrement la notion d'interactions à distance (aspect non local).

Donc si l'on désire représenter les phénomènes physiques microstructuraux intragranulaires, il y a lieu d'effectuer une réelle étude micromécanique et physique à leur échelle.

2.2 Matrice d'écroissage non locale

Lorsque l'on envisage de traiter le problème de la plasticité non plus à l'échelle du grain, considéré comme un milieu local, de façon très globale, mais directement au niveau des sous-structures de dislocations, comme les cellules de dislocations, il devient nécessaire d'introduire l'aspect non local de l'écroissage.

En effet, l'hypothèse d'interactions à distance infiniment petite, strictement nécessaire dans une théorie locale, n'est plus valide lorsque le rayon d'action des effets en jeu est de l'ordre de grandeur de l'élément de volume caractéristique du milieu étudié, ce qui est le cas dans ce travail.

En conservant toutefois le glissement cristallographique comme mécanisme élémentaire de la déformation plastique, (III.3) devient naturellement

$$\dot{\tau}_c^g(\mathbf{r}) = \int_V \mathbf{H}^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dot{\gamma}^h(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.5})$$

où V est le volume du cristallite considéré, et \mathbf{H} est une matrice d'écroissage non locale.

Cette formulation constitue une généralisation de (III.3). En effet, en choisissant $\mathbf{H}^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{H}^{gh}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, il vient, de part les propriétés de la distribution de

Dirac δ :

$$\dot{\tau}_c^g(\mathbf{r}) = \int_V \mathbf{H}^{gh}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \dot{\gamma}^h(\mathbf{r}') dV'$$

ou $\dot{\tau}_c^g(\mathbf{r}) = \mathbf{H}^{gh}(\mathbf{r}) \dot{\gamma}^h(\mathbf{r})$

De plus, la notion d'écroissage latent est préservée [FBZ80].

Cette description traduit le fait que le glissement plastique $\dot{\gamma}^h(r')$, initié en un point r' du milieu hétérogène considéré, entraîne une variation de la cission critique d'un autre système g , $\tau_c^g(r)$, en un autre point r du milieu.

Ce type d'interaction à distance peut clairement être qualifié de non local. Elle permet donc de décrire la contribution du mouvement des dislocations à l'intérieur des cellules (y créant du glissement plastique) au durcissement des parois (par stockage des dislocations en cet endroit) [MKB93a].

Dans le cas de la non localité, les conditions classiques de la plasticité apparaissant dans les conditions de Schmid sont supposées encore valides car elles sont équivalentes à la force motrice de Peach et Koehler sur les dislocations.

Enfin, l'élasticité peut être supposée locale à l'échelle du grain.

La forme intégrale de l'érouissage non local obtenue en (III.5) nécessite quelques commentaires. Il s'avère qu'obtenir une expression générale explicite de H constitue une tâche difficile. En effet, une telle fonction d'interaction doit être capable de différencier l'effet du matériau (que l'on peut distinguer par son énergie de faute d'empilement) ou encore de décrire les multiples trajets de chargement susceptibles d'être imposés au matériau.

Ainsi, cette fonction doit intrinsèquement décrire l'évolution de la structure cellulaire en fonction de l'état du matériau.

A l'heure actuelle, l'obtention d'une telle forme générale de H semble peu évidente du fait des connaissances encore imparfaites (comportement individuel ou collectif des dislocations) de la mécanique relative à cette échelle microscopique.

Cette constatation justifie donc pleinement l'usage de simplifications, en particulier la mise en œuvre d'une approximation biphasée de la structure cellulaire, en accord avec la réalité expérimentale [MLBK94].

2.3 Cas du biphasé

Du fait de la répartition hétérogène des dislocations dans les plans de glissement sous forme de cellules et de parois, il est commode de décrire la structure cellulaire à l'aide d'un modèle composite biphasé au sein duquel la phase dure représente les parois (riches en dislocations) et la phase molle représente l'intérieur des cellules (faible densité de dislocations) [M88].

Dans la suite de ce travail, la phase dure sera repérée par H, et la phase molle par S.

Dans chaque phase, les différentes variables utilisées dans une description phénoménologique à l'échelle des glissements cristallographiques sont remplacées par leurs valeurs moyennes.

Ainsi, on a, si r se trouve dans la phase α ($\alpha = H, S$) :

$$\begin{aligned}
 \dot{\gamma}^s(r) &= \dot{\gamma}_\alpha^s = \langle \dot{\gamma}^s(r) \rangle_\alpha \\
 \tau_c^s(r) &= \tau_{c\alpha}^s = \langle \tau_c^s(r) \rangle_\alpha \\
 \sigma_{ij}(r) &= \sigma_{ij}^\alpha = \langle \sigma_{ij}(r) \rangle_\alpha \\
 \varepsilon_{ij}(r) &= \varepsilon_{ij}^\alpha = \langle \varepsilon_{ij}(r) \rangle_\alpha
 \end{aligned}
 \tag{III.6}$$

Cette hypothèse d'uniformité par morceaux semble restrictive a priori. En effet, on décrit de manière assez "abrupte" la continuité du milieu réel.

Toutefois, différents résultats expérimentaux [MM84a, M88] montrent de forts gradients en ce qui concerne l'évolution des cisssions agissant sur des dislocations aux alentours des parois. Ainsi, si l'axe \bar{x} décrit la position dans la structure

cellulaire, on a qualitativement (l'aspect quantitatif sera présenté plus loin) pour un cristal soumis à un chargement macroscopique :

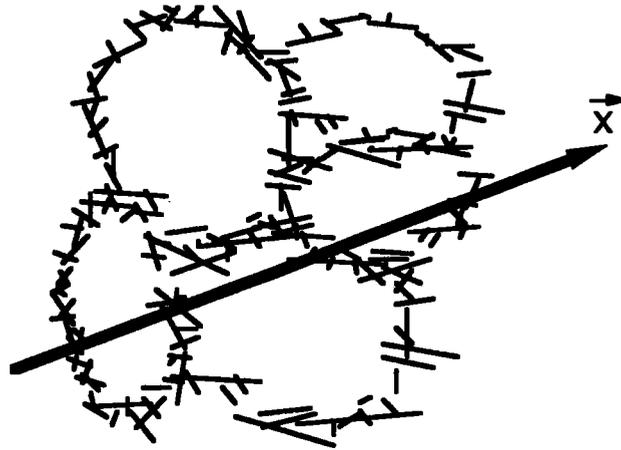


Figure III.1: Description de la structure cellulaire de dislocations

Soit, si l'on s'intéresse aux variations de l'état des contraintes le long de l'axe \bar{x} , qui peuvent être matérialisées par les variations des cissions résolues correspondantes,

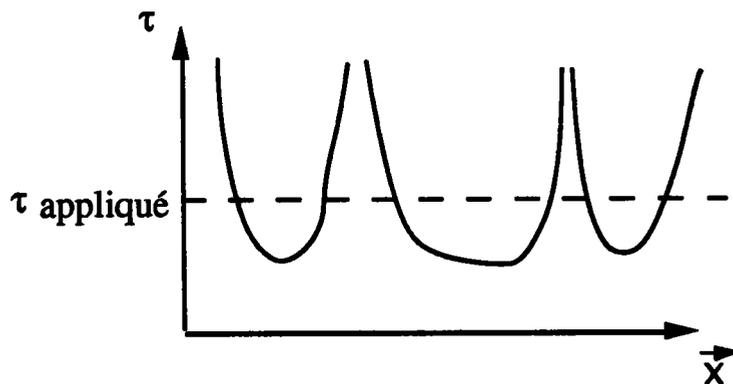


Figure III.2: Variations de τ le long de l'axe \bar{x}

Il semble donc cohérent d'appliquer cette hypothèse d'uniformité par morceaux pour évaluer les effets caractéristiques de la structure cellulaire. On remplace ainsi $\gamma(r)$ et $\tau(r)$ par leurs valeurs moyennes dans chaque phase.

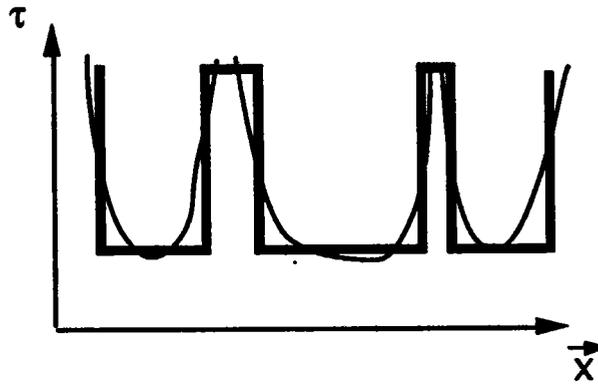


Figure III.3: Description biphasee de la structure cellulaire de dislocations

De même, ce type de représentation ne va permettre de décrire que du glissement multiple homogène par phase alors que la réalité peut être différente. Par exemple, dans le cas des polycristaux, la présence des joints de grain peut perturber l'activité plastique dans les différentes zones d'un grain induisant la notion de glissement hétérogène [R88] ainsi que de désorientation cristallographique progressive d'une cellule à l'autre (inférieure à 5°) [S86].

Ainsi, cette description à deux phases constitue une première approximation de la réalité. Une approche à n phases [ABH93] afin de représenter les différentes variétés de cellules (au point de vue des tailles et orientations relatives) serait en théorie envisageable mais n'apporterait vraisemblablement pas beaucoup plus d'informations, d'où un problème de rapport qualité des résultats/complexité accrue du formalisme.

Finalement, cette représentation biphasee permet réellement de descendre d'échelle le niveau d'uniformité par rapport aux approches où le grain est supposé uniforme dans sa totalité [LKB90].

Dans ce cadre, il est aisé de traduire l'aspect formel non local de l'écroutissage au travers de (III.5) qui devient, en effectuant les moyennes des taux de cission critique sur chaque phase :

$$\begin{aligned}\dot{\tau}_{cs}^g &= \frac{1}{V_s} \int_{V_s} \dot{\tau}_c^g(\mathbf{r}) dV = \frac{1}{V_s} \int_{V_s} \int_V H^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dot{\gamma}^h(\mathbf{r}') dV' dV \\ &= \frac{1}{V_s} \left(\int_{V_s} \int_{V_s} H^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV' dV \right) \dot{\gamma}_s^h + \frac{1}{V_s} \left(\int_{V_s} \int_{V_H} H^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV' dV \right) \dot{\gamma}_H^h\end{aligned}\quad (\text{III.7})$$

comme les vitesses de glissement $\dot{\gamma}^g(\mathbf{r})$ sont remplacées par leurs valeurs moyennes.

Soit finalement

$$\dot{\tau}_{cs}^g = H_{SS}^{gh} \dot{\gamma}_s^h + H_{SH}^{gh} \dot{\gamma}_H^h \quad (\text{III.8})$$

avec

$$\begin{aligned}H_{SS}^{gh} &= \frac{1}{V_s} \left(\int_{V_s} \int_{V_s} H^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV' dV \right) \\ H_{SH}^{gh} &= \frac{1}{V_s} \left(\int_{V_s} \int_{V_H} H^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV' dV \right)\end{aligned}\quad (\text{III.9})$$

De même on a dans H

$$\dot{\tau}_{cH}^g = H_{HS}^{gh} \dot{\gamma}_s^h + H_{HH}^{gh} \dot{\gamma}_H^h \quad (\text{III.10})$$

avec

$$\begin{aligned}H_{HS}^{gh} &= \frac{1}{V_H} \left(\int_{V_H} \int_{V_s} H^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV' dV \right) \\ H_{HH}^{gh} &= \frac{1}{V_H} \left(\int_{V_H} \int_{V_H} H^{gh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV' dV \right)\end{aligned}\quad (\text{III.11})$$

Afin d'écrire la loi de comportement élastoplastique du grain, il reste à exprimer ces matrices d'interaction $H_{\alpha\beta}$ en fonction des différents paramètres physiques utilisables à ce niveau.

Les phénomènes de stockage et d'annihilation des dislocations dans les parois, étudiés dans le chapitre II, permettent d'exprimer les matrices H_{HS} et H_{HH} [MKB92].

Ainsi, le phénomène principal est constitué par le dépôt des dislocations produites et mobiles à l'intérieur des cellules, dans les parois, autrement dit l'aspect non local de l'écroutissage [PA85, NGH85].

On peut décrire ce phénomène de la façon suivante, dans le cas de cellules fermées [M88],

$$d\rho_H^{g+} = \frac{2}{bL^{(g)}} d\gamma_S^g \quad (\text{III.12})$$

où

- $d\rho_H^{g+}$ désigne l'augmentation de la densité de dislocations dans les parois sur le système g ,
- $d\gamma_S^g$ désigne l'incrément de glissement plastique sur le système g ,
- b désigne la norme du vecteur de Burgers du matériau,
- L^g désigne le libre parcours moyen des dislocations dans les cellules sur le système g .

Au travers de L^g apparaît l'importance de la topologie du biphasé, qui joue un rôle clef dans la résolution du problème micromécanique d'évaluation du comportement de la structure cellulaire.

La loi de Taylor ($\tau_c = \alpha\mu b\sqrt{\rho}$), généralisée au cas anisotrope correspondant au glissement multiple, devient :

$$\tau_c^g = \tau_c^{0g} + \mu b \sqrt{a_{gh} \rho^h} \quad (\text{III.13})$$

où

- τ_c^{0g} désigne la cission critique initiale avant plastification,
- μ représente le module de cisaillement du matériau,
- a_{gh} est la matrice d'interaction exprimée plus haut.

Après dérivation de (III.13) et introduction dans (III.12), une relation entre l'augmentation de cission critique et les vitesses de glissement sur les différents systèmes de glissement, plus utile pour le micromécanicien, peut être obtenue sous la forme suivante :

$$d\tau_{cH}^s + = \frac{\mu^2 b}{L^{(h)}} \frac{a_{(gh)}}{\tau_{cH}^s - \tau_{cH}^{0g}} d\gamma_s^h \quad (\text{III.14})$$

D'autre part, l'étude de l'annihilation des dislocations dans les parois permet d'écrire le type de relation scalaire suivant [EM79]:

$$d\rho^- = -2 \frac{y}{b} \rho d\gamma \quad (\text{III.15})$$

où y est une distance caractéristique d'annihilation des dislocations.

En effet, il a été constaté au cours de nombreuses expériences que deux dislocations de signes opposés ne peuvent se trouver à une distance mutuelle inférieure à une distance caractéristique du matériau. Ainsi, elles ont tendance à s'annihiler si elles se rencontrent sur des plans de glissement séparés par une distance inférieure à y .

Dans le cas présent, il y a lieu de généraliser cette relation à deux niveaux :

- Tout d'abord, les aspects locaux et non locaux doivent être intégrés, sachant qu'une dislocation provenant de l'intérieur des cellules peut contribuer à l'annihilation d'autres dislocations dans les parois.

- D'autre part, il faut tenir compte des interactions entre les différents systèmes de glissement : une dislocation sur un système pouvant s'annihiler avec une autre dislocation appartenant au même plan de glissement voire à un plan différent.

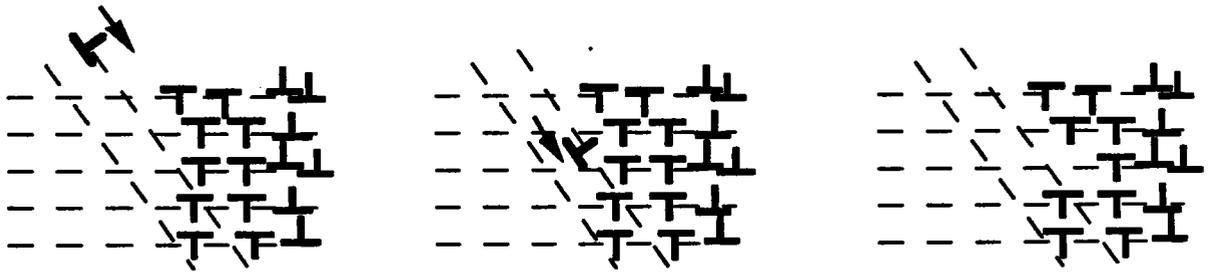


Figure III.4: Description schématique des phénomènes d'annihilation

D'où, finalement, la loi phénoménologique traduisant simplement ces phénomènes d'annihilation complexe :

$$d\rho_H^{g^-} = -2 \frac{y}{b} \rho_H^{(g)} \left(A_{HS}^{(g)h} d\gamma_S^h + A_{HH}^{(g)h} d\gamma_H^h \right) \quad (\text{III.16})$$

où A_{HH}^{gh} traduit formellement l'influence locale du système h sur l'annihilation des dislocations appartenant au système g dans la zone H, et A_{HS}^{gh} décrit de même l'aspect non local de l'annihilation des dislocations de la zone H.

Comme précédemment, la loi d'adoucissement liant $d\tau_{cH}^{g^-}$ aux différents incréments de glissement plastique $d\gamma_S^h$ et $d\gamma_H^h$ s'obtient par l'intermédiaire de (III.16) et peut se mettre sous la forme :

$$d\tau_{cH}^{g^-} = -b\mu^2 y \frac{a_{(g)h}^l}{\tau_{cH}^g - \tau_{cH}^{0g}} \rho_H^l \left(A_{HS}^{(l)h} d\gamma_S^h + A_{HH}^{(l)h} d\gamma_H^h \right) \quad (\text{III.17})$$

Il est ensuite facile de déduire les expressions de H_{HS}^{gh} et H_{HH}^{gh} à partir de (III.10), (III.14) et (III.17) :

$$H_{HS}^{gh} = \frac{b\mu^2}{\tau_{cH}^g - \tau_{cH}^{0g}} \left(\frac{a_{(g)h}^l}{L^{(h)}} - y a_{(g)l} \rho_H^l A_{HS}^{(l)h} \right)$$

$$H_{HH}^{gh} = \frac{b\mu^2}{\tau_{cH}^g - \tau_{cH}^{0g}} y a_{(g)l} \rho_H^l A_{HH}^{(l)h} \quad (\text{III.18})$$

Des relations de ce type, basées sur la physique du mouvement et du stockage des dislocations, font défaut dès lors que l'on s'intéresse aux phénomènes relatifs à l'intérieur des cellules.

Toutefois, l'évidence expérimentale montre que le stockage des dislocations reste faible à l'intérieur des cellules du fait du faible nombre d'obstacles rencontrés dans cette zone, que ce soit d'un point de vue local ou non local.

Ainsi, en première approximation, il paraît cohérent de choisir :

- une valeur faible (constante ou saturante) pour H_{SS} , ce qui traduit la faible augmentation de la densité de dislocations dans S;
- une valeur nulle pour H_{SH} , les effets non locaux de H vers S semblant peu crédibles.

Donc, par exemple, de façon très phénoménologique :

$$\begin{aligned} H_{SS}^{gh} &= \frac{\alpha_{SS}}{\tau_{cS}^g - \tau_{cS}^{0g}} a_{(g)h} \\ H_{SH}^{gh} &= 0 \end{aligned} \tag{III.19}$$

3) Loi de comportement élastoplastique non locale

3.1 Aspects formels

Le comportement du monocristal est décrit par les équations qui suivent dans le cadre général de la loi de Schmid.

Pour un système demeurant actif :

$$\begin{cases} \tau^g(r) = \tau_c^g(r) \\ \dot{\tau}^g(r) = \dot{\tau}_c^g(r) \end{cases} \tag{III.20}$$

On déduit de ce système les vitesses de glissement $\dot{\gamma}^s(\mathbf{r})$.

Pour un système potentiellement actif qui ne s'active pas

$$\dot{\gamma}^s(\mathbf{r}) = 0 \text{ si } \tau^s(\mathbf{r}) = \tau_c^s(\mathbf{r}) \text{ et } \dot{\tau}^s(\mathbf{r}) \leq 0, \quad (\text{III.21})$$

Pour un système inactif

$$\dot{\gamma}^s(\mathbf{r}) = 0 \text{ si } \tau^s(\mathbf{r}) < \tau_c^s(\mathbf{r}). \quad (\text{III.22})$$

La vitesse de déformation plastique en tout point \mathbf{r} s'exprime en fonction des différentes vitesses de glissement plastique et du tenseur de Schmid

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p(\mathbf{r}) = R_{ij}^s(\mathbf{r}) \dot{\gamma}^s(\mathbf{r}). \quad (\text{III.23})$$

On a, de même pour les vitesses de rotation plastique, :

$$\dot{\omega}_{ij}^p(\mathbf{r}) = Q_{ij}^s(\mathbf{r}) \dot{\gamma}^s(\mathbf{r}) \quad (\text{III.24})$$

où

$$Q_{ij}^s(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(m_i n_j - n_i m_j) \quad (\text{III.25})$$

La relation constitutive élastique, supposée locale, est donnée par

$$\dot{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}(\mathbf{r}) (\dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}) - \dot{\epsilon}_{kl}^p(\mathbf{r})) \quad (\text{III.26})$$

(III.26) permet d'obtenir la relation suivante, valable pour les systèmes actifs qui restent actifs au cours du chargement, à partir de (III.5), (III.20) et (III.23) :

$$R_{ij}^s(\mathbf{r}) C_{ijkl}(\mathbf{r}) (\dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}) - \dot{\epsilon}_{kl}^p(\mathbf{r})) = \int_V H^{sh}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dot{\gamma}^h(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.27})$$

Ceci peut être inversé formellement, si l'on suppose l'existence de l'opérateur inverse K :

$$\dot{\gamma}^s(\mathbf{r}) = \int_V K_{kl}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.28})$$

On en déduit les vitesses de déformation et de rotation plastique

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p(\mathbf{r}) = \int_V R_{ij}^s(\mathbf{r}) K_{kl}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.29})$$

$$\dot{\omega}_{ij}^p(\mathbf{r}) = \int_V Q_{ij}^s(\mathbf{r}) K_{kl}^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.30})$$

que l'on peut écrire plus simplement

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p(\mathbf{r}) = \int_V P_{ijkl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.31})$$

$$\dot{\omega}_{ij}^p(\mathbf{r}) = \int_V T_{ijkl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.32})$$

En introduisant (III.31) dans (3.26), il vient :

$$\dot{\sigma}(\mathbf{r}) = \int_V l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.33})$$

où l_{ijkl} désigne les modules élastoplastiques tangents non locaux du milieu hétérogène non local considéré qui sont donnés par

$$l_{ijkl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = C_{ijkl}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - C_{ijmn}(\mathbf{r}) P_{mnkl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{III.34})$$

Ainsi, l'introduction de l'érouissage non local conduit à une relation constitutive non locale. Bien évidemment, le concept de non localité diffère de celui d'hétérogénéité.

A ce niveau, il est possible de résumer formellement les différentes lois constitutives susceptibles d'apparaître dans le cas où le comportement est hétérogène ou non, et en distinguant indépendamment le cas de l'érouissage local ou non. Ceci est présenté dans le tableau III.1

	Comportement local	Comportement non local
Matériau homogène	$\dot{\sigma} = l : \dot{\epsilon}$	$\dot{\sigma}(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{V}} l(\mathbf{r} - \mathbf{r}') : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}') dV'$
Matériau hétérogène	$\dot{\sigma}(\mathbf{r}) = l(\mathbf{r}) : \dot{\epsilon}(\mathbf{r})$	$\dot{\sigma}(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{V}} l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}') dV'$

Tableau III.1: Synthèse de différents types de comportement

Le cas non local hétérogène constitue donc une généralisation du cas hétérogène local.

3.2 Application au biphasé

Dans le cadre d'une modélisation biphasée de la structure cellulaire de dislocations, il convient de particulariser les équations générales écrites dans le paragraphe précédent.

En décomposant V en $V_S \cup V_H$, l'équation (III.33) devient

$$\dot{\sigma}(\mathbf{r}) = \int_{V_S} l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}') dV' + \int_{V_H} l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{III.35})$$

Le champ $\dot{\epsilon}(\mathbf{r})$ est décrit par l'intermédiaire de ses valeurs moyennes par phase

$$\dot{\epsilon}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \dot{\epsilon}^S & \text{si } \mathbf{r} \in V_S \\ \dot{\epsilon}^H & \text{si } \mathbf{r} \in V_H \end{cases} \quad (\text{III.36})$$

(III.35) devient alors

$$\dot{\sigma}(\mathbf{r}) = \left(\int_{V_S} l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV' \right) : \dot{\epsilon}^S + \left(\int_{V_H} l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV' \right) : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{III.37})$$

soit, en moyenne sur chaque phase,

$$\dot{\sigma}^S = \left(\frac{1}{V_S} \int_{V_S} \int_{V_S} l(r, r') dV' dV \right) : \dot{\epsilon}^S + \left(\frac{1}{V_S} \int_{V_S} \int_{V_H} l(r, r') dV' dV \right) : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{III.38})$$

$$\dot{\sigma}^H = \left(\frac{1}{V_H} \int_{V_H} \int_{V_S} l(r, r') dV' dV \right) : \dot{\epsilon}^S + \left(\frac{1}{V_H} \int_{V_H} \int_{V_H} l(r, r') dV' dV \right) : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{III.39})$$

On a donc finalement

$$\dot{\sigma}^S = I^{SS} : \dot{\epsilon}^S + I^{SH} : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{III.40})$$

$$\dot{\sigma}^H = I^{HS} : \dot{\epsilon}^S + I^{HH} : \dot{\epsilon}^H \quad (\text{III.41})$$

Le problème est maintenant d'exprimer ces modules $I^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = H, S$).

A cet effet, le critère de Schmid est écrit, pour les systèmes actifs dans chaque phase, à partir des valeurs moyennes dans chaque phase des différentes variables,

$$\begin{cases} \tau_\alpha^g = \tau_{c\alpha}^g \\ \dot{\tau}_\alpha^g = \dot{\tau}_{c\alpha}^g \end{cases} \quad (\text{III.42})$$

La relation constitutive du matériau s'écrit dans chaque phase :

$$\begin{cases} \dot{\sigma}^S = C : (\dot{\epsilon}^S - \dot{\epsilon}^{pS}) \\ \dot{\sigma}^H = C : (\dot{\epsilon}^H - \dot{\epsilon}^{pH}) \end{cases} \quad (\text{III.43})$$

De même, on a successivement

$$\begin{cases} \dot{\tau}_S^g = R_{ij}^{Sg} \dot{\sigma}_{ij} \\ \dot{\tau}_H^g = R_{ij}^{Hg} \dot{\sigma}_{ij} \end{cases} \quad (\text{III.44})$$

et

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_{ij}^{pS} = R_{ij}^{Sg} \dot{\gamma}_S^g \\ \dot{\epsilon}_{ij}^{pH} = R_{ij}^{Hg} \dot{\gamma}_H^g \end{cases} \quad (\text{III.45})$$

où R^S et R^H désignent respectivement les tenseurs de Schmid dans les phases S et H.

L'introduction de (III.8), (III.10), (III.42), (III.43), (III.44) et (III.45) dans le système (III.20), en moyenne sur chaque phase, mène à

$$\begin{cases} R_{ij}^{Sg} C_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl}^S - R_{kl}^{Sh} \dot{\gamma}_S^h) = H_{SS}^{gh} \dot{\gamma}_S^h + H_{SH}^{gh} \dot{\gamma}_H^h \\ R_{ij}^{Hg} C_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl}^H - R_{kl}^{Hh} \dot{\gamma}_H^h) = H_{HS}^{gh} \dot{\gamma}_S^h + H_{HH}^{gh} \dot{\gamma}_H^h \end{cases} \quad (\text{III.46})$$

qui peut se mettre sous la forme matricielle par blocs

$$\begin{pmatrix} H_{SS}^{gh} + R_{ij}^{Sg} C_{ijkl} R_{kl}^{Sh} & H_{SH}^{gh} \\ H_{HS}^{gh} & H_{HH}^{gh} + R_{ij}^{Hg} C_{ijkl} R_{kl}^{Hh} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\gamma}_S^h \\ \dot{\gamma}_H^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{ij}^{Sg} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^S \\ R_{ij}^{Hg} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^H \end{pmatrix} \quad (\text{III.47})$$

ou, lorsque l'inversion est possible,

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_S^g \\ \dot{\gamma}_H^g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{SS}^{gh} & M_{SH}^{gh} \\ M_{HS}^{gh} & M_{HH}^{gh} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{ij}^{Sh} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^S \\ R_{ij}^{Hh} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^H \end{pmatrix} \quad (\text{III.48})$$

avec

$$\begin{pmatrix} M_{SS}^{gh} & M_{SH}^{gh} \\ M_{HS}^{gh} & M_{HH}^{gh} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{SS}^{gh} + R_{ij}^{Sg} C_{ijkl} R_{kl}^{Sh} & H_{SH}^{gh} \\ H_{HS}^{gh} & H_{HH}^{gh} + R_{ij}^{Hg} C_{ijkl} R_{kl}^{Hh} \end{pmatrix}^{-1} \quad (\text{III.49})$$

Il est alors aisé d'obtenir le système suivant, à partir de (III.43) et (III.48)

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}^S &= l^{SS} : \dot{\epsilon}^S + l^{SH} : \dot{\epsilon}^H \\ \dot{\sigma}^H &= l^{HS} : \dot{\epsilon}^S + l^{HH} : \dot{\epsilon}^H \end{aligned} \quad (\text{III.50})$$

avec

$$l_{ijkl}^{SS} = C_{ijkl} - C_{ijmn} R_{mn}^{Sg} M_{SS}^{gh} R_{tu}^{Sh} C_{tukl} \quad (\text{III.51})$$

$$l_{ijkl}^{SH} = - C_{ijmn} R_{mn}^{Sg} M_{SH}^{gh} R_{tu}^{Hh} C_{tukl} \quad (\text{III.52})$$

$$l_{ijkl}^{HS} = - C_{ijmn} R_{mn}^{Hg} M_{HS}^{gh} R_{tu}^{Sh} C_{tukl} \quad (\text{III.53})$$

$$l_{ijkl}^{HH} = C_{ijkl} - C_{ijmn} R_{mn}^{Hg} M_{HH}^{gh} R_{tu}^{Hh} C_{tukl} \quad (\text{III.54})$$

Remarque : La matrice à inverser dans (III.48) présente une forme particulière quand on fait l'hypothèse $[H_{SH}^{gh} = 0]$. En effet, elle est dans ce cas triangulaire inférieure par blocs, et de blocs diagonaux carrés. Dans ces conditions, la matrice M^{gh} possède les mêmes propriétés caractéristiques, d'où $M_{SH}^{gh} = 0$ et, en conséquence, $I^{SH} = 0$. Ces propriétés vont s'avérer utiles dans la suite de ce travail en vue d'opérer des simplifications intéressantes.

Une expression explicite des modules élastoplastiques tangents non locaux a donc été obtenue dans le cas d'une description biphasée de la structure cellulaire.

En vue d'acquiescer définitivement la loi de comportement globale du monocristal, il reste à effectuer la transition d'échelle depuis le niveau des cellules jusqu'à celui du monocristal.

4) Conclusions

L'écroissage non local, observé expérimentalement dans la structure cellulaire de dislocations, induit par la déformation plastique à l'intérieur des cellules qui entraîne un durcissement des parois, peut donc s'exprimer en termes micromécaniques et nécessite l'utilisation d'une théorie elle-même non locale en vue de traiter les effets à grande distance rencontrés.

Cette démarche, développée dans le cadre d'un formalisme intégral, fait alors intervenir la notion formelle de matrice d'écroissage non locale qui définit l'aspect "isotrope" de l'écroissage.

La détermination d'une telle fonction d'interaction matérielle étant complexe dans le cadre d'une étude de champs globale, on adopte une description biphasée qui aboutit à une expression approchée, mais explicite, de la matrice d'écroissage non locale.

Ceci fait apparaître, au travers d'une description phénoménologique simplifiée de la cinétique des dislocations, une dépendance de celle-ci en fonction de l'histoire du matériau mais aussi, et surtout, de la topologie du biphasé (par l'intermédiaire du libre parcours moyen des dislocations) dont la représentation revêt une grande importance en vue d'une description réaliste de l'hétérogénéisation intragranulaire induite dans la structure cellulaire.

Ce problème sera évoqué plus en détail dans les chapitres suivants.

Chapitre IV

IV - Transitions d'échelles et localisations

1) Introduction

La loi de comportement élastoplastique non locale en tout point du monocristal a été exprimée formellement au cours du chapitre précédent. Cette opération est nécessaire avant d'effectuer les opérations de localisation puis d'homogénéisation en vue d'opérer la transition de l'échelle microscopique (au niveau des cellules de dislocations) jusqu'aux échelles supérieures.

Ces opérations sont mises en œuvre classiquement par la résolution d'une équation intégrale cinématique à partir des propriétés des fonctions d'interaction de Green.

A ce niveau, il paraît important de souligner la différence que l'on trouve entre l'aspect apparemment non local classique déduit des fonctions de Green (effet d'interaction à grande distance) et le phénomène physique d'écrouissage non local qui est induit dans la structure cellulaire de dislocations.

La loi de comportement non locale à l'échelle microscopique entraîne la mise en place d'une équation intégrale elle-même de type non locale en plus du caractère usuel apparemment non local que l'on rencontre avec les fonctions d'interaction de Green.

Théoriquement, cette équation intégrale est valable pour traiter le problème de milieu hétérogène qu'est le polycristal dans son ensemble. Toutefois, deux constatations permettent d'éviter cette démarche compliquée :

- du fait des mécanismes de stockage des dislocations dans les parois, la non localité qui traduit l'hétérogénéisation intragranulaire a une portée réduite à l'échelle intragranulaire,

- le polycristal, d'autre part, possède par essence un aspect granulaire fort avec la présence de joints de grain en guise de frontière pour chaque cristallite. Ainsi le grain constitue un volume intermédiaire incontournable, dont les dimensions peuvent être considérées comme grandes par rapport à la longueur d'onde des effets non locaux considérés dans ce travail [TFHM82].

Dans ces conditions, une démarche en deux étapes successives est d'un grand intérêt :

- Tout d'abord, la transition de l'échelle microscopique (cellules) à l'échelle mésoscopique (grains), à partir de l'équation intégrale non locale, est mise en œuvre. Elle conduit à l'écriture d'une loi de comportement supposée locale à l'échelle du grain. Cette démarche formelle, si elle s'avère capable en théorie de décrire complètement l'hétérogénéisation intragranulaire, reste malgré tout peu applicable à l'heure actuelle. Elle est donc appliquée de façon simplifiée, dans le cadre d'une approximation biphasée des domaines intragranulaires.
- Enfin la transition d'échelle ultérieure, du grain au polycristal, est effectuée à l'aide d'un schéma autocohérent classique, qui donne lieu à des résultats tant micro-, que méso- et macroscopiques [LB89, L93].

2) Transition d'échelle micro-méso

2.1 Equation intégrale non locale pour le monocristal

2.1.1 Mise en œuvre

De même que pour les matériaux hétérogènes à comportement local, le comportement global local d'un milieu macrohomogène et microhétérogène à comportement microscopique non local est défini par la relation tensorielle locale:

$$\dot{\Sigma} = L^{\text{eff}} : \dot{E} \quad (\text{IV.1})$$

qui lie le tenseur des vitesses de contrainte macroscopique à celui des vitesses de déformation totale macroscopique par l'intermédiaire du tenseur des modules élastoplastiques macroscopiques L^{eff} .

En plus de la connaissance du comportement microscopique, l'évaluation de L^{eff} requiert la détermination, par exemple, du tenseur de localisation des vitesses de déformation qui lie la vitesse de déformation locale aux vitesses de déformation imposées aux frontières du milieu étudié. Ce tenseur de localisation est généralement obtenu par l'intermédiaire de la fonction de Green correspondant à un milieu homogène de référence [LKB90].

Dans le cas de solides hétérogènes locaux, il est utile d'introduire un milieu homogène de référence, de modules tangents L^0 , et une déviation du comportement par rapport à ce milieu, $\delta l(r)$ [LB89]. Ceci permet d'exprimer les modules tangents locaux $l(r)$ sous la forme :

$$\delta l(r) = L^0 + \delta l(r) \quad (IV.2)$$

en vue d'obtenir une équation intégrale liant le champ des vitesses de déformations locales $\dot{\epsilon}(r)$ et celui, dual, des vitesses de contrainte $\dot{\sigma}(r)$.

Dans le cas de milieux hétérogènes possédant des propriétés non locales, on adopte la même approche, qui conduit à la décomposition de $l(r, r')$ en une partie locale et une partie non locale :

$$l(r, r') = (L^0 + \delta l^1(r))\delta(r - r') + \delta l^2(r, r') \quad (IV.3)$$

où

- 1) L^0 sont les modules tangents du milieu de référence donc le comportement est supposé uniforme et local,
- 2) δl^1 représente la part hétérogène locale de $l(r, r')$,

3) δl^2 désigne la déviation non locale relativement au milieu hétérogène local défini par $(L^0 + \delta l^1(r))$.

En introduisant cette décomposition (IV.3) dans l'expression de l'équation non locale constitutive (III.33), il vient :

$$\dot{\sigma}(r) = \int_V \left[(L^0 + \delta l^1(r)) \delta(r-r') + \delta l^2(r, r') \right] : \dot{\epsilon}(r') dV' \quad (IV.4)$$

soit

$$\dot{\sigma}(r) = (L^0 + \delta l^1(r)) : \dot{\epsilon}(r) + \int_V \delta l^2(r, r') : \dot{\epsilon}(r') dV' \quad (IV.5)$$

L'équation d'équilibre usuelle

$$\dot{\sigma}_{ij,j}(r) = 0 \quad (IV.6)$$

de même que les conditions de compatibilité

$$\dot{\epsilon}_{ij}(r) = \frac{1}{2} (\dot{u}_{i,j}(r) + \dot{u}_{j,i}(r)) \quad (IV.7)$$

conduisent à une équation de type Navier :

$$L^0_{ijkl} \dot{u}_{k,lj} + \left[\delta l^1_{ijkl}(r) \dot{\epsilon}_{kl}(r) \right]_{,j} + \left[\int_V \delta l^2_{ijkl}(r, r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \right]_{,j} = 0 \quad (IV.8)$$

Les seconde et troisième parties du membre de gauche de (IV.8) peuvent être considérées comme des forces internes de volume $\dot{f}_i(r)$ de telle sorte que l'on peut écrire, en tout point r :

$$L^0_{ijkl} \dot{u}_{k,lj}(r) + \dot{f}_i(r) = 0 \quad (IV.9)$$

où

$$\dot{f}_i(r) = \left[\delta l^1_{ijkl}(r) \dot{\epsilon}_{kl}(r) \right]_{,j} + \left[\int_V \delta l^2_{ijkl}(r, r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \right]_{,j} \quad (IV.10)$$

On introduit le tenseur de Green G^0 du milieu homogène de référence infini défini par

$$\left\{ \begin{array}{l} L_{ijkl}^0 G_{jn,ik}^0(r-r') + \delta_{in} \delta(r-r') = 0 \\ \text{Plus les conditions aux limites appropriées} \\ \text{en vitesses imposées à la frontière.} \end{array} \right. \quad (IV.11)$$

D'autre part, on a

$$\dot{u}_n(r) = \int_V \delta_{in} \delta(r-r') \dot{u}_1(r') dV' \quad (IV.12)$$

On obtient alors facilement l'intégrale suivante à partir de (IV.10), (IV.11) et (IV.12) :

$$\dot{u}_n(r) = \dot{u}_n^0(r) + \int_V G_{in}^0(r-r') \dot{f}_i(r') dV' \quad (IV.13)$$

où

$$\dot{u}_n^0(r) = - \int_S L_{ijkl}^0 G_{jn,i}^0(r-r') \dot{u}_l(r') n_k(r') dS', \quad (IV.14)$$

Dans le cas de vitesses imposées à la frontière, $\dot{u}_n^0(r)$ représente la solution au problème homogène du matériau homogène local, de modules tangents L_{ijkl}^0 , soumis aux conditions limites de vitesses de déplacement imposées à la frontière du solide.

Le terme intégral dans (IV.13) est transformé par intégration par parties et conduit à l'expression suivante :

$$\dot{u}_n(r) = \dot{u}_n^0(r) + \int_V G_{in,j}^0(r-r') \left\{ \delta l_{ijkl}^1(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') + \int_{V'} \delta l_{ijkl}^2(r',r'') \dot{\epsilon}_{kl}(r'') dV'' \right\} dV' \quad (IV.15)$$

ou, en prenant en compte la décomposition (IV.3) :

$$\dot{u}_n(\mathbf{r}) = \dot{u}_n^0(\mathbf{r}) + \int_V G_{in,j}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \int_{V'} \{l_{ijkl}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') - L_{ijkl}^0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\} \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}'') dV'' dV' \quad (\text{IV.16})$$

On en déduit l'expression du gradient des vitesses

$$\dot{u}_{n,m}(\mathbf{r}) = \dot{u}_{n,m}^0(\mathbf{r}) + \int_V G_{in,jm}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \int_{V'} \{l_{ijkl}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') - L_{ijkl}^0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\} \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}'') dV'' dV' \quad (\text{IV.17})$$

La symétrisation de (IV.17) permet d'obtenir le tenseur des vitesses de déformation plastique :

$$\dot{\epsilon}_{mn}(\mathbf{r}) = \dot{E}_{mn} - \int_V \Gamma_{mnij}^{OS}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \int_{V'} \{l_{ijkl}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') - L_{ijkl}^0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\} \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}'') dV'' dV' \quad (\text{IV.18})$$

ou

$$\dot{\epsilon}_{mn}(\mathbf{r}) = \dot{E}_{mn} - \int_V \Gamma_{mnij}^{OS}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \left\{ \delta l_{ijkl}^1(\mathbf{r}') \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}') + \int_{V'} \delta l_{ijkl}^2(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}'') dV'' \right\} dV' \quad (\text{IV.19})$$

où $\delta l_{ijkl}(\mathbf{r})$ désigne la déviation $l_{ijkl}(\mathbf{r}) - L_{ijkl}^0$ et Γ^{OS} est la partie symétrique du tenseur de Green modifié correspondant au milieu homogène de référence, étant telle que :

$$\Gamma_{mnij}^{OS} = -\frac{1}{2} (G_{in,jm}^0 + G_{im,jn}^0). \quad (\text{IV.20})$$

De même, on obtient l'expression des vitesses de rotation plastique après antisymétrisation de (IV.17) :

$$\dot{\omega}_{mn}(\mathbf{r}) = \dot{\Omega}_{mn} - \int_V \Gamma_{mnij}^{OA}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \int_{V'} \{l_{ijkl}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') - L_{ijkl}^0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\} \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}'') dV'' dV' \quad (\text{IV.21})$$

où

$$\Gamma_{mnij}^{0A} = -\frac{1}{2} (G_{in,jm}^0 - G_{im,jn}^0) \quad (IV.22)$$

Dans le cas d'un comportement hétérogène mais local, les expressions des vitesses de déformation plastique ainsi que de rotation plastique se déduisent en ne considérant que la part locale de $l_{ijkl}(r, r')$:

$$l_{ijkl}(r, r') = l_{ijkl}(r) \delta(r - r') \quad (IV.23)$$

Dans ce cas, les expressions intégrales (IV.18) et (IV.22) se réduisent aux équations usuelles données par [BZ84, LKB90]

$$\dot{\epsilon}_{mn}(r) = \dot{E}_{mn} - \int_V \Gamma_{mnij}^{0S}(r - r') \int_{V'} \delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \quad (IV.24)$$

$$\dot{\omega}_{mn}(r) = \dot{\Omega}_{mn} - \int_V \Gamma_{mnij}^{0A}(r - r') \int_{V'} \delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \quad (IV.25)$$

où $\delta l_{ijkl}(r)$ désigne la déviation $l_{ijkl}(r) - L_{ijkl}^0$.

2.1.2 Résolution formelle

La solution formelle de (IV.18) et (IV.22) est obtenue par l'intermédiaire des tenseurs de localisation des vitesses de déformation et de rotation qui sont tels que:

$$\dot{\epsilon}_{mn}(r) = A_{mnkl}(r) \dot{E}_{kl} \quad (IV.26)$$

$$\dot{\omega}_{mn}(r) = \dot{\Omega}_{mn} + D_{mnkl}(r) \dot{E}_{kl} \quad (IV.27)$$

En introduisant (IV.26) dans (III.33), il vient :

$$\dot{\sigma}_{ij}(r) = \left\{ \int_V l_{ijkl}(r, r') A_{klmn}(r') dV' \right\} \dot{E}_{mn} \quad (IV.28)$$

La valeur moyenne du champ $\dot{\sigma}_{ij}(r)$ sur tout le volume V du milieu hétérogène non local étudié s'exprime par

$$\dot{\Sigma}_{ij} = \frac{1}{V} \left\{ \int_V \int_{V'} l_{ijkl}(r, r') A_{klmn}(r') dV' dV \right\} \dot{E}_{mn} \quad (\text{IV.29})$$

ce qui permet d'obtenir la relation de comportement locale à l'échelle macroscopique :

$$\dot{\Sigma} = L^{\text{eff}} : \dot{E} \quad (\text{IV.30})$$

où L^{eff} sont les modules tangents effectifs du milieu macroscopique homogène local.

Le problème principal de la résolution du problème micromécanique non local développé dans ce travail réside donc finalement dans l'obtention du tenseur de localisation $A(r)$.

2.1.3 Discussion

La résolution pratique de l'équation intégrale (IV.18) peut s'opérer en principe à l'aide de diverses méthodes telles l'approximation de Born, le modèle de Taylor-Lin ou la solution autocohérente. Mais, quelle que soit la démarche utilisée, cette résolution nécessite la description topologique du milieu hétérogène étudié (correspondant au monocristal dans notre cas), la structure interne devant être caractérisée par la forme, la fraction volumique, l'orientation voire la position relative des constituants.

En effet, tous ces paramètres sont susceptibles d'évoluer au cours de la déformation plastique et constituent l'un des effets de l'hétérogénéisation plastique.

Ainsi, si avant tout chargement le matériau est recristallisé, avec une distribution aléatoire des défauts, on observe couramment après quelques pour cent de déformation plastique une structure cellulaire de dislocations bien établie et caractéristique du trajet subi. De grandes évolutions dans la topologie de la structure cellulaire sont donc susceptibles de se produire contrairement au cas du grain, dont les frontières sont parfaitement définies et évoluent peu, qui se déforme au sein de l'agrégat qu'est le polycristal.

La formation et l'évolution de la structure cellulaire constituent donc un problème qui s'apparente au cas d'un problème de frontières évolutives.

Après cette discussion, un constat simple s'impose : le type de démarche suivante, avec évaluation de la loi de comportement à l'échelle microscopique accompagnée d'une transition d'échelle, est parfaitement à même de traiter ce problème à frontière évolutive dans son ensemble. Mais il est nécessaire, à cette fin, de connaître parfaitement l'expression de la fonction matérielle d'interaction en tout point du milieu. Dans ce cas, la connaissance de la distribution des cisssions critiques $\tau_c(r)$ permet d'accéder par l'intermédiaire de (III.13) à celle des densités de dislocations, sur les différents systèmes de glissement, en tout point du milieu, d'où une description précise de la "topographie" du monocristal. L'hétérogénéisation non aléatoire, la structuration progressive du matériau sont donc susceptibles d'être décrites par une telle démarche générale.

Finalement, malgré les atouts théoriques évidents de cette méthode, un problème majeur demeure : l'imparfaite connaissance de la matrice d'écrouissage non local à l'heure actuelle, qui est rédhibitoire quant aux applications pratiques.

L'approche à suivre, qui vise à développer un outil physiquement cohérent et mathématiquement correct tout en étant praticable numériquement, capable de décrire le développement d'une structure cellulaire intragranulaire quel que soit

le trajet de chargement, est de type énergétique. Elle sera évoquée dans le chapitre suivant.

Toutefois, dans ce travail constituant la première approche d'une description micromécanique de l'hétérogénéisation intragranulaire, on adopte une stratégie phénoménologique, en imposant de l'extérieur la topologie caractéristique du milieu intragranulaire, dans le cas d'une description biphasée du grain.

Ainsi, si on considère le problème de parois H noyées dans une matrice S (ou vice et versa), que l'on peut traiter à l'aide d'une topologie à base ellipsoïdale, le schéma autocohérent peut s'appliquer et conduit à des résultats intéressants.

Une application plus proche de la réalité expérimentale peut être développée à partir du formalisme d'inclusion enrobée, déjà vu par ailleurs [C94], et on a alors une topologie où la phase H correspond à un enrobage fin autour de l'ellipsoïde représentant la phase S.

D'autres descriptions, tel le modèle à trois phases [ABH93], sont susceptibles de décrire la topologie caractéristique du problème micromécanique posé.

Ce type de démarche, basée sur une description figée de la microstructure intragranulaire, peut se justifier dans le cas de trajets monotones où, après la mise en place rapide de la structure cellulaire aux débuts de la déformation plastique, celle-ci évolue peu.

2.2 Approximation autocohérente pour le grain biphasé non local

2.2.1 Introduction

L'équation intégrale cinématique non locale présentée précédemment peut être résolue, dans le cadre d'une description biphasée du milieu intragranulaire, par l'intermédiaire d'un schéma de type autocohérent avec introduction du milieu

effectif homogène, supposé local du fait des effets non locaux réduits à l'échelle microscopique.

A cet effet, une topologie simple est proposée, où les parois H, représentées par des ellipsoïdes, sont noyées dans une matrice S (ou vice et versa) :

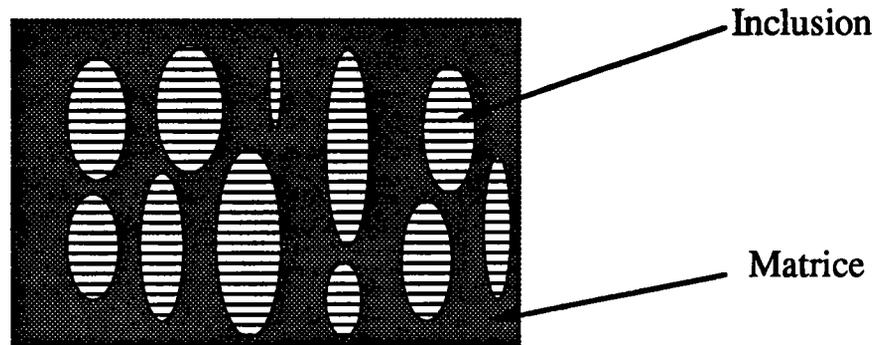


Figure IV.1: Topologie utilisée dans le cas du schéma autocohérent

On impose phénoménologiquement l'évolution de la forme et de l'orientation des constituants, ainsi que les différentes fractions volumiques de la façon suivante :

- la forme et la fraction volumique des cellules sont supposées constantes au cours de la déformation plastique, d'où la même propriété pour les rapports de forme de l'ellipsoïde représentatif;
- l'orientation des ellipsoïdes est définie suivant un critère d'activité maximale des systèmes de glissement du monocristal. Ainsi, on projette l'ellipsoïde sur le système de glissement initialement le plus actif (Annexe 1), conformément à diverses observations expérimentales, en n'autorisant pas de rotation induite à l'intérieur du grain au cours de la déformation plastique.

Cette démarche conduit à une expression explicite dans le cas d'inclusions sphériques et d'un milieu isotrope incompressible, ainsi qu'à des résultats numériques appliqués au polycristal dans le cas anisotrope général (résultats présentés en IV.3).

Une application possible de cette méthode est de décrire le mécanisme particulier d'Orowan où les boucles de dislocations viennent se stocker autour de précipités.

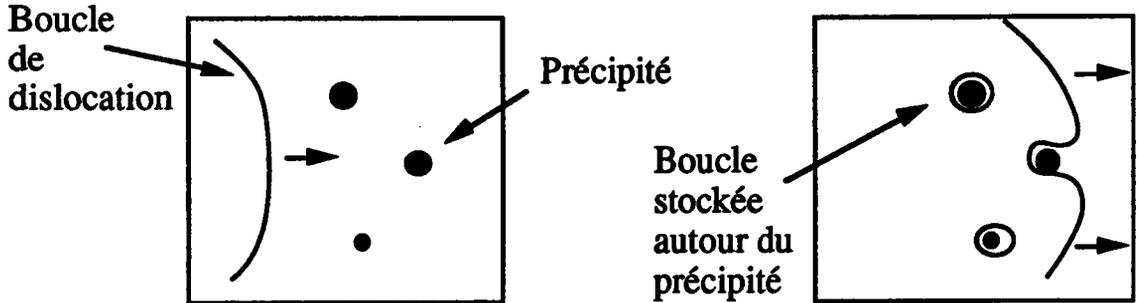


Figure IV.2: Mécanisme d'Orowan

2.2.2 Approximation autocohérente

Dans le cas du biphasé non local, le champ de polarisation des contraintes est défini par

$$\dot{t}_{ij}(r') = \int_{V'} \left\{ l_{ijkl}(r', r'') - L_{ijkl}^0 \delta(r' - r'') \right\} \dot{\epsilon}_{kl}(r'') dV'' \quad (\text{IV.31})$$

et devient, en valeur moyenne sur chaque phase :

$$\begin{aligned} \dot{t}_{ij}^S &= \frac{1}{V_S} \left\{ \int_{V_S} \int_{V_S} \left\{ l_{ijkl}(r', r'') - L_{ijkl}^0 \delta(r' - r'') \right\} dV'' dV' \right\} \dot{\epsilon}_{kl}^S \\ &+ \frac{1}{V_S} \left\{ \int_{V_S} \int_{V_H} l_{ijkl}(r', r'') dV'' dV' \right\} \dot{\epsilon}_{kl}^H \end{aligned} \quad (\text{IV.32})$$

$$\begin{aligned} \dot{t}_{ij}^H &= \frac{1}{V_H} \left\{ \int_{V_H} \int_{V_S} l_{ijkl}(r', r'') dV'' dV' \right\} \dot{\epsilon}_{kl}^S \\ &+ \frac{1}{V_H} \left\{ \int_{V_H} \int_{V_H} \left\{ l_{ijkl}(r', r'') - L_{ijkl}^0 \delta(r' - r'') \right\} dV'' dV' \right\} \dot{\epsilon}_{kl}^H \end{aligned} \quad (\text{IV.33})$$

soit le système

$$\begin{cases} \dot{t}_{ij}^S = (I_{ijkl}^{SS} - L_{ijkl}^0) \dot{e}_{kl}^S + I_{ijkl}^{SH} \dot{e}_{kl}^H \\ \dot{t}_{ij}^H = I_{ijkl}^{HS} \dot{e}_{kl}^S + (I_{ijkl}^{HH} - L_{ijkl}^0) \dot{e}_{kl}^H \end{cases} \quad (IV.34)$$

En introduisant ces valeurs dans l'équation intégrale non locale (IV.18), on arrive tout d'abord à

$$\dot{e}_{mn}(\mathbf{r}) = \dot{E}_{mn} - \int_{V_S} \Gamma_{mnij}^{OS}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \dot{t}_{ij}^S dV' - \int_{V_H} \Gamma_{mnij}^{OS}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \dot{t}_{ij}^H dV' \quad (IV.35)$$

puis, après des opérations de moyenne sur V_S et V_H

$$\begin{cases} \dot{e}_{mn}^S = \dot{E}_{mn} - T_{mnij}^{OSS} \dot{t}_{ij}^S - T_{mnij}^{OSH} \dot{t}_{ij}^H \\ \dot{e}_{mn}^H = \dot{E}_{mn} - T_{mnij}^{OHS} \dot{t}_{ij}^S - T_{mnij}^{OHH} \dot{t}_{ij}^H \end{cases} \quad (IV.36)$$

où

$$T_{mnij}^{0\alpha\beta} = \frac{1}{V_\alpha} \int_{V_\alpha} \int_{V_\beta} \Gamma_{mnij}^{OS}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV' dV \quad \text{avec } (\alpha, \beta) = (H, S) \quad (IV.37)$$

Ainsi, après quelques opérations de moyenne, l'équation de type intégral (IV.18), trop formelle pour être mise en œuvre sans une bonne connaissance de $H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, peut s'écrire sous la forme tensorielle décrite dans le système (IV.36). Ces simplifications, si elles entraînent une perte d'informations du fait de l'introduction du cas biphasé, permettent néanmoins de présenter des qualités calculatoires évidentes.

D'autre part, on observe, dans le système (IV.36), un double aspect non local du fait, tout d'abord, de la présence des $T^{\alpha\beta}$ relatifs aux interactions à distances introduites par les fonctions de Green, mais aussi, et surtout, du fait de la non localité de la loi de comportement qui provient du phénomène physique typique de la structure cellulaire.

Les coefficients tensoriels d'interaction $T^{\alpha\beta}$ sont calculés à partir de $\Gamma^{oS}(r-r')$ qui est composé de deux termes : un premier, proportionnel à ρ^{-3} , et un second, proportionnel à ρ^{-5} , où ρ est la distance caractéristique entre S et H [DZ73].

La convergence des équations (IV.36) est faible si L^o est choisi arbitrairement. Par contre si L^o est choisi égal à L^{eff} , on suppose que la contribution des termes croisés $T^{\alpha\beta}$ dans le système (IV.36) peut être négligée. En effet, on a la propriété

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{V} \int_V \dot{t}_{ij}(r) dV &= \frac{1}{V} \int_V \int_{V'} \left\{ l_{ijkl}(r, r') - L_{ijkl}^o \delta(r - r') \right\} \dot{\epsilon}_{kl}(r') \\
 &= \frac{1}{V} \int_V \left(\int_{V'} l_{ijkl}(r, r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \right) dV - L_{ijkl}^o \left(\frac{1}{V} \int_V \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \right) \\
 &= \frac{1}{V} \int_V \dot{\sigma}_{ij}(r') dV' - L_{ijkl}^o \dot{E}_{kl} \\
 &= \dot{\Sigma}_{ij} - L_{ijkl}^o \dot{E}_{kl}
 \end{aligned} \tag{IV.38}$$

Dans le cadre de l'approximation autocohérente, si l'on choisit le milieu homogène de référence identique au milieu effectif, on obtient donc :

$$\frac{1}{V} \int_V \dot{t}_{ij}(r') dV' = \dot{\Sigma}_{ij} - L_{ijkl}^{eff} \dot{E}_{kl} = 0 \tag{IV.39}$$

ce qui renforce la convergence de (IV.37) en permettant de ne pas considérer les contributions en $T^{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$). Les équations (IV.36) peuvent se réduire à

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}^S = \dot{E} - T^{eff} : \left[(l^{SS} - L^{eff}) : \dot{\epsilon}^S + l^{SH} : \dot{\epsilon}^H \right] \\ \dot{\epsilon}^H = \dot{E} - T^{eff} : \left[l^{HS} : \dot{\epsilon}^S + (l^{HH} - L^{eff}) : \dot{\epsilon}^H \right] \end{cases} \tag{IV.40}$$

après inversion, les localisations suivantes sont obtenues

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}^S = A^S : \dot{E} \\ \dot{\epsilon}^H = A^H : \dot{E} \end{cases} \tag{IV.41}$$

avec

$$A^S = \left[I + T^{\text{eff}} : \Delta l^{\text{SS}} + T^{\text{eff}} : l^{\text{SH}} : (I + T^{\text{eff}} : \Delta l^{\text{HH}})^{-1} : T^{\text{eff}} : l^{\text{HS}} \right]^{-1} : \left[I - T^{\text{eff}} : l^{\text{SH}} : (I + T^{\text{eff}} : \Delta l^{\text{HH}})^{-1} \right] \quad (\text{IV.42})$$

$$A^H = (I + T^{\text{eff}} : \Delta l^{\text{HH}})^{-1} : (I - T^{\text{eff}} : l^{\text{HS}} : A^S) \quad (\text{IV.43})$$

où $\Delta l^{\text{SS}} = l^{\text{SS}} - L^{\text{eff}}$ et $\Delta l^{\text{HH}} = l^{\text{HH}} - L^{\text{eff}}$.

Ces expressions sont plus compliquées que celles obtenues dans le cas d'un biphasé local :

$$\begin{aligned} A^S &= (I + T^{\text{eff}} : \Delta l^{\text{SS}})^{-1} \\ A^H &= (I + T^{\text{eff}} : \Delta l^{\text{HH}})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{IV.44})$$

Le problème consiste maintenant à calculer les modules effectifs du grain L^{eff} lorsque la structure cellulaire est décrite par un biphasé non local. On a la relation de moyenne pour le grain :

$$\dot{\Sigma} = f \dot{\sigma}^S + (1-f) \dot{\sigma}^H \quad (\text{IV.45})$$

En introduisant (IV.42) et (IV.43) dans (IV.45), on arrive à

$$\dot{\Sigma} = L^{\text{eff}} : \dot{E} \quad (\text{IV.46})$$

avec

$$L^{\text{eff}} = \left[f l^{\text{SS}} + (1-f) l^{\text{HS}} \right] : A^S + \left[f l^{\text{SH}} + (1-f) l^{\text{HH}} \right] : A^H \quad (\text{IV.47})$$

L'équation tensorielle (IV.47), hautement implicite en l'inconnue L^{eff} , nécessite évidemment quelques aménagements et simplifications en vue d'une résolution pratique.

Des résultats appliqués au cas polycristallin, basés sur cette formulation, sont présentés en IV.3.

2.2.3 Cas d'un matériau biphasé non local isotrope et incompressible

Dans le cas d'un matériau isotrope incompressible, le tenseur T^{eff} se réduit à [K90]

$$T_{ijkl}^{\text{eff}} = \frac{1}{15\mu^e} (-\delta_{ij}\delta_{kl} + 3I_{ijkl}) \quad (\text{IV.48})$$

où μ^e est le module de cisaillement tangent du milieu homogène équivalent.

Les relations (IV.34) s'expriment de la façon suivante, dans le cas de milieux non locaux isotropes et incompressibles

$$\begin{cases} \dot{t}_{ij}^S = 2(\mu^{SS} - \mu^e) \dot{\epsilon}_{ij}^S + 2\mu^{SH} \dot{\epsilon}_{ij}^H \\ \dot{t}_{ij}^H = 2\mu^{HS} \dot{\epsilon}_{ij}^S + 2(\mu^{HH} - \mu^e) \dot{\epsilon}_{ij}^H \end{cases} \quad (\text{IV.49})$$

En conséquence, on a, à partir de (IV.36), (IV.48) et (IV.49) :

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_{ij}^S = \dot{E}_{ij} - \frac{2}{5\mu^e} [(\mu^{SS} - \mu^e) \dot{\epsilon}_{ij}^S + \mu^{SH} \dot{\epsilon}_{ij}^H] \\ \dot{\epsilon}_{ij}^H = \dot{E}_{ij} - \frac{2}{5\mu^e} [\mu^{HS} \dot{\epsilon}_{ij}^S + (\mu^{HH} - \mu^e) \dot{\epsilon}_{ij}^H] \end{cases} \quad (\text{IV.50})$$

On en déduit les localisations des vitesses de déformation

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_{ij}^S = \frac{5\mu^e (3\mu^e + 2\mu^{HH} - 2\mu^{SH})}{(3\mu^e + 2\mu^{SS})(3\mu^e + 2\mu^{HH}) - 4\mu^{SH}\mu^{HS}} \dot{E}_{ij} \\ \dot{\epsilon}_{ij}^H = \frac{5\mu^e (3\mu^e + 2\mu^{SS} - 2\mu^{HS})}{(3\mu^e + 2\mu^{SS})(3\mu^e + 2\mu^{HH}) - 4\mu^{SH}\mu^{HS}} \dot{E}_{ij} \end{cases} \quad (\text{IV.51})$$

Pour un matériau biphasé local ($\mu^{SH} = \mu^{HS} = 0$), (IV.51) se réduit au résultat classique [BZ81a]

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_{ij}^S = \frac{5\mu^e}{(3\mu^e + 2\mu^{SS})} \dot{E}_{ij} \\ \dot{\epsilon}_{ij}^H = \frac{5\mu^e}{(3\mu^e + 2\mu^{HH})} \dot{E}_{ij} \end{cases} \quad (\text{IV.52})$$

Par contre, dans le cas non local pouvant être assimilé à celui de la structure cellulaire, si l'on fait l'hypothèse ($\mu^{SH} = 0$ et $\mu^{HS} \neq 0$), il vient :

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_{ij}^S = \frac{5\mu^e}{(3\mu^e + 2\mu^{SS})} \dot{E}_{ij} \\ \dot{\epsilon}_{ij}^H = \frac{5\mu^e}{(3\mu^e + 2\mu^{HH})} \left(1 - \frac{2\mu^{HS}}{3\mu^e + 2\mu^{SS}} \right) \dot{E}_{ij} \end{cases} \quad (IV.53)$$

On observe alors que la localisation dans S reste de type local, par contre l'influence de μ^{HS} sur la localisation dans H peut se révéler significative avec, dans tous les cas, un effet de réduction des vitesses de déformation dans H par rapport au cas local (IV52), d'où un renforcement de l'effet d'hétérogénéisation entre phases.

A partir de la relation de moyenne au niveau des vitesses de déformation :

$$\dot{E} = f \dot{\epsilon}^S + (1-f) \dot{\epsilon}^H \quad (IV.54)$$

l'équation implicite du second ordre

$$\frac{f 5\mu^e (3\mu^e + 2\mu^{HH} - 2\mu^{SH}) + (1-f) 5\mu^e (3\mu^e + 2\mu^{SS} - 2\mu^{HS})}{(3\mu^e + 2\mu^{SS})(3\mu^e + 2\mu^{HH}) - 4\mu^{SH} \mu^{HS}} = 1 \quad (IV.55)$$

permet le calcul du module tangent effectif μ^e pour un matériau non local, biphasé, isotrope et incompressible.

2.2.4 Conclusions

L'introduction d'une loi de comportement non locale en vue de décrire l'hétérogénéisation du milieu intragranulaire permet d'obtenir une équation intégrale cinématique que l'on peut résoudre, sous certaines conditions, à l'aide d'un schéma autocohérent. Malgré la réduction de Γ à sa contribution locale, des effets non locaux dus au comportement sont pris en compte par cette démarche.

Des résultats obtenus à partir de cette formulation sont présentés plus loin dans le paragraphe relatif à l'application au polycristal.

La pauvreté topologique d'une démarche basée uniquement sur un schéma autocohérent, comme c'est le cas ici, permet néanmoins d'envisager une application, qui correspond à la description du mécanisme d'Orowan avec stockage de boucles de dislocations autour de précipités.

Dans le paragraphe suivant, on présente une tentative de meilleure description des effets topologiques à l'aide du formalisme d'inclusion enrobée.

2.3 Application du formalisme d'inclusion enrobée au cas tangent non local

2.3.1 Introduction

La structure cellulaire de dislocations est mieux représentée par une topologie de type inclusion enrobée que par la description simple vue lors du paragraphe précédent. On a dans ce cas la géométrie suivante :

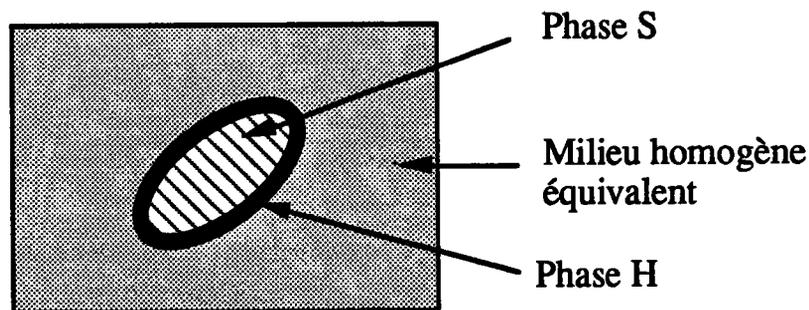


Figure IV3 : Application de l'inclusion enrobée dans le cas non local

Le cœur de l'inclusion composite est constitué par un ellipsoïde S représentant l'intérieur de la cellule, alors que l'enrobage correspond à la phase H. La liaison entre S et H est supposée parfaite. L'inclusion enrobée baigne dans le milieu homogène équivalent à la structure cellulaire.

Cette formulation reste valide tant que la fraction volumique de revêtement est faible [CSB94a]. C'est le cas dans ce travail, où l'on définit couramment, à partir de données expérimentales, une fraction volumique de parois de l'ordre de 10 à 20%.

Un tel formalisme a déjà été développé par ailleurs dans le cas d'une inclusion enrobée élastique hétérogène [C94], et conduit à des confrontations réussies avec les données expérimentales existantes [CSB94b].

La démarche micromécanique mise en œuvre dans le cas de l'inclusion enrobée décrivant la structure cellulaire de dislocations, est basée d'une part, sur l'équation intégrale non locale développée dans ce chapitre et, d'autre part, sur les propriétés des opérateurs interfaciaux.

Le problème élastoplastique avec évolution des frontières correspondant à l'hétérogénéisation intragranulaire est traité ici, comme pour l'approximation autocohérente développée dans le paragraphe précédent, de façon phénoménologique en conservant constants les fractions volumiques et les rapports de forme des ellipsoïdes utilisés.

2.3.2 Equation cinétique de localisation

L'équation intégrale obtenue en (IV.35)

$$\dot{\epsilon}(\mathbf{r}) = \dot{\mathbf{E}} - \int_{\mathbf{V}} \Gamma^{OS}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') : \dot{\mathbf{i}}(\mathbf{r}') dV'$$

devient, si l'on utilise la déformation moyenne dans l'inclusion composite $\bar{\epsilon}^c$ définie par

$$\bar{\epsilon}^c = f \bar{\epsilon}^S + (1-f) \bar{\epsilon}^H, \quad (\text{IV.56})$$

$$\bar{\epsilon}^c = \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{V}} \int_{\mathbf{V}} \Gamma^{OS}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') : \dot{\mathbf{i}}(\mathbf{r}') dV' \quad (\text{IV.57})$$

où \dot{E} est la vitesse de déformation totale imposée à l'infini.

Or, d'après les résultats d'Eshelby [E61] pour une inclusion ellipsoïdale, on a

$$\int_V \Gamma^{0S}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV' = T^0(L^0) \quad \text{si } \mathbf{r} \in V \quad (\text{IV.58})$$

On en déduit donc

$$\bar{\dot{\epsilon}}^c = \dot{E} - \frac{V_S}{V} T^0 : \left(\frac{1}{V_S} \int_{V_S} \dot{\mathbf{i}}(\mathbf{r}') dV' \right) - \frac{V_H}{V} T^0 : \left(\frac{1}{V_H} \int_{V_H} \dot{\mathbf{i}}(\mathbf{r}') dV' \right) \quad (\text{IV.59})$$

ou, d'après (IV.32) et (IV.33) :

$$\bar{\dot{\epsilon}}^c = \dot{E} - f T^0 : \dot{\mathbf{i}}^S - (1-f) T^0 : \dot{\mathbf{i}}^H \quad (\text{IV.60})$$

Finalement, on obtient l'équation cinématique suivante :

$$\left[f (I + T^0 : \Delta I^{SS}) + (1-f) T^0 : I^{HS} \right] : \bar{\dot{\epsilon}}^S + \left[(1-f)(I + T^0 : \Delta I^{HH}) + f T^0 : I^{SH} \right] : \bar{\dot{\epsilon}}^H = \dot{E} \quad (\text{IV.61})$$

Cette relation constitue une première équation nécessaire en vue d'écrire les tenseurs de localisation des vitesses moyennes par phase $\bar{\dot{\epsilon}}^S$ et $\bar{\dot{\epsilon}}^H$ en fonction de \dot{E} . Une deuxième relation provient des propriétés interfaciales caractéristiques de la topologie d'inclusion enrobée.

2.3.3 Propriétés interfaciales de l'inclusion enrobée

Soit le cas général d'une interface I de normale $\bar{\mathbf{n}}$ séparant deux solides, notés S et H , dans lesquels on a un champ de vitesses de contraintes, décrit par $\dot{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}_S)$ dans S et $\dot{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}_H)$ dans H , supposé en équilibre dans chaque phase :

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_{ij}(r_S) &= 0 \quad \forall r_S \in V_S, \\ \dot{\sigma}_{ij}(r_H) &= 0 \quad \forall r_H \in V_H.\end{aligned}\tag{IV.62}$$

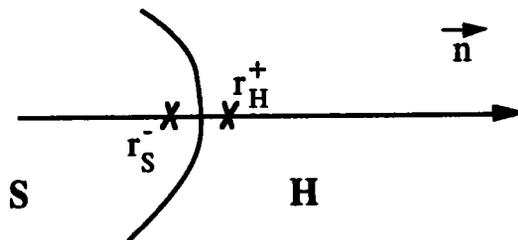
A l'interface, le vecteur taux de contraintes \dot{T}_i doit être continu, ce qui entraîne, asymptotiquement :

$$\dot{\sigma}_{ij}(r_S^-) n_j(\bar{r}) = \dot{\sigma}_{ij}(r_H^+) n_j(\bar{r})\tag{IV.63}$$

où

- r_S^- désigne un point matériel de S proche de l'interface le long de \vec{n} , normale extérieure à S,
- r_H^+ désigne un point matériel de H proche de l'interface le long de \vec{n} ,
- $\bar{r} = \frac{1}{2} (r_S^- + r_H^+)$, sur l'interface.

On a, schématiquement :



D'autre part, le champ des vitesses est supposé continu en tout point du milieu (pas de formation de vide ni de recouvrement de matière), y compris à l'interface.

Par contre, comme cela est discuté dans [H83] et [W78], si le gradient des vitesses est continu dans chaque domaine, il est toutefois discontinu à l'interface entre les deux domaines. Le saut correspondant au travers de l'interface, si l'on ne s'intéresse qu'à la partie symétrique du gradient des vitesses (i.e. la vitesse de déformation totale), s'exprime par :

$$\dot{\epsilon}_{ij}(\mathbf{r}_H^+) - \dot{\epsilon}_{ij}(\mathbf{r}_S^-) = \frac{1}{2} (\lambda_i(\bar{\mathbf{r}}) n_j(\bar{\mathbf{r}}) + \lambda_j(\bar{\mathbf{r}}) n_i(\bar{\mathbf{r}})) \quad (\text{IV.64})$$

où λ est le vecteur de proportionnalité constant (correspondant à l'amplitude du saut) inconnu, à déterminer à partir de (IV.63) et (IV.64).

Si l'on introduit le comportement non local, on a formellement de part et d'autre de la frontière :

$$\dot{\sigma}(\mathbf{r}_S^-) = \int_{V_S} l(\mathbf{r}_S^-, \mathbf{r}_S^i) : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}_S^i) dV_S^i + \int_{V_H} l(\mathbf{r}_S^-, \mathbf{r}_H^i) : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}_H^i) dV_H^i \quad (\text{IV.65})$$

$$\dot{\sigma}(\mathbf{r}_H^+) = \int_{V_H} l(\mathbf{r}_H^+, \mathbf{r}_S^i) : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}_S^i) dV_S^i + \int_{V_H} l(\mathbf{r}_H^+, \mathbf{r}_H^i) : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}_H^i) dV_H^i \quad (\text{IV.66})$$

En première approximation, les hypothèses suivantes peuvent être formulées :

- le champ $\dot{\epsilon}(\mathbf{r}_S^i)$ est remplacé par sa valeur moyenne dans S,
- $l(\mathbf{r}_S, \mathbf{r}_S^i)$ est supposé uniforme dans S, d'où

$$\int_{V_S} l(\mathbf{r}_S, \mathbf{r}_S^i) dV_S^i = l^{SS} \quad (\text{IV.67})$$

- il n'y a pas d'interaction à distance à l'intérieur de H, d'où

$$l(\mathbf{r}_H, \mathbf{r}_H^i) = l^{HH}(\mathbf{r}_H) \delta(\mathbf{r}_H - \mathbf{r}_H^i), \quad (\text{IV.68})$$

- les effets non locaux de H vers S sont négligeables, i.e.

$$\int_{V_H} l(\mathbf{r}_S^-, \mathbf{r}_H^i) : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}_H^i) dV_H^i = 0 \quad (\text{IV.69})$$

En effet, une justification de ceci provient du cas biphasé vu au chapitre III.

On a, dans ces conditions :

$$\dot{\sigma}(\mathbf{r}_S^-) = l^{SS} : \bar{\dot{\epsilon}}^S \quad (\text{IV.70})$$

$$\dot{\sigma}(\mathbf{r}_H^+) = \left(\int_{V_H} l(\mathbf{r}_H^+, \mathbf{r}_S^+) dV_S \right) : \bar{\epsilon}^S + l^{HH}(\mathbf{r}_H^+) : \dot{\epsilon}(\mathbf{r}_H^+) \quad (\text{IV.71})$$

En introduisant (IV.70) et (IV.71) dans le système (IV.63) et (IV.64), on arrive à

$$\lambda(\bar{\mathbf{r}}) = K^{-1} \left[\{l^{SS} - l^{HH}(\mathbf{r}_H^+)\} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \int_{V_H} l(\mathbf{r}_H^+, \mathbf{r}_S^+) dV_S \right] : \bar{\epsilon}^S \quad (\text{IV.72})$$

$$\text{avec } K^{-1} = (l^{HH}(\mathbf{r}_H^+) \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{n})^{-1}$$

D'où

$$\dot{\epsilon}(\mathbf{r}_H^+) = \bar{\epsilon}^S + P(\mathbf{r}_H^+) \left[\{l^{SS} - l^{HH}(\mathbf{r}_H^+)\} - \int_{V_H} l(\mathbf{r}_H^+, \mathbf{r}_S^+) dV_S \right] : \bar{\epsilon}^S \quad (\text{IV.73})$$

$$\text{avec } P = (K^{-1} \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{n})$$

La valeur moyenne de la déformation totale dans le revêtement s'écrit

$$\bar{\epsilon}^H = \bar{\epsilon}^S + \left(\frac{1}{V_H} \int_{V_H} P(\mathbf{r}_H^+) \left[\{l^{SS} - l^{HH}(\mathbf{r}_H^+)\} - \int_{V_H} l(\mathbf{r}_H^+, \mathbf{r}_S^+) dV_S \right] dV_H \right) : \bar{\epsilon}^S \quad (\text{IV.77})$$

Si de plus on suppose l'uniformité de l^{HH} dans H et que :

$$\int_{V_S} l(\mathbf{r}_H, \mathbf{r}_S) dV_S = l^{HS}, \quad (\text{IV.78})$$

on a finalement

$$\bar{\epsilon}^H = \bar{\epsilon}^S + T^*(l^{HH}) : (l^{SS} - l^{HS} - l^{HH}) : \bar{\epsilon}^S \quad (\text{IV.79})$$

$$\text{où } T^*(l^{HH}) = \frac{1}{V_H} \int_{V_H} P(\mathbf{r}_H^+) dV_H$$

Le système suivant est donc obtenu, dans ce cas élastoplastique non local :

$$\left[f (I + T^0 : \Delta l^{SS}) + (1-f) T^0 : l^{HS} \right] : \bar{\epsilon}^S + \left[(1-f) (I + T^0 : \Delta l^{HH}) + f T^0 : l^{SH} \right] : \bar{\epsilon}^H = \dot{\epsilon} \quad (\text{IV.80})$$

$$\left[\mathbf{I} + \mathbf{T}^* : (\mathbf{I}^{SS} - \mathbf{I}^{HS} - \mathbf{I}^{HH}) \right] : \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^S - \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^H = 0 \quad (\text{IV.81})$$

Ce système permet d'obtenir les localisations de $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}^S$ et $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}^H$ en fonction de la vitesse de déformation imposée $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$. Ainsi la solution du problème de l'inclusion enrobée non locale est basée sur une évaluation des tenseurs \mathbf{T}^0 et \mathbf{T}^* .

2.3.4 Cas d'un milieu isotrope incompressible

L'équation (IV.80) s'écrit, dans le cas où $\mu^{SH} = 0$:

$$\left[f \left(1 + \frac{2}{5\mu^e} \Delta\mu^{SS} \right) + (1-f) \frac{2\mu^{HS}}{5\mu^e} \right] \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^S + (1-f) \left(1 + \frac{2}{5\mu^e} \Delta\mu^{HH} \right) \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^H = \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \quad (\text{IV.82})$$

D'autre part, M. Cherkaoui [C94] a montré la relation liant \mathbf{T}^0 et \mathbf{T}^* :

$$\mathbf{T}^*(\mathbf{L}^0) = \frac{a_2 a_3}{a_1^2} \mathbf{T}^0(\mathbf{L}^0) \quad (\text{IV.83})$$

où les a_i sont les demi-côtés de l'ellipsoïde.

D'où la valeur de $\mathbf{T}^*(\mu^{HH})$ dans le cas d'une inclusion sphérique, isotrope et incompressible :

$$\mathbf{T}_{ijkl}^*(\mu^{HH}) = \frac{1}{15\mu^{HH}} (-\delta_{ij}\delta_{kl} + 3\mathbf{I}_{ijkl}) \quad (\text{IV.84})$$

Alors (IV.81) s'écrit :

$$\frac{1}{5\mu^{HH}} (2\mu^{SS} - 2\mu^{HS} + 3\mu^{HH}) \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^S - \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^H = 0 \quad (\text{IV.85})$$

Les équations (IV.82) et (IV.85) constituent donc un système d'équations permettant d'obtenir les vitesses $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}^S$ et $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}^H$ plus compliqué que dans le cas autocohérent.

2.3.5 Conclusions

L'introduction des propriétés topologiques particulières à l'inclusion enrobée permet, après plusieurs simplifications relatives à l'aspect biphasé de la structure cellulaire, de résoudre le problème micromécanique correspondant au travers de la mise en évidence des tenseurs localisations des vitesses de déformation.

Ceci représente une amélioration par rapport à la démarche présentée précédemment, où seule l'approximation autocohérente est utilisée, sans prise en considération de la topologie particulière de la structure cellulaire, différente du cas du grain se déformant au sein du polycristal.

D'autres méthodes comme le modèle à trois phases, susceptibles de traiter ce problème sans être toutefois capable d'intégrer l'anisotropie morphologique des cellules de dislocations, n'ont pas été traitées ici.

Dans le paragraphe suivant, l'extension au cas polycristallin, basée sur le schéma autocohérent de type local, est exposée. Ainsi les différentes hypothèses d'application sont présentées, ainsi que des exemples dans le cas d'un schéma autocohérent intragranulaire.

3) Cas du polycristal - Applications

3.1 Transition d'échelle méso-macro

La méthodologie classique utilisée lors d'une transition d'échelle consiste en premier lieu à écrire la loi de comportement à l'échelle la plus petite. Puis il s'agit de relier ce comportement aux données macroscopiques, ceci constitue l'opération de localisation. Enfin, lors de l'étape d'homogénéisation, on exprime

la loi de comportement à l'échelle la plus grande par l'intermédiaire d'opérations de moyenne [INN84].

Dans notre cas, la même démarche est poursuivie.

Ainsi la loi de comportement à l'échelle mésoscopique (grain) a été exprimée dans le chapitre précédent. D'autre part, en vue d'effectuer la transition d'échelle au niveau macroscopique, une approche autocohérente est utilisée : chaque grain est traité progressivement et baigne dans le milieu homogène équivalent au polycristal.

Le schéma numérique développé par Lipinski et Berveiller [LB89] est adopté, où l'ajout principal concerne l'expression de la loi de comportement au niveau mésoscopique qui résulte dorénavant des propriétés non locales de la structure cellulaire tout en étant de type locale en moyenne sur le grain.

Cette démarche permet donc d'effectuer une double transition d'échelle depuis le niveau microscopique (échelle des cellules) au niveau mésoscopique (échelle du grain) puis au niveau macroscopique (échelle du polycristal), avec la possibilité d'accéder aux variables caractéristiques de ces trois échelles.

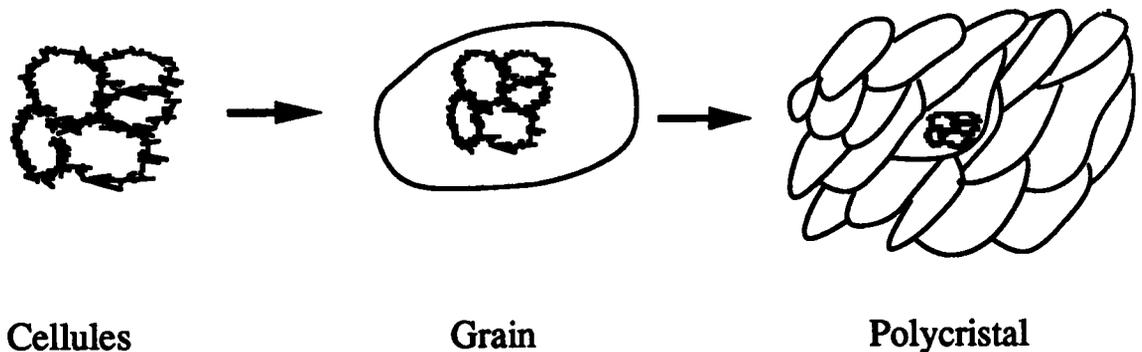
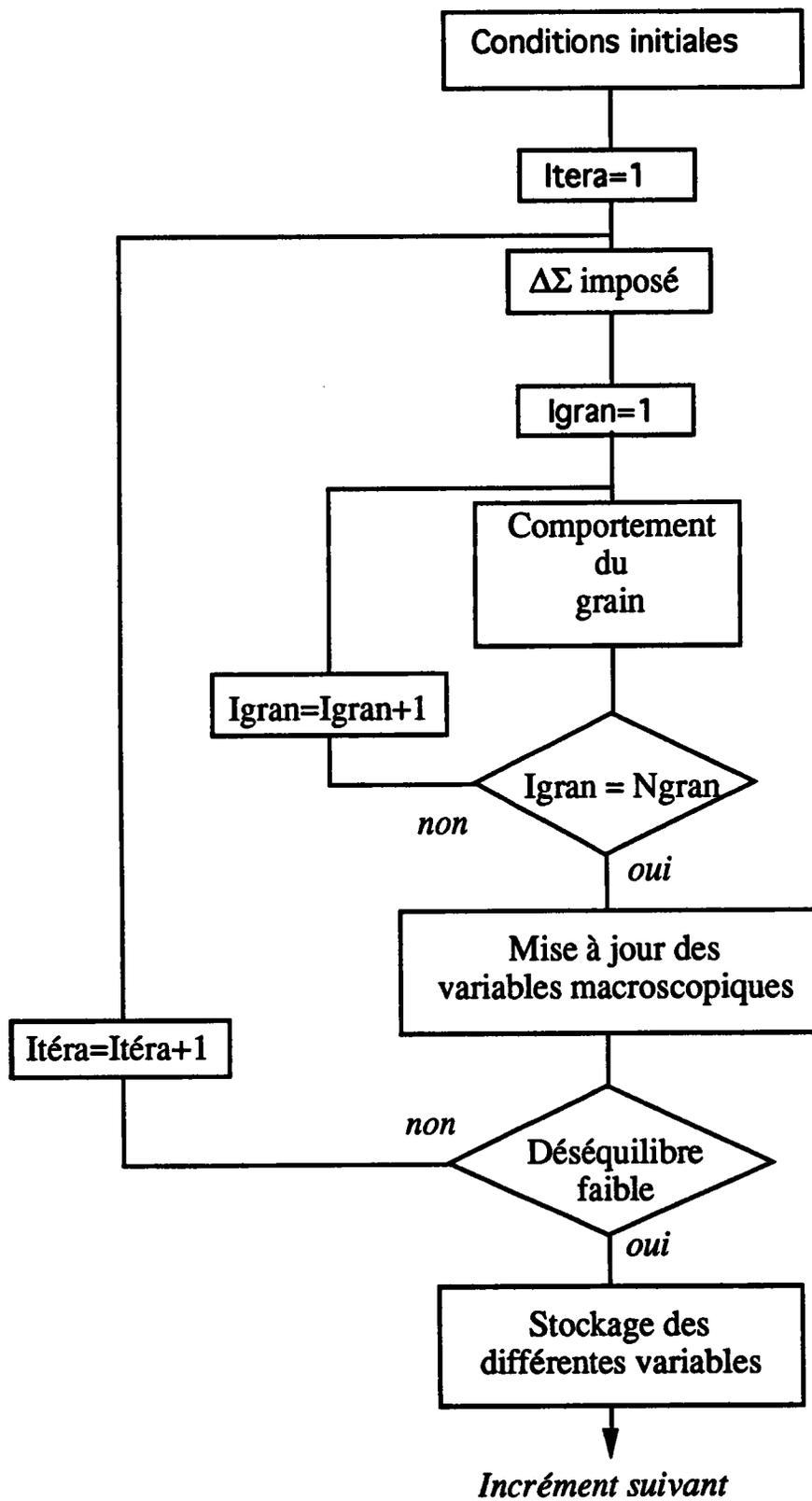


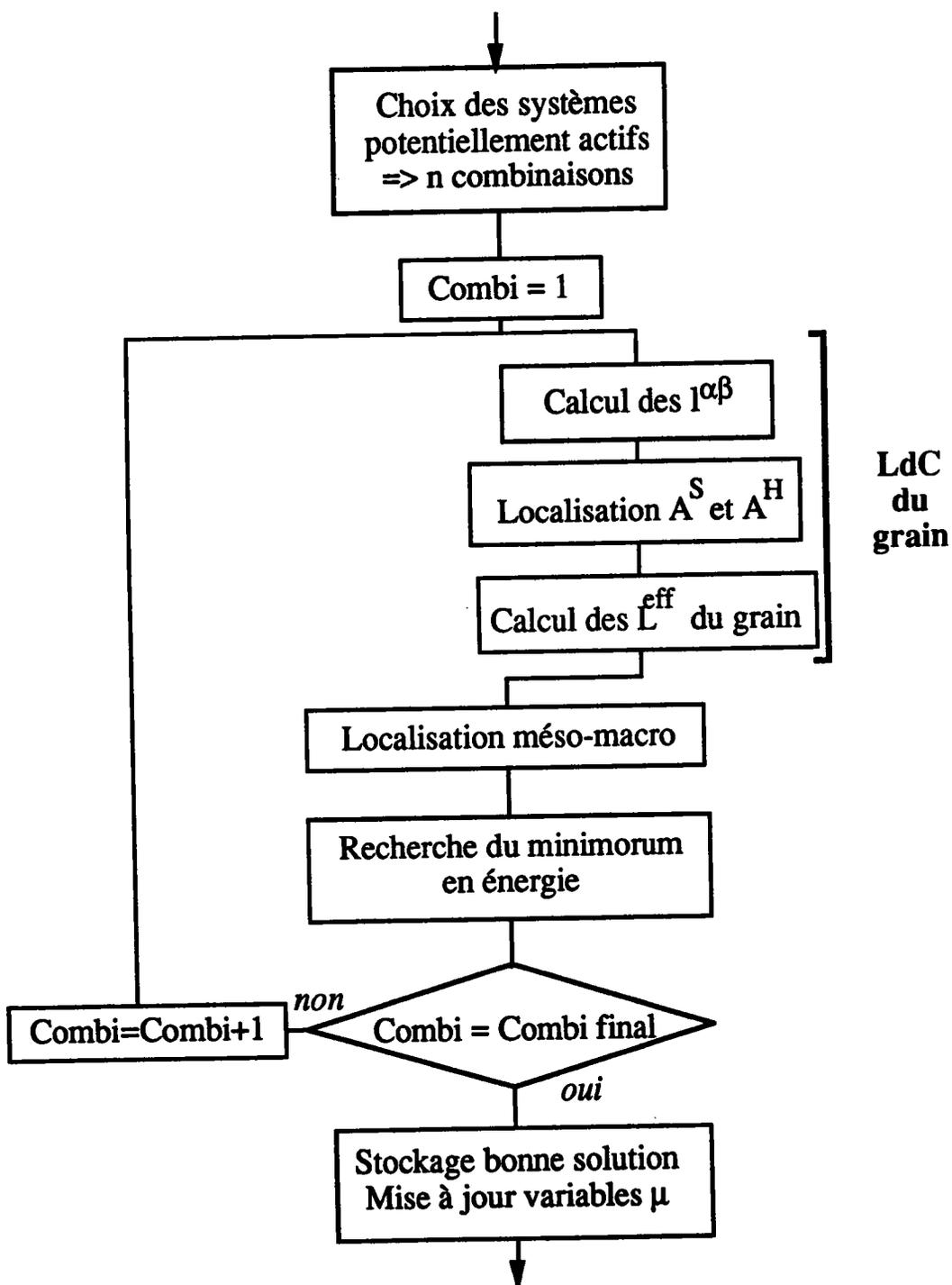
Figure IV.4: Double transition d'échelle

Les algorithmes correspondants sont rappelés sommairement dans ce qui suit.



Algorithme général simplifié du modèle autocohérent

On a, d'autre part, au niveau du grain



Algorithme détaillé au niveau du grain

3.2 Résultats

3.2.1 Hypothèses de travail

Dans cette partie, différents résultats obtenus par l'intermédiaire de la formulation micromécanique basée sur un schéma de type autocohérent au niveau du grain sont présentés.

Diverses hypothèses simplificatrices ont été émises en ce qui concerne les simulations numériques :

- Malgré la densité importante de défauts présents dans les parois de dislocations, l'aspect cristallin de la phase H a été conservé, les dislocations se propageant tout de même sur les systèmes de glissement dans cette phase.
- Les mêmes familles de systèmes de glissement ont été choisies pour chaque phase (S et H) dans chaque grain. Ceci est bien évidemment valide à l'état recuit, avant déformation plastique ultérieure; par contre, cette hypothèse ne permet pas de décrire la désorientation progressive relative des cellules (néanmoins faible) due à des perturbations locales, dans les parois, du réseau cristallin.
- De plus, dans le cas d'une structure cristalline cubique centrée, le pencil-glide est représenté de façon assez imparfaite en n'utilisant que la famille (110) $\langle 111 \rangle$ pour représenter ce phénomène caractéristique classiquement décrit par (110) $\langle 111 \rangle$ et (112) $\langle 111 \rangle$ [R94]. Ce choix a été dicté par des contraintes informatiques; en effet, le fait d'introduire deux phases dans chaque grain double déjà le nombre de systèmes, ceci entraînant une augmentation très importante du temps de calcul lié en grande partie à la recherche des combinaisons de systèmes réellement actifs. Ainsi, si l'on introduit en plus la seconde famille (112) $\langle 111 \rangle$, les temps de calculs deviennent réellement prohibitifs eu égard aux possibilités

actuelles de l'informatique. Cette hypothèse, on le verra plus loin, a bien évidemment des conséquences mécaniques avec, entre autres, une mauvaise description du coefficient de Lankford dans le cas de tôles laminées, qui est quelque peu surévalué par rapport à la réalité expérimentale.

- Comme c'est le cas avec le logiciel **CRYSTAL 1.0** [S93], on différencie le sens de glissement sur chaque système; ceci permet d'obtenir des valeurs de vitesses de glissement toujours positives.

- Les cissions critiques initiales sont choisies identiques sur tous les systèmes dans chaque phase et dans chaque grain. Ce choix est adopté afin de montrer l'hétérogénéisation du milieu intragranulaire initialement uniforme (après le recuit).

- La fraction volumique de cellules ainsi que la forme de celles-ci sont identiques pour tous les grains.

Ainsi, on choisit :

- un matériau cubique centré,
- $\tau_{cH}^{0g} = \tau_{cS}^{0g} = 65 \text{ MPa}$ (quel que soit le système g),
- le terme caractéristique $a_{gh}^{\text{Fort}} / a_{(gh)}^{\text{Faible}} = 1.1$ [R94],
- les matrices A_{HS}^{gh} et A_{HH}^{gh} sont choisies égales à la matrice identité, du fait du manque d'informations précises sur les phénomènes d'annihilation,
- la fraction volumique de cellules = 0.8,
- la forme des cellules = sphère,
- la forme des grains = sphère,
- l'élasticité isotrope ($\mu = 80 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$),
- une texture initiale isotrope de 500 grains.

Deux cas sont étudiés pour mettre en évidence les effets non locaux intragranulaires.

- Un cas non local sans prise en compte d'annihilation :

$$H_{SS}^{gh} = \frac{\alpha_{SS}}{\tau_{cS}^{(g)} - \tau_{cS}^{0(g)}} \quad \text{avec } \alpha_{SS} = 9.0 \cdot 10^2 \text{ (MPa)}^2$$

$$H_{SH}^{gh} = 0$$

$$H_{HS}^{gh} = \frac{\alpha_{HS}}{\tau_{cH}^{(g)} - \tau_{cH}^{0(g)}} \quad \text{avec } \alpha_{HS} = 2.0 \cdot 10^5 \text{ (MPa)}^2 \quad \text{(IV.86)}$$

$$H_{HH}^{gh} = 0$$

Ceci constitue le matériau 1.

- Un cas local avec pour seule différence par rapport au cas précédent :

$$H_{HS}^{gh} = 0$$

$$H_{HH}^{gh} = H_{HS}^{gh} \quad (\text{cas non local du matériau 1})$$

Ceci constitue le matériau 2.

3.2.2 Représentation des effets d'ordre 3

Le fait de descendre à l'échelle des cellules de dislocations apporte des informations supplémentaires sur l'état mécanique de la microstructure intragranulaire. Par contre, ceci nécessite l'utilisation de moyens de visualisation qui soient adaptés.

La figure IV.5 décrit le comportement du matériau 1 en vue de bien décrire et dissocier les effets locaux et non locaux, au cours d'un essai de traction :

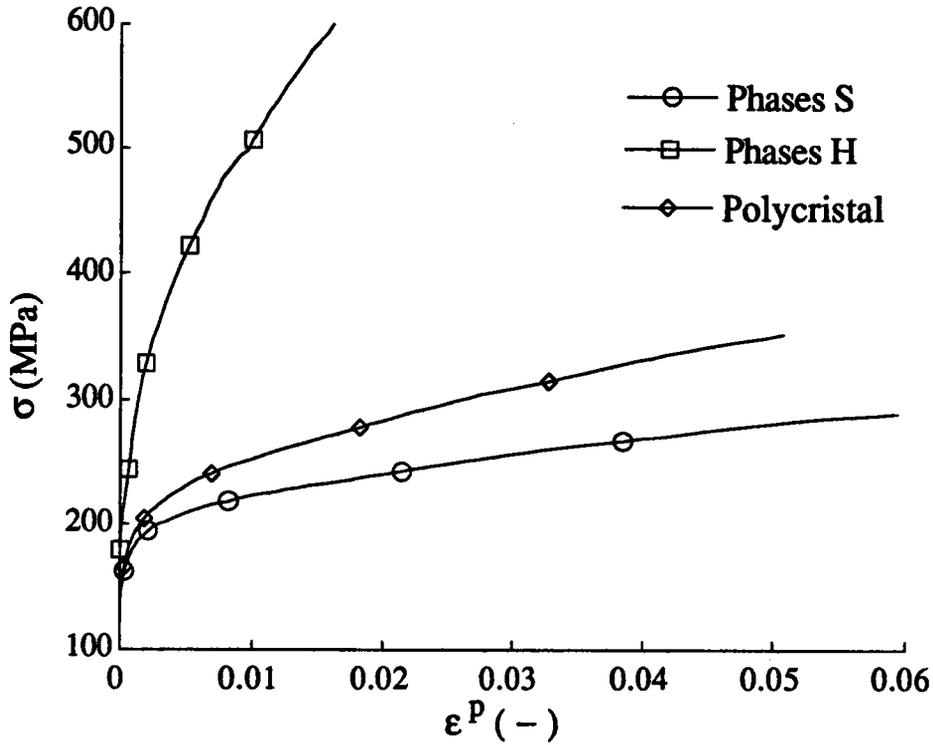


Figure IV.5: Comportements macroscopique et en moyenne par phase

Les 3 courbes décrivent respectivement, dans l'espace contraintes-déformations plastiques, le comportement global du polycristal ainsi que les comportements (Σ^S, E^{PS}) et (Σ^H, E^{PH}) de la phase S (i.e. l'intérieur des cellules) et de la phase H (i.e. les parois de dislocations) de chaque grain en moyenne sur tout le polycristal. On a les différentes réponses pour cet essai de traction :

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{Macro}} &= \sum_{\text{grains}} f_g \sigma_g^H & \text{soit } \Sigma_{\text{Macro}} &= F(E_{\text{Macro}}^P) \\ \Sigma^S &= \sum_{\text{grains}} f_g \sigma_g^S & \text{soit } \Sigma^S &= F(E^{PS}) \\ \Sigma^H &= \sum_{\text{grains}} f_g \sigma_g^H & \text{soit } \Sigma^H &= F(E^{PH}) \end{aligned} \quad (\text{IV.87})$$

de telle sorte que l'on a macroscopiquement

$$\Sigma_{Macro} = f_{cell} \Sigma^S + (1 - f_{cell}) \Sigma^H \quad (IV.88)$$

Ces courbes traduisent une forte hétérogénéisation intragranulaire tant au niveau des contraintes qu'à celui des déformations plastiques. Ainsi dans le même grain, une zone (i.e. les parois des cellules) se trouve en état de contraintes internes de traction très importantes alors que l'autre zone (i.e. l'intérieur des cellules) se trouve en état de compressions internes. Un tel niveau d'hétérogénéité dans un élément de volume de faibles dimensions comme l'est le grain peut évidemment avoir des conséquences mécaniques catastrophiques comme l'initialisation de bandes de cisaillement par exemple.

Au début de l'essai, sur la courbe décrivant le comportement des phases H en moyenne sur le polycristal, on dénote un écrouissage important de ces phases H (i.e. les parois de dislocations) sans réelle déformation plastique correspondante ("locale" dans H). Ceci résulte typiquement des interactions non locales entre les deux phases dans chaque grain (une dislocation se déplaçant à l'intérieur d'une cellule va se stocker dans une paroi avoisinante). En effet, les cissions critiques initiales sur les systèmes de glissement étant choisies identiques dans les deux phases de chaque grain, un tel effet ne pourrait être décrit par un composite local classique comme c'est le cas pour le modèle de Mughrabi par exemple [M88].

D'autre part, en vue de mieux connaître les niveaux de contraintes, du second ordre (échelle de grain) et du troisième ordre (échelle des cellules), prédits par une telle formulation non locale, un moyen commode est obtenu en s'intéressant aux états internes figés du matériau à différents niveaux de déformation plastique macroscopique, comme c'est le cas sur la figure IV.6 avec la formulation décrite au chapitre V pour 100 grains, à l'aide de nuages de points:

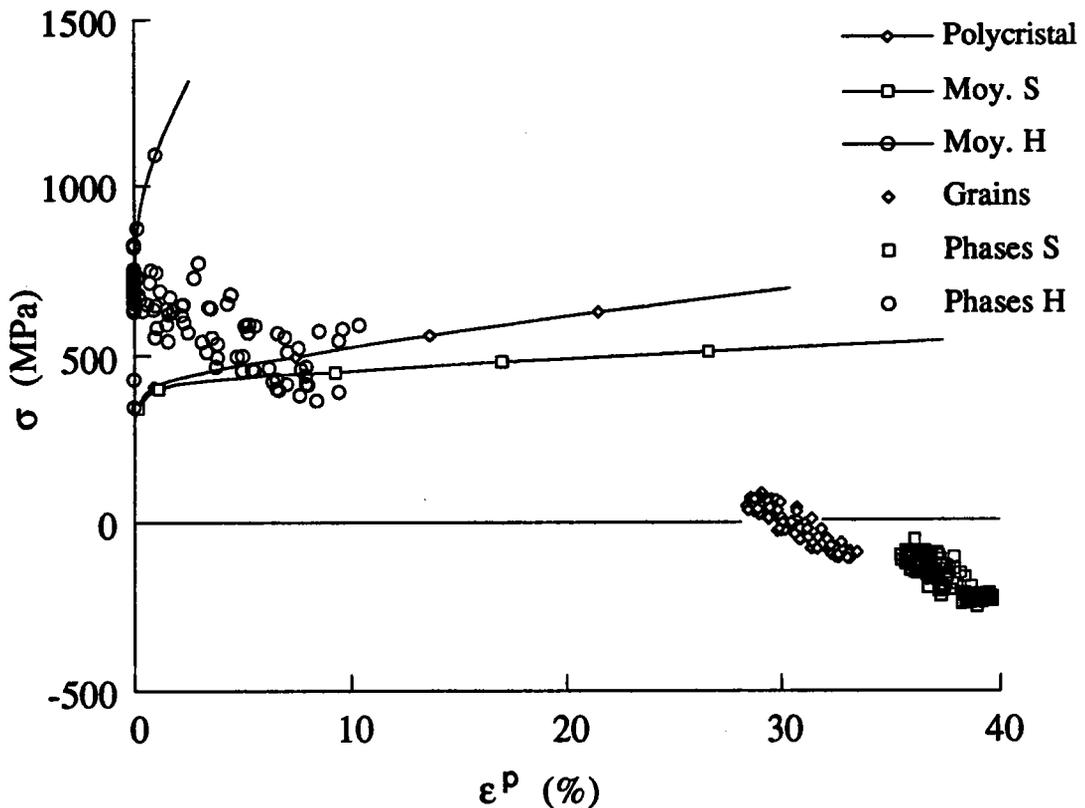


Figure IV.6 : Etats de contrainte d'ordre 2 et 3 dans le polycristal

Les deux nuages extrêmes parmi les trois représentés décrivent les états figés des deux phases dans chaque grain (ordre trois) alors que le nuage central décrit les valeurs moyennes des contraintes dans chaque grain (ordre deux) et résulte donc de la moyenne pondérée des données d'ordre trois; ceci correspond à l'état du matériau après relâchement des contraintes imposées au polycristal (notion d'état résiduel de contraintes).

Ainsi, un point situé dans l'un des deux nuages extrêmes représente l'état de contraintes d'ordre trois dans la phase correspondante d'un grain pour un état macroscopique figé alors qu'un point situé dans le nuage central décrit l'état de contraintes d'ordre deux dans un grain. Si l'on s'intéresse à un polycristal de n grains, on comptera donc n points par nuage. La figure IV.7 décrit simultanément les états figés sous charge d'un matériau fictif, décrit par la

formulation développée dans le chapitre suivant, "photographiés" pour trois niveaux successifs de déformation plastique macroscopique.

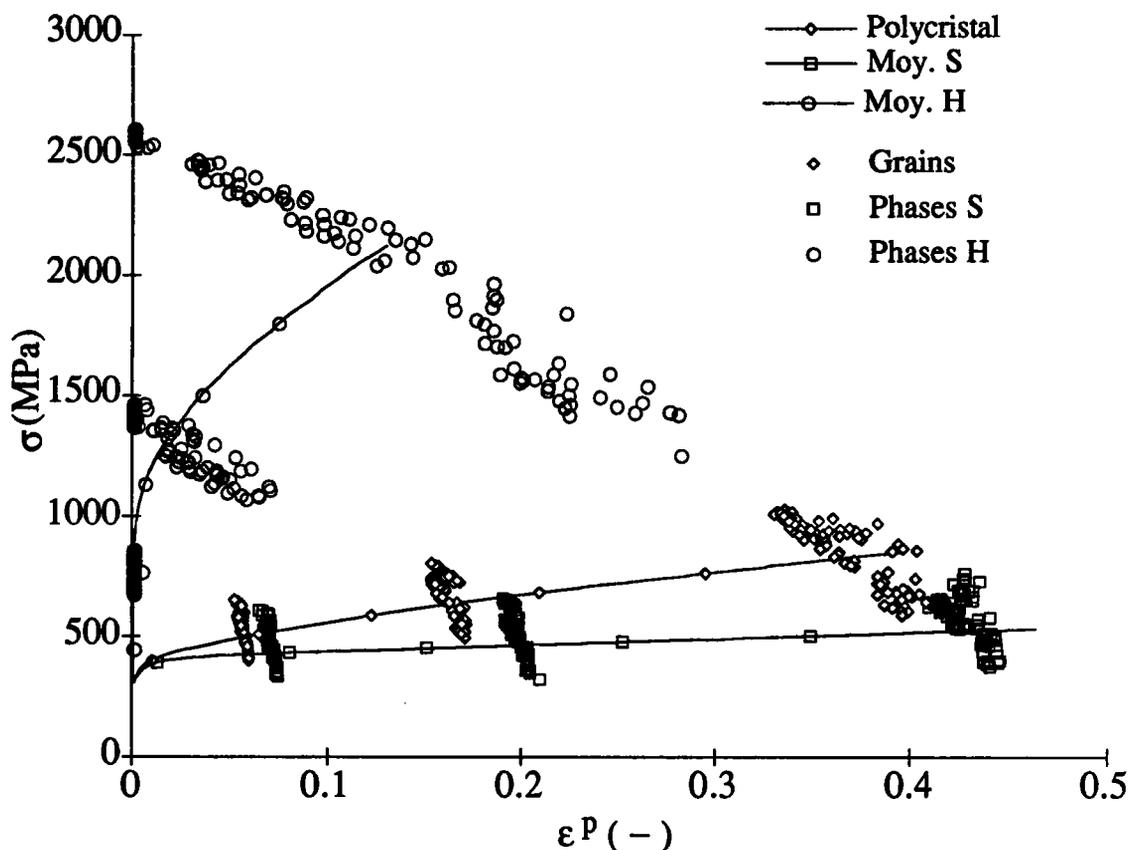


Figure IV.7 : Evolution des états de contrainte d'ordre 2 et 3 dans le polycristal

On observe une dispersion progressive des nuages décrivant les contraintes internes (initialement tous les points sont superposés du fait des cissions critiques initiales identiques).

Ce phénomène résulte de l'effet de texture cristallographique initiale : les grains favorablement orientés se déformant rapidement au cours de l'essai sans atteindre des niveaux de contraintes élevés alors que d'autres, ne pouvant se déformer aisément, voient leur niveau de contraintes devenir très important. Cet effet s'accroît encore au cours de l'écoulement plastique, d'où une rotation progressive de ces nuages dans l'espace contraintes-déformations plastiques.

3.2.3 Hétérogénéisation intragranulaire. Cas local et non local

Dans ce paragraphe, on présente une comparaison des résultats numériques basée, d'une part sur la formulation biphasée non locale (IV.43) correspondant au matériau 1 et, d'autre part, sur la formulation biphasée locale (IV.44) correspondant au matériau 2. Dans les deux cas, la forme des cellules est imposée de l'extérieur et est sphérique; l'essai mécanique imposé est une traction.

Les calculs sont effectués pour de faibles déformations plastiques. En effet, l'objectif de ces simulations numériques est, en grande partie, de montrer la faisabilité de l'intégration d'un premier schéma de type autocohérent, en vue d'effectuer la transition d'échelle micro-méso, au sein d'un second schéma autocohérent, lui-même affecté à la réalisation de la transition d'échelle méso-macro.

Dans les deux cas, local et non local, représentés respectivement par les figures IV.8 et IV.9, l'état interne figé du matériau est décrit pour une déformation plastique macroscopique équivalente de 3%.

Les nuages correspondants sont plus diffus que ceux obtenus dans la figure IV.6 qui proviennent de la description des contraintes internes intragranulaires explicitée au cours du chapitre suivant.

Dans ce cas-là, une expression simplifiée de ces contraintes internes est introduite; elle est dérivée du modèle de Kröner, où le tenseur d'élasticité, supposé isotrope dans ce travail, joue un rôle prépondérant, de même qu'un facteur scalaire d'accommodation.

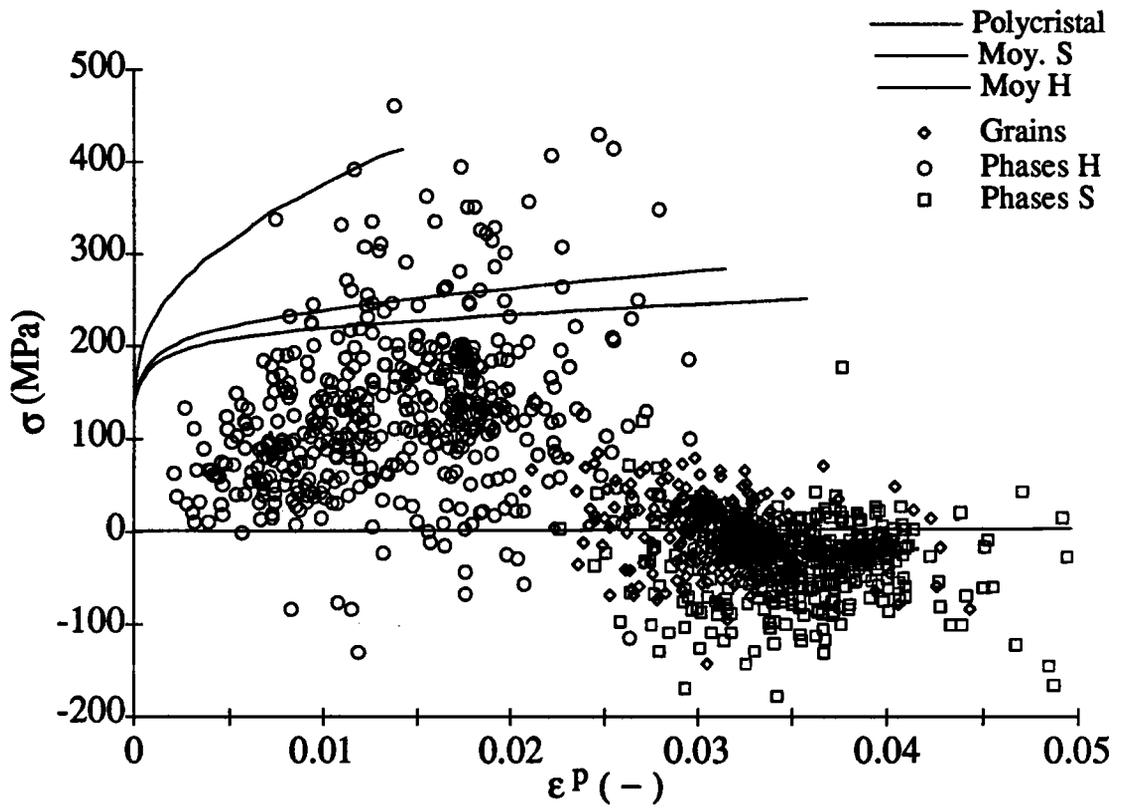


Figure IV.8: Cas d'un schéma autocohérent local au niveau intragranulaire

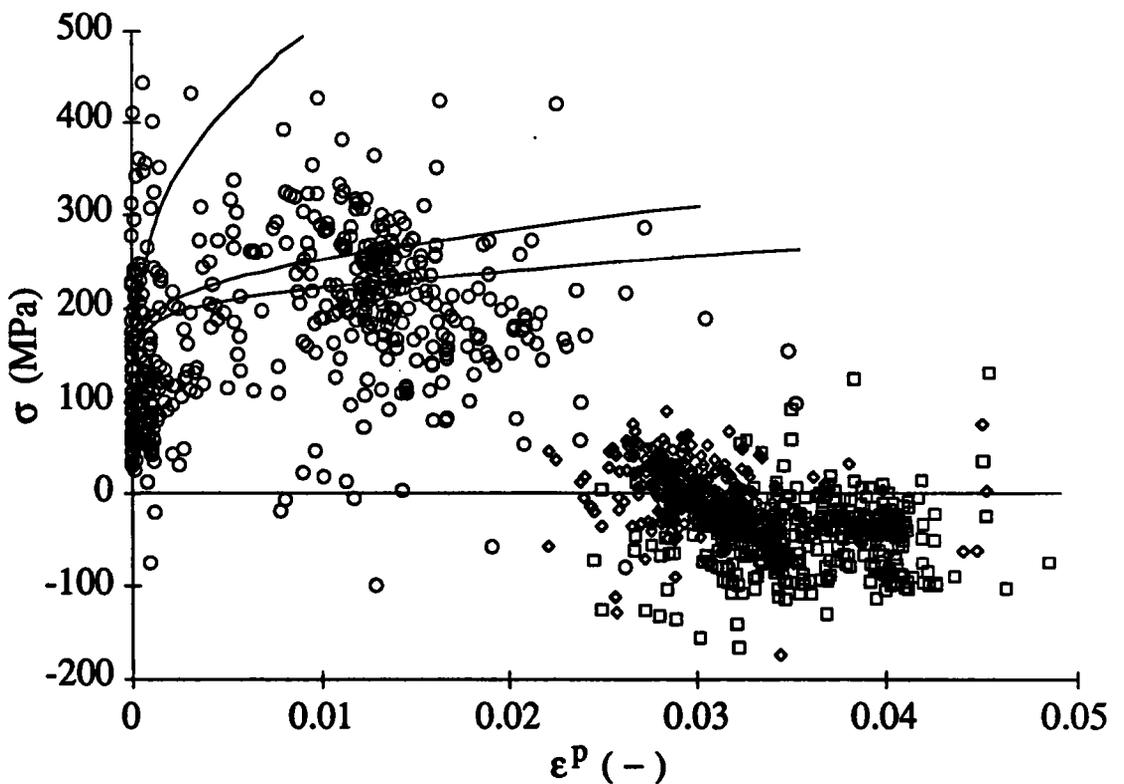


Figure IV.9: Cas d'un schéma autocohérent non local au niveau intragranulaire

Par contre, ici, l'influence du milieu effectif représentant le grain est primordiale, car il conditionne la valeur du tenseur d'interaction T^e apparaissant dans (IV.40) ou (IV.41) et, par conséquent, le niveau des contraintes internes dans chaque grain, en introduisant une anisotropie propre à chaque grain (effet de la texture cristallographique), d'où une dispersion plus rapide des nuages.

Ainsi l'activité des différents systèmes de glissement dans un grain est un paramètre important : la présence de glissement simple prépondérant induit une forte anisotropie correspondante du tenseur T^e pour le grain concerné, alors que du glissement multiple entraînera une anisotropie moins marquée en ce qui concerne ce tenseur d'interaction T^e .

Dans le cas non local, le durcissement des zones H est entièrement contrôlé par la déformation des zones S correspondantes (pas d'annihilation ici). En conséquence, on a un plus fort écrouissage dans H en moyenne dans le cas non local, comparé au cas local où, par définition, le durcissement d'une phase H ne dépend que de l'écoulement plastique local, plus faible que celui de la phase S correspondante.

La constatation effectuée en IV.2.2.3 dans le cas d'un milieu isotrope incompressible, selon laquelle on observe une tendance à avoir moins de déformation dans H dans le cas non local que dans le cas local, est confirmée sur ces figures.

Enfin, on observe un écoulement quasi instantané des zones H dans le cas local, ce qui n'est pas le cas lorsque l'on s'intéresse au matériau non local. Ainsi, on observe alors une tendance à un dédoublement du nuage des zones H, certaines étant durcies non localement et restant élastiques, alors que d'autres s'écoulent plus rapidement au cours de l'essai.

4) Conclusions

En vue d'effectuer une transition d'échelle depuis le niveau microscopique, on a mis en œuvre une équation intégrale qui présente des effets spécifiques de type non locaux, dus à la non localité de la loi de comportement à l'échelle microscopique, en plus des effets classiques d'interaction à distance découlant de l'usage des fonctions de Green.

En théorie, cette équation est apte à traiter globalement le problème du polycristal mais comme, d'une part la non localité est réduite à l'échelle des cellules (d'où un comportement local en moyenne du grain) et, d'autre part, les joints de grain jouent un rôle de frontière bien définie, la transition d'échelle s'effectue en deux étapes avec, tout d'abord utilisation de l'équation intégrale non locale pour effectuer la transition du niveau microscopique jusqu'au niveau mésoscopique et, enfin, une équation intégrale locale déjà vue par ailleurs pour atteindre l'échelle macroscopique.

Le problème à frontière évolutive, correspondant à l'évolution de l'orientation et de la forme des cellules, peut être résolu par cette méthode, mais ceci nécessite une connaissance parfaite de l'expression de la matrice d'écrouissage non locale. Ceci restant un problème largement ouvert à l'heure actuelle, deux applications sont proposées dans le cas d'une description biphasée du grain en vue de représenter la topologie de la microstructure intragranulaire :

- un cas autocohérent simple qui permet d'obtenir des résultats intéressants concernant l'hétérogénéisation dans le cas polycristallin,
- un développement du formalisme de l'inclusion enrobée qui est plus à même de caractériser la topologie particulière de la microstructure intragranulaire.

En fait, plutôt que de chercher à imposer phénoménologiquement la topologie depuis l'extérieur, la solution consisterait sans doute à affronter le problème inverse de la détermination de la topologie microstructurale.

Une réelle démarche destinée à décrire l'évolution de la microstructure intragranulaire induite par la déformation plastique est décrite brièvement dans le chapitre suivant. Elle donne lieu à de nombreux résultats au travers, entre autres, d'une étude paramétrique, qui permettent de décrire certains effets liés à l'hétérogénéisation intragranulaire.

Chapitre V

Partie 1

Avertissement :

- Du fait du grand nombre de résultats numériques obtenus dans le cadre de l'étude paramétrique correspondant à ce chapitre, celui-ci a été volontairement scindé en deux parties, afin de préserver son intégrité et sa cohérence (présentation de la théorie dans la partie V.1 et des résultats en V.2).

- D'autre part, seuls les résultats les plus intéressants sont intégrés dans la partie V.2, les autres étant présentés dans l'annexe 2. Ce choix implique une nécessaire gymnastique de la part du lecteur mais évite de surcharger plus encore cette partie V.2.

V - Approche globale biphasée non locale

1) Introduction

La mise en place à l'échelle intragranulaire de la structure cellulaire de dislocations au cours de la déformation plastique constitue un problème à frontière évolutive si l'on considère les profonds changements susceptibles de se produire sur la topologie microstructurale.

L'équation intégrale cinématique non locale développée dans le chapitre précédent est à même de résoudre ce problème d'hétérogénéisation intragranulaire, mais sa mise en œuvre est trop complexe puisque l'on ne sait pas décrire de façon micromécanique assez précise les phénomènes de mouvement, stockage et annihilation des dislocations à l'échelle des glissements plastiques. En effet, ces mécanismes physiques doivent nécessairement être décrits de façon précise par l'intermédiaire de la matrice d'écroutissage non locale H , ce qui n'est pas possible avec les connaissances disponibles actuellement à cette échelle. Une solution à ce problème serait sans aucun doute de descendre encore d'échelle, c'est-à-dire de considérer non plus seulement un effet collectif de dislocations, par l'intermédiaire d'un biphasé comme c'est le cas dans ce travail, mais aussi de décrire leur comportement individuel et leur mouvement dans le réseau cristallin. Une telle étude sort du cadre de ce travail.

En vue d'obtenir des résultats quantitatifs, pouvant déboucher par exemple sur l'obtention d'une loi de comportement à une échelle intermédiaire (au niveau du grain), une autre stratégie plus globale peut être plus adaptée.

Au niveau intragranulaire, on introduit un potentiel énergie libre dépendant de variables d'état et de différentes variables internes. Cette démarche thermodynamique est facilitée du fait du faible nombre de variables internes

nécessaires dans le cas de la structure cellulaire. En effet, les fortes hétérogénéités observées au niveau intragranulaire permettent de limiter la description continue du grain à une approche de type biphasé; ce qui conduit, malgré les limitations inhérentes à ce type de démarche, à une description relativement bonne des phénomènes d'hétérogénéisation intragranulaire.

L'écriture des lois de cohérence portant sur les forces thermodynamiques associées aux variables internes ainsi que sur les forces critiques de dissipation duales constitue alors une base propice à une étude complète des phénomènes intracristallins tant d'un point de vue comportement du matériau que de l'évolution de la géométrie microstructurale.

L'obtention d'une forme définitive de l'énergie libre nécessite une description du champ des contraintes internes dans le biphasé. A cet effet, le modèle de Kröner est rappelé et appliqué au cas du biphasé, à partir d'une topologie basée sur une inclusion ellipsoïdale.

D'autre part, une approche périodique de la topologie spécifique à la structure cellulaire de dislocations est développée afin de prendre en compte l'aspect fortement ordonné de celle-ci. Cette démarche conduit à une expression différente du potentiel thermodynamique et met en évidence un phénomène d'accommodation caractéristique, différent du cas élastoplastique classique.

La mise en œuvre de cette approche conduit à l'écriture de la loi de comportement au niveau du grain, supposée locale en moyenne sur cet élément de volume, à partir du comportement non local à l'échelle microscopique.

Ce travail étant la première approche d'une description micromécanique de l'hétérogénéisation intragranulaire, une simplification est donc adoptée avec

l'utilisation d'un facteur scalaire d'accommodation couplé à la topologie, contrôlée phénoménologiquement de l'extérieur, afin d'obtenir une expression approximée des contraintes internes dans la structure cellulaire.

De même que précédemment, un schéma autocohérent classique est alors utilisé pour effectuer la transition depuis l'échelle mésoscopique (grain) jusqu'au niveau du polycristal.

Cette démarche donne lieu à des applications variées, pour le polycristal, qui sont confrontées avec succès aux données expérimentales disponibles, ainsi qu'à des simulations effectuées avec un formalisme local déjà validé par ailleurs.

2) Loi de comportement du cristal biphasé non local

2.1 Approche énergétique

Remarque : la démarche énergétique présentée brièvement ici est développée de manière plus complète dans les travaux de thèse de Xavier LEMOINE, qui s'attache à suivre l'évolution de la structure cellulaire au cours de la déformation plastique.

Dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles, l'introduction d'un potentiel thermodynamique [LC88] permet, au moyen de variables internes soigneusement choisies, de prendre en compte le problème d'évolution de la topologie cellulaire intragranulaire.

Ce potentiel thermodynamique, duquel dérivent les lois d'état du matériau, correspond ici à l'énergie libre de Gibbs Ψ , qui dépend des variables d'état observables et de variables internes.

Dans cette étude restreinte au milieu constitué par le monocristal, dans le cadre de la plasticité à froid, la variable observable est la déformation totale E , qui permet de définir la contrainte associée Σ . Pour les phénomènes dissipatifs comme dans le cas de l'élastoplasticité, des variables internes sont introduites. Elles sont définies ici par le champ des déformations plastiques $\epsilon^p(r)$.

Le potentiel énergie libre par unité de volume s'exprime sous la forme

$$\Psi = -W + \Sigma : E \quad (V.1)$$

où W désigne l'énergie élastique du matériau par unité de volume et est définie par

$$W = \frac{1}{2V} \int_V \sigma : \epsilon^{el} dV \quad (V.2)$$

Après quelques transformations, (V.2) devient

$$W = \frac{1}{2} \Sigma : M : \Sigma - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{int} : \epsilon^p dV \quad (V.3)$$

où M est le tenseur des compliances élastiques et σ_{int} désigne les contraintes internes.

D'où, en ce qui concerne l'énergie libre,

$$\Psi = \frac{1}{2} \Sigma : M : \Sigma + \Sigma : E^p + \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{int} : \epsilon^p dV \quad (V.4)$$

où

$$E^p = \frac{1}{V} \int_V \epsilon^p dV$$

Comme précédemment, il est intéressant d'utiliser les propriétés spécifiques au cas biphasé. On introduit alors le champ $\epsilon^p(r)$ sous la forme classique particulière à l'approximation de la structure cellulaire par un biphasé :

$$\epsilon^p(r) = \begin{cases} \epsilon^{ps} & \text{si } r \in V_s \\ \epsilon^{ph} & \text{si } r \in V_H \end{cases} \quad (\text{V.5})$$

Alors, la valeur moyenne E^p est totalement déterminée par le triplet $(f, \epsilon^{ps}, \epsilon^{ph})$. Ainsi on a

$$E^p = f \epsilon^{ps} + (1-f) \epsilon^{ph} \quad (\text{V.6})$$

avec f : fraction volumique de la phase S.

D'où

$$\Psi = \frac{1}{2} \Sigma : M : \Sigma + \Sigma : E^p + \frac{1}{2} (f \langle \sigma_{int} \rangle_s : \epsilon^{ps} + (1-f) \langle \sigma_{int} \rangle_H : \epsilon^{ph}) \quad (\text{V.7})$$

où $\langle \sigma_{int} \rangle_\alpha$ désigne la valeur moyenne de σ_{int} sur la phase α ($\alpha = H, S$).

De plus on a la propriété, résultant du fait que les contraintes internes sont autoéquilibrées en moyenne sur le volume V :

$$f \langle \sigma_{int} \rangle_s + (1-f) \langle \sigma_{int} \rangle_H = 0 \quad (\text{V.8})$$

D'où la nouvelle forme que prend Ψ :

$$\Psi = \frac{1}{2} \Sigma : M : \Sigma + \Sigma : (f \epsilon^{ps} + (1-f) \epsilon^{ph}) + \frac{1}{2} f \langle \sigma_{int} \rangle_s : (\epsilon^{ps} - \epsilon^{ph}) \quad (\text{V.9})$$

Le potentiel énergie libre est la résultante de trois contributions. Les deux premières proviennent soit directement des variables observées, soit simplement à partir des variables internes f , ϵ^{ps} et ϵ^{ph} . Par contre le troisième terme fait intervenir la notion de contraintes internes qui relève typiquement du choix d'un modèle.

De façon générale, les contraintes internes moyennes dans chaque phase dépendent des paramètres suivants :

- l'élasticité C du milieu,

- la sources des contraintes internes provient de la présence d'incompatibilités plastiques, ici représentées par le saut du champ des déformations plastiques, uniforme par morceaux, $\epsilon^{pS} - \epsilon^{pH}$,
- la fraction volumique f de cellules,
- plusieurs paramètres nécessaires à une caractérisation complète de la topologie étudiée.

Soit par exemple, en ce qui concerne $\langle \sigma_{int} \rangle_s$:

$$\langle \sigma_{int} \rangle_s = F(C, f, \epsilon^{pS} - \epsilon^{pH}, V_k) \quad (V.10)$$

où les V_k sont des variables internes décrivant la topologie du problème et F est une fonction tensorielle.

En vue d'obtenir une expression de ces contraintes internes, deux modèles sont proposés.

- Tout d'abord, on rappelle le modèle de Kröner qui prend en compte, par l'intermédiaire du tenseur d'Eshelby S , l'orientation et la forme de l'inclusion ellipsoïdale considérée. On peut alors écrire (V.10) sous la forme :

$$\langle \sigma_{int} \rangle_s = -(1-f) C : (I - S) : (\epsilon^{pS} - \epsilon^{pH}) \quad (V.11)$$

En effet, mis à part l'anisotropie introduite par S , les phases S et H jouent des rôles symétriques, il faut donc retrouver un tel effet au niveau de la contribution relative aux contraintes internes dans l'écriture de Ψ .

Le modèle de Kröner correspond à une description désordonnée de la structure cellulaire.

- Une façon différente de considérer la structure cellulaire est de prendre en compte l'aspect organisé de celle-ci. Ceci peut s'effectuer par l'intermédiaire d'une description périodique du biphasé, à l'aide des propriétés des séries de Fourier appliquées à l'équation générale du problème d'incompatibilité.

Il est possible alors de comparer les effets de ces deux évaluations, ce qui montre l'importance de la topologie du biphasé quant à la détermination des contraintes internes.

2.2 Application du modèle de Kröner au cas biphasé

2.2.1 Expression des contraintes internes

En vue de traiter le problème micromécanique relatif à des incompatibilités plastiques imposées, il est utile de s'intéresser au cas d'une inclusion plongée dans une matrice de mêmes propriétés élastiques homogènes C .

Considérons donc le cas d'une inclusion ellipsoïdale I donnée, dans laquelle réside une déformation plastique uniforme ϵ^{PI} donnée, placée dans un domaine infini V étant plastifié au niveau macroscopique par E^P donnée ($E^P \neq \epsilon^{PI}$).

On a



Figure V.1 : Problème de l'inclusion plastique

Dans ce cas, il apparaît des contraintes internes autoéquilibrées entre l'inclusion et la matrice, associées aux incompatibilités du champ des déformations plastiques, uniforme par morceaux.

D'après les travaux de Kröner [K61], basés sur les résultats d'Eshelby [E61], les contraintes internes dans l'inclusion s'expriment de la façon suivante :

$$\sigma^I = C : (I - S) : (E^p - \epsilon^{pl}) \quad (V.12)$$

où S désigne le tenseur d'Eshelby qui permet de décrire la topologie de l'inclusion ellipsoïdale (sa forme et son orientation) et relie la déformation plastique ϵ^{pl} à la déformation totale dans l'inclusion ϵ^I , et I désigne le tenseur unité du quatrième ordre.

Il est à noter que, dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale, la solution est uniforme en contraintes et en déformations dans l'inclusion.

Dans le cas d'une élasticité isotrope, d'une inclusion sphérique et d'un milieu plastiquement incompressible, on a

$$\sigma^I = 2\mu (1 - \beta) (E^p - \epsilon^{pl}) \quad (V.13)$$

avec $\beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \approx 0.5$

Cette description traduit un phénomène d'accommodation élastique entre inclusion et matrice, fortement corrélé à la topologie de l'inclusion.

Ce modèle peut être généralisé au cas biphasé, afin de décrire la structure cellulaire intragranulaire.

On considère alors le cas d'une structure composite biphasée où l'on a des inclusions ellipsoïdales S baignant dans une matrice H (ou vice et versa).

La relation classique de moyenne sur les déformations totales s'écrit alors :

$$E = f \epsilon^S + (1 - f) \epsilon^H \quad (V.14)$$

où f (resp. $1-f$) désigne la fraction volumique de la phase S (resp. de la phase H), et ϵ^S (resp. ϵ^H) est la déformation totale dans S (resp. H).

Si l'élasticité est uniforme dans le composite, et de modules C , on déduit de (V.14) les relations suivantes :

$$0 = f \sigma^S + (1-f) \sigma^H \quad (V.16)$$

$$E^P = f \epsilon^{pS} + (1-f) \epsilon^P \quad (V.17)$$

où σ^S (resp. σ^H) désigne la contrainte interne dans S (resp. H),
et ϵ^{pS} (resp. ϵ^{pH}) désigne la déformation plastique dans S (resp. H),
 E^P étant la déformation plastique moyenne.

Il est alors aisé d'exprimer les contraintes internes dans chaque phase à partir de (V.12), (V.16) et (V.17) :

$$\sigma^S = (1-f) A^{Kr} : (\epsilon^{pH} - \epsilon^{pS}) \quad (V.18)$$

$$\sigma^H = -f A^{Kr} : (\epsilon^{pH} - \epsilon^{pS}) \quad (V.19)$$

avec $A^{Kr} = C : (I - S)$

La description (V.18), (V.19) correspond à un champ autoéquilibré des contraintes internes dans le composite.

D'autre part, (V.18) et (V.19) font clairement apparaître des effets d'interaction à grande distance dus à l'hétérogénéité du champ des déformations plastiques entre les deux phases du composite. Ainsi, dans (V.18) par exemple, la contrainte σ^S dans la phase S va dépendre non seulement de la déformation plastique locale ϵ^{pS} , mais aussi de ϵ^{pH} , déformation plastique induite dans la zone H, soit dans une autre partie du composite. En conséquence, on observe un aspect typiquement non local de l'érouissage cinématique, lié aux contraintes internes.

Le modèle de Kröner utilise des paramètres imposés qui sont les déformations plastiques dans l'inclusion et la matrice infinie, ainsi que la topologie de l'inclusion (forme et orientation). Dans le cas du biphasé, l'expression

particulière du champ des déformations plastiques introduit un autre paramètre, la fraction volumique de la phase S.

Cette méthode est adaptée à décrire l'écoulement d'un grain au sein d'une matrice, ses frontières étant bien définies dès la recristallisation. Par contre, le problème de la structure cellulaire est tout autre, la topologie de l'inclusion constituant une inconnue du problème.

2.2.2 Ecriture du potentiel énergie libre

Les expressions (V.18) et (V.19) permettent d'obtenir explicitement le potentiel Ψ dans le cas du biphasé, lorsque le modèle de Kröner est utilisé afin d'exprimer les contraintes internes dans chaque phase.

On a

$$\Psi(\Sigma, \epsilon^{pH}, \epsilon^{pS}, f, S) = \frac{1}{2} \Sigma : M : \Sigma + \Sigma : (f \epsilon^{pS} + (1-f) \epsilon^{pH}) - \frac{1}{2} f(1-f) \Delta \epsilon^P : A^{Kr} : \Delta \epsilon^P \quad (V.20)$$

avec $\Delta \epsilon^P = \epsilon^{pH} - \epsilon^{pS}$.

Le seul terme lié à un modèle topologique est constitué par la contribution $-\frac{1}{2} f(1-f) \Delta \epsilon^P : A^{Kr} : \Delta \epsilon^P$, déduite de l'application du modèle de Kröner.

Telle que, l'expression de Ψ est utilisable en vue d'en déduire les forces thermodynamiques motrices associées aux différentes variables internes qui sont les déformations plastiques dans chaque phase, la fraction volumique ainsi que la forme et l'orientation de l'ellipsoïde prises en compte au travers de S.

L'écriture des lois de cohérence correspondant à chaque variable interne, après la détermination des forces critiques associées, permet d'obtenir finalement la loi de comportement du composite.

Ces développements nécessaires à la prise en compte de l'évolution de la topologie cellulaire, ne rentrent pas dans le cadre de ce travail.

Ils sont présentés dans la thèse de Xavier Lemoine [L94] qui est consacrée en totalité au problème micromécanique complexe à frontières évolutives correspondant à l'hétérogénéisation intragranulaire.

Une approche différente de la description des contraintes internes pour le biphasé est développée dans le paragraphe suivant. Elle prend en compte les effets de structure ordonnée, dans le cas d'une représentation de la structure cellulaire, à l'aide d'un formalisme périodique.

2.3 Description périodique de la structure cellulaire

2.3.1 Introduction

L'aspect ordonné de la structure cellulaire peut être pris en compte par l'intermédiaire d'une démarche de type périodique. De plus, ceci permet de préciser et de quantifier les effets typiques d'accommodation rencontrés au niveau intragranulaire.

Toutefois, dans le cadre de ce travail, ce type d'approche ne peut apporter que des résultats qualitatifs, eu égard à la lourdeur inhérente aux développements périodiques d'une part, et à la transition d'échelle méso-macro ultérieure d'autre part.

Dans le cas périodique, la structure périodique est définie dans sa totalité par des relations de périodicité à partir d'une cellule élémentaire (à ne pas confondre avec les cellules de dislocations). Les distributions de contraintes et déformations locales dans le domaine élémentaire peuvent alors être obtenues par expansion en

séries de Fourier [M82] si les fonctions sont continues par morceaux dans ce domaine élémentaire.

2.3.2 Expression des contraintes internes

Considérons une distribution périodique d'inclusions sphériques de rayon a , de volume V , avec une période $2L$ dans les trois directions servant à décrire les coordonnées cartésiennes.

Les mêmes notations que celles proposées lors de l'application du modèle de Kröner au cas biphasé sont utilisées dans ce développement périodique.

- f est la fraction volumique de la phase S ,
- le champ des déformations plastiques est uniforme par morceaux dans la cellule unitaire du problème périodique et se met sous la forme

$$\epsilon^p(r) = \begin{cases} \epsilon^{ps} & \text{si } r \in \Omega \\ \epsilon^{ph} & \text{si } r \in V - \Omega \end{cases}$$

La cellule unitaire de volume V correspondant à ce problème se présente de la façon suivante :

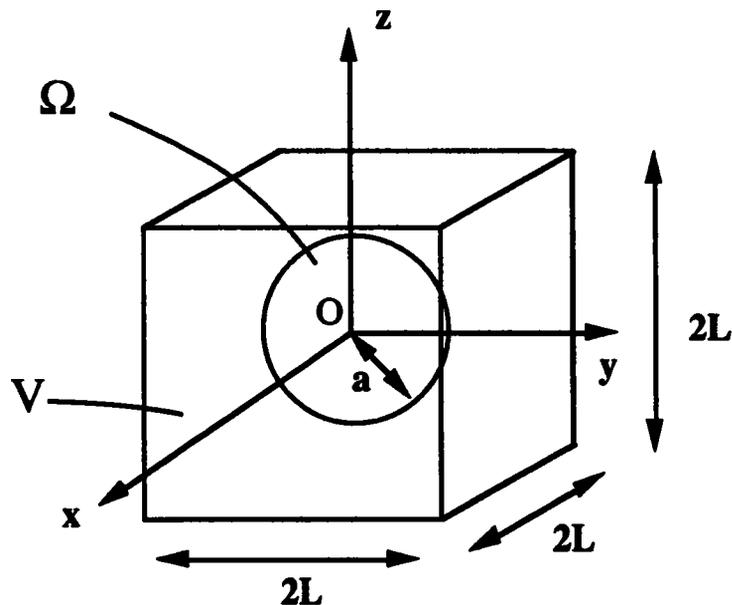


Figure V.2 : Description du domaine élémentaire du problème périodique

Remarque : on a la condition géométrique $a \leq L$.

La zone S constitue l'intérieur de la sphère, et la zone H décrit $V-\Omega$.

La distribution des déformations plastiques peut s'exprimer par l'intermédiaire des séries de Fourier sous la forme suivante [M82] :

$$\varepsilon^P(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{v_i = +\infty \\ v_i = -\infty \\ i=1,3}} \bar{\varepsilon}^P(\xi) \exp(i\xi \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{V.21})$$

avec $i^2 = -1$,

excluant le triplet ($v_1 = v_2 = v_3 = 0$) car l'uniformité de ε^P dans tout l'espace amène une solution divergente [M82]. ξ désigne le vecteur conjugué de \mathbf{r} dans l'espace de Fourier ($\xi_i = \frac{\pi}{L} v_i$ pour $v_i = 1, 3$).

De façon classique, on exprime le coefficient $\bar{\varepsilon}^P(\xi)$ par

$$\bar{\varepsilon}^P(\xi) = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon^P(\mathbf{r}) \exp(-i\xi \cdot \mathbf{r}) dV \quad (\text{V.22})$$

Si le champ des déformations propres est uniforme par morceaux dans la cellule unitaire, on a, dans le cas topologique cité précédemment,

$$\bar{\varepsilon}^P(\xi) = \frac{\varepsilon^{PS}}{8L^3} \int_{\Omega} \exp(-i\xi \cdot \mathbf{r}) dV + \frac{\varepsilon^{PH}}{8L^3} \int_{V-\Omega} \exp(-i\xi \cdot \mathbf{r}) dV \quad (\text{V.23})$$

ou

$$\bar{\varepsilon}^P(\xi) = \frac{(\varepsilon^{PS} - \varepsilon^{PH})}{8L^3} \int_{\Omega} \exp(-i\xi \cdot \mathbf{r}) dV + \frac{\varepsilon^{PH}}{8L^3} \int_V \exp(-i\xi \cdot \mathbf{r}) dV \quad (\text{V.24})$$

D'après Asaro [A75], on a dans le cas sphérique :

$$\frac{1}{8L^3} \int_{\Omega} \exp(-i\xi \cdot \mathbf{r}) dV = \left(\frac{a}{2L}\right)^{3/2} v^{-3/2} J_{3/2}\left(\frac{\pi a}{L} v\right) \quad (\text{V.25})$$

où

$$v = (v_1^2 + v_2^2 + v_3^2)^{1/2}$$

et $J_{3/2}$ est la fonction de Bessel d'ordre 3/2.

$$J_{3/2}(\eta) = \left(\frac{2}{\pi\eta}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{\eta} \sin \eta - \cos \eta\right) \quad (\text{V.26})$$

D'autre part

$$\frac{1}{8L^3} \int_V \exp(-i\xi \cdot r) dV = \frac{\sin \pi v_1}{\pi v_1} \frac{\sin \pi v_2}{\pi v_2} \frac{\sin \pi v_3}{\pi v_3} \quad (\text{V.27})$$

D'après les propriétés $[\sin \pi v = 0 \text{ pour } v \in \mathbb{Z}^*]$ et $[(v_1 = v_2 = v_3 = 0) \text{ exclu}]$, l'intégrale (V.27) s'annule.

On arrive donc à

$$\bar{\epsilon}^p(\xi) = \left(\frac{a}{2L}\right)^{3/2} v^{-3/2} J_{3/2}(\epsilon^{ps} - \epsilon^{ph}) \quad (\text{V.28})$$

L'expression du champ des contraintes internes dans le domaine élémentaire, $\sigma_{int}^p(r)$, s'obtient facilement à partir de la relation constitutive élastique sous une forme simple

$$\sigma_{int}^p(r) = \left\{ \sum_{\substack{v_i = +\infty \\ v_i = -\infty \\ i=1,3}} B^{v_1 v_2 v_3} \exp(i\xi \cdot r) \right\} : (\epsilon^{ps} - \epsilon^{ph}) \quad (\text{V.29})$$

où B est un tenseur du quatrième ordre reliant les incompatibilités plastiques aux contraintes résultantes; ce tenseur s'exprime sous la forme :

$$B_{ijmn}^{v_1 v_2 v_3} = \left(\frac{a}{2L}\right)^{3/2} v^{-3/2} J_{3/2} C_{ijkl} \left[C_{pqmn} \xi_q \xi_l N_{kp} D^{-1}(\xi) - \delta_{km} \delta_{ln} \right] \exp(i\xi \cdot r) \quad (\text{V.30})$$

avec

$$D(\xi) = \mu^2 (\lambda + 2\mu) \xi^6$$

$$N_{ij}(\xi) = \mu \xi^2 [(\lambda + 2\mu) \delta_{ij} \xi^2 - (\lambda + \mu) \xi_i \xi_j]$$

$$\xi = (\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2)^{1/2}$$

B dépend donc de la topologie du problème par l'intermédiaire du rapport $\frac{a}{L}$ (l'extension au cas ellipsoïdal présenté plus loin induit une influence d'autres paramètres spécifiques) et de l'élasticité du matériau, tout comme dans le cas du modèle de Kröner avec le tenseur d'interaction $C:(I-S)$.

D'autre part, comme dans le cas du modèle de Kröner, il est intéressant de noter que la source de contraintes internes est constituée par l'incompatibilité du champ des déformations plastiques, représentée ici par le saut $(\epsilon^{pH} - \epsilon^{pS})$.

Par souci d'allègement des notations, on écrit :

$$\sigma_{int}^P(r) = A^P(r, \frac{a}{L}, \mu, \lambda) : (\epsilon^{pS} - \epsilon^{pH}) \quad (V.31)$$

avec

$$A^P(r, \frac{a}{L}, \mu, \lambda) = - \left\{ \sum_{\substack{v_i = +\infty \\ v_j = -\infty \\ i=1,3}} B^{v_1 v_2 v_3} \exp(i \xi \cdot r) \right\}$$

Il est intéressant de remarquer que l'uniformité du champ des déformations plastiques dans l'inclusion n'entraîne pas la même propriété en ce qui concerne le champ des contraintes avec la description périodique, comme c'est le cas dans le problème de l'inclusion plongée dans un milieu infini.

Remarque : Dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale d'orientation quelconque centrée en O, l'expression de $\bar{\epsilon}^P(\xi)$ s'obtient facilement et peut se mettre sous la forme [FF85] :

$$\bar{\epsilon}^P(\xi) = \left(\frac{a_1}{2L} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{a_2 a_3}{a_1^2} \left[\left(\frac{a_i}{a_1} \right)^2 (\alpha_{ij} v_j)^2 \right]^{\frac{3}{4}} J_{\frac{3}{2}} \left(\frac{\pi}{L} a_i^2 (\alpha_{ij} v_j)^2 \right) (\epsilon^{pS} - \epsilon^{pH}) \quad (V.32)$$

où a_1 , a_2 et a_3 sont les demi-côtés de l'ellipsoïde, α est la matrice de passage du repère macroscopique au repère principal d'inertie de l'ellipsoïde, qui s'exprime à l'aide de trois angles d'Euler.

Cette expression constitue une généralisation de (V.28) au cas ellipsoïdal et laisse entrevoir des effets d'anisotropie dus à la fois à la forme et à l'orientation de l'ellipsoïde.

D'un point de vue numérique, une étude a été mise en œuvre afin de décrire et caractériser les interactions dans le cas périodique.

L'élasticité du milieu est définie par $\mu = 80$ GPa et $\nu = 0.3$. La triple somme infinie (V.29) s'exprime de la façon suivante :

$$\sum_{\substack{v_i=-\infty \\ i=1,3}}^{v_i=+\infty} f(v_1, v_2, v_3) = \sum_{v_1=1}^{+\infty} \sum_{v_2=1}^{+\infty} \sum_{v_3=1}^{+\infty} f(v_1, v_2, v_3) \\ + 4 \left(\sum_{v_2=1}^{+\infty} \sum_{v_3=1}^{+\infty} f(0, v_2, v_3) + \sum_{v_1=1}^{+\infty} \sum_{v_3=1}^{+\infty} f(v_1, 0, v_3) + \sum_{v_1=1}^{+\infty} \sum_{v_2=1}^{+\infty} f(v_1, v_2, 0) \right) \quad (V.33) \\ + 2 \left(\sum_{v_1=1}^{+\infty} f(v_1, 0, 0) + \sum_{v_2=1}^{+\infty} f(0, v_2, 0) + \sum_{v_3=1}^{+\infty} f(0, 0, v_3) \right)$$

Les sommes peuvent être tronquées à $n_{\max} = 100$. En effet, la précision de convergence ε est de l'ordre du pourcent (ε caractérise la différence entre deux solutions obtenues à des troncages différents). Ainsi, si l'on s'intéresse au calcul de A_{1212}^P au point 0, dans le cas d'une inclusion sphérique, pour une fraction volumique donnée, on a :

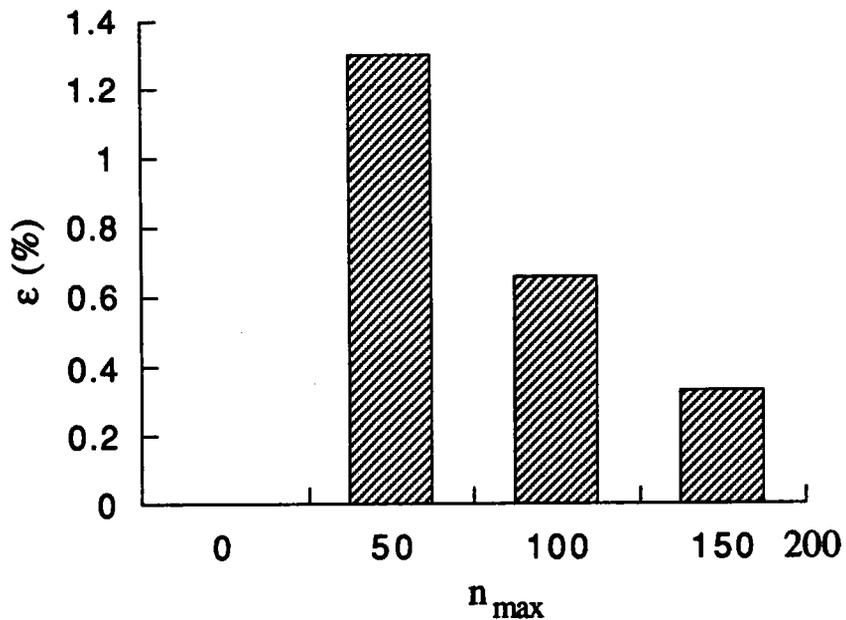


Figure V.3: Convergence de la solution périodique

Bien que le champ des déformations plastiques soit uniforme par morceaux, le champ des contraintes ne vérifie pas la même propriété, d'où les conséquences sur $A^P(r)$. L'évolution de A_{1212}^P dans le cas sphérique en fonction de la position le long de l'axe \bar{x} (Figure V.4) est tracée sur la figure V.5 pour $f = 0.3$ soit $(\frac{a}{L} = 0.83)$.

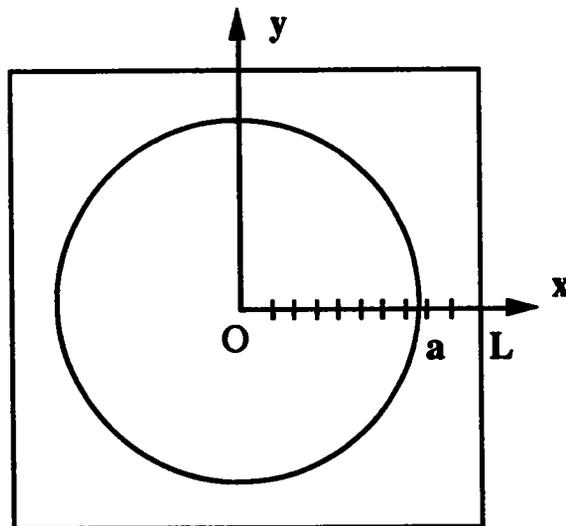


Figure V.4: Visualisation des positions de calcul sur l'axe \bar{x} .

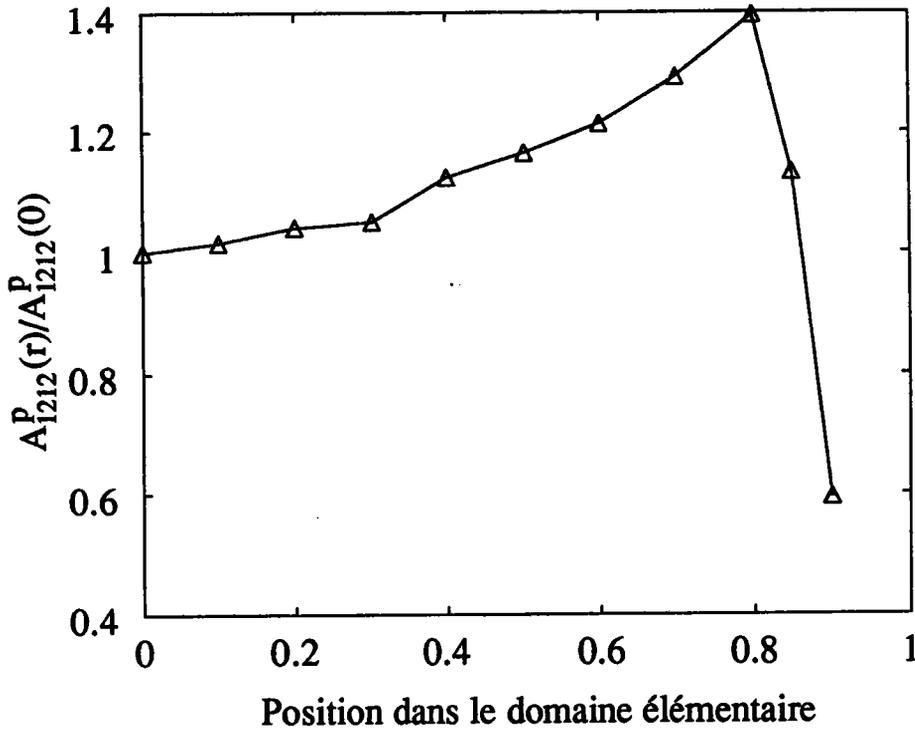


Figure V.5: Variations de A_{1212}^P le long de \bar{x} dans la cellule unitaire.

De grandes variations sont donc observées aux abords de l'interface entre inclusion et matrice en réponse à la discontinuité du champ $\epsilon^P(r)$. L'évolution de $A_{1212}^P(r)$ reste néanmoins faible à l'intérieur de la sphère.

Rappelons que, dans le cas d'un ellipsoïde baignant dans une matrice infinie, la solution en contraintes est uniforme dans l'inclusion.

2.3.3 Ecriture du potentiel énergie libre

Si l'on écrit

$$\langle \sigma_{mt}^P \rangle_s = \langle A^P \rangle_s : (\epsilon^{pH} - \epsilon^{pS}) \quad (V.34)$$

le potentiel énergie libre s'exprime, dans le cas périodique, sous la forme

$$\Psi = \frac{1}{2} \Sigma : M : \Sigma + \Sigma : (f \epsilon^{pS} + (1-f) \epsilon^{pH}) + \frac{1}{2} f \Delta \epsilon^P : \langle A^P \rangle_s : \Delta \epsilon^P \quad (V.35)$$

De même que pour le modèle de Kröner, cette expression de ψ permet de résoudre le problème thermodynamique correspondant à la structure cellulaire.

Il est évident que cette approche périodique est beaucoup plus lourde que la description de Kröner, ce qui limite par conséquent son utilisation d'un point de vue numérique.

Toutefois une comparaison directe entre le cas périodique et celui de l'inclusion plongée dans un milieu infini est effectuée, ce qui confirme l'influence de la topologie sur les interactions.

2.3.4 Comparaison entre les deux approches

L'application du modèle de Kröner au cas biphasé a mis en évidence une expression des contraintes internes dans la phase S, uniformes dans le cas ellipsoïdal, sous cette forme :

$$\sigma^S = (1-f) A^{Kr} : (\epsilon^{pH} - \epsilon^{pS})$$

avec

$$A^{Kr} = C : (I - S)$$

De même, l'introduction d'une formulation périodique, basée sur les séries de Fourier, a permis d'obtenir une expression en moyenne des contraintes internes dans la phase S :

$$\langle \sigma_{int}^P \rangle_S = \langle A^P \rangle_S : (\epsilon^{pH} - \epsilon^{pS})$$

Les deux tenseurs d'interaction $(1-f) A^{Kr}$ et $\langle A^P \rangle_S$ font intervenir de façon plus ou moins complexe la fraction volumique de S, la topologie de l'inclusion, l'élasticité du matériau.

De plus, chacun d'entre eux résulte d'une approche différente de la notion d'ordre topologique présent dans la structure cellulaire avec une vision qualifiée

de désordonnée dans le cas du modèle de Kröner alors que la description périodique correspond à une vision très ordonnée de la structure cellulaire.

Il est donc judicieux de comparer ces deux approches afin de juger de la sensibilité différente qu'elles présentent à la microstructure, en ce qui concerne les effets d'interaction dus à la présence d'incompatibilités plastiques.

Un paramètre de comparaison α_{ijkl} est donc introduit, tel que

$$\alpha_{ijkl} = \frac{\langle A_{ijkl}^P \rangle_s}{(1-f)A_{(ijkl)}^{Kr}} \quad (V.36)$$

Cette forme compare directement les coefficients d'interaction entre incompatibilités plastiques et contraintes internes exprimés dans (V.18) et (V.29). Elle permet de traduire l'influence de la topologie et en particulier de la fraction volumique d'inclusion, dans le cas périodique, sur les interactions entre domaines élémentaires.

En conséquence, il est naturel que, dans le cas d'une faible fraction volumique, la description périodique se ramène à la solution d'Eshelby-Kröner, le domaine élémentaire correspondant alors à un milieu de dimensions grandes par rapport à celles de l'inclusion.

Pour le cas sphérique, l'évolution de α_{1111} et α_{1212} en fonction de la fraction volumique est donnée par la figure V.6.

Remarque : On ne peut atteindre un taux de remplissage supérieur à $\pi/6$ dans le cas d'une sphère plongée dans un cube.

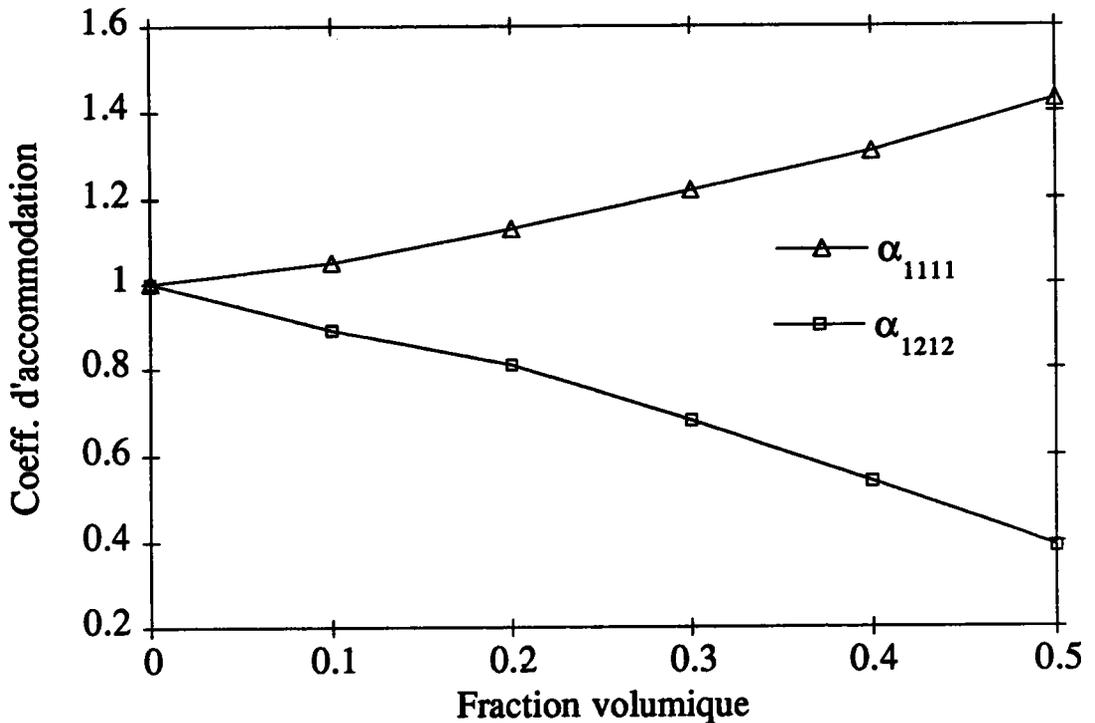


Figure V.6 : Evolution de α_{1111} et α_{1212} en fonction du taux de remplissage.

Ainsi ces coefficients convergent vers 1 pour de faibles valeurs de la fraction volumique, tendant vers la solution d'Eshelby-Kröner dans le cas biphasé. Donc, dans ce cas, les interactions spécifiques au problème périodique, traduites ici par les séries de Fourier, deviennent négligeables.

Par contre on observe une évolution contrastée de ces modules lorsque le taux de remplissage augmente. Ce phénomène traduit l'anisotropie particulière au cas périodique qui devient rapidement non négligeable, s'accompagnant par un durcissement du milieu pour certaines composantes, alors que pour d'autres, on observe un adoucissement très marqué du milieu.

Ce phénomène peut être qualifié d'accommodation sélective, spécifique au cas périodique. Il ne s'agit pas de le confondre avec l'accommodation élastoplastique,

décrite par les schémas autocohérents, qui repose sur des bases physiques toutes différentes.

Les courbes V.7 et V.8 montrent l'effet d'une dégénérescence progressive du cas ellipsoïdal (inclusion oblate de plan principal $(\bar{x}0\bar{y})$) au cas sphérique sur certaines composantes de α .

Les cas ellipsoïdaux (2-2-1), (3-3-2), (5-5-4) ainsi que le cas sphérique sont étudiés.

La courbe V.7 décrit l'évolution des coefficients α_{1212} et α_{1313} en fonction de la fraction volumique pour les différents cas topologiques précités.

De même, la courbe V.8 décrit l'évolution de α_{1111} et α_{3333} dans les mêmes conditions.

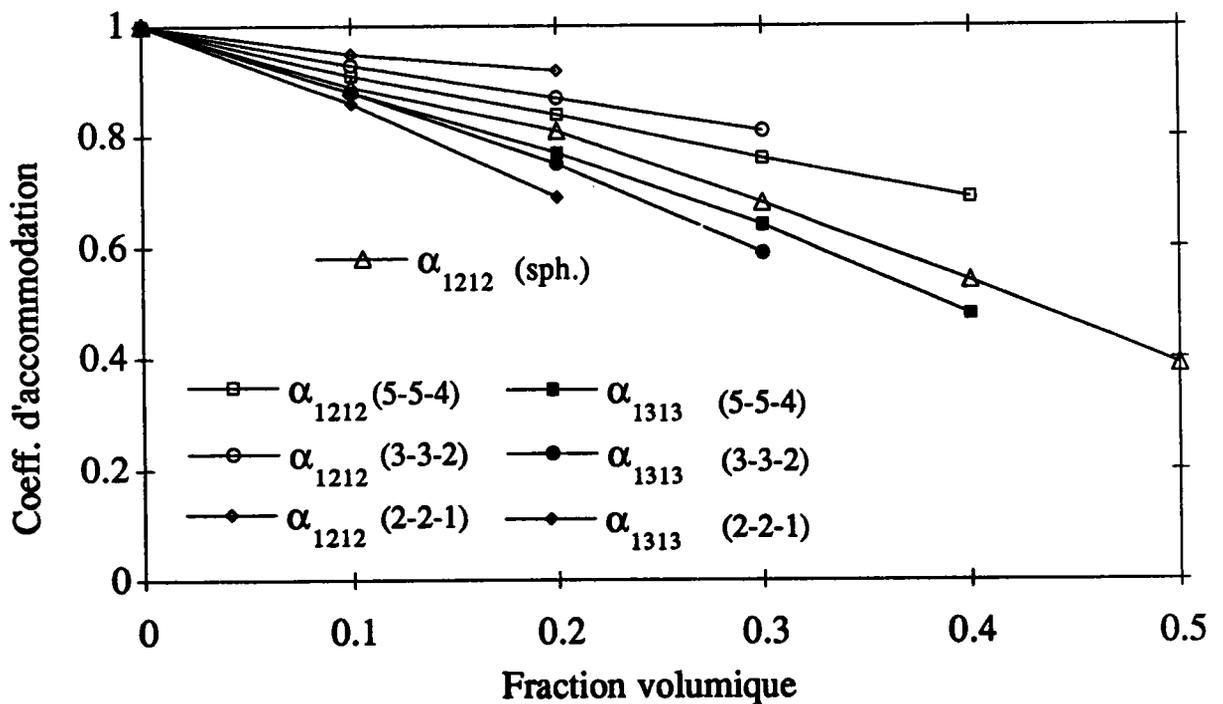


Figure V.7 : Evolution de α_{1212} et α_{1313} en fonction de f.

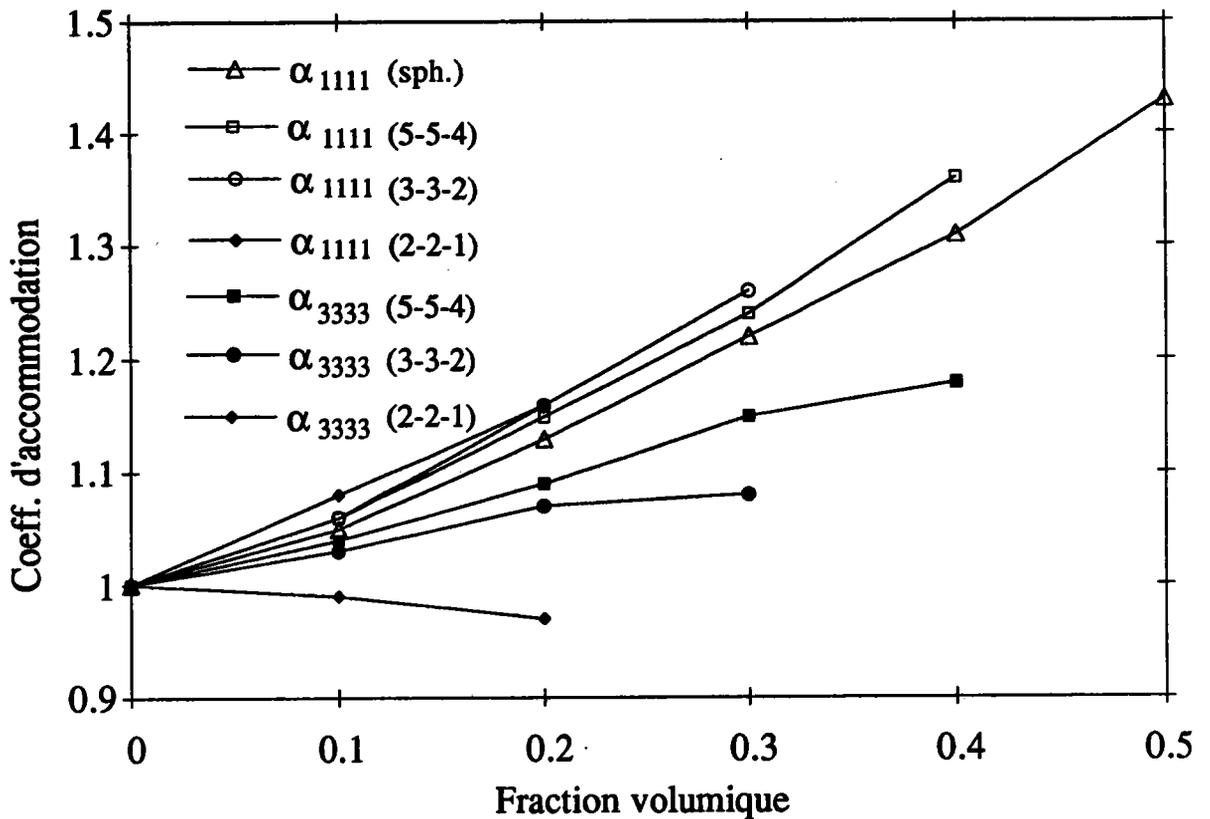


Figure V.8 : Evolution de α_{1111} et α_{3333} en fonction de f.

Ainsi l'anisotropie morphologique renforce plus encore l'anisotropie due aux interactions entre domaines, caractéristique de cette description périodique.

Ces constatations sont d'un grand intérêt en vue d'obtenir une expression des contraintes internes qui soit facilement intégrable dans un schéma numérique. Elles permettent d'ailleurs d'étayer la discussion à ce propos, qui fait l'objet du paragraphe suivant.

2.4 Loi de comportement non locale pour le monocristal

2.4.1 Discussion - Modèle partiel

Lors d'une représentation biphasée de la structure cellulaire, l'écriture définitive du potentiel énergie libre Ψ nécessite l'expression des contraintes internes dans

le biphasé. Ceci nécessite obligatoirement la mise en œuvre d'un modèle topologique, qui décrit et prend en compte la morphologie du problème micromécanique correspondant.

Deux approches ont été utilisées en vue de décrire le comportement du biphasé représentant la structure cellulaire de dislocations. Elles correspondent à des visions différentes de la topologie en ce qui concerne le niveau d'organisation de cette structure, le modèle de Kröner décrivant une structure désordonnée et la description périodique représentant plutôt une structure fortement ordonnée.

Les tenseurs d'interaction, qui lient les contraintes internes aux incompatibilités plastiques imposées, en résultant, sont très sensibles à la microstructure (fraction volumique, forme de l'inclusion, notion d'ordre dans la structure). Ainsi, on observe un phénomène qualifié d'accommodation sélective dans le cas périodique, avec un effet d'adoucissement très marqué pour certaines composantes de ces tenseurs alors que pour d'autres, une tendance à un durcissement est observée, lorsque les effets d'interaction sont plus prononcés.

Enfin, au vu de cette discussion, afin d'obtenir des résultats exploitables mais cohérents avec la réalité physique de la structure cellulaire de dislocations, la description suivante de celle-ci, correspondant à un modèle partiel par rapport à l'approche énergétique complète développée par Xavier Lemoine [L94], est proposée:

- Une description biphasée du milieu intragranulaire (une phase dure correspondant aux parois et une phase molle décrivant l'intérieur des cellules) eu égard aux fortes hétérogénéités constatées, en ce qui concerne la répartition spatiale des dislocations ainsi que les contraintes internes en résultant.
- Les contraintes internes sont une conséquence directe de l'hétérogénéité du champ des déformations plastiques et sont représentées par une approche de type

Kröner appliquée au cas du biphasé, adaptée au problème micromécanique de représentation de la structure cellulaire.

- En conséquence, les effets morphologiques de l'inclusion sont décrits par l'intermédiaire du tenseur d'Eshelby.
- Une fonction scalaire d'accommodation est introduite afin de prendre en compte approximativement les différents phénomènes relatifs à l'état fortement ordonné de la structure cellulaire ainsi qu'aux effets de frontière évolutive.

En effet, si l'on dérive par exemple (V.18) par rapport au temps en tenant compte des évolutions possibles de la microstructure, il vient :

$$\dot{\sigma}^S = F_1(C, f, S) : \Delta \dot{\epsilon}^P + F_2(C, f, S, \Delta \epsilon^P) \dot{f} + F_3(C, f, S, \Delta \epsilon^P) : \dot{S} \quad (V.37)$$

où les F_i ($i = 1, 3$) sont des fonctions scalaires ou tensorielles.

Les contributions en \dot{f} et \dot{S} de la somme (V.37) tendent à réduire le niveau élevé des contraintes internes imposées par la contribution directement liée aux incompatibilités plastiques, la structure géométrique s'adaptant, dans la mesure du possible, au chargement imposé en vue de minimiser son énergie. Ce phénomène d'évolution géométrique de la microstructure est clairement mis en évidence lors d'un changement de trajet de déformation avec une dissolution de l'ancienne structure au profit d'une autre, caractéristique des nouvelles conditions de chargement.

Cette fonction d'accommodation est du même type que celle proposée par Berveiller et Zaoui [BZ84], mais toutefois elle caractérise des phénomènes physiques différents, avec en particulier la prise en compte du problème à frontières évolutives ainsi que de l'aspect fortement ordonné de la structure cellulaire.

Dans le modèle proposé par Berveiller et Zaoui, l'accommodation élastoplastique autorise une relaxation plastique des contraintes internes, par le jeu d'une redistribution de la déformation plastique dans la matrice, autour de l'inclusion.

On propose donc une expression des contraintes internes dans le biphasé qui est de ce type :

$$\dot{\sigma}^S = A^S : (\dot{\epsilon}^{pH} - \dot{\epsilon}^{pS}) \quad (V.38)$$

$$\dot{\sigma}^H = A^H : (\dot{\epsilon}^{pH} - \dot{\epsilon}^{pS}) \quad (V.39)$$

où : - $A^S = \alpha (1-f) C : (I-S)$,

- $A^H = -\alpha f C : (I-S)$,

- α est un paramètre d'accommodation fixé à $\frac{1}{10}$ suivant les constatations développées plus haut.

- Par souci de simplicité, la microstructure est supposée constante. Ainsi, ni la fraction volumique, ni la forme de l'inclusion n'évoluent au cours de la déformation plastique. Ceci est raisonnable dans le cas de trajets monotones, avec une structure cellulaire bien établie.

- En vue de décrire l'orientation de l'ellipsoïde caractéristique du problème micromécanique en question, le critère de projection du plan principal de l'inclusion sur le système initialement le plus actif (évoqué en IV.3 et décrit plus en détail en Annexe 1) est adopté.

L'expression des contraintes internes dans le biphasé suivant (V.38) et (V.39) permet d'écrire la loi de comportement en moyenne pour le cristal. Ceci fait l'objet du paragraphe suivant.

2.4.2 Loi de comportement non locale pour le monocristal

Si la structure biphasée étudiée, pour laquelle les vitesses de contraintes internes s'expriment suivant (V.38) et (V.39) dans chaque phase, est soumise à un chargement que l'on peut, dans un premier temps, caractériser par $\dot{\sigma}$, on a dans chaque phase :

$$\dot{\sigma}^S = \dot{\sigma} + A^S : (\dot{\epsilon}^{pH} - \dot{\epsilon}^{pS}) \quad (V.40)$$

$$\dot{\sigma}^H = \dot{\sigma} + A^H : (\dot{\epsilon}^{pH} - \dot{\epsilon}^{pS}) \quad (V.41)$$

Dans un tel cas biphasé où les variables sont continues par morceaux et où la microstructure est supposée constante, l'écriture des lois de cohérence portant sur les forces thermodynamiques motrices, ainsi que sur les forces critiques correspondantes, associées aux variables internes ϵ^{pH} et ϵ^{pS} , se réduit à l'introduction de critères de plasticité dans chaque phase.

De plus, lorsque la plasticité est décrite de façon cristalline, par l'intermédiaire de systèmes de glissement, il suffit d'écrire les conditions de Schmid pour chaque système, dans chaque phase α ($\alpha = H, S$). Dans ce cas, les forces motrices thermodynamiques, associées à chaque γ_α^g , se réduisent aux cissions résolues sur ces systèmes g et les forces critiques correspondantes se réduisent aux cissions critiques sur ces systèmes. On a alors les conditions de Schmid, pour les systèmes g actifs :

$$\begin{cases} \tau_\alpha^g = \tau_{c\alpha}^g \\ \dot{\tau}_\alpha^g = \dot{\tau}_{c\alpha}^g \end{cases} \quad (V.42)$$

En introduisant les contributions cinématiques (V.40), (V.41) et isotropes (III.8), (III.10) dans (V.42), on obtient le système :

$$\begin{cases} R_{ij}^{Sg} \dot{\sigma}_{ij} + R_{ij}^{Sg} A_{ijkl}^S (R_{kl}^{Hh} \dot{\gamma}_H^h - R_{kl}^{Sh} \dot{\gamma}_S^h) = H_{SS}^{gh} \dot{\gamma}_S^h + H_{SH}^{gh} \dot{\gamma}_H^h \\ R_{ij}^{Hg} \dot{\sigma}_{ij} + R_{ij}^{Hg} A_{ijkl}^H (R_{kl}^{Hh} \dot{\gamma}_H^h - R_{kl}^{Sh} \dot{\gamma}_S^h) = H_{HS}^{gh} \dot{\gamma}_S^h + H_{HH}^{gh} \dot{\gamma}_H^h \end{cases} \quad (V.43)$$

où R^S et R^H désignent respectivement les tenseurs d'orientation de Schmid dans la phase S et la phase H. Ceci permet d'introduire, tout du moins formellement, des orientations de systèmes spécifiques à chaque phase avec des désorientations possibles.

Si l'on travaille en vitesses de déformation imposées au niveau du grain, on a :

$$\dot{\sigma} = C : (\dot{\epsilon} - \dot{\epsilon}^P)$$

$$\text{soit } \dot{\sigma} = C : (\dot{\epsilon} - f \dot{\epsilon}^{pS} - (1-f) \dot{\epsilon}^{pH}) \quad (\text{V.44})$$

D'où, le système en $\dot{\gamma}_S^g$ et $\dot{\gamma}_H^g$, dans le cas d'une expression matricielle par blocs:

$$\begin{pmatrix} M_{SS}^{gh} & M_{SH}^{gh} \\ M_{HS}^{gh} & M_{HH}^{gh} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\gamma}_S^h \\ \dot{\gamma}_H^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{ij}^{Sg} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \\ R_{ij}^{Hg} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \end{pmatrix} \quad (\text{V.45})$$

où

$$\begin{aligned} M_{SS}^{gh} &= H_{SS}^{gh} + R^{Sg} : A^S : R^{Sh} + f R^{Sg} : C : R^{Sh} \\ M_{SH}^{gh} &= H_{SH}^{gh} - R^{Sg} : A^S : R^{Hh} + (1-f) R^{Sg} : C : R^{Hh} \\ M_{HS}^{gh} &= H_{HS}^{gh} + R^{Hg} : A^H : R^{Sh} + f R^{Hg} : C : R^{Sh} \\ M_{HH}^{gh} &= H_{HH}^{gh} - R^{Hg} : A^H : R^{Hh} + (1-f) R^{Hg} : C : R^{Hh} \end{aligned} \quad (\text{V.46})$$

Donc, lorsque l'inversion est possible, on a

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_S^g \\ \dot{\gamma}_H^g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{SS}^{gh} & M_{SH}^{gh} \\ M_{HS}^{gh} & M_{HH}^{gh} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{ij}^{Sh} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \\ R_{ij}^{Hh} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \end{pmatrix} \quad (\text{V.47})$$

ou

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_S^g &= N_S^g : \dot{\epsilon} \\ \dot{\gamma}_H^g &= N_H^g : \dot{\epsilon} \end{aligned} \quad (\text{V.48})$$

Ceci permet donc d'obtenir $\dot{\gamma}_S^g$ et $\dot{\gamma}_H^g$. Il reste donc à exprimer les modules élastoplastiques tangents du cristal en vue d'obtenir la loi de comportement de ce cristal.

On a

$$\dot{\sigma} = C : (\dot{\epsilon} - f \dot{\epsilon}^{PS} - (1-f) \dot{\epsilon}^{PH})$$

$$\text{ou } \dot{\sigma} = C : (\dot{\epsilon} - f R^{Sg} : N_S^g : \dot{\epsilon} - (1-f) R^{Hg} : N_H^g : \dot{\epsilon}) \quad (\text{V.49})$$

soit, finalement :

$$\dot{\sigma} = l : \dot{\epsilon} \quad (\text{V.50})$$

$$\text{avec } l = C - f C : R^{Sg} : N_S^g - (1-f) C : R^{Hg} : N_H^g \quad (\text{V.51})$$

Ceci constitue la relation de comportement élastoplastique globale du composite présentant des propriétés non locales au niveau microscopique, qui lie le taux de déformation imposé à ce composite au taux de contrainte correspondant.

Cette relation de comportement est de type local au niveau du composite biphasé qu'est le grain possédant une structure cellulaire de dislocations. Cette approche reste donc cohérente par rapport aux modélisations locales moyennées [LP89] sur le grain qui amènent à des modules tangents élastoplastiques de la forme :

$$l = C - C : R^g : (H^{gh} + R^g : C : R^g)^{-1} : R^g : C \quad (\text{V.52})$$

Cette loi de comportement prend une forme différente de celle obtenue dans le chapitre IV en (IV.46), pour laquelle un schéma de type autocohérent est utilisé avec introduction des tenseurs de localisation correspondants. Donc, dans ce cas, la loi de comportement est écrite en utilisant les propriétés d'hétérogénéité du milieu, la topologie du problème étant décrite lors de l'intégration du tenseur de Green modifié, déduit de l'équation intégrale cinématique non locale.

Ici, tout le développement est basé sur l'incompatibilité plastique entre phases, d'où une écriture différente des contraintes internes avec l'introduction du tenseur d'Eshelby pour décrire la topologie du problème, ce qui permet d'éviter une opération complexe de localisation dans le biphasé.

L'approche biphasée non locale développée dans ce chapitre est basée sur l'aspect cristallographique de la déformation plastique, avec introduction de systèmes de glissement privilégiés. Le même type de démarche a été mis en œuvre dans un cadre plus macroscopique, où la plasticité est décrite à l'aide d'un critère phénoménologique de Von Mises [MKB93b].

Le comportement du grain, supposé local en moyenne, étant obtenu à partir des effets non locaux au niveau des cellules, la seconde étape de la double transition d'échelle, du grain au polycristal, est mise en œuvre par l'intermédiaire d'un schéma autocohérent de type local. De nombreux résultats sont présentés dans le paragraphe suivant.

Chapitre V

Partie 2

3) Application au polycristal

3.1 Introduction

La loi de comportement, supposée locale en moyenne, du grain à structure biphasée possédant des propriétés non locales à l'échelle microscopique (interactions entre phases), a été exprimée dans le paragraphe précédent à partir d'une modélisation partielle et simplifiée, du fait de la complexité du problème micromécanique de frontières évolutives correspondant.

Afin d'obtenir le comportement d'un agrégat polycristallin, il est nécessaire d'effectuer une transition d'échelle du grain à l'échelle macroscopique. Ceci s'effectue, comme dans le chapitre précédent, par l'intermédiaire d'un schéma autocohérent classique.

La mise en œuvre d'une modélisation partielle en vue de traiter la topologie correspondant à la structure cellulaire de dislocations, permet d'obtenir de nombreuses applications dans le cas du polycristal, de faire des comparaisons avec le schéma autocohérent utilisé dans **CRYSTAL**, où le comportement intragranulaire est uniforme et local, voire avec des données expérimentales, lorsque cela est possible (en effet, les études expérimentales sur le comportement du matériau à l'échelle des cellules sont peu nombreuses).

Globalement, les hypothèses concernant la description cristallographique des grains, déjà évoquées en IV 3.2.1, sont conservées.

Tout d'abord une étude numérique est effectuée afin de vérifier la sensibilité du modèle à différents paramètres (forme et fraction volumique de cellules, texture cristallographique initiale, paramètres d'écrouissage, influence du formalisme : local ou non local) tant d'un point de vue microscopique que macroscopique.

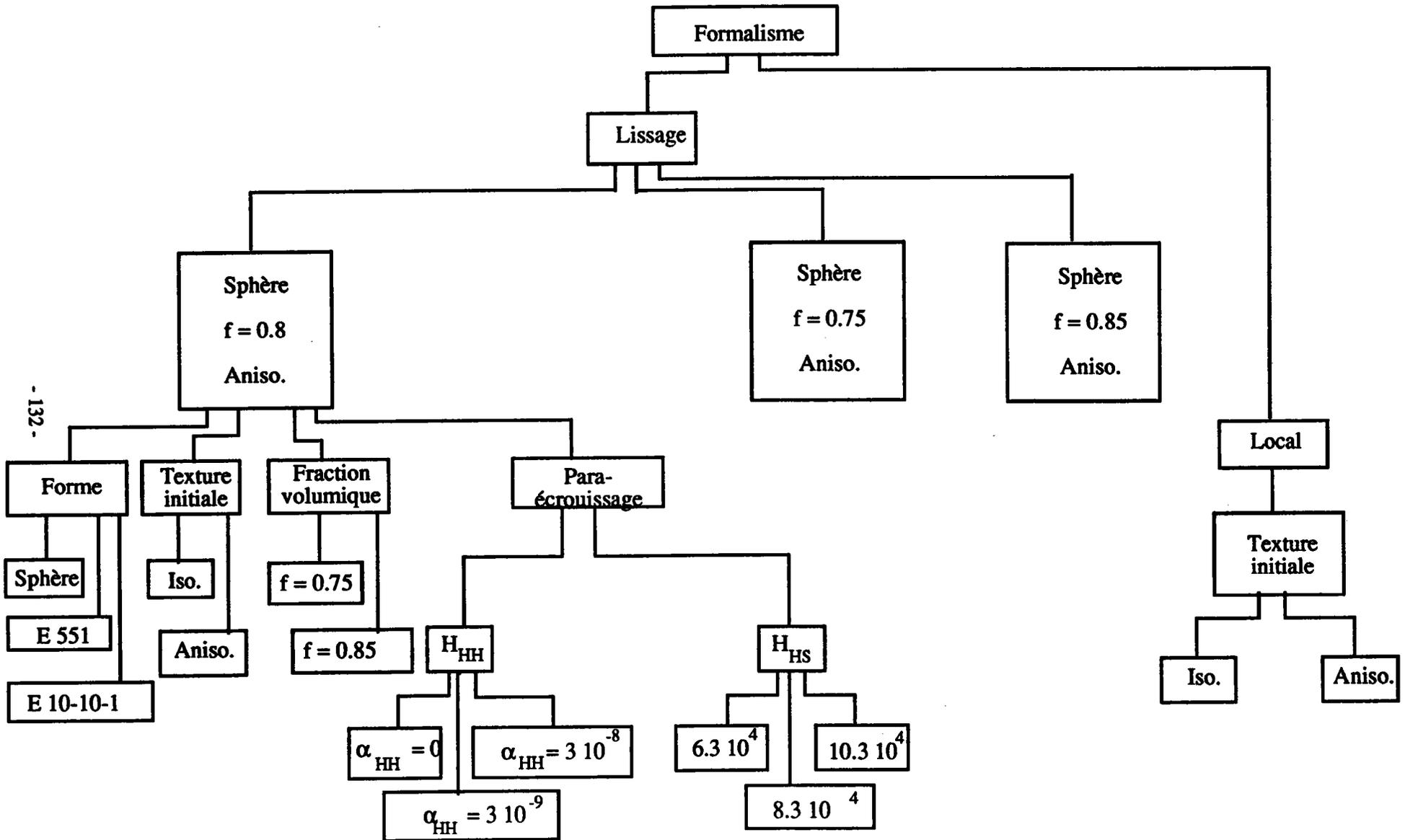
Des résultats d'essais séquentiels sont présentés, qui mettent en évidence l'effet du niveau élevé de contraintes atteint dans les parois sur la réponse macroscopique du polycristal, en comparaison avec les simulations effectuées en parallèle avec **CRYSTAL**.

Enfin, deux applications originales de cette démarche non locale au niveau intragranulaire sont proposées, dans le cadre de l'étude des contraintes résiduelles par la diffraction. La première s'attache à suivre l'évolution des distances inter-réticulaires de plans cristallographiques (directement liées à l'état de contraintes) dans l'espace des orientations alors que la seconde s'intéresse qualitativement à la reconstitution de pics de diffraction à partir de la connaissance de l'état résiduel de contraintes dans le matériau.

3.2 Etude paramétrique

Cette étude a pour objectif de vérifier l'influence de différents facteurs, relatifs à la modélisation du polycristal, sur le comportement de celui-ci tant d'un point de vue microscopique que macroscopique.

Ainsi l'influence de paramètres physiques comme la texture cristallographique du polycristal, la forme et la fraction volumique de cellules de dislocations, les paramètres d'écrouissage est étudiée. De même, les conséquences du choix de description du comportement du grain (biphasé non local ou milieu uniforme) ont été observées. Les moyens de visualisation sont de type graphique, et sont constitués par les courbes de réponse macroscopique (σ , ϵ), les nuages d'ordre deux et trois dans l'espace (σ , ϵ) ou celui des orientations (figures de pôles de contraintes), les figures de pôles cristallographiques, l'évolution du coefficient de Lankford du matériau.



- 132 -

Schéma V.1 : Organisation de l'étude paramétrique

L'organigramme descriptif de cette étude paramétrique est présenté sur le schéma V.1.

En particulier, trois formes caractéristiques d'ellipsoïdes ont été choisies phénoménologiquement en vue de décrire la forme des cellules de dislocations :

- sphère,
- oblate 5-5-1,
- oblate 10-10-1.

De même, l'influence de la fraction volumique de cellules a été étudiée en se basant sur une valeur de départ $f=0.8$, déduite d'observations expérimentales [M88]; d'où un choix de trois paramètres $f = 0.75$, $f = 0.80$, $f = 0.85$.

Deux types de texture cristallographique initiale sont utilisés pour le matériau C.C. servant de base à cette étude paramétrique. Ils sont calculés numériquement à partir d'un logiciel développé par E. Reubrez [R94], et sont discrétisés par une sélection de 1000 orientations. Le choix porte sur :

- une texture initialement isotrope,
- une texture de laminage correspondant à un acier pour emballage (APE), T4-DWI de l'unité SOLLAC de Mardyck.

Les paramètres d'écrouissage, décrivant la matrice H, sont reconstitués à partir de données de la littérature, afin d'obtenir un ordre de grandeur dans un premier temps, puis sont déterminés par lissage de courbe. La méthode qui serait la plus physiquement acceptable, consisterait à déterminer ces paramètres à partir de mesures effectuées sur le monocristal. On se heurte alors à la difficulté de mise en œuvre expérimentale.

Les données de la littérature sont :

- la distance d'annihilation : $y \approx 2 \text{ nm}$,
- le module du vecteur de Burgers : $b \approx 5 \text{ \AA}$,

- le libre parcours moyen des dislocations : $L \approx 1 \text{ à } 5 \text{ } \mu\text{m}$,
- le module de cisaillement : $\mu \approx 80 \text{ GPa}$.

On définit alors, les quantités α_{HS} et α_{HH} , qui décrivent la matrice H

$$\begin{aligned}
 -\alpha_{HS}^+ &\approx \frac{b\mu^2}{L} \\
 -\alpha_{HS}^- &= \alpha_{HH} \approx b\mu^2 y
 \end{aligned}
 \tag{V.53}$$

Remarque : - Les effets d'annihilation peuvent être différenciés. Toutefois, ce n'est pas le cas ici.

- De même, un coefficient α_{SS} est défini d'après la formule (IV.86).

Dans le cadre de cette étude paramétrique, la fraction volumique de cellules est un paramètre majeur. En effet, plus elle est importante, plus le comportement de la phase molle prend une part prépondérante sur la réponse macroscopique.

Par conséquent, des lissages de courbes obtenues par la simulation non locale, dans le cas d'une texture cristallographique anisotrope, avec la courbe de traction expérimentale (acier T4 DWI de Mardyck) sont effectués pour les trois valeurs de fraction volumique de cellules précitées. On a :

$$\begin{aligned}
 - \text{Pour } f = 0.75 & \quad + \tau_c^0 = 101.0 \text{ MPa} \\
 & \quad + \alpha_{SS} = 3.0 \cdot 10^3 \text{ (MPa)}^2 \\
 & \quad + \alpha_{HS}^+ = 6.0 \cdot 10^4 \text{ (MPa)}^2 \\
 & \quad + \alpha_{HH} = 2.0 \cdot 10^{-8} \text{ N}^2\text{m}^{-2}
 \end{aligned}
 \tag{V.54}$$

$$\begin{aligned}
 - \text{Pour } f = 0.8 & \quad + \tau_c^0 = 103.0 \text{ MPa} \\
 & \quad + \alpha_{SS} = 4.0 \cdot 10^3 \text{ (MPa)}^2 \\
 & \quad + \alpha_{HS}^+ = 8.3 \cdot 10^4 \text{ (MPa)}^2 \\
 & \quad + \alpha_{HH} = 2.0 \cdot 10^{-8} \text{ N}^2\text{m}^{-2}
 \end{aligned}
 \tag{V.55}$$

$$\begin{aligned}
- \text{ Pour } f = 0.85 & & + \tau_c^0 &= 105.0 \text{ MPa} \\
& & + \alpha_{SS} &= 3.0 \cdot 10^3 \text{ (MPa)}^2 \\
& & + \alpha_{HS}^+ &= 1.3 \cdot 10^5 \text{ (MPa)}^2 \\
& & + \alpha_{HH} &= 2.0 \cdot 10^{-8} \text{ N}^2\text{m}^{-2}
\end{aligned} \tag{V.56}$$

De même, le matériau numérique est reconstitué en utilisant **CRYSTAL** par lissage avec la courbe expérimentale dans le cas de la texture de laminage, ce qui conduit à [S93]:

$$\begin{aligned}
& + \tau_c^0 = 111.5 \text{ MPa} \\
& + \text{para-écrouissage} = 1.05 \cdot 10^4 \text{ (MPa)}^2 \\
& + \text{coefficient de non linéarité} = 1.15
\end{aligned} \tag{V.57}$$

Les effets des variations du paramètre α_{HS}^+ sont étudiés, à partir des données du matériau correspondant au lissage $f = 0.8$. D'où le choix des trois valeurs :

$$\alpha_{HS}^+ = 6.3 \cdot 10^4 \text{ (MPa)}^2 \quad \alpha_{HS}^+ = 8.3 \cdot 10^4 \text{ (MPa)}^2 \quad \alpha_{HS}^+ = 10.3 \cdot 10^4 \text{ (MPa)}^2 \tag{V.58}$$

Les effets des variations des paramètres α_{HS}^- ($= \alpha_{HH}$ ici) sont étudiés de même que pour α_{HS}^+ , avec le choix des trois valeurs extrémales:

$$\alpha_{HH} = 0.0 \text{ N}^2\text{m}^{-2} \quad \alpha_{HH} = 3.0 \cdot 10^{-10} \text{ N}^2\text{m}^{-2} \quad \alpha_{HH} = 3.0 \cdot 10^{-8} \text{ N}^2\text{m}^{-2} \tag{V.59}$$

Essai caractéristique (appelé Essai 1) de l'étude paramétrique:

- Tous les résultats présentés plus avant sont obtenus après une décharge élastique consécutive à un essai de traction jusqu'à 30% de déformation plastique équivalente.

- D'autre part, comme cela a été souligné précédemment, la plupart des figures sont insérées en annexe 2, afin de ne pas surcharger le corps du chapitre V, partie 2.

- Enfin, les courbes représentant les effets d'ordre deux et trois possèdent les mêmes caractéristiques que celles présentées en IV3.2.2.

3.2.1 Influence du formalisme utilisé

Le formalisme non local développé dans ce travail constitue une extension de la théorie utilisée pour la mise en œuvre de **CRYSTAL 1.0** (description uniforme du comportement du grain) avec une description biphasée non locale pour le monocristal.

Tous les types de résultats accessibles par **CRYSTAL** sont donc susceptibles d'être obtenus avec le développement non local qui propose, en plus, des informations sur l'hétérogénéisation intragranulaire et peut amener ainsi des conclusions quelque peu différentes (en particulier sur certains aspects du comportement du polycristal, comme cela sera présenté par la suite).

Les deux simulations sont effectuées dans le cas anisotrope, la simulation non locale correspondant au lissage [$f=0.8$], cf schéma V.1.

a) Résultats macroscopiques

La figure V.9 décrit les lissages effectués avec les formalismes locaux et non locaux par rapport à un essai expérimental de traction avec l'acier APE précité.

Remarque : Il est à noter que, du fait du plus grand nombre de paramètres à l'échelle microscopique avec le schéma non local, les possibilités de lissage sont plus grandes.

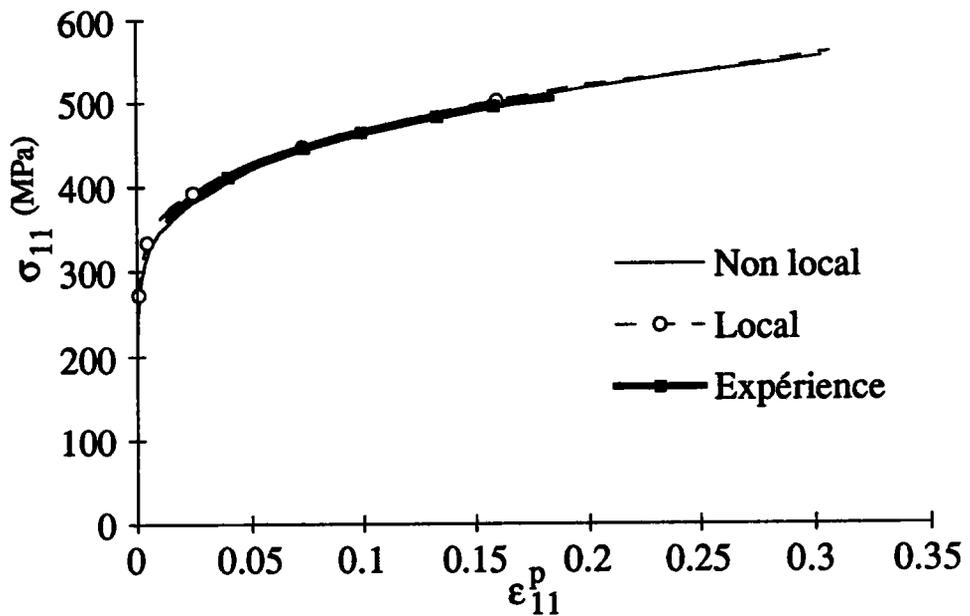


Figure V.9 : Lissage de la courbe expérimentale de traction avec les deux formalismes pour l'essai 1

La figure V.10 décrit l'évolution du coefficient de Lankford r ($r = \epsilon_{22}^p / \epsilon_{33}^p$) traduisant l'aptitude à l'emboutissage d'un matériau, obtenue avec les deux formalismes, comparativement à l'expérience.

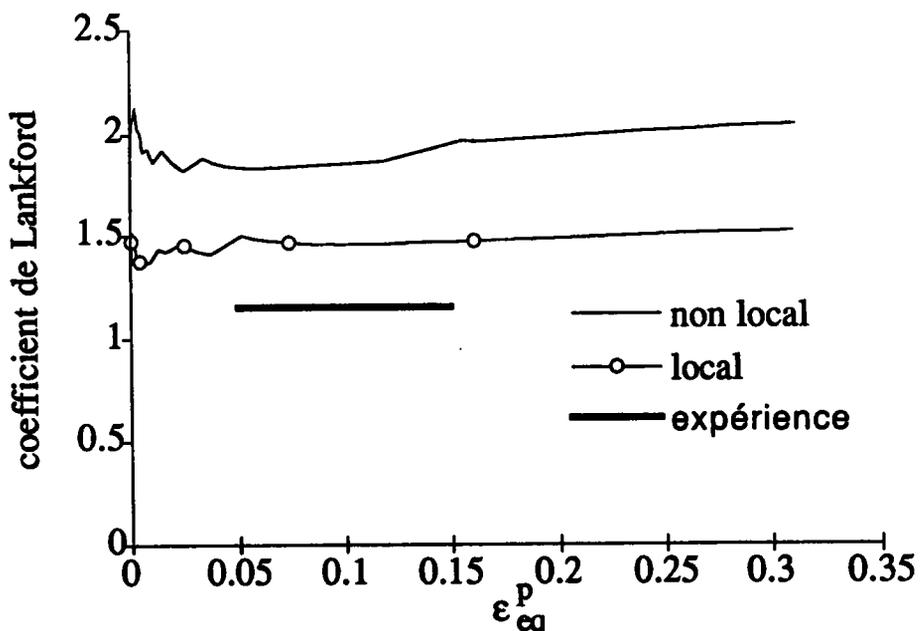


Figure V.10 : Calcul du coefficient de Lankford. Comparaison avec l'expérience pour l'essai 1

De grandes différences sont constatées entre les simulations locale et non locale. Ceci provient du choix (délibéré) de glissement cristallographique autorisé uniquement sur les plans (110) avec le code non local (du fait de problèmes de temps de calcul) alors que le pencil-glide est pris en compte par les plans (110) et (112) dans le cas local. Une simulation locale, où seuls les plans (110) sont considérés, a été effectuée par E. Reubrez [R94]; elle montre les mêmes écarts. Il y a donc lieu de prendre en compte cette possibilité de glissement sur les plans (112) avec le code non local, ce qui sera effectué ultérieurement.

D'autre part, on observe un écart conséquent entre les valeurs expérimentales et la simulation locale. Ceci provient d'une sélection trop limitée des orientations représentatives de la texture du matériau laminé.

En effet, la méthode de calcul des orientations représentatives est très sensible au nombre de grains (plus ce nombre est important, meilleure est la description de la texture). Ainsi pour différentes sélections de 1000 grains représentant le même matériau expérimental, r peut osciller de 1.1 à 1.5. Ces considérations étant vues par ailleurs [R94], les comparaisons effectuées dans ce travail sont donc relatives à la même sélection d'orientations.

b) Résultats microscopiques

La figure V.11 décrit la répartition des contraintes résiduelles d'ordre deux obtenues après un essai de traction, avec les deux formalismes dans l'espace contraintes-déformations plastiques. Ces contraintes sont calculées directement avec le code **CRYSTAL**, alors qu'elles proviennent d'opérations de moyenne sur les grains avec le code non local.

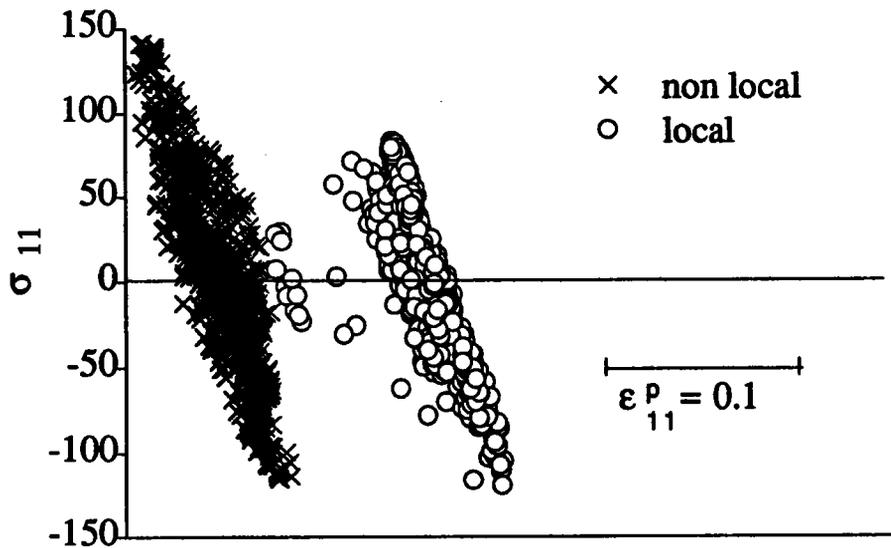


Figure V.11 : Distribution des contraintes d'ordre 2 dans le plan (σ, ϵ) après décharge élastique dans le cas de l'essai 1.

Un niveau de contraintes plus élevé est obtenu lors de la simulation non locale, malgré la même courbe de consolidation macroscopique. A part ce point, les distributions sont très similaires.

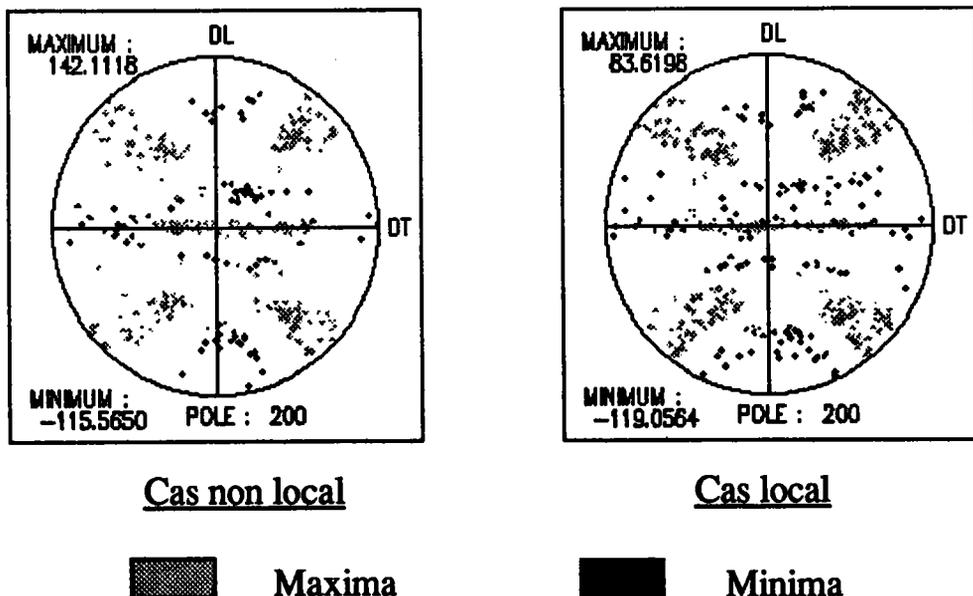


Figure V.12 : Distribution des minima et maxima de contraintes d'ordre 2 dans l'espace des orientations (composantes 11) après l'essai 1

La figure V.12 représente la distribution des contraintes résiduelles d'ordre deux, obtenues après l'essai 1, dans l'espace des orientations, au travers de la visualisation des minima et maxima de contraintes sur une figure de pôles (200) non symétrisée, et ceci pour les deux simulations, locale et non locale.

On observe les mêmes distributions pour les deux simulations. Ceci est confirmé sur la figure A2.1 où sont étudiées les répartitions des composantes 22, 33 et 23.

Les grains soumis à des niveaux de contraintes différents n'occupent pas la même position sur la figure de pôles. Ainsi les nuages décrivant les minima de contraintes d'ordre deux sont bien découplés de ceux correspondant aux maxima de contraintes. Cette méthode de visualisation permet donc de compléter les informations disponibles en utilisant la description des contraintes dans l'espace (σ, ϵ_P) (cf figure V.11).

L'effet sur la texture cristallographique est quasiment nul; les figures de pôles (200), (110), (111) et (112) pour le matériau laminé sont décrites sur la figure A2.2, la figure A2.3 décrivant ces mêmes figures de pôles obtenues après traction avec le code **CRYSTAL** local et la figure A2.4 correspondant au code non local. La texture a donc évolué après 30% de traction, mais les deux modèles montrent les mêmes résultats. Cet effet restant vrai tout au long de la simulation, on ne reproduira pas systématiquement ces figures de pôles.

En conclusion, eu égard aux hypothèses utilisées pour simplifier le développement numérique du schéma non local, celui-ci ne présente pas de différence significative avec le code local, tout du moins au vu des seuls résultats, directement comparables, obtenu au cours d'un essai de traction. L'étude de trajets complexes montrera plus loin quelques conséquences d'une description différente du comportement intragranulaire.

3.2.2 Influence de la forme des cellules

L'introduction d'une forme ellipsoïdale d'inclusion, au travers du tenseur d'Eshelby, peut s'effectuer par l'intermédiaire d'un critère de projection des ellipsoïdes sur le plan du grain initialement le plus chargé (cf Annexe 1), ceci correspondant approximativement aux observations expérimentales.

Les simulations sont effectuées dans le cas anisotrope, pour le lissage [$f=0.8$], cf schéma V.1.

a) Résultats macroscopiques

La figure V.13 décrit la réponse macroscopique (composante de traction) du cristal, ainsi que les comportements en moyenne de chaque phase sur le polycristal, suivant la forme d'ellipsoïde utilisée, au cours de l'essai 1.

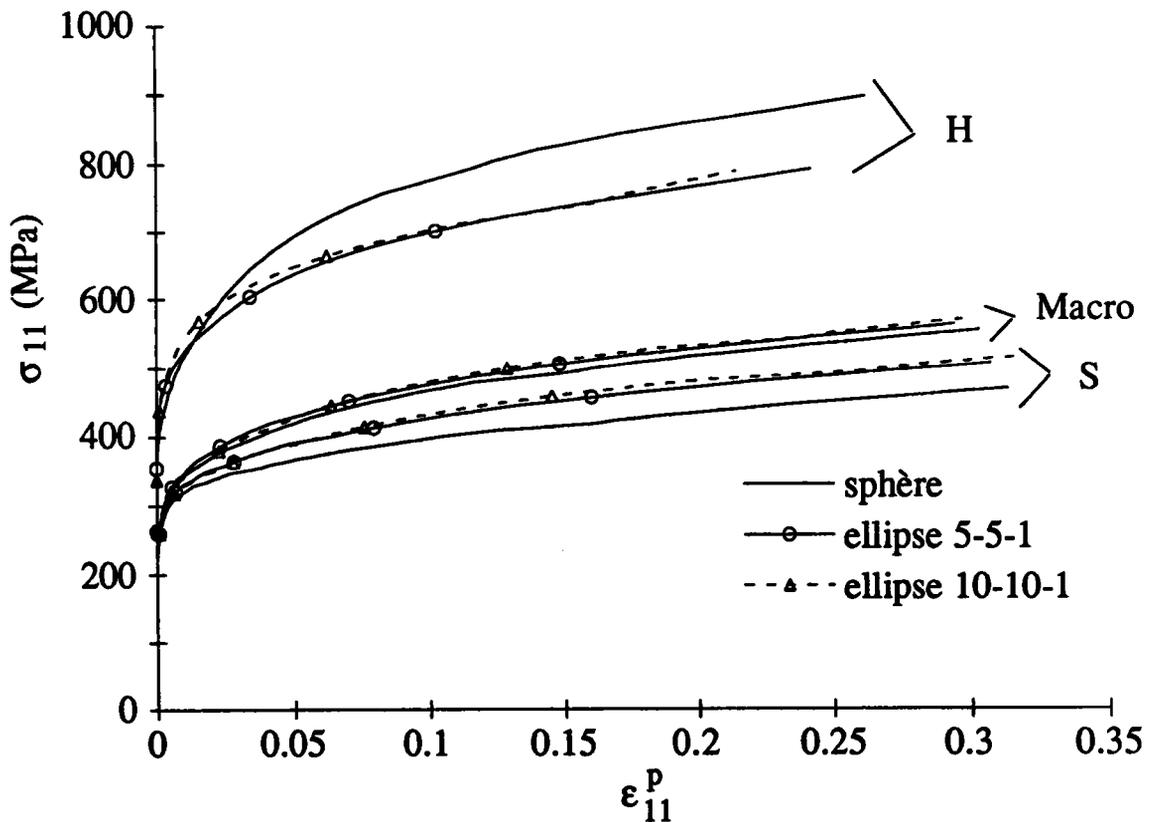


Figure V.13 : Réponses macroscopique et en moyenne par phase suivant la forme des cellules (composantes 11) au cours de l'essai 1.

Aucune influence notable sur la réponse du polycristal n'est à constater. Par contre, des effets se voient sur les réponses en moyenne de chaque phase : la forme sphérique accentue les différences de niveau entre phases par rapport aux cas des oblates qui, entre eux, donnent des résultats très semblables.

La phase d'écroutissage non local dans les phases H, sans déformation plastique correspondante, est facilement discernable au début de l'essai, avec l'obtention d'un durcissement conséquent (jusqu'à 400 MPa), malgré les cissions critiques initiales choisies identiques à celles des phases S.

Des résultats opposés sont obtenus dans le cas des réponses dans la direction 2, cf figure A2.5. Ceci montre bien l'anisotropie importante sur le comportement, induite par l'introduction de formes différentes de cellules.

En moyenne, on peut atteindre une hétérogénéité en contraintes (composante 11) entre phases de l'ordre de 500 MPa. Du fait de l'anisotropie importante du matériau, cette hétérogénéité peut devenir beaucoup plus importante, la contrainte équivalente au sens de Von Mises, sur la figure V.14.

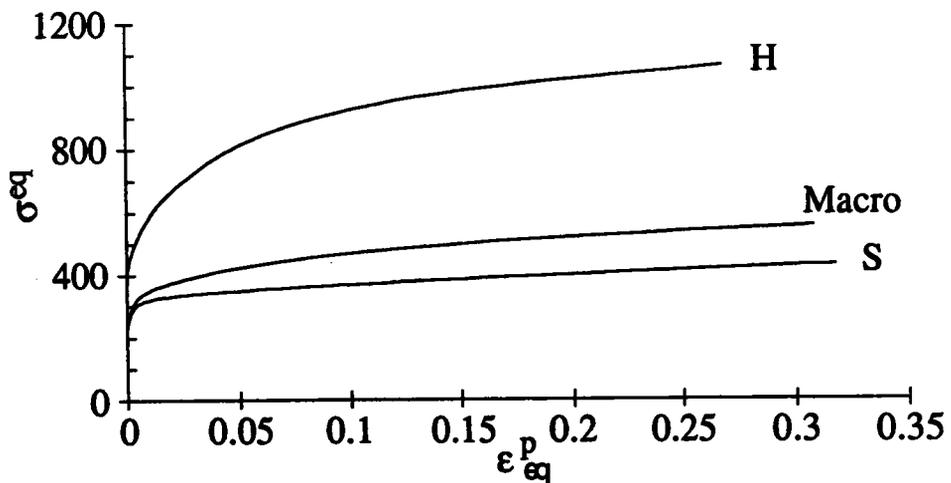


Figure V.14: Réponses macroscopique et en moyenne par phase suivant la forme des cellules (contraintes équivalentes) au cours de l'essai 1

Des contraintes équivalentes de plus de deux fois la limite d'écoulement macroscopique sont atteintes en moyenne dans les parois. Ce résultat est cohérent avec les observations expérimentales de Mughrabi [M88], ainsi que de Morris et Martin [MM84a], présentées respectivement sur les figures II.9 et II.10.

Cette hétérogénéité en contraintes, importante dans le petit domaine constitué par un grain, n'est évidemment pas prise en compte dans une description uniforme des grains. D'autre part, des conséquences tant microscopiques (initiation de microbandes de cisaillement) que macroscopiques (fort effet des contraintes internes lors de changement de trajet de chargement par exemple) sont à prévoir.

Les variations du coefficient de Lankford en fonction de la forme des cellules, représentées sur la figure V.15, sont faibles.

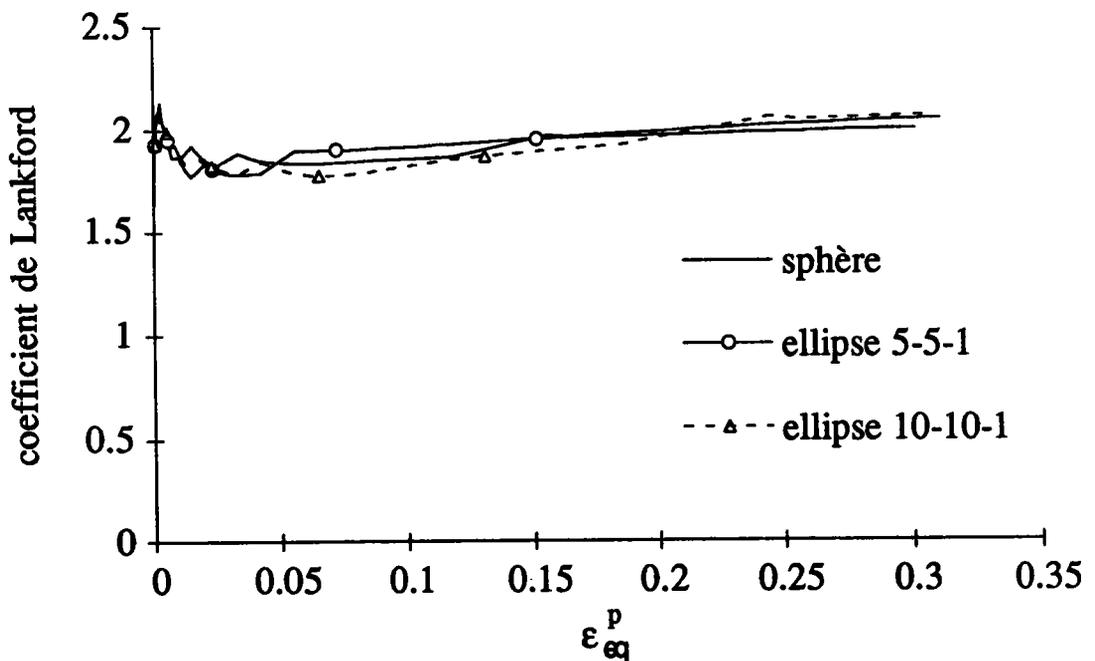


Figure V.15: Evolution du coefficient de Lankford suivant la forme des cellules au cours de l'essai 1

b) Résultats microscopiques

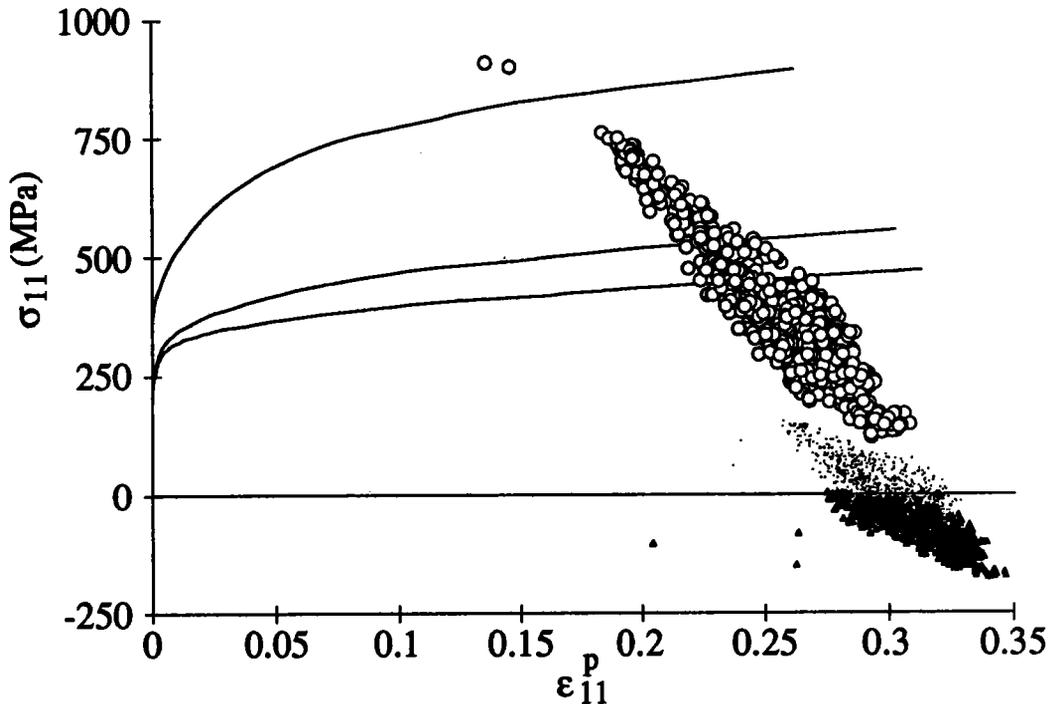


Figure V.16 : Distribution des contraintes résiduelles d'ordres deux et trois dans le polycristal après l'essai 1

La figure V.16 représente les répartitions types des contraintes résiduelles d'ordres deux et trois (composante σ_{11}) après l'essai 1, dans le cas d'une forme sphérique des cellules.

Un fort état résiduel de traction est constaté dans les parois, d'où un état de compression correspondant à l'intérieur des cellules.

Les figures A2.6 et A2.7 décrivent les mêmes distributions obtenues pour les oblates. Si le niveau moyen des contraintes d'ordre trois est plus élevé avec les sphères, l'étalement, de même que l'orientation des nuages est similaire dans les trois cas.

L'état résiduel du matériau en σ_{22} est décrit, dans les trois cas, sur les figures A2.8 à A2.10.

On constate toutefois une dispersion progressive des nuages quand le rapport de forme augmente; ce phénomène est sûrement à relier au critère de projection des ellipsoïdes adopté dans ce travail.

D'autres composantes de l'état résiduel de contraintes (σ_{33}, σ_{23}) sont présentées en A2.11 à A2.12 dans le cas sphérique. En fait, on constate un fort état de contraintes résiduelles sur pratiquement toutes les composantes.

La figure V.17 décrit les contraintes d'ordre deux (résiduelles, composante σ_{11}) après l'essai 1, obtenues suivant les formes de cellules. Les différences sont peu notables.

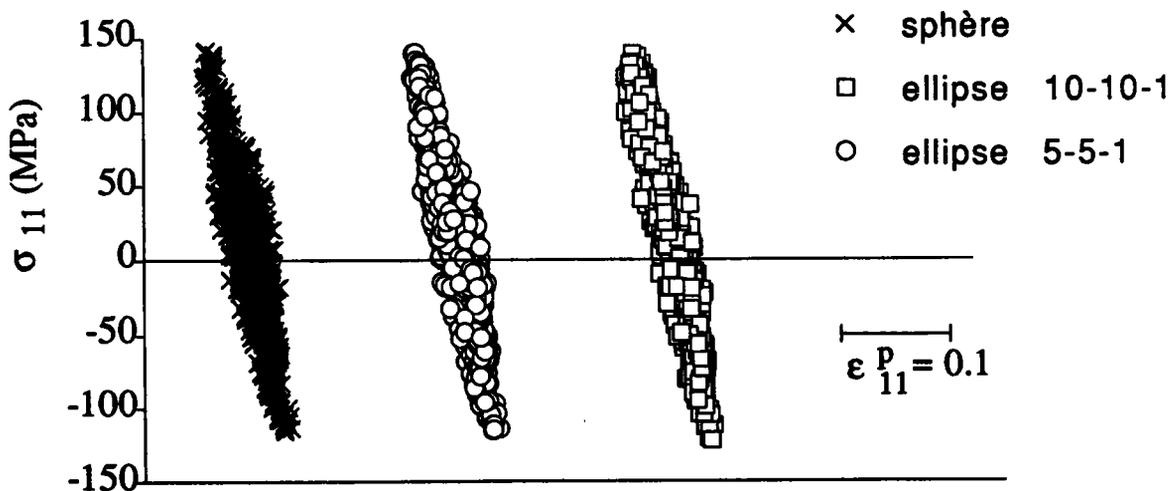


Figure V.17 : Répartition des contraintes résiduelles d'ordre deux suivant la forme des cellules, après l'essai.

L'effet du changement de forme sur les textures cristallographiques, présenté sur les figures A2.13 et A2.14 pour les cas ellipsoïdaux, que l'on peut comparer aux

résultats pour le cas sphérique en A2.4, est faible en ce qui concerne ces simulations.

En résumé, l'effet de forme de cellules est important en ce qui concerne l'anisotropie du comportement des phases. Toutefois les conséquences macroscopiques (résultant d'opérations de moyenne) sont plus faibles en ce qui concerne les simulations effectuées.

3.2.3 Influence de la texture cristallographique initiale

On compare ici, dans le cas de la modélisation non locale basée sur le lissage [$f=0.8$], effectuée avec une texture initiale isotrope de 1000 grains ainsi qu'avec la sélection de 1000 grains (déjà utilisée précédemment) représentant le matériau texturé initial, cf schéma V.1.

a) Résultats macroscopiques

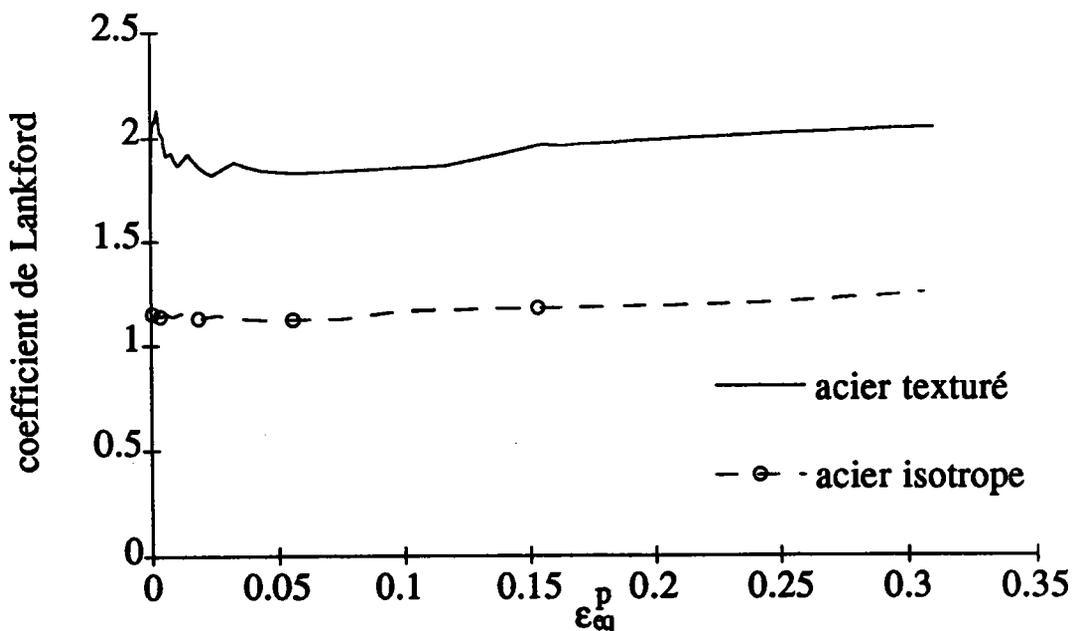


Figure V.18 : Influence de la texture cristallographique sur r .

Des différences s'observent naturellement au niveau du coefficient de Lankford, représenté sur la figure V.18 dans le cadre de l'essai 1 de traction avec le code non local, l'effet de texture étant toujours amplifié du fait du choix des systèmes de glissement (110).

Par contre, les réponses macroscopique et moyennes par phase après l'essai 1, présentées en A2.15, ne montrent pas de différences significatives.

b) Résultats microscopiques

Les nuages d'ordre deux sont plus étalés, au niveau des contraintes, dans le cas du matériau texturé (figure A2.16). Les figures de pôles présentent des différences évidentes (figures A2.17).

*En conséquence, les effets de texture initiale, lors du calcul non local, sont du même type que ceux observés classiquement avec **CRYSTAL** en ce qui concerne les effets sur le coefficient de Lankford ainsi que sur les figures de pôles.*

3.2.4 Influence des paramètres d'écroutissage

Ces paramètres sont essentiels dans la description du comportement monocristallin, d'où l'influence de leur variation sur la réponse du polycristal.

Cette étude est effectuée dans le cas du lissage [$f=0.8$] avec les autres paramètres inchangés. Seules les influences sur les résultats macroscopiques sont étudiées ici.

a) Effet de α_{HS}^+

La figure V.19 décrit les réponses macroscopique et moyennes par phase après l'essai 1 (composante σ_{11}) suivant les valeurs des paramètres α_{HS}^+ .

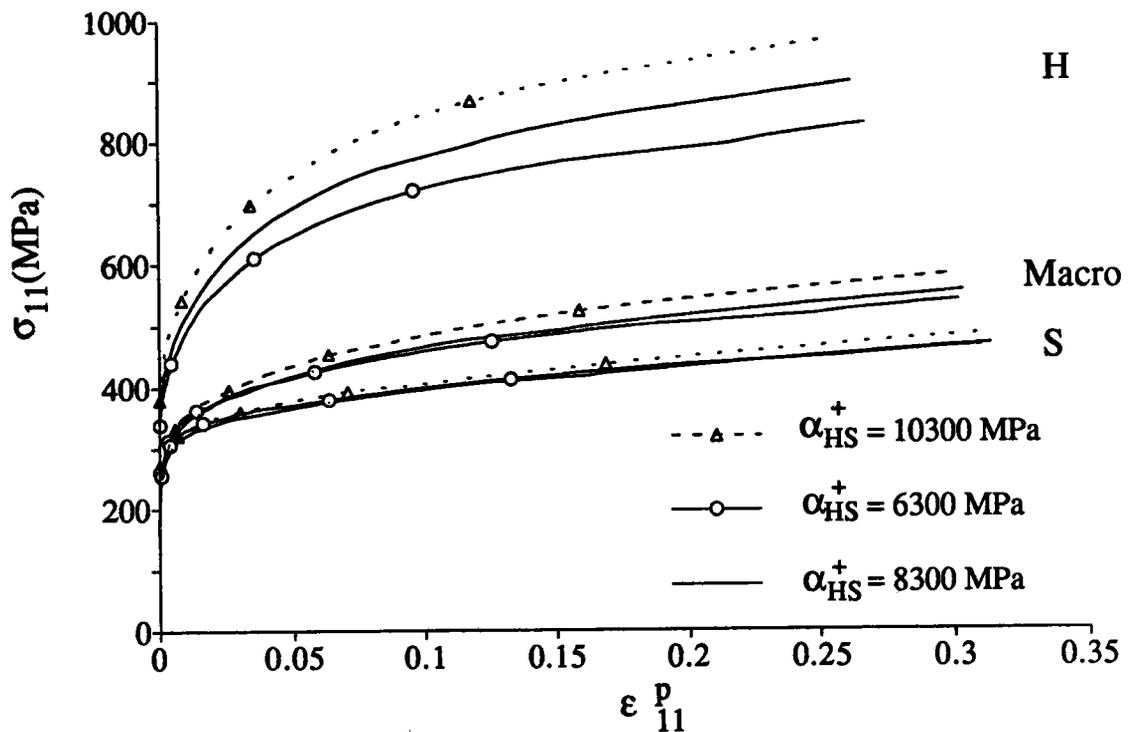


Figure V.19 : Influence des paramètres α_{HS}^+ sur le comportement du polycristal.

Les effets sont importants, avec un durcissement logique des phases H, donc du polycristal, lorsque α_{HS}^+ augmente. Ceci est confirmé sur la figure A2.18 s'intéressant aux composantes 22.

Aucun effet prononcé sur le coefficient de Lankford n'est à constater, l'anisotropie de la réponse du monocristal n'étant pas changée avec l'évolution des modules α_{HS}^+ .

b) Effet de $\alpha_{HS}^- = \alpha_{HH}$

De grandes variations de ces paramètres (supposés identiques) sont imposées ici, afin de montrer les effets importants dus à l'annihilation des dislocations dans les parois.

La figure V.20 décrit les réponses macroscopique et moyennes par phase (σ_{eq}) pour l'essai 1 suivant les valeurs de α_{HH} .

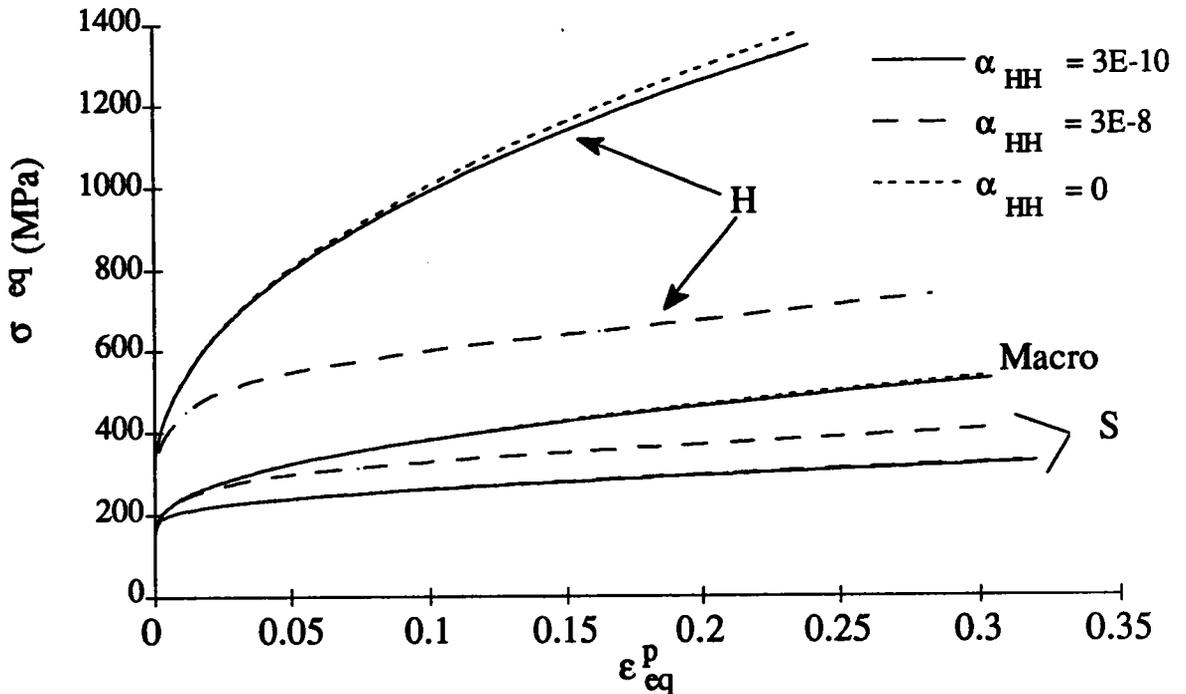


Figure V.20: Influence de α_{HH} sur le comportement du polycristal.

Les effets sont très importants (liés aux grandes variations imposées des paramètres α_{HH}) sur la réponse en moyenne des phases H, donc sur le polycristal. De même, on note des effets sur le coefficient de Lankford (figure A2.19) qui sont à relier à l'anisotropie du phénomène d'annihilation, qui s'opère uniquement sur les systèmes actifs (cf loi d'évolution des densités de dislocations en (III.17)) dans le cadre de cette modélisation.

L'étude de l'influence des paramètres d'écroutissage confirme bien leur importance, d'où la nécessité d'une évaluation réaliste de ces paramètres lors de la mise en œuvre du formalisme basé sur un comportement microscopique non local.

3.2.5 Influence de la fraction volumique de cellules

Vu l'importance de ce paramètre sur la réponse macroscopique, deux démarches de comparaison sont adoptées, la première basée sur les paramètres

obtenus lors du lissage [$f=0.8$], restant inchangés hormis la fraction volumique de cellules qui prend les trois valeurs 0.75, 0.8 et 0.85, la seconde étant basée sur une comparaison des différents résultats micro- et macroscopiques dans le cas de lissages effectués pour [$f=0.75$], [$f=0.8$] et [$f=0.85$], donc à comportement macroscopique identique, cf schéma V.1.

a) Comparaison des résultats pour le lissage [$f = 0.8$]

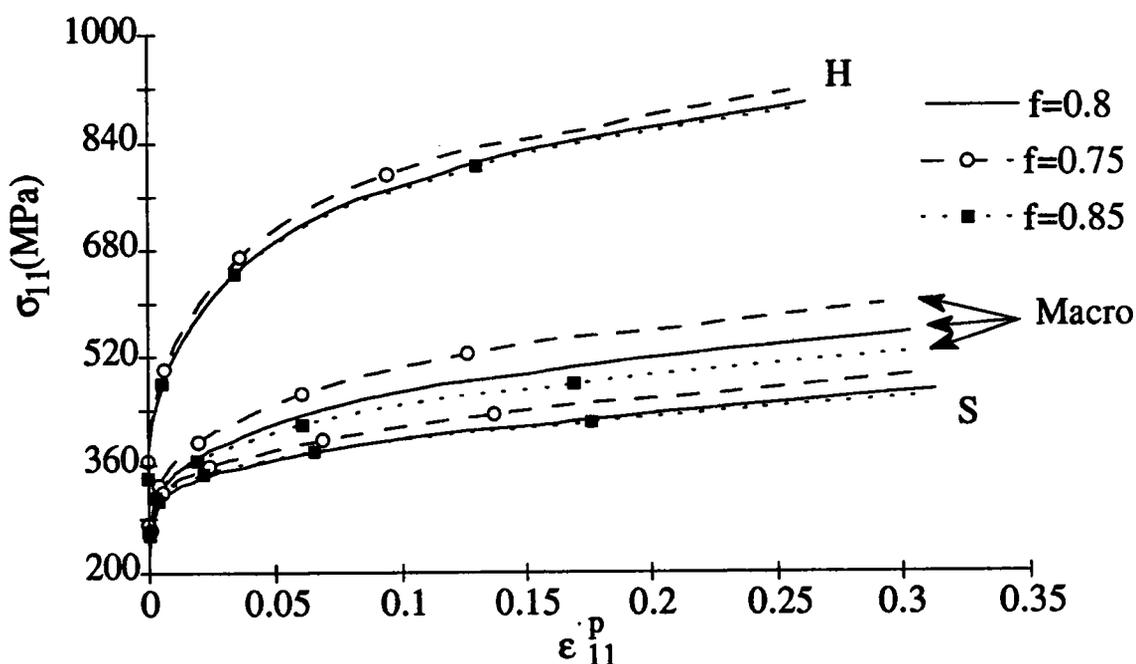


Figure V.21 : Influence de la fraction volumique sur les réponses macroscopique et moyennes par phase pour l'essai 1, les autres paramètres restant inchangés.

La figure V.21 décrit l'influence de la fraction volumique sur les réponses macroscopique et moyennes par phase (composante σ_{11}), les autres paramètres du matériau restant inchangés et correspondant au lissage [$f=0.8$].

Un effet important est constaté sur les réponses macroscopique et moyennes par phase, le matériau étant plus dur pour une fraction volumique de cellules

plus faible. Par contre, les effets sur les réponses moyennes par phase sont moindres.

b) Comparaison des résultats à lissage constant

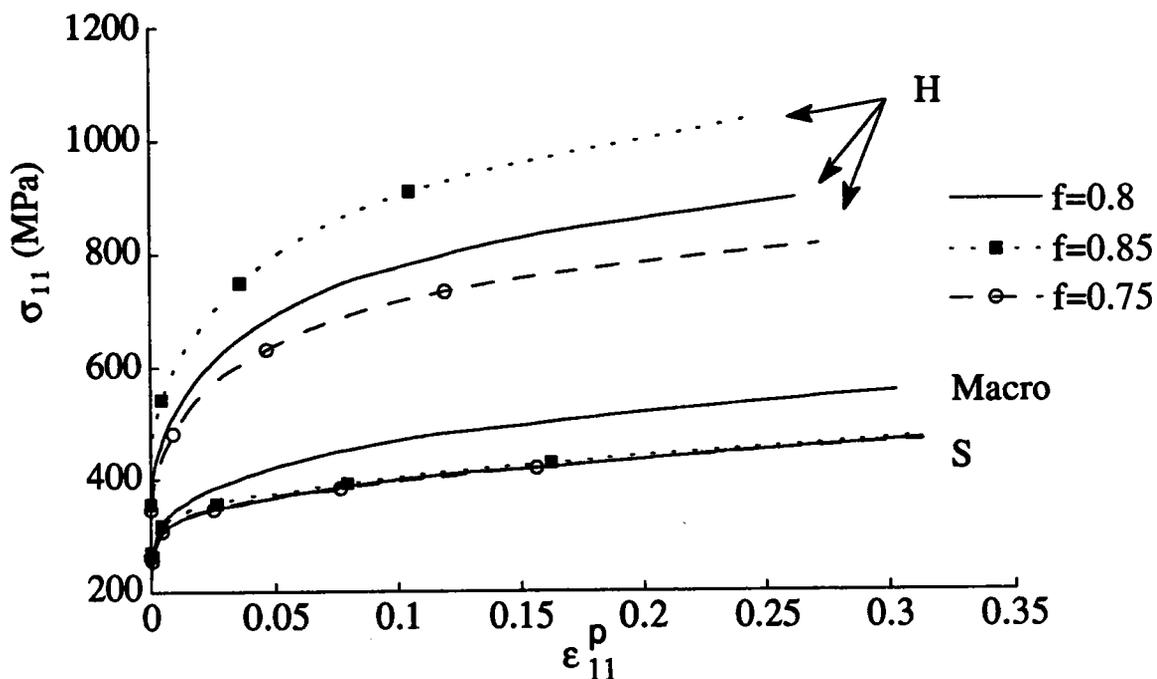


Figure V.22 : Influence de la fraction volumique sur les réponses macroscopique et moyennes par phase, à lissage macroscopique constant

La figure V.22 décrit les réponses macroscopique et moyennes par phase (composante σ_{11}) pour le polycristal soumis à l'essai de traction dénommé essai 1, les paramètres du matériau ayant été modifiés pour assurer une réponse macroscopique identique dans les trois cas [$f=0.75$], [$f=0.8$] et [$f=0.85$].

Le paramètre α_{SS} n'ayant pas été modifié, on ne constate pas d'évolution de la réponse en moyenne des phases S. Par contre, les effets sont beaucoup plus prononcés en ce qui concerne la réponse des phases H. Le matériau étant intrinsèquement plus dur pour une fraction volumique de cellules plus faible,

la contribution des phases H est diminuée pour assurer une réponse macroscopique identique.

L'évolution du coefficient de Lankford est donnée en A2.20. Des effets non négligeables sont observés avec un coefficient r plus faible pour $f = 0.85$.

D'un point de vue microscopique, la figure A2.21 décrit les distributions de contraintes résiduelles d'ordre deux (composante σ_{11}), dans le plan (σ, ε) après l'essai 1, obtenues pour les trois lissages étudiés.

En conclusion, la fraction volumique de cellules a donc un effet évident et important au niveau des résultats macroscopiques.

3.2.6 Synthèse

Les résultats macroscopiques et d'ordre deux, comparables entre les deux formalismes, local et non local, accessibles après un essai de traction, sont très similaires, hormis le problème (temporaire) du coefficient de Lankford provenant d'une description restreinte des systèmes de glissement dans le cas non local.

- La forme des cellules joue un rôle important sur la répartition des contraintes internes entre phases, mais moins sur la réponse macroscopique du polycristal. Les niveaux très importants de contrainte (équivalente) atteints dans les parois sont comparables qualitativement avec les données expérimentales disponibles.

- La texture cristallographique initiale n'entraîne pas d'effet nouveau dans le cas d'une description de l'hétérogénéisation intragranulaire.

- Les paramètres d'écroûissage ainsi que la fraction volumique de cellules sont les paramètres les plus sensibles, ayant la plus forte influence sur le comportement du matériau. Ainsi à lissage macroscopique identique, les contraintes internes dans les parois sont plus importantes dans le cas d'une forte fraction volumique (i.e. quand les parois sont fines et bien définies).

Une forte hétérogénéité intragranulaire est préjudiciable à la ductilité du matériau. Un premier constat peut donc être exprimé : afin d'obtenir un minimum de contraintes internes dans les grains, il est préférable que ceux-ci présentent des parois épaisses et diffuses (correspondant à une fraction volumique de cellules faible).

3.3 Trajets complexes

L'étude paramétrique effectuée dans le paragraphe précédent a mis en évidence un fort état de contraintes résiduelles (traction dans les parois, compression à l'intérieur des cellules) dans les grains, qui peut être décrit par le formalisme non local proposé dans ce travail.

Les conséquences d'un tel état de contraintes internes se font sentir lorsque le matériau subit un trajet de chargement complexe où la redistribution des contraintes internes, qui constituent la mémoire de l'histoire thermomécanique du matériau, a des répercussions sur le comportement macroscopique.

Des simulations d'essais de traction-compression sont effectuées afin de décrire l'influence du formalisme utilisé sur l'effet Bauschinger en compression, de même que des calculs de surfaces de plasticité après prédéformation.

Le matériau numérique correspondant au cas non local est celui défini par le lissage [f=0.8], cf schéma V.1.

3.3.1 Essais de traction-compression

La figure V.23 décrit l'évolution des réponses macroscopique et moyennes par phase au cours d'un essai de traction-compression, après une prédéformation en traction de 5%, dans le cas du formalisme non local.

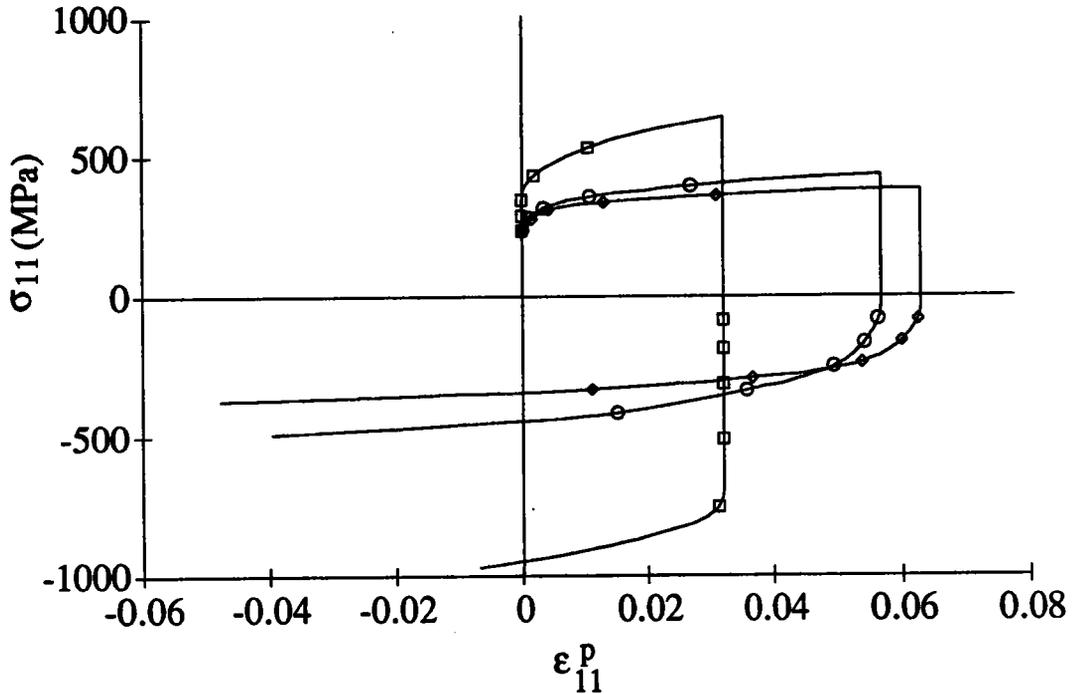


Figure V.23 : Essai de traction-compression. Formalisme non local.

Après l'essai de traction et la décharge élastique consécutive, les parois (i.e. les zones H) se retrouvent en fort état de traction résiduelle, alors que l'intérieur des cellules (i.e. les zones S) se trouvent en état de compression, du fait des propriétés du champ autoéquilibré des contraintes internes.

Ainsi lors du changement de trajet, les zones S subissent une plastification rapide, favorisée par l'orientation des contraintes résiduelles de compression initiées par la traction macroscopique. Cette phase est appelée stade de microplastificité, responsable de l'effet Bauschinger, qui traduit la dissymétrie du domaine élastique en traction-compression. Dans une seconde phase appelée stade de macroplastificité, les zones H s'activent aussi.

Ces phénomènes sont différés dans chaque grain du fait des désorientations dues à la texture cristallographique, effet typiquement polycristallin.

La figure V.24 montre l'évolution comparée des réponses macroscopiques en traction-compression obtenues avec les deux formalismes, pour une prédéformation en traction de 5%.

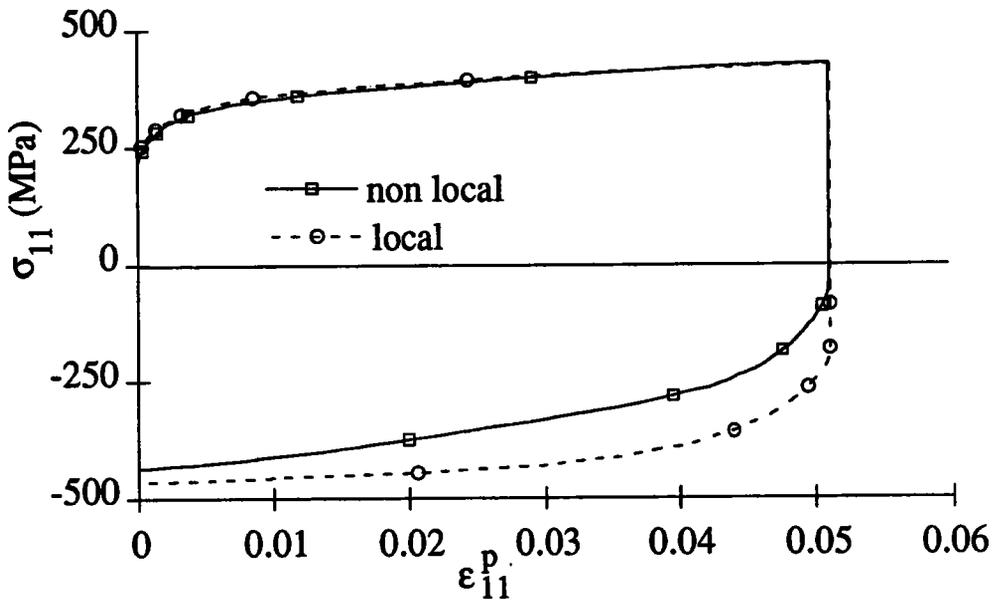


Figure V.24 : Influence du formalisme sur la réponse en traction-compression.

L'effet Bauschinger est plus prononcé dans le cas du formalisme non local, du fait du niveau élevé de contraintes internes. Ainsi, les zones S, peu durcissables (d'où une faible limite d'écoulement), qui se trouvent donc en état de compression résiduelle important, initient la plastification très rapidement dans le cas non local. Dans le cas local, seules interviennent les contraintes d'ordre deux (de faible amplitude) qui oscillent autour de zéro à l'équilibre et sont donc moins bien orientées pour débiter la plastification.

Les figures A2.22 et A2.23 décrivent les réponses macroscopiques pour les deux formulations, composantes ($\sigma^{11}, \varepsilon^{P11}$) pour la traction, composantes ($-\sigma^{11}, -\varepsilon^{P11}$) pour la compression. Elles montrent bien que le domaine élastique est plus important dans le cas local.

Ce phénomène est confirmé sur la figure V.25 qui décrit l'évolution de l'effet Bauschinger, traduit par la limite d'écoulement lors de la compression pour deux seuils de déformation plastique 0.02% et 0.2%, en fonction de la prédéformation en traction, pour les deux formalismes. De plus cette figure décrit la courbe de consolidation en traction, à titre de comparaison.

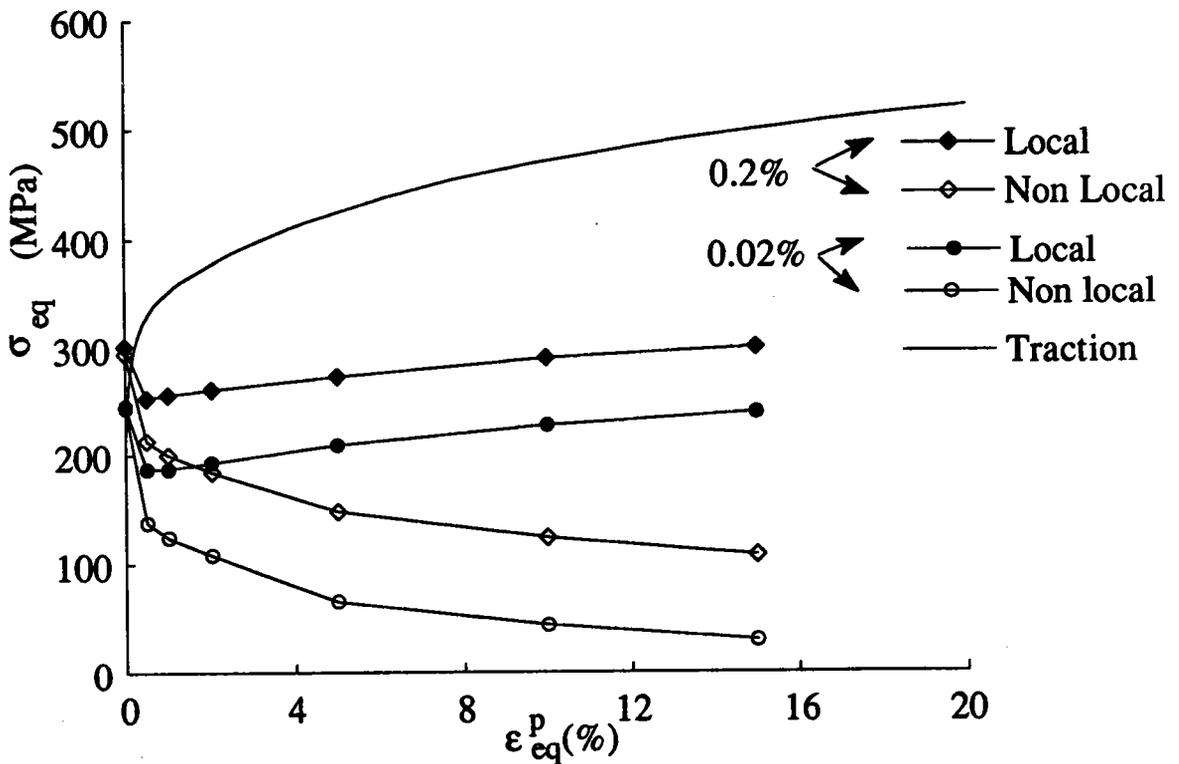


Figure V.25 : Limite d'écoulement en traction - limites d'écoulement en compression pour des seuils de plasticité de 0.02% et 0.2% - Cas local et non local.

Dans les deux cas, une chute importante de la limite d'écoulement en compression est constatée pour les faibles prédéformations ($\leq 1\%$). Pour des

prédéformations en traction plus importantes, les évolutions sont plus faibles mais contrastées pour les deux formalismes.

Une augmentation progressive de la limite d'écoulement en compression est alors constatée dans le cas local (pour les deux seuils de plasticité de 0.02% et 0.2%). Toutefois les valeurs obtenues restent inférieures aux contraintes d'écoulements maximales obtenues pour les prédéformations correspondantes mais restent de l'ordre, voire supérieures à la limite d'élasticité initiale du matériau.

Les résultats obtenus dans le cas local sont à comparer aux valeurs expérimentales [SV86] présentées en A2.24a dans les cas du cuivre pur.

Ces évolutions sont liées au faible niveau des contraintes résiduelles obtenues après simulation sur l'acier avec CRYSTAL, d'une part, et obtenues avec le cuivre pur dans le cas expérimental, d'autre part.

Par contre, une diminution de la limite d'écoulement en compression, avec une saturation progressive, est constatée dans le cas non local. L'effet Bauschinger est très important, cette valeur étant nettement inférieure à la limite d'écoulement atteinte en traction, pour un niveau de prédéformation donné.

Comme cela a été vu précédemment, ce phénomène est lié aux fortes contraintes de traction dans les parois qui conduisent, du fait des contraintes internes auto-équilibrées, à un état de compression résiduelle dans l'intérieur des cellules. Ainsi, plus le niveau de contraintes dans les parois est élevé, plus la plastification s'initie pour des faibles niveaux de contrainte en compression. Ce type d'évolution peut directement être comparé (qualitativement bien entendu) avec le cas de l'alliage Cu-Sn présenté en A2.24b. Les résultats obtenus dans le cas non local sont donc assez similaires à ceux attendus dans le cas d'un réel biphasé; ceci provient de la simplicité de la topologie cellulaire

choisie, supposée constante au cours de la déformation plastique, qui accentue les effets cinématiques.

D'autre part, la saturation lente obtenue pour les limites d'écoulement en compression peut s'expliquer par la prise en compte probablement trop faible de l'annihilation des dislocations dans les parois dans le cadre de cette simulation. En effet, l'annihilation des dislocations a un effet direct sur la densité locale de celles-ci dans les parois, d'où les conséquences en ce qui concerne le niveau des contraintes.

3.3.2 Séquences Double Réduction + Traction (ou Rétreint)

Un phénomène remarquable, qui montre combien il est important de maîtriser la ductilité des matériaux, est observé systématiquement pour les aciers lors de la séquence suivante :

- Une tôle d'acier laminée à froid puis recuite (conduisant, entre autres, à une réduction voire à une élimination des contraintes résiduelles) subit un premier trajet dit de Double Réduction, qui correspond à un nouveau laminage dans la même direction, de l'ordre de 30% de déformation équivalente.
- Si l'on applique à cette tôle relaminée un second trajet de rétreint (caractéristique de l'emboutissage), de grandes déformations plastiques sont atteintes ($\geq 30\%$) sans rencontrer de problème de ductilité.
- Par contre si l'on applique à la tôle ayant subi une Double Réduction un trajet de traction, l'éprouvette se rompt instantanément (pour des déformations inférieures à 2%).

Ce phénomène d'instabilité précoce dans un cas, et fortement retardé dans l'autre cas, n'est pas pris en compte à l'heure actuelle dans des modèles de description du comportement des matériaux, tout du moins à partir de considérations réellement physiques.

Tel est l'enjeu d'une modélisation basée sur des phénomènes physiques à l'échelle microscopique.

Bien évidemment, ce travail ne peut prétendre à introduire un quelconque critère de description d'instabilités, vu les simplifications effectuées dans la topologie de la structure cellulaire. Néanmoins, il est intéressant de constater les différents effets obtenus lors de la simulation d'un tel trajet séquentiel avec la formulation non locale développée dans ce chapitre et de la comparer aux résultats obtenus avec CRYSTAL.

La simulation non locale est effectuée avec une sélection de 500 grains représentant l'acier texturé SOLLAC, afin de lisser la courbe expérimentale déjà vue précédemment. Deux valeurs différentes des paramètres ($\alpha_{HH}=0$ et $\alpha_{HH}=3.0 \cdot 10^{-8}$) sont utilisées afin de montrer les effets dus à l'annihilation des dislocations sur le comportement du matériau.

Les figures A2.25 à A2.27 représentent les réponses macroscopiques pour la Double Réduction, ainsi que pour les deux trajets susceptibles d'intervenir : la traction ou le rétreint, respectivement pour le cas non local [$\alpha_{HH} = 0$], le cas non local [$\alpha_{HH} = 3.0 \cdot 10^{-8}$] et le cas local.

Aucun des formalismes n'est capable de décrire une quelconque perte de ductilité lors de l'essai de traction. Par contre, dans les trois cas, des différences marquées interviennent suivant que la traction ou le rétreint intervienne en second trajet. La réponse macroscopique (contrainte équivalente) est plus dure en traction qu'en rétreint, ceci provient de l'anisotropie du domaine d'élasticité induit après la double réduction.

Dans les deux cas non locaux, on observe, à l'image de la courbe de traction expérimentale lissée identiquement dans les deux cas, l'influence des paramètres d'annihilation.

Ainsi la présence d'annihilation dans les parois ($\alpha_{HH} = 3.0 \cdot 10^{-8}$) induit un écrasement progressif, d'une part de la courbe de consolidation correspondant à la Double Réduction, puis d'autre part, des réponses ultérieures en traction ou en rétreint.

Ce phénomène confirme bien l'importance de la prise en compte des phénomènes d'annihilation, fortement dépendants du trajet imposé du fait de la forte anisotropie de leur action, et, par conséquent, la difficulté à introduire quantitativement ces effets dans un modèle.

3.3.3 Surfaces de plasticité après prédéformation

Les surfaces de plasticité présentées ici sont calculées, dans le cas non local, pour un lissage de courbe expérimentale de traction [$f=0.8$] cf schéma V.1, dans le cas de l'acier texturé SOLLAC et dans le cas local, pour le même acier.

a) Prédéformation en rétreint

Ce mode de déformation est, avec l'expansion équi-biaxiale, l'un des deux modes majeurs apparaissant lors de l'emboutissage d'un flanc de tôle.

D'un point de vue mécanique, ce trajet correspond approximativement aux contraintes imposées de ce type [R94]:

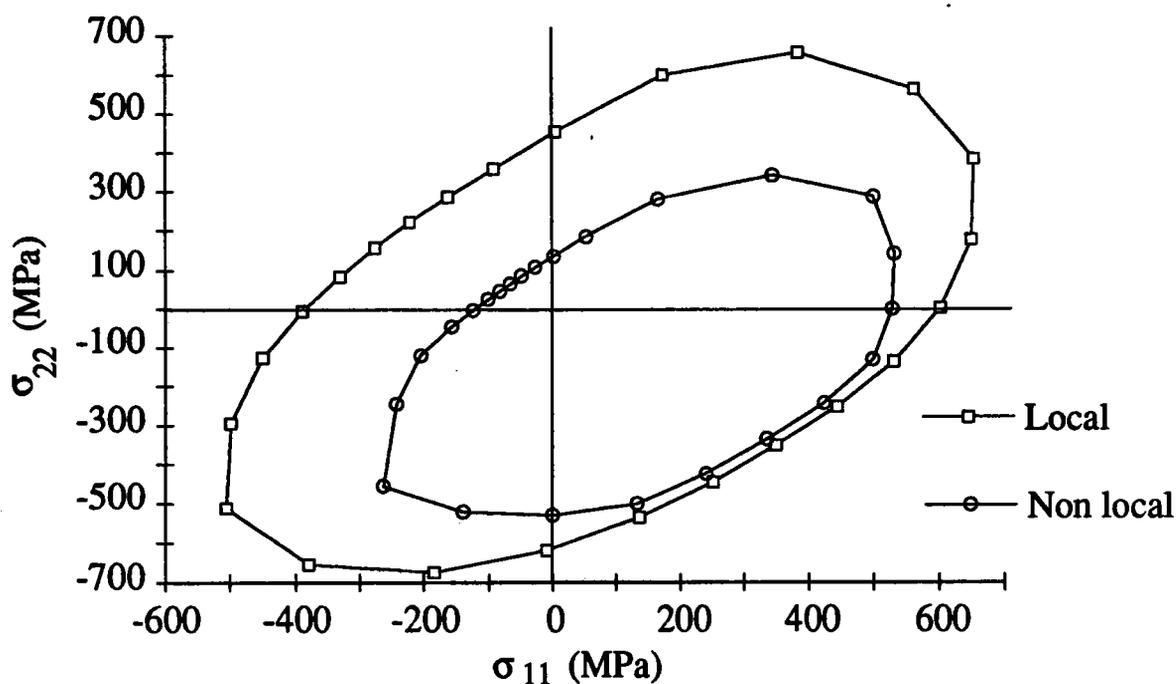


Figure V.26 : Surfaces de plasticité à 0.2% après un rétreint de 50% calculées avec les deux formalismes.

La figure V.26 compare, à seuil de plasticité identique de 0.2%, les surfaces obtenues avec les deux formalismes. De formes identiques, ces surfaces correspondent à des domaines élastiques de tailles différentes. En effet, la surface calculée par CRYSTAL présente un gonflement très prononcé par rapport à celle obtenue dans le cas non local et est de plus, quasiment centrée par rapport à l'origine.

Le début de plasticité dans le cas non local est déterminé par l'écoulement des phases S, peu durcissables, d'où une taille peu importante du domaine élastique, contrairement au cas de la description homogène des grains.

Ainsi le formalisme local induit des caractéristiques d'écrouissage plutôt de type isotrope alors que le formalisme non local entraîne un écrouissage de type cinématique (avec translation des surfaces).

Ces phénomènes sont liés aux contraintes internes, décrites différemment par les deux formalismes.

En fait, les données expérimentales indiquent plutôt un effet cinématique [I79], d'où la plus grande validité qualitative de l'approche non locale à ce niveau, du fait de l'introduction de contraintes internes (du troisième ordre) plus élevé que dans le cas local.

Les figures A2.28a et A2.28b décrivent les surfaces de plasticité obtenues après le rétreint, pour les deux seuils de plasticité 0.02% et 0.2%, avec les deux approches. Les évolutions sont, dans les deux cas, très similaires.

b) Prédéformations en traction

Un niveau de prédéformation en traction de 15% a été prescrit. Le matériau est l'acier texturé SOLLAC recréé numériquement avec les deux formalismes.

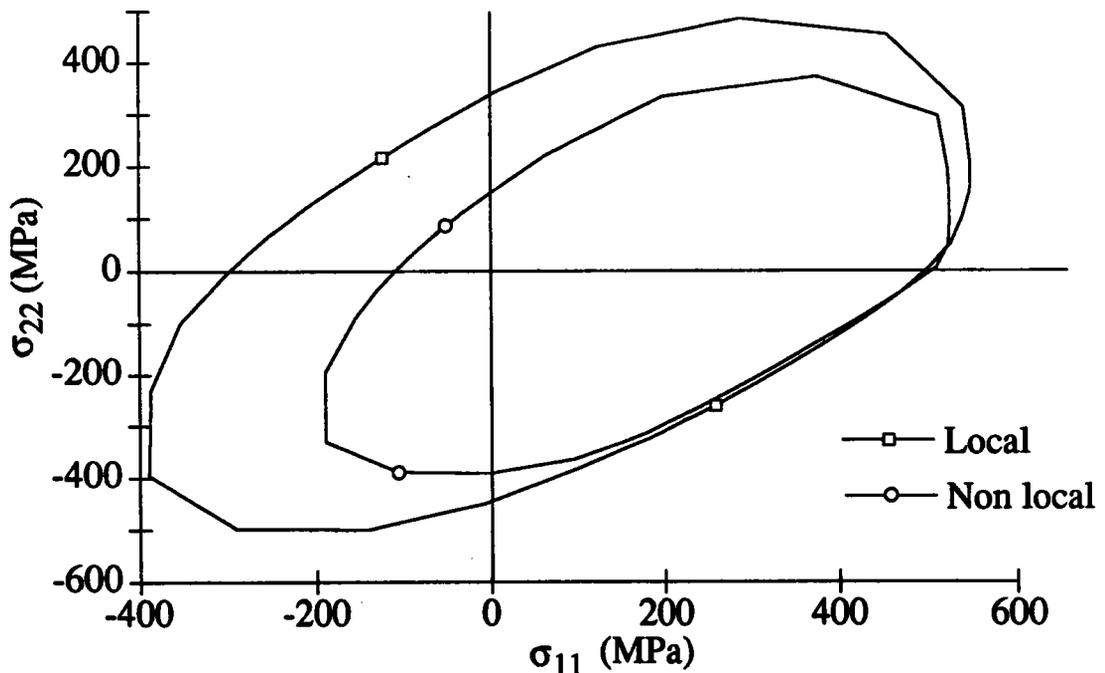


Figure V.27 : Surfaces de plasticité à 0.2% après 15% de traction avec les deux formalismes.

La figure V.27 compare les surfaces de plasticité obtenues après une prédéformation de 15% en traction, pour un même seuil de plasticité de 0.2%, avec les deux formalismes.

Les mêmes observations que précédemment sont faites en ce qui concerne le fort gonflement de la surface dans le cas local, et d'un déplacement, dans le sens du chargement, de celle-ci dans le cas non local.

Les deux surfaces se superposent dans la section $[285^\circ, 30^\circ]$.

Les figures A2.29a et A2.29b représentent les surfaces de plasticité obtenues après une prédéformation de 15% en traction, pour des seuils de plasticité de 0.02% et 0.2%, respectivement dans les cas non locaux et locaux.

Les changements de formes sont très similaires pour les deux formalismes, et très prononcés. Ceci est classique et directement lié à la redistribution des contraintes internes, importante aux tout premiers instants de la plasticité.

On retrouve un point anguleux dans la direction d'écoulement de traction avec les deux formalismes. Il est toutefois beaucoup plus marqué dans le cas non local (conformément aux données expérimentales [I79]), et s'estompe progressivement au cours de la plastification.

c) Conclusions

L'introduction de propriétés non locales au niveau du comportement des grains induit de fortes contraintes internes d'ordre trois. Ce phénomène, qui n'est pas pris en compte dans le formalisme basé sur une description uniforme

des grains, a évidemment des conséquences sur les surfaces de plasticité calculées après un préchargement.

Ainsi, le formalisme non local introduit un fort aspect cinématique de l'écrouissage (d'où des translations de surfaces avec le taux de prédéformation) alors que la description locale induit de forts gonflements des surfaces (aspect isotrope).

Toutefois, l'évolution de l'allure des surfaces est similaire avec les deux formulations avec, par conséquent, une bonne représentation de l'anisotropie induite par les contraintes internes ainsi que des points anguleux susceptibles d'apparaître.

Le fort gonflement des surfaces de charge, entraîné par une description locale et uniforme des grains, n'est pas généralement constaté expérimentalement [I79]. En effet, on a dans ce cas une évolution plus "cinématique" des surfaces avec la prédéformation, ce qui est retrouvé avec l'introduction du formalisme non local au niveau des grains.

Cette validation du formalisme non local reste bien évidemment qualitative, l'intérêt consiste en l'effet positif de l'introduction d'un niveau élevé de contraintes internes (d'ordre trois).

3.4 Application du formalisme non local à l'évaluation des contraintes internes

3.4.1 Evaluation des contraintes résiduelles d'ordre deux

L'évaluation des contraintes résiduelles causées par l'incompatibilité plastique de grain à grain (contraintes d'ordre deux) peut s'effectuer soit expérimentalement, par l'intermédiaire de la diffraction des rayons X ou des neutrons, soit de modèles théoriques comme le schéma autocohérent.

Force est de constater que les résultats obtenus à partir des différents modèles ne peuvent être comparés directement avec les résultats expérimentaux.

Plusieurs raisons expliquent ce phénomène :

- Les fonctions de Green utilisées par le modèle autocohérent correspondent à un milieu infini, alors que, dans le cas de la diffraction des rayons X par exemple, la faible pénétration de l'irradiation nécessiterait la prise en compte des conditions aux limites à la surface de l'échantillon.
- Les contraintes macroscopiques obtenues après décharge élastique dans le polycristal modèle sont nulles, ce qui n'est pas le cas pour la diffraction des rayons X, où le volume irradié correspond à une couche fine (quelques dizaines de μm au maximum) à la surface de l'échantillon avec un champ de contraintes d'ordre un non autoéquilibré (état de compression en surface dans le cas d'un laminage ou d'un grenailage par exemple).
- Lors de mesures d'échantillons fortement texturés, il est impossible d'obtenir suffisamment de points de mesure dans certaines zones de l'espace des orientations (φ , ψ), d'où un problème de fiabilité de ces mesures.
- De même, la discrétisation de la distribution continue des orientations caractérisant le matériau réel en un nombre de grains fini, nécessaire à la modélisation, ne permet pas de décrire tout l'espace des orientations.

- Lors de l'extrapolation des résultats expérimentaux, l'hypothèse de contraintes planes est souvent utilisée en vue de simplifier les calculs, dans le cas de la diffraction aux rayons X à faible pénétration. L'état des contraintes obtenu avec le schéma autocohérent est, par contre, triaxé.

Par conséquent, A. Baczmanski (Cracovie, Pologne) [B92] a proposé une méthode qui utilise seulement les informations qualitatives de ces modèles, qui correspondent à la forme de l'évolution des déformations élastiques, duales aux contraintes résiduelles d'ordre deux, dans l'espace des orientations.

Cette méthode est décrite plus en détail en annexe 3.

La figure V.28 montre schématiquement une comparaison directe entre expérience et simulation, réalisée par J. Krier [K93] après un essai de traction de 10% sur un acier IFHR 400 SOLLAC fortement texturé, présentant la distribution des déformations élastiques résiduelles dans l'espace des orientations.

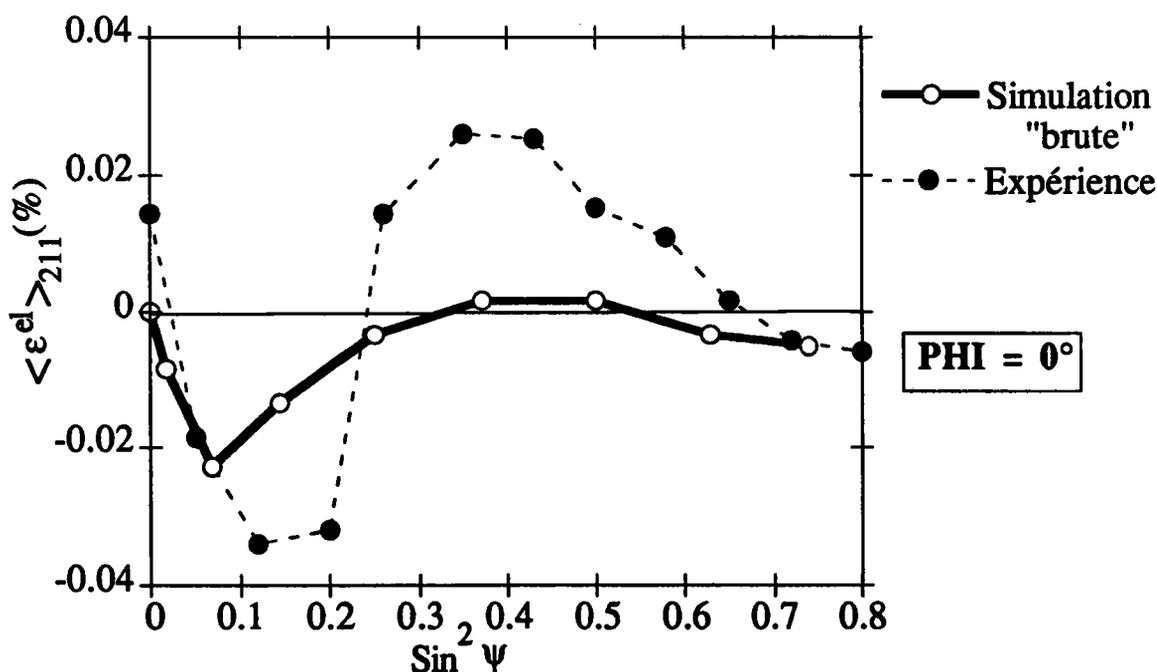


Figure V.28 : Comparaison directe entre expérience et simulations- Déformations élastiques résiduelles sur les plans (211) en fonction de l'orientation de mesure

Les oscillations sont bien représentées par le modèle, mais leur amplitude reste trop importantes par rapport aux mesures expérimentales.

La démarche développée par Baczmanski est synthétisée sur une seule courbe sur la figure V.29 qui correspond à l'état résiduel de contraintes après un essai de laminage jusqu'à 40% de déformation plastique, au travers de la distribution des distances interréticulaires sur les plans (211) dans l'espace (φ , ψ).

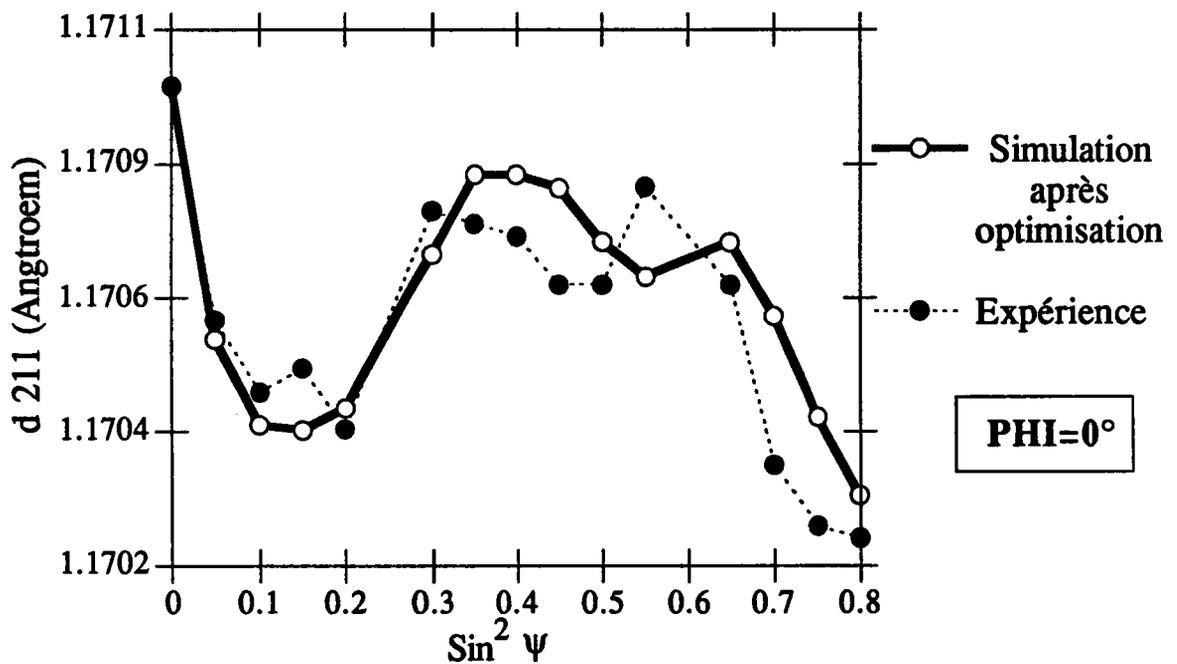


Figure V.29: Lissage par la méthode des moindres carrés.

Ainsi, à l'aide d'une méthode des moindres carrés pour différents angles de mesure (φ , ψ), l'état réel des contraintes d'ordres un et deux du matériau est obtenu à partir de plusieurs mesures expérimentales des distances interréticulaires spécifiques à une famille de plans (hkl), afin d'améliorer la statistique, ainsi que de la distribution des contraintes d'ordre deux obtenues par simulation.

Une comparaison entre des résultats obtenus avec le code polycristallin **CRYSTAL**, basé sur un comportement local et uniforme des grains, le schéma autocohérent non local développé dans ce chapitre et des résultats expérimentaux obtenus par A. Baczanski, à l'aide d'un logiciel développé par ce dernier a été effectuée.

Le matériau, un acier Ultra Bas Carbone, a subi un laminage de 96%.

L'évolution des distances interréticulaires $\langle d \rangle_{211}$ en fonction de $\sin^2 \psi$, paramétrée à différents φ , a été obtenue expérimentalement.

Les simulations effectuées dans les cas local et non local portent sur un matériau CC initialement isotrope de 2000 orientations. Le matériau numérique est recréé, comme précédemment, dans les deux cas à partir d'un essai de traction par lissage de courbes.

Les paramètres du matériau nécessaires pour chaque modèle étant déterminés, un essai de laminage est simulé dans les deux cas avec l'écoulement imposé suivant [R94] :

$$\begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma \end{pmatrix}$$

Le critère d'arrêt est fixé à 40% de déformation plastique, inférieur aux valeurs expérimentales. En effet, les contraintes internes du second ordre évoluent peu aux grandes déformations plastiques.

Un choix de cellules sphériques a été adopté, ainsi qu'une fraction volumique de cellules de 80%.

La figure V.30 décrit les distributions de contraintes résiduelles d'ordre deux (en moyenne sur les grains) obtenues après décharge élastique à la suite du laminage, par les deux formulations.

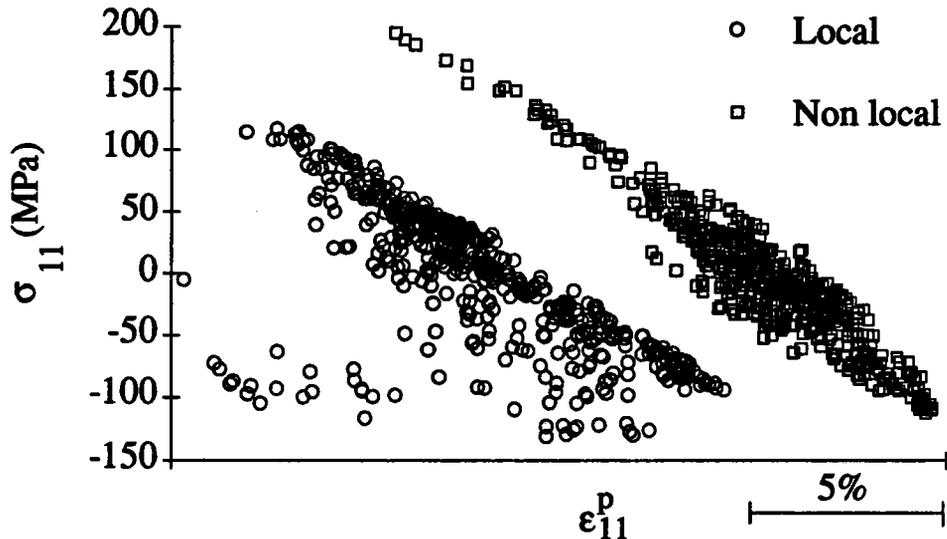


Figure V.30 : Distribution des contraintes d'ordre 2 simulées dans le plan (σ , ϵ^P) (cas local et non local).

Le nuage obtenu avec le formalisme local classique résulte du calcul direct des contraintes supposées uniformes dans les grains. Par contre, le nuage obtenu avec le formalisme non local résulte d'une opération de moyenne effectuée à partir des contraintes d'ordre trois calculées dans chaque phase des grains.

Les deux distributions sont comparables, tant au niveau des contraintes que de la rotation des nuages, liée à la désorientation des grains.

Les courbes V.31a, b, c, d décrivent la distribution des contraintes internes dans l'espace des orientations (φ , ψ) par l'intermédiaire de la répartition des distances interréticulaires $\langle d \rangle_{211}$, d'après la méthode développée par A. Baczmanski, en fonction de $\sin^2 \psi$ avec, respectivement, le paramétrage en φ suivant ($\varphi = 0^\circ$, 30° , 60° et 90°).

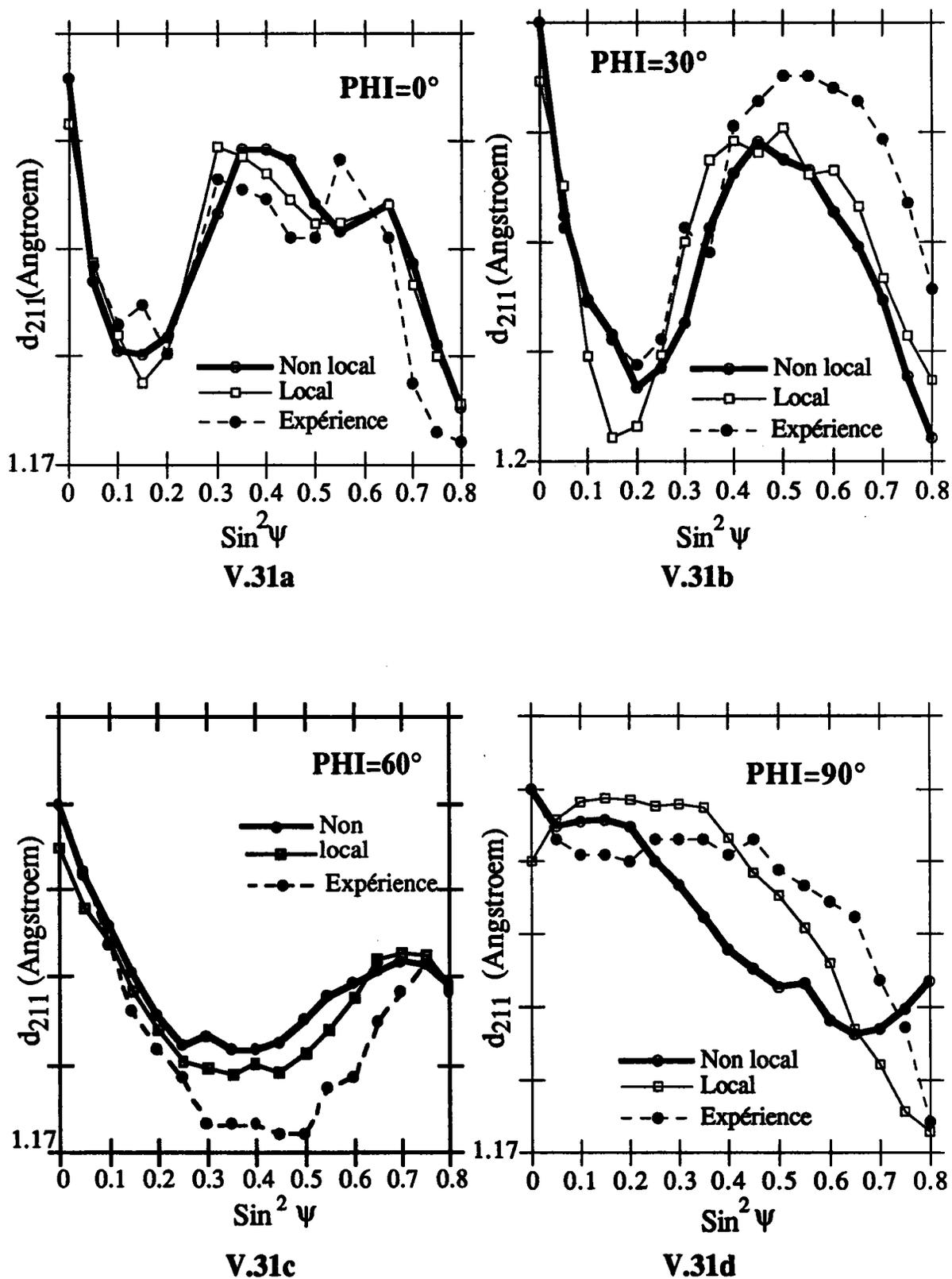


Figure V.31 : Comparaison des résultats expérimentaux et simulés dans l'espace (φ, ψ) après lissage par la méthode des moindres carrés- Etat résiduel des distances interréticulaires après le laminage.

A partir de la distribution brute des contraintes d'ordre deux obtenue par les simulations, les répartitions des $\langle d \rangle_{211}$ correspondantes sont optimisées par rapport aux données expérimentales, par une méthode des moindres carrés, en fonction de trois paramètres inconnus qui sont :

- le tenseur des contraintes du premier ordre σ^I , traduisant l'état reconstitué de contraintes résiduelles expérimentales,
- un facteur q décrivant la différence d'intensité des contraintes d'ordre deux obtenues par simulation et lors de l'expérience,
- d_0 , l'espace interréticulaire du matériau non contraint recalculé.

Ainsi l'allure générale de l'évolution des $\langle d \rangle_{211}$ expérimentaux en fonction des orientations est retrouvée par les simulations, mise à part la faible divergence obtenue dans le cas non local pour les $\sin^2 \psi$ élevés sur la figure V.31d, qui reste inexplicée, mais nuit tout de même à la précision des résultats dans le cas non local.

Cette bonne corrélation traduit la distribution cohérente des contraintes résiduelles du second ordre, dans l'espace des orientations, obtenues par utilisation du schéma autocohérent, déjà validé par ailleurs à ce propos [K93], l'introduction d'une loi de comportement cristalline basée sur la non localité de l'écroutissage n'introduisant pas de perturbation.

Un meilleur lissage peut être obtenu par augmentation du nombre d'orientations, ce qui améliore la statistique de la représentation du polycristal.

Le tableau V.1 décrit les valeurs des paramètres σ^I , q et d_0 optimisant le lissage, obtenus pour les deux simulations.

	Simulation autocohérente : Comportement uniforme des grains	Simulation autocohérente : Description biphasée non locale des grains
Σ_{11} (MPa)	- 78.15	- 99.27
Σ_{22} (MPa)	- 44.41	- 44.25
Σ_{12} (MPa)	- 0.83	- 13.64
q (-)	0.67	0.57
d_0 (Å)	1.170 652	1.170 684

Tableau V.1 : Valeurs des différents paramètres optimisant le lissage par les moindres carrés.

Ainsi un état macroscopique de compression est retrouvé pour optimiser le lissage des données expérimentales. Ce résultat est cohérent avec l'expérience de diffraction par rayons X effectuée, avec l'irradiation d'une très fine couche du matériau, en surface (quelques dizaines de microns). Une expérience de diffraction des neutrons aurait conduit à un état de contraintes du premier ordre nul, l'irradiation portant sur une grande distance (plusieurs millimètres voire plusieurs centimètres) d'où la possibilité d'irradier toute l'épaisseur de l'échantillon. Les résultats sont proches pour les deux simulations.

Le niveau des contraintes d'ordre deux obtenues à l'aide des simulations est 1,5 fois plus élevé ($q = 0.67$) dans le cas local, et 1,75 fois plus élevé ($q = 0.57$) dans le cas non local, par rapport à l'expérience, phénomène déjà constaté par ailleurs, et lié, entre autres, aux hypothèses rappelées plus haut.

Cette étude a porté sur les contraintes résiduelles d'ordre deux. Le problème est de savoir si ce sont vraiment ces contraintes, résultant de moyennes à un niveau plus petit, qui contribuent à la diffraction. Il serait judicieux d'effectuer le même type de comparaison en se basant directement sur les effets d'ordre trois.

En conclusion, les deux modèles permettent une bonne description de l'état résiduel de contraintes dans le matériau à la fois dans l'espace (σ, ϵ^p) et dans l'espace (φ, ψ) .

3.4.2 Obtention de raies de diffraction

Une application du formalisme non local développé dans ce travail, décrit à l'échelle de la structure cellulaire de dislocations, peut être la reconstruction des raies de diffraction à partir de l'état des contraintes simulé par le modèle.

Ceci constitue le problème inverse du cas classique, où l'expérimentateur déduit des raies de diffraction mesurées l'état de contraintes résiduelles du matériau, par l'intermédiaire de méthodes basées sur un calcul de largeur de raie à mi-hauteur, voire de largeur intégrale ou à l'aide d'une analyse de Fourier.

L'objectif de cette étude est de mieux comprendre les effets d'asymétrie des raies de diffraction, déjà observés par Ungar et al. [UMRW84] lors d'essais expérimentaux sur des monocristaux de cuivre présentant une structure cellulaire de dislocations marquée, ou lors de mesures individuelles sur des grains de polycristaux de cuivre [UBM93]. Leurs conclusions conduisent à une décomposition originale du pic asymétrique expérimental en deux contributions symétriques résultant de la diffraction, d'une part, de l'intérieur des cellules et d'autre part, des parois.

Ils en déduisent la fraction volumique de cellules, ainsi que le niveau des contraintes internes dans la structure cellulaire. Ces résultats sont cohérents avec le niveau de contraintes mesurées par microscopie électronique à transmission dans le même type de matériau [UMRW84].

Ce type de démarche repose sur une hypothèse forte selon laquelle les parois de dislocations contribuent à la diffraction. Ceci constitue, à l'heure actuelle, un débat largement ouvert pour les spécialistes de la diffraction.

En effet, le problème est de savoir si le milieu constituant les parois, perturbé par la présence de dislocations, possède des domaines cohérents de diffraction assez grands pour avoir une influence non négligeable au niveau de la raie de diffraction globale [W69].

Dans ce travail, s'intéressant à une description mécanique du comportement intragranulaire, l'hypothèse de participation des parois de dislocations à la diffraction est adoptée. De plus, le cas polycristallin est étudié, de façon qualitative. En effet, aucun résultat d'observation expérimentale de pics de diffraction dissymétrique, après déconvolution des effets expérimentaux, n'est disponible du fait de la très grande spécificité de l'équipement nécessaire, ainsi que du montage expérimental en résultant. De plus, il est à noter que l'effet polycristallin tend à noyer les informations disponibles à l'échelle des grains.

La méthodologie utilisée est présentée en annexe A4.

Dans chaque grain en position de diffracter, les deux phases contribuent à la diffraction proportionnellement à leur fraction volumique. Les deux phases se trouvant, lorsque le polycristal a une histoire thermomécanique, dans des états de contraintes différents, on a un décalage relatif des deux pics correspondants.

L'exemple d'un acier IF SOLLAC est présenté ici. Le matériau est reconstitué numériquement à partir d'un essai de traction avec 10000 orientations (pour atteindre un nombre maximum de grains en position de diffracter), dans le cas d'une modélisation autocohérente où chaque grain est considéré comme un biphasé non local.

Un pic de diffraction est reconstitué pour un matériau ayant subi une traction de 5%, pour un couple d'angles de mesure ($\psi = \varphi = \theta^\circ$). On s'intéresse à la famille de plans (310).

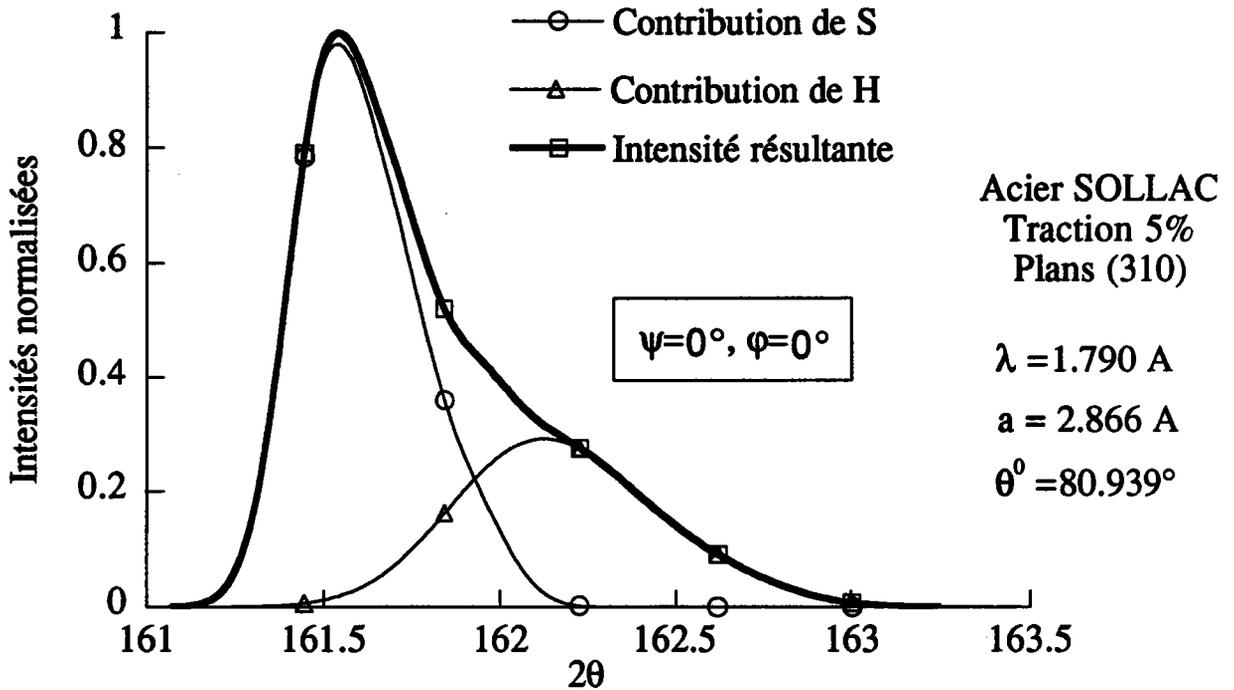


Figure V.32: Reconstruction d'un pic de diffraction à $\varphi = \psi = \theta^\circ$ après un essai de traction.

On observe un décalage relatif entre les deux contributions, par rapport au θ° initial. Ce phénomène est d'autant plus important que le niveau local de contraintes est important, d'où le décalage prononcé du pic H. Dans le cadre de cette étude, le pic de diffraction correspondant au matériau non contraint, est représenté par un pic centré en θ° , du fait de l'absence de contraintes internes dans le polycristal.

La conséquence de ce décalage est une asymétrisation de profil de raie.

L'information intéressante, concernant les niveaux élevés de contrainte, est stockée dans la queue de raie, où l'élargissement du pic est maximal. Ceci correspond en effet à la diffraction de domaines cohérents de petite taille, liés à la présence d'un grand nombre de défauts (comme les dislocations par exemple).

L'étude de la largeur de chaque contribution constitue, de même que les nuages dans le plan (σ , ϵ^P), un moyen d'observer l'évolution de l'état de contraintes dans chaque phase en moyenne. On a ainsi un gonflement du pic correspondant à la zone H au fur et à mesure de la déformation plastique.

Ces résultats correspondent à une description très simplifiée du phénomène de diffraction et n'apportent par conséquent que des informations qualitatives sur l'évolution des pics de diffraction en fonction de l'état de contrainte du matériau.

4) Conclusions

L'approche intégrale basée sur une théorie de champs, présentée au chapitre précédent, est difficile à mettre en œuvre si l'on désire prendre en compte le problème micromécanique à frontières évolutives correspondant à la mise en place de la structure cellulaire.

Une approche plus globale, de type énergétique, est proposée dans ce chapitre, afin de prendre en compte le problème d'évolution de la structure cellulaire. Le développement complet de cette approche ne fait pas l'objet de ce travail, qui constitue, en fait, la première étape dans la prise en compte de l'hétérogénéisation intragranulaire par une description biphasée "figée" du grain dans le polycristal.

Une modélisation partielle est donc proposée à partir de considérations topologiques déduites d'une description périodique de la structure cellulaire, qui montre des effets d'accommodation sélective du milieu intragranulaire liés à la topologie spécifique du problème micromécanique correspondant.

La loi de comportement du monocristal, supposée locale en moyenne, en est déduite ; ce qui permet d'obtenir le comportement du polycristal par l'intermédiaire d'un schéma autocohérent.

Cette approche donne lieu à diverses applications numériques.

Tout d'abord, une étude paramétrique montre les effets importants des paramètres les plus sensibles que sont la fraction volumique de cellules ainsi que les paramètres d'écrouissage, et, dans une moindre mesure, la forme des cellules (effets sûrement amoindris du fait du critère phénoménologique systématique de projection des cellules adopté).

L'étude de plusieurs trajets complexes montre les effets importants du niveau élevé de contraintes du troisième ordre sur l'écroissage cinématique, avec des conséquences lors d'essais 1D sur l'effet Bauschinger (dont l'évolution avec la prédéformation peut être comparée qualitativement avec l'expérience pour les deux formulations) et, lors d'essais 3D, par les translations des surfaces de plasticité dans le cas non local (plus conformes avec l'expérience), alors que le formalisme local, avec une description uniforme du comportement des grains, induit un fort écroissage isotrope (traduit par un gonflement important des surfaces de plasticité). Les effets de changement de forme (vertex...) sont conservés pour les deux formulations, et conformes à l'expérience.

Finalement, deux applications de ce formalisme non local (à l'échelle des cellules de dislocations), dans le cas d'étude de contraintes résiduelles par diffraction, sont proposées. La première s'intéresse à la répartition des contraintes d'ordre deux dans l'espace des orientations. Elle permet de retrouver les résultats obtenus avec la formulation locale (déjà validée par ailleurs). La seconde constitue une méthode originale de reconstitution de pics de diffraction à partir de la connaissance de l'état de contraintes du troisième ordre dans le polycristal. Elle reste, compte tenu de l'état d'avancement du modèle non local et du manque d'essais expérimentaux à l'échelle très fine des cellules de dislocations, très qualitative.

Conclusions

VI - Conclusions

Les méthodes à transition d'échelle basées sur une description intragranulaire uniforme, en particulier le schéma autocohérent, constituent un gros progrès vers une meilleure représentation du comportement des matériaux polycristallins, surtout dans le cas de sollicitations complexes.

Elles permettent d'accéder à des résultats fiables tant au niveau macroscopique (anisotropie des surfaces de plasticité) que microscopique (distribution des contraintes d'ordre deux, évolution de la texture cristallographique du matériau au cours de trajets complexes), et présentent l'avantage, par rapport aux formulations phénoménologiques, d'être des outils prédictifs.

Toutefois cette description imparfaite du comportement intragranulaire entraîne la mauvaise représentation de phénomènes comme la perte de ductilité ou encore les instabilités transitoires observées lors de changements brutaux de trajet de chargement.

Ce travail constitue une première tentative de meilleure description du comportement intragranulaire dans le cas des polycristaux, basée sur des outils micromécaniques. Le grain y est traité comme une structure biphasée, du fait de l'hétérogénéité de la répartition des dislocations, couramment sous la forme de parois, qui présentent une grande densité de dislocations, délimitant des cellules de faible densité de dislocations.

Un mécanisme de couplage entre cellules et parois au niveau du mouvement et du stockage des dislocations, l'écroutissage non local, est mis en évidence dans de nombreuses études expérimentales. Il est à l'origine de l'hétérogénéisation intragranulaire, phénomène relatif à la mise en place de la structure cellulaire

de dislocations ainsi qu'à son évolution au cours de la déformation plastique, qui se traduit mécaniquement d'une part par des niveaux de contraintes élevés, dits d'ordre trois, dans les parois et d'autre part, par l'hétérogénéité du champ des déformations plastiques dans le grain.

Ainsi, malgré la représentation simplifiée de la topologie cellulaire (forme, fraction volumique et orientations des cellules conservées constantes au cours du chargement), cette démarche permet d'accéder, d'un point de vue microscopique, aux contraintes internes dans la structure cellulaire ainsi qu'au niveau d'hétérogénéité des déformations plastiques dans les grains. D'un point de vue macroscopique, la description plus fine des contraintes internes (les effets d'ordre trois sont absents ou noyés avec une description uniforme des grains) permet de mieux représenter les effets dits cinématiques (translation de surfaces de plasticité, effet Bauschinger), sous-estimés dans le cas d'une description locale et uniforme du comportement des grains.

Néanmoins un problème majeur, relatif aux formulations non locales, subsiste, qui concerne l'identification de la matrice d'écrouissage. Ceci nécessite, à l'échelle microscopique, des expériences sur des polycristaux voire sur des monocristaux avec des mesures locales, qui soient directes ou indirectes. De même, au niveau macroscopique, des essais de chargements complexes sont nécessaires pour accéder à une meilleure connaissance des phénomènes d'annihilation par exemple.

Ainsi cette complexité accrue est le prix à payer pour une meilleure description du comportement des matériaux.

La mise en place et l'évolution des microstructures de dislocations peut être traitée par l'intermédiaire de simulations portant sur le mouvement et le

stockage de dislocations, considérées individuellement. Mais une description à l'échelle des glissements cristallographiques prenant en compte les effets collectifs constatés dans la structure cellulaire, en traitant réellement le problème de frontières évolutives correspondant, semble plus réaliste en vue d'acquérir des informations sur le comportement macroscopique des métaux polycristallins, l'objectif étant de mettre en évidence les mécanismes essentiels responsables de la formation de cette sous-structure afin de mieux la maîtriser.

En plus des niveaux élevés de contraintes induits dans les parois, la structure cellulaire de dislocations présente la particularité d'introduire une notion d'organisation qui dépasse les frontières des grains (texture de la micro-structure), ce qui conduit à renforcer l'anisotropie du matériau en se superposant aux textures cristallographiques et morphologiques de celui-ci.

En conclusion, il est donc préférable d'améliorer la description du comportement intragranulaire plutôt que d'optimiser plus encore la prise en compte des effets d'interaction à l'échelle intercrystalline.

Références Bibliographiques

Références bibliographiques

- [A75] ASARO R.J., "Somigliana dislocations and internal stresses : with application to second phase hardening", *Int. J. Engng Sci.*, **13**, p. 271-286, 1975.
- [A93] AIFANTIS E.C., "Higher order gradients and self-organization at nano, micro and macro scales", CMDS7, Paderborn, juin 92, *Material Science Forum*, p. 553, 1993.
- [ABH93] ALLAIS L., BRETHEAU T. et HERVE E., "Phase morphology and plastic behavior of two-phase material", CMDS7, Paderborn, juin 92, *Material Science Forum*, p. 305, 1993.
- [B92] BACZMANSKI A., Thèse, CRACOVIE, 1992.
- [BMK93] BERVEILLER M., MULLER D. et KRATOCHVIL J. , "Nonlocal versus local elastoplastic behavior of heterogeneous materials", *Int. J. of Plast.*, **9**, p. 633-652, 1993.
- [BZ79] BERVEILLER M. et ZAOUÏ A. , "An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals", *J. Mech. Phys. Solids*, **26**, p. 325-344, 1979.
- [BZ81a] BERVEILLER M. et ZAOUÏ A., "A simplified self-consistent scheme for two-phase metal plasticity," *Res. Mech. Let.*, **1**, p. 175-199, 1981.
- [BZ81b] BERVEILLER M. et ZAOUÏ A., "Méthodes self-consistantes en mécanique des solides hétérogènes" dans "Comportements rhéologiques et structures des Matériaux", Editions ENPC, C. HUET et A. ZAOUÏ Edit., p. 175-199, 1981.
- [BZ84] BERVEILLER M. et ZAOUÏ A., "Modeling of the Plastic Behavior of Inhomogeneous Media," *J. of Engng Mat. and Tech.*, **106**, p. 295-298, 1984.

- [CBK92] CANOVA G., BRECHET Y. et KUBIN L.P., "3D dislocation simulation of plastic instabilities in softening metals," Proc. 13th RISO international Symposium on Material Science, p. 27, 1992.
- [CL74] CALABRESE C. et LAIRD C., Mater. Sci. Eng., 1974.
- [CSB94a] CHERKAOUI M., SABAR H. et BERVEILLER M., "Propriétés effectives des matériaux composites à renforts enrobés," en cours de publication dans le Journal de Physique, 1994.
- [CSB94b] CHERKAOUI M., SABAR H. et BERVEILLER M., "Micromechanical approach of the coated inclusion problem and applications to composite materials," en cours de publication dans J. of Engng Mat. and Tech., 1994.
- [DZ73] DEDERICHS P.H. et ZELLER R., "Variational Treatment of the Elastic Constants of Disordered Materials," Z. Physik, **259**, p. 103, 1973.
- [E61] ESHELBY J.D., "Elastic inclusions and inhomogeneities", edited by Sneddon, I.N. and Hill, R. in "Progress in Solid Mechanics II" (North-Holland, Amsterdam), p. 89-140, 1961.
- [E83] ERINGEN A.C., "Theories of nonlocal Plasticity," **21**, p. 741-751, 1983.
- [EM79] ESSMANN U. et MUGHRABI H., "Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities," Phil. Mag. A, **40**, p. 731-756, 1979.
- [ERW68] ESSMANN U., RAPP M. et WILKENS M., "Die Versetzungsanordnung in plastisch verformten Kupferviellkristallen," Acta Met., **16**, p. 1275, 1968.
- [F84] FRANCIOSI P., Thèse d'état, Université paris-Nord, 1984.
- [F88] FRANCIOSI P., "On flow and work-hardening expression correlations in metallic single crystal plasticity," Rev. de Phys. Appl., **23**, p. 383, 1988.

- [FBZ80] FRANCIOSI P., BERVEILLER M. and ZAOUI A., "Latent Hardening in Copper and Aluminium Single Crystals," *Acta Metall.*, **28**, p. 273, 1980.
- [FF85] FASSI-FEHRI O., thèse d'état, Université de METZ, 1985.
- [FS83] FERNANDES J.V. et SCHMITT J.H., "Dislocation microstructures in steel during deep drawing," *Phil. Mag. A*, **48**, p. 841, 1983.
- [GP94] GROMA I. et PAWLEY G.S., "Dislocation cell formation in a 2D simulation," *Solid State Phenom.*, **35-36**, p. 369, 1994.
- [GS94] GORYATCHEV S.B. et SHALENKOV A.V., "Theory and computer simulation of dislocations structure relaxation during annealing," *Solid State Phenom.*, **35-36**, p. 375, 1994.
- [H83] HILL R., "Interfacial operators in the mechanics of composite media," *J. Mech. Phys. Solids*, **31**, p. 347-357, 1983.
- [H89] HUGHES D.A. et NIX W.D., "Strain hardening and substructural evolution in Ni-Co solid solutions at large strains," *Mat. Sci. and Eng.*, **122**, p. 153, 1989.
- [H90] HANSEN N., "Cold deformation structures," *Mat. Sci. and Techn.*, **6**, p. 1039, 1990.
- [H93] HUGHES D.A., "Microstructural evolution in a non-cell forming metal : Al-Mg," *Acta Metall. Mater.*, **41**, p. 1421, 1993.
- [HTHK92] HAVLICEK F., TOKUDA M., HINO. S. et KRATOCHVIL J., "Finite element method analysis of micro-macro transition in polycrystalline plasticity," *Int. J. of Plast.*, **8**, p. 477, 1992.
- [I79] IKEGAMI K., "Experimental plasticity on the anisotropy of metals," *Colloques Internationaux du CNRS.*, **295**, p. 201, 1979.
- [INN84] IWAKUMA T. et NEMAT-NASSER S., "Finite elastic plastic deformation of polycrystalline metals and composites," *Proc. Roy. Soc.*, **A394**, p. 87, 1984.

- [K58] KRÖNER E., "Kontinuums Theorie des Versetzungen und Eigenspannungen", Springer Verlag, 1958.
- [K61] KRÖNER E., "Zur plastischen Verformung des Vielkristalls", Acta Metall., **9**, p. 155-161, 1961.
- [K72] KRÖNER E., "Statistical Continuum Mechanics," CISM, Lecture Notes, n° **92**, Springer Wien, 1972.
- [K83] KUNIN I.A., "Elastic media with Microstructure II," Springer Verlag, p. 122-143, 1983.
- [K85] KRATOCHVIL J., "A model of cyclic plastic hardening and softening of metals," Proc. Int. Conf. on Nonlinear Mechanics, Shanghai, p. 560-565, 1985.
- [K88] KRATOCHVIL J., "Dislocation pattern formation in metals," Revue Phys. Appl., **23**, p. 419-429, 1988.
- [K90] KORBEL A., "The mechanism of strain localization in metals," Arch. of Metallurgy, **35**, p 177, 1990.
- [K90] KRÖNER E., "Modified Green function in the theory of heterogeneous and/or anisotropic linearly elastic media," in "Micromechanics and inhomogeneities" G.J. WENG, M. TAYA, H. ABE eds., Springer Verlag, 1990.
- [K93] KRIER J., Thèse, Université de METZ, 1993.
- [K94] KRATOCHVIL J., "Continuum mechanics approach to collective behavior of dislocations," Solid State Phenom., **35-36**, p. 371, 1994.
- [KD66] KRÖNER E. et DATTA B.K., "Nichtlokale Elastostatik : Ableitung aus der Gittertheorie," Z. Physik, **196**, p.203-211, 1966.
- [KHS80] KOCKS U.F., HASEGAWA T. et SCATTERGOOD R.O., "On the origin of cell walls and of lattice misorientations during deformation;" Scripta Metall., **14**, p. 449, 1980.

- [KS92] KRATOCHVIL J. et SAXLOVA M., "A model of formation of dipolar dislocation structures," *Solid State Phenomena*, **23**, p. 369, 1992.
- [KT80] KAWASAKI Y. et TAKEUCHI T., "Cell structures in copper single crystals deformed in the [0011] and [111] axes," *Scripta Met.*, **14**, p. 183, 1980.
- [L57] LIN T.H., "Analysis of Elastic and Plastic Strains of a F.C.C. Crystal", *J. Mech. Phys. Solids*, **5**, p. 143, 1957.
- [L91] LUFT A., "Microstructural processes of plastic instabilities in strengthened metals," *Progress in Materials Science*, **35**, p. 97-204, 1991.
- [L93] LIPINSKI P., Thèse d'habilitation, Université de METZ, 1993.
- [L94] LEMOINE X., Communication personnelle, 1994.
- [LB89] LIPINSKI P. et BERVEILLER M., "Elastoplasticity of micro-inhomogeneous metals at large strains," *Int. Journal of Plast.*, **5**, p. 149-172, 1989.
- [LC88] LEMAITRE J. et CHABOCHE J.L., "Mécanique des matériaux solides;" DUNOD, 1988.
- [LKB90] LIPINSKI P., KRIER J. et BERVEILLER M., "Elastoplasticité des métaux en grandes déformations : Comportement global et Evolution de la structure interne", *Revue Phys. Appl.*, **25**, p. 361-388, 1990.
- [LKD92] LAN Y., KLAAR H.J. et DAHL W., "Evolution of dislocation structures and deformation behavior of iron at different temperatures : Part I. Strain hardening curves and cellular structures;" *Metall. Trans. A*, **23A**, p. 537, 1992.
- [LKK84] LEPISTÖ T., KUOKKALA V.T. et KETTUNEN P., "The PSB structure in multiple-slip oriented copper single crystal," *Scripta Met.*, **18**, p. 245, 1984.

- [LMB93] LEMOINE X., MULLER D. et BERVEILLER M., "Textures of microstructures in BCC and FCC metals for various loading paths," ICOTOM10, Clausthal, 1993.
- [LNB91] LIPINSKI P., NADDARI A. et BERVEILLER M., "Recent results concerning the modelling of polycrystalline plasticity at large strains", *Int. J. Solids Structures*, **29**, p. 1873-1881, 1991.
- [LPC92] LEGAIT J., PILVIN P. et CAILLETAUD G., "A description of stress redistribution in polycrystalline plasticity," *Proc. 13th RISO international Symposium on Material Science*, p. 331, 1992.
- [LS83] LIBOVICKY S. et SESTAK B., "Development of the dislocation arrangement in Fe-0.9wt% Si single crystals deformed in tension," *Phil. Mag. A*, **47**, p. 63, 1983.
- [M73] MUGHRABI H., "Some observations of fatigue in copper single crystals," *Proc. of the third Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys*, Cambridge, p. 407, 1973.
- [M82] MURA T., "Micromechanisms of defects in solids," *Martinus Nijhoff Pub*, 1982.
- [M88] MUGHRABI H., "Dislocation clustering and long-range internal stresses in monotonically and cyclically deformed metal crystals," *Revue Phys. Appl.*, **23**, p. 367-379, 1988.
- [MKB92a] MULLER D., KRATOCHVIL J. et BERVEILLER M., "Non-local hardenings in metals", *Proc. 13th RISO international Symposium on Material Science*, p. 367-372, 1992.
- [MKB93a] MULLER D., KRATOCHVIL J. et BERVEILLER M., "Non-local hardenings in metals", *CMDS7, Paderborn, juin 92, Material Science Forum*, p. 195, 1993.
- [MKB93b] MULLER D., KRATOCHVIL J. et BERVEILLER M., "Effets des écrouissages couplés de différentes parties d'un métal sur la réponse

- en traction-compression et sur les contraintes internes”, C. R. Acad. Sci., **316**, p. 435, 1993.
- [MLBK94] MULLER D., LEMOINE X., BERVEILLER M. et KRATOCHVIL J., "Dislocation cell formation in a 2D simulation," Solid State Phenom., **35-36**, p. 393, 1994.
- [MM84a] MORRIS M.A. et MARTIN J.L., "Evolution of internal stresses and substructure during creep at intermediate temperatures," Acta Met., **32**, p. 549, 1984.
- [MM84b] MORRIS M.A. et MARTIN J.L., "Microstructural dependence of effective stresses and activation volumes during creep," Acta Met., **32**, p. 1609, 1984.
- [NGH85] NIX W.D. GIBELING J.C. et HUGHES D.A., "Time-dependent Deformation of Metals", Met. Trans., **16A**, p. 2215, 1985.
- [NNIH82] NEMAT-NASSER S., IWAKUMA T. et HEJAZI M., "On composites with periodic structures", Mech. of Mater., **1**, p. 239, 1982.
- [PA80] PRINZ F.B. et ARGON A.S., "Dislocation cell formation during plastic deformation of copper single crystals," Phys. Stat. Sol. (a), **57**, p. 741, 1980.
- [PA84] PRINZ F.B. et ARGON A.S., "The evolution of plastic resistance in large strain plastic flow of single phase subgrain forming metals," Acta Metall., **32**, p. 1021, 1984.
- [PBS81] PEDERSEN O.B., BROWN L.M. et STOBBS W.M., "The Bauschinger effect in copper," Acta Met., **29**, p. 1843, 1981.
- [R29] REUSS A., "Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle", Z. Angew. Math. Mech., **9**, p. 49, 1929.
- [R81] REES D.W.A., "Anisotropic hardening theory and the Bauschinger effect," J. of Strain Analysis, **16**, p. 85, 1981.

- [R88] REY C., "Effects of grain boundaries on the mechanical behavior of grains in polycrystals," *Revue Phys. Appl.*, **23**, p. 491, 1988.
- [R94] REUBREZ E., thèse, à paraître, Université de METZ, 1994.
- [RBL92] REUBREZ E., BERVEILLER M. et LIPINSKI P., "Optimal crystallographic texture determination for metal forming processes using a self-consistent model," *Proc. 13th RISO international Symposium on Material Science*, p. 403, 1992.
- [RS89] RAUCH E.F. et G'SELL C., *Mat. Science and Eng.*, **111**, p. 71, 1989.
- [RS89] RAUCH E.F. et SCHMITT J.H., "Dislocation substructures in mild steel deformed in simple shear," *Mat. Science and Eng.*, **113**, p. 441, 1989.
- [S28] SACHS A., "Zur Ableitung einer Fließbedingung", *Z. der V.D.I.*, **72**, p. 739, 1928.
- [S86] SCHMITT J.H., Thèse, "Contribution à l'étude de la micro-plasticité des aciers," INPG Grenoble, 1986.
- [S88] SIDOROFF F., "Internal variables and phenomenological models for crystal plasticity," *Revue Phys. Appl.*, **23**, p. 649, 1988.
- [S93] Rapport interne SOLLAC, LEDEPP (FLORANGE), 1993.
- [S94] SCACCIATELLA E., thèse, Université de METZ, 1994.
- [SLBDH92] SCACCIATELLA E., LIPINSKI P., BERVEILLER M. DETREAUX J.M. et HORKAY F., "Numerical implementation of the elastic-plastic self-consistent constitutive relation in a finite elements code," *Proc. 13th RISO international Symposium on Material Science*, p. 431, 1992.
- [SV86] SCHOLTES B. et VÖHRINGER O., "Untersuchungen zum Bauschinger effect an Kupfer and homogen Kupferlegierungen," *Z. Metallk.*, **77**, p. 595, 1986.

- [T38] TAYLOR G.I., "Plastic strain in metals", J. Inst. Metals, **62**, p. 307, 1938.
- [T92] THUILLIER S., Thèse, "Rhéologie et microstructure associées à un trajet complexe de déformation pour une nuance d'acier doux," INPG Grenoble, 1992.
- [TFHM82] TABATA T., FUJITA H., HIRAOKA M. et MIYAKE S., "The relationship between flow stress and dislocation behaviour in [111] aluminium single crystals," Phil. Mag. A, **46**, p. 801-816, 1982.
- [TMFI76] TABATA T., MORI H., FUJITA H. et ISHIKAWA I., "In-situ deformation of Tungsten single crystals with [111] tensile axis in an ultra-high voltage electron microscope," J. of the Phys. Soc. of Japan, **40**, p. 1103, 1976.
- [TYF78] TABATA T., YAMANAKA S. et FUJITA H., "In situ deformation of the [111] aluminium single crystals observed by high voltage microscopy," Acta Met., **26**, p. 405, 1978.
- [UBM93] UNGAR T., BIERMANN H. et MUGHRABI H., "Dislocation distributions as seen by X-ray line profiles," Mater. Sci. and Engng., **164**, p. 175, 1993.
- [UMRW84] UNGAR T., MUGHRABI H., RÖNNPAGEL D. et WILKENS M., "X-ray line-broadening study of the dislocation cell structure in deformed [001] oriented copper single crystals," Acta Met., **32**, p. 333, 1984.
- [V89] VOIGT W., "Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper", Wied. Ann., **38**, p. 573, 1889.
- [W69] WARREN B.E., "X-Ray diffraction," ed. Addison Wesley, Londres, 1969.
- [W78] WALPOLE L.J., "A coated inclusion in an elastic medium," Math. Proc. Camb. Phil. Soc., **83**, p. 495-506, 1978.

- [WPR81] WINTER A.T., PEDERSEN O.B. et RASMUSSEN K.V., "Dislocation microstructures in fatigued copper polycrystals," Acta Met., 29, p. 735, 1981.
- [Z92] ZBIB H.M., "The strain gradient phenomenon in viscoplasticity : theory and application to shear instability," Proc. 13th RISO international Symposium on Material Science, p. 525, 1992

Annexes

Annexe 1 :
Critère phénoménologique de projection des cellules sur le système initialement le plus actif du grain

Il a été vu au chapitre II qu'une microstructure caractéristique se développe pour chaque trajet de déformation, et que les orientations des cellules sont reliées à l'activité des systèmes de glissement, de telle sorte que l'orientation principale des cellules dans un grain correspond en première approximation à celle du système le plus actif de ce grain.

Une étude numérique a été menée à partir de résultats concernant l'activité des systèmes de glissement dans un polycristal CFC de 1000 grains à l'aide du schéma autocohérent pour plusieurs trajets de chargement.

Elle s'attache à suivre, dans chaque grain du polycristal, le système le plus actif à chaque incrément de contrainte macroscopique imposée.

Le tableau A.1 montre que, quel que soit le chargement macroscopique imposé, le plan de glissement le plus chargé reste globalement le même depuis le début de l'essai jusqu'à 40% de déformation plastique et ce, pour la plupart des grains.

Trajets de chargement	Plans de glissement les plus chargés demeurant inchangés pendant tout l'essai (% sur tout le polycristal)	Plans de glissement les plus chargés demeurant inchangés pendant 70% de la durée de l'essai (% sur tout le polycristal)
Traction	55%	70%
Expansion Equibiaxiale	85%	92%
Cisaillement	79%	85%
Laminage	77%	83%

Tableau A1 : Stabilité de l'activité maximale sur les systèmes de glissement

Ainsi si l'on considère par exemple le cas de l'expansion équibiaxiale, 85% des grains voient leur plan de glissement initialement le plus chargé demeurer inchangé tout au long de l'essai. De plus, si l'on s'intéresse à la condition de stabilité du plan le plus chargé pendant seulement 70% du trajet (i.e. de la déformation plastique cumulée), ce sont 92% des grains qui vérifient ce critère.

De tels résultats permettent d'imposer phénoménologiquement la condition géométrique suivante sur les ellipsoïdes représentant les cellules de dislocations : ceux-ci sont projetés sur le plan du système initialement le plus actif de chaque grain. Par souci de simplification, les seuls ellipsoïdes non dégénérés en sphères utilisés dans ce travail seront de type penny-shape, possédant la propriété d'isotropie dans leur plan principal.

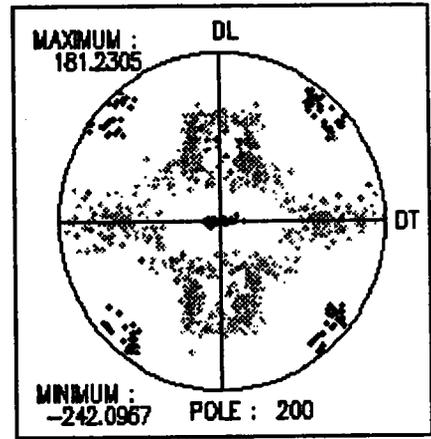
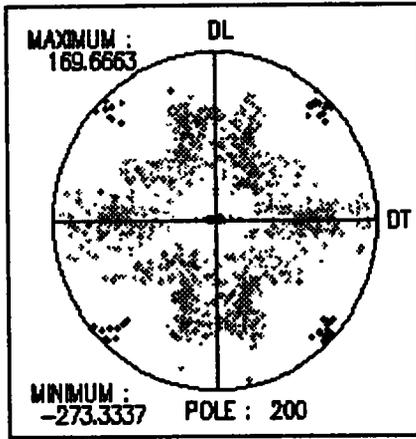
Cette condition s'applique différemment pour les deux approches développées :

- En ce qui concerne les formulations intégrales présentées au chapitre IV, l'orientation d'une cellule apparaît lors de la mise en œuvre du tenseur de Green modifié, caractérisant la topologie étudiée.
- Dans le cadre de l'approche développée dans le chapitre V, l'orientation des cellules est mise en évidence par l'intermédiaire du tenseur d'Eshelby correspondant, qui est calculé dans le repère principal de l'ellipsoïde puis est tourné dans le repère du grain.

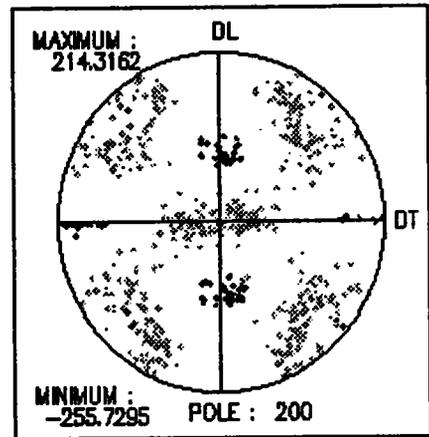
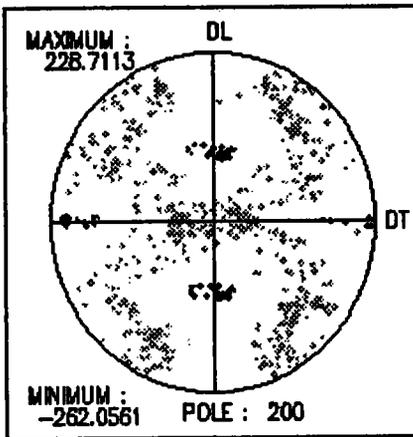
Annexe 2

Résultats détaillés de simulation

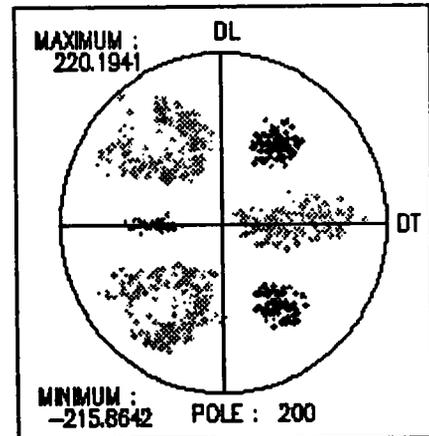
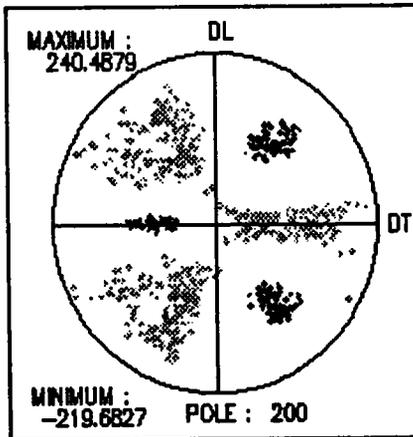
sigma 22



sigma 33



sigma 23



Cas non local

Cas local



Maxima



Minima

Figure A2.1: Distribution des contraintes d'ordre 2 dans l'espace des orientations
Composantes 22, 33 et 23

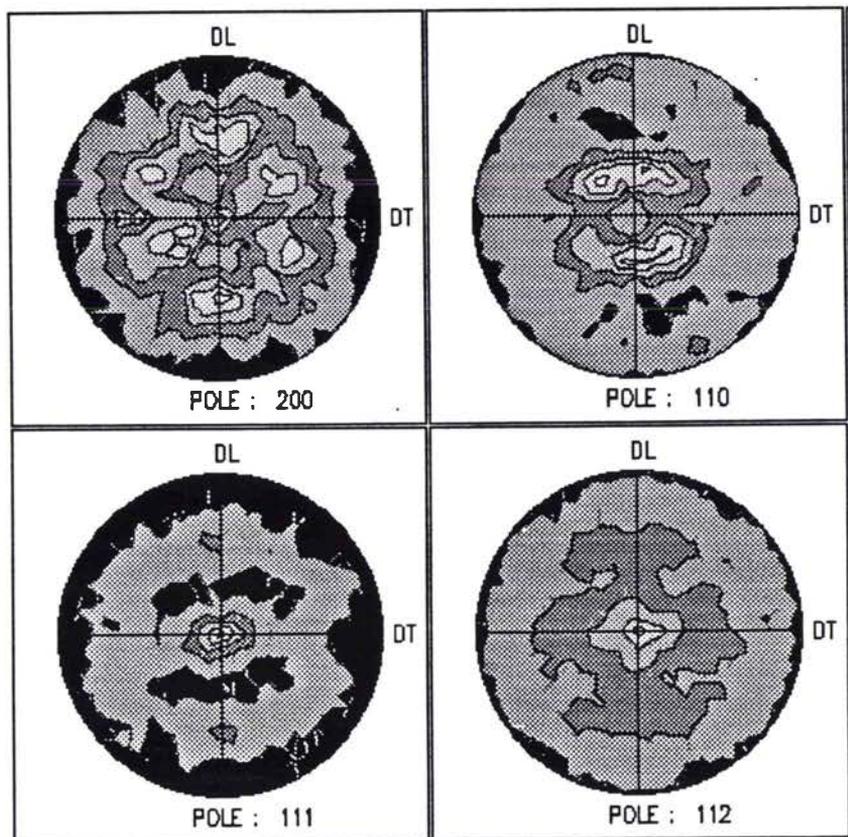


Figure A2.2: Texture recalculée du matériau laminé

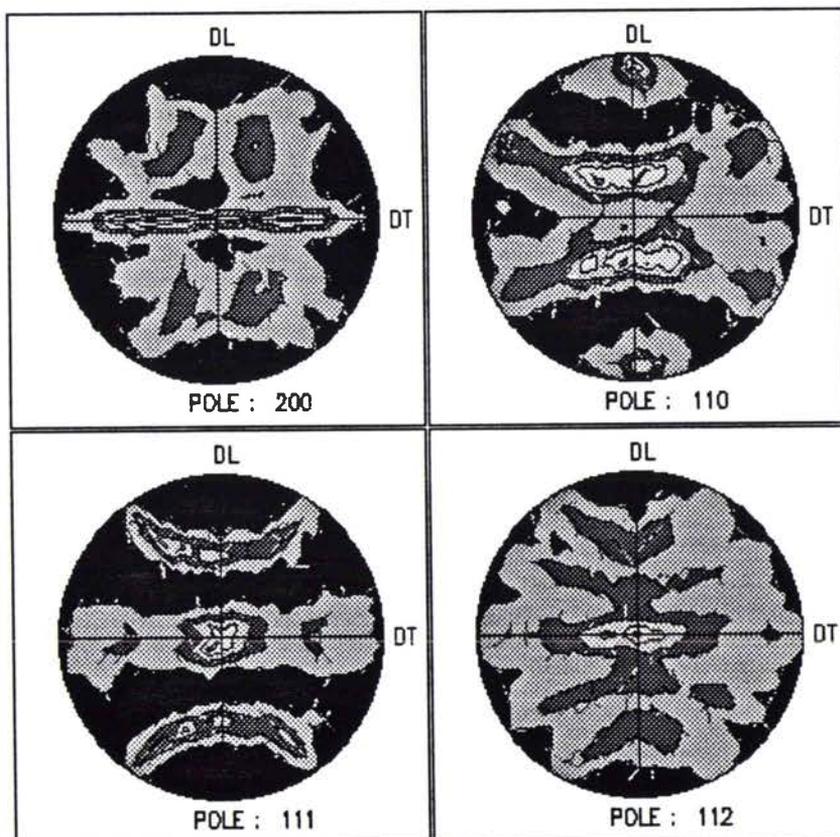


Figure A2.3: Texture du matériau ayant subi l'essai de traction - cas local

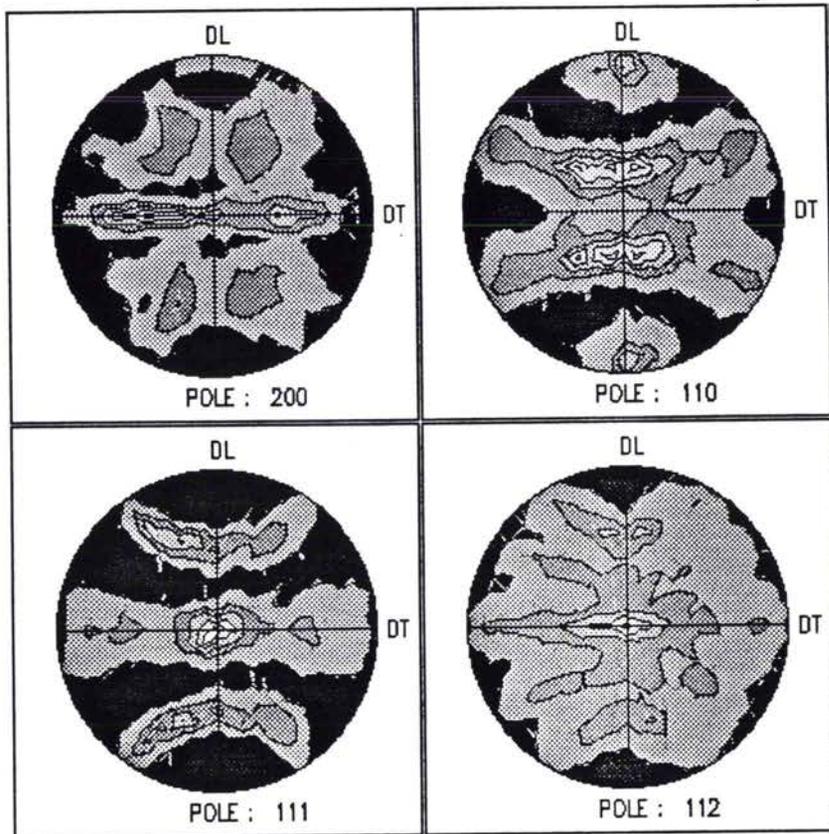


Figure A2.4: Texture du matériau ayant subi l'essai de traction - cas non local

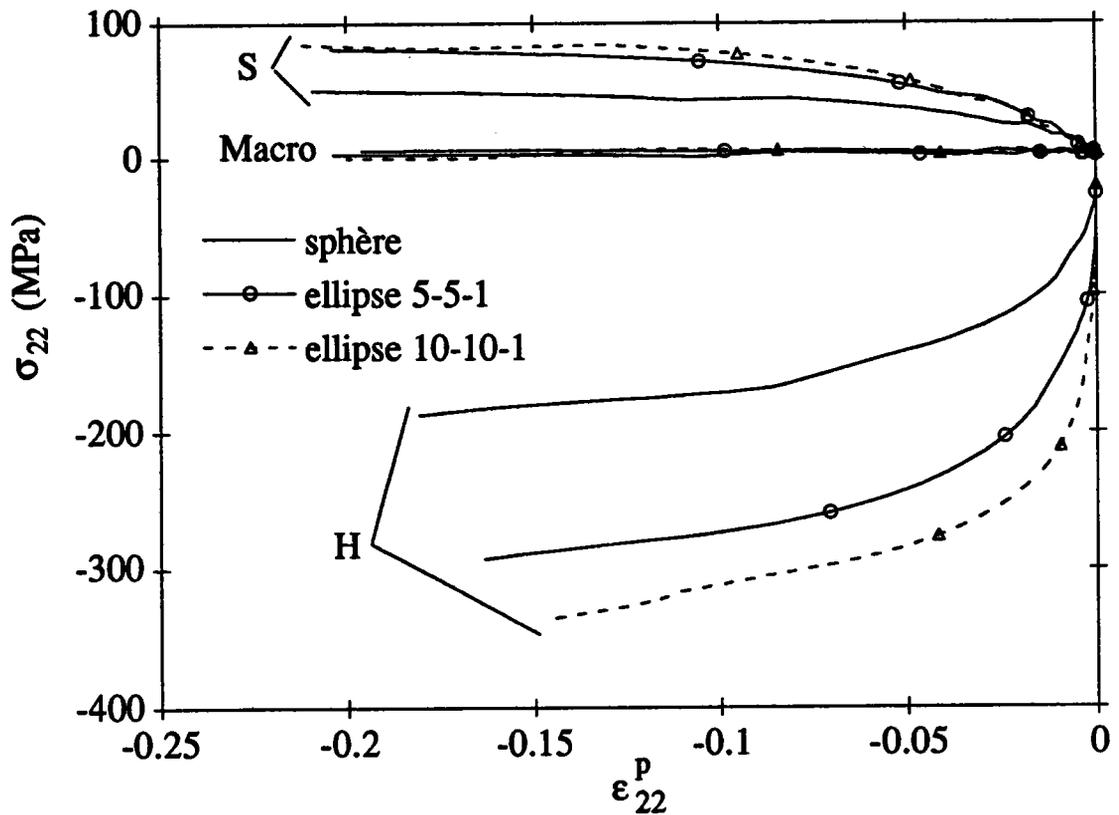


Figure A2.5 : Réponses macroscopique et moyennes par phase pendant l'essai 1 (composantes 22)

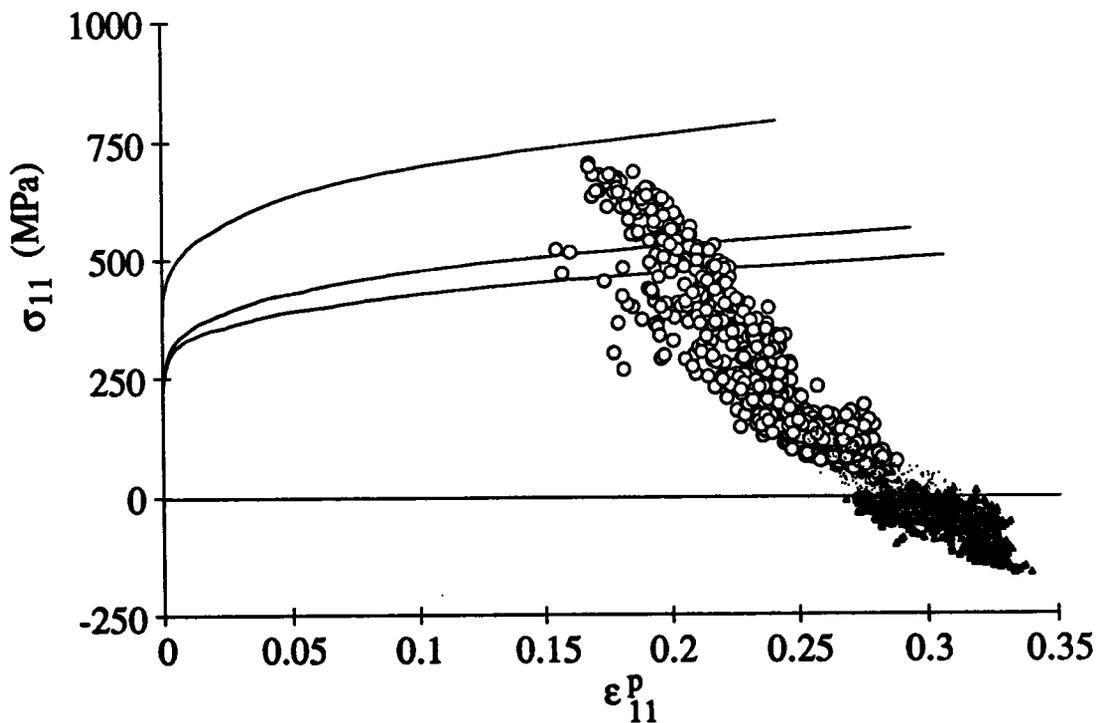


Figure A2.6 : Etats résiduels d'ordres 2 et 3 dans le matériau après l'essai 1 (σ_{11} , ellipsoïde 5-5-1)

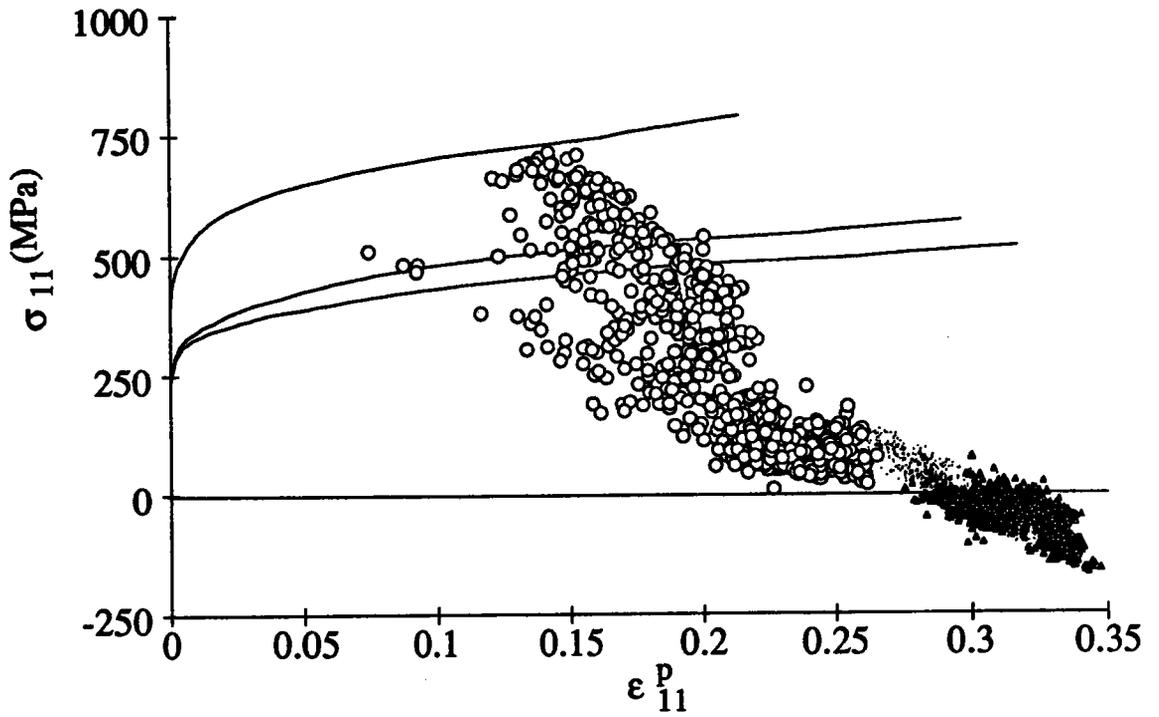


Figure A2.7 : Etats résiduels d'ordres 2 et 3 dans le matériau après l'essai 1
 (σ_{11} , ellipsoïde 10-10-1)

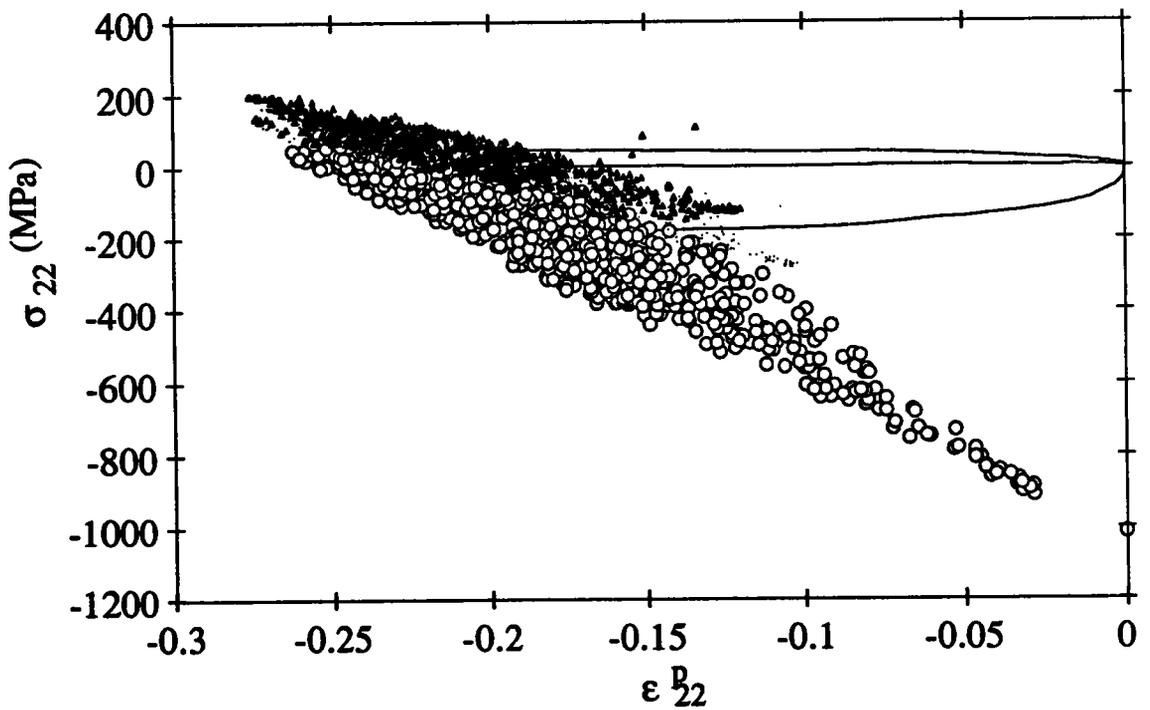


Figure A2.8 : Etats résiduels d'ordres 2 et 3 dans le matériau après l'essai 1
 (σ_{22} , sphère)

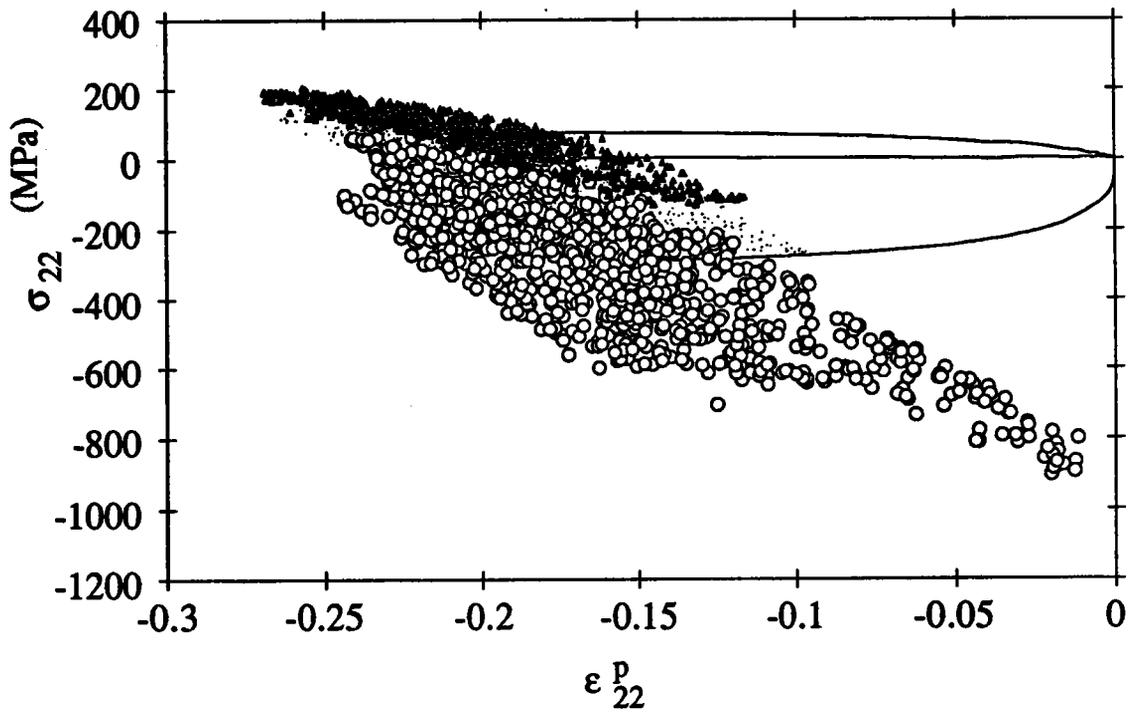


Figure A2.9 : Etats résiduels d'ordres 2 et 3 dans le matériau après l'essai 1
 (σ_{22} , ellipsoïde 5-5-1)

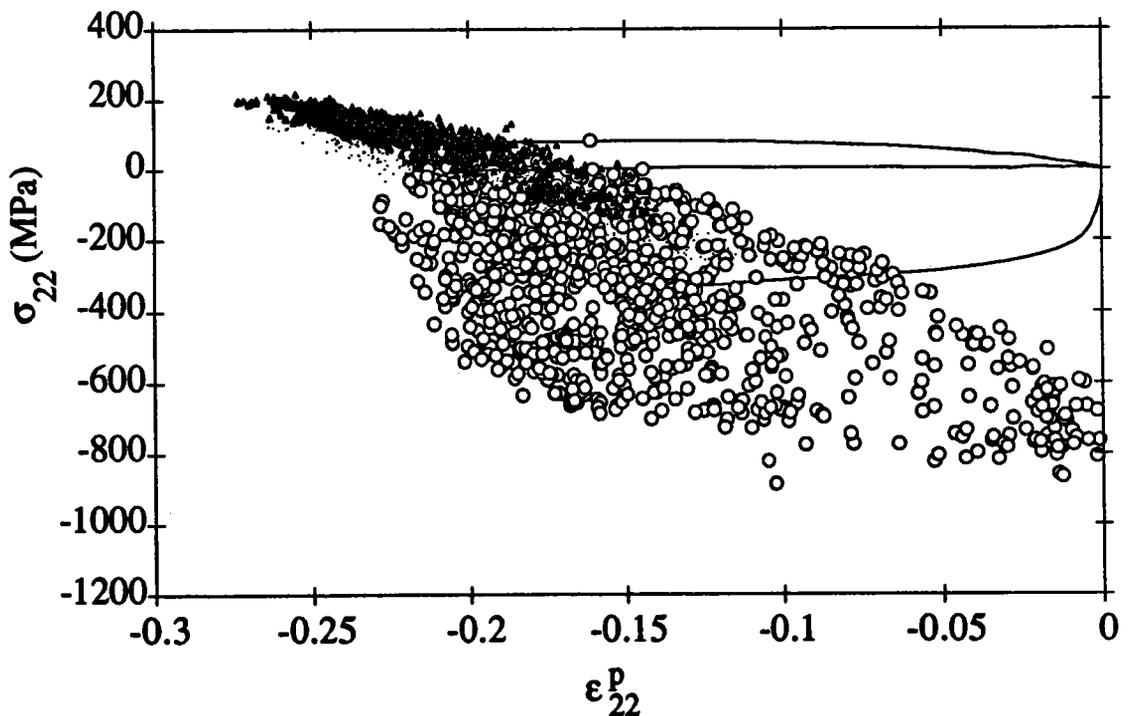


Figure A2.10 : Etats résiduels d'ordres 2 et 3 dans le matériau après l'essai 1
 (σ_{22} , ellipsoïde 10-10-1)

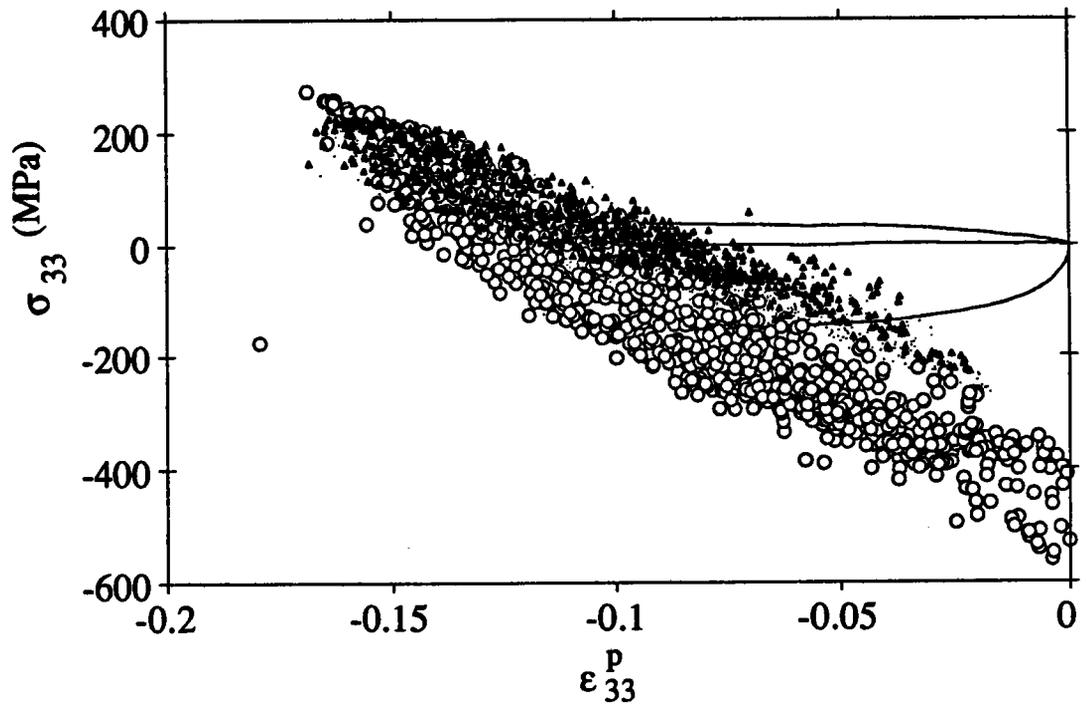


Figure A2.11 : Etats résiduels d'ordres 2 et 3 dans le matériau après l'essai 1 (σ_{33} , sphère)

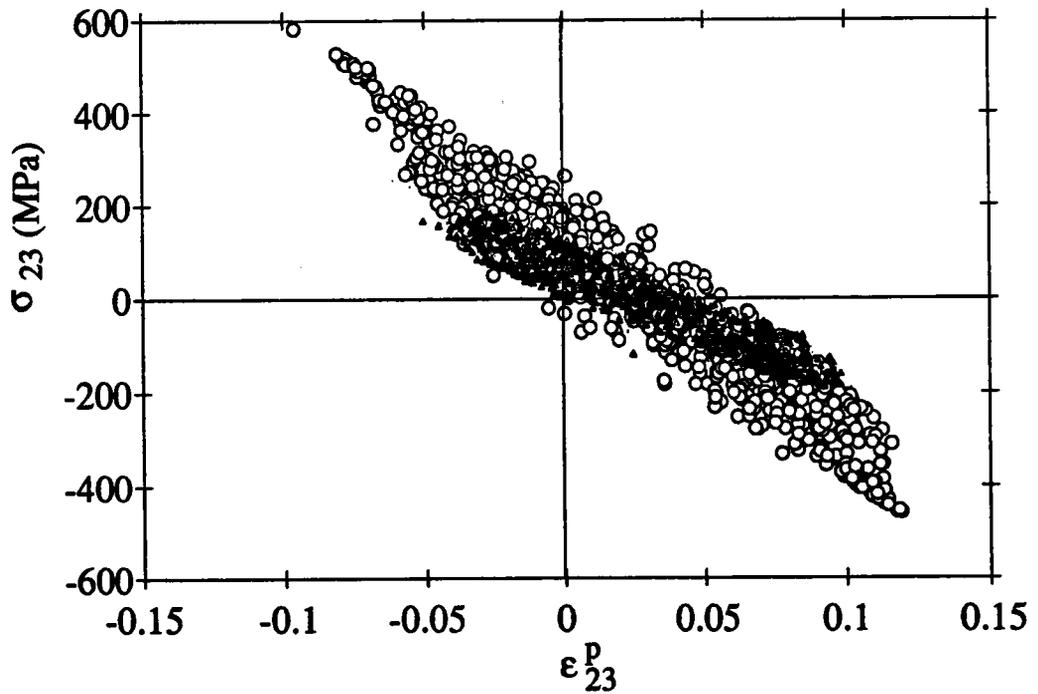


Figure A2.12 : Etats résiduels d'ordres 2 et 3 dans le matériau après l'essai 1 (σ_{23} , sphère)

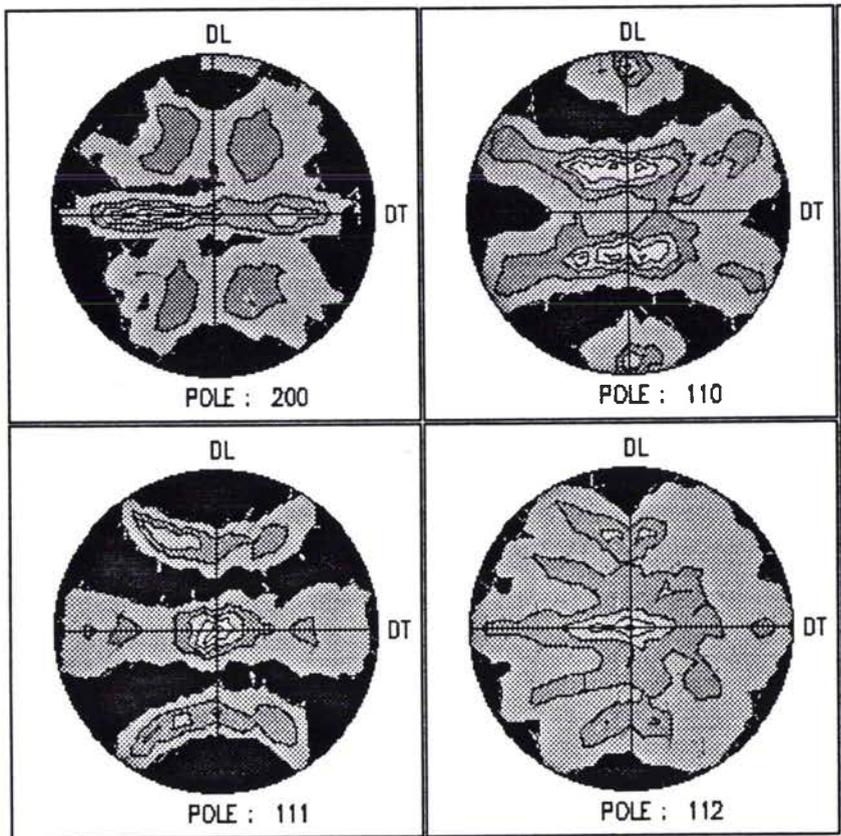


Figure A2.13 : Texture du matériau après l'essai 1 - non local aniso.
(ellipsoïde 5-5-1)

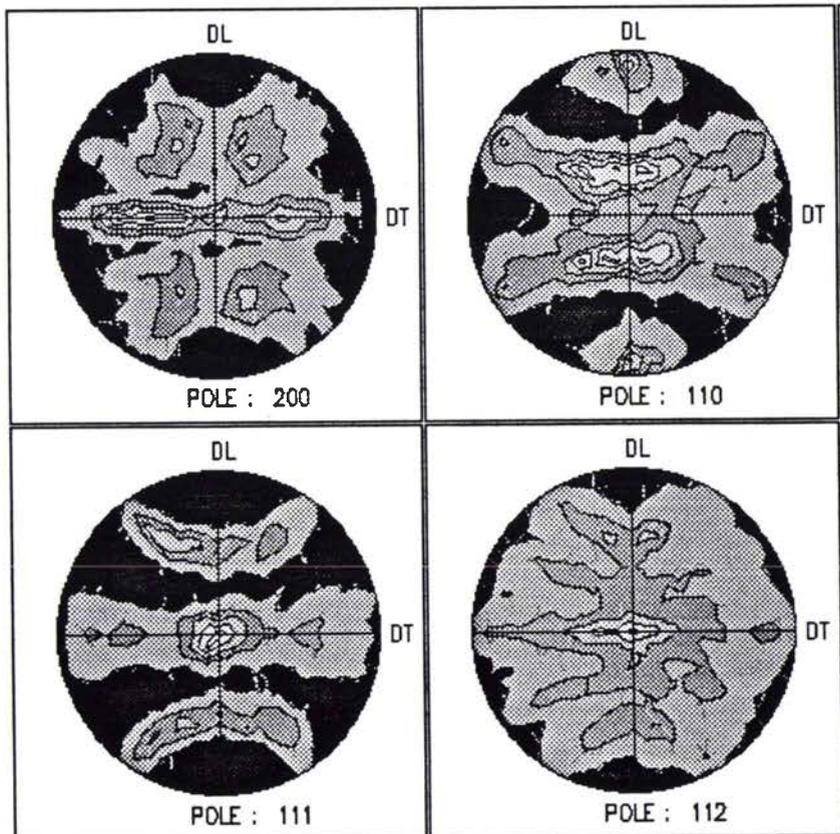


Figure A2.14: Texture du matériau après l'essai 1 - non local aniso.
(ellipsoïde 10-10-1)

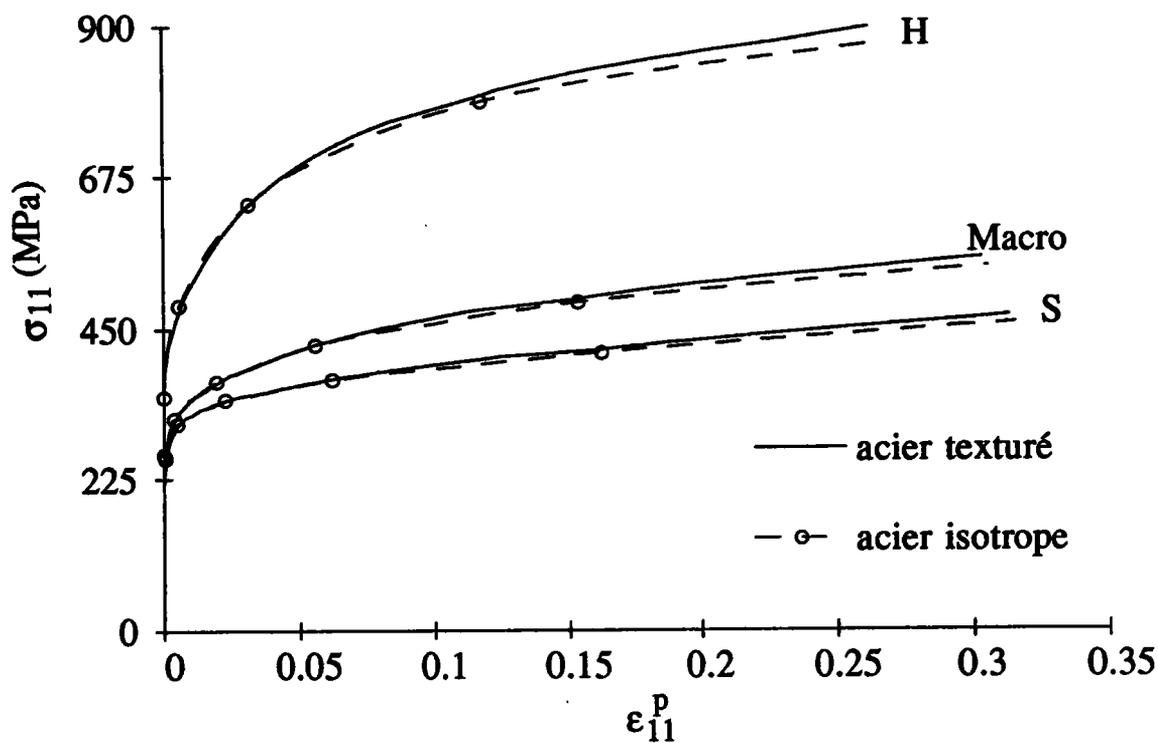


Figure A2.15 : Influence de la texture cristallographique initiale sur les réponses en traction au cours de l'essai 1 pour le cas non local sphérique

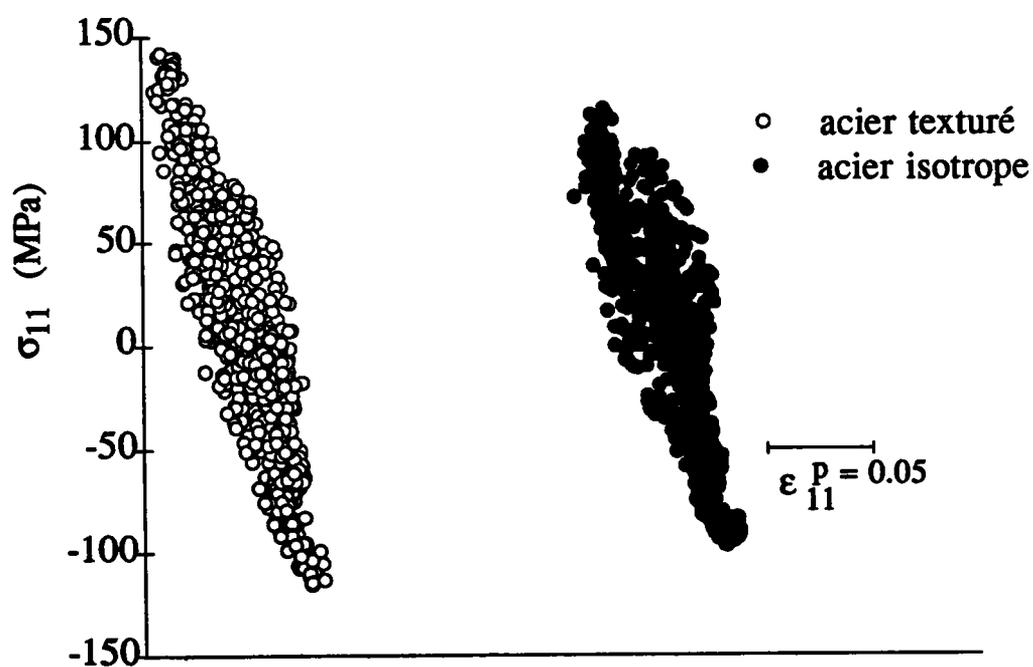


Figure A2.16 : Influence de la texture cristallographique initiale sur les contraintes résiduelles d'ordre deux après l'essai 1 pour le cas non local sphérique

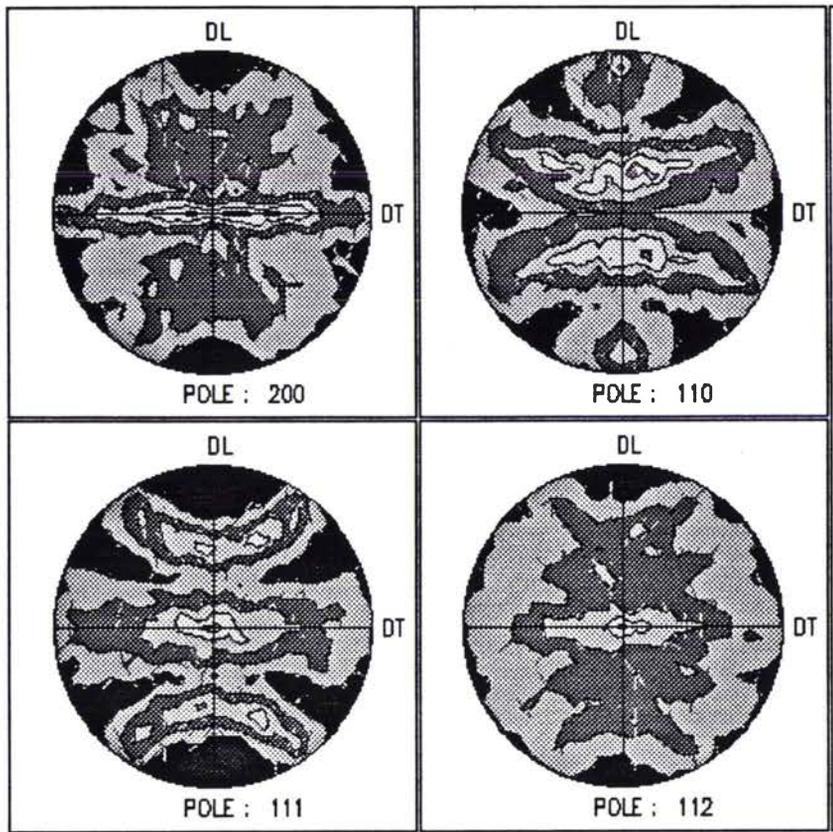


Figure A2.17 : Texture du matériau après l'essai 1 (cas non local iso. sphérique)

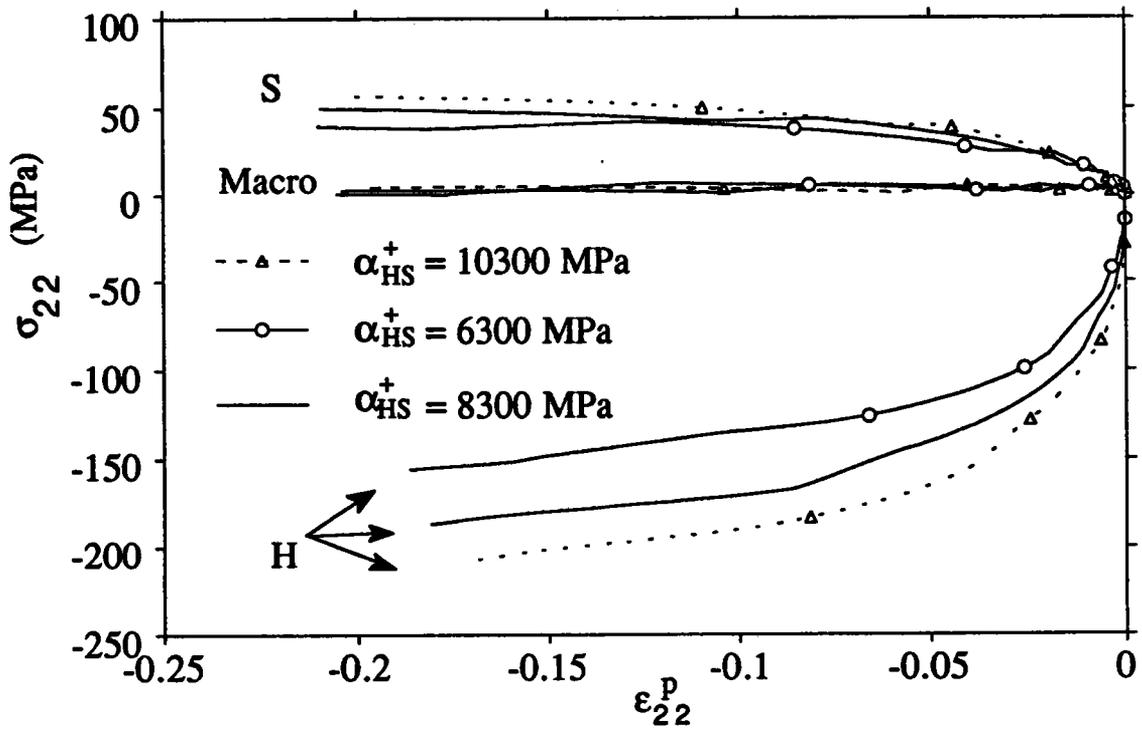


Figure A2.18 : Effets de α_{HS}^+ sur les réponses macroscopique et moyennes par phase avec le code non local (σ_{22} , sphère)

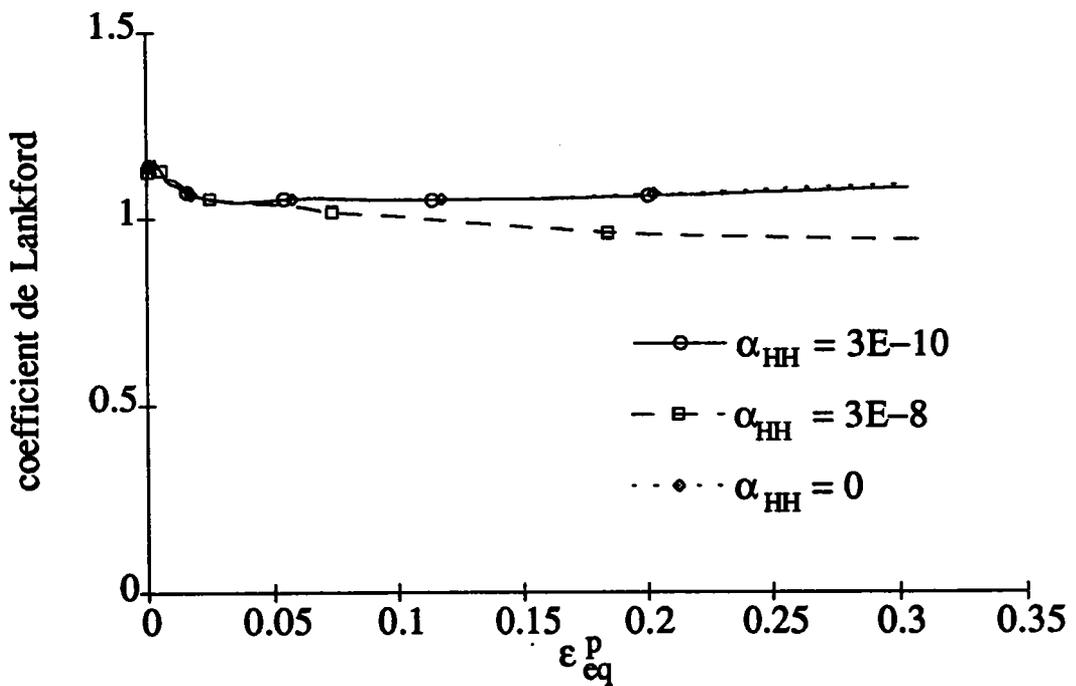


Figure A2.19 : Effets de α_{HH} ($=\alpha_{HS}^-$) sur le coefficient de Lankford au cours de l'essai 1 avec le code non local - cas sphérique isotrope

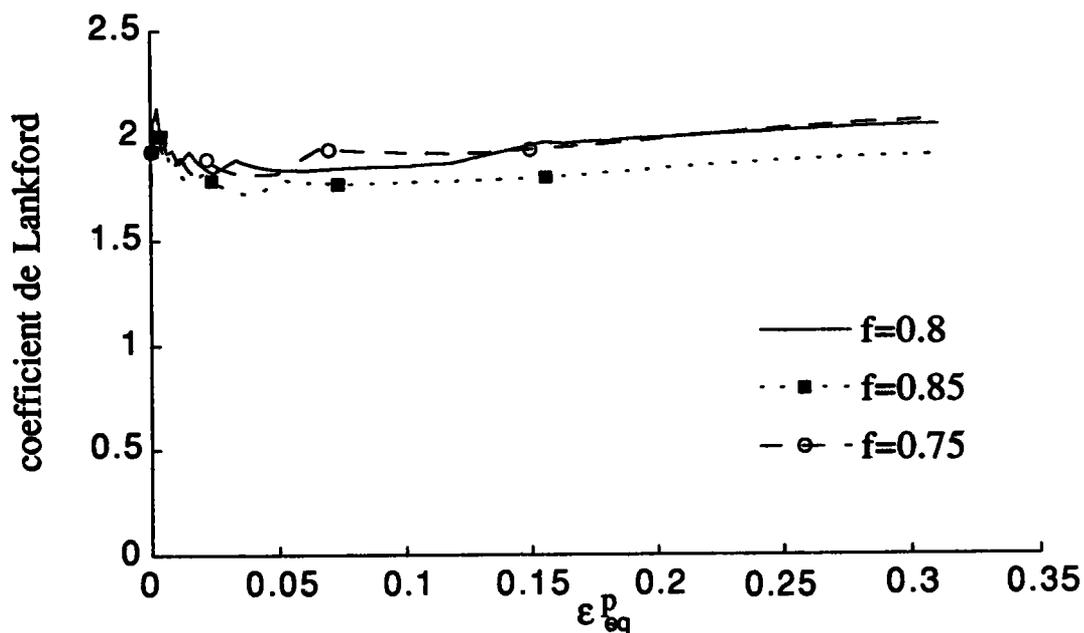


Figure A2.20 : Effets de la fraction volumique sur le coefficient de Lankford au cours de l'essai 1 dans le cas non local, à lissage macroscopique constant

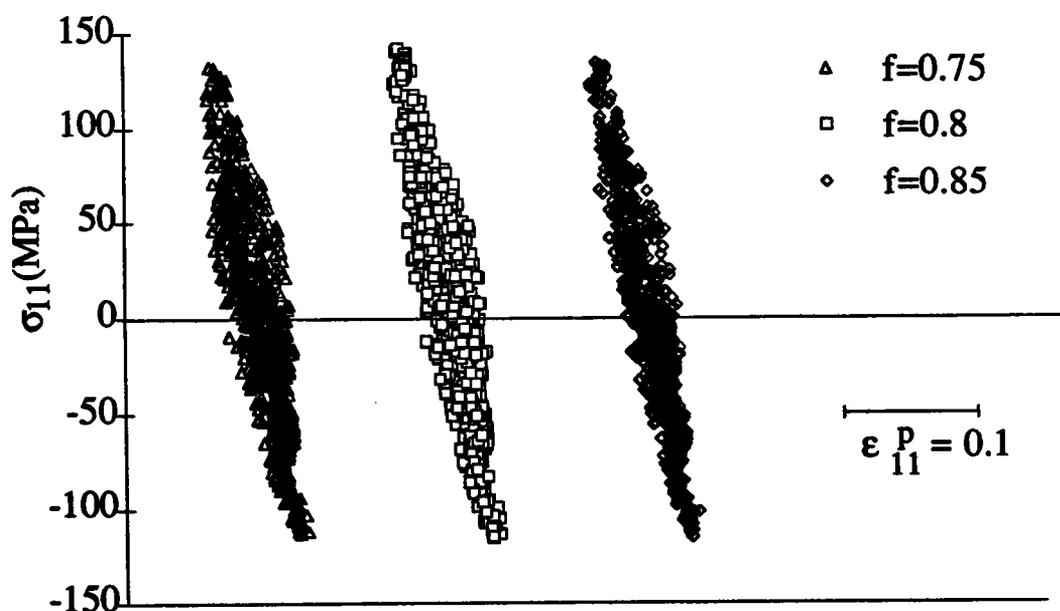


Figure A2.21 : Effets de la fraction volumique sur les contraintes résiduelles d'ordre deux dans le cas non local sphérique, à lissage macroscopique constant

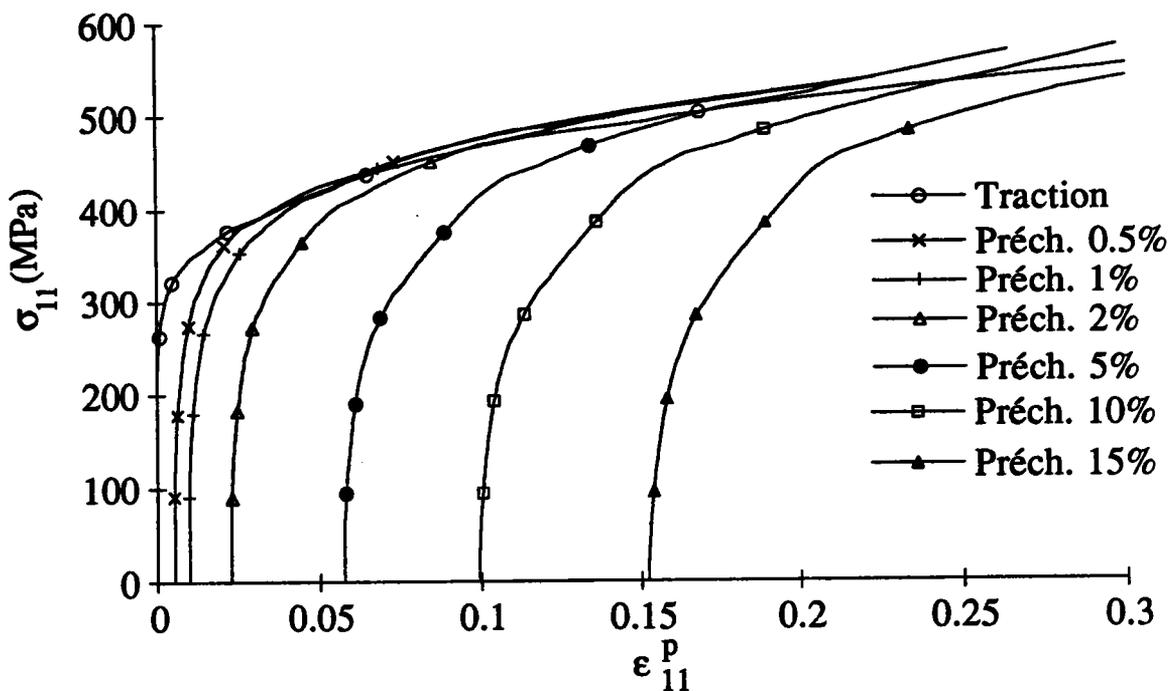


Figure A2.22 : Influence de la prédéformation en traction sur la réponse en compression (cas non local sphérique)

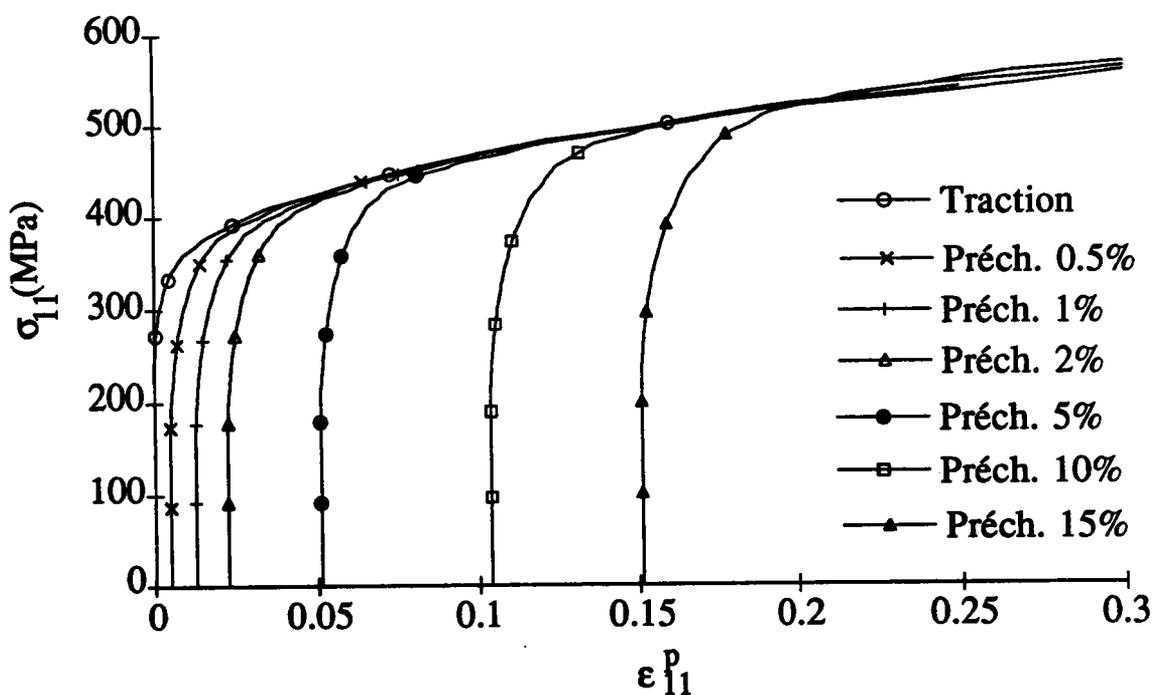


Figure A2.23 : Influence de la prédéformation en traction sur la réponse en compression (cas local)

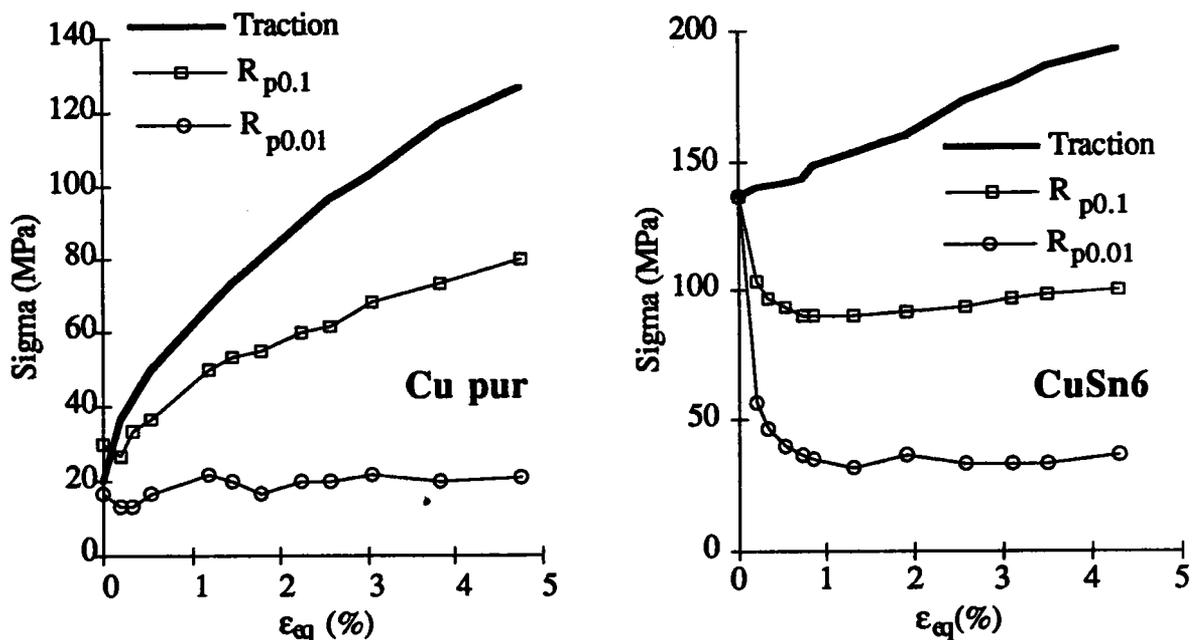


Figure A2.24 : Courbes expérimentales décrivant l'évolution de l'effet Bauschinger en fonction de la prédeformation (d'après [SV86])

(A2.24a : cas d'un polycristal de Cu pur, A2.24b : cas d'un alliage de CuSn6)

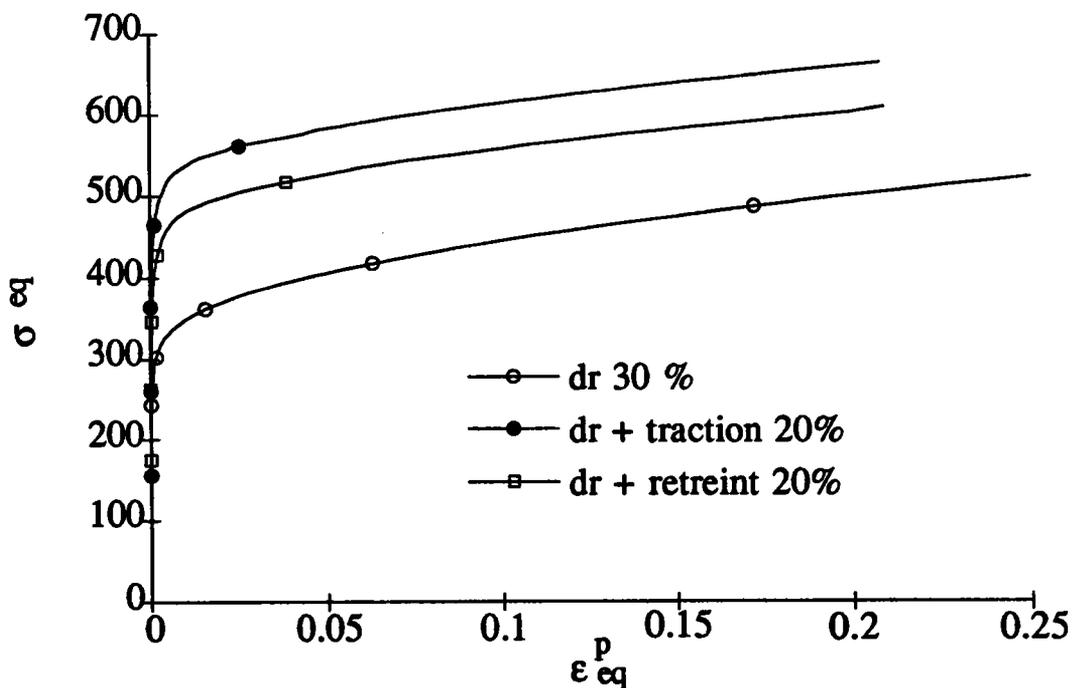


Figure A2.25 : Séquence Double-Réduction puis traction ou rétreint (cas non local, $[\alpha_{HH} = 0]$)

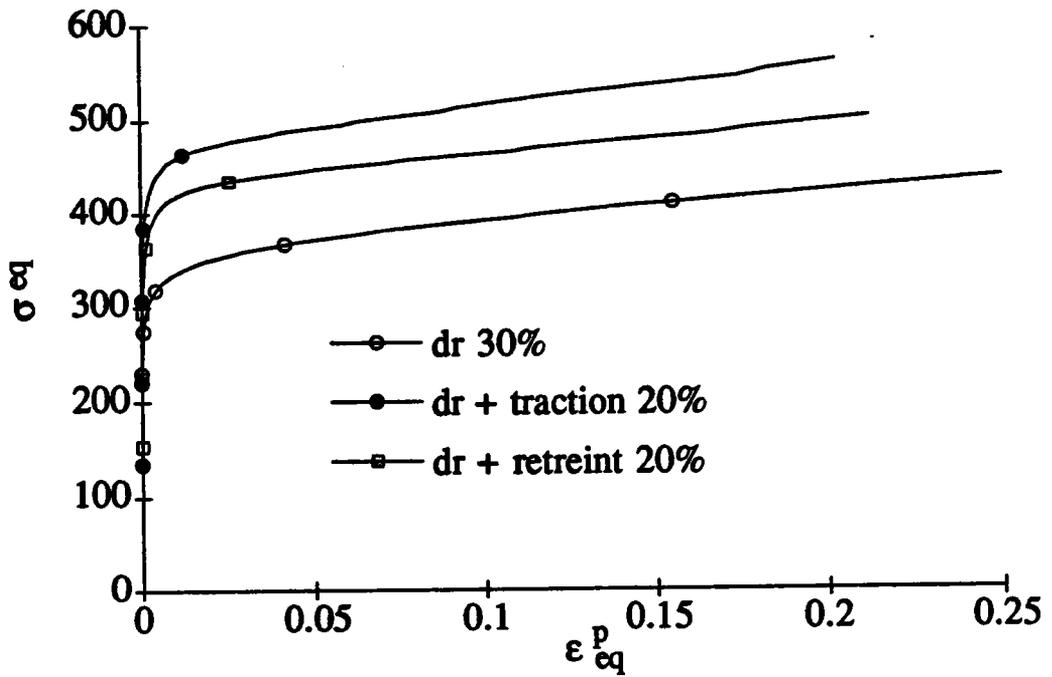


Figure A2.26 : Séquence Double-Réduction puis traction ou rétreint (cas non local, $[\alpha_{HH} = 3.0 \cdot 10^{-8}]$)

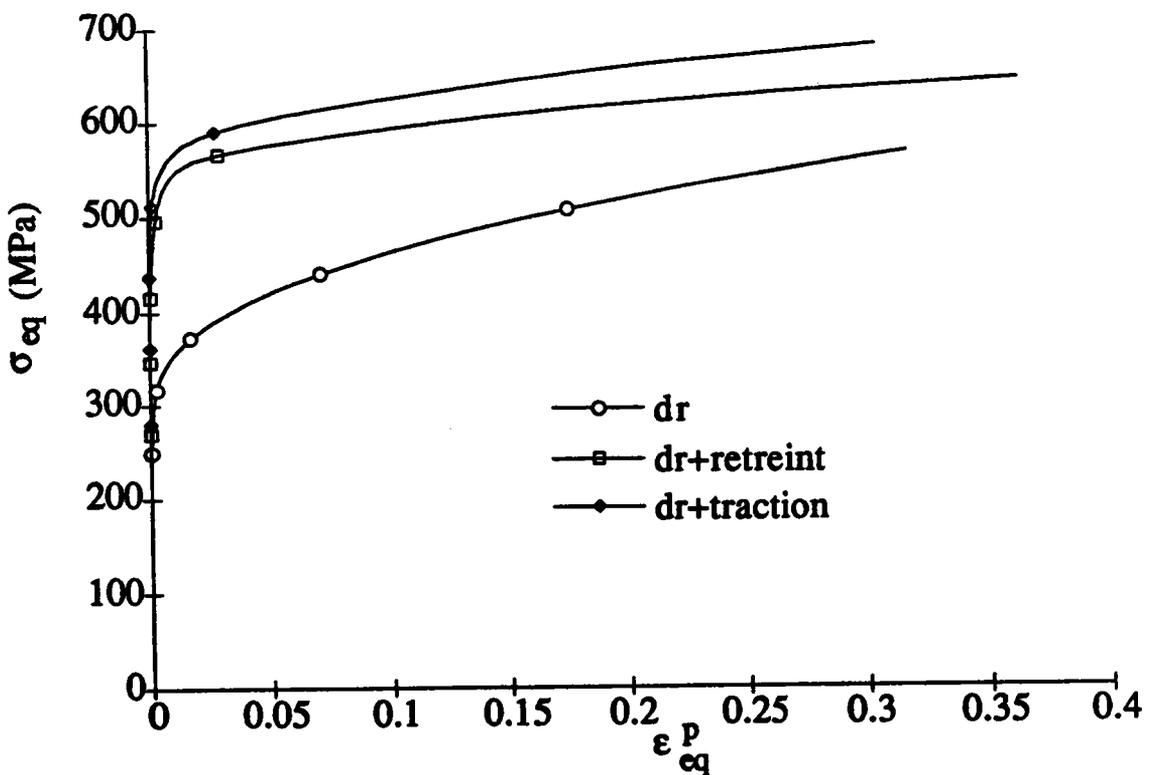


Figure A2.27 : Séquence Double-Réduction puis traction ou rétreint (cas local)

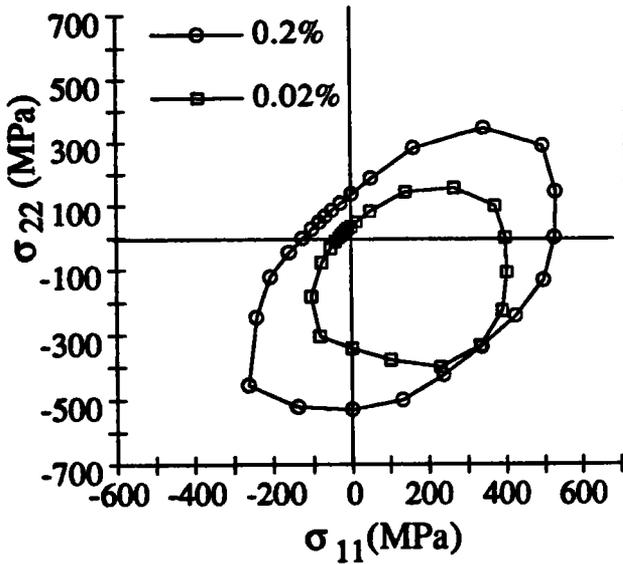


Figure A2.28a Cas non local

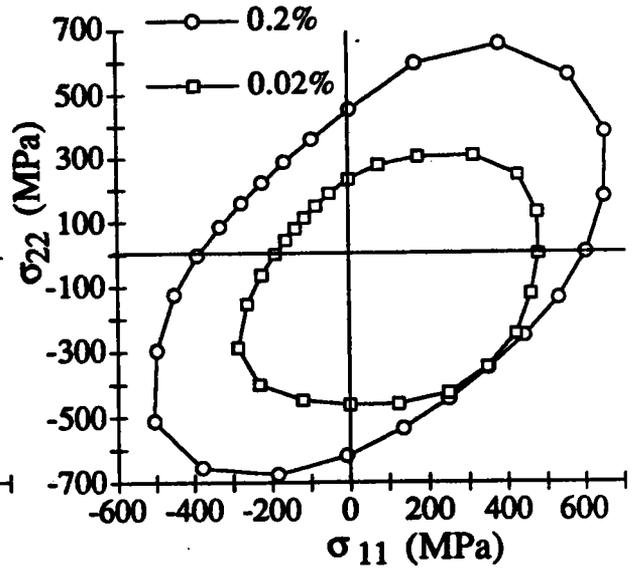


Figure A2.28b Cas local

Figure A2.28 : Surfaces de plasticité après un préchargement de rétreint de 50%, simulées à 0.02% et 0.2%, pour les deux formalismes

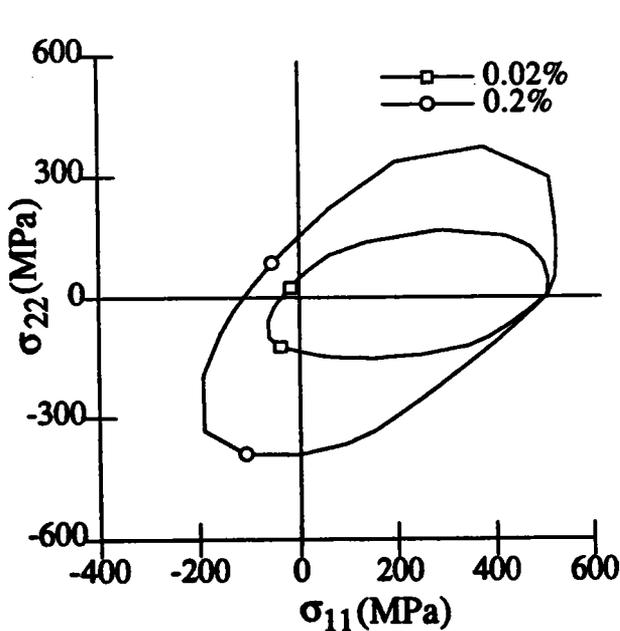


Figure A2.29a Cas non local

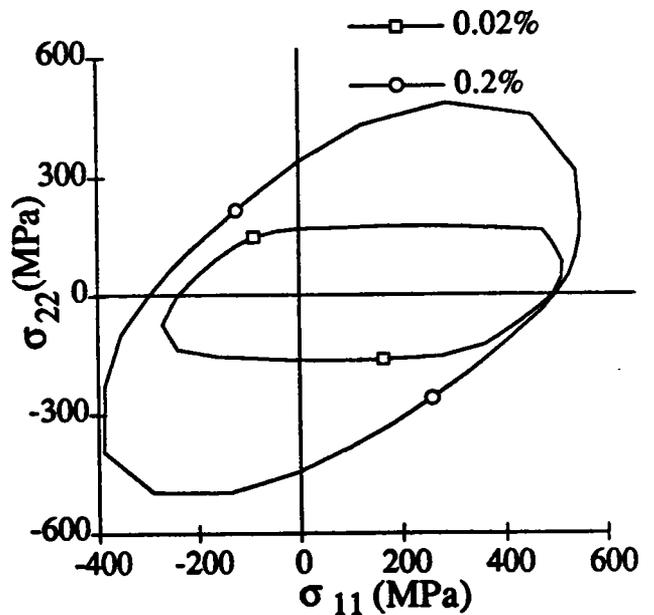


Figure A2.29b Cas local

Figure A2.29 : Surfaces de plasticité après un préchargement de traction de 15%, simulées à 0.02% et 0.2%, pour les deux formalismes

Annexe 3 :

Evaluation des contraintes d'ordre deux (A. Baczmanski)

La diffraction de rayons X ou de neutrons, pour une famille de plans (hkl) de normale \vec{n} , fait intervenir le couple d'orientations (φ, ψ) , décrit sur la figure A3.1.

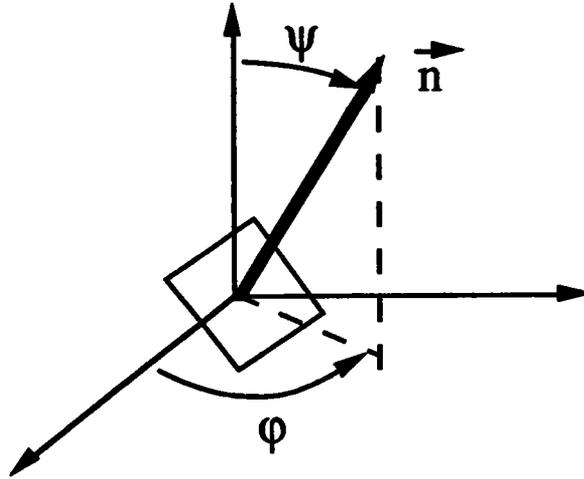


Figure A3.1 : Diffraction d'un plan (hkl).

La diffraction ne fait intervenir que les distorsions du réseau, causées par les déformations et rotations élastiques liées à l'état de contraintes local, et non pas la déformation plastique qui ne modifie pas directement l'orientation du réseau et est de type isochorique.

On détermine alors, à partir de l'état de contraintes local, la déformation élastique normale au plan (hkl) qui est telle que

$$\langle \epsilon_{\text{exp}}^{\text{él}} \rangle_{\text{hkl}} = \langle \epsilon_{\text{exp}}^{\text{I}} \rangle_{\text{hkl}} + \langle \epsilon_{\text{exp}}^{\text{II}} \rangle_{\text{hkl}}$$

où :

- $\langle \epsilon_{\text{exp}}^{\text{I}} \rangle_{\text{hkl}}$ est la contribution des effets d'ordre un (I)

$$\langle \epsilon_{\text{exp}}^{\text{I}} \rangle_{\text{hkl}} = F_{ij}[(\text{hkl}), \varphi, \psi] \sigma_{ij}^{\text{I}}$$

avec F_{ij} : constantes radiocristallographiques

- σ_{ij}^I : tenseur des contraintes du premier ordre
- $\langle \varepsilon_{exp}^{II} \rangle_{hkl}$ est la contribution des effets d'ordre deux (II)
- $$\langle \varepsilon_{exp}^{II} \rangle_{hkl} = \langle C_{ijkl}^{-1} \sigma_{kl}^{II} n_i n_j \rangle$$
- σ_{ij}^{II} tenseur des contraintes du deuxième ordre.

D'autre part, la déformation normale au plan (hkl) s'exprime en fonction des distances interréticulaires actuelle d_{hkl} et initiale d_{hkl}^0 par

$$\langle \varepsilon_{exp}^{el} \rangle_{hkl} = \frac{d_{hkl} - d_{hkl}^0}{d_{hkl}^0}$$

On arrive donc à l'équation suivante, à partir de données réelles sur l'état du matériau :

$$\frac{d_{hkl} - d_{hkl}^0}{d_{hkl}^0} = F_{ij} \sigma_{ij}^I + \langle \varepsilon_{exp}^{II} \rangle_{hkl}$$

On suppose que le second terme dans cette équation peut s'exprimer par

$$\langle \varepsilon_{exp}^{II} \rangle_{hkl} = q \langle \varepsilon_{sim}^{II} \rangle_{hkl}$$

où $\langle \varepsilon_{sim}^{II} \rangle_{hkl}$ est calculé par le modèle et q est un paramètre de lissage.

Le facteur q est introduit pour obtenir la réelle amplitude des $\langle \varepsilon_{sim}^{II} \rangle_{hkl}$ en supposant que leur variation en fonction de (φ, ψ) est convenablement décrite lors de la modélisation.

On a donc finalement

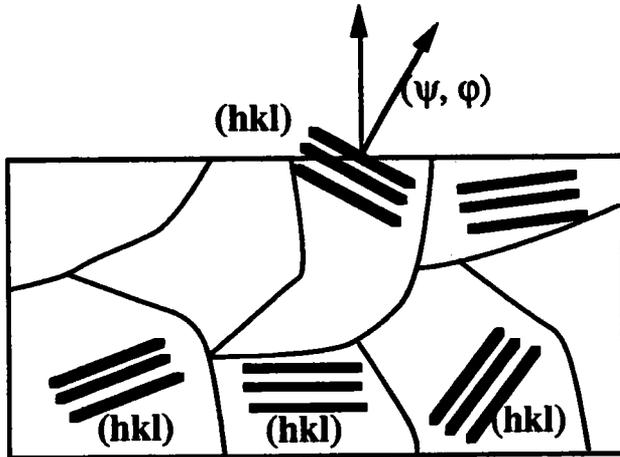
$$d_{hkl} = \left(F_{ij} \sigma_{ij}^I + q \langle \varepsilon_{sim}^{II} \rangle_{hkl} + 1 \right) d_{hkl}^0$$

A partir des constantes supposées connues $F_{ij}(\varphi, \psi)$, des déformations calculées et des distances interréticulaires mesurées d_{hkl} , les quantités d_{hkl}^0 , q et σ_{ij}^I sont déterminées par lissage à l'aide de la méthode des moindres carrés.

Annexe 4 :

Reconstruction de pics de diffraction à partir de l'état de contraintes dans chaque grain

Considérons une famille de plans (hkl) donnés dans un polycristal (figure A4.1)



\vec{N} est la normale à la surface de l'échantillon.

\vec{n} est la normale à une famille (hkl) dans un grain, \vec{n} est repérée par (φ, ψ) par rapport au repère macroscopique.

Figure A4.1 : Distribution de plans (hkl) dans un polycristal.

Du fait des désorientations entre grains, seuls les plans (hkl) de quelques grains sont en position de diffraction, d'où la notion de volume diffractant.

Une condition nécessaire de diffraction est que \vec{n} et \vec{m} , la direction du cône de diffraction, coïncident (figure A4.2).

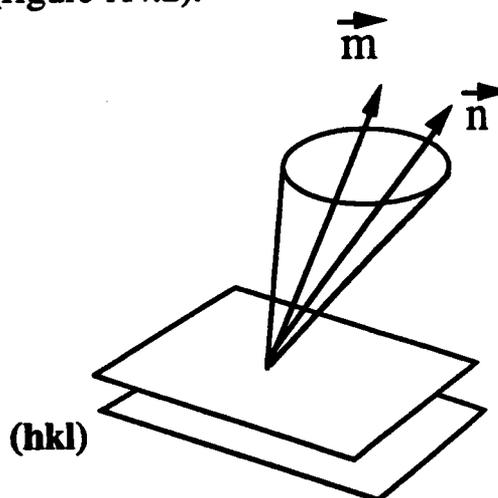


Figure A4.2 : Condition de diffraction du plan (hkl).

De part les divergences du faisceau incident (de l'ordre du degré) ainsi que des oscillations du faisceau nécessaires à améliorer la statistique du volume diffractant ($\sim 3^\circ$), il suffit donc que \bar{n} et \bar{m} soient dans un cône d'ouverture environ 4° .

Un plan (hkl) en position de diffracter vérifie la condition de cohérence géométrique dite de Bragg :

$$2 d_{hkl} \sin \theta = n \lambda$$

où d_{hkl} est la distance interréticulaire du plan (hkl),
 n est l'ordre de diffraction,
 λ est la longueur d'onde du faisceau utilisé,
 θ est l'angle de diffraction.

Tout ceci est décrit schématiquement sur la figure A4.3.

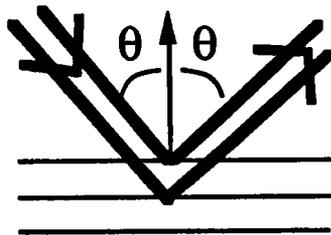


Figure A4.3 : Diffraction d'un plan (hkl).

On a la relation déjà vue précédemment,

$$d_{hkl} = (1 + \langle \epsilon^{el} \rangle_{hkl}) d_{hkl}^0$$

avec

$$d_{hkl}^0 = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

où a est le paramètre de maille du matériau étudié.

De même,

$$\langle \varepsilon^{el} \rangle_{hkl} = \frac{1}{V_D} \int_{V_D} C_{ijkl}^{-1}(\mathbf{r}) \sigma_{kl}(\mathbf{r}) n_i n_j dV$$

où V_D est le volume diffractant

\vec{n} est la normale au plan (hkl), coïncidant avec la direction de mesure, qui vérifie donc

$$\vec{n} \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \psi \\ \sin \varphi \sin \psi \\ \cos \psi \end{pmatrix}$$

Les mêmes orientations de plans cristallographiques sont choisies dans chaque phase d'un grain. Par conséquent, les deux phases H et S d'un grain apporteront leur contribution simultanément lorsque le plan (hkl) de ce grain sera en position de diffracter.

On a alors, dans chaque phase en moyenne pour ce grain,

$$\langle \varepsilon^{el} \rangle_{hkl}^S = C_{ijkl}^{-1} \sigma_{kl}^S n_i n_j$$

$$\langle \varepsilon^{el} \rangle_{hkl}^H = C_{ijkl}^{-1} \sigma_{kl}^H n_i n_j$$

On en déduit les angles de diffraction correspondants, ils diffèrent du fait d'un état de contraintes local différent, suivant

$$\theta_{hkl}^\alpha = \text{Arcsin} \left(\frac{\lambda}{2d_{hkl}^\alpha} \right)$$

Le schéma autocohérent développé dans ce travail permet d'accéder à l'état résiduel de contraintes du polycristal, pour les deux phases de chaque grain. Pour un couple (φ, ψ) donné ainsi que pour une famille de plans (hkl) déterminée, la distribution des angles de diffraction θ_{hkl}^S et θ_{hkl}^H s'obtient en effectuant l'opération suivante pour chaque grain du polycristal :

- 1) Vérification de la condition de diffraction,
- 2) Calcul des angles θ_{hkl}^S et θ_{hkl}^H correspondants en cas de diffraction.

Une contribution identique est supposée pour chaque grain du volume diffractant, du fait de l'utilisation de fractions volumiques correspondantes identiques.

Les distributions θ_{hkl}^α ($\alpha = H,S$) sont présentées sur la figure A4.4, chaque contribution étant décrite par un Dirac :

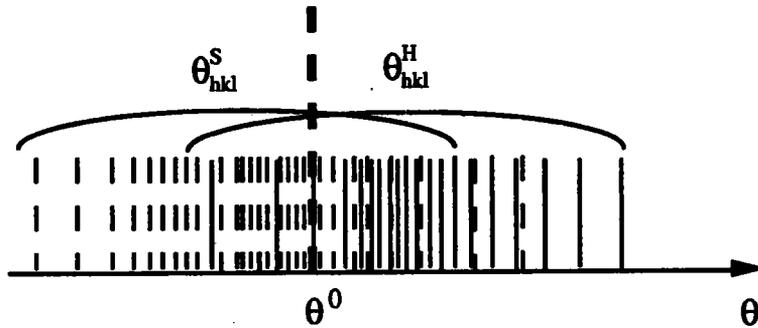


Figure A4.4 : Représentation schématique des distributions θ .

où θ_{hkl}^0 est la réponse en diffraction du matériau non contraint. On a

$$\theta_{hkl}^0 = \text{Arcsin}\left(\frac{\lambda}{2d_{hkl}^0}\right)$$

Une raie de diffraction correspond en fait à la densité de probabilité d'une distribution d'angles de diffraction.

Ce type de représentation, basé sur des densités de probabilité, est adapté lorsque la statistique des angles de diffraction est fournie, avec de nombreuses orientations en position de diffracter.

Mais ce n'est pas le cas en général, un polycristal de 10000 orientations (une orientation correspondant à un grain) ayant au maximum de l'ordre de 500 grains en position de diffraction avec le critère adopté dans ce travail.