



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>

Thèse

présentée par

Nicolas NICAISE

pour l'obtention du grade de

Docteur

de

l'Université Paul Verlaine de Metz
Spécialité « Mécanique »

Effets de longueur interne sur les propriétés effectives des polycristaux métalliques : applications aux aciers

Soutenue le 6 novembre 2009 devant le jury composé de :

M. Olivier CASTELNAU, Directeur de Recherche, LPMTM, Université Paris XIII	Rapporteur
Mme. Colette REY, Professeur, LMSSMat, École Centrale Paris	Rapporteur
M. François SIDOROFF, Professeur, LTDS, École Centrale Paris	Examineur
M. Thomas BÖHLKE, Professeur, FKM, Université de Karlsruhe	Examineur
M. Francis WAGNER, Professeur, LETAM, Université Metz	Examineur
M. Xavier LEMOINE, Docteur Ingénieur, ArcelorMittal Research, Maizières les Metz	Examineur
M. Marcel BERVEILLER, Professeur, LPMM, ENSAM Metz	Directeur de thèse
M. Stéphane BERBENNI, Chargé de Recherche, LPMM, ENSAM Metz	Co-encadrant de thèse

Résumé

Ce travail a pour but d'étudier les effets des longueurs internes, comme la taille des grains, sur le comportement mécanique des aciers IF par le biais de modélisations micromécaniques. Après une revue bibliographique des différents effets d'échelle observés en plasticité (effet taille des grains) et de quelques méthodes de transition d'échelle existantes, ce travail se décompose en trois étapes.

Dans un premier temps, un schéma auto-cohérent écrit dans le cadre de l'élasto-viscoplasticité est utilisé afin d'étudier les effets de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins, en négligeant les hétérogénéités d'origine cristallographique. Ces effets sont aussi importants que ceux de la taille moyenne des grains et de la texture cristallographique.

Dans un second temps, le même schéma de transition d'échelle est utilisé afin d'étudier les effets combinés de la dispersion de taille de grains et des orientations cristallographiques. Il apparaît alors que l'effet de la dispersion de taille de grains est effectivement plus important que l'effet de la texture cristallographique sur le comportement mécanique en traction. Néanmoins, la dispersion de taille de grains n'a que peu d'effet sur l'anisotropie plastique des aciers IF.

La troisième étape consiste à développer de nouvelles approches, à champs de déformation non uniformes dans les grains, afin de capter des effets de taille de grains par le biais de nouvelles lois d'interaction. Ainsi, deux différentes modélisations à longueurs internes sont proposées : l'une "discrète", considérant des distributions de dislocation contrainte au joint de grains, et l'autre "moyenne", avec la prise en compte d'un gradient de déformation plastique dans une zone près du joint de grains. Ces nouvelles approches permettent de reproduire les effets de taille de grains sur le comportement mécanique des matériaux métalliques, en particulier pour les aciers IF.

Mots clés : Microstructure, Longueurs Internes, Taille des grains, Hétérogénéités Plastiques, Matériau élasto-viscoplastique, Aciers IF, Schéma auto-cohérent

Abstract

The objective of this work is to study the effects of internal lengths, as the grain size on the mechanical behavior of IF steels with micromechanical models. After a literature review about different length scale effects observed in plasticity (grain size effects...) and existing scale transition methods, this work is divided into three steps.

First of all, a self-consistent scheme written for heterogeneous elastic-viscoplastic materials is used to study the grain size dispersion effects on the mechanical behavior of polycrystalline aggregates, ignoring the heterogeneities of crystallographic orientations. These effects are as important as those due to the average grain size and crystallographic texture.

In a second time, the same transition scale scheme is used to study the combined effects of grain size dispersion and crystallographic orientation. It appears that the effect of the grain size dispersion is larger than the effect of crystallographic texture on the tensile behavior.

The third step is to develop new approaches with non-uniform plastic deformation inside the grain, in order to capture the effects of grain size through new interaction laws. Thus, two different models are proposed : a “discrete” one, considering dislocation distributions constrained by grain boundaries, and, an “averaged” one, accounting for plastic strain gradient in the region close to grain boundaries. These new approaches allow to reproduce the grain size effects observed on the mechanical behavior of metallic materials, in particular for IF steels.

Keywords : Microstructures, Internal Lengths, Grain Size, Plastic Heterogeneities, Elastic-viscoplastic material, IF steels, Self-Consistent scheme

Remerciements

Je tiens tout particulièrement à remercier Marcel Berveiller de m'avoir permis de réaliser cette thèse au sein de l'équipe Rhéologie et Microstructure du Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux (LPMM), et Stéphane Berbenni pour m'avoir encadré au cours de ces quatre années.

Je remercie Etienne Patoor de m'avoir accueilli au LPMM.

Je remercie Xavier Lemoine, Olivier Bouazziz, Raphaël Pesci, Véronique Favier, Sophie Berveiller et Francis Wagner pour les différentes collaborations que nous avons eues.

Je remercie Christophe Collard, Denis Bouscaud, Marc Wary, Serge Dominiak pour leurs aides précieuses dans mes démarches scientifiques.

Je remercie mes camarades doctorants et post-doctorants, Jean-Marc, Thiebaud, Gérard, Christophe, Eddy, Tarek, Olivier, Camille, Vincent, Jérôme, Razane et Charles, pour l'ambiance de travail studieuse et décontractée.

Je remercie les membres des OBT qui m'ont permis de me défouler au cours de nos vols sur simulateur.

Je remercie mes amis, Stéphanie et Grégory, Nathalie et Grégory, Amélie et Nicolas, qui m'ont également permis de m'évader.

Je remercie ma famille, ma soeur, mon frère, ma mère et tous mes cousins qui furent à mes côtés.

Enfin, je remercie ma femme Caroline qui fut toujours à mes côtés et qui m'a soutenu tout au long de ma thèse.

Cette thèse est dédiée à la mémoire de mon père.

Table des matières

Résumé	i
Abstract	iii
Remerciements	v
Table des matières	xi
Liste des tableaux	xv
Table des figures	xix
Notations	xxi
Introduction générale	1
1 Méthodes de transition d'échelle et longueurs internes	5
1.1 Introduction	5
1.2 Effets de longueur interne sur le comportement mécanique des métaux	7
1.2.1 Effets de taille de grains sur le comportement mécanique macroscopique des matériaux métalliques	8
1.2.2 Effets de taille de grains sur la structure interne des grains de type cellule de dislocation	12
1.2.3 Effets de surface libre sur le comportement mécanique macroscopique	15
1.3 Rappel sur les techniques d'homogénéisation d'un milieu hétérogène .	18
1.3.1 Volume Elémentaire Représentatif	18
1.3.2 Méthodologie	20
1.3.3 Estimation autocohérente pour des comportements simples . .	22
1.3.4 Transition d'échelle en élasto-viscoplasticité	26
1.3.5 Autres modélisations de type auto-cohérent en élasto-viscoplasticité	38
1.3.6 Insuffisance des modèles micromécaniques à champs moyens .	40

1.4	Prise en compte phénoménologique de l'effet taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats par des modèles à transition d'échelle	40
1.5	Organisation du manuscrit	45
2	Effets de la dispersion des tailles de grain sur le comportement isotrope de matériaux hétérogènes élasto-viscoplastiques	47
2.1	Introduction	47
2.1.1	Distribution de taille de grain : loi de distribution log-normale	48
2.2	Loi d'interaction en élasticité homogène	57
2.3	Loi de comportement élasto-viscoplastique isotrope dépendante de la taille de grain	58
2.4	Paramètres matériaux et simulations étudiés	60
2.4.1	Influence de la taille et de la dispersion relative des tailles de grain sur le comportement mécanique macroscopique	61
2.4.2	Influence de la dispersion des tailles de grain sur les champs mécaniques locaux	67
2.5	Conclusions	72
3	Effets couplés de la dispersion de taille de grains et de l'orientation cristallographique sur le comportement mécanique d'aciers IF	73
3.1	Introduction	73
3.2	Loi de comportement en plasticité cristalline	75
3.2.1	Plasticité cristalline dans le cas de métaux C.C.	75
3.2.2	Comportement élastique et viscoplastique	77
3.2.3	Ecrouissage intracristallin	80
3.2.4	Détermination du module viscoplastique sécant des grains	84
3.2.5	Evolutions des orientations cristallines	85
3.3	Combinaison des effets de distributions de taille de grains et d'orientation cristallographique sur le comportement d'aciers IF	87
3.3.1	Présentation des matériaux étudiés	87
3.3.2	Identification des paramètres	93
3.3.3	Effets combinés de l'orientation cristallographique et de la taille de grains sur le comportement macroscopique	95
3.3.4	Effets combinés de l'orientation cristallographique et de la taille de grains sur l'énergie bloquée	99
3.3.5	Effets de texture et de taille de grains sur la réponse locale des grains	100
3.3.6	Effets de la dispersion de taille de grains et de la texture cristallographique sur l'anisotropie plastique globale des tôles	104
3.4	Conclusions	107

4	Longueurs internes associées à une microstructure de dislocations contraintes aux joints de grains et applications	109
4.1	Introduction	109
4.2	Longueurs internes et hétérogénéité des champs plastiques intragranulaires	111
4.2.1	Rappel de l’approche à champs moyens d’Eshelby	112
4.2.2	Formulation micromécanique d’événements plastiques discrets basée sur les transformées de Fourier	114
4.2.3	Vers une modélisation à champs moyens à longueurs internes en plasticité	120
4.3	Modèle d’homogénéisation à champs moyens à longueurs internes	123
4.3.1	Représentation moyenne des champs de dislocation continus et topologie du VER	124
4.3.2	Lois de comportement locales et lois d’évolution des variables internes	127
4.3.3	Applications aux aciers IF	130
4.4	Conclusions	136
	Conclusions et perspectives	137
	Bibliographie	141
A	Procédure numérique	153
B	Calcul d’une densité de dislocation géométriquement nécessaire scalaire dans une couche	155

Liste des tableaux

1.1	Synthèse des effets de taille de grains sur les caractéristiques macroscopiques des matériaux métalliques	12
2.1	Caractéristiques des lois de distribution log-normales présentées sur la figure (2.2)	51
2.2	Paramètres et données principales des distributions log-normales utilisées	55
2.3	Paramètres de la loi de comportement pour un acier bas carbone	61
3.1	Indexation des plans et directions de glissement	82
3.2	Matrice d'anisotropie du glissement plastique pour des réseaux cubiques centrés à 2 paramètres (a_1, a_2)[LBRM95]	83
3.3	Compositions chimiques partielles des deux aciers IF étudiés	88
89table.3.4		
3.5	Surfaces et distributions de taille de grains analysées par EBSD pour les deux aciers IF	90
3.6	Différents cas étudiés	93
3.7	Paramètres matériaux identifiés dans le cas 1 sur des chargements de traction uniaxiale	94
3.8	Etendues des champs mécaniques locaux	103
3.9	Coefficients de Lankford obtenus expérimentalement et par simulations pour les différents cas traités	106
4.1	Frictions de réseau σ_0 estimées en fonction de la composition chimique partielle et du diamètre moyen des différents aciers IF étudiés. Il est à noter que ce type d'acier a une très faible teneur en carbone afin de limiter les atomes interstitiels	130
4.2	Paramètres matériaux, pour des aciers IF, supposés indépendants de la composition chimique.	132

Table des figures

1.1	Effets de la taille de grains sur le comportement macroscopique pour des aciers bas carbone à grains fins [SPR05]	8
1.2	Description de la résistance mécanique σ_{max} , de la ductilité A%, de la longueur du plateau de Lüders $\varepsilon_{Lü}$ et la limite d'élasticité σ_e	9
1.3	Diagramme de Hall-Petch pour l'or (a) [CJ05] et pour le nickel (b) [Han04]	9
1.4	Effets de taille de grains sur la limite d'élasticité pour des acier bas carbone à grains fins [SPR ⁺ 06] (a) et représentation schématique de la dépendance à la taille de grains de la limite d'élasticité pour des tailles de grain micrométriques à nanométriques [KSS03] (b)	10
1.5	Effets de taille de grains sur la longueur du plateau de Lüders pour des aciers bas carbone à grains fins [SPR05] (a) et effets de taille de grains sur la limite d'élasticité σ_{lys} et la longueur du plateau de Lüders ε_L pour des aciers Armco [BLD71] (b)	11
1.6	Effets de taille de grains sur la sensibilité à la vitesse de déformation pour le cuivre (a) et les aciers (b)[WG08]	11
1.7	Effets de taille de grains sur la taille des cellules de dislocation au cours d'un chargement de laminage, pour des taux de réduction de 20% à 75%, pour le cuivre [Gra95], avec d la taille de cellule de dislocation et D la taille de grain	13
1.8	Effets de taille des cellules de dislocation sur la limite d'élasticité ($\sigma_{flow}/(\mu b)$) (a) et effets de taille de grains sur la limite d'élasticité ($(\sigma_{flow} - \sigma_0)/(\mu b)$) (b) pour le cuivre, le fer et l'aluminium [OO07], les données expérimentales provenant de [SH72]	14
1.9	Effets de taille de grains sur la densité de dislocation moyenne pour du cuivre à une déformation donnée [Con04]	14
1.10	Effets de taille sur le comportement macroscopique de film mince libre de substrat au cours d'un chargement de traction [EPP04]	16
1.11	Représentation schématique d'un film mince et des zones déformées plastiquement pour un film d'épaisseur plus importante que la taille de grains (a) et plus faible que la taille de grains (b) [SMM ⁺ 09]	17

1.12	Effets de diamètre sur le comportement macroscopique en compression de micro-pilier ayant une orientation cristallographique $\langle 134 \rangle$ (A). Micrographies d'un micro-pilier de $20 \mu m$ de diamètre après une déformation de 4% (B) et d'un micro-pilier de $5 \mu m$ de diamètre après une déformation de 19% (C) [UDFN04]	18
1.13	Représentation des hétérogénéités de déformation	19
1.14	Séparation des échelles et VER	19
1.15	Représentation schématique des relations existantes entre les différents champs mécaniques locaux et macroscopiques avec les différentes étapes (approche en déplacement imposées), avec : (1) la représentation, (2) la localisation et (3) l'homogénéisation	20
1.16	Représentation du schéma auto-cohérent (à un site)	23
1.17	Modèle série de Maxwell	28
1.18	Comparaison de l'approche de Kröner-Weng [Krö61][Wen81] à celle à champs translatsés [Ber02][SBFB02][BFLB04], au niveau de la description du champ local de déformation viscoplastique	
1.19	Effets de taille de grains sur le comportement mécanique (a) et sur le seuil d'écoulement pour des déformations de 5%, 10% et 20% (b) pour des agrégats polycristallins de cuivre soumis à un trajet de traction [Wen83]	41
1.20	Effets de taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins de cuivre soumis à un trajet de traction [SPB06]	42
1.21	Effets de taille moyenne de grain sur le comportement mécanique (a) et effets de la dispersion relative de taille de grains sur la limite d'élasticité (b) au cours de simulations numériques de traction pour des agrégats polycristallins de cuivre [RSPT08a]	43
1.22	Effets de taille de grains et de dispersion relative $\Delta D/D$ sur la limite d'élasticité d'agrégats polycristallins de cuivre soumis à un trajet de traction [RBD09]	44
2.1	Evolution de la distribution de taille de grains de type log-normal pour un acier IF au cours de la recristallisation [SAGJJ06]	48
2.2	Effets conjugués des paramètres M à S fixes (a) et S à M fixes (b) sur l'allure de la loi de probabilité log-normale	50
2.3	Effets conjugués des paramètres M à S fixes (a) et S à M fixes (b) sur la fonction de répartition de la loi de probabilité de type log-normal	52
2.4	Représentation d'un VER composé de grains sphériques dont la position spatiale est indépendante de leur taille	53
2.5	Distributions log-normale pour une taille moyenne de $4 \mu m$ (a) et de $80 \mu m$ (b)	56

2.6	Distributions log-normales continue (a) et discrétisée (b) de taille de grains	57
2.7	Effets de la taille et de dispersion des tailles de grain sur le comportement mécanique en traction pour une taille moyenne de grain de 4 μm (a) et de 80 μm (b)	62
2.8	Effets de la taille et de dispersion des tailles de grain sur la limite d'élasticité macroscopique	63
2.9	Courbes de traction-compression pour une taille moyenne de grain de	64
2.10	Effets de la taille et de la dispersion des tailles de grain sur l'effet Bauschinger en traction-compression	64
2.11	Evolution de l'énergie bloquée W_b au cours d'essais de traction-compression, pour une taille moyenne de grain D_{moyen} de 80 μm et des dispersions des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b), et pour une taille moyenne de grain D_{moyen} de 4 μm et des dispersions de taille de grains $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (c) et 5 (d)	66
2.12	Evolution des champs de déformations en fonction de la taille du grain, pour une taille moyenne D_{moyen} de 80 μm et des dispersions de taille $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b)	68
2.13	Evolution des champs de déformation plastique locaux en fonction de la taille du grain, pour une taille moyenne D_{moyen} de 4 μm et des dispersions des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b)	69
2.14	Evolution des champs de contrainte locaux en fonction de la taille des grains, pour une taille moyenne D_{moyen} de 80 μm et des dispersions des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b)	70
2.15	Evolution des champs locaux de contrainte en fonction de la taille des grains, pour une taille moyenne D_{moyen} de 4 μm et des dispersions des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b)	71
2.16	Effets d'anisotropie cristalline sur le comportement mécanique local [LBRM95]	72
3.1	Systèmes de glissement dans un réseau de type cubique centré : systèmes appartenant aux familles $\{110\} \langle 111 \rangle$ (a) et $\{112\} \langle 111 \rangle$ (b)	76
3.2	Vitesses des dislocations de type coin dans un alliage Fer-Silicium (à 3,25% de silicium, réseau CC) pour quatre températures en fonction de la contrainte de cisaillement appliquée [SL60]	78
3.3	Courbe cission-glissement pour des monocristaux de fer- α ayant différentes orientations cristallographiques [KN67]	80
3.4	Définition des angles d'Euler au sens de Bunge [BE97]	85

3.5	Courbes contrainte-déformation conventionnelles expérimentales en traction pour les deux aciers	88
3.6	Image EBSD en contraste de bande de l'acier IF1 dans le plan de la tôle	89
3.7	Image EBSD en contraste de bande de l'acier IF2 dans le plan de la tôle	90
3.8	Distribution de taille de grain, par pas de $1 \mu m$, des aciers IF1 (a) et	91
3.9	ODF de l'acier IF1 représentée à $\varphi_2 = 45^\circ$ obtenue après mesure EBSD	91
3.10	ODF de l'acier IF2 représentée à $\varphi_2 = 45^\circ$ obtenue après mesure EBSD	92
3.11	Identification des paramètres matériaux en traction uniaxiale	94
3.12	Courbes contrainte-déformation en traction, pour les quatre cas, pour l'acier IF1 (a) et l'acier IF2 (b)	96
3.13	Comportement macroscopique en traction pour les 9 agrégats fictifs	98
3.14	Evolution de la limite d'élasticité	98
3.15	Evolution de l'énergie bloquée en traction, dans les quatre cas, pour l'acier IF1 (a) et l'acier IF2 (b)	99
3.16	Evolutions des champs locaux, au cours du chargement, des aciers IF1 (a) et IF2 (b) pour les cas 1 et 2	101
3.17	Evolutions des champs locaux, au cours du chargement, des aciers IF1 (a) et IF2 (b) pour les cas 3 et 4	102
3.18	Orientation géométrique d'une éprouvette en vue d'essais de traction pour caractériser les coefficients de Lankford	104
3.19	Evolutions des déformations transverses en fonction des déformations longitudinales de l'éprouvette, pour un angle θ de 0° pour l'acier IF1 (a) et un angle θ de 45° pour l'acier IF2 (b)	105
3.20	Mise en évidence de l'influence de la morphologie des grains sur les coefficients de Lankford réalisée à l'aide de plusieurs modèles [DMS ⁺ 09]	107
4.1	Schéma du problème de l'inclusion plastique d'Eshelby [Esh57]	113
4.2	Image obtenue par AFM permettant de visualiser des bandes de glissement dans des grains d'une éprouvette d'acier inoxydable. La direction de traction est verticale par rapport à l'image AFM [FMCC06]	114
4.3	Représentation du problème d'une inclusion sphérique, à champs de déformation plastique intragranulaire discret et périodique (associé à des boucles de dislocation circulaires), noyée dans une matrice purement élastique [BBR08]	117
4.4	Mise en évidence de l'hétérogénéité des contraintes internes suivant la direction x_3 du repère local du grain dans le grain [BBR08]	118

4.5	Représentation d'une couche proche du joint de grains d'épaisseur l , en utilisant un critère permettant la définir comme une calotte sphérique. Evolution de l en fonction de R/h [BBR08]	119
4.6	Représentation de la désorientation intragranulaire le long d'une ligne (en pointillés), dans la direction transverse, sur un grain pour une déformation de l'éprouvette de 14,4%. La désorientation est représentée par rapport à l'orientation cristallographique au centre du grain (a) puis par rapport au point adjacent (b) [KWT05]	120
4.7	Répartition spatiale des deux types de dislocation et des longueurs internes λ et D présentes dans un grain	121
4.8	Représentation du cœur et de la couche d'épaisseur λ pour un grain de diamètre D	124
4.9	Evolutions des fractions volumiques de la couche (C) et du coeur (I) du grain en fonction du diamètre D du grain pour une épaisseur de couche $\lambda = 0,15\mu m$	125
4.10	Représentation d'un gradient linéaire des taux de déformation plastique dans une couche d'épaisseur λ en rouge. Ce gradient linéaire permet de définir ρ_g au sens d'Ashby [Ash70]. Et représentation des taux de déformation plastique uniformes par morceaux sur un grain en noir.	126
4.11	Représentation du VER, du cœur (I) et de la couche (C) du grain dans le milieu homogène équivalent (MHE)	127
4.12	Comparaisons entre les essais expérimentaux de traction simple (données fournies par ArcelorMittal) et les simulations effectuées pour une épaisseur de couche λ fixe de $0,15\mu m$ et plusieurs tailles moyennes de grain	131
4.13	Evolution du seuil d'écoulement, au cours du chargement pour des déformations de 2, 5 et 10%, en fonction de la taille de grains [PNB+09]	132
4.14	Mise en évidence de la dépendance à la taille moyenne des grains du taux d'écrouissage avant 10% de déformation (a) et de l'absence de dépendance après 10% de déformation (b) (pour des essais de traction simple) [SPB06]	133
4.15	Evolution des contraintes et des déformations plastiques globales et locales au sein des deux phases (couche et coeur des grains)	134
4.16	Evolution des densités de dislocation au sein des deux phases (couche et coeur des grains) en fonction de la déformation plastique locale dans la direction de traction	135
A.1	Représentation du modèle auto-cohérent incrémental utilisé dans cette thèse	153

Notations

Notations

Notations condensées :

- d'un vecteur X : \underline{X}
- d'un tenseur d'ordre 2 X : $\underline{\underline{X}}$
- d'un tenseur d'ordre 4 X : $\underline{\underline{\underline{X}}}$

Notations indicielles :

- d'un vecteur X : X_i
- d'un tenseur d'ordre 2 X : X_{ij}
- d'un tenseur d'ordre 4 X : X_{ijkl}

Opérations tensorielles :

Notations indicielles :

· représente le produit contracté, nous avons alors :

- entre deux vecteurs \underline{A} et \underline{B} : $\underline{A} \cdot \underline{B} = A_i B_i$
- entre deux tenseurs d'ordre 2 $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$: $\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}} = A_{ij} B_{jl}$
- entre deux tenseurs d'ordre 4 $\underline{\underline{\underline{A}}}$ et $\underline{\underline{\underline{B}}}$: $\underline{\underline{\underline{A}}} \cdot \underline{\underline{\underline{B}}} = A_{ijkl} B_{lmnp}$

: représente le produit doublement contracté, nous avons alors :

- entre deux tenseur d'ordre 2 $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$: $\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{B}} = A_{ij} B_{ij}$
- entre deux tenseurs d'ordre 4 $\underline{\underline{\underline{A}}}$ et $\underline{\underline{\underline{B}}}$: $\underline{\underline{\underline{A}}} : \underline{\underline{\underline{B}}} = A_{ijkl} B_{klmn}$

\otimes représente le produit dyadique, nous avons alors :

- entre deux vecteurs \underline{A} et \underline{B} : $\underline{A} \otimes \underline{B} = A_i B_j$
- entre deux tenseurs d'ordre 2 $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$: $\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} = A_{ij} B_{kl}$
- entre deux tenseurs d'ordre 4 $\underline{\underline{\underline{A}}}$ et $\underline{\underline{\underline{B}}}$: $\underline{\underline{\underline{A}}} \otimes \underline{\underline{\underline{B}}} = A_{ijkl} B_{mnpq}$

Introduction générale

La science cherche le mouvement perpétuel : elle l'a trouvé, c'est elle-même... Tout remue en elle, tout change, tout fait peau neuve... La science va sans cesse se raturant elle-même... Elle est l'asymptote de la vérité : elle approche sans cesse et ne touche jamais. "Œuvres complètes de Victor Hugo", Victor Hugo

Le contexte écologique et économique actuel pousse les constructeurs automobile à réduire, notamment, la consommation énergétique de leurs véhicules. Pour cela, ils peuvent s'orienter vers trois directions différentes.

Une première consiste à développer des motorisations permettant de tirer le meilleur parti des différentes sources d'énergie. Néanmoins, la technologie des moteurs à explosion atteint actuellement ses limites. De plus, la conscience écologique naissante pousse les motoristes vers de nouvelles motorisations (motorisation électrique, moteur à hydrogène...) n'offrant, pas encore, les mêmes performances que les motorisations thermiques.

La seconde est de développer de manière poussée l'aérodynamisme des véhicules dans le but de réduire leur traînée induite. Cette démarche est néanmoins limitée par des critères, notamment par rapport au confort et à l'esthétisme, devant permettre des ventes suffisamment nombreuses.

La troisième approche a pour objectif de réduire la masse des véhicules sans perdre la rigidité et la résistance au crash de la structure. Cette réduction est réalisable "facilement" en choisissant et en développant les matériaux adéquats. Ainsi, les aciers, utilisés aussi bien pour le châssis que pour la carrosserie d'un véhicule, sont développés afin d'améliorer les propriétés mécaniques (ductilité, résistance mécanique...).

Les aciers IF représentent un très bon compromis entre emboutissabilité et résistance mécanique grâce à une métallurgie spécifique sans éléments interstitiels

(“Interstitial Free” en anglais : IF). Ainsi, la quantité de carbone (principal élément d’addition interstitiel avec l’azote) présente dans ces aciers est inférieure à 0,005% (pourcentage en massique), et les éléments interstitiels restant sont stabilisés par ajout de titane ou niobium. Cette faible teneur en carbone donne aux aciers IF une microstructure purement ferritique.

Le durcissement est assuré à la fois par la mise en solution solide de manganèse, de silicium et de phosphore dans la ferrite et par la maîtrise de la taille moyenne et de la dispersion de taille de grain.

Les propriétés métallographiques citées précédemment procurent de bonnes caractéristiques d’emboutissabilité et notamment :

- un rapport R_e/R_m faible (avec R_e la limite d’élasticité et R_m la résistance mécanique),
- un coefficient d’écrouissage n élevé,
- un coefficient d’anisotropie r (Lankford) élevé.

Ainsi, les aciers IF ont un bon comportement en rétreint, une excellente aptitude à l’emboutissage profond et une bonne répartition des déformations. Ces capacités de mise en forme font des aciers IF les aciers idéaux (en fonction de leurs nuances) pour des éléments de carrosserie profondément emboutis (comme les hayons ou les passages de roue) ou des éléments de structure complexe (comme les longerons).

Le développement des aciers IF tend à encore améliorer ces propriétés dans le but de pouvoir réduire d’avantage les épaisseurs des tôles utilisées, et ainsi d’alléger la structure métallique des véhicules.

Ce perpétuel développement nécessite de nombreux essais mécaniques permettant de caractériser expérimentalement, parfois de façon empirique, les effets des éléments d’addition et de la microstructure sur les propriétés mécaniques des aciers à l’échelle macroscopique.

L’étude des impacts de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique de ces aciers et l’élaboration de modélisations micromécaniques permettant de retrouver les effets de la taille de grains constituent les principaux objectifs de cette thèse.

La connaissance des propriétés mécaniques locales permettrait d’envisager la ou les sources d’amélioration (ou d’altération) des propriétés mécaniques.

En effet, expérimentalement, alors que la détermination des champs mécaniques

macroscopiques est bien maîtrisée et rapide à mettre en uvre, la détermination des champs mécaniques à l'échelle microscopique (que nous appellerons champs mécaniques locaux) est plus complexe et fait appel à des techniques d'analyse particulières (application de mouchetis pour déterminer les champs de déformation par exemple).

Les approches numériques basées sur des méthodes de transition d'échelle, comme les schémas auto-cohérents, sont de plus en plus poussées et permettent de faire le lien entre les champs mécaniques macroscopiques et locaux. Ces approches permettent alors de contrôler les évolutions des champs mécaniques au sein de la microstructure, donnant alors accès à la fois aux contraintes et aux déformations locales à n'importe quel instant du chargement.

Une nouvelle approche du développement des aciers combine à la fois essais expérimentaux et résultats de calculs numériques ("alloy design" en anglais). Néanmoins, cette approche est encore limitée par les schémas de transition d'échelle. En effet, alors que les effets de la morphologie de la microstructure (sur le comportement mécanique) sont bien captés ou peuvent, le cas échéant, être encadrés par ces approches [BKRF00], les effets des longueurs internes de la microstructure ne sont pas encore captés par ces approches.

Dans cette thèse, deux approches seront abordées afin de palier l'absence d'effet de taille de grains des modèles auto-cohérents basés sur le modèle d'Eshelby. Le manuscrit est organisé de la manière suivante :

En premier lieu, une synthèse bibliographique souligne les différents effets de longueur interne sur le comportement mécanique macroscopique des métaux (sous forme "massive", de type film mince ou micro-pilier) et l'évolution au cours du temps des modèles micromécaniques auto-cohérents.

Le schéma auto-cohérent écrit en élasto-viscoplasticité et utilisant la technique des "champs translatés", développé par Paquin [Paq98] puis par Berbenni [Ber02], est alors décrit en détails. Les insuffisances de ces schémas auto-cohérents, par rapport à la prise en compte de la taille des grains, puis quelques approches permettant de contourner ces lacunes sont énoncées.

Dans un deuxième temps, le schéma auto-cohérent à champs translatés est mis en uvre dans une situation simplifiée afin de détecter d'éventuels effets de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique des matériaux hétérogènes. Les effets de taille de grain, sur le comportement mécanique macroscopique, seront captés en introduisant des longueurs internes au niveau des lois de comportement des grains.

Cette analyse se décompose alors en deux parties :

- l'étude de la dispersion de taille de grains seule (sans prendre en compte la texture cristallographique). Les lois de comportement local élasto-viscoplastique seront alors supposées isotropes. L'absence de texture mettra alors en évidence les impacts de la dispersion de taille de grain sur le comportement mécanique macroscopique des aciers IF isotropes.
- l'étude des effets combinés de la taille de grains et de la texture cristallographique. Les lois de comportement local seront alors décrites dans le cadre de la plasticité cristalline. Cette étude rendra compte des conséquences de la non-prise en compte de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique macroscopique des aciers IF.

Pour finir, deux modélisations micromécaniques permettant d'obtenir naturellement les effets de taille de grains sur les champs intragranulaires et la réponse macroscopique seront détaillées.

- La première approche, dite "discrète", consiste à prendre en compte la non-uniformité des champs de distorsion plastique intragranulaires induite par des distributions de boucles de dislocation contraintes par le joint de grains et d'examiner l'influence des longueurs internes associées à cette microstructure sur la répartition spatiale des contraintes internes en comparaison avec l'approche classique de l'inclusion plastique uniforme d'Eshelby [BBR08].
- La seconde approche continue, "non-locale", à champs moyens et à longueurs internes, fait appel à la théorie des dislocations géométriquement nécessaires. Cette approche sera appliquée aux aciers IF.

Chapitre 1

Méthodes de transition d'échelle et longueurs internes

1.1 Introduction

Au cours des décennies passées, des “effets de longueur interne” sur le comportement inélastique des matériaux métalliques ont été étudiés expérimentalement. L'étude des courbes de traction, par exemple, a permis la mise en évidence des effets de la taille des grains sur la limite d'élasticité et sur le seuil d'écoulement plastique des matériaux métalliques [Hal51][Pet53]. Ces effets de taille de grains dépendent à la fois de la structure du réseau cristallin, de la nature des éléments d'alliage constituant le métal étudié, de la microstructure et des mécanismes de déformation (glissement plastique, maclage...).

Mais, ces effets ne sont pas les seuls effets de taille observables au cours des chargements en traction : il apparaît également des effets de taille de grains sur la ductilité du matériau, sur la longueur des plateaux de Lüders ou encore sur la limite à rupture du matériau.

L'affinement des tailles de grain vers le nanomètre a depuis mis en évidence un effet Hall-Petch “classique” pour des tailles de grain de l'ordre du micromètre et un effet Hall-Petch inverse pour des tailles de grain nanométriques ($d < 100nm$)[LW07]. L'inversion de l'effet Hall-Petch est notamment due à des mécanismes de déformation différents aux deux échelles (micrométrique et nanométrique).

L'utilisation du microscope électronique, afin d'observer l'organisation des cellules de dislocation, au cours d'un chargement par exemple, a également mis en

évidence un effet de la taille des grains sur le diamètre des cellules de dislocation [Gra95]. Ces observations à l'échelle microscopique ont apporté les premiers éclaircissements sur la provenance des effets de taille de grains sur le comportement mécanique du matériau.

Parallèlement et indépendamment de ces observations expérimentales, ces cinquante dernières années, les techniques de transition d'échelle ont été développées afin de déterminer le comportement mécanique effectif de matériaux hétérogènes en s'appuyant sur les lois de comportement locales des constituants et de leurs microstructures.

La qualité d'une modélisation micromécanique dépend de la capacité de la transition d'échelle à prendre en compte les mécanismes de déformation et les interactions physiques (interactions entre le joint de grains et les dislocations par exemple). Celle-ci doit fournir les relations entre les champs mécaniques locaux et les champs mécaniques globaux en utilisant les équations de champs "classiques".

Les modèles de transition d'échelle "simples", comme les modèles (classiques) de Voigt [Voi89] et Reuss [Reu29] pour les comportements linéaires et les modèles de Taylor [Tay38] et Sachs [Sac28] pour les comportements non linéaires, permettent de simplifier l'étape de "localisation" des champs. Néanmoins, ces méthodes de transition d'échelle sont soit trop souples (modèle de Reuss et Sachs) soit trop raides (modèle de Voigt et Taylor).

La procédure de transition d'échelle auto-cohérente a permis d'estimer de manière plus précise les interactions et les effets des hétérogénéités intergranulaires en utilisant les propriétés des fonctions de Green. Elle est bien adaptée aux cas des milieux aléatoires comme les polycristaux métalliques.

La procédure auto-cohérente a été développée dans le cadre de la (thermo)élasticité linéaire [Her54][Krö67][ZD73], puis étendue aux cas non linéaires (comme les comportements élastoplastiques et viscoplastiques) par l'intermédiaire de modélisations incrémentales [Hil65][Hut76][BZ79], tangentes [MCA87][LT93] et affines [MZ99].

Pour des lois de comportement de type élastique, élastoplastique et viscoplastique, les lois de comportement macroscopique (effective) et microscopique (locale) ont la même structure. Néanmoins, dans des cas plus complexes, c'est à dire dans le cas de lois de comportement couplées (comme l'élasto-viscoplasticité, l'électrostriction ou encore la transformation martensitique) des problèmes plus délicats apparaissent.

L'utilisation d'une modélisation basée sur la Méthodes des Eléments Finis (MEF) est apparue comme une alternative aux méthodes de transition d'échelle traditionnelles grâce aux avancées de l'informatique.

Tout d'abord utilisée pour décrire le comportement mécanique, en tout point, de bi- ou tri-cristaux [HKTL90], l'évolution des moyens de calcul a rapidement permis

d'augmenter le nombre de grains des agrégats étudiés par le biais de cette méthode [DRR00][DMS⁺09] [BLC09]. L'avantage, par rapport aux méthodes de transition d'échelle classiques, provient de la faculté à connaître les champs mécaniques en tout point (de part la décomposition de l'agrégat en éléments finis). Néanmoins, avec la MEF classique, seuls les degrés de liberté de translation sont pris en compte. L'absence des degrés de liberté de rotation "impose" une théorie continue des dislocations essentiellement statiques. La méthode des éléments finis à milieux continus généralisés (comme les milieux de Cosserat), mise en évidence par Günther [Gün58], considère les six degrés de liberté (trois translations et trois rotations) et permet ainsi une description dynamique des dislocations par le biais de lois de comportement [Zeg05].

Il est surprenant que les outils micromécaniques (schéma auto-cohérent, Méthode des Eléments Finis...) n'aient pas pu capter un effet des longueurs internes sur le comportement inélastique macroscopique d'agrégats polycristallins et en particulier les effets de taille de grain.

L'objectif de ce travail est de présenter les différents effets des longueurs internes, et notamment les effets de taille de grain, sur les propriétés mécaniques des matériaux métalliques, puis d'expliquer les avantages et les insuffisances des modèles micro-macro à champs moyens pour quelques classes de comportement simple et de manière plus détaillée dans le cas de l'élasto-viscoplasticité des matériaux hétérogènes.

Dans un premier temps, la notion de Volume Élémentaire Représentatif sera définie, puis la méthodologie générale appliquée aux techniques de transition d'échelle sera expliquée pour des cas simples. Nous nous intéresserons ensuite aux insuffisances des modèles micro-macro à champs moyens, type modèle auto-cohérent, dans la prédiction des effets de taille en plasticité (effets de taille de grains par exemple) et nous verrons comment prendre en compte les longueurs internes associées à la microstructure. Nous concluons ce chapitre en énonçant les objectifs de la thèse et les volets explorés dans les chapitres suivants.

1.2 Effets de longueur interne sur le comportement mécanique des métaux

Depuis la découverte de l'effet de taille de grains sur la limite d'élasticité des matériaux métalliques, communément appelé effet Hall-Petch [Hal51][Pet53], de nombreux autres effets de longueur interne ont été mis en évidence sur le comportement mécanique des métaux. Dans ce paragraphe, nous proposons une vue

d'ensemble de ces effets pour plusieurs classes de matériaux se déformant plastiquement de manière dépendante ou indépendante du temps.

1.2.1 Effets de taille de grains sur le comportement mécanique macroscopique des matériaux métalliques

Les effets de la taille de grains (taille de grains moyenne) sur le comportement mécanique macroscopique des matériaux métalliques furent les premiers effets de longueur interne mis en évidence. Ces effets de taille sont présents sur la courbe contrainte-déformation en traction simple, comme cela est le cas sur la figure (1.1) pour des aciers au manganèse et pour des grains de taille de l'ordre du micromètre [SPR05].

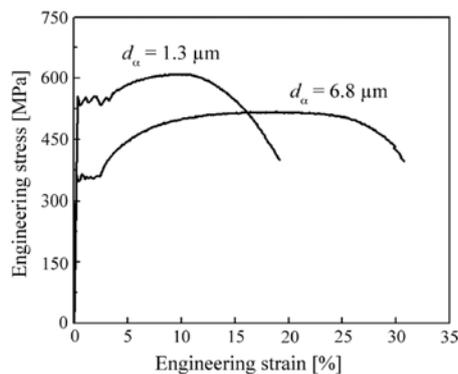


FIG. 1.1 – Effets de la taille de grains sur le comportement macroscopique pour des aciers bas carbone à grains fins [SPR05]

Il apparaît alors que la taille des grains a une influence sur la résistance mécanique σ_{max} , la ductilité $A\%$, la longueur du plateau de Lüders $\varepsilon_{Lü.}$ et sur la limite d'élasticité σ_e . Toutes ces grandeurs sont définies sur la figure (1.2).

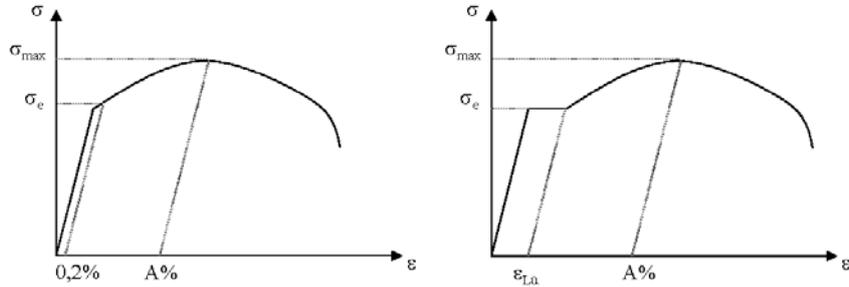
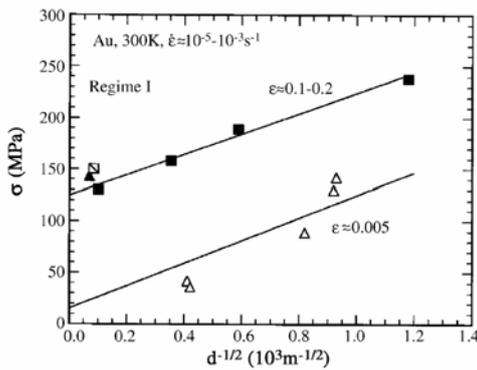


FIG. 1.2 – Description de la résistance mécanique σ_{max} , de la ductilité A%, de la longueur du plateau de Lüders $\varepsilon_{Lü}$ et la limite d'élasticité σ_e

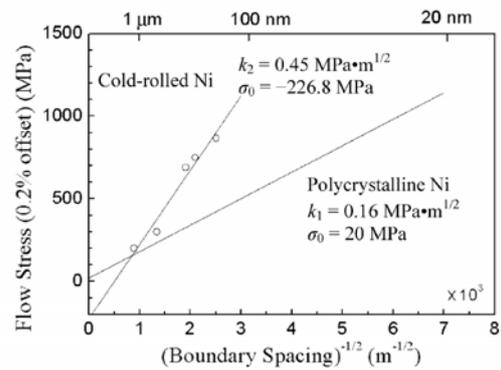
L'effet de taille de grains sur la limite d'élasticité, visible aussi bien pour l'or (figure (1.3a)) [CJ05] que pour le nickel (figure (1.3b)) [Han04] ou l'acier, donne lieu à la relation générale dite de "Hall-Petch" suivante :

$$\sigma_e = \sigma_0 + k \cdot D^{-n} \quad (1.1)$$

où σ_e est la limite d'élasticité, σ_0 est la limite d'élasticité du monocristal liée à la friction de réseau, k est une constante et n est une puissance généralement comprise entre 0,5 et 1.



(a)



(b)

FIG. 1.3 – Diagramme de Hall-Petch pour l'or (a) [CJ05] et pour le nickel (b) [Han04]

Néanmoins, de nombreuses études récentes, comme celles de Song et al. [SPR+06] et de Li et Weng [LW07], ont démontré que l'effet Hall-Petch n'est valable que pour

des matériaux dont la taille des grains est supérieure au micromètre. Par contre, pour des tailles de grain nanométriques, nous observons une inversion de la loi de Hall-Petch appelée effet Hall-Petch inverse (figure 1.4).

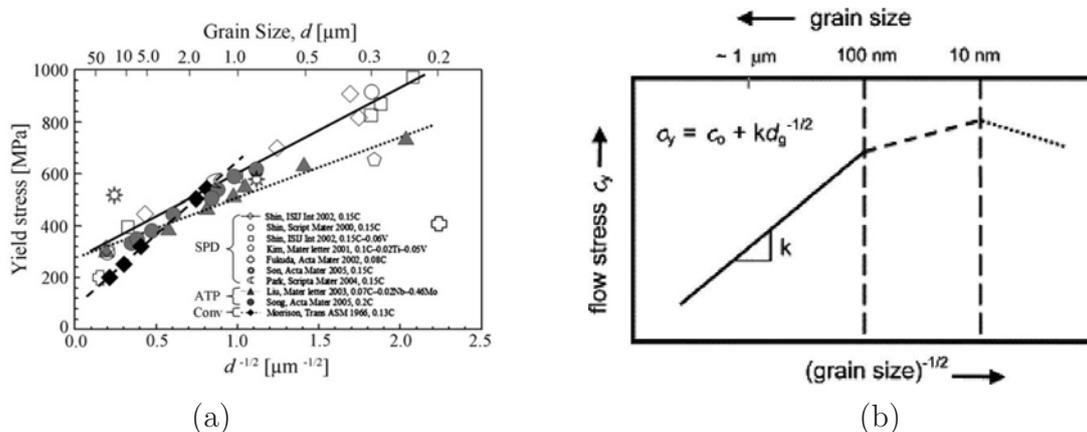


FIG. 1.4 – Effets de taille de grains sur la limite d'élasticité pour des acier bas carbone à grains fins [SPR+06] (a) et représentation schématique de la dépendance à la taille de grains de la limite d'élasticité pour des tailles de grain micrométriques à nanométriques [KSS03] (b)

Il est également à noter que la longueur du plateau de Lüders, visible sur la figure (1.1), est également influencée par la taille des grains (figure (1.5)). Cet effet a fait l'objet des études de Hayes et al. et Wang et Prangnell [HKP00][WP02] pour l'aluminium fortement allié dont la taille moyenne des grains est comprise entre 400 nm à 20 μm . D'après ces travaux, la longueur du plateau de Lüders est inversement proportionnelle à la racine carrée de la taille moyenne des grains, à l'image d'une relation de type Hall-Petch sur cette longueur.

Néanmoins, ce type de relation n'est pas vérifié pour les aciers [BLD71]. En effet, d'après la figure (1.5b) il apparaît que le plateau de Lüders n'est pas inversement proportionnel à $1/\sqrt{D}$. Pour des grains nanométriques, le plateau de Lüders devient important. D'après Song et al. [SPR+06], cette augmentation de la longueur du plateau, pour des grains de l'ordre du micromètre, est liée à une faible densité de dislocation mobile, une absence de source de dislocation et un faible taux d'écroissage des grains de petites tailles.

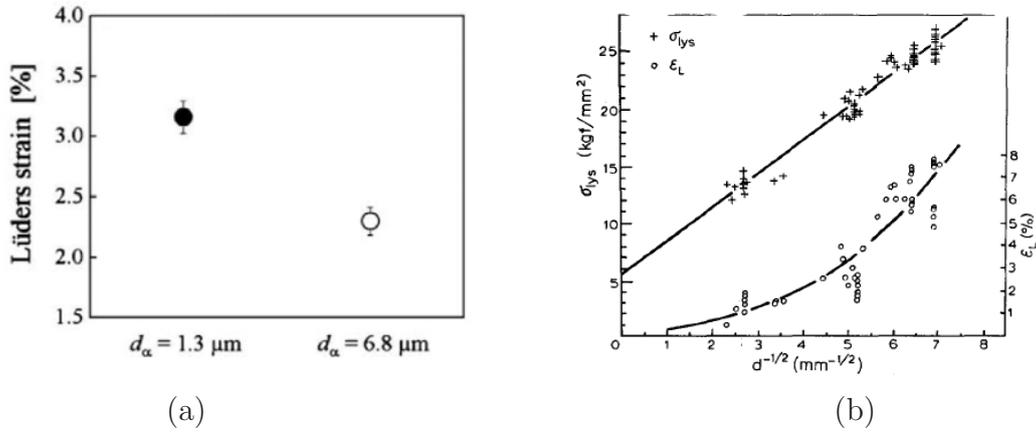


FIG. 1.5 – Effets de taille de grains sur la longueur du plateau de Lüders pour des aciers bas carbone à grains fins [SPR05] (a) et effets de taille de grains sur la limite d'élasticité σ_{lys} et la longueur du plateau de Lüders ϵ_L pour des aciers Armco [BLD71] (b)

Wei et Gao [WG08] ont trouvé un effet de taille de grains sur la sensibilité à la vitesse de déformation m , déterminée par $m = \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \ln \dot{\epsilon}}$, pour le cuivre et l'acier. Pour des tailles de grain inférieures à 100 nm (métaux nanocristallins), la sensibilité du matériau à la vitesse de déformation croît fortement pour le cuivre (figure (1.6a)). Cet effet n'est pas présent pour l'acier qui lui est très sensible à la vitesse de déformation pour de larges tailles de grains ($D > 10\text{nm}$, figure (1.6b)). Ces effets sont également relatés par Armstrong [Arm09].

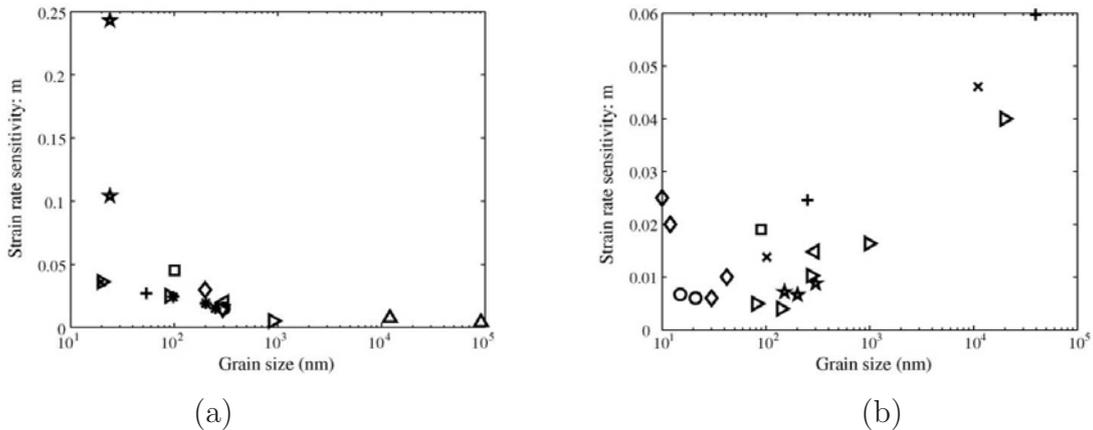


FIG. 1.6 – Effets de taille de grains sur la sensibilité à la vitesse de déformation pour le cuivre (a) et les aciers (b)[WG08]

Pour les matériaux à réseaux cubiques faces centrées (CFC) comme le cuivre, la sensibilité à la vitesse de déformation n'existe que pour des petites tailles de grain, alors que cet effet est visible pour une plus large gamme de taille de grains pour des matériaux à réseaux cubiques centrés (CC). Pour ces derniers matériaux, plus la taille de grains est petite, plus la sensibilité à la vitesse de déformation diminue. D'après Wei et Gao [WG08], ce phénomène serait dû à une énergie de diffusion des dislocations à travers le joint de grains plus importante dans le cas d'un réseau CC, puis, pour des tailles de grain inférieures au micromètre, le mouvement des dislocations devient plus difficile à cause des interactions avec les joints de grains. Les différents effets de taille de grains mentionnés précédemment sont récapitulés dans le tableau (1.1).

	D ↗		équations caractéristiques
	CC	CFC	
σ_e	↘	↘	$\sigma_e = \sigma_0 + k \cdot D^{-n}$ avec n entre 0,5 et 1
$\varepsilon_{L\ddot{u}}$	↘	↘	
σ_{max}	↘	↘	$\sigma_{max} = \sigma_0 + k \cdot D^{-n}$ avec n entre 0,5 et 1
A%	↗	↗	
sensibilité à la vitesse m	↗	↘	

TAB. 1.1 – Synthèse des effets de taille de grains sur les caractéristiques macroscopiques des matériaux métalliques

Néanmoins, les effets de taille de grains sur le comportement mécanique macroscopique ne sont pas les seuls effets de taille de grains observés.

1.2.2 Effets de taille de grains sur la structure interne des grains de type cellule de dislocation

Pour le cuivre, Gracio [Gra95] a montré un effet de taille de grains sur la taille des cellules de dislocation créées au cours de chargements de laminages à froid, pour des taux de réduction de 20% à 75% (figure (1.7)).

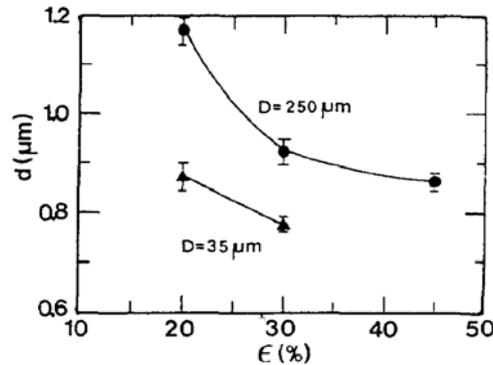


FIG. 1.7 – Effets de taille de grains sur la taille des cellules de dislocation au cours d’un chargement de laminage, pour des taux de réduction de 20% à 75%, pour le cuivre [Gra95], avec d la taille de cellule de dislocation et D la taille de grain

Ainsi, pour une déformation de 20% en laminage, plus la taille de grains est importante, plus la taille des cellules de dislocation est grande. Mais, cet effet sur les cellules de dislocation ne se limite pas à la taille des cellules de dislocation. En effet, la taille de grains aurait, d’après Gracio [Gra95], un impact sur l’organisation et la géométrie des cellules de dislocation. Pour des grains ayant une taille de 250 μm , Gracio note la présence de bandes de glissement et une géométrie allongée des cellules de dislocation, alors que pour une taille de grain de 35 μm , seules des cellules de dislocation équiaxiales apparaissent (sans bande de glissement visible).

Ohno et Okumura notent, à partir des données expérimentales de Staker et Holt [SH72] et de simulations numériques basées sur l’énergie libre des dislocations géométriquement nécessaires [OO07], que la taille des cellules de dislocation a un effet sur la limite d’élasticité des métaux (figure (1.8a)). Ainsi, l’effet de taille des cellules de dislocation sur la limite d’élasticité suit également une loi de type Hall-Petch.

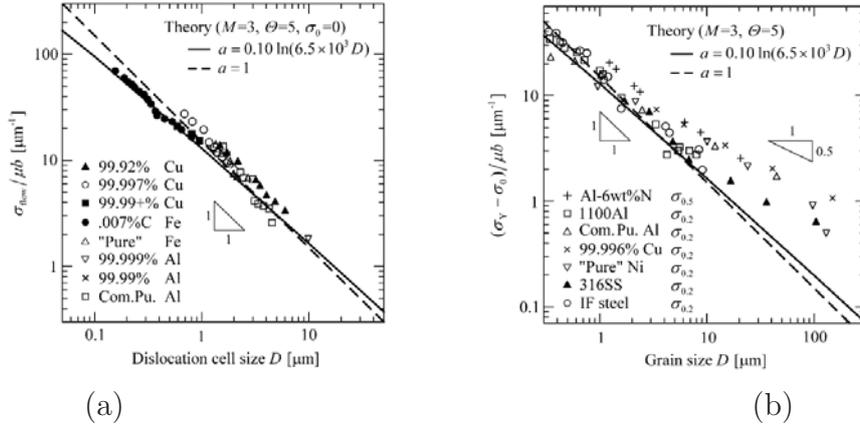


FIG. 1.8 – Effets de taille des cellules de dislocation sur la limite d'élasticité ($\sigma_{flow}/(\mu b)$) (a) et effets de taille de grains sur la limite d'élasticité ($(\sigma_{flow} - \sigma_0)/(\mu b)$) (b) pour le cuivre, le fer et l'aluminium [OO07], les données expérimentales provenant de [SH72]

Pour sa part, Conrad [Con04] met en évidence un effet de taille de grains sur la densité moyenne de dislocation pour le cuivre. Cet effet est linéaire pour des matériaux ayant des tailles de grain supérieures au micromètre. Néanmoins, pour des matériaux à tailles de grain inférieures au micromètre, il n'y a pas d'effet de taille de grains sur la densité moyenne de dislocation. Ceci provient d'une concurrence entre les mouvements de dislocation et le glissement des joints de grains assisté de nucléations de dislocations partielles ou complètes aux joints qui, comme l'ont énoncée Wei et Gao [WG08], apparaissent pour des tailles de grain nanométriques.

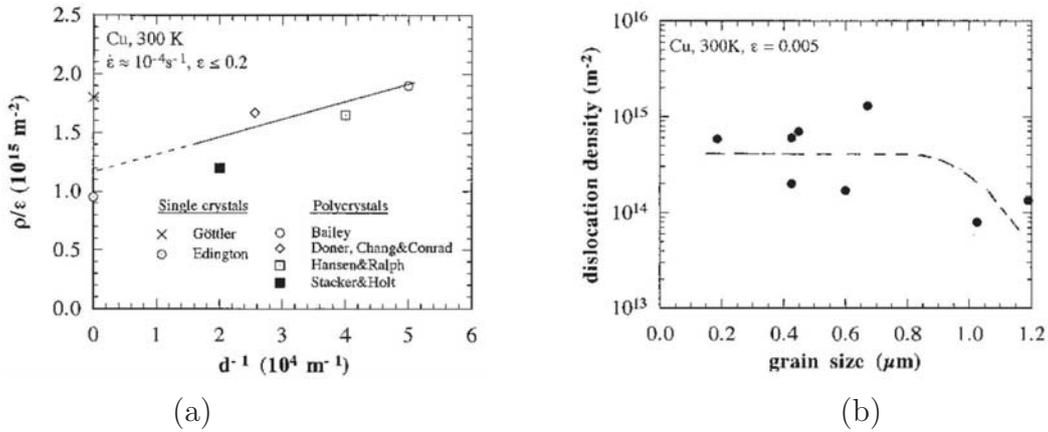


FIG. 1.9 – Effets de taille de grains sur la densité de dislocation moyenne pour du cuivre à une déformation donnée [Con04]

Néanmoins, les effets de taille présentés jusqu'à présent sont étudiés pour des matériaux ayant des tailles de grain petites par rapport aux dimensions de la structure étudiée. Lorsque la taille de grains est du même ordre de grandeur que la structure, comme cela est le cas pour des films minces, des effets de surface libre apparaissent en plus des mécanismes aux joints de grains ou à l'intérieur des grains.

1.2.3 Effets de surface libre sur le comportement mécanique macroscopique

A l'aide d'expériences de déflexion de membrane, Espinosa et al. [EPP04] ont mis en évidence des effets d'épaisseur de film mince polycristallin (libre de tout substrat) de cuivre, d'aluminium et d'or en traction. Les essais portent sur des largeurs de film comprises entre 2,5 et 20 μm et des épaisseurs variant entre 0,3 et 1 μm . Il apparaît que l'effet d'épaisseur du film mince submicronique est beaucoup plus important que l'effet de largeur. Ceci est dû au nombre de grains plus important suivant la largeur du film. En effet, lorsque l'épaisseur du film mince est du même ordre de grandeur que la taille des grains, les grains peuvent être considérés comme quasi-colonnaires.

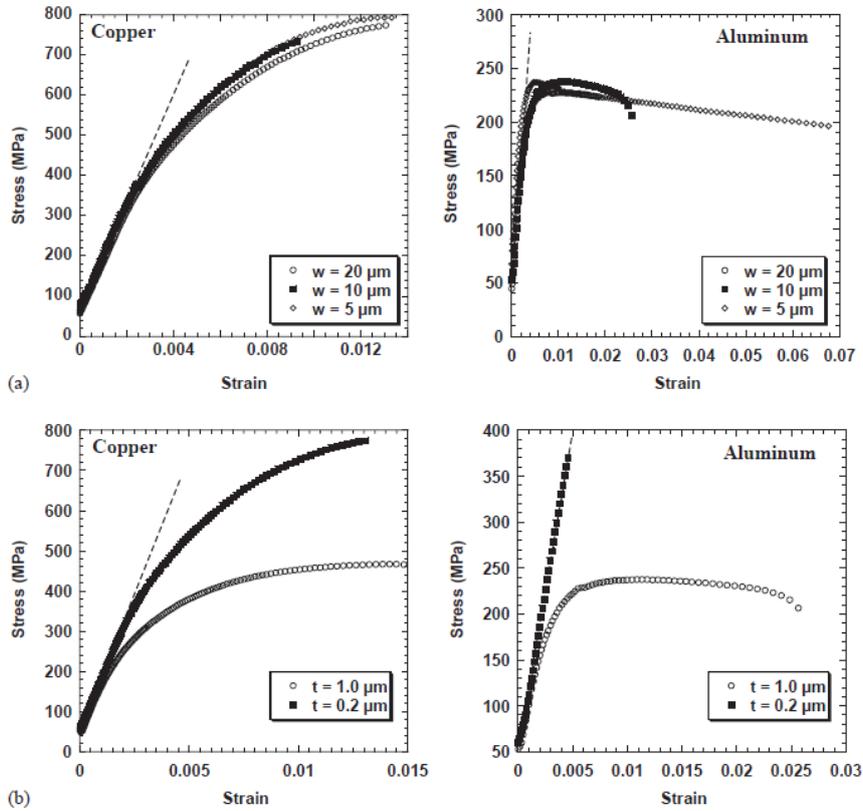


FIG. 1.10 – Effets de taille sur le comportement macroscopique de film mince libre de substrat au cours d'un chargement de traction [EPP04]

Bazant et al. [BGE⁺05] concluent alors que, pour des films minces, la dépendance de la contrainte d'écoulement en fonction de la taille de grains (de type Hall-Petch pour des métaux polycristallins massifs) doit être remplacée par une dépendance selon l'inverse de l'épaisseur du film. Pour des épaisseurs de film supérieures à la taille des grains mais restant sub-micronique, la contrainte d'écoulement est inversement proportionnel à l'épaisseur (loi en $1/h$). Ce phénomène est plus connu sous le nom d'effet Nix [Nix89][BGE⁺05].

Suzuki et al. [SMM⁺09] observent également un effet de l'épaisseur de film mince sur l'aluminium soumis à un chargement de traction, pour une taille de grains moyenne de $48 \mu m$ et des épaisseurs de film comprises entre 24 et $50 \mu m$. D'après eux, les déformations plastiques sont faibles à proximité du joint de grains quand l'épaisseur du film est du même ordre de grandeur ou plus importante que la taille des grains (figure (1.11a)).

En revanche, pour des épaisseurs du film plus faibles que la taille des grains, la zone faiblement déformée plastiquement est réduite, engendrant un fort gradient de

déformation plastique dans les zones proches du joint de grains (figure (1.11b)).

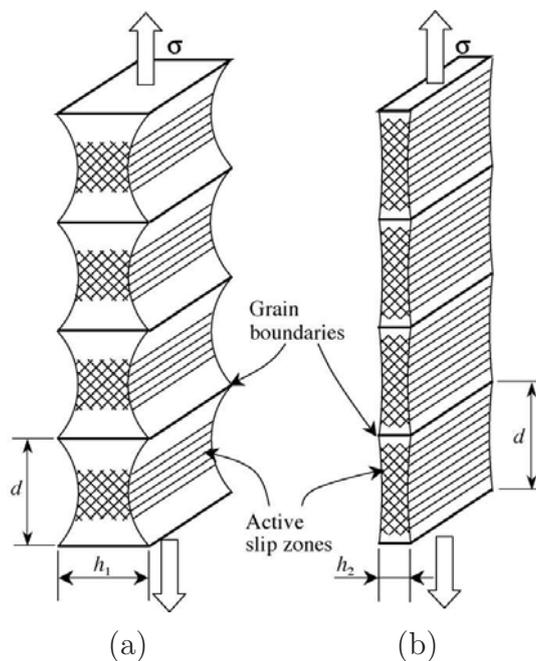


FIG. 1.11 – Représentation schématique d’un film mince et des zones déformées plastiquement pour un film d’épaisseur plus importante que la taille de grains (a) et plus faible que la taille de grains (b) [SMM⁺09]

Uchic et al. [UDFN04] trouvent également des effets de diamètre sur le comportement mécanique en compression de micro-piliers de nickel (figure (1.12)). Le comportement mécanique est “classique” pour des diamètres de micro-pilier supérieurs à $10 \mu m$. Cependant, pour un diamètre inférieur à cette valeur, les mécanismes de plasticité sont modifiés. Ils notent alors que les approches continues à gradients de déformation plastique permettraient de prendre en compte ces effets de taille particuliers. A ce jour, de nombreux débats subsistent quant à la compréhension exacte de ces effets de taille.

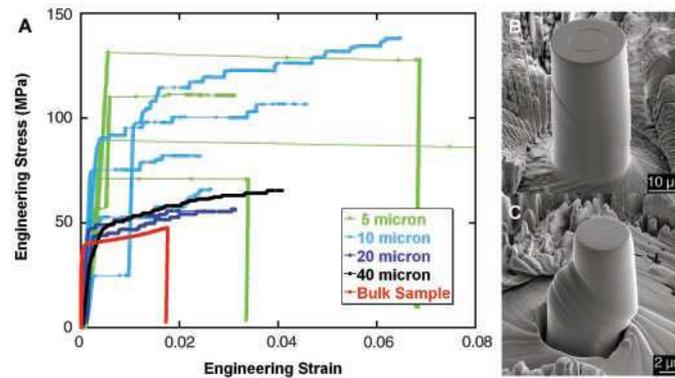


FIG. 1.12 – Effets de diamètre sur le comportement macroscopique en compression de micro-pilier ayant une orientation cristallographique $\langle 134 \rangle$ (A). Micrographies d'un micro-pilier de 20 μm de diamètre après une déformation de 4% (B) et d'un micro-pilier de 5 μm de diamètre après une déformation de 19% (C) [UDFN04]

1.3 Rappel sur les techniques d'homogénéisation d'un milieu hétérogène

1.3.1 Volume Élémentaire Représentatif

A l'échelle macroscopique, la mécanique des milieux continus ou le calcul des structures considère généralement les matériaux comme étant mécaniquement homogènes. L'observation du comportement mécanique en tout point d'un matériau met pourtant en évidence des hétérogénéités de comportement (figure (1.13)). Celles-ci sont liées aux différentes hétérogénéités et défauts d'ordre cristallin que nous pouvons rencontrer en passant de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique. L'échelle des hétérogénéités dans le matériau dépend de la microstructure.

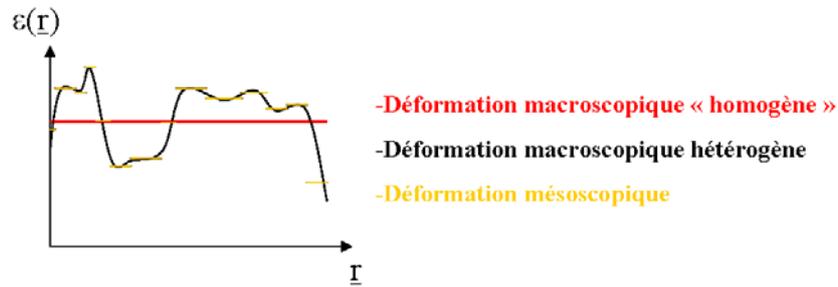


FIG. 1.13 – Représentation des hétérogénéités de déformation

Numériquement, la détermination du comportement mécanique à l'échelle macroscopique peut être déterminée en réalisant une homogénéisation du matériau : une transition de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique est alors réalisée. Cette homogénéisation consiste à substituer au matériau réel un matériau fictif, homogène et équivalent en terme de comportement mécanique. Elle nécessite de définir un volume élémentaire du matériau réel, et représentatif des différentes phases qui constituent le matériau réel. Ici, le terme phase désigne un volume dont les propriétés géométriques, métallurgiques, chimiques et cristallographiques sont identiques ou considérées comme telles. La taille de ces phases définit l'échelle d'hétérogénéité prise en compte. Le Volume Élémentaire Représentatif (VER) doit alors être petit par rapport à la structure mais grand par rapport à la taille des phases [BBG01][FPZ91]. Cette hypothèse de séparation des échelles doit être vérifiée pour "construire" le VER (figure (1.14)).

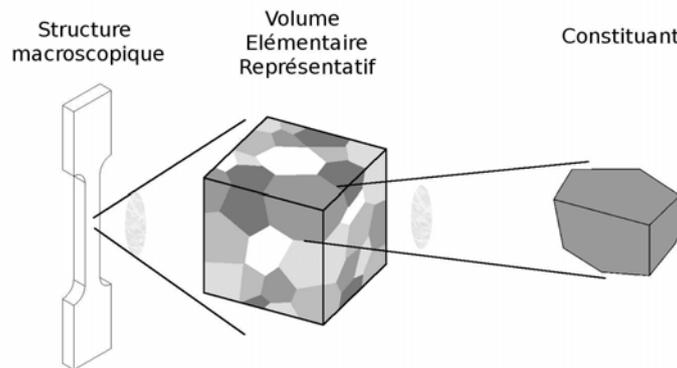


FIG. 1.14 – Séparation des échelles et VER

1.3.2 Méthodologie

Les techniques de transition d'échelle se décomposent en trois étapes [BBG01] [FPZ91] :

- la représentation, qui consiste à définir et à décrire les phases étudiées, leurs répartitions spatiales et leurs comportements mécaniques (reliant les contraintes σ et les déformations ε locales entre elles),
- la localisation, qui détermine les relations existant entre les champs mécaniques locaux et les grandeurs macroscopiques (reliant par exemple les contraintes macroscopiques Σ et les contraintes locales σ entre elles),
- l'homogénéisation, qui correspond à des opérations de moyenne sur les champs mécaniques locaux afin de déterminer le comportement macroscopique du VER (reliant ainsi les contraintes Σ et les déformations E macroscopiques entre elles).

Un problème de transtion d'échelle peut alors être représenté par la figure (1.15), où les différentes étapes sont schématisé et où les flèches représentent des liens entre champs mécaniques .

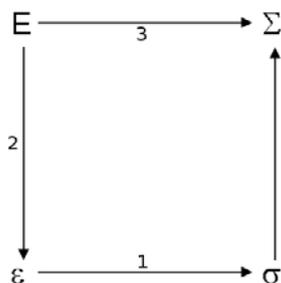


FIG. 1.15 – Représentation schématique des relations existantes entre les différents champs mécaniques locaux et macroscopiques avec les différentes étapes (approche en déplacement imposées), avec : (1) la représentation, (2) la localisation et (3) l'homogénéisation

1.3.2.1 Etape de représentation des phases

L'étape de représentation a pour objectifs de définir les hétérogénéités prises en compte pour la modélisation et de déterminer la nature des paramètres permettant de décrire les phases.

Lors de cette étape, la fraction volumique, la morphologie et la répartition spatiale (aléatoire, périodique, clusters...) de chaque phase, ainsi que le comportement

mécanique, permettant de relier les contraintes σ et les déformations ε locales (et/ou leurs dérivées temporelles), sont définis. Il s'agit de l'étape 1 sur la figure (1.15).

1.3.2.2 Etape de localisation

Généralement, les champs mécaniques locaux et macroscopiques ne sont pas égaux du fait de l'hétérogénéité des matériaux (microstructure hétérogène), excepté pour des hypothèses de microstructures très simples (modèles de Voigt [Voi89] et de Reuss [Reu29]).

$$\begin{cases} \underline{\dot{\varepsilon}} \neq \underline{\dot{E}} \\ \underline{\dot{\sigma}} \neq \underline{\dot{\Sigma}} \end{cases} \quad (1.2)$$

Néanmoins, les champs mécaniques locaux et globaux peuvent être reliés formellement par des tenseurs de localisation. Pour des comportements mécaniques linéaires ou non linéaires simples, ces liens peuvent s'écrire de la manière suivante :

$$\begin{cases} \underline{\dot{\varepsilon}} = \underset{\sim}{A} : \underline{\dot{E}} \\ \underline{\dot{\sigma}} = \underset{\sim}{B} : \underline{\dot{\Sigma}} \end{cases} \quad (1.3)$$

où $\underset{\sim}{A}$ et $\underset{\sim}{B}$ sont respectivement les tenseurs de localisation des déformations et des contraintes (étape 2 sur la figure (1.15)).

Ces tenseurs dépendent :

- de la modélisation des “constituants” du matériau (morphologie...),
- du comportement mécanique de ces constituants,
- de la position des constituants du matériau, et,
- du choix de la transition d'échelle.

1.3.2.3 L'étape d'homogénéisation

L'étape d'homogénéisation permet de déterminer le comportement mécanique effectif du milieu homogène équivalent. Pour cela, nous utilisons les différentes relations de moyenne existantes, ou supposées, entre les grandeurs locales et macroscopiques.

piques. Les grandeurs macroscopiques sont définies comme étant les moyennes des grandeurs locales, nous avons ainsi :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\dot{E}}} = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} dV \\ \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} = \frac{1}{V} \int_V \underline{\underline{\dot{\sigma}}} dV \end{cases} \quad (1.4)$$

où V est le volume du VER. Le comportement effectif du milieu homogène équivalent est alors obtenu en combinant ces opérations de moyenne et les tenseurs de localisation [BBG01][FPZ91] (étape 3 sur la figure (1.15)).

Dans la suite de ce chapitre, les méthodes de transition d'échelle de type auto-cohérent sont rappelées pour des comportements simples comme l'élasticité, avec le modèle de Kröner [Krö58][Krö61]; ou l'élastoplasticité, avec les modèles de Hill [Hil65] et Berveiller-Zaoui [BZ79]; ou encore en viscoplasticité, avec les modèles de Hutchinson [Hut76] et de Lebensohn-Tomé [LT93]. Puis, une méthode auto-cohérente est détaillée pour un comportement local élasto-viscoplastique maxwellien. Il s'agit de l'approche à variables internes et à "champs-translatés" développée par Paquin [Pac98] puis par Berbenni [Ber02].

1.3.3 Estimation autocohérente pour des comportements simples

Les lois de comportement mécanique "simples" permettent de relier directement les déformations (ou leurs taux) aux contraintes (ou à leurs taux). Ainsi, dans cette partie, des estimations auto-cohérentes sont développées pour des matériaux hétérogènes à loi de comportement :

- élastique linéaire [Krö58]

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underset{\sim}{c} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad (1.5)$$

où $\underset{\sim}{c}$ sont les modules élastiques,

- élastoplastique [Hil65][BZ79]

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underset{\sim}{l} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad (1.6)$$

où $\underset{\sim}{l}$ sont les modules tangents élastoplastiques,

– viscoplastique [Hut76][MCA87][LT93]

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{b}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \quad (1.7)$$

où $\underline{\underline{b}}$ sont les modules viscoplastiques.

Ces études utilisent une représentation sphérique ou ellipsoïdale des grains, puis appliquent un schéma auto-cohérent. Ce dernier consiste à assimiler les interactions entre une hétérogénéité et toutes les autres comme l'interaction entre cette hétérogénéité et un milieu homogène équivalent constitué de toutes les hétérogénéités (figure 1.16) et déterminé à posteriori.

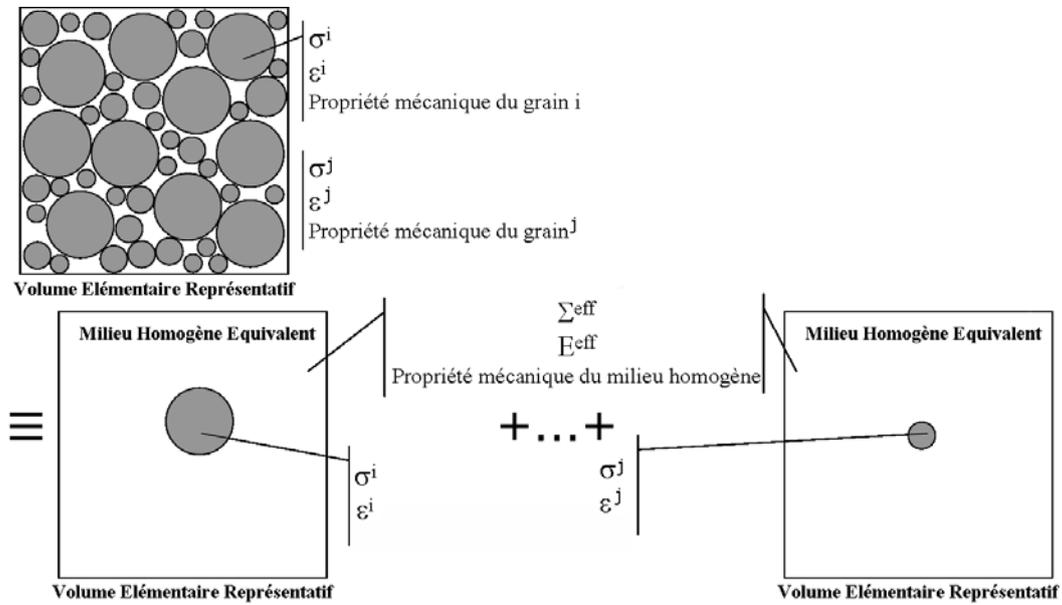


FIG. 1.16 – Représentation du schéma auto-cohérent (à un site)

Le schéma auto-cohérent en élasticité linéaire de Kröner [Krö58] permet de relier les déformations locales aux déformations macroscopiques appliquées aux bornes du VER. La relation entre ces deux déformations pouvant alors s'écrire :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \left[\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\Gamma}}^{eff} : \left(\underline{\underline{c}} - \underline{\underline{C}}^{eff} \right) \right]^{-1} : \underline{\underline{E}} \quad (1.8)$$

où $\underline{\underline{\Gamma}}^{eff}$ est lié au tenseur de Green modifié associé aux modules élastiques $\underline{\underline{C}}^{eff}$ du milieu homogène équivalent.

La démarche auto-cohérente consiste à déterminer ces modules élastiques. Pour

cela, les lois de comportement locale et macroscopique ainsi que la condition d'homogénéisation sont utilisées. La moyenne des déformations sur les inclusions permet de déterminer les déformations macroscopiques sur le VER :

$$\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{\varepsilon}} = \overline{\left[I + \Gamma_{\sim}^{eff} : \left(\underline{\underline{c}}_{\sim} - \underline{\underline{C}}_{\sim}^{eff} \right) \right]^{-1}} : \underline{\underline{E}} = \overline{A_{\sim}^{C^{eff}}} : \underline{\underline{E}} \quad (1.9)$$

avec $A_{\sim}^{C^{eff}}$ le tenseur de localisation, dépendant des modules élastiques effectifs du VER, et déterminé par :

$$A_{\sim}^{C^{eff}} = \left[I + \Gamma_{\sim}^{eff} : \left(\underline{\underline{c}}_{\sim} - \underline{\underline{C}}_{\sim}^{eff} \right) \right]^{-1} \quad (1.10)$$

La moyenne des contraintes sur les inclusions permet également de déterminer les contraintes sur le VER. De plus, la loi de comportement élastique (reliant les déformations et les contraintes locales) et le comportement élastique effectif du VER permettent alors d'écrire les relations supplémentaires suivantes :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \overline{\underline{\underline{c}}_{\sim}} : \underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{C}}_{\sim}^{eff} : \underline{\underline{E}} \quad (1.11)$$

En remplaçant les moyennes des déformations sur les inclusions dans l'équation (1.11) par l'équation (1.9), et en remplaçant l'expression des déformations locales par son expression (équation (1.8)), les modules élastiques du milieu homogène de référence $\underline{\underline{C}}_{\sim}^{eff}$ sont finalement définis par :

$$\underline{\underline{C}}_{\sim}^{eff} = \overline{\underline{\underline{c}}_{\sim}} : \overline{A_{\sim}^{C^{eff}}} : \overline{A_{\sim}^{C^{eff}}}^{-1} \quad (1.12)$$

Dans cette expression, il apparaît que la détermination des modules élastiques effectifs n'est pas simple (car présents dans les deux membres de l'expression). Le développement du schéma auto-cohérent en élastoplasticité est réalisable en utilisant les bases du problème de l'inclusion d'Eshelby.

Le premier modèle auto-cohérent écrit en élastoplasticité fut le modèle de Kröner [Krö61]. En considérant les déformations plastiques du grain comme étant des déformations libres, au sens d'Eshelby, Kröner arrive à la loi de localisation en contraintes

suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{C}} : \left(\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{S}}^{Esh} \right) : \left(\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^p \right) \quad (1.13)$$

Néanmoins, cette approche prend seulement en compte une accommodation de nature élastique entraînant une surestimation des contraintes du fait de la raideur des interactions élastiques. Hill [Hil65] a alors proposé une approche incrémentale permettant de linéariser les équations de constitution des grains et du milieu homogène équivalent.

Pour des grains ellipsoïdaux, la loi de localisation en contraintes du modèle incrémental de Hill est :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} - \underline{\underline{L}}^* : \left(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \underline{\underline{\dot{E}}} \right) \quad (1.14)$$

où $\underline{\underline{L}}^*$ correspond au tenseur d'influence de Hill.

Contrairement à l'approche de Kröner [Krö61], l'accommodation entre les grains et le milieu homogène équivalent est bien de nature élastoplastique.

Plusieurs modélisations auto-cohérentes découlent directement du modèle incrémental de Hill [INN84][LKB92]. L'approche de Hill a alors été simplifiée en une approche sécante par Berveiller et Zaoui [BZ79] pour des chargements proportionnels.

La loi d'interaction, pour des grains sphériques et un matériau isotrope, s'écrit alors :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)\alpha \left(\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^p \right) \quad (1.15)$$

où α est un facteur d'accommodation élastoplastique, égal à 1 dans le cas de matériau purement élastique (nous retrouvons alors l'équation (1.13) de Kröner) et décroissant rapidement avec l'écroutissage, et β est défini par :

$$\beta = \frac{2}{15} \frac{4 - 5\nu}{1 - \nu} \quad (1.16)$$

où ν est le coefficient de Poisson.

Parallèlement au développement des modèles auto-cohérents en élastoplasticité, Hutchinson [Hut76] a adapté la formulation incrémentale de Hill pour des matériaux à loi de comportement mécanique viscoplastique (de type loi puissance) pour décrire le fluage de ces matériaux.

La formulation alors obtenue par Hutchinson a permis de relier les contraintes à la dérivée temporelle des déformations.

Molinari et al. [MCA87] ont également développé un schéma auto-cohérent pour des matériaux viscoplastiques. Mais, contrairement à Hutchinson, qui a utilisé une description sécante des modules viscoplastiques, une approche à modules tangents isotropes déterminés à chaque pas de calcul est proposée.

Lebensohn et Tomé [LT93] ont, par la suite, étendu le modèle de Molinari et al. au cas général et l’ont appliqué aux métaux de structure hexagonale comme le zirconium.

Les trois types de modèles auto-cohérents décrits dans cette section (en élasticité, en élastoplasticité et en viscoplasticité) partent de lois de comportement pouvant être linéarisées. Ainsi, les propriétés mécaniques effectives du milieu homogène équivalent, correspondant aux propriétés mécaniques globales du VER, sont de même type que celles établies pour le comportement mécanique local (de chaque grain).

Dans le cas d’un matériau hétérogène élasto-viscoplastique (approche utilisée dans cette thèse), la loi de comportement homogénéisé est différente de celle caractérisant le comportement des grains, comme exposé dans la section suivante.

1.3.4 Transition d’échelle en élasto-viscoplasticité

Dans le cas d’un comportement de nature maxwellien, en élasto-viscoplasticité, le comportement effectif macroscopique n’est plus maxwellien (équations (1.17) et (1.18)). Ceci est dû à la présence simultanée de différents ordres de dérivées temporelles. Ainsi, le schéma auto-cohérent en élasto-viscoplasticité fait face à une connection spatio-temporelle provenant à la fois de l’hétérogénéité et de l’histoire du matériau.

La principale difficulté consiste à trouver une transition d’échelle convenable, capable de prendre en compte la complexité de l’interaction élasto-viscoplastique, décrite par Suquet [Suq87], donnant lieu à l’effet “mémoire longue”.

Ainsi, si localement le comportement élasto-viscoplastique s'écrit :

$$\underline{\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}} = \underline{\underset{\sim}{s}} : \underline{\dot{\underline{\underline{\sigma}}}} + \underline{\underset{\sim}{m}} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (1.17)$$

à l'échelle macroscopique, le comportement élasto-viscoplastique s'écrira :

$$\underline{\dot{\underline{\underline{E}}}} = \underline{\underset{\sim}{S}^{eff}} : \underline{\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}} + \underline{\underset{\sim}{M}^{eff}} : \underline{\underline{\Sigma}} + \int_0^t \underline{\underset{\sim}{J}}(t-p) : \underline{\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}}(p) dp \quad (1.18)$$

en notant $\underline{\underset{\sim}{s}}$ et $\underline{\underset{\sim}{m}}$ les tenseurs des compliances élastiques et viscoplastiques locales respectivement, $\underline{\underset{\sim}{S}^{eff}}$ et $\underline{\underset{\sim}{M}^{eff}}$ leurs équivalents pour le milieu homogène équivalent. Le terme $\int_0^t \underline{\underset{\sim}{J}}(t-p) : \underline{\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}}(p) dp$ correspond à l'effet "mémoire longue", et $\underline{\underset{\sim}{J}}(t)$ est la fonction de fluage.

Au cours des années passées, plusieurs modélisations micromécaniques ont été élaborées afin de déterminer les propriétés effectives de cette classe de matériaux. Le premier modèle, de Weng [Wen81] est déduit des modèles de Kröner [Krö61] et de Budiansky-Wu [BW62] (utilisés à la base pour des lois de comportement élastoplastique indépendantes du temps) pour un matériau élasto-viscoplastique. Plus tard, Li et Weng [LW97] ont introduit une loi d'interaction dépendante du temps plus souple à l'aide d'une approche sécante en viscosité pour un milieu hétérogène linéaire de référence introduite par Ponte Castañada [PCn91]. Rougier et al. [RSZ94] proposent une solution exacte au problème auto-cohérent dans le cas restrictif de composites viscoélastiques isotropes, linéaires et incompressibles en utilisant les transformées de Laplace-Carson inverses (approche héréditaire). Molinari et al. [MAK97] ont résolu le problème élasto-viscoplastique en supposant le matériau incompressible et en limitant ainsi le couplage des champs élastiques et viscoplastiques.

La suite de ce paragraphe décrit le modèle de transition d'échelle développé par Paquin [Paq98] puis par Berbenni [Ber02] qui sera utilisé dans cette thèse.

1.3.4.1 Comportement élasto-viscoplastique et équations de champs du problème

Un matériau hétérogène à comportement élasto-viscoplastique est considéré. Les hypothèses suivantes sont utilisées :

- les chargements sont supposés quasi statiques, donc sans effet d’inertie,
- le matériau n’est soumis à aucune force de volume,
- seul le cas des petites déformations est envisagé, (même si les techniques présentées peuvent être étendues aux cas des transformations finies).

Les équations décrivant le comportement élasto-viscoplastique en tout point \underline{r} du VER sont les suivantes :

- la loi de comportement élasto-viscoplastique décrite par une décomposition du taux de déformation en une partie élastique $\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}^e$ et une partie viscoplastique $\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}^{vp}$ suivant un schéma de Maxwell comme le montre la figure (1.17), et comme le traduit l’équation :

$$\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}(\underline{r}) = \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}^e(\underline{r}) + \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{r}) \quad (1.19)$$



FIG. 1.17 – Modèle série de Maxwell

- la loi d’évolution des déformations élastiques, correspondant à la loi de Hooke :

$$\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}^e(\underline{r}) = \underset{\sim}{s}(\underline{r}) : \underline{\dot{\underline{\sigma}}}(\underline{r}, t) \quad (1.20)$$

où $\underset{\sim}{s}$ est le tenseur des complaisances élastiques. Nous avons également $\underset{\sim}{s} = \underset{\sim}{c}^{-1}$, où $\underset{\sim}{c}$ représente le tenseur des modules élastiques.

- la loi d’évolution des déformations viscoplastiques est la suivante :

$$\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{r}) = \underset{\sim}{m}(\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}, \underline{r}, \dots) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{r}, t) \quad (1.21)$$

où $\underset{\sim}{m}$ est le tenseur des compliances viscoplastiques, non linéaires en $\underline{\underline{\sigma}}$. Nous avons également $\underset{\sim}{m} = \underset{\sim}{b}^{-1}$, où $\underset{\sim}{b}$ représente le tenseur des modules viscoplastiques.

En prenant en compte les équations (1.19) à (1.21) la loi de comportement s’écrit alors :

$$\begin{aligned} \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}(\underline{r}) &= \underset{\sim}{s}(\underline{r}) : \underline{\dot{\underline{\sigma}}}(\underline{r}) + \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{r}) \\ \text{avec } \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}^{vp}(\underline{r}) &= \underset{\sim}{m}(\underline{r}) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{r}) \end{aligned} \quad (1.22)$$

Les équations du problème sont les suivantes :

- la condition d'équilibre pour le champ de contrainte vérifiée à tout instant t :

$$\text{div}(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r}, t)) = 0 \quad (1.23)$$

- la condition d'équilibre pour un champ de taux de contrainte inconnu à chaque instant t :

$$\text{div}(\underline{\underline{\dot{\sigma}}}(\underline{r}, t)) = 0 \quad (1.24)$$

- la condition de compatibilité cinématique du champ des taux de déformation :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\underline{r}) = \nabla^s \underline{\underline{\dot{u}}}(\underline{r}) \quad (1.25)$$

où ∇^s dénote l'opérateur gradient symétrisé.

- les conditions aux limites en vitesse imposée uniforme à la frontière du VER :

$$\underline{\underline{\dot{u}}}^d = \underline{\underline{\dot{E}}} \cdot \underline{x} \text{ sur } \partial V \quad (1.26)$$

La résolution du problème consiste à déterminer des champs de taux de contrainte $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}$ et de taux de déformation $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ satisfaisants à l'ensemble des équations de champs mécaniques du problème énoncé. Le comportement global d'un VER pourra alors être défini en appliquant une méthode d'homogénéisation de type auto-cohérent.

Dans notre schéma d'intégration, les champs de contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$ et de déformation viscoplastique $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}$ seront considérés comme les variables internes contenant l'histoire du matériau.

La démarche est incrémentale et non héréditaire. Elle permet une estimation du comportement effectif du matériau directement dans l'espace réel sans nécessiter le recours aux transformées de Laplace-Carson inverses.

1.3.4.2 Opérateurs de projection et équation intégrale

Variations au premier ordre des propriétés élastiques et viscoplastiques

Nous considérons les modules élastiques $\underline{\underline{c}}$ et viscoplastiques $\underline{\underline{m}}$ fluctuant autour de modules élastiques $\underline{\underline{C}}$ et viscoplastiques $\underline{\underline{M}}$ homogènes tels que :

$$\begin{cases} \underline{\underline{c}}(\underline{r}) = \underline{\underline{C}} + \delta \underline{\underline{c}}(\underline{r}) \\ \underline{\underline{m}}(\underline{r}) = \underline{\underline{M}} + \delta \underline{\underline{m}}(\underline{r}) \end{cases} \quad (1.27)$$

De même, les complaisances élastiques $\underset{\sim}{s}$ et viscoplastiques $\underset{\sim}{b}$ fluctuent autour de complaisances élastiques $\underset{\sim}{S}$ et viscoplastiques $\underset{\sim}{B}$ homogènes telles que :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{s}(\underline{r}) = \underset{\sim}{c}^{-1}(\underline{r}) = \underset{\sim}{S} + \delta \underset{\sim}{s}(\underline{r}) \\ \underset{\sim}{b}(\underline{r}) = \underset{\sim}{m}^{-1}(\underline{r}) = \underset{\sim}{B} + \delta \underset{\sim}{b}(\underline{r}) \end{cases} \quad (1.28)$$

Opérateur de projection et propriétés remarquables

Les champs de contrainte et des taux de contrainte sont alors statiquement admissibles (équations (1.23) et (1.24)). Les équations (1.25) et (1.26) imposent des conditions de compatibilité cinématique sur les taux de déformation. Ainsi, l'utilisation de l'opérateur de projection $\underset{\sim}{\Pi}^C(\underline{r})$ défini par Kunin [Kun81][Kun83] est dictée par ses propriétés intéressantes. Ces opérateurs, associés aux milieux élastiques (exposant C) ou viscoplastique (exposant B), sont définis par les relations :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{\Pi}^C(\underline{r} - \underline{r}') = \underset{\sim}{\Gamma}^C(\underline{r} - \underline{r}') : \underset{\sim}{C} \\ \underset{\sim}{\Pi}^B(\underline{r} - \underline{r}') = \underset{\sim}{\Gamma}^B(\underline{r} - \underline{r}') : \underset{\sim}{B} \end{cases} \quad (1.29)$$

Dans ces dernières relations, $\underset{\sim}{\Gamma}^C$ et $\underset{\sim}{\Gamma}^B$ sont les tenseurs de Green modifiés définis par Kröner [Krö86][Krö89] et associés aux modules élastiques $\underset{\sim}{C}$ et viscoplastiques $\underset{\sim}{B}$ respectivement. Ces tenseurs sont définis à partir du tenseur de Green par :

$$\Gamma_{ijkl}^* = -\frac{1}{2} (G_{ik,jl}^* + G_{jk,il}^*) \quad (1.30)$$

où * correspond à C ou à B.

Les tenseurs $\underset{\sim}{\Gamma}^{C \text{ ou } B}$ se décomposent en une partie locale $\underset{\sim}{\Gamma}^{C \text{ ou } B}_{\sim l}$ et une partie non locale $\underset{\sim}{\Gamma}^{C \text{ ou } B}_{\sim nl}$ (variant en $\frac{1}{\|\underline{r} - \underline{r}'\|^3}$) telles que :

$$\underset{\sim}{\Gamma}^{C \text{ ou } B}(\underline{r} - \underline{r}') = \underset{\sim}{\Gamma}^{C \text{ ou } B}_{\sim l}(\underline{r} - \underline{r}') + \underset{\sim}{\Gamma}^{C \text{ ou } B}_{\sim nl}(\underline{r} - \underline{r}') \quad (1.31)$$

En utilisant les conditions d'équilibre (équations (1.23) et (1.24)), les propriétés remarquables suivantes peuvent être démontrées en se plaçant dans l'espace de Fou-

rier [Paq98][Ber02] :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\underline{\dot{\sigma}}(\underline{r}, t)) = 0 \Leftrightarrow \tilde{\Pi}^C \star \tilde{S} : \underline{\dot{\sigma}} = 0 \\ \operatorname{div}(\underline{\sigma}(\underline{r}, t)) = 0 \Leftrightarrow \tilde{\Pi}^B \star \tilde{M} : \underline{\sigma} = 0 \end{cases} \quad (1.32)$$

où \star correspond au produit de convolution.

En utilisant les équations de compatibilité (1.25) et (1.26), la propriété remarquable suivante peut également être démontrée en se plaçant dans l'espace de Fourier [Ber02] :

$$\tilde{\Pi}^C \star \underline{\dot{\underline{\underline{\sigma}}}} = \underline{\dot{\underline{\underline{\sigma}}}} - \underline{\dot{E}} \quad (1.33)$$

Equation intégrale

L'équation intégrale du problème peut alors être définie à partir de la loi de comportement en tout point.

En faisant intervenir l'opérateur de projection $\tilde{\Pi}^C$ de part et d'autre de l'expression (1.22), la décomposition du tenseur des complaisances élastiques donnée par l'équation (1.28), puis les propriétés (1.32) et (1.33), nous obtenons aisément l'équation intégrale :

$$\underline{\dot{\underline{\underline{\sigma}}}} = \underline{\dot{E}} + \tilde{\Pi}^C \star (\delta_S : \underline{\dot{\sigma}} + \underline{\dot{\underline{\underline{\sigma}}}}^{vp}) \quad (1.34)$$

Cette équation décrit donc exactement le problème en tout point \underline{r} du VER. Les taux de déformation $\underline{\dot{\underline{\underline{\sigma}}}}$ au point \underline{r} dépendent à la fois des taux de déformation macroscopiques imposés, mais aussi des taux de déformation viscoplastique (dépendants de l'état de contrainte) au point \underline{r}' .

La résolution de cette équation intégrale, dans le cas de la méthole auto-cohérente, n'est pas simple et demande l'utilisation de la technique mise en oeuvre par Paquin et al. [PBF⁺01], Sabar et al. [SBFB02] et Berbenni et al. [BFLB04][Ber02]. Il s'agit de la méthode des champs translatés dans le cadre d'une approche incrémentale à variable interne.

1.3.4.3 Procédure auto-cohérente : application de la technique des champs translétés

Nous supposons tout d'abord que les taux de déformation viscoplastique sont indépendants des propriétés élastiques du milieu élasto-viscoplastique hétérogène. Ainsi, le tenseur des modules élastiques $\underline{\underline{C}}$ peut être choisi comme étant la solution auto-cohérente en élasticité linéaire pure.

Nous prendrons la solution $\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}}^{eff}$ directement au niveau de l'équation intégrale :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \underline{\underline{\dot{E}}} + \Pi^{C^{eff}} \star (\delta s^{eff} : \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^e + \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}) \quad (1.35)$$

L'opérateur de projection étant associé au milieu élastique de référence, sa nouvelle expression est :

$$\Pi^{C^{eff}}(\underline{r} - \underline{r}') = \Gamma^{C^{eff}}(\underline{r} - \underline{r}') : \underline{\underline{C}}^{eff} \quad (1.36)$$

Le tenseur des modules d'élasticité effectifs du milieu homogène purement élastique est défini de manière classique par la formule :

$$\underline{\underline{C}}^{eff} = \overline{\underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}}^{C^{eff}}} : \overline{\underline{\underline{A}}^{C^{eff}}}^{-1} \quad (1.37)$$

Dans cette formule, le tenseur $\underline{\underline{A}}^{C^{eff}}$ correspond au tenseur de localisation du problème purement élastique défini par :

$$\underline{\underline{A}}^{C^{eff}} = \left(\underline{\underline{I}} + \Gamma_{\sim l}^{C^{eff}} : \delta \underline{\underline{c}}^{eff} \right)^{-1} \quad (1.38)$$

avec $\delta \underline{\underline{c}}^{eff}(\underline{r}) = \underline{\underline{c}}(\underline{r}) - \underline{\underline{C}}^{eff}$, suivant l'équation (1.27).

Le tenseur de localisation $\underline{\underline{A}}^{C^{eff}}$ vérifie la propriété suivante :

$$\overline{\underline{\underline{A}}^{C^{eff}}} = \underline{\underline{I}} \quad (1.39)$$

Cette étape constitue un début de l'application des techniques d'homogénéisation

comme la procédure auto-cohérente. Elle n'est pas suffisante pour résoudre l'équation intégrale (1.34). Cette insuffisance est liée à la présence dans cette équation du produit de convolution spatial et à l'absence de terme de fluctuation au niveau du champ $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}$ dans cette convolution.

A l'instar de Sabar et al. [SBFB02] et Berbenni et al. [BFLB04], la technique des champs translétés est appliquée pour résoudre et simplifier cette équation par une condition d'auto-cohérence.

Cette technique consiste à décomposer (ou encore translater) le champ $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r})$ en un champ cinématiquement admissible $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r})$ à priori connu, et non nécessairement uniforme comme cela est le cas dans l'approche de Kröner-Weng [Krö61] [Wen81], et une fluctuation $\delta\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r})$.

Cette décomposition se traduit par l'écriture variationnelle suivante :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r}) = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r}) + \delta\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r}) \quad (1.40)$$

La figure (1.18) permet de comparer les techniques de décomposition des champs entre la méthode utilisée dans les modèles de type Kröner-Weng et celle de type champ translété.

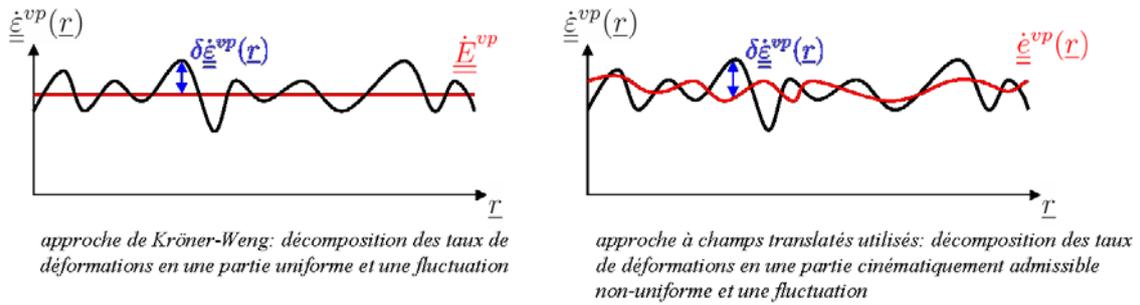


FIG. 1.18 – Comparaison de l'approche de Kröner-Weng [Krö61][Wen81] à celle à champs translétés [Ber02][SBFB02][BFLB04], au niveau de la description du champ local de déformation viscoplastique $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}$

Le fait que le terme $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r})$ soit choisi comme cinématiquement admissible permettra d'utiliser les propriétés de l'opérateur de projection $\tilde{\Pi}^{C^{eff}}(\underline{r} - \underline{r}')$.

Auparavant, le champ $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r})$ doit être choisi astucieusement. Un choix naturel de $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r})$ est la solution du problème d'un milieu hétérogène, de même microstructure, purement viscoplastique soumis à un chargement inconnu $\underline{\underline{\dot{X}}}$.

Ainsi, la condition de compatibilité cinématique est assurée.

Nous pouvons alors définir le champ $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}(\underline{r})$ par la solution auto-cohérente de l'équation intégrale d'un problème auxiliaire viscoplastique pur :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \underline{\underline{\dot{X}}} + \Pi^B \star \left(\delta \underset{\sim}{b} : \underset{\sim}{m} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} \right) \quad (1.41)$$

La solution à cette équation intégrale est la suivante :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \underset{\sim}{A}^{B^{eff}} : \underline{\underline{\dot{X}}} \quad (1.42)$$

Dans cette équation, le tenseur $\underset{\sim}{A}^{B^{eff}}$ correspond au tenseur de localisation du problème purement viscoplastique pur défini par :

$$\underset{\sim}{A}^{B^{eff}} = \left(\underset{\sim}{I} + \underset{\sim}{\Gamma}^{B^{eff}} : \underset{\sim}{\delta b}^{eff} \right)^{-1} \quad (1.43)$$

Dans cette équation, $\underset{\sim}{\Gamma}^{B^{eff}}$ correspond à la partie locale du tenseur de Green modifié associé au milieu effectif purement viscoplastique de modules homogènes $\underset{\sim}{B}^{eff}$.

$\underset{\sim}{\delta b}^{eff}(\underline{r})$ correspond aux fluctuations des modules viscoplastiques $\underset{\sim}{b}(\underline{r})$ autour de ces modules effectifs.

Nous avons ainsi :

$$\underset{\sim}{b}(\underline{r}) = \underset{\sim}{B}^{eff} + \underset{\sim}{\delta b}^{eff}(\underline{r}) \quad (1.44)$$

Les modules viscoplastiques effectifs sont obtenus par une opération de moyenne :

$$\underset{\sim}{B}^{eff} = \overline{\underset{\sim}{b} : \underset{\sim}{A}^{B^{eff}}} \quad (1.45)$$

Le tenseur de localisation du problème purement viscoplastique $\underset{\sim}{A}^{B^{eff}}$ vérifie la

propriété suivante :

$$\overline{\underset{\sim}{A}^{Beff}} = \underset{\sim}{I} \quad (1.46)$$

Le champ $\underline{\underline{\dot{e}}}^{vp}$, défini par l'équation (1.42), étant cinématiquement admissible, la relation suivante est vérifiée (d'après la propriété (1.33)) :

$$\underset{\sim}{\Pi}^{Ceff} \star \underline{\underline{\dot{e}}}^{vp} = \underline{\underline{\dot{e}}}^{vp} - \underline{\underline{\dot{X}}} \quad (1.47)$$

En remplaçant l'expression de $\underline{\underline{\dot{e}}}^{vp}$ (1.42) dans l'équation (1.47), l'équation (1.47) devient :

$$\underset{\sim}{\Pi}^{Ceff} \star \underset{\sim}{A}^{Beff} : \underline{\underline{\dot{X}}} = \underset{\sim}{A}^{Beff} : \underline{\underline{\dot{X}}} - \underline{\underline{\dot{X}}} \quad (1.48)$$

L'équation intégrale (équation (1.35)) peut alors être réécrite sous la forme suivante :

$$\underline{\underline{\dot{e}}} = \underline{\underline{\dot{E}}} + \underset{\sim}{A}^{Beff} : \underline{\underline{\dot{X}}} - \underline{\underline{\dot{X}}} + \underset{\sim}{\Pi}^{Ceff} \star \left(\delta \underline{\underline{\dot{e}}}^{vp} + \delta \underset{\sim}{s}^{eff} : \underset{\sim}{c} : \underline{\underline{\dot{e}}}^e \right) \quad (1.49)$$

En décomposant le tenseur de projection $\underset{\sim}{\Pi}^{Ceff}$ en une partie locale et une partie non locale [Krö89] :

$$\underset{\sim}{\Pi}^{Ceff}(\underline{r} - \underline{r}') = \underset{\sim_l}{\Pi}^{Ceff} \delta(\underline{r} - \underline{r}') + \underset{\sim_{nl}}{\Pi}^{Ceff}(\underline{r} - \underline{r}') \quad (1.50)$$

Puis, en appliquant le principe du schéma auto-cohérent, où les contributions non locales, variant en $\frac{1}{\|\underline{r} - \underline{r}'\|^3}$, sont négligées, nous déduisons de l'équation intégrale (1.49) que le tenseur $\underline{\underline{\dot{X}}}$ doit être choisi de telle sorte que :

$$\overline{\delta \underset{\sim}{s}^{eff} : \underset{\sim}{c} : \underline{\underline{\dot{e}}}^e + \delta \underline{\underline{\dot{e}}}^{vp}} = 0 \quad (1.51)$$

Par identification, à l'aide de l'équation (1.51), le tenseur $\underline{\underline{\dot{X}}}$ peut alors être défini par :

$$\underline{\underline{\dot{X}}} = \underline{\underline{\dot{E}}} - \underline{\underline{S}}^{eff} : \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} \quad (1.52)$$

Or, compte tenu de la loi de comportement macroscopique $\underline{\underline{\dot{E}}} = \underline{\underline{S}}^{eff} : \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} + \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp^{eff}}$, l'expression du tenseur $\underline{\underline{\dot{X}}}$ s'identifie comme suit en utilisant le lemme de Hill-Mandel [Hil63][Man73] :

$$\underline{\underline{\dot{X}}} = \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp^{eff}} = \overline{{}^t B^{C^{eff}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}} \quad (1.53)$$

où $\underline{\underline{B}}^{C^{eff}} = \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}}^{C^{eff}} : \underline{\underline{S}}^{eff}$ est le tenseur de concentration de contrainte obtenu dans le cas du problème purement élastique.

Nous obtenons alors l'équation de localisation en taux de déformation suivante qui contient toute la complexité des interactions mécaniques de nature élasto-viscoplastique :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = & \underline{\underline{A}}^{C^{eff}} : (\underline{\underline{\dot{E}}} - \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp^{eff}}) + \underline{\underline{A}}^{C^{eff}} : \underline{\underline{A}}^{B^{eff}} : \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp^{eff}} + \\ & \underline{\underline{A}}^{C^{eff}} : \underline{\underline{\Gamma}}^{C^{eff}} : \left(\underline{\underline{c}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} - \underline{\underline{C}}^{eff} : \underline{\underline{A}}^{B^{eff}} : \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp^{eff}} \right) \end{aligned} \quad (1.54)$$

La loi de comportement élasto-viscoplastique locale s'écrivant :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{c}} : (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} - \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}) \quad (1.55)$$

Nous pouvons en déduire la loi d'interaction en taux de contrainte en combinant les équations (1.54) et (1.55) :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}}^{C^{eff}} : \underline{\underline{S}}^{eff} : \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} - \underline{\underline{c}} : \underline{\underline{A}}^{C^{eff}} : \left(\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{S}}^{Esh} \right) : \left(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} - \underline{\underline{A}}^{B^{eff}} : \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp^{eff}} \right) \quad (1.56)$$

Dans cette équation, le tenseur noté $\underline{\underline{S}}^{Esh}$ correspond au tenseur d'Eshelby

élastique [Esh57], son expression est la suivante :

$$\underset{\sim}{S}^{Esh} = \underset{\sim}{\Gamma}^{Ceff} : \underset{\sim}{C}^{eff} \quad (1.57)$$

Les lois de localisation en taux de déformation (1.54) et contrainte (1.56), obtenues dans le cas de comportement mécanique de type élasto-viscoplastique et maxwellien, contiennent deux états asymptotiques (élasticité pure et viscoplasticité pure). Il s'agit des cas suivants :

- cas de l'élasticité pure, nous avons alors :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp\,eff} = \underline{\underline{0}} \quad (1.58)$$

où $\underline{\underline{0}}$ représente le tenseur “nul”. Dans ce cas, les lois d'interactions en taux de déformation et de contrainte se réduisent à :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underset{\sim}{B}^{Ceff} : \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^e = \underset{\sim}{A}^{Ceff} : \underline{\underline{\dot{E}}} \end{cases} \quad (1.59)$$

- cas de la viscoplasticité pure, nous avons alors :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} = \underline{\underline{0}} \quad (1.60)$$

Dans ce cas, les lois d'interactions en déformation et en contrainte se réduisent à :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}} = \underset{\sim}{B}^{Beff} : \underline{\underline{\Sigma}} \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \underset{\sim}{A}^{Beff} : \underline{\underline{\dot{E}}} \end{cases} \quad (1.61)$$

avec $\underset{\sim}{B}^{Beff} = \underset{\sim}{b} : \underset{\sim}{A}^{Beff} : \underset{\sim}{M}^{eff}$.

L'algorithme d'intégration du modèle auto-cohérent présenté ici est donné en annexe A.

Le modèle auto-cohérent en élasto-viscoplasticité décrit dans cette section n'est pas le seul existant. Nous allons présenter les principaux autres modèles dans la section suivante.

1.3.5 Autres modélisations de type auto-cohérent en élasto-viscoplasticité

La loi d'interaction en contraintes (1.54) est proche de la loi d'interaction obtenue par Kröner-Weng [Krö61][Wen81] :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underset{\sim}{c} : \underset{\sim}{A}^{Ceff} : \underset{\sim}{S}^{eff} : \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} - \underset{\sim}{c} : \underset{\sim}{A}^{Ceff} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}^{Esh} \right) : \left(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} - \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp^{eff}} \right) \quad (1.62)$$

Cependant, ces deux lois sont fondamentalement différentes dans la mesure où le tenseur des interactions viscoplastiques $\underset{\sim}{A}^{B^{eff}}$ n'intervient pas dans la loi d'interaction (1.62). La loi d'interaction de Kröner-Weng surestime les contraintes locales (et donc la contrainte macroscopique) comme indiqué par Zaoui-Raphanel [ZR93], Sabar et al.[SBFB02] et Berbenni et al. [BFLB04].

Pilvin [Pil90] propose également un schéma auto-cohérent écrit en élasto-viscoplasticité, pour des chargements complexes, basé sur une nouvelle variable "heuristique" $\underline{\underline{\beta}}$. Elle remplace $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$ dans la loi d'interaction écrite par Kröner (équation (1.13)). La loi de localisation de ce modèle s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} + C(1 - \beta) : \left(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}} \right) \quad (1.63)$$

et β est défini par :

$$\underline{\underline{\dot{\beta}}} = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^p - D\underline{\underline{\beta}} \|\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^p\| \quad (1.64)$$

où D est identifié sur un essai de traction en utilisant le modèle de Berveiller-Zaoui [BZ79] comme référence. Le tenseur $\underline{\underline{B}}$ est défini pour satisfaire l'équilibrage du problème :

$$\underline{\underline{B}} = \overline{\underline{\underline{\beta}}} \quad (1.65)$$

Grâce à l'introduction de la variable interne $\underline{\underline{\beta}}$, la loi de localisation du modèle heuristique présente le même type d'évolution que la loi d'interaction de Berveiller-Zaoui. Pour une déformation plastique nulle ou très faible, la loi d'interaction de

Kröner-Weng est retrouvée. En revanche, pour des déformations plastiques importantes, la variable interne sature. La loi d'interaction, proposée par Pilvin, tend alors vers la loi d'interaction du modèle statique.

Contrairement aux trois approches auto-cohérentes en élasto-viscoplasticité présentées jusqu'à présent (qui sont à variable interne), Masson et Zaoui [MZ99] proposent une approche affine de type héréditaire, c'est-à-dire dépendante de toute l'histoire thermomécanique du matériau. Ils reprennent alors le processus de linéarisation proposé par Rougier et al. [RSZ94] qui consiste à linéariser à l'instant τ la loi de comportement au temps t :

$$\underline{\dot{\underline{\epsilon}}}(t, \tau) = \underline{s} : \underline{\dot{\underline{\sigma}}}(t) + \underline{\tilde{m}}(\tau) : \underline{\underline{\sigma}}(t) + \underline{\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}}_0(\tau, t) \quad (1.66)$$

$$\underline{\tilde{m}}(\tau) = \frac{dg}{d\underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{\sigma}}(\tau)) \quad (1.67)$$

$$\underline{\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}}_0(\tau) = g(\underline{\underline{\sigma}}(\tau)) - \underline{\tilde{m}}(\tau) : \underline{\underline{\sigma}}(\tau) \quad (1.68)$$

où $\underline{\tilde{m}}(\tau)$ et $\underline{\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}}_0(\tau)$ expriment les variations au premier ordre du taux de déformation inélastique avec la contrainte. L'approche de type héréditaire ainsi proposée, faisant apparaître différents ordres de dérivation dans la loi de comportement, nécessite de résoudre le problème dans l'espace de Laplace-Carson, puis, de ramener la solution dans l'espace réel. Le passage par l'espace de Laplace-Carson rend cette approche héréditaire numériquement lourde par rapport aux approches à variables internes. Le domaine de validité de ce modèle a été exploré récemment [BMCZ02].

Jusqu'à présent, nous avons introduit les techniques de transition d'échelle et différents effets de longueur interne. Néanmoins, la possibilité de prendre en compte des effets de longueur interne sur le comportement mécanique d'agrégats à partir d'approches de type micromécanique n'a pas encore été évoquée.

1.3.6 Insuffisance des modèles micromécaniques à champs moyens

Les schémas de transition d'échelle présentés (modèle auto-cohérent) utilisent une procédure qui consiste à noyer l'inclusion (ou le grain) dans une matrice infinie. Cette démarche découle de l'approche d'Eshelby [Esh57]. Ainsi, les lois d'interaction décrites dans la section (1.3.4) font intervenir le tenseur d'Eshelby qui dépend, dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale, des rapports des demi-axes $\tilde{S}^{Esh} \left(\frac{a}{b}, \frac{a}{c}, 1 \right)$ de l'ellipsoïde. Cette dépendance permet de capter les effets de la morphologie des inclusions (ou des grains) sur le comportement mécanique du VER, mais ne permet pas de capter ceux liés à la taille absolue des grains.

La section suivante met en avant les premières tentatives mises en œuvre afin de palier à cette insuffisance.

1.4 Prise en compte phénoménologique de l'effet taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats par des modèles à transition d'échelle

Les lois d'interaction ne permettant pas d'obtenir d'effet de taille de grains (sur le comportement mécanique), il apparaît nécessaire de donner une longueur interne (comme la taille de grain) en tant que variable des lois de comportement. Weng [Wen83] propose une première tentative afin d'obtenir un effet de taille de grains en utilisant un schéma auto-cohérent. Il introduit une loi de type Hall-Petch [Hal51][Pet53] au niveau de la cission critique τ_c sur chaque système de glissement en plasticité cristalline :

$$\tau_c(d, \gamma^p) = \tau_0 + k \cdot \bar{d}^{-1/2} + \left(h + a\bar{d}^{-1/2} \right) \gamma^{pn} \quad (1.69)$$

où τ_c représente la cission critique sur un système de glissement, τ_0 est la cission critique initiale provenant de la friction de réseau, k est le paramètre de Hall-Petch, \bar{d} est à la taille moyenne des grains dans l'agrégat, h est le coefficient d'écroûissage indépendant de la taille de grain, a est le coefficient d'écroûissage prenant en compte l'effet de taille de grains et γ^p correspond au glissement plastique.

La prise en compte de la taille du grain au niveau de la cission critique permet alors d'obtenir un effet de taille sur le comportement mécanique en traction simple

d'un matériau tel que le cuivre polycristallin [Wen83] (figure (1.19a)). La transition d'échelle, utilisée par Weng, est le modèle auto-cohérent sécant de Berveiller-Zaoui (équation (1.15) [BZ79] valable uniquement pour des chargements radiaux (comme ici en traction)).

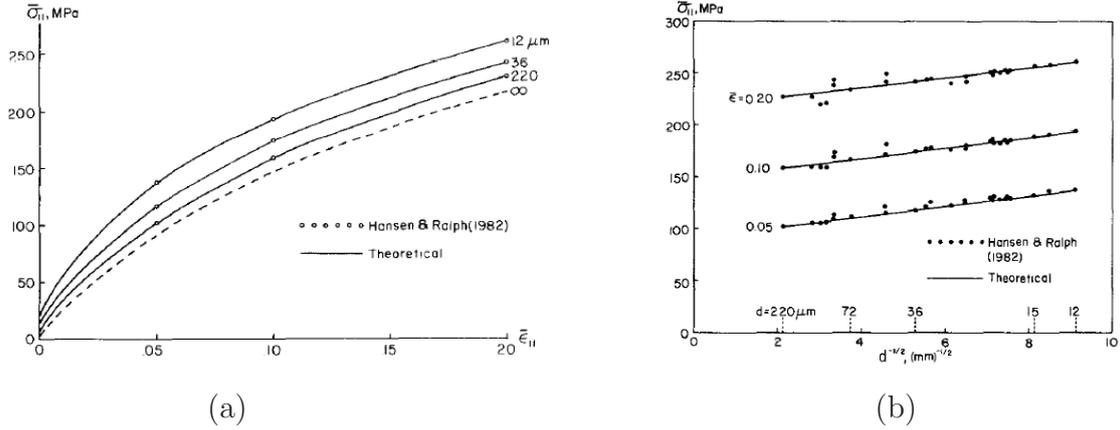


FIG. 1.19 – Effets de taille de grains sur le comportement mécanique (a) et sur le seuil d'écoulement pour des déformations de 5%, 10% et 20% (b) pour des agrégats polycristallins de cuivre soumis à un trajet de traction [Wen83]

L'évolution du seuil de plasticité macroscopique suit également une dépendance en $\bar{d}^{-1/2}$ et correspond parfaitement aux mesures expérimentales de Hansen et Ralph [HR82]. Cette première approche permettant d'obtenir un effet de taille de grains est relativement simple à mettre en œuvre mais ne s'intéresse pas aux effets des hétérogénéités de taille de grains notamment sur le comportement des polycristaux. Sinclair et al. [SPB06] arrivent à obtenir un effet de taille de grains sur la limite d'élasticité et sur l'écroutissage en prenant un seuil d'écoulement dépendant de la taille de grain, mais en limitant l'impact de la taille de grains par l'accumulation de dislocations aux joints de grain jusqu'à un état de saturation des dislocations aux joints. Ainsi, la loi d'écoulement mise en œuvre par Sinclair et al. est la suivante :

$$\sigma_c = \sigma_0 + M \left[\frac{\mu b}{D} n \left(1 - \frac{n}{n^*} \right) + \alpha \mu b \sqrt{\rho} \right] \quad (1.70)$$

où M est le coefficient de Taylor, D est le diamètre du grain, α est une constante, μ est le module de cisaillement, b est la norme du vecteur de Burgers et σ_0 est le seuil d'écoulement initial lié à la friction de réseau. ρ correspond à la densité moyenne de dislocation, dans le grain, qui suit une loi d'évolution indépendante de

la taille du grain (et non décrite ici), n est le nombre de dislocations bloquées au joint de grains (dislocations géométriquement nécessaires GND) et n^* correspond au “nombre” maximum de dislocations pouvant s’accumuler au joint de grains. D’après l’équation (1.70), si $n = n^*$ alors l’écoulement plastique devient indépendant de D (durcissement classique de type Taylor), ce qui explique que le taux d’érouissage devienne quasiment indépendant de la taille de grains lorsque la déformation dépasse 5%.

Cette approche, n’utilisant pas de technique de transition d’échelle, prend alors en compte un premier type d’interaction entre dislocations et joint de grains au niveau des empilements de dislocation qui produisent des contraintes internes (directement introduites dans le seuil de plasticité).

Cette interaction a pour effet de limiter l’érouissage pour des polycristaux à petites tailles de grain (figure (1.20)).

De plus, d’après Sinclair et al. lorsque $n = n^*/2$, la contribution cinématique $\sigma_b = M \left[\frac{\mu b}{D} n \left(1 - \frac{n}{n^*} \right) \right]$ atteint un maximum, ce qui explique l’apparition d’un petit plateau pour une déformation d’environ 1% et pour une taille de grains de $2,1 \mu m$.

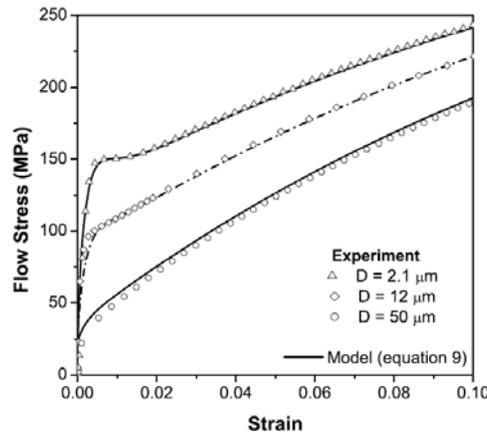


FIG. 1.20 – Effets de taille de grains sur le comportement mécanique d’agrégats polycristallins de cuivre soumis à un trajet de traction [SPB06]

Raeisnia et al. [RSPT08a] utilisent le modèle auto-cohérent en viscoplasticité développé par Lebensohn et Tomé [LT93] afin d’étudier les effets de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique du cuivre (matériau CFC à faible énergie de faute d’empilement). Dans cette modélisation, les déformations plastiques sont uniquement dues aux mouvements des dislocations. Comme dans les études de Weng [Wen83] et de Sinclair et al. [SPB06], Raeisnia et al. supposent que le seuil d’écoulement τ^s , dépendant de la taille des grains (sur les systèmes de glissement)

et des déformations cummulées Γ dans le grain, suit une loi de type Voce :

$$\tau^s = \tau_0 + [\tau_1 + \theta_1 (\Gamma + \Gamma_0)] \left[1 - \exp \left(- (\Gamma + \Gamma_0) \frac{\theta_1}{\tau_1} \right) \right] \quad (1.71)$$

où τ_0 et θ_0 décrivent les cissions critiques initiales (CCI) et le taux d'écroissage local, θ_1 est le taux d'écroissage asymptotique, τ_1 est une cission seuil, et, Γ_0 est une déformation caractéristique dépendant de la taille de grain.

Pour un grain de taille D , la CCI est déterminée par $\tau_0 + kd^{-1/2}$. Il est alors possible de déterminer Γ_0 pour des déformations cummulées nulles ($\Gamma = 0$).

La loi de type Voce permet alors de décrire l'écroissage de stade 3 en prenant en compte le recouvrement dynamique, puis du stade 4 (décrit au niveau de la loi d'écroissage par la constante θ_1).

Les distributions de taille de grains générées dans leurs travaux sont de type log-normal, et ont des moyennes comprises entre 0,1 et 50 μm et des déviations standards relatives σ_0/μ comprises entre 0 (sans dispersion de taille de grain) et 0,8.

Les simulations de traction, effectuées sur leurs différents agrégats, mettent en évidence un effet de la taille moyenne des grains sur le taux d'écroissage macroscopique. Il apparaît clairement que la relation de Hall-Petch varie en fonction de la dispersion des tailles de grain.

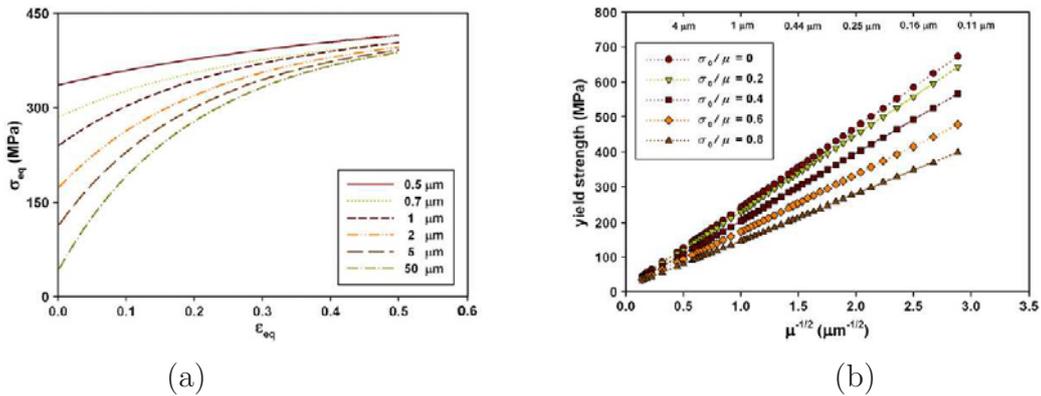


FIG. 1.21 – Effets de taille moyenne de grain sur le comportement mécanique (a) et effets de la dispersion relative de taille de grains sur la limite d'élasticité (b) au cours de simulations numériques de traction pour des agrégats polycristallins de cuivre [RSPT08a]

Ramtani et al. [RBD09] proposent une approche intéressante en mettant en

œuvre une méthode de transition d'échelle à inclusion enrobée en élastoplasticité afin d'étudier l'effet de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats dont ayant des grains de taille moyenne nanométrique.

Ils considèrent que le seuil d'écoulement du cœur des grains ne dépend pas de l'écroutissage mais de la taille de grain.

Par contre, au niveau de la couche, ce seuil d'écoulement dépend de l'écroutissage, lié à une accumulation de dislocations au joint de grain, mais ne dépend pas de la taille de grain.

Utilisant le même type de loi de distribution de taille de grains que Raeisia et al., l'approche de Ramtani et al. met également en évidence une variation de la loi de Hall-Petch lorsque la dispersion relative des tailles de grain ($\Delta D/D$) augmente (figure (1.22)). Cela se traduit par une diminution du facteur de Hall-Petch (k dans la relation $\tau = \tau_0 + kd^{-1/2}$) quand la dispersion relative des tailles de grain augmente. Cet effet a également été observé par Berbenni et al. [BFB07a][BFB07b] pour des matériaux dont la taille moyenne des grains est micrométrique.

Dans le Chapitre 2, nous nous focaliserons en détails sur les effets de la dispersion de taille de grains sur le comportement plastique d'agrégats isotropes.

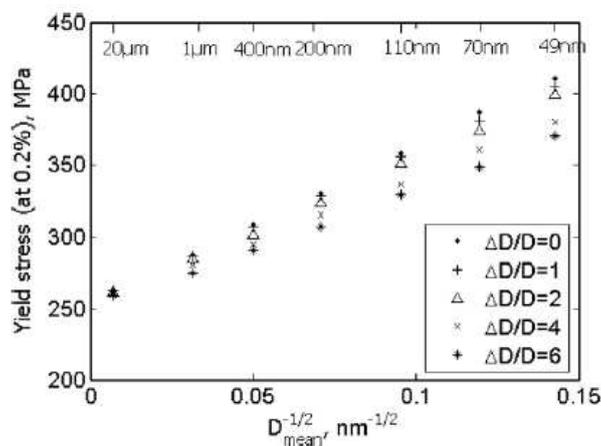


FIG. 1.22 – Effets de taille de grains et de dispersion relative $\Delta D/D$ sur la limite d'élasticité d'agrégats polycristallins de cuivre soumis à un trajet de traction [RBD09]

Ces études reportées [Wen83][SPB06][RBD09] donnent donc des effets de taille de grains probants, mais nécessitent une loi de type Hall-Petch au niveau du seuil de plasticité.

Pour palier à cet inconvénient, Ohno et Okumura [OO07] utilisent une approche de type milieu continu généralisé basée sur les gradients de déformation plastique et sur l'énergie libre produite par des GND [Gur02]. Leur approche permet d'obtenir des

effets de taille de grains sur la limite d'élasticité sous forme d'une loi hyperbolique ($\sigma_y = \sigma_0 + k \cdot D^{-1}$, figure (1.8)). Ainsi, l'utilisation des gradients de déformation plastique et des GND induites permet d'obtenir un effet de taille de grains sans avoir de seuil d'écoulement dépendant phénoménologiquement de la taille du grain.

1.5 Organisation du manuscrit

Dans les chapitres suivants, les effets de taille de grains sur le comportement mécanique macroscopique et sur les variables internes (champs mécanique et microstructure) de matériaux élasto-viscoplastiques seront étudiés en faisant l'hypothèse des petites déformations.

Ainsi, par exemple, la perte de ductilité des matériaux ne sera pas traitée dans ce manuscrit.

Dans le Chapitre 2, les effets de dispersion de taille de grain, encore peu explorés, seront étudiés en utilisant une formulation isotrope de la viscoplasticité. La contrainte de référence, définissant le seuil de plasticité, sera alors considérée comme dépendante de la taille de grains et de l'écroutissage du matériau, et sera de même nature que la cission critique définie par Weng [Wen83].

Un second volet (Chapitre 3) mettra en évidence l'influence de la taille de grains sur le comportement mécanique global et local dans le cadre de la plasticité cristalline. La cission critique sur chaque système de glissement sera également du même type que celle définie par Weng [Wen83] mais l'évolution des densités de dislocation se basera sur les travaux de Meckings et Kocks [MK81].

Cette approche sera mise en œuvre sur deux aciers IF ayant des tailles moyennes de grain différentes, mais de même nature métallurgique. Elle permettra également de mettre en évidence des effets liés à la corrélation orientation cristallographique / taille de grains sur le comportement mécanique macroscopique et sur l'anisotropie plastique des deux aciers.

Pour finir, le Chapitre 4 aborde deux approches complémentaires permettant d'obtenir des effets naturels de taille de grains sur le comportement mécanique du matériau.

La première de ces deux approches fait appel à des champs de déformations hétérogènes sur le grain liés à une distribution de boucle de super-dislocation, et permet notamment la mise en évidence d'une couche à fort gradient de contrainte interne à proximité du joint de grains.

Une seconde description plus moyenne, appelée “approche à champs moyens et à longueurs internes” (ACMLI), est développée et appliquée aux aciers IF.

Le schéma de transition d'échelle utilisé au cours des trois chapitres suivants est celui décrit dans la section (1.3.4). Il conduit aux lois d'interaction (1.54) et (1.56) rappelées aux moments opportuns pour faciliter la lecture.

Chapitre 2

Effets de la dispersion des tailles de grain sur le comportement isotrope de matériaux hétérogènes élasto-viscoplastiques

2.1 Introduction

Le comportement macroscopique des matériaux polycristallins métalliques dépend au moins de deux sources d'hétérogénéités plastiques.

La première source d'hétérogénéités est liée à la texture cristallographique du matériau. Celle-ci est souvent étudiée expérimentalement par diffraction des rayons X (DRX), et/ou par la technique de diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD) à l'aide d'un Microscope Electronique à Balayage (MEB). Les effets de la texture cristallographique sur le comportement mécanique sont bien connus [LB89] [LBRM95][BKRF00].

Ensuite, une seconde d'hétérogénéités provient de l'ordre microstructural, comme la taille des grains, leurs morphologies et leurs dispersions.

Jusqu'à présent, seule la texture cristallographique, représentée par une Fonction de Distribution d'Orientations (ODF), est prise en compte comme donnée dans les Volumes Élémentaires Représentatifs (VER) des modèles de transition d'échelle.

Un premier schéma d'homogénéisation utilisé pour étudier les effets de taille de grains fut écrit par Weng [Wen83] et appliqué à l'étude de polycristaux de cuivre. Pour étudier les effets de taille de grain, la taille moyenne des grains est introduite

au niveau de la cission critique des systèmes de glissement par le biais d'une loi de type Hall-Petch [Hal51][Pet53]. Néanmoins, dans ce modèle, seule la taille de grains moyenne de l'agrégat est considérée. Plus récemment, des études se sont penchées sur les effets de la distribution des tailles de grain sur le comportement macroscopique d'agrégats polycristallins [RBD09][BFB07a][BFB07b].

Dans ce chapitre, afin de simplifier l'impact de la loi d'interaction (1.56) sur les réponses mécaniques globales, nous allons étudier les effets de la dispersion des tailles de grain pour des agrégats polycristallins en considérant des lois locales élastique et viscoplastique isotropes. Ces travaux constituent une extension des travaux de Berbenni et al. [BFB07a][BFB07b] en prenant en compte une loi d'écrouissage phénoménologique pour chaque grain.

L'objectif n'est pas de comparer les effets de taille et de la dispersion de taille de grains avec des résultats expérimentaux, mais de mettre en évidence des effets potentiels de la dispersion des tailles de grain sur les propriétés mécaniques macroscopiques de matériaux métalliques (courbe contrainte-déformation en traction uniaxiale, effet Bauschinger) ainsi que sur l'évolution de la structure interne du matériau, c'est-à-dire sur l'évolution des champs mécaniques locaux et l'énergie bloquée.

2.1.1 Distribution de taille de grain : loi de distribution log-normale

Généralement, les problèmes portant sur la taille des grains considèrent une taille de grains moyenne. Cependant, la taille des grains n'est pas unique dans un agrégat, mais suit une loi de distribution.

La fonction distribution de taille de grains expérimentale la plus répandue est de type log-normal [HH95][RP82][ZAKB05][AAMP07][RBD09] (figure (2.1)).

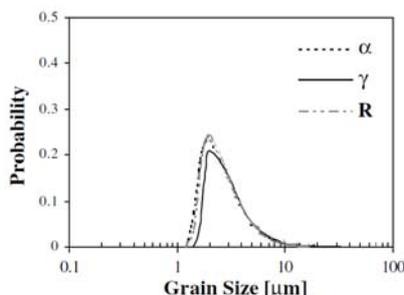


FIG. 2.1 – Evolution de la distribution de taille de grains de type log-normal pour un acier IF au cours de la recristallisation [SAGJJ06]

Les lois de distribution statistique couramment utilisées peuvent être caractérisées par quatre paramètres qui sont : la moyenne, la dispersion ou écart type, le coefficient d'asymétrie et le coefficient d'aplatissement (ou Kurtosis). Ces quatre paramètres correspondent aux moments de la loi de probabilité. Il est alors intéressant d'étudier leurs influences sur les lois de distribution de types log-normal, puis d'étudier leurs influences sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins (notamment l'influence de la dispersion de taille de grain). Pour commencer, les aspects statistiques des lois de probabilité log-normales seront présentés, puis les VER utilisés dans les simulations du comportement mécanique seront définis.

2.1.1.1 Les distributions de tailles de grain de type log-normal

La fonction densité de probabilité $P(D | M, S)$ de type log-normal, D étant la taille de grain, est définie de telle sorte que la variable x , avec $x = \ln(D)$, suit une distribution de type normal [EHP00]. Dans l'écriture $P(D | M, S)$, la variable M représente l'espérance, encore appelée moyenne, de la variable x , et S représente l'écart type de cette même variable. La fonction densité de probabilité sur la variable D , $P(D | M, S)$, s'écrit alors :

$$P(D | M, S) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} D \cdot S} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln(D) - M}{S} \right)^2 \right] \quad (2.1)$$

L'espérance (moyenne) μ et la variance Var de la variable D sont directement liées à la moyenne M et à l'écart type S de la variable x . Les relations permettant le passage des moyenne et écart type sur x aux moyenne et variance sur D sont les suivantes :

$$\begin{cases} \mu = \exp \left(M + \frac{S^2}{2} \right) \\ Var = \exp(S^2 + 2M) \cdot (\exp(S^2) - 1) \end{cases} \quad (2.2)$$

Néanmoins, les moyenne et variance d'une loi de probabilité log-normale ne décrivent pas intégralement l'allure de la loi de probabilité. En effet, contrairement aux lois de probabilité de type normal, ces lois de probabilité ne sont pas symétriques. Le facteur d'asymétrie dépend de l'écart type sur la variable x , donc

sur l'écart type de la variable $\ln(D)$ au vu de la définition de x . Il est défini par :

$$\alpha = (2 + \exp(S^2)) \sqrt{\exp(S^2) - 1} \quad (2.3)$$

Nous pouvons également étudier l'appâtissement des lois de probabilité log-normales en déterminant le coefficient d'appâtissement. Le Kurtosis κ peut se calculer dans le cas d'une distribution log-normale en utilisant l'expression :

$$\kappa = \frac{\exp(6S^2) - 4\exp(3S^2) + 6\exp(S^2) - 3}{(\exp(S^2) - 1)^4 \exp(4M + 2S^2)} \quad (2.4)$$

L'influence des paramètres M et S sur la loi de probabilité $P(D | M, S)$ est décrite par la figure (2.2).

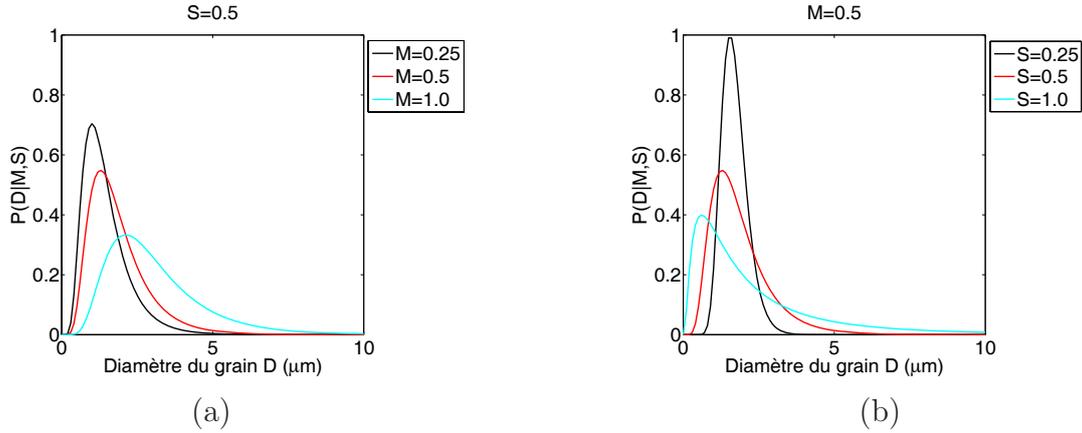


FIG. 2.2 – Effets conjugués des paramètres M à S fixes (a) et S à M fixes (b) sur l'allure de la loi de probabilité log-normale

Les paramètres μ , Var , α et κ des lois de distribution présents sur la figure (2.2) sont réportés dans le tableau (2.1).

Sur la figure (2.2a), les trois courbes ont le même facteur d'asymétrie mais présentent des Kurtosis différents. Alors que sur la figure (2.2b), les courbes ont des facteurs d'asymétrie et des Kurtosis différents.

Une augmentation du paramètre S ou M permet de diminuer le Kurtosis, donc "d'appâtir" la loi de distribution et d'augmenter la variance. Cet effet est plus

M	S	μ	Var	α	κ	M	S	μ	Var	α	κ
0,25	0,5	1,45	0,60	1,75	24,61	0,25	0,5	1,70	0,19	0,78	117,61
0,5	0,5	1,87	0,99	1,75	9,05	0,5	0,5	1,87	0,99	1,75	9,05
1,0	0,5	3,08	2,69	1,75	1,22	1,0	0,5	2,72	12,7	6,18	0,71

TAB. 2.1 – Caractéristiques des lois de distribution log-normales présentées sur la figure (2.2)

prononcé dans le cas d'une diminution de S . En observant les lois définissant ces caractéristiques, nous comprenons que le facteur d'asymétrie ne dépende que de l'écart type S sur la variable x (équation (2.3)).

Dans le cas où S vaut 0, le facteur d'asymétrie vaut 0 et le Kurtosis tend vers l'infini. Il est à noter que, normalement, pour un facteur d'asymétrie α de 0, la distribution statistique est symétrique. Or, les distributions de type log-normal, ayant un coefficient d'asymétrie de 0, présentent un pic de Dirac centré sur la valeur $D = \exp(M)$.

La fonction de probabilité cummulative $Cdf(D | M, S)$, également appelée fonction de répartition, de la fonction de probabilité de type log-normal $P(D | M, S)$ a pour expression :

$$Cdf(D | M, S) = \frac{1}{2} \left(1 + erf \left(\frac{\ln(D) - M}{S\sqrt{2}} \right) \right) \quad (2.5)$$

avec :

$$erf(x) = \int_0^x \exp(-t^2) dt \quad (2.6)$$

Les effets des paramètres M et S sur la fonction de répartition des lois de probabilité log-normales sont décrits sur la figure (2.3).

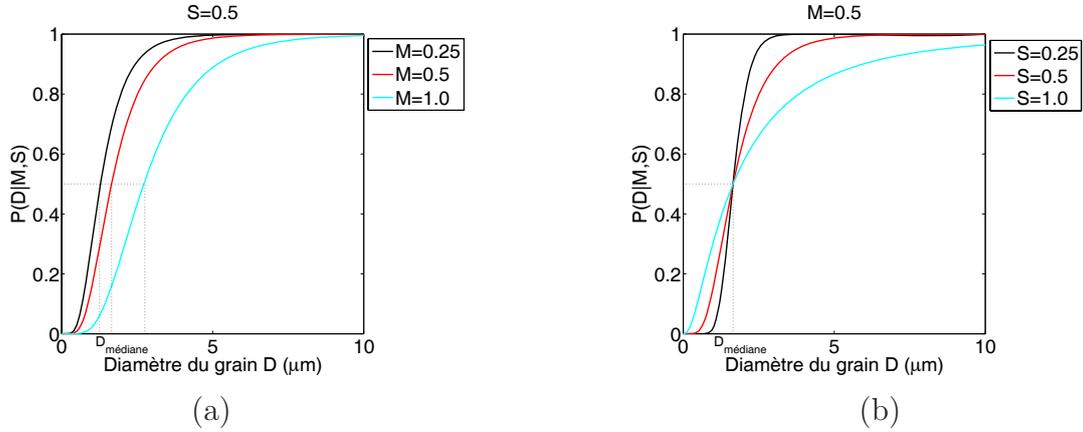


FIG. 2.3 – Effets conjugués des paramètres M à S fixes (a) et S à M fixes (b) sur la fonction de répartition de la loi de probabilité de type log-normal

La figure (2.3b) montre clairement que l'écart type S sur la variable x n'a pas d'effet sur la médiane de la loi de distribution, en d'autres termes, lorsque le paramètre S est modifié, pour une valeur de M fixée, la valeur médiane du diamètre des grains $D_{médiane}$ reste constante.

Par contre, la moyenne M sur la variable x permet de modifier cette valeur médiane $D_{médiane}$: une augmentation de M entraîne un accroissement de la valeur de la médiane de la distribution.

Ces exemples permettent d'illustrer les rôles conjugués de M et de S sur les caractéristiques de la fonction de distribution log-normale.

Dans la section suivante, nous allons définir les distributions de tailles de grain utilisées afin d'étudier les effets de tailles et de la dispersion des tailles de grain sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins à comportement isotrope.

2.1.1.2 Définitions des fractions volumiques et de la morphologie

Dans les schémas de transition de type auto-cohérent, comme introduits au Chapitre 1, la taille de grains n'est pas "directement" prise en compte, seules la morphologie et la fraction volumique des grains sont prises en considération dans le tenseur d'Eshelby [Esh57].

En revanche, la fraction volumique est prise en compte directement au niveau des modules viscoplastiques effectifs \tilde{B}^{eff} définis au Chapitre 1 par l'équation (1.38). Il

est alors nécessaire de déterminer les fractions volumiques des grains. En utilisant la loi de distribution log-normale $P(D | M, S)$ sur la taille de grains D et en faisant l'hypothèse de grains sphériques, la fraction volumique f^I d'un grain "I" ayant un diamètre D^I sera :

$$f^I = \frac{\pi D^{I3}}{6V} \quad (2.7)$$

Où $\frac{\pi D^3}{6}$ représente le volume du grain. Le volume total du VER, noté V , est défini par l'intégrale sur l'ensemble des tailles de grain D :

$$V = \int_0^\infty \frac{\pi}{6} D^3 p(D | M, S) dD \quad (2.8)$$

2.1.1.3 Composition des VER

Les VER étudiés sont composés de grains sphériques disposés spatialement de manière aléatoire. La figure (2.4) représente un VER constitué de N grains dont la disposition spatiale n'est pas corrélée à leurs tailles respectives.

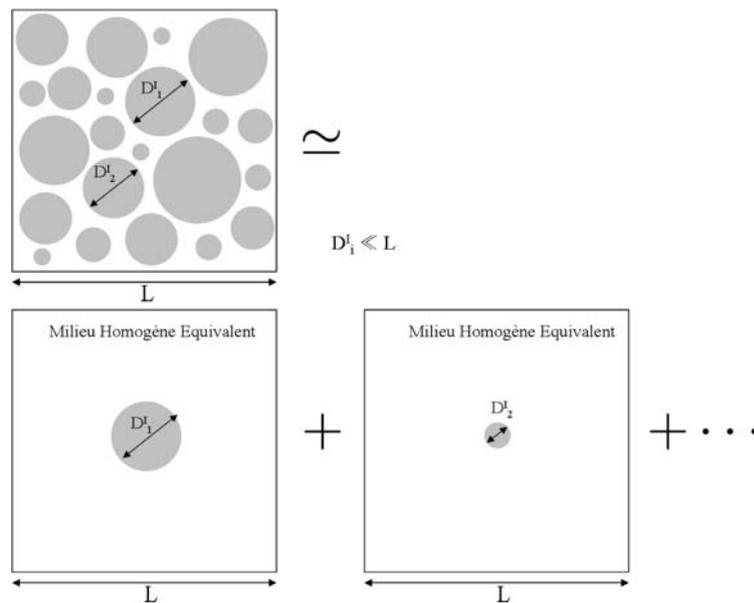


FIG. 2.4 – Représentation d'un VER composé de grains sphériques dont la position spatiale est indépendante de leur taille

La distribution des tailles de grain au sein du VER est de type log-normal, et est discrétisée par pas de $0,1 \mu m$. Cette discrétisation permet d'obtenir une bonne corrélation entre la loi de distribution continue et la loi de distribution discrète. Le nombre de grains composant le VER est de 2016. Ce nombre est recalculé afin d'avoir un VER représentatif, c'est à dire afin d'avoir un VER ayant un "gros" volume au vu du volume des plus gros grains, mais un petit volume au vu des structures macroscopiques.

Les grains ne peuvent avoir un diamètre inférieur à la taille minimale D_{min} de $0,1 \mu m$. Cette valeur minimale est définie en faisant l'hypothèse qu'un seul mode de déformation est présent dans le grain : il s'agit de déformations plastiques dues aux mouvements des dislocations.

Les mécanismes présents aux joints de grains comme dans les matériaux nanocristallins [ZAKB05] ne sont pas pris en compte.

La valeur maximale D_{max} que peut prendre un grain est de $500 \mu m$ afin d'éviter d'avoir des grains ayant une fraction volumique trop importante par rapport aux petits grains.

Les outils statistiques de MatLab 7, et notamment la fonction `lognpdf` correspondant à la fonction de probabilité log-normale, sont utilisés afin de générer les différentes distributions de taille de grains utilisées. Les distributions de taille de grains utilisées ont des moyennes variant de $2 \mu m$ à $100 \mu m$ et quatre dispersions relatives différentes. L'ensemble des paramètres concernant ces distributions de taille de grains sont donnés dans le tableau (2.2). Ce dernier récapitule également les tailles moyennes des lois de distribution continue et discrétisée, les tailles moyennes, minimales et maximales ainsi que l'étendue et la dispersion relative $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de chaque distribution étudiée.

La figure (2.5) permet de comparer les distributions de taille de grains continues pour des tailles moyennes de grain de 4 et $80 \mu m$ et pour des dispersions relatives de 0, 1, 2.5 et 5.

Paramètres d'entrée de la loi log-normale		Sortie de la loi de probabilité continue				Sortie de la loi de probabilité discrétisée				
M	S	μ	Var	α	κ	D_{min}	D_{max}	D_{moyen}	ΔD	$\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$
0,66	0,14	1,95	0,08	0,43	535,57	1,2	3,2	2,38	2,0	1,03
0,62	0,32	1,95	0,41	1,02	29,26	0,7	5,7	2,45	5,0	2,56
0,53	0,52	1,94	1,17	1,84	6,96	0,3	10,4	2,44	10,1	5,15
1,09	0,14	3,00	0,18	0,42	104,21	1,9	4,9	3,49	3	1,00
1,05	0,31	3,00	0,91	0,98	5,80	1,0	8,5	3,50	8	2,67
0,96	0,51	2,96	2,60	1,80	1,47	0,5	15,5	3,46	15	5,07
1,36	0,14	3,95	0,31	0,43	33,87	2,4	6,4	4,45	4,0	1,01
1,33	0,32	3,95	1,69	1,02	1,72	1,3	11,5	4,46	10,2	2,53
1,24	0,51	3,95	4,66	1,80	0,43	0,6	20,6	4,45	20,0	5,06
1,93	0,14	6,95	0,96	0,42	0,19	4,3	11,3	7,45	7,0	1,01
1,89	0,31	6,95	5,00	1,00	0,04	2,3	19,8	7,45	17,5	2,45
1,81	0,51	6,95	14,41	1,80	0,86	1,1	36,2	7,45	35,1	5,18
2,29	0,14	9,95	1,96	0,42	0,05	6,1	16,1	10,45	10,0	1,01
2,25	0,31	9,94	10,18	1,00	0,01	3,2	28,2	10,44	25,0	2,52
2,17	0,51	9,96	29,50	1,80	0,01	1,5	51,7	10,46	50,2	5,02
2,98	0,14	19,94	7,87	0,42	0,05	12,2	32,2	20,44	20,0	1,00
2,94	0,31	19,90	40,78	1,00	0,00	6,4	56,4	20,40	50,0	2,51
2,86	0,51	19,89	117,48	1,80	0,00	3,0	103,2	20,38	101,0	5,08
3,68	0,14	40,03	31,73	0,42	0,00	24,4	64,6	40,54	40,2	1,00
3,64	0,31	39,95	163,19	0,99	0,00	12,9	112,9	40,45	100,0	2,50
3,56	0,51	40,01	471,22	1,79	0,00	6,0	206,3	40,50	199,7	5,02
4,37	0,14	79,90	126,37	0,42	0,00	48,6	128,9	80,40	80,3	1,00
4,33	0,31	80,48	640,45	0,98	0,00	25,7	225,9	80,98	200,2	2,49
4,25	0,51	79,92	1880,55	1,79	0,00	12,0	412,2	80,41	400,2	5,02
4,6	0,14	99,96	196,34	0,42	0,00	60,9	161,0	100,45	100,1	1,00
4,56	0,31	99,95	1021,38	0,99	0,00	32,2	282,3	100,47	250,1	2,50

TAB. 2.2 – Paramètres et données principales des distributions log-normales utilisées

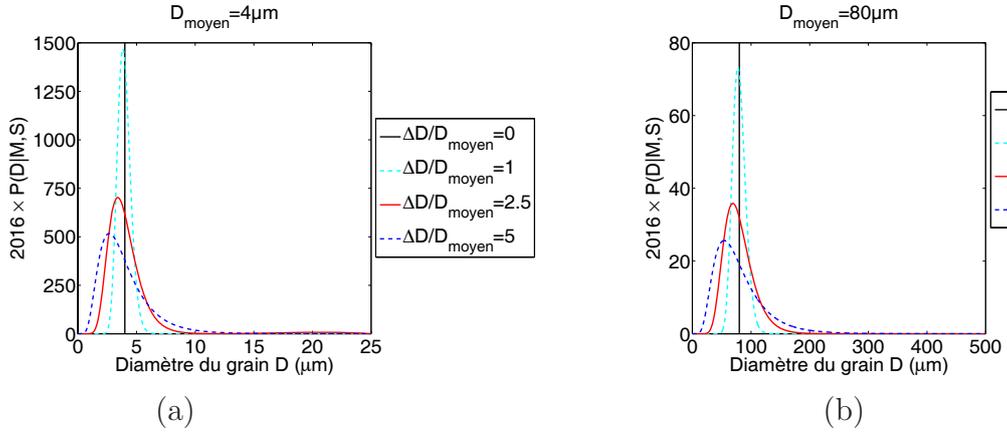


FIG. 2.5 – Distributions log-normale pour une taille moyenne de $4 \mu\text{m}$ (a) et de $80 \mu\text{m}$ (b)

Sur cette figure, il est à noter que les abscisses sont différentes entre le graphique de droite et celui de gauche. Malgré cette différence, les distributions sont semblables. Cette similitude est principalement due au facteur d'asymétrie. En effet, pour une dispersion relative donnée, et quelque soit la taille moyenne des grains de la distribution, le facteur d'asymétrie reste constant.

Par contre, les Kurtosis ont grandement variés.

En effet, sur la figure (2.5a), les Kurtosis passent de 33,87 (pour une dispersion relative de 1) à 0,43 (pour une dispersion relative de 5). Alors que sur la figure (2.5b), les Kurtosis passent de 0,0002 (pour une dispersion relative de 1) à 0,000003 (pour une dispersion relative de 5). Ils sont donc très faibles. Cette différence notable est principalement due aux différences de variance entre les deux tailles moyennes présentées ici.

La figure (2.6) permet de comparer les distributions de taille de grains continue et discrétisée, pour une taille moyenne de $80 \mu\text{m}$ et pour une dispersion de taille $\frac{\Delta D}{D_{\text{moyen}}}$ de 2,5. Cette figure met en évidence la bonne corrélation entre la loi de distribution continue et la loi de distribution discrète.

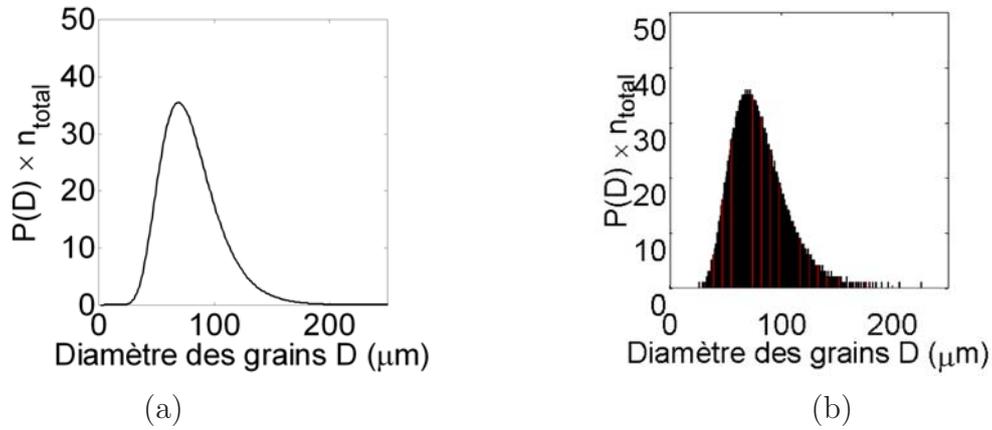


FIG. 2.6 – Distributions log-normales continue (a) et discrétisée (b) de taille de grains

Afin de décrire l'influence de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique effectif d'agrégat, des lois de comportement locales isotropes et dépendantes de la taille des grains sont mis en œuvre.

2.2 Loi d'interaction en élasticité homogène

Les équations d'interaction (1.54) et (1.56) peuvent être simplifiées en considérant des propriétés élastiques homogènes au sein du matériau. Cette hypothèse se traduit par la relation :

$$\underset{\sim}{c}(\underline{r}) = \underset{\sim}{C} \quad (2.9)$$

Nous pouvons alors facilement définir le tenseur des modules effectifs d'élasticité et le tenseur de localisation élastique $\underset{\sim}{A}^{C^{eff}}$. Les expressions de ces tenseurs sont les suivantes :

$$\begin{cases} \underset{\sim}{C}^{eff} = \underset{\sim}{C} \\ \underset{\sim}{A}^{C^{eff}} = \underset{\sim}{I} \end{cases} \quad (2.10)$$

Dans ce cas bien particulier de l'élasticité homogène et isotrope, les lois d'interaction en déformation (1.54) et en contrainte (1.56) se traduisent par :

$$\begin{cases} \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} = \dot{\underline{\underline{E}}} + \left(\underset{\sim}{A}^{Beff} - \underset{\sim}{I} \right) : \dot{\underline{\underline{E}}}^{vp^{eff}} + \underset{\sim}{\Gamma}^C : \underset{\sim}{C} : \left(\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} - \underset{\sim}{A}^{Beff} : \dot{\underline{\underline{E}}}^{vp^{eff}} \right) \\ \dot{\underline{\underline{\sigma}}} = \dot{\underline{\underline{S}}} - \underset{\sim}{C} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}^{Esh} \right) : \left(\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} - \underset{\sim}{A}^{Beff} : \dot{\underline{\underline{E}}}^{vp^{eff}} \right) \end{cases} \quad (2.11)$$

Par la suite, seul le cas de l'élasticité homogène sera utilisé.

2.3 Loi de comportement élasto-viscoplastique isotrope dépendante de la taille de grain

Le comportement mécanique de chaque grain sera supposé élasto-viscoplastique. Ce type de loi de comportement se traduit par la décomposition des taux de déformation en une partie élastique et une partie viscoplastique. Cette décomposition s'exprime, dans le cadre des petites déformations, par l'équation :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^I = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{e^I} + \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp^I} \quad (2.12)$$

Les exposants "I" font référence au grain ayant l'indice "I". Le tenseur des taux de déformation viscoplastique est lié au tenseur des contraintes par une formulation sécante :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp^I} = \underset{\sim}{m}^I(\underline{\underline{\sigma}}^I, t) : \underline{\underline{\sigma}}^I \quad (2.13)$$

Le tenseur des compliances $\underset{\sim}{m}^I(\underline{\underline{\sigma}}^I, t)$ dépend des mécanismes de déformation pris en compte. Nous supposons ici que la loi de comportement viscoplastique est isotrope et suit une évolution du type Prandtl-Reuss :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp^I} = \frac{3}{2} \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{vp^I}}{\sigma_{eq}^I} \right) s_{ij}^I \quad (2.14)$$

où le terme s_{ij}^I représente le déviateur des contraintes σ_{ij}^I . Ce tenseur déviateur se obtient à l'aide du tenseur d'ordre 4 \tilde{J} par :

$$\underline{\underline{s}} = \tilde{J} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (2.15)$$

Le tenseur \tilde{J} correspond à l'opérateur de "déviation" incluant l'incompressibilité viscoplastique, il est défini par :

$$J_{ijkl} = I_{ijkl} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl} \quad (2.16)$$

Les termes $\dot{\epsilon}_{eq}^{vpI}$ et σ_{eq}^I correspondent aux taux de déformation viscoplastique et aux contraintes équivalentes au sens de Von Mises. Ils s'expriment par l'expression :

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_{eq}^{vpI} = \sqrt{\frac{2}{3}\dot{\epsilon}_{ij}^{vpI}\dot{\epsilon}_{ij}^{vpI}} \\ \sigma_{eq}^I = \sqrt{3J_2} = \sqrt{\frac{3}{2}s_{ij}^I s_{ij}^I} \end{cases} \quad (2.17)$$

Le taux de déformation viscoplastique équivalent est supposé suivre une loi de type Norton, qui se traduit par :

$$\dot{\epsilon}_{eq}^{vpI} = \dot{\epsilon}_{ref} \left(\frac{\sigma_{eq}^I}{\sigma_{ref}^I} \right)^n \quad (2.18)$$

Dans cette expression, le terme $\dot{\epsilon}_{ref}$ correspond à un écoulement viscoplastique de référence, où n est un paramètre de sensibilité à la vitesse. En combinant les équations (2.14) et (2.18), nous obtenons une loi d'évolution des déformations viscoplastiques de type Odqvist :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vpI} = \frac{3}{2}\dot{\epsilon}_{ref} \left(\frac{\sigma_{eq}^I}{\sigma_{ref}^I} \right)^n \frac{s_{ij}^I}{\sigma_{eq}^I} \quad (2.19)$$

Les équations (2.13) et (2.19) permettent de déterminer le tenseur des com-

pliances viscoplastiques. Ce dernier s'exprime de la façon suivante :

$$m_{ijkl}^I = \frac{3}{2} \dot{\varepsilon}_{ref} \left(\frac{\sigma_{eq}^I}{\sigma_{ref}^I} \right)^n \frac{J_{ijkl}}{\sigma_{eq}^I} \quad (2.20)$$

Dans le tenseur des compliances viscoplastiques, le terme σ_{ref}^I correspond à une contrainte de référence qui décrit l'écroissage des grains. Cette contrainte est définie par la loi phénoménologique :

$$\sigma_{ref}^I = \sigma_0 + k \cdot (D^I)^{-m} + h \cdot (\varepsilon_{eq}^{vpI})^q \quad (2.21)$$

où le premier terme, σ_0 correspond à la friction de réseau, identique pour chaque grain dans le cas de matériau monophasé ; le second terme représente l'effet taille de grains qui suit une évolution de type Hall-Petch [Hal51][Pet53]. k et m correspondent aux paramètres de la loi de type Hall-Petch, le paramètre m est identifié pour les fers α par Armstrong [ACDP62] , sa valeur est de 0,5.

Le troisième terme correspond à un terme d'écroissage isotrope supposé de type Ludwik-Hollomon. Cet écroissage correspond aux interactions entre les dislocations au sein des grains et est défini par les paramètres h et q .

2.4 Paramètres matériaux et simulations étudiés

Les lois de comportement isotropes retenues permettent d'avoir un nombre limité de paramètres matériaux. Les différents paramètres matériaux présents dans cette première modélisation sont :

- les modules de Lamé μ et λ ,
- la puissance n de la loi de Odqvist (équation (2.19)) qui caractérise la sensibilité à la vitesse du comportement viscoplastique du matériau. Ce paramètre sera choisi de façon à caractériser une faible sensibilité à la vitesse suivant Paquin et al. [PBF+01] et le taux de déformation de référence $\dot{\varepsilon}_0$
- les paramètres σ_0 , k et h , et les puissances m et q présents dans l'expression de l'évolution de la contrainte de référence (équation (2.21)).

Le paramètre k et la puissance m sont les paramètres de la loi de Hall-Petch, ces paramètres sont définis à l'aide des travaux de Li et al. [LCLL03] et de Armstrong [ACDP62].

Le paramètre h et la puissance q sont les paramètres de la loi de type Ludwik-Hollomon, ils sont définis à l'aide des travaux de Narayanasamy et Narayanan [NN05] et de Jaoul [Jao65]. Les valeurs de ces différents paramètres sont énumérées dans le tableau (2.3).

μ (MPa)	λ (MPa)	$\dot{\epsilon}_0$ (s^{-1})	n	σ_0 (MPa)	k (MPa $\cdot\mu m^m$)	m	h (MPa)	q
80000	120000	1	20	100	600	0,5	500	0,32

TAB. 2.3 – Paramètres de la loi de comportement pour un acier bas carbone

Afin d'étudier l'impact de la taille de grains et principalement de la taille moyenne et de la dispersion relative de taille de grains sur les comportements mécaniques de matériaux polycristallins, des essais de traction simple et de traction réversible sont simulés jusqu'à des déformations de 10%. Nous nous placerons dans un cas quasi-statique, c'est-à-dire à une vitesse de déformation de $0,008 s^{-1}$.

Les résultats numériques sont tout d'abord présentés à l'échelle macroscopique en termes de courbes contraintes/déformations et de limite d'élasticité en fonction de la taille moyenne et de la dispersion de taille de grain. Puis, ils sont reportés en termes de champs locaux, c'est-à-dire, en termes de contraintes internes et de déformations plastiques à l'intérieur des grains.

2.4.1 Influence de la taille et de la dispersion relative des tailles de grain sur le comportement mécanique macroscopique

2.4.1.1 Influence de la taille et de la dispersion relative des tailles de grain sur les réponses macroscopiques en traction uniaxiale

Comme le montre la figure (2.7) pour deux tailles moyennes ($4 \mu m$ et $80 \mu m$) et trois dispersions relatives (0, 1 et 5), le comportement mécanique macroscopique de l'agrégat dépend à la fois de la taille moyenne et de la dispersion de taille de grain. Néanmoins, cette dépendance se traduit principalement en terme de seuil de plasticité et en aucun cas en terme d'écrouissage. Ceci s'explique par l'absence de terme combinant l'effet de taille, donc le terme de Hall-Petch, et l'écrouissage, c'est-à-dire

le terme de Ludwik-Hollomon. Dans ses travaux, Weng [Wen83] démontre que la combinaison d'une loi de type Hall-Petch avec une loi d'écroutissage de type Ludwik-Hollomon fait apparaître un troisième terme combinant ces deux effets. Néanmoins, dans le cas de petites déformations, l'influence d'un tel terme sur l'écroutissage est négligeable. Un effet similaire fut trouvé sur les limites d'écoulement du matériau par Berbenni et al. [BFB07a][BFB07b], c'est-à-dire en élasto-viscoplasticité, mais sans écroutissage.

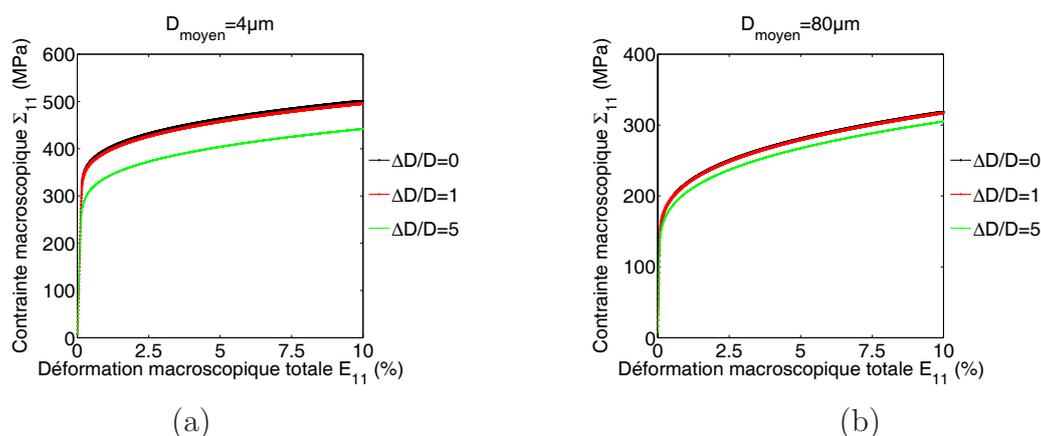


FIG. 2.7 – Effets de la taille et de dispersion des tailles de grain sur le comportement mécanique en traction pour une taille moyenne de grain de 4 μm (a) et de 80 μm (b)

2.4.1.2 Influence de la taille moyenne et de la dispersion de taille de grains sur la limite d'élasticité macroscopique

La figure (2.8) représente l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la taille moyenne des grains et de la dispersion relative sous la forme d'un diagramme de Hall-Petch. La limite d'élasticité, dite conventionnelle, représente la contrainte macroscopique en charge lorsque le matériau a subi une déformation plastique de 0,2%.

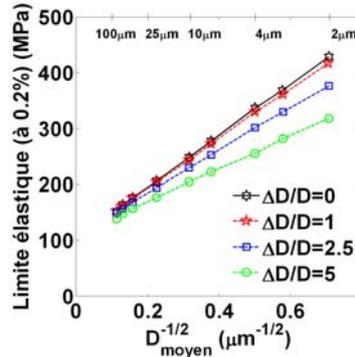


FIG. 2.8 – Effets de la taille et de dispersion des tailles de grain sur la limite d'élasticité macroscopique

Conformément aux travaux de Berbenni et al. [BFB07a][BFB07b], une influence non négligeable de la dispersion des tailles de grain sur la limite d'élasticité macroscopique est remarquable.

Le cas où $\frac{\Delta D}{D_{moyen}} = 0$ correspond au comportement classique de la loi de Hall-Petch introduit au niveau des grains [Hal51] [Pet53]. La dispersion des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ crée une déviation du comportement de Hall-Petch caractérisée par une diminution de la limite d'élasticité et une l'augmentation de la dispersion des tailles, c'est-à-dire une diminution du coefficient de Hall-Petch effectif pour le VER par rapport au cas sans dispersion des tailles de grain.

En d'autres termes, la dispersion des tailles de grain tend à réduire l'effet de la taille moyenne, et pour une dispersion relative "infinie" (c'est-à-dire pour une étendue de tailles de grain infinie), nous pourrions ne plus avoir d'effet de taille de grain. Cette dispersion relative a également été observée par Kurzydowski [Kur90] en utilisant un modèle de transition d'échelle simplifié de type Taylor.

2.4.1.3 Influence de la taille moyenne et de la dispersion de taille de grains sur l'effet Bauschinger

Ici, nous nous intéressons aux potentiels effets de dispersion des tailles de grain sur l'effet Bauschinger. L'effet Bauschinger correspond à la variation (diminution) de limite élastique entre un premier chargement en traction (permettant d'obtenir une nouvelle limite élastique théorique) et la reprise de plasticité lors d'un second trajet en compression (sens inverse au premier chargement).

L'effet Bauschinger est étudié grâce à des essais de traction-compression, jusqu'à

des déformations de 0,2%, 1%, 2,5%, 5% et 10%, et pour des tailles moyennes de grain de $4 \mu\text{m}$ et $80 \mu\text{m}$ et des dispersion relatives $\frac{\Delta D}{D_{\text{moyen}}}$ de 0, 1 et 5. La figure (2.9) représente les courbes contraintes-déformations obtenues par les simulations.

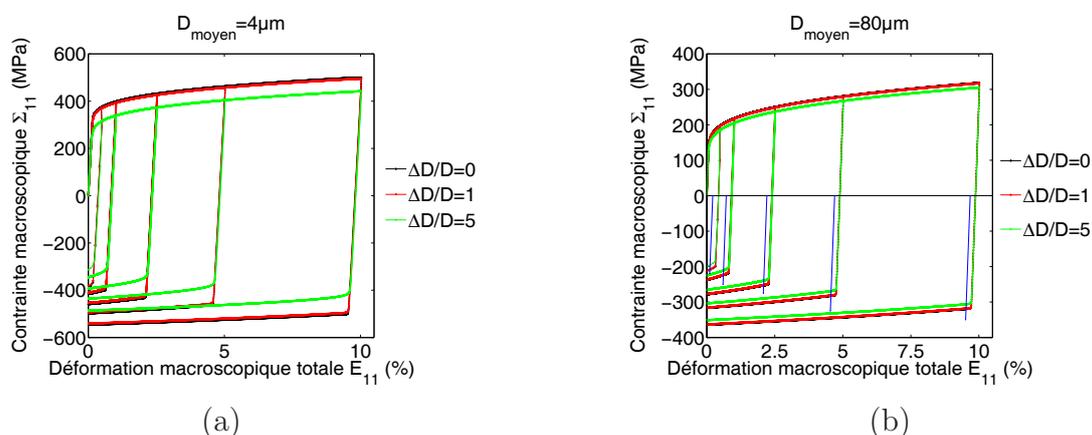


FIG. 2.9 – Courbes de traction-compression pour une taille moyenne de grain de $4 \mu\text{m}$ (a) et de $80 \mu\text{m}$ (b)

Expérimentalement, ce genre de trajet est “irréalisable” sur des tôles métalliques d’épaisseur millimétrique (pour cause de flambement au cours de la compression) mais réalisable sur des éprouvettes cylindriques et des rapports longueurs utiles / diamètres de l’éprouvette faible.

Néanmoins, l’avantage de ces simulations est de permettre une lecture “rapide” des effets de la dispersion des tailles de grain sur la réorganisation des contraintes internes au cours de l’essai de type Bauschinger. L’évolution de l’effet Bauschinger en fonction de la déformation maximale de l’essai est représenté sur la figure (2.10).

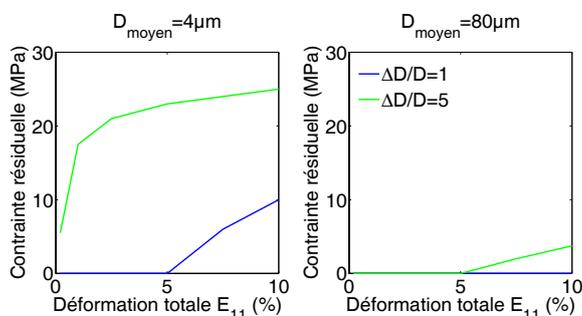


FIG. 2.10 – Effets de la taille et de la dispersion des tailles de grain sur l’effet Bauschinger en traction-compression

Pour une dispersion relative $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 0, c'est-à-dire pour une taille unique de grain, l'effet Bauschinger n'évolue, et, n'existe pas. Pour une taille moyenne de 80 μm , l'effet Bauschinger est très faible quelque soit la dispersion relative. Alors que pour une taille moyenne de 4 μm , plus la dispersion relative augmente, plus l'effet Bauschinger apparait tôt au cours du chargement.

L'étude de l'évolution de l'énergie bloquée due aux contraintes résiduelles dans le matériau au cours des trajets de traction-compression permet de vérifier l'importance de l'effet de la dispersion des tailles de grain.

2.4.1.4 Effets de la dispersion des tailles de grain sur l'énergie bloquée

L'énergie bloquée par unité de volume permet de caractériser l'énergie élastique emmagasinée par l'ensemble des grains de l'agrégat, due aux contraintes internes d'ordre 2 (ou contraintes internes d'origine intergranulaire) ou encore contraintes résiduelles. Cette énergie se détermine par la formule [FPZ91] :

$$W_b = \frac{1}{2V} \int_V \underline{\underline{\sigma}}_R(\underline{r}) : \underline{\underline{S}}(\underline{r}) : \underline{\underline{\sigma}}_R(\underline{r}) dV \quad (2.22)$$

où $\underline{\underline{\sigma}}_R$ représente le tenseur des contraintes résiduelles, c'est-à-dire, ici, la différence $\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\Sigma}}$. En appliquant les hypothèses de milieu granulaire à champs moyens dans le grain et de l'élasticité homogène, la relation (2.22) devient :

$$W_b = \frac{1}{2} \sum_{I=1}^N f^I (\underline{\underline{\sigma}}^I - \underline{\underline{\Sigma}}) : \underline{\underline{S}} : (\underline{\underline{\sigma}}^I - \underline{\underline{\Sigma}}) \quad (2.23)$$

Le modèle utilisé permet de suivre l'évolution de l'énergie stockée au cours des trajets de chargement. Dans le cas des essais de traction-compression énoncés précédemment, l'évolution de l'énergie bloquée (en J/m^3) est représentée sur la figure (2.11). Il faut noter que l'énergie bloquée due aux dislocations intra-granulaires, et qui est à l'origine des contraintes résiduelles d'ordre 3, est négligée. D'après Seeger et Kronmuller [SK62], ces contributions restent cependant bien inférieures à l'énergie bloquée définie par l'équation (2.23).

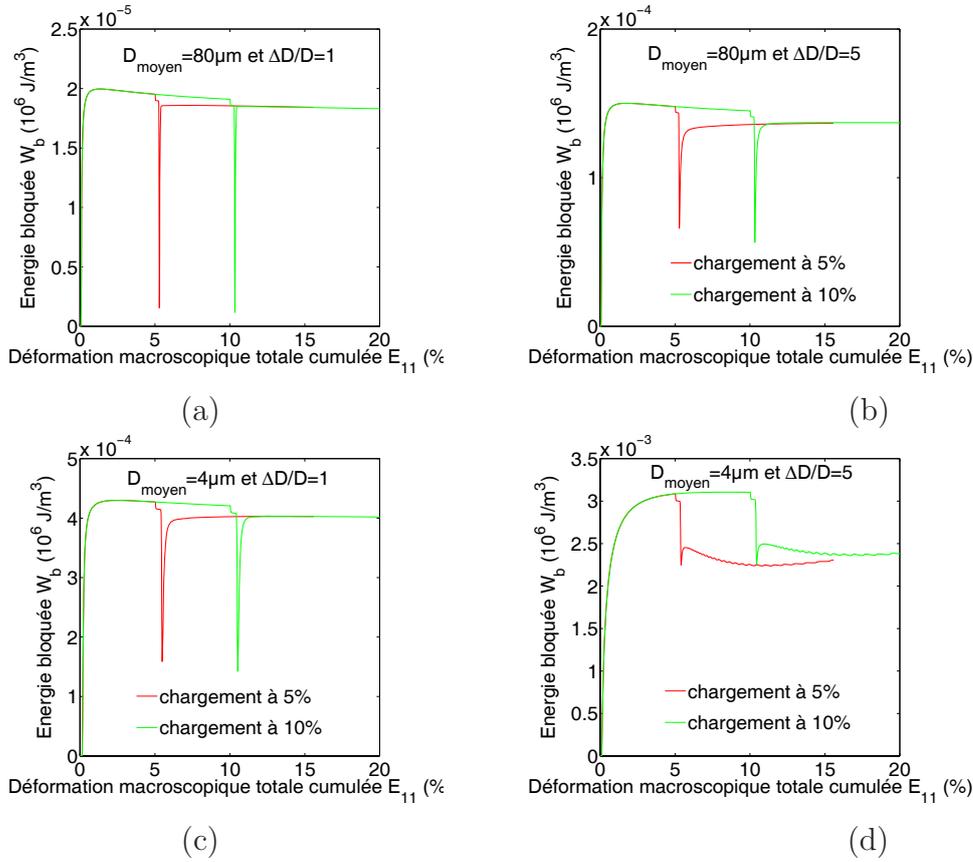


FIG. 2.11 – Evolution de l'énergie bloquée W_b au cours d'essais de traction-compression, pour une taille moyenne de grain D_{moyen} de $80 \mu m$ et des dispersions des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b), et pour une taille moyenne de grain D_{moyen} de $4 \mu m$ et des dispersions de taille de grains $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (c) et 5 (d)

L'effet de la dispersion des tailles de grain est plus prononcé sur l'énergie bloquée lorsque la taille moyenne est plus fine. Lorsque nous passons, à même dispersion relative $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$, d'une taille moyenne de $80 \mu m$ à une taille moyenne de grain de $4 \mu m$, l'énergie bloquée est multipliée par 20. L'effet de la dispersion relative est moindre mais bien présent. Ainsi, une augmentation de la dispersion relative de 1 à 5 permet de multiplier par 7 environ l'énergie bloquée. L'énergie bloquée passe par un maximum, puis diminue avec la déformation. Mais ceci n'est pas vérifié dans le cas où la taille moyenne est de $4 \mu m$ et la dispersion relative de 5. En effet, dans ce cas précis, l'énergie bloquée croît constamment au cours du premier trajet.

Au vu de l'équation (2.23), cette évolution particulière pourrait être synonyme d'une augmentation, d'une stagnation ou d'une diminution continue des contraintes in-

ternes d'ordre 2, correspondante en valeur absolue à la différence entre la contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$ et la contrainte locale $\underline{\underline{\sigma}}$.

Pour vérifier cette hypothèse et comprendre l'effet Bauschinger présenté (figure (2.10)), nous allons nous intéresser à l'évolution des champs mécaniques locaux.

2.4.2 Influence de la dispersion des tailles de grain sur les champs mécaniques locaux

Les différents effets de la dispersion des tailles de grain reportés jusqu'à maintenant ont été étudiés sur les réponses à l'échelle macroscopique. Or, l'intérêt des approches micro-macro est de pouvoir comprendre ces effets en suivant les champs mécaniques locaux au cours de la déformation. Il est donc intéressant de voir l'évolution de la microstructure et des champs mécaniques locaux, au cours du chargement de traction. Cette étude doit permettre de comprendre l'évolution des phénomènes observés en termes de contraintes internes d'ordre 2 et d'accommodation intragranulaire (de nature élasto-viscoplastique) en fonction de la dispersion des tailles de grain.

2.4.2.1 Evolution des déformations (visco)plastiques locales

Nous commençons ici par étudier l'évolution des champs de déformation plastique pour un essai de traction dans la direction notée 1. Les champs de déformation plastique permettent de caractériser la nature de l'accommodation des différents grains au sein de l'agrégat. Les figures (2.12) et (2.13) représentent l'évolution des déformations plastiques en fonction de la taille des grains, pour des tailles moyennes de $80 \mu m$ et de $4 \mu m$ respectivement, pour des déformations macroscopiques totales de 1%, 5% et 10%.

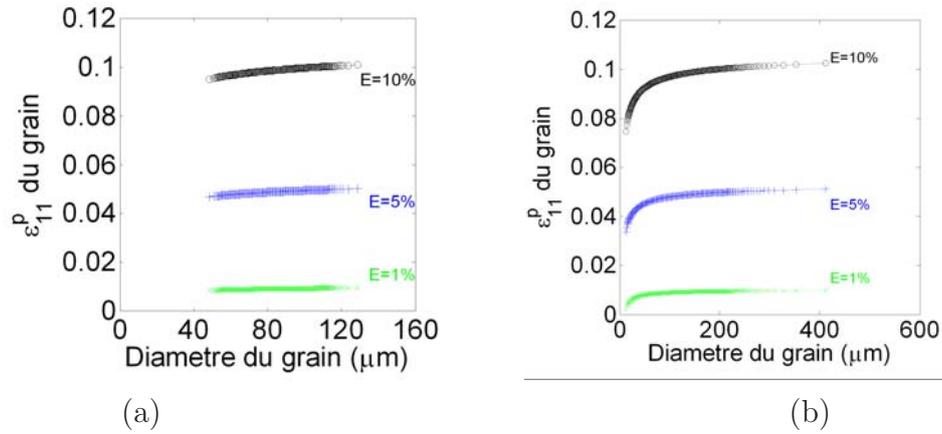


FIG. 2.12 – Evolution des champs de déformations en fonction de la taille du grain, pour une taille moyenne D_{moyen} de $80\mu m$ et des dispersions de taille $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b)

Pour une taille moyenne de $80\mu m$ (figure (2.12)), et quelque soit la dispersion relative des tailles de grain, les grains ont tous plastifié avant d’atteindre 1% de déformation totale.

Une forte hétérogénéité des déformations plastiques pour une dispersion relative de 5 est remarquable, alors que celles-ci sont relativement homogènes pour une dispersion relative de 1. Ces déformations sont accrues pour des tailles de grain plus importantes ; ainsi, les “gros” grains sont plus déformés plastiquement que les petits grains. Ce qui est cohérent avec un seuil de plasticité local qui suit une loi de type Hall-Petch (équation (2.21)). L’hétérogénéité des déformations plastiques augmente avec la déformation totale de l’agrégat.

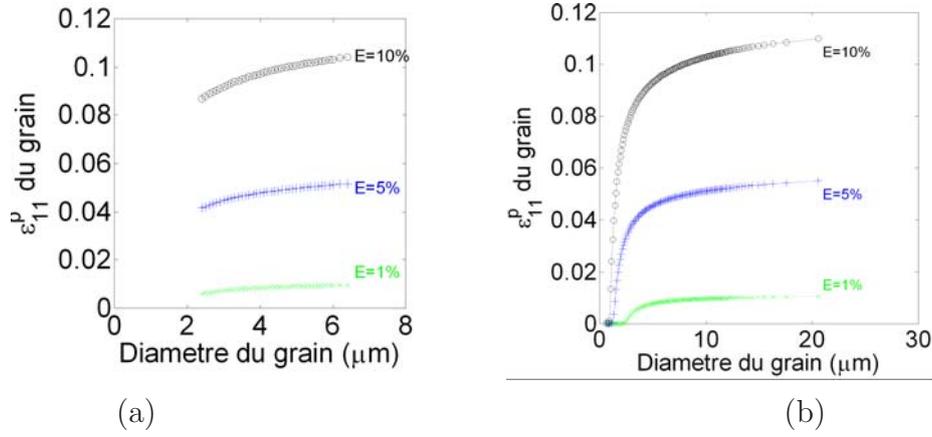


FIG. 2.13 – Evolution des champs de déformation plastique locaux en fonction de la taille du grain, pour une taille moyenne D_{moyen} de $4 \mu m$ et des dispersions des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b)

Pour une taille moyenne de $4 \mu m$ (figure (2.13)), et pour une dispersion relative de 1, nous retrouvons les mêmes tendances que précédemment. Pour une dispersion relative de 5 (figure (2.13b)), alors que nous remarquons la même allure des fluctuations des déformations plastiques que pour une taille moyenne de $80 \mu m$ (figure (2.12b)), les grains les plus fins restent dans un état élastique jusqu'à 10% de déformation totale ($\varepsilon_{11}^p = 0$ sur la figure (2.13b)).

Ainsi, au cours de la déformation de l'agrégat, tous les grains commencent par se déformer élastiquement et identiquement du fait de l'hypothèse d'homogénéité élastique.

Puis, les gros grains s'accommodent plastiquement alors que les plus petits grains ne peuvent que s'accommoder élastiquement.

Enfin, dans un troisième temps, tous les grains s'accommodent plastiquement. Ces résultats sont dus aux différentes tailles, et donc aux différentes contraintes de référence σ_{ref} (équation (2.21) entre les grains qui auront une influence directement sur la loi d'interaction intergranulaire du modèle de transition d'échelle présenté dans la section (1.3.4).

2.4.2.2 Evolution des contraintes locales

Nous étudions maintenant l'évolution des champs locaux de contrainte au cours des mêmes essais de traction simple. Nous obtenons alors des informations sur les contraintes internes d'ordre 2 (intergranulaires). Les figures (2.14) et (2.15)

représentent l'évolution des contraintes internes en fonction de la taille des grains, pour des tailles moyennes de $80 \mu m$ et de $4 \mu m$ respectivement et pour des déformations macroscopiques totales de 1%, 5% et 10%. Sur ces figures, les contraintes macroscopiques sont représentées par des droites horizontales, et leurs valeurs sont indiquées.

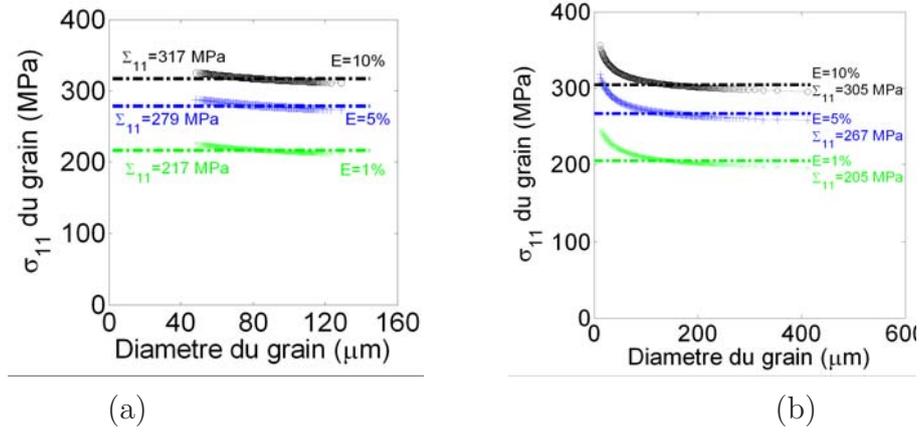


FIG. 2.14 – Evolution des champs de contrainte locaux en fonction de la taille des grains, pour une taille moyenne D_{moyen} de $80 \mu m$ et des dispersions des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b)

A première vue, pour une taille moyenne de grain de $80 \mu m$, et quelque soit la dispersion relative (figure (2.14)), et pour une taille moyenne de $4 \mu m$, et une dispersion relative de 1 (figure (2.15a)), les champs de contraintes locaux fluctuent de façon continue en fonction de la taille du grain.

A contrario, pour une taille moyenne de $4 \mu m$, et une dispersion relative de 5 (figure (2.15b)), trois régimes se distinguent.

Dans un premier temps, les “petits” grains ont encore un comportement quasi-élastique, ainsi, ils ne sont que peu soumis à des contraintes internes. L'évolution des contraintes internes, en fonction de la taille des grains, présente alors un plateau provenant de la loi d'interaction liant les contraintes internes (locales) aux contraintes macroscopiques et aux déformations plastiques locales (étant nulles pour les “petits” grains) et macroscopiques.

Dans un second temps, un régime transitoire apparaît, les contraintes internes augmentent rapidement avec la taille du grain jusqu'à atteindre un maximum. Ce régime transitoire correspond à un écrouissage rapide des “petits” grains.

Le troisième régime correspond à une diminution continue des contraintes internes en fonction de la taille du grain, cette fluctuation est similaire aux fluctuations

présentes pour une taille moyenne de $80 \mu m$.

Les trois régimes, observables pour la taille moyenne de $4 \mu m$ et la dispersion relative de 5, sont également observables pour les trois autres cas présentés ici.

En effet, le premier régime correspond à un comportement élastique des petits grains. Pour une taille moyenne de $80 \mu m$, la contrainte de référence initiale moyenne σ_{ref} , c'est-à-dire les termes correspondant à la striction de réseau et à l'effet Hall-Petch $\sigma_0 + k \cdot D^{-m}$, est deux fois plus faible que pour une taille moyenne de $4 \mu m$. Ainsi, le premier régime apparaît beaucoup plus tôt pour une taille moyenne de $80 \mu m$. Le second régime étant un régime de transition, il est également observable pour une taille moyenne de $80 \mu m$, mais comme pour le premier régime, cette transition se produit rapidement avant d'atteindre 1% de déformation globale.

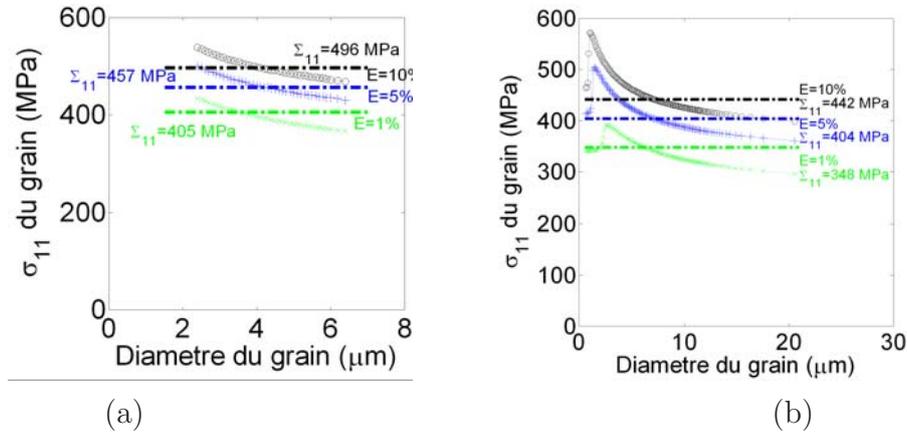


FIG. 2.15 – Evolution des champs locaux de contrainte en fonction de la taille des grains, pour une taille moyenne D_{moyen} de $4 \mu m$ et des dispersions des tailles de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ de 1 (a) et 5 (b)

Pour une dispersion relative de 1, les grains ayant des contraintes de référence σ_{ref} moins hétérogènes, les trois régimes seraient également observables pour des déformations globales largement inférieures au pourcentage. Donc, ce n'est pas un effet de taille moyenne qui masque les trois régimes, dans le cas présent, mais bien un effet de la dispersion des tailles de grain.

2.5 Conclusions

La modélisation présentée dans cette partie a permis de mettre en évidence un effet de la taille moyenne des grains “connu” sur le comportement mécanique macroscopique d’un matériau hétérogène ayant des lois locales de comportement mécanique de type isotrope.

Nous avons également montré qu’un effet similaire, et même plus important dans certains cas, est lié à la dispersion relative des tailles de grain dans l’agrégat en supposant une limite d’écoulement locale de type Hall-Petch.

Pour des valeurs réalistes de coefficient de Hall-Petch pour des matériaux cubiques centrés (type aciers), une forte déviation par rapport à la pente de Hall-Petch locale est observée à l’échelle macroscopique. Ces effets sur les contraintes et déformations locales sont du même ordre de grandeur que l’effet d’anisotropie cristalline bien mieux étudié dans la dernière décennie (figure (2.16)) [LBRM95] [BKRF00].

Néanmoins, cet effet de la dispersion des tailles de grain est plus important pour les matériaux à grains fins, représentés dans cette première sous partie par un agrégat ayant une taille moyenne de grain de $4 \mu m$, que pour des matériaux à grains grossiers (ayant par exemple une taille moyenne de $80 \mu m$).

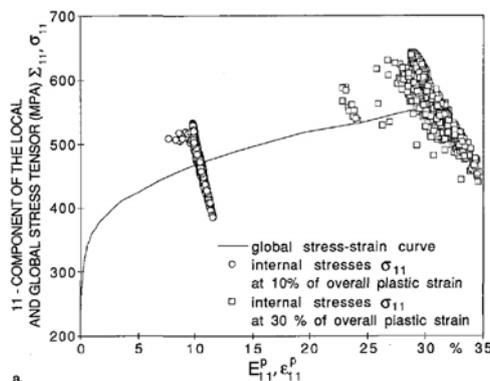


FIG. 2.16 – Effets d’anisotropie cristalline sur le comportement mécanique local [LBRM95]

Les matériaux métalliques “réels” polycristallins combinent à la fois une distribution de taille de grains et une anisotropie plastique provenant de la texture cristallographique. Il est alors fort intéressant d’étudier l’effet combiné de la dispersion des tailles de grain et de l’orientation cristallographique sur les propriétés mécaniques de ces matériaux, principal objectif du Chapitre 3.

Chapitre 3

Effets couplés de la dispersion de taille de grains et de l'orientation cristallographique sur le comportement mécanique d'aciers IF

3.1 Introduction

Le Chapitre 2 a permis de mettre en avant l'impact de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique macroscopique d'agrégats polycristallins. Dans cette approche, les lois de comportement étaient isotropes, négligeant ainsi les orientations cristallographiques du réseau cristallin des différents grains.

Des conclusions similaires ont été obtenues dans le cadre de la plasticité cristalline par Raesinia et al. [RSPT08b] en utilisant le modèle auto-cohérent en viscoplasticité écrit par Lebensohn et Tomé [LT93]. Ramtani et al. [RBD09] observent également cet effet de dispersion de taille de grain, pour les matériaux nanocristallins, en utilisant le schéma auto-cohérent généralisé (inclusion enrobée) écrit par Jiang et Weng [JW04].

Généralement, la texture cristallographique est prise en compte grâce à la fonction de distribution d'orientation (ODF) en tant que donnée d'entrée pour le Volume Élémentaire Représentatif sans considérer la taille des grains.

Les deux études précédentes [RSPT08b][RBD09] ne sont pas les premières à combi-

ner l'orientation cristallographique et la taille de grain.

Weng [Wen83] a mis en œuvre un schéma auto-cohérent de type Berveiller-Zaoui afin d'observer les effets de taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins de cuivre. Son étude est réalisée dans le cadre de la plasticité cristalline en supposant, sur chaque système de glissement, une cission critique qui dépend de la taille des grains.

Néanmoins, dans son approche, Weng considère que tous les grains ont la même taille. Melchior et Delannay [MD06] ont étudié le rôle de la distribution de taille de grains sur l'anisotropie plastique des aciers IF laminés à froid. Ils utilisent un modèle de Taylor et un modèle à éléments finis décrivant la plasticité cristalline afin de calculer les coefficients de Lankford R de ces matériaux. Dans leurs VER, la taille des grains et l'orientation cristallographique ne sont pas corrélées. Melchior et Delannay concluent que la dispersion de taille de grains améliore la prédiction de l'anisotropie plastique.

Fromm et al. [FAAK09] proposent une nouvelle fonction de distribution, combinant la distribution d'orientation et de taille de grains (GSODF=Grain Size and Orientation Distribution Function). Cette fonction est obtenue grâce à un module OIM (Orientation Imaging Microscopy) permettant d'avoir des informations spatiales sur l'orientation et la taille des grains dans les matériaux. Ils étudient alors les effets couplés de la taille des grains et de la texture cristallographique sur la surface de charge de titane- α à partir d'un modèle de Taylor. Cette nouvelle fonction de distribution permet alors de bien estimer la surface de charge.

Ainsi, l'objectif de ce chapitre est d'étendre l'approche du Chapitre 2, et d'étudier les effets couplés de la distribution de taille de grains et de l'orientation cristallographique sur les propriétés mécaniques d'agrégats polycristallins.

L'accent sera mis sur le rôle de la corrélation entre la taille de grains et l'orientation cristallographique sur les propriétés effectives du polycristal et sur l'évolution des propriétés locales en s'appuyant sur des données expérimentales.

Ce chapitre sera organisé comme suit.

Dans un premier temps, une modélisation de type plasticité cristalline est rappelée, et, l'obtention du comportement mécanique local sera détaillée en prenant en compte une cission critique de référence sur chaque système de glissement dépendante de la taille individuelle du grain.

Ensuite, les caractéristiques mécaniques et microstructurales de deux aciers IF, obtenues expérimentalement, seront exposées.

Enfin, des simulations de traction seront comparées aux essais mécaniques expérimentaux, puis les effets de la dispersion de taille et de l'orientation cristallographique seront présentés en termes de réponses en traction uniaxiale et de coefficients de

Lankford. Ces quantités permettent de caractériser l'anisotropie plastique globale des tôles.

Ce chapitre fait également l'objet d'une publication soumise à l'International Journal of Plasticity.

3.2 Loi de comportement en plasticité cristalline

Dans cette partie, nous nous intéresserons à la définition de la déformation plastique, liée au mouvement des défauts cristallins linéaires, de type dislocation, dans les matériaux métalliques.

Nous commencerons par aborder le comportement du monocristal (ou grain in-situ) en partant des taux de glissement, et nous donnerons l'expression des lois de comportement viscoplastique du matériau. Le mécanisme principal de plasticité dans les métaux Cubiques Centrés (C.C.) à basse température (c'est-à-dire à une température inférieure à $0,2T_f$) et en condition statique (ou quasistatique) est le glissement plastique qui est issu du mouvement collectif de dislocation.

3.2.1 Plasticité cristalline dans le cas de métaux C.C.

Les matériaux métalliques à structure cristalline de type cubique centré ont deux grandes familles de systèmes de glissement. Elles sont notées $\{110\} \langle 111 \rangle$ et $\{112\} \langle 111 \rangle$. Au regard des différentes symétries du réseau cristallin C.C., ces deux familles de systèmes de glissement représentent un ensemble de 24 systèmes de glissement. La figure (3.1) représente les deux principales familles de systèmes de glissement.

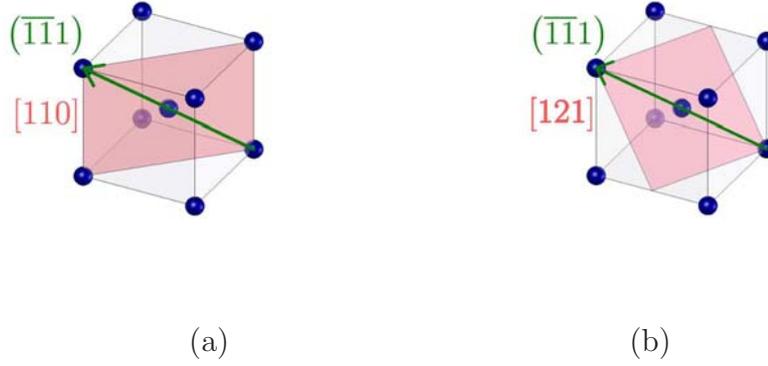


FIG. 3.1 – Systèmes de glissement dans un réseau de type cubique centré : systèmes appartenant aux familles $\{110\} \langle 111 \rangle$ (a) et $\{112\} \langle 111 \rangle$ (b)

Les systèmes de glissement sont définis par une direction de glissement, notée $\underline{m}^{(g)}$, et un plan de glissement de normale $\underline{n}^{(g)}$. L'amplitude du glissement, due au déplacement collectif des dislocations sur un système de glissement (g), se notera $\gamma^{(g)}$ et la vitesse de glissement se notera $\dot{\gamma}^{(g)}$.

D'après l'hypothèse des petites déformations et des petites rotations, qui permet de simplifier la relation entre les déformations et les rotations et/ou entre les distortions élastiques et plastiques, la décomposition des distortions du réseau cristallin se résume à :

$$\underline{\underline{\dot{\beta}}} = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} + \underline{\underline{\dot{\omega}}} = \underline{\underline{\dot{\beta}}^e} + \underline{\underline{\dot{\beta}}^p} = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}^e} + \underline{\underline{\dot{\omega}}^e} + \underline{\underline{\dot{\epsilon}}^p} + \underline{\underline{\dot{\omega}}^p} \quad (3.1)$$

Dans cette expression, les tenseurs $\underline{\underline{\dot{\beta}}^e}$ et $\underline{\underline{\dot{\beta}}^p}$ représentent les taux de distortion élastique (exposant e) et plastique (exposant p). La partie plastique $\underline{\underline{\dot{\beta}}^p}$ s'exprime à l'aide de la vitesse de glissement sur l'ensemble des systèmes de glissement (g) par la relation :

$$\underline{\underline{\dot{\beta}}^p} = \sum_{(g)} \dot{\gamma}^{(g)} \underline{m}^{(g)} \otimes \underline{n}^{(g)} \quad (3.2)$$

La décomposition additive du tenseur des taux de distortion plastique en une partie symétrique $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}^p}$, correspondant aux taux de déformation plastique, et une par-

tie antisymétrique $\underline{\dot{\omega}}^p$, correspondant aux taux de rotation plastique du matériau, permet alors de déduire la relation (3.2) avec :

$$\begin{cases} \underline{\dot{\epsilon}}^p = \sum_g \dot{\gamma}^{(g)} \underline{R}^{(g)} \\ \underline{\dot{\omega}}^p = \sum_g \dot{\gamma}^{(g)} \underline{S}^{(g)} \end{cases} \quad (3.3)$$

Dans ces expressions, les tenseurs $\underline{R}^{(g)}$ et $\underline{S}^{(g)}$ correspondent respectivement aux parties symétrique et antisymétrique du tenseur de Schmid. Leurs expressions sont les suivantes :

$$\begin{cases} \underline{R}^g = \frac{1}{2} (\underline{m}^{(g)} \otimes \underline{n}^{(g)} + \underline{n}^{(g)} \otimes \underline{m}^{(g)}) \\ \underline{S}^g = \frac{1}{2} (\underline{m}^{(g)} \otimes \underline{n}^{(g)} - \underline{n}^{(g)} \otimes \underline{m}^{(g)}) \end{cases} \quad (3.4)$$

La section suivante décrit l'évolution du glissement plastique et des déformations plastiques en fonction des contraintes et des cissions résolues.

3.2.2 Comportement élastique et viscoplastique

Le comportement élastique du matériau sera supposé isotrope et homogène, nous rappelons alors l'expression permettant de lier les taux de déformation $\underline{\dot{\epsilon}}^e$ aux taux de contrainte $\underline{\dot{\sigma}}$:

$$\underline{\dot{\epsilon}}^e(\underline{r}) = \underline{S} : \underline{\dot{\sigma}}(\underline{r}) \quad (3.5)$$

Le comportement viscoplastique local sera supposé hétérogène et dépendra de l'état des contraintes et des variables internes, comme l'orientation cristallographique, la taille de grains individuelle, et, de l'état d'écrouissage sur chaque système de glissement.

En observant l'évolution de la vitesse des dislocations en fonction de la cission résolue $\tau^{(g)}$, avec $\tau^{(g)} = R_{ij}^{(g)} \sigma_{ij}$, comme le montre la figure (3.2), nous pouvons relier

la vitesse de dislocation moyenne à la cission résolue par la loi puissance suivante :

$$\bar{v}^{(g)} = v_0^{(g)} \left[\frac{|\tau^{(g)}|}{\tau_c^{(g)}} \right]^n \text{signe}(\tau^{(g)}), \quad (3.6)$$

où $v_0^{(g)}$ est une vitesse de dislocation de référence dépendant de la température, $\tau_c^{(g)}$ la cission de référence et n un paramètre de sensibilité à la vitesse qui ne dépend pas de la température, pour une gamme de températures allant de 78 K à 373 K (figure (3.2)).

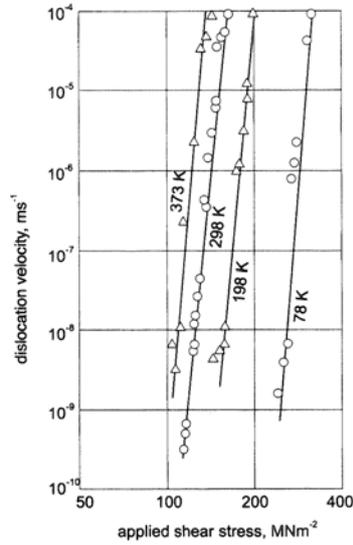


FIG. 3.2 – Vitesses des dislocations de type coin dans un alliage Fer-Silicium (à 3,25% de silicium, réseau CC) pour quatre températures en fonction de la contrainte de cisaillement appliquée [SL60]

La loi d'Orowan permet de lier la vitesse de glissement $\dot{\gamma}$ à la vitesse moyenne des dislocation \bar{v} et à la densité de dislocation moyenne mobile ρ_m par la relation :

$$\dot{\gamma}^{(g)} = \rho_m^{(g)} b \bar{v}^{(g)} \quad (3.7)$$

Dans cette expression, b correspond à la norme du vecteur de Burgers. En com-

binant les équations (3.6) et (3.7), la loi d'écoulement suivante est obtenue :

$$\dot{\gamma}^{(g)} = v_0^{(g)} \rho_m^{(g)} b \left(\frac{|\tau^{(g)}|}{\tau_c^{(g)}(\rho^{(g)}, \gamma^{(g)}, D^I)} \right)^n \text{signe}(\tau^{(g)}) \quad (3.8)$$

Ce type de loi, qualifiable de loi d'écoulement viscoplastique car ne faisant pas appel à un seuil de plasticité, rend tous les systèmes de glissement potentiellement actifs. En posant $\dot{\gamma}_0 = v_0^{(g)} \rho_m^{(g)} b$ (avec la quantité $v_0^{(g)} \rho_m^{(g)}$ indépendante du système de glissement (g)), nous obtenons la loi d'écoulement sous la forme d'une loi puissance :

$$\dot{\gamma}^{(g)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau^{(g)}|}{\tau_c^{(g)}} \right)^n \text{signe}(\tau^{(g)}) \quad (3.9)$$

Dans cette étude nous ne cherchons pas à décrire la sensibilité à la vitesse de déformation. Ainsi, cette loi puissance n'est utilisée que pour réaliser un seuil numérique décrivant l'écoulement plastique. Des lois d'écoulement plus complexes permettent de décrire le mouvement des dislocations vis à basse température [Ber02]. Un grand avantage de cette loi puissance est de diminuer le nombre de paramètres régissant l'écoulement plastique. Ainsi, nous avons seulement les deux paramètres, $\dot{\gamma}_0$, n et ceux inclus dans la loi d'écrouissage de $\tau_c^{(g)}$ qui seront introduits dans la section 3.2.3.

La puissance n est, comme déjà énoncé, un paramètre de sensibilité à la vitesse. Une valeur élevée de cette puissance permet de décrire un glissement thermiquement activé et ainsi de limiter le nombre de systèmes de glissement réellement actifs, alors qu'une puissance faible permettra de modéliser un écoulement de type visqueux, dans lequel un grand nombre de systèmes de glissement s'activent.

$\tau_c^{(g)}$ dépend ici des variables microstructurales, comme la taille du grain auquel appartient le système de glissement (g), les densités de dislocation et les glissements dans le grain.

Ainsi, l'écriture exacte de $\tau_c^{(g)}$ est $\tau_c^{(g)}(\rho^{(g)}, \gamma^{(g)}, D^I)$. En choisissant convenablement l'évolution de la cission de référence, nous serons en mesure d'estimer les stades 2 et 3 d'écrouissage de monocristaux CC.

Le paragraphe suivant est dédié à la description de l'écrouissage intracristallin.

3.2.3 Ecrouissage intracristallin

Les courbes cission-glissement sur des monocristaux de fer- α permettent de mettre en évidence, en fonction de l'orientation du monocristal, un à trois stades de durcissement [KN67]. Sur la figure (3.3), les courbes D, E, G et H présentent les trois stades de durcissement.

Le premier stade, appelé Stade 1, correspond à une variation linéaire de la cission critique τ_c en fonction du cisaillement γ . D'un point de vue microstructural, au cours de ce durcissement, qui est assez faible, nous avons une accumulation de boucles et de dipôles de dislocation créant de faibles contraintes internes à longue distance. Ce premier stade de durcissement est peu sensible aux variations de température et de taux de glissement mais sensible au chargement.

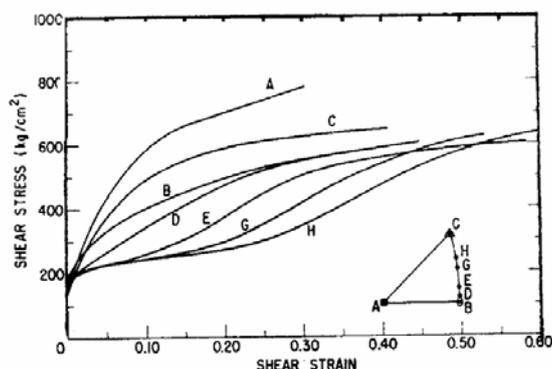


FIG. 3.3 – Courbe cission-glissement pour des monocristaux de fer- α ayant différentes orientations cristallographiques [KN67]

Le second stade, appelé Stade 2, apparaît après un “petit” domaine transitoire. Il s’agit d’un durcissement linéaire plus prononcé qu’au stade 1. Au cours du Stade 2, nous avons une activation d’un ou plusieurs systèmes de glissement supplémentaires. Les interactions entre les dislocations des systèmes primaires et secondaires créent des barrières de Lomer-Cottrell qui sont en partie responsables de la forêt de dislocations. Cette forêt “piège” les dislocations créant alors ce que nous appelons des dislocations statistiquement distribuées ou encore stockées.

Le troisième stade, appelé Stade 3, correspond à un écrouissage parabolique. Nous observons un nouveau mécanisme de glissement, le glissement dévié, et des processus d’annihilation, de recombinaison et d’organisation en cellules de dislocation.

L’orientation cristallographique du monocristal et le chargement influent directement sur le nombre de systèmes de glissement actif. Or, ce nombre est directement lié au taux d’écrouissage initial du cristal. Lorsque celui-ci est trop élevé, comme

c'est le cas sur les courbes A, B et C, les Stades 1 et 2 sont peu ou pas visibles, et les courbes cission-glissement deviennent paraboliques.

Dans un agrégat polycristallin, les grains seront soumis, individuellement, à un chargement complexe, le stade 1 n'existe donc pas. Les grains subissent des écrouissages de Stade 2 et 3 uniquement. Une loi d'écrouissage dans un premier temps linéaire, puis saturante en terme d'évolution des densités de dislocation est donc satisfaisante pour des déformations macroscopiques en traction ne dépassant pas 15% environ. La cission de référence $\tau_c^{(g)}$ dans l'expression (3.9) s'exprime par :

$$\tau_c^{(g)}(\rho^{(h)}, D^I) = \tau_{c_0}^{(g)} + \frac{\kappa}{\sqrt{D^I}} + \alpha\mu b \sqrt{\sum_h a^{(gh)} \rho^{(h)}} \quad (3.10)$$

où :

- τ_{c_0} est la cission critique du cristal parfait ayant une taille "infinie", qui dépend généralement de la famille de système de glissement, mais, supposée identique sur tous les systèmes de glissement pour cette étude. Elle correspond à la contrainte de Peierls (ou friction de réseau), la teneur en élément chimique d'addition pouvant modifier la valeur de τ_{c_0} ,
- $\frac{\kappa}{\sqrt{D^I}}$ est une dépendance de la cission de référence à la taille de grains selon une loi de type Hall-Petch,
- α est une constante comprise entre 0 et 0,5 qui est généralement de l'ordre de 0,3,
- μ est le module élastique de cisaillement,
- b est le module du vecteur de Burgers,
- $a^{(gh)}$ est la matrice d'anisotropie issue des travaux de Franciosi [Fra83],
- $\rho^{(h)}$ est la densité de dislocation sur le système de glissement (h).

La matrice d'anisotropie permet de prendre en compte les interactions entre systèmes de glissement (qui sont au nombre de 24 et reportées dans le tableau (3.1)).

D'après Franciosi [Fra83], et en première approximation, ces interactions peuvent être classées en deux catégories : des interactions faibles, entre dislocations appartenant à des systèmes de glissement identiques, colinéaires ou coplanaires, représentées par les termes a_1 dans la matrice d'interaction, et des interactions fortes, entre dislocations appartenant à des systèmes sécants, représentées par les termes a_2 dans la matrice d'interaction.

Ces deux termes sont liés par la relation $a_2 = A \cdot a_1$, le coefficient A étant fixé à 1,1 pour les aciers ferritiques d'après les travaux de Lipinski et al. [LBRM95].

Pour sa part, Hoc [Hoc99] utilise une matrice d'écrouissage à 6 coefficients permettant de prendre en compte les différentes interactions entre systèmes de glis-

sement. Néanmoins, cette matrice d'écroissage nécessite 4 paramètres matériaux supplémentaires [Hoc99].

Le tableau (3.2) représente la matrice d'écroissage utilisée avec ces deux termes d'interaction, et le tableau (3.1) précise l'indexation utilisée.

Famille de plan {110}			
A	($\bar{1}\bar{1}0$)	D	(110)
B	($10\bar{1}$)	E	(101)
C	($01\bar{1}$)	F	(011)
Famille de plan {112}			
G	($11\bar{2}$)	M	($\bar{1}\bar{1}2$)
H	($\bar{1}\bar{2}1$)	N	(121)
I	($\bar{2}11$)	O	($2\bar{1}1$)
J	($1\bar{1}2$)	P	($\bar{1}12$)
K	($12\bar{1}$)	Q	($\bar{1}21$)
L	(211)	R	($2\bar{1}1$)
Direction $\langle 111 \rangle$			
1	[111]	3	[$\bar{1}\bar{1}1$]
2	[$\bar{1}11$]	4	[11 $\bar{1}$]

TAB. 3.1 – Indexation des plans et directions de glissement

Afin d'exprimer totalement l'écroissage du matériau, il nous reste à définir la loi d'évolution des densités de dislocation $\rho^{(g)}$ en fonction du taux de glissement. A l'état initial, ces densités seront supposées identiques pour tous les systèmes de glissement, et cette valeur sera notée ρ_0 .

Kocks [Koc76] proposa une loi d'évolution des densités de dislocation, linéaire et sans mécanisme d'annihilation de dipôle de dislocation vis. Celle ci fut dérivée par Essmann et Mughrabi [EM79] afin de prendre en compte ces annihilations.

Mecking et Kocks [MK81] ont ensuite proposé une loi d'évolution permettant de prendre en compte l'augmentation, puis la saturation des densités de dislocation :

$$\dot{\rho}^{(g)} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^{(g)}} - 2y_c \rho^{(g)} \right) |\dot{\gamma}^{(g)}| \quad (3.11)$$

Le premier terme de cette expression, $\frac{1}{L^{(g)}}$, est le terme de création (via des sources de multiplication comme les sources de Frank-Read) et de stockage de dislocation, et le second terme, $2y_c \rho^{(g)}$, correspond à l'annihilation des dipôles de dislocation d'après Essmann et Mughrabi [EM79], y_c étant la distance critique d'annihilation de ces dipôles.

	A1	B1	C1	G1	H1	I1	D2	E2	C2	J2	K2	L2	D3	B3	F3	M3	N3	O3	A4	E4	F4	P4	Q4	R4
A1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2											
B1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_1	a_2															
C1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_2	a_1	a_2														
G1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2																	
H1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2																	
I1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2																	
D2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_2																
E2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2						
C2	a_2	a_2	a_1	a_2	a_2	a_2	a_1	a_2																
J2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_2																
K2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_2																
L2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_2																
D3	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2
B3	a_2	a_1	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2									
F3	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_2	a_1	a_2	a_2	a_2											
M3	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2											
N3	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2											
O3	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2	a_2											
A4	a_1	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1																
E4	a_2	a_1	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1															
F4	a_2	a_1	a_2	a_2	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1													
P4	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1																	
Q4	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1																	
R4	a_2	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1	a_1																	

TAB. 3.2 – Matrice d’anisotropie du glissement plastique pour des réseaux cubiques centrés à 2 paramètres (a_1, a_2) [LBRM95]

$L^{(g)}$ représente le libre parcours moyen des dislocations sur le système de glissement (g) . Initialement, et pour un matériau bien recristallisé, sa valeur est proche de la taille de grain, puis, quand la déformation plastique augmente, elle tend vers la taille des cellules de dislocation à température ambiante (fin du Stade 2). Ainsi, l’expression de $L^{(g)}$ est supposée comme suit :

$$\frac{1}{L^{(g)}} = \frac{1}{D^I} + \frac{\sqrt{\sum_{i \neq g} \rho^{(i)}}}{K} \quad (3.12)$$

où K est un paramètre matériau concernant le libre parcours moyen des dislocations.

La loi d'évolution des densités de dislocation permet donc de décrire les phénomènes de création puis de saturation des densités de dislocation (restauration dynamique). Au vu de l'équation (3.10), nous aurons le même phénomène sur la limite d'écoulement. Nous retrouvons ainsi les Stades 2 et 3 de l'écroissage visible sur les courbes de la figure (3.3).

Ayant décrit les lois d'écroissage et de glissement, nous pouvons alors déterminer l'expression des modules viscoplastiques sécants.

3.2.4 Détermination du module viscoplastique sécant des grains

Les équations (3.3) et (3.9) définissent les taux de déformation viscoplastique en fonction des taux de glissement et du tenseur symétrique de Schmid de chaque système de glissement.

Ainsi, en développant l'expression (3.3) à l'aide de la loi puissance (3.9), nous pouvons déterminer l'expression complète des taux de déformation viscoplastique :

$$\varepsilon_{ij}^{vp} = \sum_g R_{ij}^{(g)} \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau^{(g)}|}{\tau_c^{(g)}(\rho^{(g)}(D^I), \gamma^{(g)}, D^I)} \right)^n \text{signe}(\tau^{(g)}) \quad (3.13)$$

En se rappelant que nous avons $\tau^{(g)} = R_{kl}^{(g)} \sigma_{kl}$, et en identifiant le tenseur des modules viscoplastiques sécants à l'aide de l'expression $\varepsilon_{ij}^{vp} = m_{ijkl}$

$$m_{ijkl}^{vp} = \sum_g \dot{\gamma}_0 \frac{|\tau^{(g)}|^{n-1}}{\left(\tau_c^{(g)}(\rho^{(g)}(D^I), \gamma^{(g)}, D^I) \right)^n} R_{ij}^{(g)} R_{kl}^{(g)} \quad (3.14)$$

Nous reconnaissons dans cette expression deux dépendances primordiales pour m^{vp} en fonction du matériau.

Tout d'abord, les modules viscoplastiques présentent une double dépendance à la taille de grain, celle-ci étant présente au niveau des cissions de référence $\tau_c^{(g)}$, et au niveau des densités de dislocation, par le biais de la loi d'écroissage définissant $\dot{\rho}^{(g)}$ dans l'équation (3.12) relative à $L^{(g)}$.

Ainsi, la taille de grains aura à la fois un effet sur la limite d'écoulement, mais aussi sur l'écroissage macroscopique (contrairement à la modélisation isotrope du Chapitre 2).

L'autre dépendance concerne l'orientation cristallographique, de part le produit dyadique des tenseurs de Schmid $R_{ij}^{(g)} R_{kl}^{(g)}$.

Cette dépendance permet à la modélisation d'être plus réaliste car elle prend en compte simultanément les phénomènes physiques liés à l'orientation cristallographique des grains, à la fluctuation des densités de dislocation et aux longueurs internes comme la taille de grains et le libre parcours moyen.

Néanmoins, l'orientation cristallographique des grains n'est pas constante au cours d'un chargement. Ainsi, afin de finaliser la modélisation micromécanique, nous allons exposer maintenant la méthodologie utilisée pour prendre en compte la ré-orientation des grains en cours de déformation.

3.2.5 Evolutions des orientations cristallines

L'orientation du réseau cristallin d'un monocristal ou d'un grain dans un agrégat polycristallin peut être repérée sans ambiguïté par un triplet d'angles appelés angles d'Euler [Bun87], et notés φ_1 , Φ et φ_2 . Ces trois angles correspondent à trois rotations définies à partir du repère global du matériau vers le repère local repéré par les directions [100], [010] et [001] du réseau cristallin. Le repère global est représenté par la direction de laminage notée DL, la direction transverse notée DT et la direction normale notée DN. Les définitions des angles d'Euler sont alors les suivantes :

- l'angle φ_1 correspond à une rotation autour de la direction normale DN, nous créons alors un nouveau repère d'axe DL1, DT1 et DN1,
- l'angle Φ correspond à une rotation autour de la nouvelle direction de laminage DL1, nous créons alors un nouveau repère d'axe DL2, DT2 et DN2,
- l'angle φ_2 correspond à une rotation autour de la nouvelle direction normale DN2.

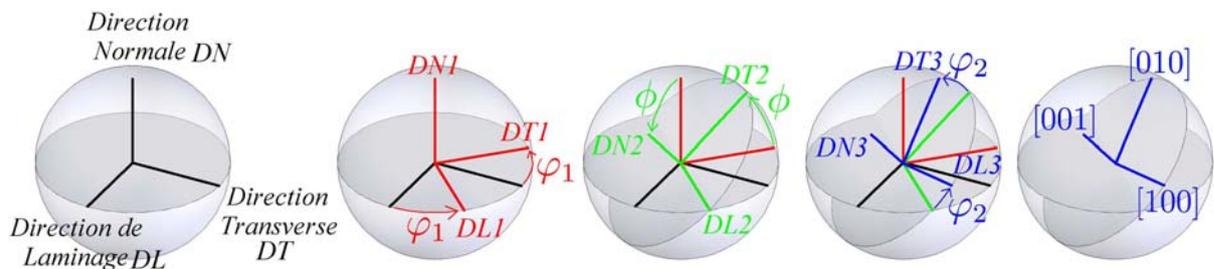


FIG. 3.4 – Définition des angles d'Euler au sens de Bunge [BE97]

Ces définitions sont schématisées sur la figure (3.4), et la matrice de rotation, ou encore matrice de passage $\underline{\underline{P}}$, permettant le passage du repère local au repère global, s'exprime par [BE97] :

$$\underline{\underline{P}} = \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \cos \varphi_2 \sin \varphi_1 + \sin \varphi_2 \cos \varphi_1 \cos \Phi & \sin \varphi_2 \sin \Phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 - \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & \cos \varphi_2 \sin \Phi \\ \sin \varphi_1 \sin \Phi & -\cos \varphi_1 \sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

Au cours des différents chargements de traction qui seront simulés, le tenseur des vitesses de rotation macroscopique imposé $\underline{\underline{\dot{\Omega}}}$ sera nul. Nous avons alors :

$$\underline{\underline{\dot{\Omega}}} = \underline{\underline{\dot{\Omega}}}^e + \underline{\underline{\dot{\Omega}}}^p = \underline{\underline{0}} \quad (3.16)$$

Le modèle utilisé ne prenant pas en compte le changement de morphologie des grains, les rotations locales $\underline{\underline{\dot{\omega}}}$ seront supposées inexistantes du fait que, dans le cas de grains sphériques, nous avons $\underline{\underline{\dot{\omega}}} = \underline{\underline{\dot{\Omega}}}$ car la partie antisymétrique du tenseur d'Eshelby est nulle dans ce cas particulier [Mur87]. D'après l'équation (3.16), nous aurons alors la relation suivante entre les rotations locales élastiques $\dot{\omega}^e$ et plastiques $\dot{\omega}^p$:

$$\underline{\underline{\dot{\omega}}}^e = -\underline{\underline{\dot{\omega}}}^p \quad (3.17)$$

L'expression de $\dot{\omega}^p$ est donnée par la relation (3.3). Connaissant alors les taux de rotation élastique $\dot{\omega}^e$ de chaque grain, les orientations des grains évolueront suivant les lois d'évolution introduites par Bunge et al. [BEG68] :

$$\begin{cases} \dot{\varphi}_1 = -\dot{\omega}_{12}^e - \frac{\cos(\Phi)}{\sin(\Phi)} (\dot{\omega}_{13}^e \cos(\varphi_1) + \dot{\omega}_{23}^e \sin(\varphi_1)) \\ \dot{\varphi} = \dot{\omega}_{23}^e \cos(\varphi_1) - \dot{\omega}_{13}^e \sin(\varphi_1) \\ \dot{\varphi}_2 = \frac{1}{\sin(\Phi)} (\dot{\omega}_{13}^e \cos(\varphi_1) + \dot{\omega}_{23}^e \sin(\varphi_1)) \end{cases} \quad (3.18)$$

Néanmoins, ces lois d'évolution sont applicables si et seulement si l'angle Φ est non nul. Dans le cas où Φ devient nul, les lois d'évolutions à utiliser sont :

$$\begin{cases} \dot{\varphi}_1 = -\frac{\dot{\omega}_{12}^e}{2} \\ \dot{\varphi} = \dot{\omega}_{23}^e \cos(\varphi_1) - \dot{\omega}_{13}^e \sin(\varphi_1) \\ \dot{\varphi}_2 = -\frac{\dot{\omega}_{12}^e}{2} \end{cases} \quad (3.19)$$

Les simulations effectuées en traction permettront d'étudier l'impact de la texture et de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins.

3.3 Combinaison des effets de distributions de taille de grains et d'orientation cristallographique sur le comportement d'aciers IF

Cette section est consacrée à l'étude des effets combinés de distributions de la taille de grains et de la texture cristallographique. Nous commençons par présenter les deux aciers IF utilisés ainsi que les VER générés. Après avoir identifié les paramètres matériaux par comparaison entre les données expérimentales et les simulations, les effets combinés de la texture cristallographique et de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique en traction des aciers sont étudiés en termes :

- de comportement macroscopique,
- d'évolution de l'énergie libre,
- d'évolution de l'étendue des comportements mécaniques locaux,
- de coefficient d'anisotropie plastique.

3.3.1 Présentation des matériaux étudiés

Nous étudions ici deux aciers IF au Titane différents, nommés acier IF1 et acier IF2 par la suite. Les compositions chimiques partielles de ces deux aciers sont données dans le tableau (3.3) [Aou08].

Nous pouvons dès lors supposer que l'acier IF2 aura une friction de réseau ini-

	Eléments présents en 10^{-3} %						
	Ti	C	Mn	P	Si	Cu	Al
acier IF1	81,0	1,6	113	74	8	6	37
acier IF2	89,0	3,0	921	55	139	32	48

TAB. 3.3 – Compositions chimiques partielles des deux aciers IF étudiés

tiale (τ_{c_0} dans la relation (3.10)) plus élevée que l'acier IF1 du fait des proportions plus importantes en manganèse, silicium et phosphore dans l'acier IF2 [TS02].

La figure (3.5) représente le comportement mécanique en traction des deux aciers. Les courbes, présentées par cette figure, correspondent aux courbes contrainte-déformation conventionnelles.

Le tableau (3.4) énumère les caractéristiques mécaniques principales en traction uniaxiale des deux aciers, obtenues en exploitant les courbes de la figure (3.5).

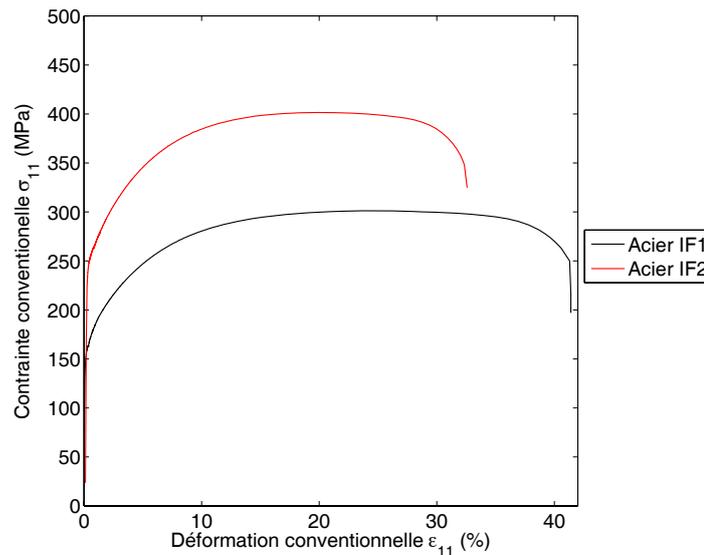


FIG. 3.5 – Courbes contrainte-déformation conventionnelles expérimentales en traction pour les deux aciers

Afin d'étudier les effets combinés de la taille de grains et de l'orientation cristallographique, nous effectuons des cartographies EBSD sur chacun des deux aciers. Les deux aciers ont été caractérisés au Laboratoire d'Etude des Textures et Application aux Matériaux (Francis WAGNER) sur une surface importante ($3,4 \text{ mm}^2$ pour l'acier IF1 et $1,3 \text{ mm}^2$ pour l'acier IF2) en utilisant un MEB-FEG JEOL 6500F et le logiciel HKL.

	$R_{p0,2\%}$ (MPa)	R_m (MPa)	A(%)
acier IF1	162	301	25,8
acier IF2	248	401	20,1

TAB. 3.4 – Caractéristiques mécaniques partielles des deux aciers IF

$R_{p0,2\%}$ = Limite d'élasticité conventionnel à 0,2%

R_m = Résistance à la traction

A = Allongement à la rupture

Les mesures ont été réalisées à l'aide d'une grille $\Delta x = \Delta y = 1,5\mu m$ pour l'acier IF1 et d'une grille $\Delta x = \Delta y = 0,6\mu m$ pour l'acier IF2.

Les cartographies obtenues ont permis d'identifier 16093 grains pour l'acier IF1 et 19939 grains pour l'acier IF2 en prenant un critère de désorientation de moins de 3° .

Les figures (3.6) et (3.7) sont des images en contraste de bande réalisées à partir de ces cartographies. Les deux aciers ont des microstructures similaires avec des grains de formes "equi-axes".

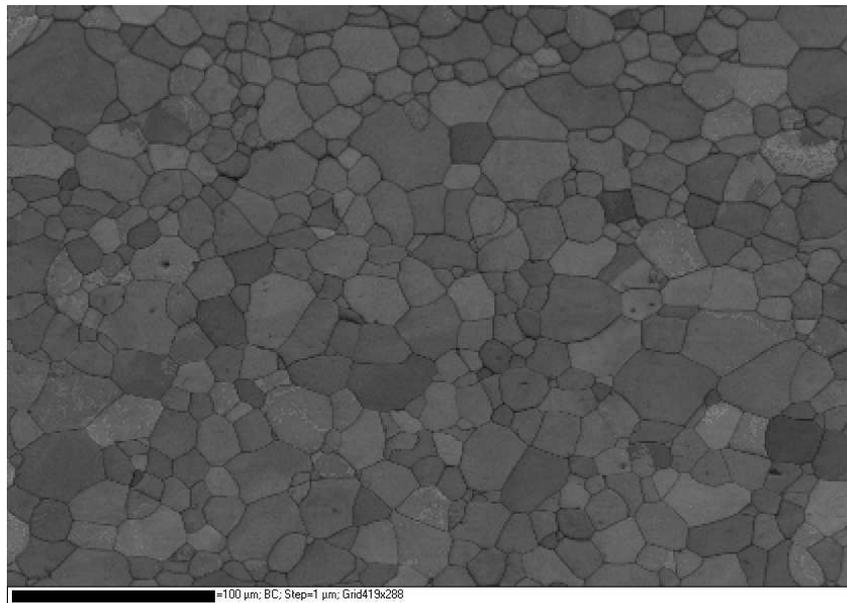


FIG. 3.6 – Image EBSD en contraste de bande de l'acier IF1 dans le plan de la tôle

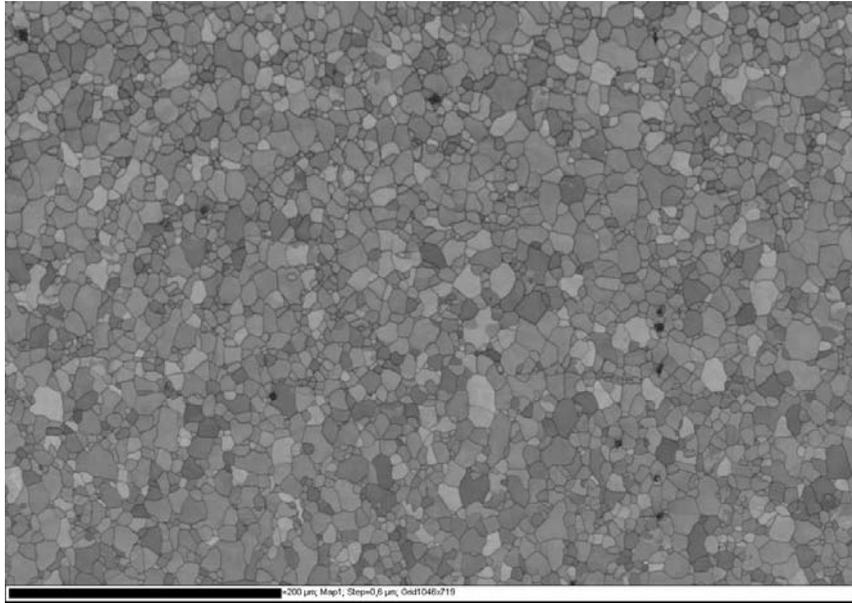


FIG. 3.7 – Image EBSD en contraste de bande de l’acier IF2 dans le plan de la tôle

Les distributions de taille de grains sont également représentées sur la figure (3.8) et leurs principales caractéristiques (taille moyenne, dispersion relative, coefficients d’asymétrie et d’aplatissement) sont données dans le tableau (3.5).

Les distributions de taille de grains correspondent à des distributions de type log-normal comme cela est souvent décrit dans la littérature [RP82][HH95][SAGJJ06].

	Surface analysée (mm ²)	Nombre de grains	D_{moyen} (mm)	$\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$	α	κ
acier IF1	3,4	16093	12,96	3,67	0,91	0,81
acier IF2	1,3	19939	8,75	4,55	1,03	1,39

TAB. 3.5 – Surfaces et distributions de taille de grains analysées par EBSD pour les deux aciers IF

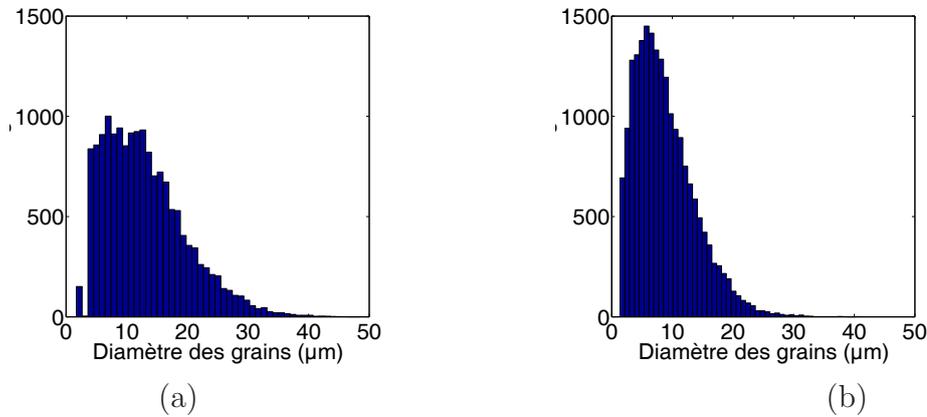


FIG. 3.8 – Distribution de taille de grain, par pas de $1 \mu m$, des aciers IF1 (a) et IF2 (b)

Les aciers IF1 et IF2 ont des tailles moyennes de grains différentes et des dispersions de taille également différentes. Les facteurs d'asymétrie α et d'aplatissement κ sont quasiment identiques pour les deux aciers.

Nous devons donc nous attendre à la fois à un effet de taille moyenne (car les D_{moyen} sont différents), et, de dispersion de taille (car les valeurs de $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$ sont différentes et non nulles) sur les comportements macroscopiques de ces deux aciers.

Les deux aciers étudiés n'ont pas subi de traitement thermique avant analyse EBSD, nous avons alors des aciers présentant des textures de laminage comme le montrent les figures de pôle (3.9) et (3.10).

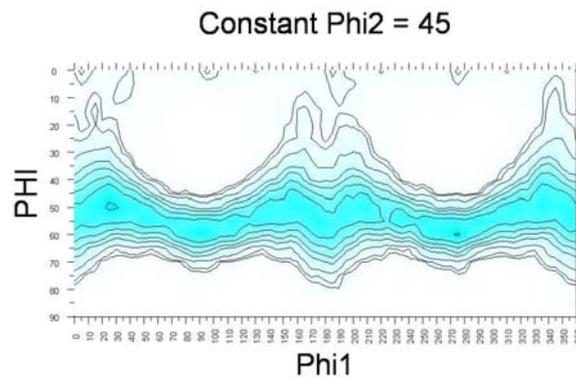


FIG. 3.9 – ODF de l'acier IF1 représentée à $\varphi_2 = 45^\circ$ obtenue après mesure EBSD

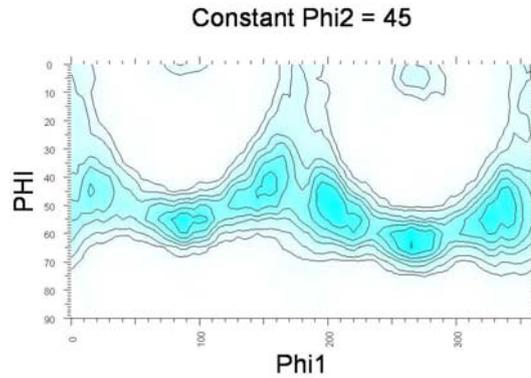


FIG. 3.10 – ODF de l’acier IF2 représentée à $\varphi_2 = 45^\circ$ obtenue après mesure EBSD

Les données EBSD obtenues permettent de décrire un agrégat par un ensemble de 3 quantités :

- l’orientation cristallographique du grain g_i ,
- la fraction volumique du grain f_i (avec $f_i = \frac{V_i}{V} = \frac{4}{3} \frac{\pi R_i^3}{V}$) et
- la taille du grain D_i .

Il est alors possible de générer plusieurs VER afin d’observer l’influence de ces trois quantités sur les comportements mécaniques des deux aciers.

Le premier VER, noté “cas 1” par la suite, consiste à prendre en considération toutes les hétérogénéités en termes de tailles de grain et d’orientations cristallographiques, c’est-à-dire en conservant la véritable ODF (orientations cristallographiques et fractions volumiques) et la granulométrie déterminée par EBSD.

La fraction volumique f_i est alors déterminée de telle sorte que $f_i = \frac{4}{3} \frac{\pi R_i^3}{V}$, avec R_i le rayon du grain i déterminé par EBSD.

Un second VER, noté “cas 2”, consiste à maintenir la véritable ODF (orientations cristallographiques et fractions volumiques) et, ainsi, de conserver les fractions volumiques de chaque grain.

Cependant, la taille des grains est considérée comme uniforme, égale à la taille moyenne de la distribution de taille. Les tailles de grain seront alors de $12,96 \mu m$ pour les grains du VER correspondant à l’acier IF1 et de $8,75 \mu m$ pour les grains du VER correspondant à l’acier IF2.

Deux autres VER sont générables si les ODF réelles ne sont pas conservées. Dans un troisième VER, noté “cas 3”, les orientations cristallographiques expérimentales g_i sont conservées, mais tous les grains auront le même diamètre ($D_i = \bar{D} = D_{moyen}$) et la même fraction volumique (isofraction volumique avec $f_i = \bar{f} = f_{moyen} = 1/N$, avec N le nombre total de grains).

Dans un dernier VER, noté “cas 4”, les isofractions volumiques et les orientations cristallographiques sont conservées, mais la distribution de taille de grains est rétablie, c’est-à-dire que chaque grain aura sa propre taille, celle déterminée par EBSD. Les différents cas étudiés sont rappelés dans le tableau (3.6).

	Taille des grains	Orientation des grains	Fraction volumique des grains
cas 1	D_i	g_i	f_i
cas 2	\bar{D}	g_i	f_i
cas 3	\bar{D}	g_i	$\bar{f} = 1/N$
cas 4	D_i	g_i	$\bar{f} = 1/N$

TAB. 3.6 – Différents cas étudiés

Ainsi, ces quatre VER permettent d’étudier l’effet de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique des deux aciers en comparant les cas 1 et 2 et les cas 3 et 4. L’effet de la texture cristallographique sur le comportement mécanique des deux aciers pourra être étudié en comparant les cas 2 et 3.

3.3.2 Identification des paramètres

L’exposant n de la loi puissance (3.9) est arbitrairement choisi à 30 afin de décrire la faible dépendance à la vitesse de déformation à température ambiante.

Les propriétés élastiques μ , ν et le module de vecteur de Burgers b proviennent de la littérature [PBF⁺01][BFLB04] et correspondent à des valeurs classiques pour des aciers IF.

Le coefficient de Hall-Petch κ est déterminé pour les aciers IF à l’aide de la valeur donnée par Armstrong et al. [ACDP62], Jaoul [Jao65] et Li et al. [LCLL03], en se rappelant que la valeur du coefficient de Hall-Petch à l’échelle locale correspond à la moitié du coefficient de Hall-Petch macroscopique (en traction uniaxiale).

Les paramètres $\dot{\gamma}_0$, τ_{c0} , α , y_c , K et ρ_0 , présents dans les équations (3.9), (3.10),

(3.11) et dans l'équation (3.12) de la section (3.2), sont identifiés en comparant les courbes contrainte-déformation (vraies) pour des chargements expérimentaux de traction uniaxiale et des simulations numériques réalisées en utilisant le VER noté cas 1 pour chacun des deux aciers (figure (3.11)).

Les chargements expérimentaux de traction, sur les deux aciers, ont été réalisés avec des éprouvettes ayant des longueurs utiles de 80 mm, une largeur de 20 mm et une épaisseur de 0,7 mm. La vitesse de traverse de $40 \text{ mm} \cdot \text{min}^{-1}$ donne alors une vitesse de déformation de $0,008 \text{ s}^{-1}$.

Les différents paramètres matériaux ainsi identifiés sont énumérés dans le tableau (3.7).

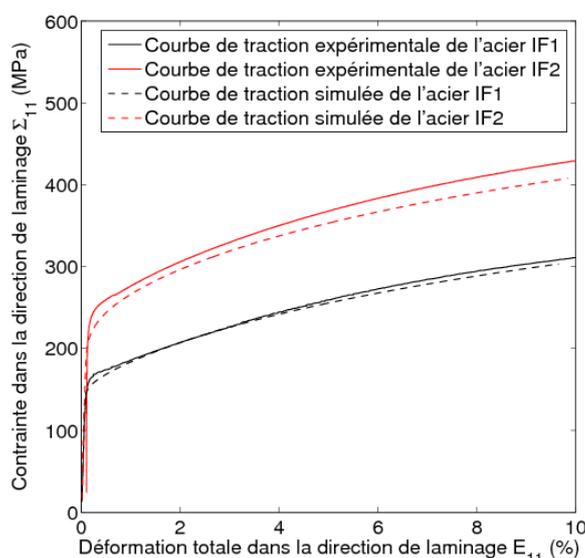


FIG. 3.11 – Identification des paramètres matériaux en traction uniaxiale

Commun aux deux aciers										acier IF1	acier IF2
μ (MPa)	ν	$\dot{\gamma}_0$ (s^{-1})	\mathbf{n}	κ	α ($\text{MPa} \cdot \sqrt{\mu\text{m}}$)	\mathbf{b} (nm)	ρ_0 (m^{-2})	y_c (nm)	\mathbf{K}	τ_{c0} (MPa)	τ_{c0} (MPa)
80000	0,3	1	30	250	0,5	0,25	10^{12}	5,005	75	20	40

TAB. 3.7 – Paramètres matériaux identifiés dans le cas 1 sur des chargements de traction uniaxiale

Les cissions critiques initiales τ_{c0} des deux aciers sont très différentes (20 MPa pour l'acier IF1 et 40 MPa pour l'acier IF2).

Cette différence est due au durcissement bien connu par solution solide et généré

par les éléments d'alliage tels que le manganèse, le potassium et le silicium comme indiqué en section (3.2.3)[TS02].

Les paramètres y_c et K présents dans les équations (3.11) et (3.12) sont choisis identiques sur tous les systèmes de glissement et pour tous les grains. Ces paramètres sont donc supposés indépendants de la taille de grains dans cette étude.

K est associé au libre parcours moyen des dislocations et a une forte influence au début des courbes contrainte-déformation. Pour des déformations plus importantes, le paramètre K fait tendre le libre parcours moyen vers la taille des cellules de dislocation.

Contrairement au paramètre K , la distance critique d'annihilation y_c a peu d'effet sur le comportement mécanique pour de faibles déformations, et un effet important sur ce même comportement lorsque la déformation devient importante ($E > 5\%$).

L'identification des paramètres permet de conclure que le modèle est capable de prendre en compte l'effet de la taille des grains sur le comportement mécanique macroscopique.

3.3.3 Effets combinés de l'orientation cristallographique et de la taille de grains sur le comportement macroscopique

Dans cette section, les effets combinés de l'orientation cristallographique et de la taille des grains sur le comportement mécanique des aciers IF1 et IF2 seront étudiés. Pour cela, des chargements de traction sont simulés jusqu'à une déformation macroscopique de 10%. Les comportements macroscopiques en traction simple sont représentés sur la figure (3.12) pour les quatre cas du tableau (3.6).

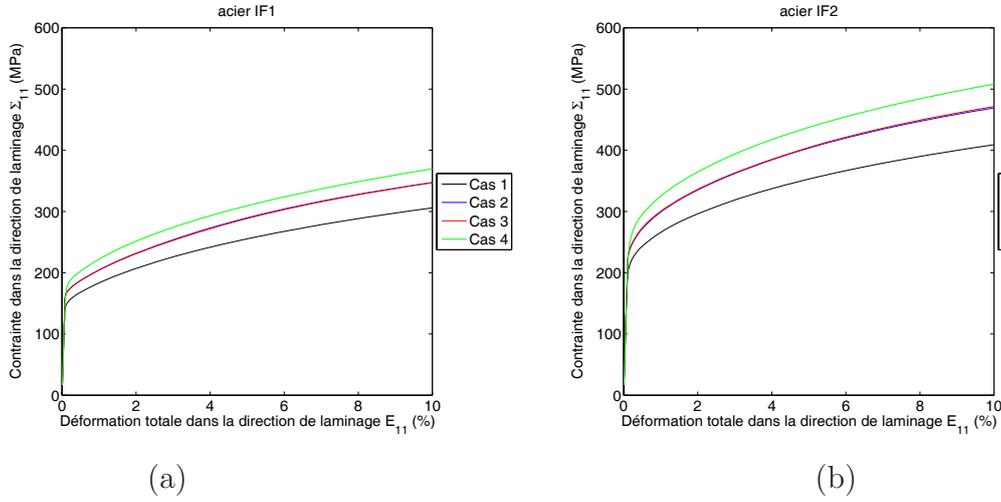


FIG. 3.12 – Courbes contrainte-déformation en traction, pour les quatre cas, pour l’acier IF1 (a) et l’acier IF2 (b)

L’effet de dispersion de taille de grains mis en évidence au Chapitre 2 est retrouvé en plasticité cristalline.

La comparaison des cas 1 et 2 pour les deux aciers IF met en évidence un effet de dispersion de taille de grains important sur la contrainte d’écoulement macroscopique (abaissement de la contrainte d’écoulement quand la dispersion de taille de grains augmente).

En outre, cet effet de dispersion de taille de grains est plus prononcé pour l’acier IF2 que pour l’acier IF1. Ceci est lié au fait que l’acier IF2 a quasiment la même dispersion relative de taille de grains que l’acier IF1, mais, a une taille moyenne de grain plus faible.

Cette tendance a été notée dans le cas de lois de comportement élasto-viscoplastique isotropes comme cela fut le cas au Chapitre 2 et dans les travaux de Berbenni et al. [BFB07a][BFB07b].

Les cas où il n’y a pas de dispersion de taille de grain, c’est-à-dire les cas 2 (avec ODF réelle) et 3 (avec ODF fictive) de chaque acier, donnent des résultats similaires en terme de contrainte macroscopique (courbes pratiquement superposées) alors que les fractions volumiques des orientations cristallographiques sont différentes.

Le comportement mécanique macroscopique obtenu en utilisant le cas 4 permet de retrouver un effet de dispersion relative. Celui-ci est à nouveau plus prononcé pour l’acier IF2.

La limite d'écoulement et le taux d'écroissage dans ce cas sont plus importants que ceux obtenus dans les trois autres cas. Cet effet sur l'écroissage provient des fractions volumiques qui sont égales pour tous les grains alors que la taille des grains n'est pas uniforme. Cela signifie que les petits grains, c'est-à-dire ceux qui ont de faibles diamètres D_I , occupent un volume plus important dans ce VER que dans celui du cas 1. Le fait que le nombre de petits grains est plus important explique que la réponse mécanique du VER est plus rigide et que le taux d'écroissage est légèrement plus important.

Afin de décorrélérer les rôles respectifs de la taille de grains et de l'orientation cristallographique, des VER constitués de grains ayant tous la même taille D_0 et la même orientation cristallographique g_0 peuvent être utilisés.

Trois différentes tailles de grain D_0 (1, 10 et 50 μm) et trois différentes orientations cristallographiques, conduisant à neuf VER distincts, sont alors étudiées.

Pour ces VER supplémentaires, les paramètres matériaux sont inchangés, exception faite pour τ_{c0} qui est arbitrairement fixé à 50 MPa pour ces VER.

Les aciers IF laminés à froid présentent deux fibres principales, les fibres α et γ . Ainsi, les trois orientations cristallographiques utilisées pour ces nouveaux VER correspondent à deux orientations sur la fibre γ (qui prédominent par rapport à la fibre α) :

- $\varphi_1 = 30^\circ$, $\Phi = 55^\circ$ et $\varphi_2 = 45^\circ$,
- $\varphi_1 = 60^\circ$, $\Phi = 55^\circ$ et $\varphi_2 = 45^\circ$ (équivalent à l'orientation $\varphi_1 = 0^\circ$, $\Phi = 55^\circ$ et $\varphi_2 = 45^\circ$),

et une orientation choisie aléatoirement ($\varphi_1 = 20^\circ$, $\Phi = 20^\circ$ et $\varphi_2 = 20^\circ$).

Les effets de l'orientation cristallographique sont comparés à ceux de la taille de grains pour les réponses macroscopiques en traction présentées sur la figure (3.13).

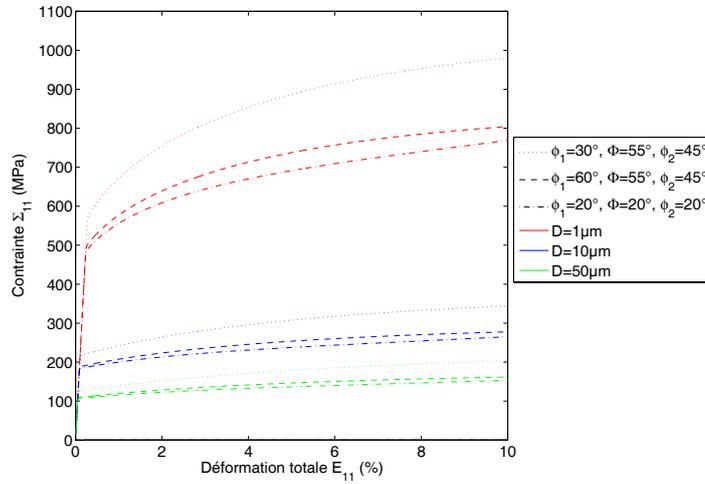


FIG. 3.13 – Comportement macroscopique en traction pour les 9 agrégats fictifs

Il apparaît que l'effet de taille de grains sur la limite d'élasticité est prédominant par rapport à l'effet de l'orientation cristallographique, alors que le taux d'écrouissage est influencé à la fois par la taille de grains et l'orientation cristallographique.

De plus, l'évolution des limites d'élasticité (figure (3.14)), déterminées à $E_{11} = 0,2\%$, met en évidence que l'effet d'orientation cristallographique produit une déviation de la loi de Hall-Petch similaire à celle produite par la dispersion de taille vue au Chapitre 2.

Ceci prouve que les deux effets sont couplés.

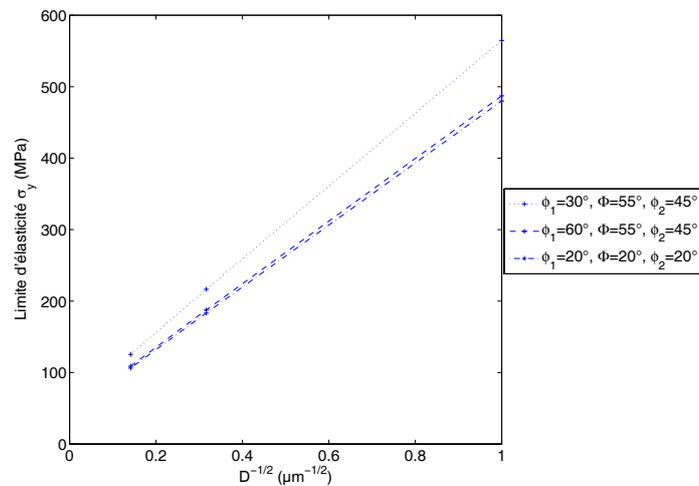


FIG. 3.14 – Evolution de la limite d'élasticité

L'étude de l'évolution de l'énergie bloquée et des contraintes internes doit permettre de mieux comprendre les différences observables entre les quatre premiers cas générés, notamment sur les réponses macroscopiques obtenues sur la figure (3.12).

3.3.4 Effets combinés de l'orientation cristallographique et de la taille de grains sur l'énergie bloquée

L'évolution de l'énergie bloquée des différents VER (figure (3.15)), telle qu'elle fut introduite au Chapitre 2, confirme les tendances observées à l'aide des courbes contrainte-déformation en traction.

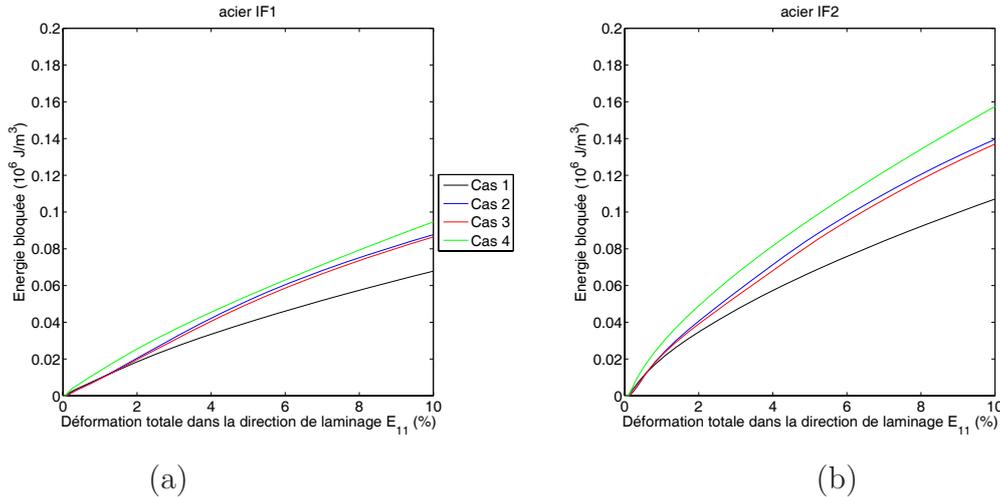


FIG. 3.15 – Evolution de l'énergie bloquée en traction, dans les quatre cas, pour l'acier IF1 (a) et l'acier IF2 (b)

Dans tous les cas, l'énergie bloquée est plus importante pour l'acier IF2 que pour l'acier IF1. Etant donné que les deux aciers ont des textures similaires, cette différence d'énergie bloquée provient essentiellement de la taille de grains moyenne et de la dispersion relative de taille de grain $\frac{\Delta D}{D_{moyen}}$.

La comparaison des cas 2 et 3, donc la comparaison de deux textures différentes permet de noter que l'énergie bloquée est plus faible avec la texture du cas 3 (même fraction volumique pour toutes les orientations cristallographiques) que pour le cas 2 (texture réelle).

Ces résultats montrent que la taille de grains moyenne et la dispersion de taille

de grains ont une influence non négligeable sur l'énergie bloquée, et par conséquent sur les contraintes internes, alors que la texture cristallographique a une influence beaucoup plus réduite.

Afin de compléter et d'approfondir l'étude des contraintes internes, les résultats en terme d'évolution des champs mécaniques locaux sont décrits ci-après.

3.3.5 Effets de texture et de taille de grains sur la réponse locale des grains

L'évolution des contraintes et des déformations plastiques des grains, dans la direction de traction, est étudiée afin de comprendre les différences de comportement mécanique macroscopiques.

Les champs locaux sont ainsi reportés pour des déformations macroscopiques totales de 1% et 5% pour les cas 1 et 2 (figure (3.16)) et pour les cas 3 et 4 (figure (3.17)).

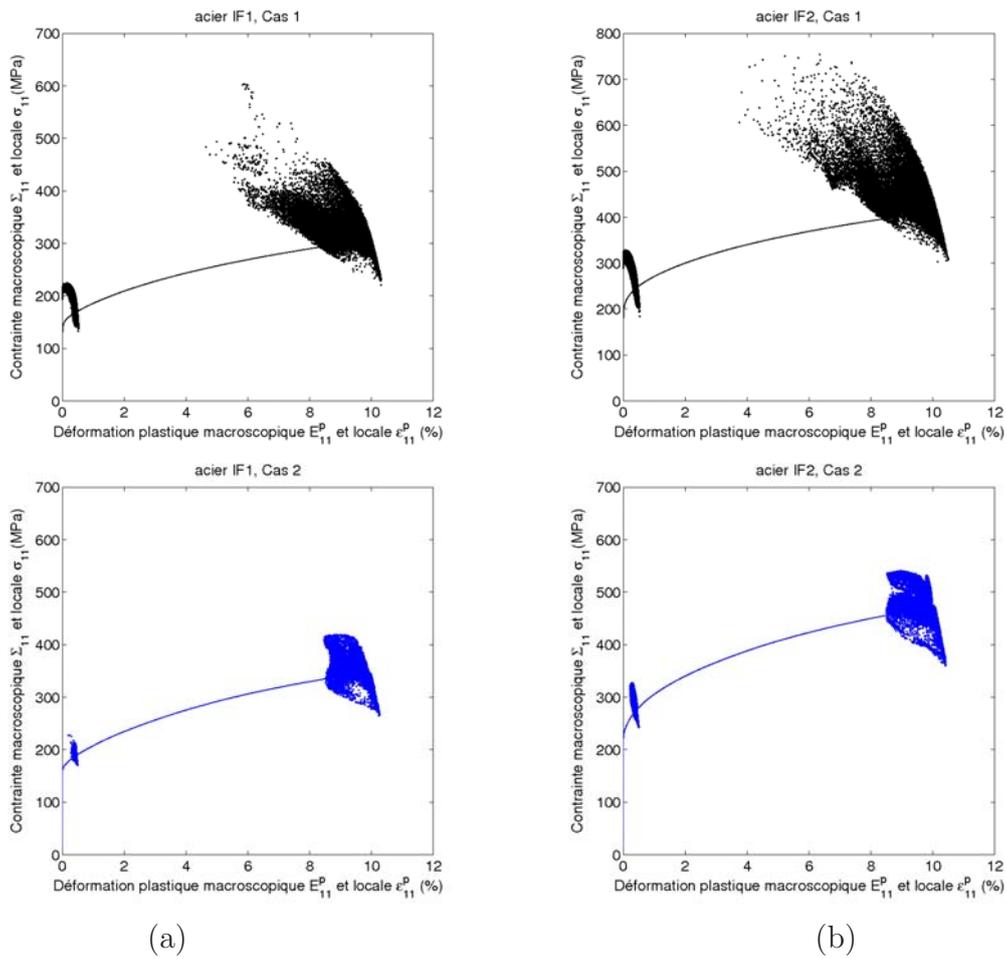


FIG. 3.16 – Evolutions des champs locaux, au cours du chargement, des aciers IF1 (a) et IF2 (b) pour les cas 1 et 2

Afin de compléter l'évolution des champs locaux, les écarts entre les grains les plus et les moins sollicités, c'est-à-dire $\Delta\sigma_{11} = \max(\sigma_{11}) - \min(\sigma_{11})$, et les écarts entre les grains les plus et les moins déformés plastiquement, c'est-à-dire $\Delta\epsilon_{11}^p = \max(\epsilon_{11}^p) - \min(\epsilon_{11}^p)$, sont reportés pour des déformations macroscopiques totales de 0,5% et 10% dans le tableau (3.8).

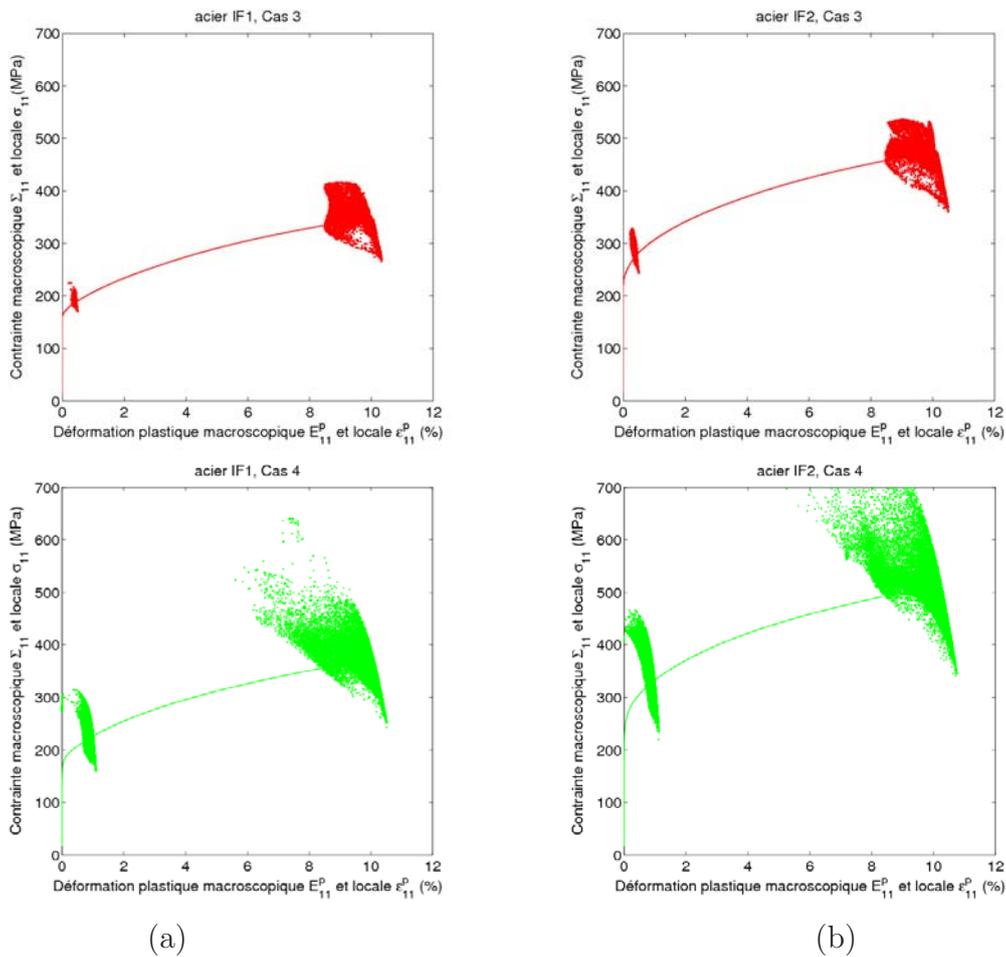


FIG. 3.17 – Evolutions des champs locaux, au cours du chargement, des aciers IF1 (a) et IF2 (b) pour les cas 3 et 4

L’impact de la dispersion de taille de grains sur l’étendue des quantités $\Delta\sigma_{11}$ et $\Delta\varepsilon_{11}^p$ locales est significatif.

Les différents cas intégrant une dispersion de taille de grains (les cas 1 et 4) présentent d’importantes fluctuations en termes de contraintes et de déformations plastiques. Par contre, les cas sans cette hétérogénéité (cas 2 et 3) présentent des champs mécaniques locaux environ deux fois moins étendus.

Les comparaisons entre le cas 1 et le cas 2 d’une part, et entre le cas 3 et le cas 4 d’autre part, permettent d’affirmer que la dispersion de taille de grains est à l’origine de la forte hétérogénéité des champs locaux.

En revanche, une modification de la texture (cas 2 et 3) n’a que très peu d’ef-

	Acier IF1		Acier IF2	
$E_{11} = 0,5\%$	$\Delta\sigma_{11}$ (MPa)	$\Delta\varepsilon_{11}^P$ (%)	$\Delta\sigma_{11}$ (MPa)	$\Delta\varepsilon_{11}^P$ (%)
cas 1	92,07	0,528	143,80	0,534
cas 2	56,79	0,304	85,10	0,287
cas 3	54,62	0,307	85,04	0,285
cas 4	123,08	0,548	185,78	0,559
$E_{11} = 10\%$	$\Delta\sigma_{11}$ (MPa)	$\Delta\varepsilon_{11}^P$ (%)	$\Delta\sigma_{11}$ (MPa)	$\Delta\varepsilon_{11}^P$ (%)
cas 1	382,37	5,671	450,58	6,752
cas 2	154,75	1,796	180,85	1,918
cas 3	151,16	1,863	176,04	2,034
cas 4	396,96	4,915	539,02	5,511

TAB. 3.8 – Etendues des champs mécaniques locaux

fet sur l'étendue des champs locaux. Deux facteurs peuvent être à l'origine de ce phénomène :

- les textures pour les cas 2 et 3 ne sont pas fondamentalement différentes. Les orientations cristallographiques et les tailles des grains restant identiques dans ces deux cas, le comportement mécanique des grains est inchangé. Néanmoins, le comportement mécanique macroscopique varie un peu du fait des fractions volumiques différentes entre ces deux cas.
- le nombre d'orientations cristallographiques disponible est élevé (supérieur à 16000). L'effet de la texture sur le comportement mécanique pourrait alors être masqué par le nombre d'orientations cristallographiques possibles dans le VER.

Enfin, il est à noter que toutes ces observations sont vérifiées pour les deux aciers, et, les étendues des champs locaux sont globalement plus importantes pour l'acier IF2 que pour l'acier IF1.

La taille de grains moyenne a également un effet sur les étendues des comportements mécaniques locaux des grains : en terme de contraintes $\Delta\sigma_{11}$ est multiplié par 1,5 entre l'acier IF1 et l'acier IF2 et en terme de déformation plastique $\Delta\varepsilon_{11}^P$ est multiplié par environ 1,2. L'effet sur l'étendue des contraintes est donc plus prononcé que celui sur les déformations plastiques.

Après avoir étudié l'effet couplé de la dispersion de taille de grains et de la texture sur le comportement mécanique global et local du matériau, nous allons nous intéresser, dans la partie suivante, aux effets de dispersion de taille de grains et de texture sur les coefficients de Lankford, qui sont une mesure de l'anisotropie plastique globale des tôles.

3.3.6 Effets de la dispersion de taille de grains et de la texture cristallographique sur l'anisotropie plastique globale des tôles

La mise en forme des tôles se fait principalement par le procédé d'emboutissage. La caractérisation de l'emboutissabilité d'un matériau se réalise à partir de différents paramètres mécaniques à l'échelle macroscopique.

Parmi ceux-ci, nous pouvons citer l'allongement à rupture, le rapport $\frac{R_m}{R_e}$ et les coefficients de Lankford.

La transition d'échelle utilisée étant écrite en petites déformations, notre modélisation ne permet pas d'atteindre l'allongement à rupture, ni la contrainte maximale R_m . En revanche, nous pouvons caractériser les coefficients de Lankford. Ainsi, les chargements pour caractériser l'anisotropie plastique consistent à effectuer des chargements de traction suivant une direction faisant un angle θ avec la direction de laminage, comme le montre la figure (3.18).

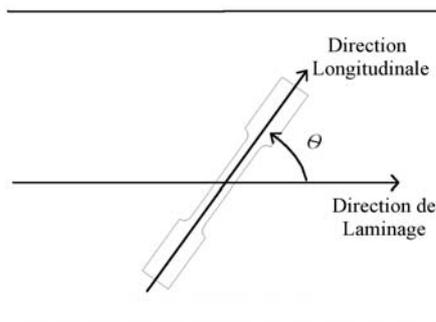


FIG. 3.18 – Orientation géométrique d'une éprouvette en vue d'essais de traction pour caractériser les coefficients de Lankford

Généralement, les coefficients de Lankford $r(\theta)$ sont déterminés en faisant le rapport $\frac{\dot{E}_{22}^p}{\dot{E}_{33}^p}$. Néanmoins, ce rapport est relativement complexe à déterminer lors d'essais de traction. En effet, il faut un système de mesure précis afin de définir \dot{E}_{33}^p (qui correspond à la déformation plastique suivant l'épaisseur de la tôle). Or, l'épaisseur des tôles étant généralement faible par rapport à la largeur et à la longueur des éprouvettes, le risque d'erreurs de mesure est élevé.

En utilisant la notion d'incompressibilité plastique macroscopique, qui se traduit

par l'équation suivante :

$$\dot{E}_{11}^p + \dot{E}_{22}^p + \dot{E}_{33}^p = 0, \quad (3.20)$$

nous pouvons définir le coefficient $q(\theta)$, correspondant au rapport $\frac{-\dot{E}_{22}^p}{\dot{E}_{11}^p}$. La relation liant $r(\theta)$ à $q(\theta)$ étant alors :

$$r(\theta) = \frac{q(\theta)}{1 - q(\theta)} \quad (3.21)$$

Un avantage de la détermination du coefficient q est la quasi-linéarité entre les déformations plastiques dans les directions longitudinale et transverse de l'éprouvette. Le coefficient de Lankford ainsi déterminé est constant au cours du chargement pour les VER étudiés [KTW00]. La figure (3.19) montre cette quasi-linéarité au cours des chargements simulés pour deux orientations différentes d'éprouvette.

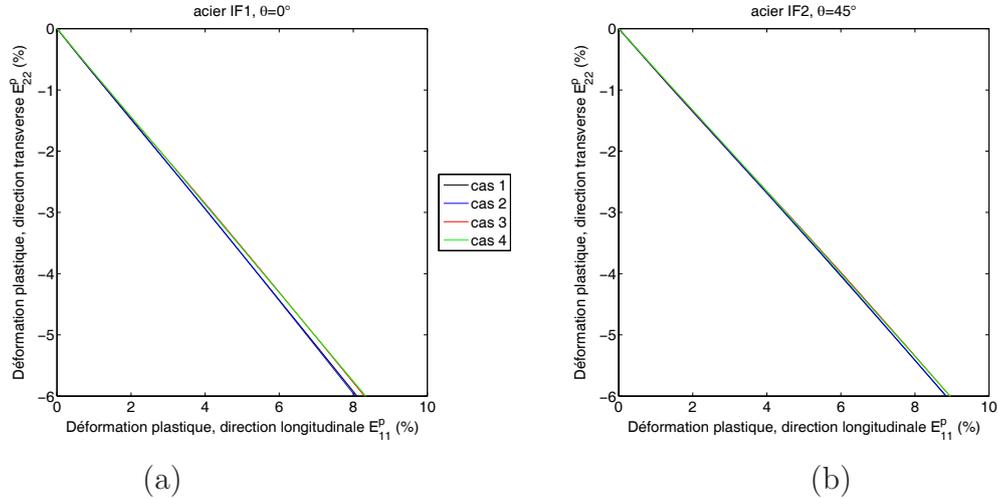


FIG. 3.19 – Evolutions des déformations transverse en fonction des déformations longitudinales de l'éprouvette, pour un angle θ de 0° pour l'acier IF1 (a) et un angle θ de 45° pour l'acier IF2 (b)

Les coefficients de Lankford, expérimentaux et simulés pour les cas 1 à 4 introduits dans le tableau (3.6), pour des éprouvettes orientées à 0° , 45° et 90° sont énumérés dans le tableau (3.9).

θ	Acier IF1					Acier IF2				
	0 °	45 °	90 °	\bar{r}	Δr	0 °	45 °	90 °	\bar{r}	Δr
expérimentale	2,1	1,9	2,8	2,2	0,48	1,5	2,1	2,0	1,92	-0,35
cas 1	2,86	2,13	2,80	2,48	0,71	1,49	2,13	2,03	1,94	-0,37
cas 2	2,92	2,15	2,69	2,48	0,65	1,52	2,13	2,06	1,96	-0,34
cas 3	2,60	2,00	2,42	2,25	0,51	1,56	2,04	1,80	1,86	-0,36
cas 4	2,58	1,95	2,49	2,24	0,58	1,30	2,04	1,73	1,78	-0,52

TAB. 3.9 – Coefficients de Lankford obtenus expérimentalement et par simulations pour les différents cas traités

La comparaison des valeurs expérimentales et des valeurs obtenues dans le cas 1 permet de remarquer une très bonne approximation des coefficients de Lankford par le modèle utilisé.

En comparant respectivement les cas 1 et 2 et les cas 3 et 4, nous nous apercevons que la considération d'une dispersion de taille de grains améliore peu l'estimation des coefficients de Lankford.

A l'inverse, en comparant respectivement les cas 2 et 3 et les cas 1 et 4, l'impact très important de la texture cristallographique sur les coefficients de Lankford est démontré.

La bonne approximation du modèle proviendrait alors plus de l'utilisation d'une texture très réaliste (car utilisant un grand nombre de grains et ainsi un grand nombre d'orientations s'approchant alors de la texture réelle du matériau) que de la prise en compte de la dispersion de taille de grain au sein du modèle micromécanique.

La surestimation du coefficient de Lankford $r(0)$ est probablement due à l'approche de transition d'échelle où les grains sont considérés comme sphériques.

En effet, Delannay et al. [DMS⁺09] ont démontré que la géométrie et la morphologie des grains jouent des rôles très importants sur les coefficients de Lankford. Ces effets sont représentés sur la figure (3.20), provenant des travaux de Delannay et al. [DMS⁺09] réalisés en utilisant trois modélisations différentes.

Le premier modèle qu'ils utilisent est celui développé par Delannay et al. [DJK06], écrit dans le cadre de la plasticité cristalline et utilisant la méthode des éléments finis.

Le second modèle mis en œuvre correspond au modèle auto-cohérent écrit en viscoplasticité par Lebensohn et Tomé [LT93].

Et le troisième modèle utilisé par Delannay et al. [DMS⁺09] correspond au modèle

“multisite” de Van Houtte et al. [VHLS05].

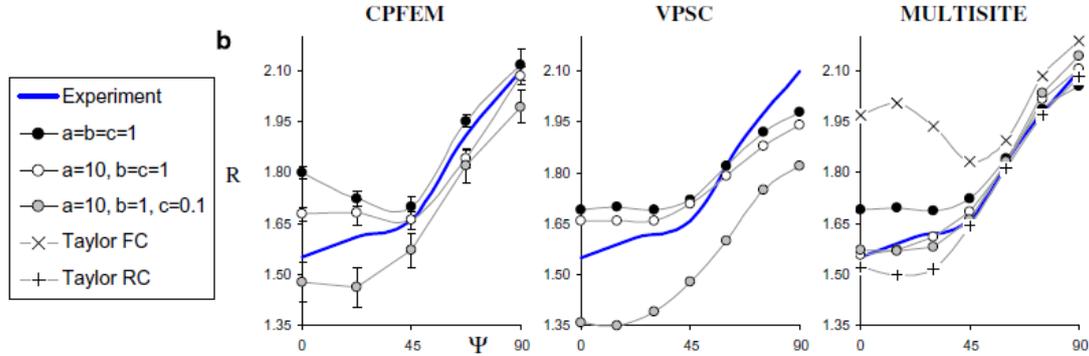


FIG. 3.20 – Mise en évidence de l’influence de la morphologie des grains sur les coefficients de Lankford réalisée à l’aide de plusieurs modèles [DMS+09]

Une première source possible de l’écart observé entre les différents modèles peut provenir de la texture des tôles utilisée. En effet, la texture d’une tôle peut varier suivant l’épaisseur. Ainsi, la texture de “peau” peut être différente de la texture au cœur de la tôle du fait du processus de laminage.

Une autre source possible de cet écart peut provenir de l’approche à champs moyens utilisée dans ce chapitre. Peeters et al. [PSK+01] ont montré que la prise en compte de cellules de dislocation, et notamment la présence des murs de dislocation, modifie les valeurs des coefficients de Lankford.

3.4 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons mis en évidence un effet couplé de la dispersion relative de taille de grains et de la texture cristallographique sur le comportement mécanique macroscopique et l’anisotropie plastique dans le cadre de la plasticité cristalline.

La comparaison entre les effets de la texture cristallographique et de la dispersion de taille de grains montre une prédominance de l’effet de la dispersion de taille de grains sur la contrainte d’écoulement et sur le comportement mécanique local.

Néanmoins, le type de modélisation choisi ne permet pas de retrouver l’intégralité du comportement mécanique macroscopique, comme par exemple les coefficients de Lankford qui sont bien estimés sauf dans un cas.

De plus, les lois de comportement mécanique à l'échelle locale nécessitent de donner la taille des grains en entrée de la modélisation (loi de type Hall-Petch). Cette nécessité provient du type de modélisation utilisée dans ce chapitre. Le chapitre suivant montrera que nous pouvons, par le biais d'une modélisation à champs non-uniformes dans les grains, obtenir un effet naturel de taille moyenne de grain sans avoir besoin d'entrer cette taille de manière empirique au niveau des lois de comportement.

Chapitre 4

Longueurs internes associées à une microstructure de dislocations contraintes aux joints de grains et applications

4.1 Introduction

L'approche micromécanique développée et mise en œuvre aux chapitres précédents a permis de mettre en évidence un effet de la taille moyenne et de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins. Néanmoins, ces approches à champs moyens ne permettent pas de prédire ces effets de taille naturellement à partir de lois physiques reliées aux mécanismes de déformation et aux microstructures, et, nécessitent d'utiliser des relations phénoménologiques de type Hall-Petch au niveau des lois de comportement intragranulaire.

Cette lacune provient non seulement de la modélisation utilisée pour décrire les champs mécaniques, mais aussi des lois de comportement mécanique dans le cadre de la plasticité isotrope ou cristalline. En effet, les deux approches proposées aux Chapitres 2 et 3 considèrent un état de contrainte en un point dépendant uniquement de son état de déformation (contexte de localité).

Ces approches ne sont plus valides dès lors que l'échelle des mécanismes physiques de déformation considérés se rapproche de la longueur caractéristique associée à la microstructure étudiée (comme la taille de grains par exemple).

Une démarche possible serait d'utiliser la théorie des milieux continus généralisés,

tels les milieux de Cosserat. Néanmoins, nous adopterons deux démarches différentes. Dans ces conditions de confinement d'échelle, les deux approches développées dans le présent chapitre, permettront de prendre en compte les effets des longueurs internes.

La première, discrète, considère des hétérogénéités plastiques de type défauts cristallins. Celles-ci peuvent provenir de l'apparition de bandes de glissement, de cellules de dislocation ou encore d'empilements de dislocation aux joints de grains. Cette première approche permet, contrairement à l'approche d'Eshelby [Esh57] considérant des déformations plastiques uniformes sur une inclusion, de mettre en évidence les échelles caractéristiques indiquées précédemment en partant d'une configuration statique des boucles de dislocation (ou de super dislocation) intragranulaires contraintes aux joints de grains.

La seconde approche, continue, non locale, consiste à prendre en considération l'environnement du grain (grain voisin) en terme d'incompatibilité plastique dans une zone proche du joint de grains. Cette zone est sujette à un fort gradient de déformation plastique (ou fort gradient de désorientation) d'après les résultats de l'approche discrète.

Dans ce chapitre, nous commencerons par présenter une modélisation micromécanique en supposant un champs de déformation plastique hétérogène lié à des distributions de boucles de dislocation (approche discrète) dans un grain sphérique (section (4.2)).

Puis, nous développerons une approche continue, "non locale", à champs moyens et à longueurs internes afin de retrouver naturellement les effets de taille de grains observés sur les aciers IF [PNB⁺09] dans le cadre de comportement élasto-viscoplastique. Les résultats de l'approche à champs moyens à longueurs internes au niveau des réponses macroscopiques et des évolutions de variables locales sont présentés dans la section (4.3).

4.2 Longueurs internes et hétérogénéité des champs plastiques intragranulaires

Quand un matériau se déforme plastiquement au cours de chargements externes, un nombre important de dislocations se déplace collectivement formant à l'échelle mésoscopique des sous-structures comme des lignes ou des bandes de glissement. Ces sous-structures dépendent de la structure cristallographique du matériau. Selon Neuhäuser [Neu83], la formation des lignes de glissement est due aux mouvements cummulés de plusieurs dislocations qui durent généralement quelques millisecondes, puis, les bandes de glissement se développent après formation de plusieurs lignes de glissement.

Dans l'approche mise en œuvre dans cette section, la connaissance de la microstructure discrète (vecteurs de Burgers, distributions spatiales des dislocations) et des longueurs internes associées sont nécessaires pour déterminer les contraintes internes et l'énergie libre.

Dans le but de comparer les deux approches, l'approche classique de l'inclusion plastique d'Eshelby et l'approche discrète, la moyenne de la distorsion plastique sur le grain correspondant à la distribution de boucles de dislocation sera la même que la distorsion plastique uniforme dans le grain considéré dans l'approche à champs moyens d'Eshelby.

Ce genre d'étude a déjà été mis en œuvre par Mura [Mur87] et Saada et al. [RS76][Saa06][SB93] uniquement pour des réseaux périodiques de dislocations rectilignes. Ces auteurs ont montré que les contraintes internes à longue distance dues à des distributions discrètes de dislocations rectilignes se réduisent aux contraintes internes obtenues en utilisant une distribution continue et moyennée de dislocations interfaciales. En revanche, à proximité de l'interface, la distribution discrète de dislocations conduit à une solution en contrainte qui décroît exponentiellement avec la distance à l'interface pour tendre vers la solution d'une distribution continue et moyennée. De plus, il a été prouvé que cette décroissance exponentielle dépend de la période du réseau de dislocation à l'interface.

Dans cette section, les effets combinés d'une distribution périodique de boucles de dislocation, de leurs empilements aux joints de grains, et de la courbure du joint de grains (considéré ici comme une interface sphérique) sur les contraintes internes sont analysés en utilisant les transformées de Fourier. Les contraintes internes sont dépendantes du paramètre adimensionnel défini par le rapport de la taille de grains et de la période de la distribution de boucles (ou inversement) contenant les longueurs internes associées à la microstructure discrète intragranulaire. Cette approche fait également l'objet des travaux de Berbenni et al. [BBR08].

4.2.1 Rappel de l'approche à champs moyens d'Eshelby

Le problème de l'inclusion sphérique "noyée" dans une matrice élastique infinie, généralement appelé problème d'Eshelby [Esh57], a été traité en supposant que l'inclusion est soumise à une déformation libre $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$ (déformation plastique), uniforme dans l'inclusion, de telle sorte que :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r}) = \underline{\underline{C}} : [\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{r}) - \underline{\underline{\varepsilon}}^* \delta_0^I(\underline{r})] \quad (4.1)$$

où $\underline{\underline{C}}$ est le tenseur des modules élastiques supposés homogènes. $\delta_0^I(\underline{r})$ est la fonction caractéristique de l'inclusion I, c'est-à-dire $\delta_0^I = \begin{cases} 0 & \text{si } \underline{r} \notin V_I \\ 1 & \text{si } \underline{r} \in V_I \end{cases}$.

La résolution de ce problème par Eshelby permet alors de déterminer la déformation totale $\underline{\underline{\varepsilon}}^I$ uniforme dans l'inclusion en fonction de la déformation libre par le biais du tenseur d'Eshelby $\underline{\underline{S}}^{\text{Esh}}$, uniforme dans V^I :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = \underline{\underline{S}}^{\text{Esh}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \quad (4.2)$$

avec :

$$\underline{\underline{S}}^{\text{Esh}} = \underline{\underline{C}} : \int_{V_I} \underline{\underline{\Gamma}} dV' \quad (4.3)$$

où $\underline{\underline{\Gamma}}$ correspond au tenseur de Green modifié. $\underline{\underline{S}}^{\text{Esh}}$ dépend de la géométrie de l'inclusion, et, pour une inclusion sphérique, les expressions des déformations, des contraintes dans l'inclusion et de l'énergie élastique W_{el} sur le volume total dépendent uniquement de la déformation libre et des modules élastiques.

Dans le cas de l'élasticité isotrope, et d'une inclusion sphérique, nous avons :

$$S_{ijkl}^{\text{Esh}} = \frac{\alpha - \beta}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{\beta}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (4.4)$$

avec :

$$\begin{cases} \alpha = \frac{1}{3} \frac{1+\nu}{1-\nu} \\ \beta = \frac{2}{15} \frac{4-5\nu}{1-\nu} \end{cases} \quad (4.5)$$

D'où, sous l'hypothèse d'une condition de déformation nulle imposée aux limites, les expressions de $\underline{\underline{\varepsilon}}^I$, $\underline{\underline{\sigma}}^I$ et de W_{el} sont respectivement :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\varepsilon}}^I = \alpha \underline{\underline{\varepsilon}}^* + \frac{\alpha-\beta}{3} \delta \text{ trace}(\underline{\underline{\varepsilon}}^*) \\ \underline{\underline{\sigma}}^I = -2\mu(1-\beta) \underline{\underline{\varepsilon}}^* + 2\mu \left(\frac{\beta-\alpha}{3} + \frac{\nu(1-\alpha)}{1-2\nu} \right) \delta \text{ trace}(\underline{\underline{\varepsilon}}^*) \\ W_{el} = -\frac{1}{2} V_I \underline{\underline{\sigma}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \end{cases} \quad (4.6)$$

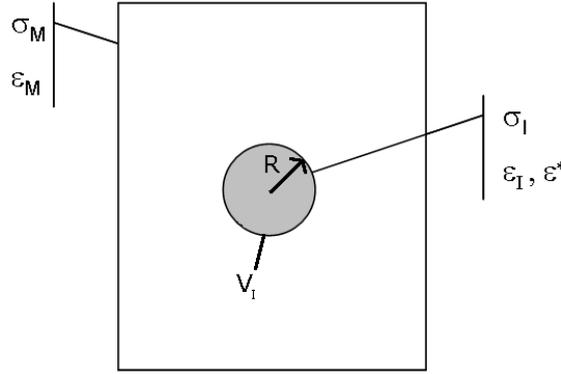


FIG. 4.1 – Schéma du problème de l'inclusion plastique d'Eshelby [Esh57]

Les expressions précédentes sont simplifiées dans le cas courant en plasticité où $\varepsilon_{kk}^* = 0$ ($\text{trace}(\underline{\underline{\varepsilon}}^*) = 0$) du fait de l'incompressibilité plastique.

Les expressions des déformations totales, des contraintes et de l'énergie élastique mettent en évidence une absence d'effet de taille de l'inclusion. Cette absence provient d'une représentation non réaliste des déformations libres supposées uniformes dans l'inclusion. En effet, les mécanismes de plastification par mouvement de dislocation font apparaître des structures de déformation plastique non-uniformes. Ces hétérogénéités des déformations plastiques peuvent être liées à des lignes ou des bandes de glissement (figure (4.2)) comme l'ont montré Fréchar et al. [FMCC06] et Villechaise et al. [VSG02].

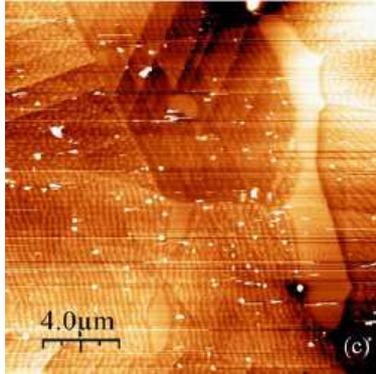


FIG. 4.2 – Image obtenue par AFM permettant de visualiser des bandes de glissement dans des grains d’une éprouvette d’acier inoxydable. La direction de traction est verticale par rapport à l’image AFM [FMCC06]

Une tentative de description micromécanique de ces mécanismes physiques est développée ci-après par l’approche discrète proposée par Berbenni et al. [BBR08].

4.2.2 Formulation micromécanique d’événements plastiques discrets basée sur les transformées de Fourier

Berbenni et al. [BBR08] supposent des distorsions libres $\underline{\underline{\beta}}^*(\underline{r})$ non-uniformes et discrètes (distributions de boucles de dislocation) dans l’inclusion. En utilisant les équations d’équilibre, la compatibilité des déformations avec une condition de déformation nulle imposée aux limites, les équations de Navier suivantes sont obtenues :

$$C_{ijkl}u_{k,lj}(\underline{r}) - C_{ijkl}\beta_{lk,j}^*(\underline{r}) = 0 \quad (4.7)$$

Le problème peut alors être résolu dans l’espace de Fourier [Mur87], les champs de déplacement $\underline{u}(\underline{r})$ et de distorsion $\underline{\underline{\beta}}(\underline{r})$ étant tout d’abord calculés dans l’espace de Fourier, puis transportés dans l’espace réel. Les solutions dans l’espace de Fourier

en termes de déplacements $\underline{\tilde{u}}(\underline{\xi})$ et de distorsions $\underline{\tilde{\beta}}(\underline{\xi})$ sont définies par :

$$\begin{cases} \underline{\tilde{u}}_k(\underline{\xi}) = \int_{V_r} u_k(\underline{r}) \exp(-i\underline{\xi} \cdot \underline{r}) dV_r \\ \underline{\tilde{\beta}}_{lk}^*(\underline{\xi}) = \int_{V_r} \beta_{lk}^*(\underline{r}) \exp(-i\underline{\xi} \cdot \underline{r}) dV_r \end{cases} \quad (4.8)$$

où $\underline{\xi}$ est le vecteur position dans l'espace de Fourier et $i^2 = -1$. Ces champs sont définis dans l'espace réel en utilisant les transformées inverses de Fourier, qui sont définies par :

$$\begin{cases} u_k(\underline{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{V_\xi} \underline{\tilde{u}}_k(\underline{\xi}) \exp(i\underline{\xi} \cdot \underline{r}) dV_\xi \\ \beta_{lk}^*(\underline{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{V_\xi} \underline{\tilde{\beta}}_{lk}^*(\underline{\xi}) \exp(i\underline{\xi} \cdot \underline{r}) dV_\xi \end{cases} \quad (4.9)$$

Le champs de déformation dans l'espace de Fourier devient alors après quelques simplifications [Mur87] :

$$\underline{\tilde{u}}_k(\underline{\xi}) = X_i(\underline{\xi}) \underline{\tilde{G}}_{ik}(\underline{\xi}) \quad (4.10)$$

où $\underline{\tilde{G}}_{ik}(\underline{\xi})$ est la transformée de Fourier du tenseur de Green associé au milieu élastique homogène $\underline{\tilde{C}}$. Les expressions de $X_i(\underline{\xi})$ et $\underline{\tilde{G}}_{ik}(\underline{\xi})$ sont définies par :

$$\begin{cases} \underline{\tilde{G}}_{ik}(\underline{\xi}) = (C_{ijkl} \xi_l \xi_j)^{-1} \\ X_i(\underline{\xi}) = -i C_{ijkl} \xi_j \underline{\tilde{\beta}}_{lk}^*(\underline{\xi}) \end{cases} \quad (4.11)$$

En se plaçant en élasticité isotrope, définie par le module de cisaillement μ et le coefficient de Poisson ν , $X_i(\underline{\xi})$ et $\underline{\tilde{G}}_{ik}(\underline{\xi})$ s'écrivent :

$$\begin{cases} X_i(\underline{\xi}) = -i2\mu\xi_j \left[\underline{\tilde{\varepsilon}}_{ij}^*(\underline{\xi}) + \frac{\nu}{1-2\nu} \underline{\tilde{\varepsilon}}_{kk}^*(\underline{\xi}) \delta_{ij} \right] \\ \underline{\tilde{G}}_{ik}(\underline{\xi}) = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\delta_{ik}}{\xi^2} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{\xi_i \xi_k}{\xi^4} \right] \end{cases} \quad (4.12)$$

La solution du problème, en termes de déplacements et de distorsions, peut alors

s'écrire :

$$\begin{cases} u_k(\underline{r}) = \frac{-1}{4\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{ik}\xi_j}{\xi^2} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k}{\xi^4} \right) \left(\tilde{\varepsilon}_{ij}^*(\underline{\xi}) + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \tilde{\varepsilon}_{qq}^*(\underline{\xi}) \right) \exp(i\underline{\xi} \cdot \underline{r}) dV_\xi \\ u_{k,l}(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{ik}\xi_j\xi_l}{\xi^2} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_l}{\xi^4} \right) \left(\tilde{\varepsilon}_{ij}^*(\underline{\xi}) + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \tilde{\varepsilon}_{qq}^*(\underline{\xi}) \right) \exp(i\underline{\xi} \cdot \underline{r}) dV_\xi \end{cases} \quad (4.13)$$

Dans le cas de boucles de dislocation, les équations précédentes sont simplifiées du fait de l'incompressibilité plastique ($\tilde{\varepsilon}_{qq}^* = 0$) en :

$$\begin{cases} u_k(\underline{r}) = \frac{-1}{4\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{ik}\xi_j}{\xi^2} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k}{\xi^4} \right) \tilde{\varepsilon}_{ij}^*(\underline{\xi}) \exp(i\underline{\xi} \cdot \underline{r}) dV_\xi \\ u_{k,l}(\underline{r}) = \beta_{lk}(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{ik}\xi_j\xi_l}{\xi^2} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_l}{\xi^4} \right) \tilde{\varepsilon}_{ij}^*(\underline{\xi}) \exp(i\underline{\xi} \cdot \underline{r}) dV_\xi \end{cases} \quad (4.14)$$

Les champs de contrainte interne $\underline{\sigma}(\underline{r})$ sont alors déduits de la loi de Hooke par :

$$\sigma_{ij}(\underline{r}) = 2\mu \left(\varepsilon_{ij}(\underline{r}) - \varepsilon_{ij}^*(\underline{r}) + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \varepsilon_{qq}(\underline{r}) \right) \quad (4.15)$$

La solution du problème dépend des distorsions plastiques non-uniformes dans l'inclusion. Berbenni et al. [BBR08] se placent dans le cas particulier de boucles de dislocation distribuées spatialement de manière périodique dans un grain de rayon R et disposées sur des plans $(x_1, x_2, 0)$ espacés d'une hauteur h (figure 4.3) ayant les mêmes vecteurs de Burgers $\underline{b} = (b, 0, 0)$. Cette disposition particulière permet d'exprimer les distorsions libres par :

$$\beta_{31}^*(\underline{r}) = b \sum_{n=-N}^{+N} H \left(1 - \frac{\rho}{\sqrt{R^2 - (nh)^2}} \right) \delta(x_3 - nh) \quad (4.16)$$

où $H \left(1 - \frac{\rho}{\sqrt{R^2 - (nh)^2}} \right)$ est la fonction Heaviside sur la boucle de dislocation à l'altitude nh , et $\delta(x_3 - nh)$ est la fonction de Dirac à l'altitude nh .

Cette schématisation prend en compte les interactions discrètes entre les boucles de dislocation contraintes par le joint de grain, ce qui n'est pas le cas du problème

d'Eshelby. La transformée de Fourier de ces distorsions peut s'écrire :

$$\widetilde{\beta_{31}^*}(\underline{\xi}) = b\widetilde{\theta^d}(\underline{\xi}) \quad (4.17)$$

avec :

$$\widetilde{\theta^d}(\underline{\xi}) = 2\pi \sum_{n=-N}^{+N} \exp(-inh\xi_3) \sqrt{R^2 - (nh)^2} \frac{J_1\left(q\sqrt{R^2 - (nh)^2}\right)}{q} \quad (4.18)$$

avec $q = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2}$ et J_1 est la fonction de Bessel de premier type.

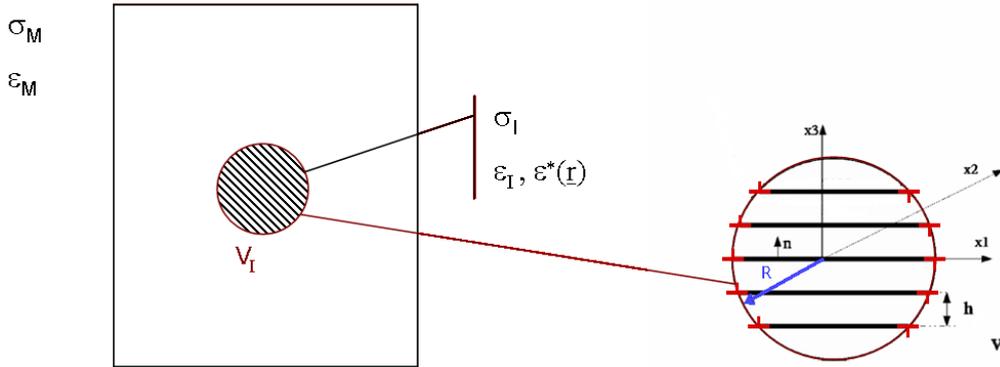


FIG. 4.3 – Représentation du problème d'une inclusion sphérique, à champs de déformation plastique intragranulaire discret et périodique (associé à des boucles de dislocation circulaires), noyée dans une matrice purement élastique [BBR08]

Le problème classique de l'inclusion plastique d'Eshelby peut être comparé à la configuration discrète précédente à mêmes distorsions moyennes sur le grain de volume V_I . Les hétérogénéités des distorsions libres du grain donnent alors des distorsions moyennes sur le grain $\overline{\beta_{31}^*}^{V_I}$ dépendantes de la taille de ce même grain :

$$\overline{\beta_{31}^*}^{V_I} = \frac{3}{4} \frac{b}{R} \sum_{n=-N}^{+N} \left(1 - \left(\frac{nh}{R}\right)^2\right) \quad (4.19)$$

Dans ces conditions, les contraintes sont trouvées non-uniformes dans l'inclusion V_I et seront par conséquent différentes de celles déduites du problème d'Eshelby. Berbenni et al. [BBR08] mettent alors en évidence cette non-uniformité des contraintes internes intragranulaires, en observant l'évolution des contraintes au centre du grain suivant l'axe x_3 (figure (4.4)), en fonction du nombre de boucles de dislocation tapissant le grain.

Quand le nombre de boucles est élevé, la solution classique d'Eshelby est retrouvée (figure (4.4)). Inversement, plus le rapport R/h est faible, plus une couche à fort gradient de contrainte interne se développe près du joint de grains.

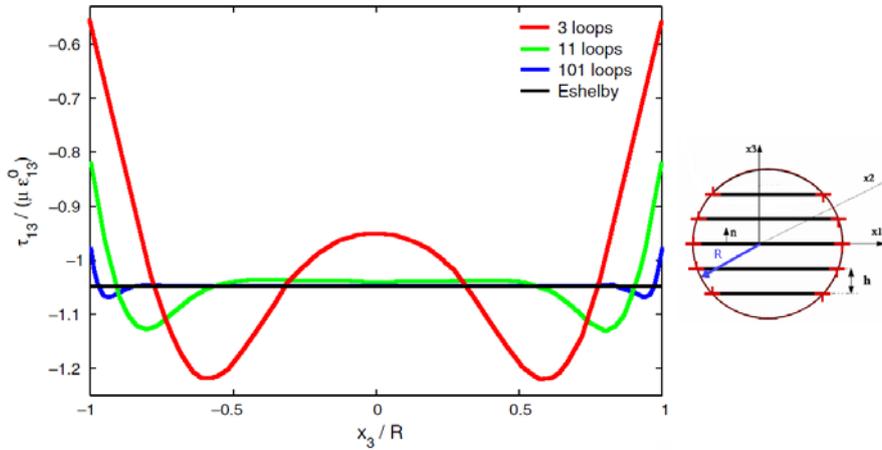


FIG. 4.4 – Mise en évidence de l'hétérogénéité des contraintes internes suivant la direction x_3 du repère local du grain dans le grain [BBR08]

Ces hétérogénéités des contraintes internes montrent qu'un grain peut être schématiquement décomposé spatialement en deux domaines distincts.

D'une part, il y a le coeur du grain correspondant à un domaine présentant une quasi-uniformité de champs mécaniques ceux-ci se rapprochant de la solution d'Eshelby.

D'autre part, il y a une région proche du joint de grains comprenant des champs mécaniques non-uniformes (zone à fort gradient de contrainte interne).

L'observation des variations des contraintes dans le grain (figure 4.4) met en évidence un effet de la taille de grain : plus le grain est petit (ici R/h petit), plus les contraintes sont perturbées et la zone affectée par le joint de grains est large. Berbenni et al. [BBR08] assimilent la zone perturbée à une calotte sphérique. La dimension de celle-ci est déterminée en utilisant un critère d'uniformité de l'énergie élastique sur le coeur du grain (figure 4.5).

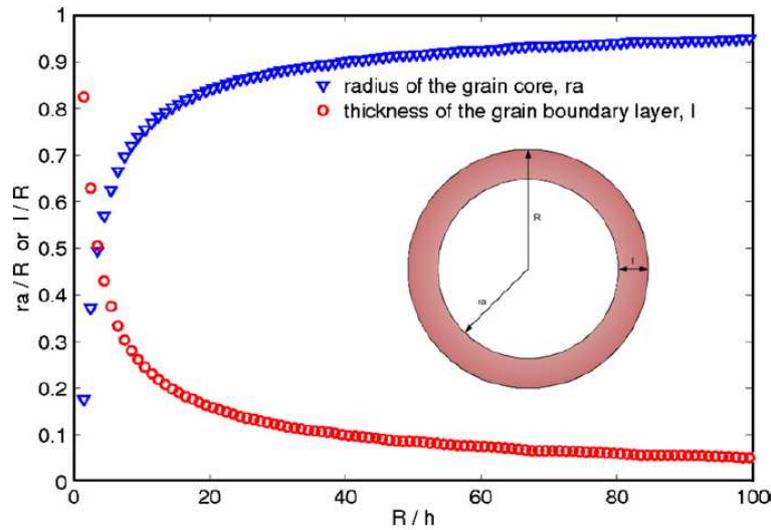


FIG. 4.5 – Représentation d’une couche proche du joint de grains d’épaisseur l , en utilisant un critère permettant la définir comme une calotte sphérique. Evolution de l en fonction de R/h [BBR08]

Ces modélisations permettent de mettre en évidence un effet de taille “direct” lié à des distributions de dislocation non-uniformes au sein du grain. L’hétérogénéité des champs mécaniques locaux s’explique, à l’échelle du grain, par l’apparition de bandes de glissement et de boucle de dislocation. Ces boucles s’accumulent (sous forme d’empilements) dans la région du joint de grains.

Ainsi, cette région possède un état de contrainte en moyenne plus élevé que celui au cœur du grain. Il est néanmoins difficile de prendre en compte des champs mécaniques complexes au sein d’un polycristal. Mais, il est possible d’introduire une modélisation d’un grain enrobé par une zone proche du joint de grains (enrobage supposé sphérique) et noyé dans un milieu homogène équivalent.

Néanmoins, comme détaillé dans la section suivante, ces modélisations ne décrivent pas intégralement les mécanismes engendrant des hétérogénéités de comportement dans un grain mais sont capables de décrire naturellement un effet de taille de grains à l’échelle macroscopique.

4.2.3 Vers une modélisation à champs moyens à longueurs internes en plasticité

4.2.3.1 Mesures expérimentales des désorientations de réseau près du joint de grain

Expérimentalement, Kamaya et al. [KWT05] retrouvent une couche en étudiant les rotations de réseau intragranulaire dans l'acier inoxydable en fonction de la déformation plastique dans les grains, au cours de trajets de traction simple. Ainsi, à l'aide de mesures EBSD, ils observent une couche présentant de fortes désorientations cristallines proches des joints de grains par rapport au centre des grains.

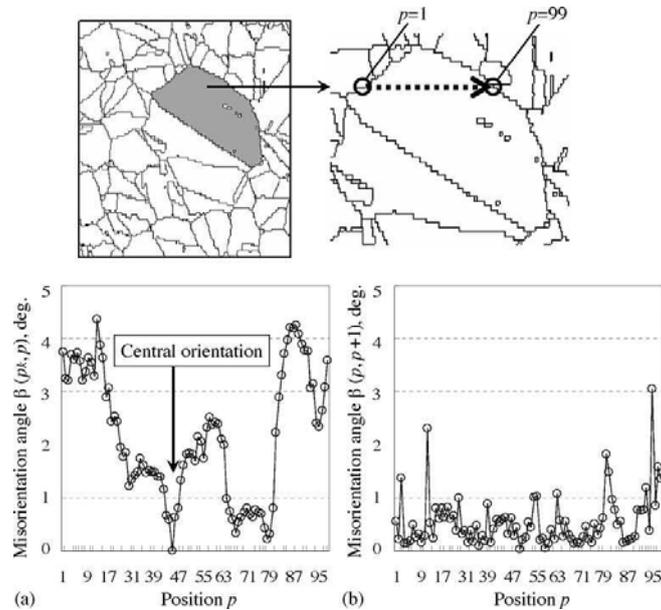


FIG. 4.6 – Représentation de la désorientation intragranulaire le long d'une ligne (en pointillés), dans la direction transverse, sur un grain pour une déformation de l'éprouvette de 14,4%. La désorientation est représentée par rapport à l'orientation cristallographique au centre du grain (a) puis par rapport au point adjacent (b) [KWT05]

La même technique a été utilisée auparavant par Randle et al. [RHJ96] sur des polycristaux d'aluminium déformés plastiquement par laminage avec un taux de réduction de 30%. Des perturbations de quelques degrés des orientations cristallines proches du joint de grains furent alors observées.

Scheriau et Pippan [SP08] observent un phénomène similaire, sur des métaux purs tels que le nickel, le cuivre et le fer, en utilisant également des mesures EBSD avant et au cours de chargements de traction uniaxiale in-situ. Néanmoins, ils notent des désorientations proches du joint de grains uniquement pour des grains ayant un diamètre inférieur ou égal au micromètre. Pour des grains ayant un diamètre plus important, Scheriau et Pippan observent également une fragmentation des grains en terme d'orientation cristallographique générée, entre autres, par l'apparition de cellules de dislocation dans le grain. Ces désorientations du réseau cristallin, dans la région proche des joints de grains, sont la conséquence de l'apparition de dislocations géométriquement nécessaires (GND) et permettent de conserver la cohésion grain à grain du matériau. D'après ces résultats expérimentaux et les conclusions de l'approche discrète, un grain peut donc être représenté en deux zones (figure 4.7) : une zone appelée coeur du grain ne comprenant que des dislocations statistiquement stockées, et une autre zone appelée couche.

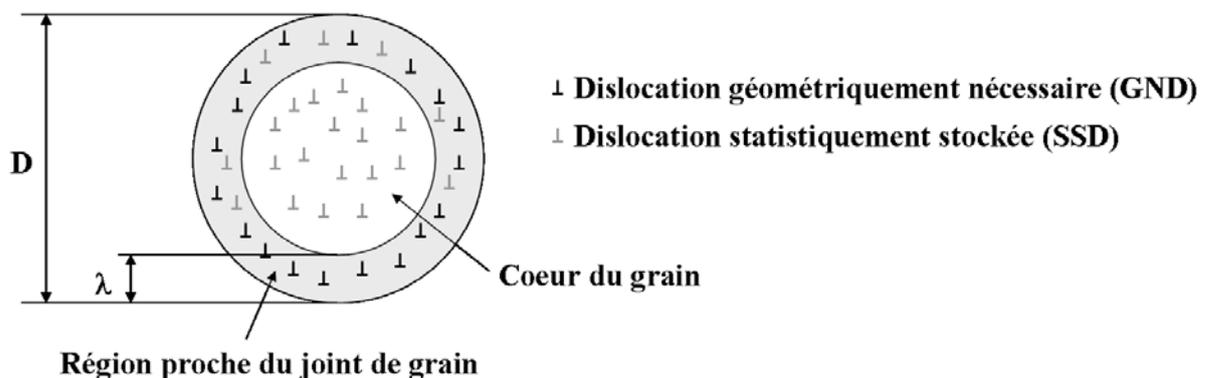


FIG. 4.7 – Répartition spatiale des deux types de dislocation et des longueurs internes λ et D présentes dans un grain

4.2.3.2 Dislocations géométriquement nécessaires

Afin d'assurer la cohésion de la matière, les densités de dislocation géométriquement nécessaire (GND) sont essentielles afin d'assurer la courbure du réseau cristallin [Ash70]. Les équations fondamentales de la théorie des dislocations continues établissent un lien entre les distorsions élastiques $\underline{\underline{\beta}}^e$ et le tenseur de dislocation $\underline{\underline{\alpha}}$ également

appelé tenseur de Nye [Nye53][Krö58] :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \text{rot} \underline{\underline{\beta}}^e \quad (4.20)$$

En utilisant la décomposition des distorsions totales $\underline{\underline{\beta}}$ en une partie élastique $\underline{\underline{\beta}}^e$ et une partie plastique $\underline{\underline{\beta}}^p$, puis en se rappelant de la définition du tenseur des distorsions totales correspond au gradient des déplacements \underline{u} :

$$\beta_{lk} = u_{k,l} \quad (4.21)$$

le tenseur des densités de dislocation peut être lié aux distorsions plastiques par :

$$\underline{\underline{\alpha}} = -\text{rot} \underline{\underline{\beta}}^p \quad (4.22)$$

En négligeant les rotations inélastiques, l'évolution du tenseur des dislocations est relié aux taux de déformation plastique :

$$\underline{\underline{\dot{\alpha}}} = -\text{rot} \underline{\underline{\dot{\beta}}}^p \quad (4.23)$$

En utilisant les coordonnées sphériques, l'expression de l'évolution des GND ne dépend plus que du gradient de déformation plastique :

$$\dot{\rho}_g^{(s)} = \frac{1}{b} \frac{\partial \dot{\varepsilon}_{eq}^p}{\partial r} \quad (4.24)$$

où b est le module du vecteur de Burgers. Un développement plus poussé de cette démonstration est présenté en annexe B.

L'expression (4.24) est similaire à celle décrite par Ashby [Ash70]. Dans ces travaux, Ashby décrit l'influence des GND sur les rotations de réseau et établit une relation liant les densités de GND (notées $\rho_g^{(s)}$ sur un système de glissement (s)) aux gradients de glissement plastique (noté $\gamma^{(s)}$) :

$$\rho_g^{(s)} = \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma^{(s)}}{\partial \underline{x}} \quad (4.25)$$

Il est alors possible de définir une évolution des GND, dans la zone proche du joint de grains qui est appelée couche, dépendant du gradient de déformation plastique. Les GND sont alors considérées comme une nouvelle variable interne dans la couche. L'évolution des GND dépendant du gradient de déformation plastique, il est possible de faire apparaître une nouvelle longueur interne, l'épaisseur de la couche λ , pour définir ce gradient.

Cette longueur interne et cette nouvelle variable interne devraient permettre d'obtenir un effet de taille de grains naturel (provenant de la modélisation) sur le comportement mécanique.

4.3 Modèle d'homogénéisation à champs moyens à longueurs internes

Dans cette section, nous mettons en œuvre l'approche auto-cohérente élastoviscoplastique exposée au Chapitre 1 et utilisée dans les Chapitres 2 et 3.

Contrairement aux approches des Chapitres 2 et 3, nous supposons l'apparition d'une couche "dure" (à forts gradients de glissement plastique) proche des joints de grains.

Nous commençons par expliquer la représentation moyenne des variables internes, et la représentation des hétérogénéités plastiques dans les grains ainsi que la topologie du VER utilisée.

Puis, nous abordons l'évolution des variables internes, c'est-à-dire des densités de dislocation statistiquement stockée (ρ_s) et géométriquement nécessaire (ρ_g), au sein du matériau.

Pour finir, nous appliquons l'approche décrite en œuvre aux aciers IF afin d'observer et d'étudier les effets de taille de grains sur le comportement mécanique macroscopique et sur l'évolution des variables internes dans les différentes zones du grain.

Il s'agit d'un modèle micromécanique simplifié basé sur une description du grain par un composite biphasé.

Le cœur du grain constitue une première "phase" pour laquelle seules les dislocations statistiquement stockées (c'est-à-dire avec un vecteur de Burgers net de zéro) participent à l'écoulement plastique. La couche, où prennent place les gradients de déformation plastique et les dislocations géométriquement nécessaires (en plus des dislocations statistiquement stockées), constitue une seconde "phase". Une plasticité de nature isotrope sera prise en compte par souci de simplicité, même si les applications sont destinées aux aciers IF.

L'approche proposée est conceptuellement similaire à celle proposée initialement par

Mughrabi [Mug83][Mug04] pour la description des cellules de dislocation, mais les outils et les applications sont ici différents.

4.3.1 Représentation moyenne des champs de dislocation continus et topologie du VER

Les grains des matériaux métalliques recuits peuvent être considérés comme équiaxiaux et peuvent être modélisés par une représentation sphérique. Compte tenu des conclusions des sections (4.2.2) et (4.2.3), les grains sont représentés par une sphère (cœur du grain) et une calote également supposée sphérique (couche proche du joint de grain) à fort gradient de déformation plastique. Sur la figure (4.8), l'épaisseur de la couche est notée λ , dimension qui sera supposée constante quelque soit l'état de déformation plastique et la taille de grains D . La microstructure intragranulaire est donc totalement définie dès que le paramètre adimensionnel λ/D est fixé.

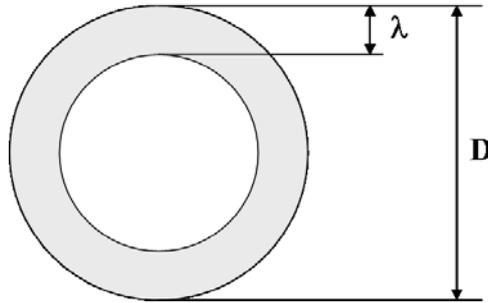


FIG. 4.8 – Représentation du cœur et de la couche d'épaisseur λ pour un grain de diamètre D

La représentation des grains en deux zones (cœur et couche), présentée par la figure ci-dessus, permet de définir la fraction volumique du cœur (notée $f^{(I)}$) et celle de la couche (notée $f^{(C)}$) dans le grain. Ces fractions volumiques sont définies par :

$$\begin{cases} f^{(I)} = \left(\frac{D-2\lambda}{D}\right)^3 \\ f^{(C)} = 1 - f^{(I)} = 1 - \left(\frac{D-2\lambda}{D}\right)^3 \end{cases} \quad (4.26)$$

Ainsi, pour une épaisseur de couche donnée (λ est arbitrairement choisi égal à une valeur de $0,15 \mu m$), les évolutions des fractions volumiques de la couche et du

cœur en fonction du diamètre du grain sont représentées par le graphique de la figure (4.9).

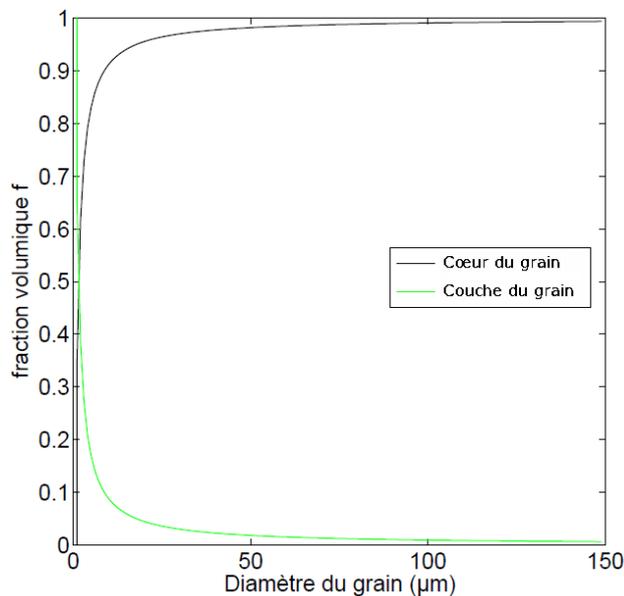


FIG. 4.9 – Evolutions des fractions volumiques de la couche (C) et du coeur (I) du grain en fonction du diamètre D du grain pour une épaisseur de couche $\lambda = 0,15\mu m$

Pour un grain ayant un “petit” diamètre, c’est-à-dire du même ordre de grandeur que l’épaisseur de la couche, la contribution de la couche au comportement mécanique de l’agrégat n’est pas négligeable.

A l’inverse, pour de gros grains, la fraction volumique de la couche est très faible, et la contribution de la couche au comportement mécanique de l’agrégat est négligeable (effet composite).

L’effet composite n’est cependant pas le seul responsable des effets de taille puisque l’évolution des densités de GND jouera aussi un rôle significatif.

Les descriptions des champs mécaniques dans la couche dépendent des dislocations géométriquement nécessaires (GND) comme introduites par Ashby [Ash70]. Les taux de déformation plastique peuvent être schématisés en supposant un gradient linéaire dans la zone proche du joint de grains (représenté en rouge sur la figure (4.10)) afin de calculer l’évolution des GND dans la couche.

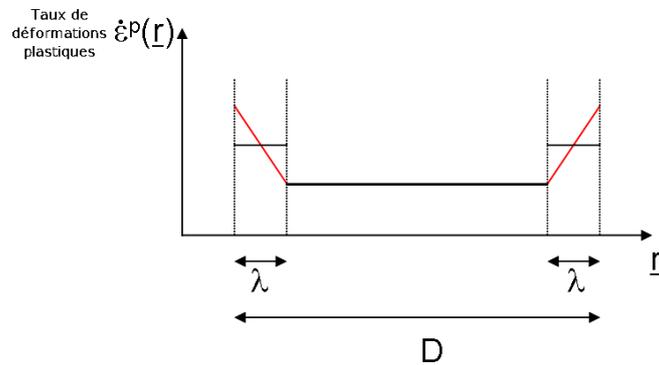


FIG. 4.10 – Représentation d’un gradient linéaire des taux de déformation plastique dans une couche d’épaisseur λ en rouge. Ce gradient linéaire permet de définir ρ_g au sens d’Ashby [Ash70]. Et représentation des taux de déformation plastique uniformes par morceaux sur un grain en noir.

Néanmoins, pour le calcul des contraintes interphases, cette modélisation est simplifiée en supposant des déformations plastiques uniformes par morceaux dans l’approche à champs moyens, c’est-à-dire des taux de déformation uniformes dans le cœur du grain et dans la couche (représentés en noir sur la figure (4.10)). Il est alors évident qu’une seule partie des contraintes internes est prise en compte, celle liée aux non-uniformités plastiques interphases, en omettant celle liée aux non-uniformités plastiques intracouche qui est beaucoup plus difficile à atteindre par les outils de la micromécanique (calculs en champs complets indispensables).

Cette représentation permet d’utiliser des schémas micromécaniques “simples” comme un modèle auto-cohérent en élastoplasticité (modèle de Berveiller-Zaoui [BZ79]) ou le modèle auto-cohérent à inclusions enrobées (Cherkaoui et al. [CSB95]). Une première démarche consiste à utiliser comme méthode de transition d’échelle auto-cohérente celle développée pour les matériaux hétérogènes élasto-viscoplastiques et présentée au Chapitre 1.

L’utilisation de ce schéma modifie la topologie du grain. Ainsi, la configuration du cœur de grain enrobé par la couche n’est pas “respectée”, et est modifiée en une modélisation biphasée du grain (figure (4.11)).

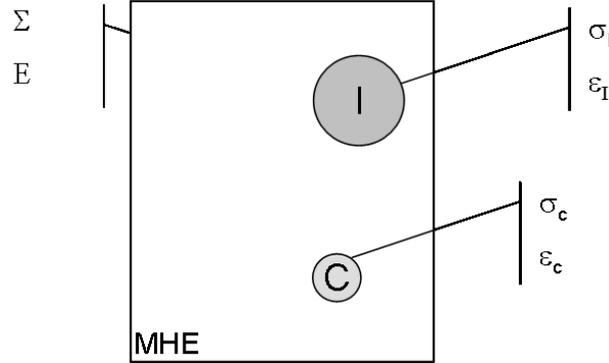


FIG. 4.11 – Représentation du VER, du cœur (I) et de la couche (C) du grain dans le milieu homogène équivalent (MHE)

La modélisation mécanique est également simplifiée en utilisant des lois de comportement élasto-viscoplastique isotropes. Il n'est alors pas nécessaire de déterminer les GND sur chaque système de glissement (ce qui pourrait s'avérer difficile à mettre en œuvre).

4.3.2 Lois de comportement locales et lois d'évolution des variables internes

Les lois de comportement des deux zones sont élasto-viscoplastiques et sont supposées suivre une loi de type Odqvist (plasticité isotrope) comme décrite au Chapitre 2 :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp^x} = \frac{3}{2} \dot{\epsilon}_{ref} \left(\frac{|\sigma_{eq}^x|}{\sigma_{ref}^x} \right)^n \frac{s_{ij}^x}{\sigma_{eq}^x} \quad (4.27)$$

où l'exposant "x" correspond à la phase, le cœur (I) ou la couche (C) du grain, et σ_{ref}^x correspond à une contrainte de référence dépendante de l'écroutissage isotrope uniquement. L'écroutissage isotrope fait appel à deux variables internes : il s'agit des densités de dislocation statistiquement stockée (pour I et C, notées SSD par la suite) et géométriquement nécessaire (pour C uniquement, notées GND par la suite).

$$\sigma_{ref}^x = \sigma_0 + M\alpha\mu b\sqrt{\rho_s^x + \rho_g^x} \quad (4.28)$$

où ρ_s et ρ_g correspondent respectivement aux densités moyennes de SSD et de GND respectivement. M est le coefficient de Taylor, μ est le module élastique de cisaillement et b est la norme du vecteur de Burgers.

Les densités de SSD sont dues à la multiplication et à l'annihilation de dislocations à vecteur de Burgers net nul. Ces dislocations sont stockées aléatoirement dans tout le grain.

Habituellement, les densités de GND n'apparaissent pas au niveau des contraintes de référence, mais elles sont indirectement prises en compte au niveau de la friction de réseau σ_0 . Les densités de GND étant principalement "concentrées" dans la zone proche des joints de grains (concentration de bandes de glissement ou de murs de dislocation par exemple), elles seront donc supposées nulles dans le cœur du grain. L'évolution de la contrainte de référence s'obtient par dérivation de l'équation (4.28) :

$$\dot{\sigma}_{ref}^x = \frac{M\alpha\mu b}{2\sqrt{\rho_s^x + \rho_g^x}} (\dot{\rho}_s^x + \dot{\rho}_g^x) \text{ avec } \begin{cases} \dot{\rho}_g^I = 0 \\ \dot{\rho}_g^C \neq 0 \end{cases} \quad (4.29)$$

Cette relation fait apparaître l'évolution des densités de dislocation $\dot{\rho}_s^I$, $\dot{\rho}_s^C$ et $\dot{\rho}_g^C$. L'évolution des densités de SSD suit une loi de type Kocks-Mecking [MK81], présentant un terme de création lié à la forêt de dislocations incluant les deux "types" de dislocations (dans la couche) et un terme d'annihilation lié aux SSD uniquement (restauration dynamique) :

$$\dot{\rho}_s^x = M \left(\frac{k}{b} \sqrt{\rho_s^x + \rho_g^x} - f \rho_s^x \right) \dot{\varepsilon}_{eq}^{p^x} \quad (4.30)$$

Dans cette expression, k est un paramètre matériau (sans unité) régissant le stockage de dislocations et f est un paramètre (sans unité) définissant la distance minimale entre deux SSD permettant l'annihilation et $\dot{\varepsilon}_{eq}^{p^x}$ correspond au taux de déformation plastique équivalent au sens de Von Mises et défini par :

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{p^x} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p} \quad (4.31)$$

Cette relation est phénoménologique mais basée sur les arguments physiques suivants :

- la présence des densités de GND dans le terme de création de SSD (dans la couche) accélère l'évolution des densités de SSD. En effet, une partie du libre

parcours moyen L est d'origine géométrique puisque proportionnel au ratio $1/\sqrt{\rho_s + \rho_g}$,

- par contre, les GND sont supposées ne pas pouvoir participer aux mécanismes d'annihilation

Ce type d'approche a été utilisée récemment par Gil Sevillano et Aldazabal [GSA04] pour des nanomatériaux.

L'évolution des densités de GND suit l'évolution décrite par l'équation (4.24). En faisant l'hypothèse d'un gradient de déformation plastique linéaire sur la couche d'épaisseur λ (figure (4.10)), le gradient des taux de déformation plastique se résume à :

$$\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{eq}^p}{\partial \underline{r}} \simeq \frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{p^I} - \dot{\varepsilon}_{eq}^{p^C}}{\lambda} \quad (4.32)$$

Le coefficient de Taylor M permet le passage des taux de glissement plastique aux taux de déformation plastique équivalent ($\partial \dot{\gamma} = M \partial \dot{\varepsilon}_{eq}^p$). L'expression (4.24) se simplifie alors en (démonstration en Annexe B) :

$$\dot{\rho}_g^x \simeq \frac{M}{b} \frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{p^I} - \dot{\varepsilon}_{eq}^{p^C}}{\lambda} \quad (4.33)$$

L'absence de densité de GND dans le cœur du grain donne une contrainte de référence du cœur plus faible que celle de la couche à même densité de SSD et même friction de réseau σ_0 .

Les lois de localisation utilisées, pour effectuer la transition d'échelle, sont celles décrites au Chapitre 1 (équations (1.54) et (1.56)) et qui sont rappelées ici en élasticité homogène (voir aussi l'équation (2.11) du Chapitre 2) :

$$\begin{cases} \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} = \dot{\underline{\underline{E}}} + \left(\underset{\sim}{A}^{B^{eff}} - \underset{\sim}{I} \right) : \dot{\underline{\underline{E}}}^{vp^{eff}} + \underset{\sim}{\Gamma}^C : \underset{\sim}{C} : \left(\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} - \underset{\sim}{A}^{B^{eff}} : \dot{\underline{\underline{E}}}^{vp^{eff}} \right) \\ \dot{\underline{\underline{\sigma}}} = \dot{\underline{\underline{\Sigma}}} - \underset{\sim}{C} : \left(\underset{\sim}{I} - \underset{\sim}{S}^{Esh} \right) : \left(\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} - \underset{\sim}{A}^{B^{eff}} : \dot{\underline{\underline{E}}}^{vp^{eff}} \right) \end{cases} \quad (4.34)$$

Les simulations numériques effectuées en utilisant cette modélisation permettront d'étudier l'impact de la couche et des GND sur la prise en compte de l'effet de la taille des grains sur le comportement mécanique et sur l'évolution des variables

internes au cours de chargement de traction. Ces simulations sont appliquées sur quatre aciers IF différents.

4.3.3 Applications aux aciers IF

4.3.3.1 Tailles de grain et compositions chimiques des aciers étudiés

Cette modélisation à champs moyens et à longueurs internes est appliquée à quatre aciers IF (ferritique) ayant des tailles de grain moyennes différentes variant de 5,5 à 120 μm . Les compositions chimiques (principaux éléments d'addition) de ces aciers sont données dans le tableau (4.1) d'après [Zeg05][PNB+09] et transmises par ArcelorMittal.

Eléments présents en 10^{-3} %						
σ_0	Ti	Mn	P	Si	Al	D_{moyen} (μm)
95	50,0	100	10	5	37	120,0
150	61,3	201	11,1	5	37	15,0
200	60,8	199	73,4	5	37	8,5
330	60,0	1475	68,7	5	37	5,5

TAB. 4.1 – Frictions de réseau σ_0 estimées en fonction de la composition chimique partielle et du diamètre moyen des différents aciers IF étudiés. Il est à noter que ce type d'acier a une très faible teneur en carbone afin de limiter les atomes interstitiels

Les simulations numériques de traction simple sont effectuées pour un taux de déformation $|\dot{E}|$ imposé de $10^{-4} s^{-1}$ jusqu'à 20%, et sont présentés sur la figure (4.12) pour les différentes tailles moyennes de grain (de 5,5 à 120 μm).

Les frictions de réseau σ_0 des aciers sont différentes du fait des différences de composition chimique, et croit proportionnellement avec la quantité de manganèse présente dans l'acier.

Les autres paramètres matériaux, présents au niveau des équations de comportement (4.27), (4.30) sont déterminés en comparant la courbe de traction expérimentale à celle numérique (figure (4.12)), toutes deux réalisées avec l'acier IF dont la taille moyenne des grains est de 120 μm . Cette taille moyenne des grains permet de rendre négligeable l'impact de la couche sur le comportement mécanique (fraction volumique de couche très faible, $f^{(C)} = 0,007$). Les paramètres matériaux ainsi identifiés ainsi que les constantes élastiques isotropes sont donnés dans le tableau (4.2).

De la même manière, l'épaisseur de la couche (λ) est déterminée en comparant la courbe de traction expérimentale à celle numérique toutes deux obtenues avec l'acier IF dont la taille moyenne des grains est de $5,5 \mu m$.

L'épaisseur de couche est supposée constante et indépendante de la taille moyenne des grains. La valeur trouvée nous semble réaliste mais nécessite encore des études approfondies (observations EBSD, simulations par dynamiques des dislocations...) afin de caractériser plus précisément la géométrie et l'épaisseur de cette couche. En effet, il est à noter qu'il s'agit ici d'une première approche ne prenant pas en compte l'évolution de l'épaisseur de la couche, ni sa dépendance avec la taille de grain.

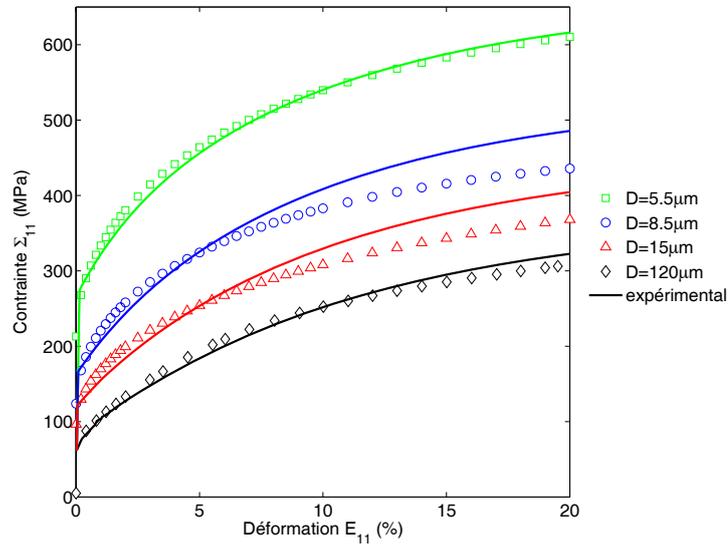


FIG. 4.12 – Comparaisons entre les essais expérimentaux de traction simple (données fournies par ArcelorMittal) et les simulations effectuées pour une épaisseur de couche λ fixe de $0,15 \mu m$ et plusieurs tailles moyennes de grain

Les densités de dislocation initiales (ρ_{s_0} et ρ_{g_0}) sont également supposées indépendantes de la taille des grains et sont estimées pour des grains dans un état recuit. Les paramètres k et f identifiés sont cohérents avec les travaux de Fang et Dahl portant sur les aciers IF [FD04].

4.3.3.2 Résultats pour le comportement mécanique global et local

Une bonne corrélation en terme de limite d'écoulement et taux d'écroutissage, entre les courbes expérimentales et les simulations, est obtenue malgré les hypothèses

μ (MPa)	ν	$\dot{\epsilon}_0$ (s ⁻¹)	n	b (nm)	α	M	k	f	ρ_{s0} (m ⁻²)	ρ_{g0} (m ⁻²)	λ (μ m)
80000	0,3	1	50	0,25	0,4	3	0,0022	6	10 ¹²	10 ¹⁴	0,15

TAB. 4.2 – Paramètres matériaux, pour des aciers IF, supposés indépendants de la composition chimique.

restrictives utilisées dans cette étude.

L'évolution du seuil d'écoulement (figure (4.13)) met particulièrement en évidence les capacités du modèle à décrire convenablement l'écrouissage des différents aciers, notamment après 10% de déformation (figure (4.12)), domaine où le taux d'écrouissage devient indépendant de la taille moyenne des grains.

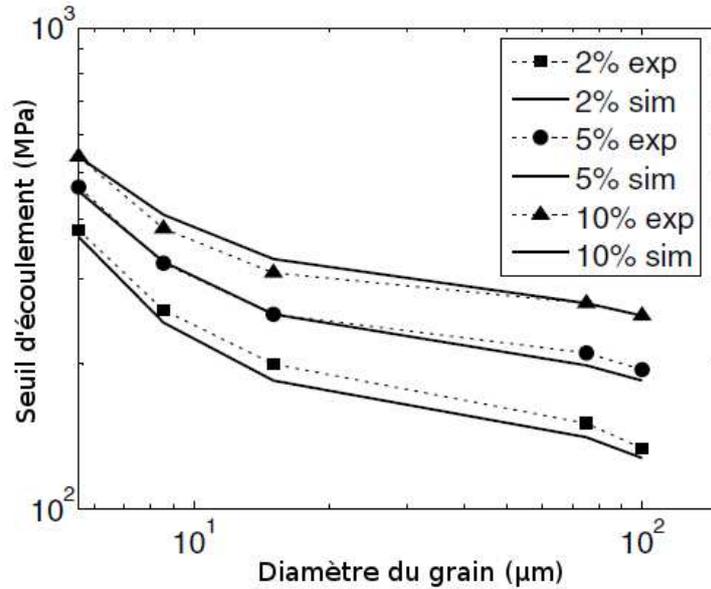


FIG. 4.13 – Evolution du seuil d'écoulement, au cours du chargement pour des déformations de 2, 5 et 10%, en fonction de la taille de grains [PNB⁺09]

Ce phénomène est conforme aux observations expérimentales et est reporté par ailleurs dans la littérature par Sinclair et al. [SPB06] (figure (4.14)).

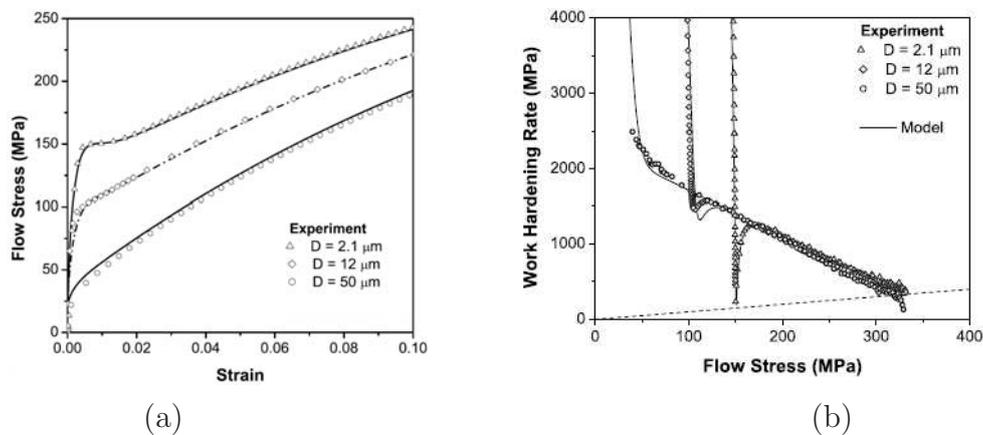


FIG. 4.14 – Mise en évidence de la dépendance à la taille moyenne des grains du taux d'érouissage avant 10% de déformation (a) et de l'absence de dépendance après 10% de déformation (b) (pour des essais de traction simple) [SPB06]

L'étude des contraintes et déformations plastiques locales (figure 4.15) met en évidence le caractère plus résistant de la couche par rapport au cœur du grain. La contrainte moyenne dans la couche (près du joint de grain) est environ deux fois plus élevée que celle dans le cœur du grain. Cette différence provient de la dépendance de la contrainte de référence σ_{ref} de la couche à la densité de GND (absente dans le cœur du grain).

Pour une taille moyenne de grain de $5,5 \mu m$, la présence de la couche a une forte influence sur la contrainte macroscopique.

A contrario, pour une taille moyenne de grains de $120 \mu m$, la contrainte macroscopique est très peu influencée par celle de la couche. Ce phénomène est lié à la fraction volumique de la couche qui est très faible dans le cas présent ($f^c = 0,007$).

De plus, les contraintes dans la couche dépendent de la taille moyenne des grains D : une augmentation de la taille moyenne des grains de $5,5 \mu m$ à $120 \mu m$ provoque une division par deux des contraintes dans la couche. Un phénomène similaire est observé pour le cœur des grains.

De même, les déformations plastiques dans la couche dépendent également de la taille des grains. Cet effet est du même ordre de grandeur que celui sur la contrainte dans la couche.

L'effet de taille de grains sur les déformations plastiques dans le cœur du grain est moins important.

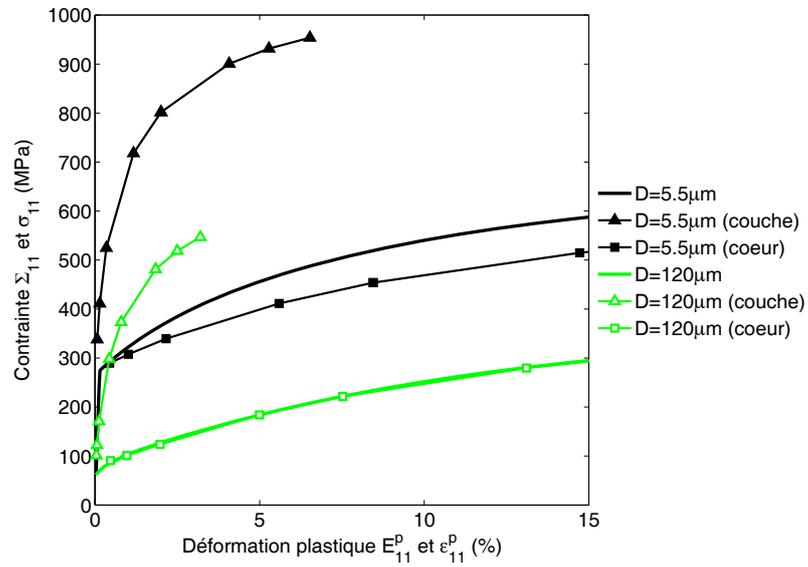


FIG. 4.15 – Evolution des contraintes et des déformations plastiques globales et locales au sein des deux phases (couche et cœur des grains)

Ces deux effets de taille de grains sont directement liés aux évolutions des densités de dislocation, qui sont reportées au cours du chargement sur la figure (4.16).

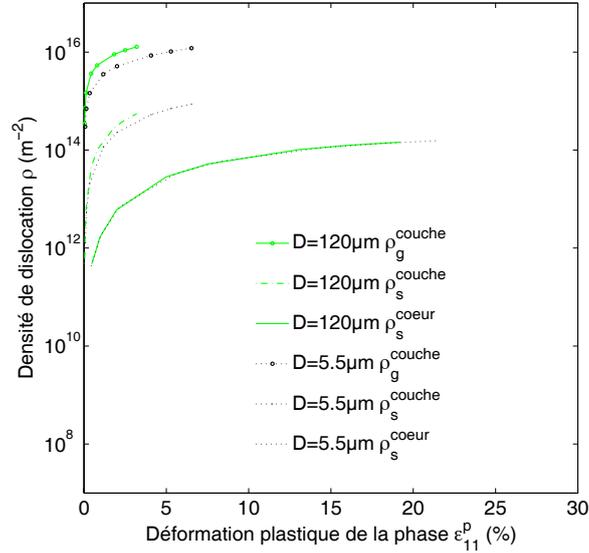


FIG. 4.16 – Evolution des densités de dislocation au sein des deux phases (couche et coeur des grains) en fonction de la déformation plastique locale dans la direction de traction

Les densités de GND sont plus importantes que celles des SSD que ce soit dans le cœur ou dans la couche. Les densités de SSD sont plus fortes dans la couche que dans le cœur du grain. Ceci résulte de la formulation utilisée pour décrire l'évolution des densités de SSD (équation (4.30)). Dans la couche, les densités de SSD et de GND interviennent dans le terme de création de dislocation, alors que seules les SSD (vue l'absence de GND) interviennent dans le terme de création de dislocation dans le cœur du grain. Ceci est cohérent avec les observations faites au microscope électronique en transmission (MET) effectuées par El-Dasher et al. [EDAR03]. Alors qu'il n'y a pas d'effet de taille de grains sur le seuil des densités de dislocation, un effet de taille de grains est observable sur l'évolution de ces densités de dislocation. Cet effet provient des effets de taille de grains sur les déformations plastiques exposés précédemment.

4.4 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons tout d’abord rappelé l’absence d’effet de taille de grains lors d’une modélisation micromécanique “classique”, comme le modèle d’Eshelby [Esh57]. La prise en compte des longueurs internes, au niveau des champs mécaniques, permet de mettre en évidence des effets de taille de grains sur le comportement mécanique de polycristaux.

Plusieurs approches sont alors envisageables.

D’un côté, la prise en compte des longueurs internes peut s’effectuer en “discrétisant” les champs de déformation sur les grains (distribution de boucles de dislocation). Ce type d’approche fait alors appel à des calculs pouvant être résolus dans l’espace de Fourier [BBR08]. L’avantage de cette formulation est de connaître les variations des champs mécaniques sur l’ensemble de la structure du grain, donc en tout point \underline{r} du grain (champs complets). Ce type d’approche, combiné aux observations expérimentales [KWT05][RHJ96][SP08], engendre une seconde modélisation possible prenant en compte deux longueurs internes associées aux interactions entre les dislocations et les joints de grain (la taille des grains et l’épaisseur de la couche à fortes désorientations près du joint de grain).

La description continue du comportement mécanique du matériau peut alors être discrétisée par morceaux en représentant, par exemple, le grain en deux zones distinctes : le cœur et la zone proche du joint de grains (à forte densité de dislocation géométriquement nécessaire, créant de fortes désorientations du réseau cristallin). Les schémas de transition d’échelle classiques, comme un schéma auto-cohérent, peuvent alors être utilisés afin de capter les effets de taille de grain, sur le comportement mécanique, associés à cette représentation. Ce type d’approche permet d’obtenir des effets de taille de grains naturellement sur les champs mécaniques et les variables internes. Il permet aussi de décrire l’écroutissage du matériau en fonction de la taille moyenne des grains au cours de chargement et aboutit à une bonne approximation des contraintes locales et des niveaux de densité de dislocation.

Conclusions et perspectives

Ce travail a porté sur la prise en compte des “longueurs internes” du matériau, comme la taille individuelle des grains où la zone affectée par un fort gradient plastique près du joint de grain, à l’aide d’approches micromécaniques à “champs moyens” de type auto-cohérent afin de décrire leurs effets sur le comportement mécanique macroscopique de matériaux métalliques.

Les approches à champs moyens (de type Mori-Tanaka, auto-cohérent etc.) basées sur le problème de l’inclusion d’Eshelby permettant de capter les effets de la morphologie (“ellipsoïdale”) des grains, ne prennent pas en compte les effets des longueurs internes (“taille de grain”). Cette “insensibilité” provient de la démarche d’Eshelby qui suppose que les champs “sources” et les champs induits dans les inclusions sont uniformes. Ainsi, le tenseur d’Eshelby, qui est lié au comportement élastique du matériau et à la forme des grains, ne dépend pas de la taille absolue des grains.

Nous avons alors essayé de combler cette insuffisance à travers deux approches différentes pour capter par des outils micromécaniques les effets de la taille moyenne et la dispersion de taille de grains sur la réponse macroscopique de matériaux métalliques “simplifiés”.

Dans les deux approches, le modèle auto-cohérent écrit pour des matériaux hétérogènes élasto-viscoplastiques, initié par Paquin [Paq98] puis par Berbenni [Ber02], a été utilisé comme méthode de transition d’échelle (Chapitre 1). D’autres modèles micromécaniques décrits au Chapitre 1 auraient pu aussi bien être utilisés sans que les conclusions globales ne soient modifiées.

Dans cette thèse, les modélisations introduites et susceptibles de capter les effets des longueurs internes sur le comportement du matériau ne se réfèrent pas aux milieux continus généralisés et utilisent les outils classiques de la mécanique des milieux continus même si les événements discrets en plasticité sont décrits (notamment dans le Chapitre 4).

Dans un premier temps, nous avons pu capter des effets d'hétérogénéités de taille de grains en introduisant ce paramètre individuellement, au niveau des lois de comportement mécanique locales des grains, et, notamment au niveau des lois d'écoulement. Cette approche a fait l'objet du Chapitre 2, portant sur les effets de la dispersion de taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats isotropes, et du Chapitre 3, portant sur les effets combinés de la dispersion de taille de grains et de l'orientation cristallographique.

Dans le Chapitre 2, la génération de différentes distributions de taille de grains de type log-normal a permis de mettre en évidence un effet de la dispersion relative de taille de grain, en plus de l'effet classique de la taille moyenne des grains, sur le comportement mécanique macroscopique. Cet effet est plus prononcé pour des grains de petites tailles et montre une chute de la contrainte d'écoulement macroscopique du matériau à mesure que la dispersion relative de taille de grains augmente (ou que les hétérogénéités de taille de grains deviennent plus importantes). L'effet Bauschinger ainsi que l'énergie stockée dans le matériau sont également plus prononcés lorsque la dispersion de taille de grains augmente.

Dans le Chapitre 3, une approche similaire a été appliquée dans le cadre de la plasticité cristalline dépendante du temps et pour des métaux à réseaux cristallographiques cubiques centrés se déformant par glissement à température ambiante. Les orientations cristallographiques (ODF) et les distributions de taille de grains ont été obtenues en réalisant des cartographies EBSD sur de larges surfaces pour deux aciers IF (ferritiques). Ces deux aciers possèdent des tailles de grain moyennes différentes, et des dispersions de taille de grains légèrement différentes.

Après avoir identifié les paramètres matériaux sur des chargements de traction uniaxiale, plusieurs VER ont été générés. Ceux-ci ont permis d'étudier les impacts respectifs de la dispersion de taille de grains et de l'ODF, et leur corrélation, sur le comportement mécanique du matériau.

Les conclusions du Chapitre 2 ont alors été retrouvées dans le cadre de la plasticité cristalline, et la dispersion de taille de grains a également eu un effet sur le taux d'écrouissage macroscopique. L'effet de la dispersion de taille de grains sur le seuil d'écoulement macroscopique ainsi que sur les fluctuations des champs mécaniques locaux est plus prononcé que celui de la texture cristallographique. Ces fluctuations sont à l'origine des diminutions du seuil d'écoulement et de l'énergie bloquée.

Néanmoins, la dispersion de taille de grains n'a apparemment pas d'effet sur l'anisotropie plastique du matériau, contrairement à la texture cristallographique. De récentes études [BKRF00][PSK⁺01][DMS⁺09] ont démontré que l'anisotropie plastique dépend par ailleurs de la morphologie des grains, ce qui n'a pas été étudié en

détails dans cette thèse.

Dans un second temps, une deuxième approche décrite au Chapitre 4 fait appel à des champs de déformation plastique non-uniformes dans les grains pour tenter de retrouver naturellement un effet de taille moyenne de grain sans l'introduire au niveau des lois locales de comportement (par le biais de lois de type Hall-Petch).

Pour cela, une première description, développée par Berbenni et al. [BBR08], consiste à considérer des champs de déformation plastique discrets liés à des boucles de dislocation statique distribuées périodiquement dans un grain noyé dans une matrice élastique. La résolution de ce problème à champs complets, c'est-à-dire la détermination des champs mécaniques en tout point de l'espace et de l'énergie libre, s'effectue à l'aide de la technique des transformées de Fourier [Mur87]. Les résultats alors obtenus en termes de contraintes internes sont très différents de ceux d'Eshelby [Esh57], tout particulièrement dans la zone proche du joint de grains. Cette zone peut être approximativement représentée par une calotte sphérique, nommée "couche".

Quand le nombre de boucles de dislocation augmente, l'épaisseur de cette couche diminue, et la solution d'Eshelby est retrouvée lorsque ce nombre devient très grand (ou que le rapport espacement entre boucles / rayon du grain devient très faible). L'apparition de cette couche est également observée expérimentalement en terme de désorientation du réseau cristallin ou de structure de dislocation à proximité du joint de grain [KWT05][RHJ96][SP08].

En outre, cette modélisation permet d'obtenir un effet de taille de grains naturel sur la contrainte cinématique moyenne dans le grain en considérant un mécanisme de plastification en glissement simple uniquement dans les boucles présentes et un espacement entre les boucles fixe et indépendant de la taille de grains [BBR08].

L'obtention par la "méthode discrète" de deux zones bien distinctes dans le grain au niveau des contraintes internes et les observations expérimentales par EBSD incitent à introduire une nouvelle modélisation continue appelée "à champs moyens à longueurs internes" similaire à celle introduite par Xavier Lemoine [Lan95] et plus tard par Laurent Langlois [Lan00]. Celle-ci consiste à représenter les grains comme un composite constitué de deux zones distinctes (biphasé) : le cœur du grain sphérique et la zone proche du joint de grains comme une calotte sphérique.

La description du gradient de déformation plastique dans la couche permet de définir l'évolution des dislocations géométriquement nécessaires (abrégées GND en anglais) dans celles-ci (celles-ci apparaissant expérimentalement dans la région à proximité du joint de grain). Elle fait notamment apparaître l'épaisseur de couche comme une

longueur interne permettant de définir les évolutions des densités de GND. Nous avons simplifié cette approche à gradient en considérant un VER constitué de deux “phases” (le cœur du grain et la couche), et en utilisant alors le schéma auto-cohérent mis en oeuvre au Chapitre 1.

La loi de comportement plastique de la couche étant supposée non-locale, des interactions croisées entre la couche et le grain apparaissent. Cette modélisation permet de retrouver les évolutions de la contrainte d’écoulement et des taux d’écrouissage expérimentaux.

Ces résultats confirment la possibilité d’utiliser des approches à champs moyens afin de décrire un comportement mécanique dépendant de la taille des grains, si la présence de GND est considérée dans les lois d’écrouissage. D’autres approches mécanistiques [SPB06] ou à gradient plastique [OO07] récentes s’inspirent également de la description de GND contraintes par le joint de grains pour décrire les effets de taille de grains sur la limite d’élasticité et l’écrouissage.

Les résultats de cette thèse peuvent être approfondis et offrent de nombreuses perspectives concernant :

- les effets de la dispersion de taille de grains sur la perte d’ellipticité d’agrégats polycristallins (type aciers ou autres). Pour étudier ces effets, il est nécessaire d’utiliser un schéma auto-cohérent écrit en élastoplasticité dans le cadre des grandes déformations (une description en petite déformation est insuffisante).
- l’impact de la morphologie des grains sur l’obtention des effets de taille de grain. En effet, dans la dernière partie de cette thèse, le cœur et la couche des grains ont été modélisés par un modèle auto-cohérent classique ne respectant pas la topologie de la couche enrobant le cœur au niveau des relations de localisation. Il est alors intéressant de connaître l’influence de cette simplification sur le comportement mécanique du VER. Des schémas de transition d’échelle se rapprochant du problème peuvent être développés dans ce but, comme par exemple un schéma auto-cohérent à inclusion enrobée.
- les effets des cellules de dislocation sur le comportement mécanique des aciers. La modélisation décrite au Chapitre 4 utilisant les GND permettrait d’étudier ces effets en supposant que les murs de dislocation formant les frontières des cellules sont constitués de GND (cf modèle composite de Mughrabi [Mug83]).
- la description de la couche (théoriquement et expérimentalement). Une caractérisation plus précise de l’épaisseur de couche et la prise en compte de son évolution au cours de chargements en traction font l’objet de la thèse de Camille PERRIN qui étudie actuellement deux types de métaux (nickel pur, acier duplex).
- enfin, l’utilisation de lois de comportement dans le cadre de la plasticité cristalline (suite au Chapitre 4) permettrait d’avoir une approche encore plus réaliste

des phénomènes de déformation plastique.

Bibliographie

- [AAMP07] H. Azizi-Alizamini, M. Militzer, and W.J. Poole. A novel technique for developing bimodal grain size distributions in low carbon steels. *Scripta Materialia*, 57 :10651068, 2007.
- [ACDP62] R.W. Armstrong, I. Codd, R. M. Douthwaite, and N. J Petch. The plastic deformation of polycrystalline aggregates. *Philosophical Magazine*, 7 :45–58, 1962.
- [Aou08] A. Aouafi. *Analyse expérimentale et modélisation du comportement mécanique d’aciers micro-alliés : influence du taux de précipitation sur les relation microstructure-comportement*. PhD thesis, Université Paris XIII, France, 2008.
- [Arm09] R.W. Armstrong. Strength and strain rate sensitivity of nanopolycrystals. In *Mechanical Properties of Nanocrystalline Materials*. Scientific Publishing Co., Inc., Hackensack, 2009.
- [Ash70] M.F. Ashby. The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Philosophical Magazine*, 21 :399–424, 1970.
- [BBG01] M. Bornert, T. Bretheau, and P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1*. Hermès Science, Paris, 2001.
- [BBR08] S. Berbenni, M. Berveiller, and T. Richeton. Intra-granular plastic slip heterogeneities : Discrete vs. mean field approaches. *International Journal of Solids and Structures*, 45 :4147–4172, 2008.
- [BE97] H.J. Bunge and C. Essling. Texture et anisotropie des matériaux. *Techniques de l’Ingénieur*, M606 :1–38, 1997.
- [BEG68] H.J. Bunge, R. Ebert, and F. Günther. On the angular variation and texture dependence of young’s modulus in cold-rolled copper sheet. *Physica Status Solidi b*, 31 :565–569, 1968.
- [Ber02] S. Berbenni. *Elastoviscoplasticité des aciers polycristallins : Modélisation micromécanique et physique Applications au comportement dynamique et à l’effet Bake-Hardening*. PhD thesis, École Nationale Supérieure d’Arts et Métiers de Metz, France, 2002.

- [BFB07a] S. Berbenni, V. Favier, and M. Berveiller. Impact of the grain size distribution on the behaviour of heterogeneous materials. *International Journal of Plasticity*, 23 :114–142, 2007.
- [BFB07b] S. Berbenni, V. Favier, and M. Berveiller. Micro-macro modeling of the effects of the grain size distribution on the plastic flow stress of heterogeneous materials. *Computational Materials Science*, 39 :96–105, 2007.
- [BFLB04] S. Berbenni, V. Favier, X. Lemoine, and M. Berveiller. Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures. *Materials Science and Engineering, A* 372 :128–136, 2004.
- [BGE⁺05] Z.P. Bazant, Z. Guo, H.D. Espinosa, Y. Zhu, and B. Peng. Epitaxially influenced boundary layer model for size effect in thin metallic films. *Journal of Applied Physics*, 97, 2005.
- [BKRF00] H.J. Bunge, R. Kiewel, T. Reinert, and L. Fritsche. Elastic properties of polycrystals-influence of texture and stereology. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :29–66, 2000.
- [BLC09] R. Brenner, R.A. Lebensohn, and O. Castelnau. Elastic anisotropy and yield surface estimates of polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*, 46 :30183026, 2009.
- [BLD71] J.P. Baillon, A. Loyet, and J.M. Dorlot. The relationships between stress, strain, grain size and dislocation density in armco iron at room temperature. *Materials Science and Engineering*, 8 :288–298, 1971.
- [BMCZ02] R. Brenner, R. Masson, O. Castelnau, and A. Zaoui. A “quasi-elastic” affine formulation for the homogenised behaviour of non-linear viscoelastic polycrystals and composites. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 21 :943–960, 2002.
- [Bun87] H.J. Bunge. *Theoretical methods of texture analysis*. Deutsche Gesellschaft für Metallkunde e.V, Germany, 1987.
- [BW62] B. Budianski and T.T. Wu. Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals. *Proceedings of the 4th US National Congress of Applied Mechanics*, pages 1175–1185, 1962.
- [BZ79] M. Berveiller and A. Zaoui. An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 26 :325–344, 1979.
- [CJ05] H. Conrad and K. Jung. Effect of grain size from mm to nm on the flow stress and plastic deformation kinetics of au at low

- homologous temperatures. *Materials Science and Engineering A*, 406 :78–85, 2005.
- [Con04] H. Conrad. Grain-size dependence of the flow stress of cu from millimeters to nanometers. *Metallurgical and Materials Transactions*, A35 :2681–2695, 2004.
- [CSB95] M. Cherkaoui, H. Sabar, and M. Berveiller. Elastic composites with coated reinforcements : a micromechanical approach for non-homothetic topology. *International Journal Engineering Science*, 33 :829–843, 1995.
- [DJK06] L. Delannay, P.J. Jacques, and S.R. Kalidindi. Finite element modeling of crystal plasticity with grains shaped as truncated octahedrons. *International Journal of Plasticity*, 22 :1879–1898, 2006.
- [DMS⁺09] L. Delannay, M.A. Melchior, J.W. Signorelli, J.-F. Remacle, and T. Kuwabara. Influence of grain shape on the planar anisotropy of rolled steel sheets evaluation of three models. *Computational Materials Sciences*, 45 :739–743, 2009.
- [DRR00] F. Delaire, J.L. Raphanel, and C. Rey. Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension : experimental study and finite element simulations. *Acta Materialia*, 48 :1075–1087, 2000.
- [EDAR03] B.S. El-Dasher, B.L. Adams, and A.D. Rollett. Viewpoint : experimental recovery of geometrically necessary dislocation density in polycrystals. *Scripta Materialia*, 48 :141145, 2003.
- [EHP00] M. Evans, N. Hastings, and B. Peacock. *Statistical distributions*. Wiley-Interscience, 2000.
- [EM79] U. Essmann and H. Mughrabi. Annihilation of dislocations during tensile tests and cyclic deformation and limit of dislocations densities. *Philosophical Magazine*, 40 :731756, 1979.
- [EPP04] H.D. Espinosa, B.C. Prorok, and B. Peng. Plasticity size effects in free-standing submicron polycrystalline fcc -lms subjected to pure tension. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 :667–689, 2004.
- [Esh57] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proceedings of the Royal Society London A*, 241 :376–396, 1957.
- [FAAK09] B.S. Fromm, B.L. Adams, S. Ahmadi, and M. Knezevic. Grain size and orientation distributions : Application to yielding of α -titanium. *Acta Materialia*, 57 :23392348, 2009.

- [FD04] X.F. Fang and W. Dahl. Strain hardening of steels at large strain deformation. part i : Relationship between strain hardening and microstructures of b.c.c. steels. *Matérial sciences and engineering*, A203 :14–25, 2004.
- [FMCC06] S. Fréchar, F. Martin, C. Clément, and J. Cousty. Afm and ebsd combined studies of plastic deformation in a duplex stainless steel. *Materials Science and Engineering*, A 418 :312–319, 2006.
- [FPZ91] D. François, A. Pineau, and A. Zaoui. *Comportement mécanique des matériaux-viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du contact*. Paris Hermès, 1991.
- [Fra83] P. Franciosi. Glide mechanisms in bcc crystals. *Acta Metallurgica*, 31 :1331–1341, 1983.
- [Gün58] W. Günther. Zur statik und kinematik des cosseratschen kontinuums. *Abhandlungen der Braunschweigische Wissenschaftliche Gesellschaft*, 10 :195–213, 1958.
- [Gra95] J.J. Gracio. The effect of grain size on the microstructural evolution of copper deformed in rolling. *Materials Science and Engineering*, A196 :97–104, 1995.
- [GSA04] J. Gil Sevillano and J. Aldazabal. Ductilization of nanocrystalline materials for structural applications. *Scripta Materialia*, 51 :795–800, 2004.
- [Gur02] M.E. Gurtin. A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 50 :532, 2002.
- [Hal51] E.O. Hall. The deformation and ageing of mild steel. *Proceedings of the Physical Society London*, B64 :747–753, 1951.
- [Han04] N. Hansen. Hallpetch relation and boundary strengthening. *Scripta Materialia*, 51 :801–806, 2004.
- [Her54] A.V. Hershey. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *Journal of Applied Mechanics*, 21 :236–240, 1954.
- [HH95] F.J. Humphreys and M. Hatherly. *Recrystallization and related annealing phenomena*. Elsevier Science, Oxford, 1995.
- [Hil63] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids : some theoretical principles. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 11 :357–372, 1963.
- [Hil65] R. Hill. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 13 :89–101, 1965.

- [HKP00] J.S. Hayes, R. Keyte, and P.B. Prangnell. Effect of grain size on tensile behaviour of a submicron grained al-3 wt- *Material Science and Technology*, 16 :1259–1263, 2000.
- [HKTL90] F. Havlicek, J. Krotchvil, M. Tokuda, and V. Lev. Finite element model of plastically deformed multicrystal. *International journal of plasticity*, 6 :281–291, 1990.
- [Hoc99] T. Hoc. *Etude expérimentale et numérique de la localisation lors de changements de trajets dans un acier doux*. PhD thesis, Ecole centrale de Paris, France, 1999.
- [HR82] N. Hansen and B. Ralph. The strain and grain size dependence of the flow stress of copper. *Acta Metallurgica*, 30 :411–417, 1982.
- [Hut76] J.W. Hutchinson. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proceeding of Royal Society London A*, 348 :101–127, 1976.
- [INN84] T. Iwakura and S. Nemat-Nasser. Finite elastic-plastic deformation of polycrystalline metals. *Proceeding of Royal Society London A*, 394 :87–119, 1984.
- [Jao65] B. Jaoul. *Etude de la plasticité and application aux métaux*. Les Presses, Mines, Paris, 1965.
- [JW04] B. Jiang and G.J. Weng. A generalized self-consistent polycrystal model for the yield strength of nanocrystalline materials. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 52 :1125–1149, 2004.
- [KN67] A.S. Keh and Y. Nakada. Plasticity of iron single crystals. *Canadian Journal of Physics*, 45 :1101–1120, 1967.
- [Koc76] U.F. Kocks. Laws for work-hardening and low-temperature creep. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 98 :7685, 1976.
- [Krö58] E. Kröner. *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*. Springer Verlag, Berlin, 1958.
- [Krö61] E. Kröner. Zur plastischen verformung des vielkristalls. *Acta materialia*, 9(1) :155–161, 1961.
- [Krö67] E. Kröner. Elastic moduli of perfectly disordered composite materials. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 15 :319–329, 1967.
- [Krö86] E. Kröner. Variational treatment of the elastic constants of disordered materials. In *Modelling small deformations of polycrystals*. Gittus, E., Zarka, E. (eds.), Elsevier Applied Science, London, New York, 1986.

- [Krö89] E. Kröner. Modified green functions in the theory of heterogeneous and/or anisotropic linearly elastic media. In *Micromechanics and Inhomogeneity*, pages 197–211. G.J. Weng ; M. Taya ; M. Abe (eds.), Springer, Germany, Berlin, 1989.
- [KSS03] K.S. Kumar, Van Swygenhoven, and S. Suresh. Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys. *Acta Materialia*, 51 :57435744, 2003.
- [KTW00] U.F. Kocks, C.N. Tomé, and H.R. Wenk. *Texture and anisotropy : preferred orientations in polycrystals and their effect on materials properties*. University press, Cambridge, Royaume-Uni, 2000.
- [Kun81] I.A. Kunin. An algebra of tensor operators and its applications to elasticity. *International Journal of Engineering Sciences*, 19 :1551–1561, 1981.
- [Kun83] I.A. Kunin. *Elastic Media with Microstructure II : Three Dimensional Models*. Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New-York, Tokyo, 1983.
- [Kur90] K.J. Kurzydowski. A model for the flow stress dependence on the distribution of grain size in polycrystals. *Scripta Metallurgica and Materialia*, 24(5) :879–883, 1990.
- [KWT05] M. Kamaya, A.J. Wilkinson, and J.M. Titchmarsh. Measurement of plastic strain of polycrystalline material by electron backscatter diffraction. *Nuclear Engineering and Design*, 235 :713725, 2005.
- [Lan95] L. Langlois. *Analyse micromécanique de la formation des cellules de dislocations et conséquence sur le comportement des aciers*. PhD thesis, Université de Metz, France, 1995.
- [Lan00] L. Langlois. *Evolutions propres de la microstructure de dislocations et conséquences sur le comportement élastoplastique des métaux*. PhD thesis, Université de Metz, France, 2000.
- [LB89] P. Lipinski and M. Berveiller. Elastoplasticity of microinhomogeneous metals at large strains. *International Journal of Plasticity*, 5 :149–172, 1989.
- [LBRM95] P. Lipinski, M. Berveiller, E. Reubrez, and J. Morreales. Transition theories of elastic-plastic deformation of metallic polycrystals. *Archive of Applied Mechanics*, 65 :291–311, 1995.
- [LCLL03] B.L. Li, W.Q. Cao, Q. Liu, and W. Liu. Flow stress and microstructure of the cold-rolled if-steel. *Materials Sciences Engineering (A)*, 356 :37–42, 2003.

- [LKB92] P. Lipinski, J. Krier, and M. Berveiller. Elastoplasticité des métaux en grandes déformations : comportement global and évolution de la structure interne. *Revue de Physique Appliquée*, 25 :361–388, 1992.
- [LT93] R.A. Lebensohn and C.N. Tomé. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystal : application to zirconium alloys. *Acta Metallurgica Materialia*, 41 :2611–2624, 1993.
- [LW97] J. Li and G.J. Weng. A secant viscosity approach to the time-dependent creep of an elastic-viscoplastic composite. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 45 :1069–1083, 1997.
- [LW07] J. Li and G.J. Weng. A secant-viscosity composite model for the strain-rate sensitivity of nanocrystalline materials. *International Journal of Plasticity*, 23 :2115–2133, 2007.
- [MAK97] A. Molinari, S. Ahzi, and R. Kouddane. On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals. *Mechanics of Materials*, 26 :43–62, 1997.
- [Man73] J. Mandel. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *International Journal of Solids and Structures*, 9 :725–740, 1973.
- [MCA87] A. Molinari, G.R. Canova, and S. Ahzi. A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metallurgica*, 35 :2983–2994, 1987.
- [MD06] M.A. Melchior and L. Delannay. A texture discretization technique adapted to polycrystalline aggregates with non-uniform grain size. *Computational Material Sciences*, 37 :556–564, 2006.
- [MK81] H. Meckings and U.F. Kocks. Kinetics of flow and strainhardening. *Acta Metallurgica*, 29 :1865–1875, 1981.
- [Mug83] H. Mughrabi. Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals. *Acta Metallurgica*, 31 :1367–1379, 1983.
- [Mug04] H. Mughrabi. On the current understanding of strain gradient plasticity. *Material Sciences and Engineering*, A387–389 :209–213, 2004.
- [Mur87] T. Mura. *Micromechanics of defects in solids*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1987.
- [MZ99] R. Masson and A. Zaoui. Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behavior of polycrystalline materials. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 47 :1543–1568, 1999.

- [Neu83] H. Neuhäuser. Slip-line formation and collective dislocation motion. In *Dislocations in Solids (vol 4)*, pages 319–440. F.R.N. Nabarro, Amsterdam, North-Holland, 1983.
- [Nix89] W.D. Nix. Mechanical properties of thin films. *Metallurgical and Materials Transactions*, A20 :1543–1940, 1989.
- [NN05] R. Narayanasamy and C.S. Narayanan. Forming limit diagram for interstitial free steels part i. *Materials Sciences and Engineering (A)*, 399 :292–307, 2005.
- [Nye53] J.F. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1 :153–162, 1953.
- [OO07] N. Ohno and D. Okumura. Higher-order stress and grain size effects due to self-energy of geometrically necessary dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55 :18791898, 2007.
- [Paq98] A. Paquin. *Modélisation micromécanique du comportement élastoviscoplastique des matériaux hétérogènes*. PhD thesis, Université de Metz, France, 1998.
- [PBF⁺01] A. Paquin, S. Berbenni, V. Favier, X. Lemoine, and M. Berveiller. Micromechanical modeling of the elastoviscoplastic behavior of heterogeneous materials. *International Journal of Plasticity*, 17 :1267–1302, 2001.
- [PCn91] P. Ponte Castañeda. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 39 :45–71, 1991.
- [Pet53] N.J. Petch. The cleavage strength of polycrystals. *Journal of Iron and Steel Institute*, 174 :25–28, 1953.
- [Pil90] P. Pilvin. *Approches multiéchelles pour la prévision du comportement anélastique des métaux*. PhD thesis, Université Paris VI, France, 1990.
- [PNB⁺09] J.M. Pipard, N. Nicaise, S. Berbenni, O. Bouazziz, and M. Berveiller. A new mean field micromechanical approach to capture grain size effects. *Computational Materials Science*, 45 :604–610, 2009.
- [PSK⁺01] B. Peeters, M. Seefeldt, S.R. Kalidindi, P. Van Houtte, and E. Aernoudt. The incorporation of dislocation sheets into a model for plastic deformation of b.c.c. polycrystals and its influence on r-values. *Materials Science and Engineering*, A319 :188191, 2001.

- [RBD09] S. Ramtani, H.Q. Bui, and G. Dirras. A revisited generalized self-consistent polycrystal model following an incremental small strain formulation and including grain-size distribution effect. *International Journal of Engineering Science*, 47 :537–553, 2009.
- [Reu29] A. Reuss. Berechnung der fließgrenzen von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9 :49–58, 1929.
- [RHJ96] V. Randle, N. Hansen, and D.J. Jensen. The deformation behaviour of grain boundary regions in polycrystalline aluminium. *Philosophical Magazine*, A73 :265–282, 1996.
- [RP82] F.N. Rhines and B.P. Patterson. Effect of the degree of prior cold work on the grain volume distribution and the rate of grain growth of recrystallized aluminium. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 13 :985–993, 1982.
- [RS76] C. Rey and G. Saada. The elastic field of periodic dislocation networks. *Philosophical Magazine*, 33(5) :825–841, 1976.
- [RSPT08a] B. Raesinia, C.W. Sinclair, W.J. Poole, and C.N. Tomé. On the impact of grain size distribution on the plastic behaviour of polycrystalline metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 16 :025001, 2008.
- [RSPT08b] B. Raesinia, C.W. Sinclair, W.J. Poole, and C.N. Tomé. On the impact of grain size distribution on the plastic behaviour of polycrystalline metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 16, 2008.
- [RSZ94] Y. Rougier, C. Stolz, and A. Zaoui. Self-consistent modelling of elastic-viscoplastic polycrystals. *Comptes Rendus de l'Académie des sciences Paris*, 318(série II) :145–151, 1994.
- [Saa06] G. Saada. Planar dislocation arrays and crystal plasticity. In *Encyclopedia of Materials : Science and Technology*, pages 1–18. K H J. Buschow and al. (Eds), Elsevier, 2006.
- [Sac28] G. Sachs. Zur ableitung einer flie. *Zeitschrift des Vereins deutscher Ingenieure*, 72 :734–736, 1928.
- [SAGJJ06] M. Sanchez-Araiza, S. Godet, P.J. Jacques, and J.J. Jonas. Texture evolution during the recrystallization of a warm-rolled low-carbon steel. *Acta Materialia*, 54 :30853093, 2006.
- [SB93] G. Saada and E. Bouchaud. Dislocation walls. *Acta Metallurgica and Materialia*, 41(7) :2173–2178, 1993.

- [SBFB02] H. Sabar, M. Berveiller, V. Favier, and S. Berbenni. A new class of micro-macro models for elastic-viscoplastic heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, 39 :3257–3276, 2002.
- [SH72] M.R. Staker and D.R. Holt. The dislocation cell size and dislocation density in copper deformed at temperatures between 25 and 700°c. *Acta Metallurgica*, 20 :569579, 1972.
- [SK62] A. Seeger and H. Kronmuller. *Philosophical Magazine*, 7 :897–, 1962.
- [SL60] D.F. Stein and J.W. Low. Mobility of edge dislocations in silicon iron crystals. *Journal of Applied Physics*, 31 :362–369, 1960.
- [SMM⁺09] K. Suzuki, Y. Matsuki, K. Masaki, M. Sato, and M. Kuroda. Tensile and microbend tests of pure aluminum foils with different thicknesses. *Materials Science and Engineering*, A513-514 :7782, 2009.
- [SP08] S. Scheriau and R. Pippan. Influence of grain size on orientation changes during plastic deformation. *Materials Science and Engineering*, A493 :4852, 2008.
- [SPB06] C.W. Sinclair, W.J. Poole, and Y. Bréchet. A model for the grain size dependent work hardening of copper. *Scripta Materialia*, 55 :739742, 2006.
- [SPR05] R. Song, D. Ponge, and D. Raabe. Mechanical properties of an ultrafine grained cmn steel processed by warm deformation and annealing. *Acta Materialia*, 53 :48814892, 2005.
- [SPR⁺06] R. Song, D. Ponge, D. Raabe, J.G. Speer, and D.K. Matlock. Overview of processing, microstructure and mechanical properties of ultrafine grained bcc steels. *Materials Science and Engineering A*, 441 :1–17, 2006.
- [Suq87] P. Suquet. Elements of homogenizationfor inelastic solid mechanics. In *Homogenization techniques for Composite media*, pages 193–278. E. Sanchez-Palencia and A. Zaoui (Eds), Springer Berlin, 1987.
- [Tay38] G.I. Taylor. Plastic strain in metals. *Journal of the Institute of Metals*, 62 :307–324, 1938.
- [TS02] B. Thomas and J.H. Schmitt. Durcissement des aciers :*Mécanismes*. *Techniques de l'Ingénieur*, M4340 :1–20, 2002.

- [UDFN04] M.D. Uchic, D.M. Dimiduk, J.N. Florando, and W.D. Nix. Sample dimensions influence strength and crystal plasticity. *Science*, 305 :986–989, 2004.
- [VHLS05] P. Van Houtte, S. Li, M. Seefeldt, and L. Delannay. Deformation texture prediction : from the Taylor model to the advanced lamel model. *International Journal of Plasticity*, 21 :589624, 2005.
- [Voi89] W. Voigt. Bestimmung der elasticitäts-constanten für kalkspath. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen*, pages 483–511, 1889.
- [VSG02] P. Villechaise, L. Sabatier, and J.C. Girard. On slip band features and crack initiation in fatigued 316l austenitic stainless steel : Part 1 : Analysis by electron back-scattered diffraction and atomic force microscopy. *Materials Science and Engineering, A* 323 :377–385, 2002.
- [Wen81] G.J. Weng. Self-consistent determination of time-dependent behavior of metals. *Journal of Applied Mechanics*, 48 :41–46, 1981.
- [Wen83] G.J. Weng. A micromechanical theory of grain-size dependence in metal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 31 :193–203, 1983.
- [WG08] Y. Wei and H. Gao. An elasticviscoplastic model of deformation in nanocrystalline metals based on coupled mechanisms in grain boundaries and grain interiors. *Materials Science and Engineering, A* 478 :1625, 2008.
- [WP02] Z.C. Wang and P.B. Prangnell. Microstructure refinement and mechanical properties of severely deformed Al-Mg alloys. *Materials Science and Engineering, A* 328 :8797, 2002.
- [ZAKB05] B. Zhu, R. Asaro, P. Krysl, and R. Bailey. Transition of deformation mechanisms and its connection to grain size distribution in nanocrystalline metals. *Acta Materialia*, 53 :4825–4838, 2005.
- [ZD73] R. Zeller and P.H. Dederich. Elastic constants of polycrystals. *Physica status solidi (b)*, 55 :831–842, 1973.
- [Zeg05] A. Zeghadi. *Effet de la morphologie tri-dimensionnelle et de la taille de grains sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, France, 2005.
- [ZR93] A. Zaoui and J.L. Raphanel. *On the nature of the intergranular accommodation in the modeling of elastoviscoplastic behavior of polycrystalline aggregates*. ENSMP, France, 1993.

Annexe A

Procédure numérique

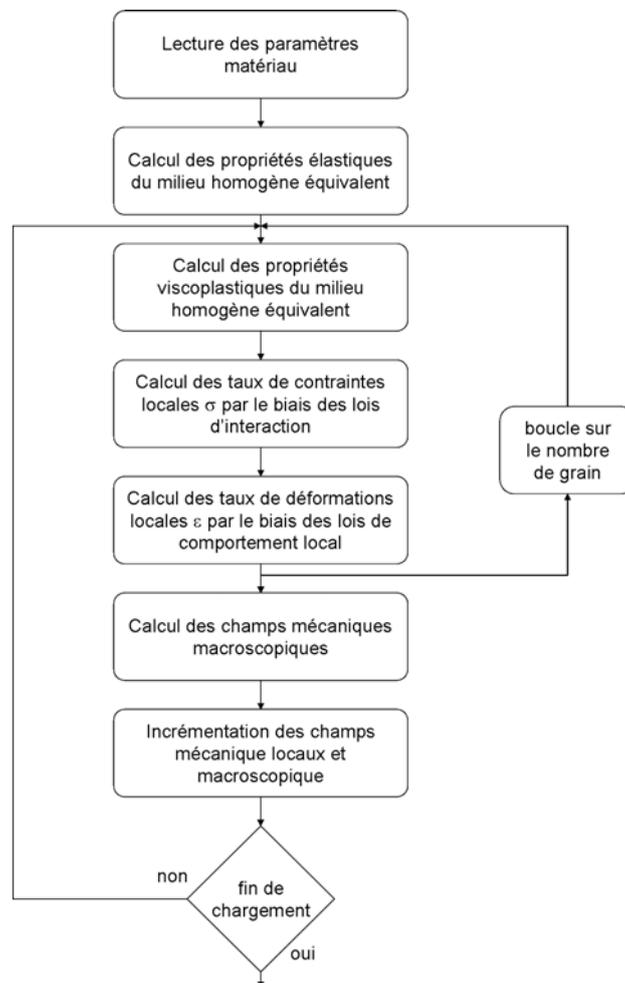


FIG. A.1 – Représentation du modèle auto-cohérent incrémental utilisé dans cette thèse

Annexe B

Calcul d'une densité de dislocation géométriquement nécessaire scalaire dans une couche

Les équations fondamentales de la théorie des dislocations continues établissent un lien entre les distorsions élastiques $\underline{\underline{\beta}}^e$ et le tenseur de dislocation $\underline{\underline{\alpha}}$ également appelé tenseur de Nye [Nye53][Krö58] :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \text{rot}(\underline{\underline{\beta}}^e) \quad (\text{B.1})$$

La décomposition des distorsions totales $\underline{\underline{\beta}}$ en une partie élastique $\underline{\underline{\beta}}^e$ et une partie plastique $\underline{\underline{\beta}}^p$ permet d'écrire :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \text{rot}(\underline{\underline{\beta}} - \underline{\underline{\beta}}^p) \quad (\text{B.2})$$

Le tenseur des distorsions totales est défini par le gradient des déplacements. Or, le rotationnel d'un gradient est nul, donc l'écriture du tenseur de Nye se simplifie alors en :

$$\underline{\underline{\alpha}} = -\text{rot}(\underline{\underline{\beta}}^p) \quad (\text{B.3})$$

En négligeant les rotations inélastiques, l'évolution du tenseur des dislocations est relié aux taux de déformation plastique :

$$\underline{\underline{\alpha}} = -\text{rot}(\underline{\underline{\varepsilon}}^p) \quad (\text{B.4})$$

Ainsi, l'écriture du tenseur $\underline{\dot{\alpha}}$ s'écrit en coordonnées sphériques ($\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \varphi} = 0$) :

$$\underline{\dot{\alpha}} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{r} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \dot{\varepsilon}_{r\varphi}^p & \frac{1}{r} \dot{\varepsilon}_{r\varphi}^p + \dot{\varepsilon}_{r\varphi,r}^p & -\frac{1}{r} \dot{\varepsilon}_{r\theta}^p + \dot{\varepsilon}_{r\theta,r}^p \\ -\frac{1}{r} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi}^p & \frac{1}{r} \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi,r}^p & -\frac{1}{r} \dot{\varepsilon}_{\theta\theta}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\theta,r}^p \\ -\frac{1}{r} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi}^p & \frac{1}{r} \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi,r}^p & -\frac{1}{r} \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta,r}^p \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Le second invariant du tenseur de Nye ($\sqrt{\alpha_{ij}\alpha_{ij}}$) représente une valeur scalaire de la densité de dislocation géométriquement nécessaire (GND).

L'unité des densités de dislocation est le m^{-2} . Or, les composantes du tenseur de Nye sont exprimées sous la forme d'une longueur du vecteur de Burgers par unité de surface (m^{-1}).

Ainsi, afin de conserver la cohérence des unités, nous pouvons écrire :

$$\dot{\rho}_g = \frac{1}{b} \sqrt{\dot{\alpha}_{ij}\dot{\alpha}_{ij}} \quad (\text{B.6})$$

ou encore, sous forme développée :

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_g \simeq & \frac{1}{b} \left[-\frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(-\dot{\varepsilon}_{\theta\varphi}^{p^2} - \dot{\varepsilon}_{r\varphi}^{p^2} - \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi}^{p^2} - \dot{\varepsilon}_{r\theta}^{p^2} - \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta}^{p^2} - \dot{\varepsilon}_{\theta\theta}^{p^2} \right. \right. \\ & + \cos^2 \theta \left(\dot{\varepsilon}_{r\theta}^{p^2} + \dot{\varepsilon}_{\theta\theta}^{p^2} + \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta}^{p^2} \right) \\ & - r^2 \left(\dot{\varepsilon}_{r\varphi,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{r\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi,r}^p \right) \\ & + r^2 \cos^2 \theta \left(\dot{\varepsilon}_{r\varphi,r}^p + \dot{\varepsilon}_{r\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi,r}^p \right) \\ & + 2r \cos^2 \theta \left(\dot{\varepsilon}_{r\varphi}^p \dot{\varepsilon}_{r\varphi,r}^p + \dot{\varepsilon}_{r\theta}^p \dot{\varepsilon}_{r\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi}^p \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta}^p \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\theta}^p \dot{\varepsilon}_{\theta\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi}^p \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi,r}^p \right) \\ & \left. - 2r \left(\dot{\varepsilon}_{r\varphi}^p \dot{\varepsilon}_{r\varphi,r}^p + \dot{\varepsilon}_{r\theta}^p \dot{\varepsilon}_{r\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi}^p \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta}^p \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\theta\theta}^p \dot{\varepsilon}_{\theta\theta,r}^p + \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi}^p \dot{\varepsilon}_{\varphi\varphi,r}^p \right)^{1/2} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

En utilisant les relations trigonométriques, comme $1 - \cos^2 \theta = \sin^2 \theta$, les trois termes $\cos^2 \theta \dot{\varepsilon}_{\theta\varphi}^{p^2}$, $\cos^2 \theta \dot{\varepsilon}_{r\varphi}^{p^2}$ et $\cos^2 \theta \dot{\varepsilon}_{\varphi\theta}^{p^2}$ sont manquants afin d'obtenir l'expression des densités de GND obtenue en passant par les coordonnées cylindriques. Cette expression est la suivante :

$$\dot{\rho}_g = \frac{1}{b} \left(\left(\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{eq}^p}{\partial r} \right)^2 + \frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^p}{r} \frac{\partial \dot{\varepsilon}_{eq}^p}{\partial r} + \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^p}{r} \right)^2 \right)^{1/2} \quad (\text{B.9})$$

En simplifiant les termes négligeables, et en supposant un gradient linéaire des déformations plastiques sur la couche d'épaisseur λ , l'évolution des densités de GND se traduit par :

$$\dot{\rho}_g = \frac{1}{b} \frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{pI} - \dot{\varepsilon}_{eq}^{pC}}{\lambda} \quad (\text{B.10})$$

