



HAL
open science

Étude micro-mécanique de l'effet de la présence d'amas d'inclusions sur la transition fragile-ductile d'aciers nucléaires.

Nicolas Bilger

► To cite this version:

Nicolas Bilger. Étude micro-mécanique de l'effet de la présence d'amas d'inclusions sur la transition fragile-ductile d'aciers nucléaires.. Sciences de l'ingénieur [physics]. Ecole Polytechnique X, 2003. Français. NNT: . pastel-00001070

HAL Id: pastel-00001070

<https://pastel.hal.science/pastel-00001070>

Submitted on 8 Feb 2012

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

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



Thèse présentée pour l'obtention du titre de
DOCTEUR DE L'ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Spécialité: Mécanique

par

Nicolas Bilger

Sujet de thèse

**Étude micromécanique
de l'effet de la présence d'amas d'inclusions
sur la transition fragile-ductile d'aciers nucléaires**

soutenue le 22 octobre 2003 devant le jury composé de :

Messieurs	Philippe Bompard	<i>Président</i>
	Dominique Jeulin	<i>Rapporteurs</i>
	Gilles Perrin	
	Michel Bornert	<i>Examineurs</i>
	Pierre Suquet	
	André Zaoui	
	Renaud Masson	<i>Invité</i>

Remerciements

Ce mémoire est le fruit d'une étroite collaboration entre le Laboratoire de Mécanique des Solides de l'École Polytechnique (LMS), le Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique de Marseille (LMA) et Électricité de France. A ce titre, je tiens, tout d'abord à remercier les directeurs de ces deux laboratoires, Bernard Halphen ainsi que son prédécesseur Pierre Berest, pour le LMS et Michel Raous pour le LMA pour m'avoir accueilli au sein de leur laboratoire. Mes remerciements vont ensuite vers EDF qui m'a permis d'effectuer cette thèse.

Mes remerciements se tournent, dans un premier temps, vers les membres du jury : Philippe Bompard pour m'avoir fait l'honneur de présider mon jury mais également Dominique Jeulin et Gilles Perrin pour avoir consacré une partie de leur temps précieux à l'examen de ce mémoire ainsi que Michel Bornert, Renaud Masson, Pierre Suquet et André Zaoui pour avoir lu attentivement ces pages. Je suis particulièrement heureux de retrouver Pierre Suquet et André Zaoui dans mon jury de thèse car ils m'ont laissé ma chance, dès le stage de DEA, malgré mes connaissances limitées en mécanique de la rupture et dans les méthodes de changement d'échelle.

Tous les résultats présentés dans ce mémoire résultent d'un travail d'équipe et au cours de ces années j'ai pu bénéficier d'un encadrement de choix tant dans l'équipe "Micromécanique des Matériaux Hétérogènes" du LMS que dans celle des "Matériaux et Structures Hétérogènes" du LMA. La première personne que je tiens à remercier est Michel Bornert. Il a su m'aider patiemment grâce à ses connaissances dans le domaine de la micromécanique. Son recul face aux problèmes et son sens physique m'ont permis d'aborder en profondeur différents aspects de ces travaux tout en me laissant une grande part d'autonomie. J'exprime également toute ma gratitude envers François Auslender pour sa participation au bon déroulement de ces travaux, pour sa disponibilité et l'intérêt qu'il a manifesté pour ces travaux durant toutes ces années. André Zaoui, qui malgré ses nombreuses activités a suivi ces travaux de thèse et a toujours été d'une grande disponibilité. Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à Daniel Caldemaison pour avoir pris sur son temps en me faisant découvrir le microscope électronique à balayage, ainsi que les joies de l'expérimental. J'associe également à ces remerciements Jérôme Crépin pour ses remarques pertinentes et constructives sur ce travail ainsi que Raphaël Pesci (LPMM, ENSAM de Metz) pour les riches échanges que nous avons pu avoir concernant l'analyse expérimentale des champs locaux.

Bien que mes séjours à Marseille furent de courtes durées, ils n'en restèrent pas moins très enrichissants. A ce titre, je tiens à associer à mes remerciements Annie Fornacciari pour son aide précieuse lors de mes déplacements sur Marseille, ainsi que Hervé Moulinec, Jean-Claude Michel et Pierre Suquet pour les fructueuses et enrichissantes discussions que nous avons pu avoir. Grâce à eux ces séjours ont toujours été à la fois productifs et instructifs. Sans Hervé Moulinec, une bonne partie des résultats obtenus à partir des simulations par TFR3D n'aurait pas été possible. Je le remercie donc pour avoir passé du temps notamment pour étendre ses codes de calculs par TFR vers d'autres comportements (prise en compte de l'écroutissage).

Je remercie également EDF et tout particulièrement Renaud Masson et Gilles Rousselier pour l'intérêt qu'ils ont porté au suivi de ces travaux. Les discussions formelles et informelles que j'ai pu avoir avec eux m'ont toujours été d'un grand recours.

Mais une thèse c'est aussi trois années passées au sein d'une (ou plusieurs) équipe(s). L'ambiance qui régnait tout au long de cette thèse, tant au LMS qu'au LMA, était tout à fait délicieuse, propice à de nombreux échanges scientifiques ou non. Je citerais donc: Aude Racine, Emmanuelle Chabert, Emna Rekik, Eva Héripéré, Graciella Bertolino, Marie Dexet, Alexandre Kane, Benoît Berini, Frédéric Mignot, Kamal Elbachiri, Lionel Gélébart, Lotfi Jaballah, Michaël Peigney, Noël Lahellec, Thomas Ganne, Olivier Brivois...

Pour conclure, ce travail s'est, bien entendu, accompagné de moments difficiles. Je tiens à remercier chaleureusement mes parents et mes deux frères pour leur aide, leur soutien et leur patience durant toutes ces années.

Table des matières

Introduction	1
1 Problématique et Méthodologie	5
1.1 Rupture ductile : mécanismes et modèles associés	5
1.1.1 Mécanismes de la rupture ductile	5
1.1.2 Modèles non couplés	7
1.1.3 Modèles couplés : critère de Gurson et ses extensions	8
1.1.4 Modèle couplé : Critère elliptique	11
1.1.5 Critère de Rousselier	12
1.2 Rupture fragile : mécanismes et critères associés	14
1.2.1 Analyse énergétique de la rupture fragile	14
1.2.2 Modèle probabiliste : le critère de Beremin	16
1.2.3 Déformation plastique en pointe de fissure	19
1.3 Contexte industriel de l'étude	19
1.4 Mesure des champs locaux	22
1.4.1 Technique des micro-grilles	23
1.4.2 Acquisition d'une image	24
1.4.3 Déroulement de l'essai	25
1.5 Analyse des champs locaux	26
1.6 Méthodes de changement d'échelle	29
1.6.1 Principes de base et méthodologie	29
1.6.2 Élasticité linéaire hétérogène	31
1.6.3 Matériaux hétérogènes non-linéaires	36
1.7 Autres applications des principes de changement d'échelle	41
1.8 Statut et amélioration du critère de Gurson	43
1.8.1 Statut du critère de Gurson	43
1.8.2 Extension micromécanique du critère de Gurson : Borne de Gārājeu	44
1.9 Techniques numériques	45

1.10 Conclusion	46
2 Simulation de microstructures et analyse statistique de la notion d'amas. Application à une microstructure réelle	47
2.1 Principe de simulation de microstructures périodiques	48
2.1.1 Cas des microstructures aléatoires	48
2.1.2 Cas des microstructures à amas	52
2.1.3 Extension aux microstructures tridimensionnelles	55
2.1.4 Les tests d'arrêt	56
2.2 Informations statistiques	57
2.2.1 La fonction distance et ses extensions	58
2.2.2 Application à des microstructures simulées	59
2.2.3 Étude de connectivité	61
2.2.4 Extension au cas 3D	62
2.2.5 Analyse de sensibilité	63
2.3 Application à la microstructure de l'acier de cuve	67
2.3.1 Cartographie d'une éprouvette de traction	68
2.3.2 Informations statistiques basées sur la fonction distance	74
2.3.3 Traitement des défauts sur le bord	80
2.4 Passage 3D → 2D	83
2.4.1 Principe de la méthode	83
2.4.2 Cas des microstructures aléatoires	84
2.4.3 Cas des microstructures à amas	88
2.5 Conclusion	92
3 Analyse numérique de l'effet d'amas sur la rupture fragile et sur la rupture ductile	95
3.1 Analyse par calculs par éléments finis	96
3.1.1 Principe de la méthode	96
3.1.2 Simulations numériques 2D	98
3.1.3 Conclusions	101
3.2 Méthode basée sur la transformée de Fourier rapide (T.F.R.)	102
3.2.1 Principe de la méthode	103
3.2.2 Méthode de résolution	104
3.2.3 Lagrangien augmenté	105
3.3 Surface d'écoulement de milieux poreux en 2D	108
3.3.1 Critère de plasticité de Gurson en 2D	108
3.3.2 Simulations de microstructures 2D	109

Table des matières

3.3.3	Cas d'une triaxialité de contraintes infinie	110
3.3.4	Cas d'une triaxialité des contraintes nulle	113
3.3.5	Surface d'écoulement des milieux poreux 2D	116
3.4	Bandes de localisation de la déformation	119
3.4.1	Étude de l'hétérogénéité de déformation	119
3.4.2	Modèle de prévision des bandes de localisation	120
3.5	Surface d'écoulement des milieux poreux en 3D	122
3.5.1	Simulations de microstructures 3D	122
3.5.2	Cas d'une triaxialité des contraintes infinie	123
3.5.3	Cas d'une triaxialité des contraintes nulle	125
3.5.4	Surface d'écoulement 3D	127
3.6	Effet d'amas sur la rupture fragile	129
3.6.1	Critère de Beremin : principe d'application	129
3.6.2	Application de critère de Beremin en 2D	131
3.6.3	Application du critère de Beremin en 3D	135
3.7	Conclusion	138
4	Homogénéisation non linéaire : surface de charge et champs locaux dans un milieu poreux	141
4.1	Description du modèle semi-analytique	142
4.1.1	Approche sécante modifiée	142
4.1.2	Description de la microstructure	144
4.2	Surface d'écoulement du milieu poreux : Bornes et estimations	148
4.2.1	Réponse sous chargement monotone à triaxialité fixée	148
4.2.2	Surface d'écoulement du milieu poreux	150
4.2.3	Minimisation par gradient	157
4.3	Comparaisons avec des calculs par T.F.R. 3D	158
4.3.1	Méthodes d'obtention des concentrations locales	159
4.3.2	Comparaison T.F.R. 3D / Modèle semi-analytique	161
4.4	Champs locaux dans un milieu poreux	171
4.4.1	Modèle semi-analytique : Estimation des champs locaux	171
4.4.2	Modélisation par éléments finis	174
4.4.3	Comparaisons calculs par éléments finis / modèle semi-analytique	179
4.4.4	Comparaison avec des calculs par T.F.R. 3D	185
4.5	Effet d'amas sur la rupture fragile	188
4.5.1	Application du critère de Beremin	189
4.5.2	Comparaison avec des calculs par éléments finis	191

4.6 Conclusion	192
Conclusion générale	195
Bibliographie	201
Annexes	209
A Techniques de micro-grilles	209
A.1 Méthode de corrélation d'images	209
A.2 Dépôt de micro-grilles	211
A.3 Prise d'images numérique au M.E.B.	211
B Rappels sur la covariance	213
C Rappel de l'approche variationnelle de Ponte Castañeda	215

Introduction

Lors des visites d'inspection des cuves de centrales nucléaires, des indications de défauts peuvent être mises en évidence et l'exploitant de la centrale doit être capable d'en évaluer la nocivité. Une sous-estimation de l'effet de tels défauts sur le comportement de l'acier de cuve peut conduire à un endommagement précoce de ce dernier et donc à une durée de vie bien inférieure à celle initialement prévue. Réciproquement, une surestimation peut conduire à des mesures coûteuses et inutiles. Au cours de son exploitation, l'acier de cuve, qui fonctionne plutôt, pour ce qui est de la rupture, dans son domaine ductile, va subir de fortes irradiations. Ces dernières tendent à le fragiliser, risquant, à terme, de le faire réagir dans son domaine de transition fragile-ductile, zone où règne une compétition entre les mécanismes de rupture fragile (propagation de micro-fissures) et ductile (germination, croissance et coalescence de cavités). Le suivi de l'évolution de la zone de transition de l'acier au cours de son exploitation permet de caractériser son état d'endommagement. Il est réalisé au travers d'essais périodiques sur mouton Charpy à différentes températures.

Pour certains cas critiques, les méthodes dites classiques de la mécanique de la rupture restent trop conservatives, de sorte que le défaut risque à tort d'être jugé nocif. A ce titre, l'approche locale de la rupture a permis des progrès significatifs en introduisant un critère local de rupture. Toutefois, certains problèmes restent à ce jour non résolus : ainsi, dans la zone de température de transition fragile - ductile, le critère de rupture par clivage de Beremin (approche probabiliste de la mécanique de la rupture fragile) perd beaucoup son caractère prédictif : la ténacité mesurée sur les aciers de cuve est sous-estimée par l'application de ce critère, notamment pour des températures supérieures à -90°C . Cette température correspond précisément par le biais d'une équivalence irradiation/basse température à la température de transition fragile-ductile de l'acier de cuve. Afin de rendre compte de l'augmentation rapide de la ténacité en fonction de la température, un calage des paramètres de Weibull est nécessaire. Celui-ci ne permet toutefois pas de rendre compte des phénomènes locaux mis en jeu. L'approche locale reste donc actuellement, tout comme les approches classiques, encore trop conservatrice dans le domaine de la transition.

Un résultat marquant obtenu récemment est la mise en évidence expérimentale, pour l'amorçage de la rupture par clivage, du rôle important joué par les inclusions de sulfure de manganèse (MnS) et, plus précisément, de leur répartition hétérogène en amas. En effet, de tels amas sont susceptibles de jouer le rôle de concentrateurs de contrainte, induisant une hétérogénéité des champs locaux à leur voisinage et favorisant ainsi le déclenchement du clivage sur des défauts proches. Cette hypothèse est à la base de ces travaux de thèse. Notons d'emblée que, dès les premiers stades de la déformation plastique, ces inclusions se désolidarisent de l'acier et peuvent être assimilées à des pores. C'est en tout cas l'hypothèse retenue dans ce travail. Appliquer un critère de rupture à l'aide des champs macroscopiques négligerait totalement les fluctuations des champs mécaniques locaux qui peuvent s'avérer importantes pour décrire correctement les mécanismes de rupture.

L'objectif de cette thèse est de montrer que la prise en compte de l'hétérogénéité des champs

locaux peut permettre une meilleure description des mécanismes de rupture ductile et fragile à travers l'élaboration d'un critère simple de rupture tenant compte de cette hétérogénéité. Une des questions soulevées par la description de cette hétérogénéité des champs locaux est celle de l'échelle pertinente. Pour décrire cette hétérogénéité, doit-on tenir compte uniquement de l'hétérogénéité développée à l'intérieur d'un amas ou de celle due aux interactions entre amas ? L'étude de l'effet d'amas de MnS sur la rupture fragile et ductile est menée selon une approche micromécanique. Celle-ci s'appuie sur des méthodes de changement d'échelle, numériques et analytiques, visant à déterminer la réponse mécanique globale, à l'échelle d'un volume élémentaire représentatif (V.E.R.), mais donnant aussi accès aux champs locaux à l'échelle des pores et des amas de pores. La rupture fragile est abordée au travers du critère de Beremin, appliqué à l'échelle des champs locaux issus des modèles d'homogénéisation. Une étape d'évolution de la microstructure au travers de la croissance de cavités couplée à l'application du critère de Beremin permettra de décrire la transition fragile-ductile et, notamment, d'évaluer l'effet d'une répartition hétérogène des défauts en amas sur cette dernière. Notons que la prise en compte de la température est faite au travers des seules courbes d'écrouissage de l'acier de cuve disponibles expérimentalement.

Cette étude traite donc des aspects statistiques de la présence d'amas de sulfure de manganèse sur la rupture fragile et ductile dans les aciers de cuve. Ce travail est présenté en quatre parties :

- La première partie (Chapitre 1) est principalement consacrée à une revue bibliographique des principaux modèles de la rupture ductile et fragile. On y rappelle également la philosophie et les principes de base des méthodes de changement d'échelle. Un essai de traction à froid, mené dans le cadre d'un partenariat avec l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers de Metz et Électricité de France (Site des Renardières) est présenté. Celui-ci vise à mettre en évidence expérimentalement l'hétérogénéité des champs locaux dans l'acier de cuve induite par la présence de MnS et, à une échelle plus fine, par le regroupement en paquets des particules de cémentite. Ceci est rendu possible grâce à l'utilisation des outils de corrélation d'images numériques développés au LMS.
- La seconde partie (Chapitre 2) est consacrée au développement d'outils de simulation de microstructures 2D et 3D et au développement d'outils d'analyse statistique en vue d'une application à la microstructure de l'acier de cuve. L'objectif visé est de définir la morphologie de la microstructure de l'acier de cuve (est-ce une microstructure à amas et, si oui, de quel type : isolés ou connectés ?) et, plus généralement, de disposer d'un indicateur morphologique applicable à n'importe quelle microstructure, provenant de l'expérience ou simulée. Ces outils d'analyse statistique sont, dans un premier temps, appliqués à des microstructures 2D et 3D de morphologies diverses : microstructures aléatoires, à amas isolés ou connectés, avec des tailles de défauts identiques ou variables. Les principes de simulation de ces microstructures sont présentés. Notre étude se limite au cas des microstructures périodiques. Les procédés de simulation de microstructures 2D et 3D constituent une étape importante dans ces travaux car ils seront mis à profit dans les parties suivantes.

Ces outils d'analyse statistique sont ensuite appliqués à la microstructure réelle de l'acier de cuve obtenue par une cartographie de la zone utile d'une éprouvette de traction plate. Cette cartographie est réalisée grâce à l'utilisation des outils d'analyse d'images. L'objectif est, dans un premier temps, de recueillir des informations sur la position des particules de MnS, leur forme, leur orientation, etc. et, dans un second temps, d'appliquer ces outils d'analyse statistique en vue de définir la morphologie de la microstructure de l'acier de cuve.

La question de la pertinence des informations statistiques obtenues sur une ou plusieurs coupes 2D d'un matériau hétérogène vis-à-vis de sa microstructure réelle, i.e., 3D, est évoquée. L'objectif

est de savoir si les informations statistiques obtenues sur une coupe 2D d'un matériau hétérogène sont directement transposables au cas 3D. Cette étude est menée par l'analyse statistique de plusieurs coupes 2D obtenues sur des microstructures 3D simulées et de morphologies diverses : aléatoire et à amas, isolés et connectés.

- La troisième partie (Chapitre 3) est consacrée à l'étude numérique de l'effet d'une répartition hétérogène des cavités de forme cylindrique (en 2D) et sphérique (en 3D) sur la rupture ductile et fragile. Cette étude est, dans un premier temps, menée grâce à l'utilisation de calculs par éléments finis, en représentant le milieu poreux par un critère de Gurson avec une porosité initiale hétérogène. De tels calculs permettront également de mettre en évidence les interactions entre les amas, l'hétérogénéité des champs locaux induite par la présence de ces derniers et l'effet des amas sur la rupture fragile.

Dans un second temps, un outil de simulation numérique basé sur la transformée de Fourier rapide (T.F.R.), récemment développé au Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique de Marseille, est mis à profit. Celui-ci permet de déterminer le comportement macroscopique de structures complexes, possédant un grand nombre de défauts à l'échelle du V.E.R., et donne également accès aux champs locaux dans ce dernier.

Cet outil est, d'abord, mis à profit pour mettre évidence un effet d'amas sur la surface d'écoulement des milieux poreux en 2D et 3D. Dans ce dernier cas, l'effet du troisième invariant sur la contrainte d'écoulement est démontré. Ensuite, le critère de Beremin est appliqué à partir des champs locaux issus de cet outil de simulation numérique en vue d'évaluer un effet d'amas sur la rupture fragile en 2D et en 3D, avec et sans écrouissage.

- La quatrième et dernière partie (Chapitre 4) présente un modèle semi-analytique 3D résultant d'un couplage entre les approches variationnelles récentes de l'homogénéisation non-linéaire des matériaux hétérogènes et une description de la microstructure par une approche par motifs morphologiques représentatifs qui se réduit, dans notre étude, à un assemblage de sphères de Hashin ou de Hashin généralisé. Ce modèle, moins coûteux en temps de calculs que la méthode par T.F.R., est également mis à profit pour évaluer l'effet d'amas sur la rupture ductile et fragile. Dans un premier temps, une comparaison des surfaces d'écoulement obtenues à partir du modèle semi-analytique et des calculs par T.F.R. 3D est menée. Avant d'appliquer le critère de Beremin à partir des champs locaux issus de ce modèle semi-analytique, une étape de comparaison des champs locaux est indispensable. La pertinence des champs locaux issus du modèle semi-analytique est vérifiée par des comparaisons entre ceux issus de calculs par éléments finis et ceux issus de calculs numériques par T.F.R. 3D. Enfin, une particularisation du critère de Beremin au cas des microstructures décrites par un assemblage de sphères de Hashin et de Hashin généralisé est proposée.

Ce travail est le fruit d'une étroite collaboration entre le Laboratoire de Mécanique des Solides (LMS) de l'École Polytechnique, le Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA) de Marseille et la Direction des études et recherches d'Électricité de France (département M.M.C., site des Renardières), menée dans le cadre d'une convention CIFRE.

Chapitre 1

Problématique et Méthodologie

Dans la zone de transition fragile - ductile d'un acier de cuve de réacteur nucléaire, les mécanismes de rupture ductile (germination, croissance de cavité et coalescence) et fragile (propagation de fissure) coexistent. Ces mécanismes, bien que de nature différente, prennent naissance sur des micro-défauts et conduisent à la ruine du matériau. Ils sont relativement bien décrits par des modèles tels que ceux de Gurson ou Rousselier et de Beremin respectivement. Le début de ce chapitre est consacré à une description des mécanismes locaux de la rupture ductile et de la rupture fragile ainsi qu'à la présentation des modèles associés à chaque type de rupture : Beremin, Gurson, Rousselier ainsi que leurs principales extensions.

L'incapacité des modèles de Beremin et de Gurson (ou Rousselier) à décrire à eux seuls les mécanismes locaux mis en jeu dans la zone de transition fragile - ductile de l'acier de cuve (zone où règne une compétition entre les mécanismes de rupture fragile et ductile) et la mise en évidence expérimentale de la présence d'amas de MnS au voisinage de sites de clivage conduisent à étudier l'influence de la présence de tels amas sur l'activation des mécanismes locaux et sur les modes de déformation locaux, au travers d'une approche micromécanique. Cette approche, basée sur les techniques de changement d'échelle, consiste à déterminer le comportement macroscopique d'un matériau hétérogène à l'échelle d'un volume élémentaire représentatif et donne également accès aux champs locaux dans ce dernier. La méthodologie de ces techniques de changement d'échelle est abordée après une description du contexte industriel de cette étude et la mise en évidence expérimentale de l'hétérogénéité des champs locaux au voisinage des particules de MnS et, à une échelle plus petite, au voisinage des paquets de cémentites au travers d'un essai de traction à froid. Cette estimation des champs locaux passe par l'utilisation de techniques de corrélation d'images numériques dont le principe est brièvement rappelé.

1.1 Rupture ductile : mécanismes et modèles associés

1.1.1 Mécanismes de la rupture ductile

Afin d'étudier les différentes étapes qui conduisent à la ruine d'un matériau ductile, matériau pouvant subir de fortes déformations plastiques avant rupture, on considère un élément de volume constitué d'une matrice ductile et contenant une certaine proportion de défauts tels que des cavités ou des particules de géométrie quelconque. Le processus de rupture d'un tel matériau se décompose en trois étapes (Figure 1.1) :

- **Nucléation** : Décohésion entre la matrice et les particules ou rupture des particules créant de petites cavités.
- **Croissance** : Croissance de ces cavités par déformation plastique de la matrice autour de ces dernières.
- **Coalescence** : Réunion des cavités formant une micro-fissure, voire, in fine, une macro-fissure.

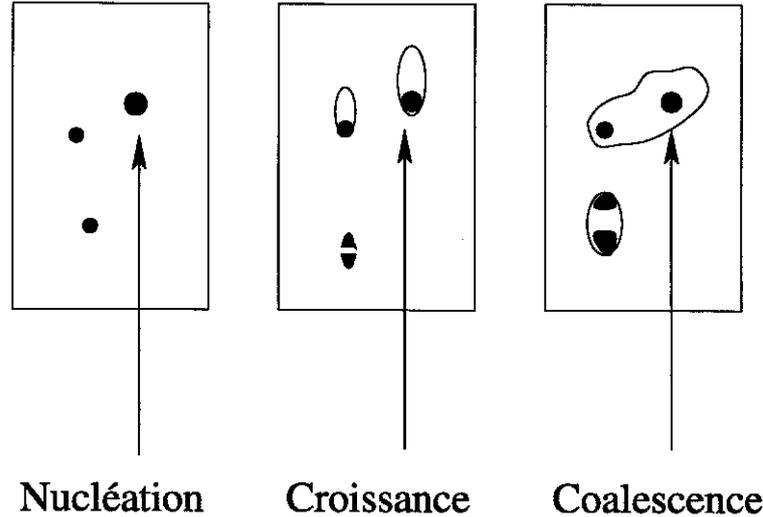


FIG. 1.1 – Les trois phases de la rupture ductile

La variable interne gouvernant l'endommagement d'un tel matériau est la fraction volumique des vides ou porosité notée f , définie comme le rapport entre le volume des vides P et le volume total du matériau V selon :

$$f = \frac{P}{V}. \quad (1.1)$$

Sous une sollicitation externe, la variation de porosité du matériau \dot{f} provient de deux sources qui sont la nucléation de nouvelles cavités et la croissance des cavités existantes par déformation plastique autour de ces cavités :

$$\dot{f} = \dot{f}_{\text{croissance}} + \dot{f}_{\text{nucléation}}. \quad (1.2)$$

La variation de la porosité due à la création de nouvelles cavités (nucléation) n'est décrite qu'au travers de lois statistiques comme par exemple celles de Chu et Needleman [25] que nous détaillerons un peu plus loin dans le texte lorsque nous aborderons l'étude du critère de Gurson [39]. En revanche, l'étude de la variation de porosité due à la croissance de cavités existantes relève d'une démarche micromécanique simple qui permet d'exprimer cette variation de porosité directement en fonction des grandeurs macroscopiques. En effet, la dérivation de l'équation (1.1) associée à l'hypothèse d'incompressibilité de la matrice $\dot{V} = \dot{P}$, conduit aux définitions suivantes de la variation de porosité macroscopique, variations exclusivement dues à la croissance des pores [23] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{f} = (1-f) \frac{\dot{V}}{V} \text{ avec } \frac{\dot{V}}{V} = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \bar{v} \bar{n} \, dS \\ \text{ou} \\ \dot{f} = f(1-f) \frac{\dot{P}}{P} \text{ avec } \frac{\dot{P}}{P} = \frac{1}{P} \int_{\partial P} \bar{v} \bar{n} \, dS, \end{array} \right. \quad (1.3)$$

∂V représentant la surface extérieure du V.E.R, ∂P celle des pores, \vec{v} le champ de vitesse dans l'élément de volume considéré et \vec{n} la normale unitaire sortante. La vitesse de variation de volume du matériau poreux $\frac{\dot{V}}{V}$ étant reliée au taux de déformation macroscopique \dot{E} selon $\frac{\dot{V}}{V} = \text{Tr}(\dot{E})$, l'équation (1.3a) s'exprime alors en négligeant les variations dues aux déformations élastiques selon [23] :

$$\dot{f} = (1 - f) \text{Tr}(\dot{E}^p). \quad (1.4)$$

La variation de la porosité dans le matériau peut également s'exprimer en fonction du taux de déformation moyen dans les pores par l'expression suivante :

$$\dot{f} = f(1 - f) \text{Tr}(\langle \dot{\epsilon} \rangle_{\text{pore}}). \quad (1.5)$$

Les équations (1.3), (1.4) et (1.5) illustrent bien les différentes approches permettant d'estimer la variation de porosité du matériau. Notons que, bien que la matrice du matériau poreux soit considérée comme incompressible, le matériau endommagé est compressible. Plusieurs modèles visant à décrire les mécanismes locaux de la rupture ductile (croissance de cavité) ainsi que l'influence des cavités sur le comportement macroscopique existent dans la littérature. On se propose d'en décrire deux catégories : les modèles dits "non couplés" et ceux dits "couplés".

1.1.2 Modèles non couplés

Des travaux pionniers modélisant la croissance de pores ont été entrepris par McClintock [57] qui a considéré le cas d'une cavité cylindrique plongée dans un massif infini rigide plastique, régie par le critère de von Mises et soumis à un chargement macroscopique axisymétrique. La loi de croissance ainsi obtenue est une fonction exponentielle du taux de triaxialité des contraintes $\tau = \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}$. Un peu plus tard, Rice et Tracey [76] étudiaient le cas d'une cavité sphérique de rayon R . La loi de croissance obtenue par ces auteurs s'exprime en fonction du taux de triaxialité des contraintes et des paramètres de chargement selon¹ :

$$\frac{1}{\dot{E}_{eq}} \frac{\dot{R}}{R} = 0,558 \sinh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}\right) + 0,008 \frac{-3\dot{E}_{22}}{\dot{E}_{11} - \dot{E}_{33}} \cosh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}\right);$$

expression qui prend la forme suivante dans l'hypothèse des forts taux de triaxialité :

$$\frac{\dot{R}}{R} \simeq 0,283 \exp\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}\right) \dot{E}_{eq}. \quad (1.6)$$

$\Sigma_m = \frac{1}{3} \text{Tr}\Sigma$ représente la partie sphérique du tenseur des contraintes macroscopiques Σ et Σ_{eq} sa partie équivalente (également appelée contrainte de von Mises) définie en fonction de la partie déviatorique $S = \Sigma - \Sigma_m \delta$ (δ = symbole de Kronecker) de Σ selon $\Sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} S : S}$; \dot{E}_{eq} est le taux de déformation équivalente défini en fonction de la partie déviatorique $\text{dev}\dot{E} = \dot{E} - \dot{E}_m \delta$ du taux de déformation macroscopique \dot{E} selon : $\dot{E}_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \text{dev}\dot{E} : \text{dev}\dot{E}}$.

¹ \dot{E} correspond en fait à la vitesse de déformation plastique puisque les déformations élastiques sont négligées [23]

²Ces notations seront utilisées tout au long de ce mémoire

Ces approches ne permettent pas de mettre en évidence l'influence sur le comportement des matériaux poreux de l'endommagement dû à la croissance de cavités. C'est pour cette raison que ces modèles sont appelés "modèles non couplés" : il n'y a pas de couplage entre l'endommagement et le comportement. D'autres approches, plus récentes, ont permis de mettre en évidence l'effet de la présence de cavités sur le comportement macroscopique des milieux poreux. C'est notamment le cas des modèles de Gurson et de Rousselier.

1.1.3 Modèles couplés : critère de Gurson et ses extensions

Énoncé du critère de Gurson

Gurson [39] a proposé une expression analytique du critère de plasticité macroscopique de matériaux poreux, à matrice rigide-plastique, régie par le critère de von Mises, et dont les cavités ont une forme sphérique. Ce critère s'écrit :

$$F(\Sigma, \sigma_0, f) = \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + 2f \cosh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right) - 1 - f^2 = 0, \quad (1.7)$$

équation qui fait intervenir la porosité macroscopique f du milieu poreux, la limite d'élasticité σ_0 de la matrice et des grandeurs macroscopiques telles que la pression hydrostatique Σ_m et la contrainte de von Mises Σ_{eq} . On sait, depuis Perrin [67], que le critère de Gurson est une borne supérieure rigoureuse dans le cas de microstructures décrites par un assemblage de sphères de Hashin [40]. La méthode utilisée pour aboutir au critère de Gurson ainsi qu'une extension micromécanique de ce dernier sont abordées un peu plus loin dans le texte à la fin de ce chapitre.

Mais le statut du critère de Gurson (1.7) n'est actuellement pas encore complètement clair : est-ce une borne supérieure ou une simple estimation pour l'ensemble des milieux poreux isotropes ?

A partir du critère de Gurson, il est possible d'établir une loi de croissance de cavité. En effet, nous avons vu précédemment que celle-ci s'exprime en fonction du taux de déformation plastique macroscopique \dot{E}^p (1.4), obtenue, si la loi de normalité est satisfaite, par l'expression :

$$\begin{cases} \dot{E}^p = \dot{\lambda} \frac{\partial F}{\partial \Sigma} \\ \dot{\lambda} \geq 0, \end{cases} \quad (1.8)$$

où $\dot{\lambda}$ représente le multiplicateur plastique. En prenant pour la fonction F l'expression du critère de plasticité de Gurson (1.7), le taux de croissance des pores s'exprime en fonction du taux de déformation équivalente macroscopique \dot{E}_{eq} et dépend de manière exponentielle de la pression hydrostatique macroscopique selon :

$$\dot{f}_{\text{croissance}} = \frac{3}{2} f(1-f) \sinh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right) \left(1 + f^2 - 2f \cosh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right)\right)^{-\frac{1}{2}} \dot{E}_{eq}. \quad (1.9)$$

Dans le cas des faibles fractions volumiques de vide ($f \ll 1 \Rightarrow \Sigma_{eq} \approx \sigma_0$) et pour des cavités de forme sphérique, la loi de croissance de pores associée au critère de Gurson (1.9) se réduit à l'expression suivante :

$$\frac{\dot{f}_{\text{croissance}}}{3\dot{E}_{eq}f} = \frac{\dot{R}}{\dot{E}_{eq}R} \simeq \frac{1}{2} \sinh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}\right),$$

expression qui peut se mettre sous la forme simplifiée suivante dans l'hypothèse des fortes triaxialités :

$$\frac{\dot{f}_{\text{croissance}}}{3\dot{E}_{eq}f} \simeq 0,25 \exp\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}\right).$$

Cette expression est proche de celle de Rice et Tracey (1.6) et traduit également la dépendance exponentielle de la croissance des cavités par rapport à la triaxialité des contraintes.

Le critère de Gurson possède toutefois quelques faiblesses. Par exemple, pour un chargement en cisaillement pur, il prévoit une contrainte d'écoulement $\Sigma_{eq} = (1-f)\sigma_0$ induisant une perte complète de résistance mécanique seulement pour une porosité $f = 1$. Cette valeur est naturellement trop grande et ne correspond pas aux observations expérimentales. D'autres faiblesses de ce critère, comme la prise en compte des interactions entre cavités voisines, la description de l'écrouissage et la prise en compte de la nucléation, sont maintenant présentées ainsi que les corrections proposées.

Modèle de Gurson, Tvergaard et Needleman

De par sa construction³, le critère de Gurson ne peut décrire les interactions qui règnent entre pores voisins. Pour s'affranchir de cette faiblesse, Tvergaard [89] introduit, de manière purement heuristique, trois paramètres q_1 , q_2 et q_3 dans le critère (1.7) :

$$\left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + 2q_1 f \cosh\left(\frac{3}{2}q_2 \frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right) - 1 - q_3 (f)^2 = 0. \quad (1.10)$$

Le critère (1.10) est appelé critère de Gurson-Tvergaard (G-T). Par comparaison entre la localisation des déformations entre cavités obtenue par des simulations numériques sur cellules périodiques et celle obtenue par le modèle (1.10), Tvergaard [89] trouve un bon accord pour $q_3 = q_1^2 = 1,5$ et $q_2 = 1$. L'introduction de ces paramètres a pour effet de rendre les contraintes d'écoulement en cisaillement pur et en pression hydrostatique pure plus faibles que celles obtenues par le critère de Gurson initial (pour $q_3 = q_1^2$) :

$$\begin{cases} \Sigma_{eq} = \sigma_0 (1 - q_1 f) : \text{Critère en cisaillement pur} \\ \Sigma_m = -\frac{2}{3q_2} \sigma_0 \ln(q_1 f) : \text{Critère en pression hydrostatique pure.} \end{cases} \quad (1.11)$$

Ainsi, dans le cas d'un chargement en cisaillement pur, le matériau perd toute résistance mécanique pour une porosité macroscopique $f = 1/q_1$ (expression obtenue en prenant $q_2 = 1$ et $q_3 = q_1^2$). D'autres travaux ont été effectués afin de déterminer les coefficients introduits par Tvergaard, notamment par Koplik et Needleman [50]. Ces auteurs ont comparé, pour différents taux de triaxialité, l'évolution de la porosité f et de la contrainte macroscopique de Mises Σ_{eq} en fonction de la déformation équivalente macroscopique E_{eq} (courbe $f - E_{eq}$ et courbe $\Sigma_{eq} - E_{eq}$), obtenues par des simulations numériques sur des cellules périodiques et par le modèle de Gurson modifié (1.10). Ces auteurs aboutissent à un bon accord pour $q_1 = 1,25$, $q_2 = 1$ et $q_3 = q_1^2$. Perrin et Leblond [68] obtiennent $q_1 = 4/e \simeq 1,47$ en résolvant selon une approche auto-cohérente le problème d'une sphère creuse plongée dans un massif infini lui-même poreux et obéissant au critère G-T., sous un chargement purement hydrostatique.

Néanmoins, l'introduction des paramètres q_i dans le critère de Gurson n'est pas suffisante pour prédire l'accélération rapide de la croissance des pores au voisinage de la coalescence. Pour remédier à cette faiblesse, Tvergaard et Needleman [90] ont introduit une porosité "effective" f^* dans le critère (1.10), telle que

³Le critère de Gurson a été établi par une approche micromécanique en considérant le cas d'une sphère creuse soumise à son bord à des conditions aux limites en déformation homogène. De plus amples précisions sur sa mise en œuvre sont fournies dans le chapitre 4.

$$\left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + 2q_1 f^* \cosh\left(\frac{3}{2}q_2 \frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right) - 1 - q_3 (f^*)^2 = 0 \quad (1.12)$$

avec

$$f^*(f) = \begin{cases} f & \text{si } f \leq f_c \\ f_c + \frac{f_u - f_c}{f_F - f_c} (f - f_c) & \text{si } f > f_c. \end{cases} \quad (1.13)$$

f_F représente la porosité à rupture finale telle que $f^*(f_F) = f_u = \frac{1}{q_1}$. f_c , f_u et f_F sont des paramètres qu'il convient d'ajuster en liaison avec les observations expérimentales. Ainsi, dès que f devient supérieure à f_c , la porosité f^* subit un changement de pente qui traduit l'accélération de la croissance de la porosité au voisinage de la coalescence. Le matériau perd ainsi toute résistance mécanique pour une porosité égale à f_u dont la valeur est inférieure à 1.

L'introduction des paramètres q_i et d'une porosité effective f^* permet bien de surmonter certaines faiblesses du critère de Gurson mais au prix d'un grand nombre de paramètres à ajuster. Les mécanismes locaux tels que la croissance de cavité et les interactions entre cavités sont décrits de manière heuristique, indépendamment de la microstructure du matériau poreux. Or les microstructures contenant des amas de cavités et celles à répartition uniforme de la porosité n'ont pas la même réponse sous une même sollicitation et n'ont pas les mêmes modes de déformations locaux. Des microstructures de morphologies diverses ne peuvent donc être décrites par un unique jeu de paramètres. Une modélisation plus sophistiquée de la rupture ductile, prenant en compte des informations statistiques sur la microstructure des milieux poreux, a récemment été proposée [11]. Nous aboutissons à des tendances similaires à celles obtenues par le critère G-T mais sans aucun ajustement de paramètre. Ce point est abordé en détail dans le chapitre 4.

Prise en compte de la nucléation (ou germination)

La nucléation résulte soit de la décohésion entre les particules et la matrice (ou de la rupture de particules), soit de la formation de cavités survenant lorsque la matrice atteint une déformation plastique critique. Ainsi, cette phase peut être pilotée soit par la composante hydrostatique de la contrainte macroscopique Σ_m , soit par la déformation plastique moyenne de la matrice ε^M . Chu et Needleman [25] ont ainsi proposé un modèle faisant intervenir les deux sources de nucléation où les deux constantes A et B sont exprimées par des lois gaussiennes normales :

$$\dot{f}_{\text{nucléation}} = A \left(\dot{\Sigma}_m + \dot{\Sigma}^M \right) + B \dot{\varepsilon}^M, \quad \text{avec} \quad \begin{cases} A = \frac{f_N}{s_N \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma^M + \Sigma_m - \sigma_N}{s_N} \right)^2 \right] \\ B = \frac{f_N}{s_N \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon^M - \varepsilon_N}{s_N} \right)^2 \right]. \end{cases}$$

s_N représente l'écart type de la distribution des déformations à rupture, f_N la fraction volumique d'inclusions pouvant participer à la germination, ε^M la déformation plastique effective et ε_N la déformation moyenne pour laquelle 50% des inclusions sont rompues. Lorsque que la nucléation est pilotée par la déformation plastique, la constante A est nulle, tandis que la constante B est nulle lorsque la décohésion domine. Les quantités Σ^M et ε^M sont liées par la loi d'érouissage de la matrice.

Prise en compte de l'écroutissement

La démarche adoptée par Gurson pour traiter le cas d'une matrice écroutissable ne dérive pas vraiment d'une approche micromécanique mais plutôt d'un traitement phénoménologique qui consiste à remplacer le matériau réel par un matériau fictif présentant la même loi d'écroutissage, négligeant ainsi l'hétérogénéité de l'écroutissage au sein du matériau réel. La loi d'écroutissage du matériau fictif n'est plus fonction de la déformation plastique cumulée mais d'une déformation équivalente $\bar{\varepsilon}$

$$\bar{\sigma} = \sigma(\bar{\varepsilon}),$$

déterminée par identification entre le potentiel de dissipation plastique du matériau réel et celui du matériau fictif :

$$\Pi(\dot{E})_{Reel} = \Pi(\dot{E})_{Fictif}.$$

Le potentiel de dissipation plastique étant naturellement nul dans les pores, la loi d'évolution de $\bar{\varepsilon}$ est donc donnée par :

$$\Sigma : \dot{E} = (1 - f)\bar{\sigma} : \dot{\varepsilon};$$

Ainsi, le critère de Gurson s'écrit comme suit dans le cas d'un milieu poreux à matrice écroutissable :

$$\left(\frac{\Sigma_{eq}}{\bar{\sigma}}\right)^2 + 2f \cosh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\bar{\sigma}}\right) - 1 - f^2 = 0; \quad (1.14)$$

expression obtenue en remplaçant dans (1.7) la limite d'élasticité de la matrice σ_0 par $\bar{\sigma}$. Cette démarche conduit à une surestimation de la vitesse de croissance des cavités [67] (voir aussi [52]), surestimation qui a l'interprétation physique suivante [23] : l'hétérogénéité de la déformation plastique est très importante au bord des cavités et entraîne donc un durcissement de la matrice dans cette zone. Ce durcissement a pour effet de ralentir la croissance des cavités et celui-ci n'est pas pris en compte par la modification du critère de Gurson présentée plus haut. Perrin propose alors d'introduire deux variables macroscopiques, σ_1^M et σ_2^M , remplaçant le critère de Gurson modifié (1.14) par :

$$\left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_1^M}\right)^2 + 2f \cosh\left(\frac{3}{2} \frac{\Sigma_m}{\sigma_2^M}\right) - 1 - f^2 = 0, \quad (1.15)$$

variables qui dépendent uniquement de deux paramètres de déformation macroscopique, respectivement les déformations plastiques déviatoriques et hydrostatiques cumulées E_{eq} et E_m telles que :

$$E_{eq} = \int_0^t \sqrt{\frac{2}{3} \text{dev} \dot{E} : \text{dev} \dot{E}} ds \quad \text{et} \quad E_m = \int_0^t |\dot{E}_m| ds.$$

1.1.4 Modèle couplé : Critère elliptique

Les approches variationnelles récentes en homogénéisation non-linéaire dues à Suquet [82] et Ponte Castañeda [70] permettent d'obtenir, pour les milieux poreux isotropes, un critère de plasticité elliptique dont l'expression est donnée ci-dessous :

$$F(\Sigma_{eq}, \Sigma_m, f) = \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + \frac{9}{4}f \left(\frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right)^2 - (1 - f)^2 = 0. \quad (1.16)$$

Ce critère possède le statut de borne supérieure rigoureuse pour toute microstructure dont les pores sont distribués de manière isotrope. Il est appelé borne de Hashin-Shtrikman (ou borne HS). C'est une borne supérieure rigoureuse pour tous les taux de triaxialité. La contrainte d'écoulement prévue par ce modèle pour un chargement en cisaillement pur améliore la borne de Gurson (1.7) :

$$\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} = \frac{1-f}{\sqrt{1+\frac{2}{3}f}},$$

expression qui peut se mettre sous la forme simplifiée suivante dans l'hypothèse des faibles fractions volumiques :

$$\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} \simeq 1 - \frac{4}{3}f.$$

Cette dernière expression de la contrainte d'écoulement est similaire à celle issue du critère G-T avec une valeur de $q_1 = \frac{4}{3}$.

En revanche, la contrainte d'écoulement en pression hydrostatique pure prévue par le critère (1.16) est plus élevée que celle obtenue par Gurson. Dans cette optique, Michel et Suquet [61] proposent de remplacer dans (1.16) le coefficient $\frac{9}{4}f$ par $\frac{9}{4} \left(\frac{1-f}{\ln(f)} \right)^2$, définissant ainsi un nouveau critère elliptique qui s'identifie en cisaillement pur à la borne de Hashin-Shtrikman et retrouve en pression hydrostatique pure la borne de Gurson. Néanmoins, pour des valeurs de triaxialité intermédiaires, ce critère ne constitue qu'une estimation de la surface d'écoulement.

Le second inconvénient de ce critère réside, comme pour tout critère elliptique, dans la prédiction d'une vitesse de croissance des cavités qui dépend linéairement de la triaxialité des contraintes macroscopiques. La loi de normalité associée au critère de plasticité (1.16) conduit en effet à l'estimation suivante de la vitesse de croissance de cavité :

$$\frac{\dot{f}_{\text{croissance}}}{\dot{E}_{eq}f} = \frac{9}{4} \left(\frac{1-f}{1+\frac{2}{3}f} \right) \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}. \quad (1.17)$$

Cette dernière expression est en contradiction avec la dépendance exponentielle de la vitesse de croissance de cavité avec la triaxialité des contraintes traduite par la relation de Rice et Tracey (1.6), dépendance globalement conforme à l'expérience.

1.1.5 Critère de Rousselier

Contrairement aux deux modèles de plasticité présentés précédemment, le critère de Rousselier [79] ne dérive pas d'une démarche micromécanique mais d'une analyse purement thermodynamique dans laquelle l'endommagement est caractérisé par une variable interne. Le potentiel plastique F est décomposé en la somme de deux termes, F_1 et F_2 , selon :

$$F(\tilde{\Sigma}, P, D) = F_1(\tilde{\Sigma}_{eq}, P) + F_2(\tilde{\Sigma}_m, D), \quad (1.18)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\Sigma} = \frac{\Sigma}{\rho} \\ \rho : \text{Masse volumique du matériau endommagé} \\ p : \text{Variable d'écrouissage} \\ d : \text{Variable d'endommagement} \\ P : \text{Force thermodynamique associée à } p \\ D : \text{Force thermodynamique associée à } d \\ R(p) : \text{Limite d'écoulement du matériau sain} \end{array} \right. \quad (1.19)$$

et :

$$\left\{ \begin{array}{l} F_1(\tilde{\Sigma}_{eq}, P) = \tilde{\Sigma}_{eq} - R(p) \\ F_2(\tilde{\Sigma}_m, D) = A \exp\left(\frac{\tilde{\Sigma}_m}{\sigma_1}\right) \frac{\sigma_1 f_0 \exp(d)}{1 - f_0 + f_0 \exp(d)} \end{array} \right. \quad (1.20)$$

F_1 représente l'écoulement plastique du matériau sans endommagement et F_2 traduit l'effet de l'endommagement sur le matériau poreux au travers de la pression hydrostatique et de la variable d'endommagement d . f_0 correspond à la porosité initiale du matériau et est liée à la porosité actuelle f et à la masse volumique ρ par :

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{1 - f}{1 - f_0},$$

ρ_0 étant la masse volumique initiale du matériau. La constante σ_1 dans (1.20b) est directement liée à la limite d'élasticité de la matrice σ_0 par : $\sigma_1 = \frac{2}{3}\sigma_0$ et l'évolution de la variable d'endommagement d est pilotée par la pression hydrostatique macroscopique $\tilde{\Sigma}_m$ et par la variable d'écrouissage p selon :

$$\dot{d} = A \exp\left(\frac{\tilde{\Sigma}_m}{\sigma_1}\right) \dot{p}.$$

Dans le cas de cavités sphériques, avec $A = 3 \times 0,283$, la loi de croissance de cavité obtenue à partir du critère de Rousselier correspond à celle obtenue par Rice et Tracey (1.6).

Bien que reposant sur des approches différentes, les critères de Rousselier et de Gurson présentent une grande analogie. Dans la limite des faibles fractions volumiques f et des fortes triaxialités, le critère de Gurson prend la forme simplifiée suivante [79] :

$$\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} + \frac{1}{2}f \exp\left(\frac{3}{2}\frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right) - 1 = 0. \quad (1.21)$$

En prenant, pour simplifier, $\rho = \rho_0 = 1$, il n'y a pas d'évolution de l'endommagement au cours du chargement et, en prenant $A = 3 \times 0,25$ et $R(p) = \sigma_0$, le critère de Rousselier (1.18) et (1.20) se réduit à la forme simplifiée du critère du Gurson (1.21).

Notons également que le critère de Rousselier prévoit que la surface d'écoulement du milieu poreux coupe l'axe des pressions hydrostatiques avec une pente finie. Cette pente est infinie dans le cas de critère de Gurson. Des simulations 2D récentes sur des cavités cylindriques, effectuées par Francescato et coll [32] et Pastor et Ponte Castañeda [65], montrent bien, dans le cadre des contraintes planes et des déformations planes respectivement, le caractère fini de la pente au voisinage de l'axe des pressions hydrostatiques. Ce point est abordé plus en détail dans le chapitre 3, à partir de simulations numériques basées sur la transformée de Fourier rapide.

1.2 Rupture fragile : mécanismes et critères associés

La rupture fragile résulte de l'initiation d'une micro-fissure sur un défaut et de la propagation de celle-ci soit le long d'un joint de grains, conduisant à une rupture intergranulaire, soit à l'intérieur d'un grain, conduisant à une rupture transgranulaire ou de clivage. La rupture par clivage est le mécanisme de rupture fragile le plus souvent rencontré dans l'acier de cuve et est directement lié à la microstructure du matériau. Le clivage prend naissance sur des défauts microstructuraux tels que des petites particules, induisant une hétérogénéité de contraintes pouvant initier et faire propager une micro-fissure. La rupture fragile est relativement bien décrite par des modèles tels que celui de Beremin [6], modèle probabiliste de la rupture fragile par clivage. Avant d'aborder plus en détail ce modèle ainsi que les hypothèses sur lesquelles il est fondé, il est utile de faire un point bref sur les aspects énergétiques de la rupture fragile, au sens de Griffith, afin d'établir un critère de propagation d'une fissure, présumé par le critère de Beremin.

1.2.1 Analyse énergétique de la rupture fragile

La théorie énergétique de Griffith [38] permet d'aboutir, d'un point de vue global, à un critère de propagation quasi-statique d'une fissure. Cette théorie est basée sur un bilan énergétique avant et après propagation de la fissure associant l'énergie de surface créée par l'avancée de la fissure [84]. Dans un souci de simplicité, nous nous plaçons dans le cadre des petites déformations et de l'élasticité linéaire. Considérons un élément bidimensionnel d'épaisseur unité de volume V contenant une fissure Γ de longueur l et soumis sur son bord extérieur ∂V à une densité de forces T^d sur ∂V^S et à un déplacement u^d sur ∂V^d (Figure 1.2).

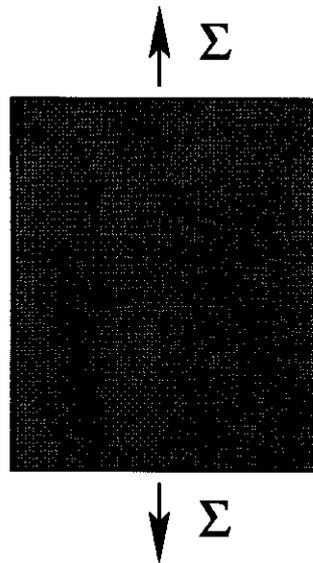


FIG. 1.2 – Élément fissuré

L'énergie potentielle $E_p(l)$ dans le volume $V - \Gamma$, somme de l'énergie élastique $W(l)$ et du potentiel des efforts extérieurs $-L(l)$, est donnée par la résolution du problème de minimisation suivant :

$$E_p(l) = W(l) - L(l) = \min_{u=u^d \text{ sur } \partial V^d} \left\{ \frac{1}{2} \int_{V-\Gamma} \sigma : \varepsilon(u) \, d(V-\Gamma) - \int_{\partial V} T^d \cdot u \, dS \right\}, \quad (1.22)$$

pour tout champ de déplacement u cinématiquement admissible avec u^d . L'énergie de surface due à la présence d'une fissure dans l'élément de volume est proportionnelle à la longueur de cette fissure et s'exprime en fonction de l'énergie de surface γ selon :

$$E_s = 2\gamma l. \quad (1.23)$$

Sous l'application des sollicitations T^d et u^d , l'élément de volume emmagasine de l'énergie apportée par le milieu extérieur. Deux scénarios sont alors possibles : soit la fissure ne se propage pas, soit elle avance d'une quantité dl . Cette avancée se traduit comme une restitution de l'énergie emmagasinée par l'élément de volume qui ne peut plus absorber d'énergie provenant du milieu extérieur. Pour établir son critère de propagation, Griffith propose de prendre la situation la moins énergétique. Si :

$$E_p(l) + E_s(l) < E_p(l + dl) + E_s(l + dl),$$

la fissure reste stable et ne se propage pas. En revanche si :

$$E_p(l) + E_s(l) \geq E_p(l + dl) + E_s(l + dl),$$

la fissure se propage d'une longueur dl . Cette dernière expression peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{E_p(l + dl) - E_p(l)}{dl} + 2\gamma \geq 0. \quad (1.24)$$

En définissant le taux de restitution d'énergie G par:

$$G = -\frac{dE_p(l)}{dl}$$

et à l'aide de l'inégalité (1.24), le critère de propagation s'écrit finalement :

$$\begin{cases} G < 2\gamma & \text{fissure stable} \\ G \geq 2\gamma & \text{propagation de la fissure.} \end{cases} \quad (1.25)$$

Un taux de restitution d'énergie critique G_c à partir duquel la fissure se propage (i.e., lorsque $G = G_c = 2\gamma$) peut être défini. L'inégalité $G > G_c$ est un cas exclu car incompatible avec l'hypothèse d'une évolution quasi-statique. Les grandeurs G et G_c sont inconnues mais peuvent être reliées à des grandeurs issues d'une approche locale de la mécanique de la rupture fragile.

En pointe de fissure, le champ de contrainte présente un comportement asymptotique en $1/\sqrt{r}$ où r est la distance à la pointe de fissure. Ce champ de contrainte est directement proportionnel à des paramètres scalaires K_I , K_{II} et K_{III} , facteurs d'intensité de contraintes, qui traduisent les différents modes de la propagation d'une fissure, respectivement ouverture (mode I), cisaillement plan (mode II) et cisaillement antiplan (mode III). Ces facteurs d'intensité de contrainte dépendent directement de la géométrie de la pièce et de la fissure et du chargement macroscopique appliqué sur la structure. Dans le cas d'une sollicitation orthogonale au plan de la fissure et d'un milieu infini, l'expression du facteur d'intensité de contrainte K_I est fonction du chargement appliqué à l'infini Σ et de la longueur l de la fissure :

$$K_I = \Sigma \sqrt{\pi \frac{l}{2}} \quad (1.26)$$

Dans le cas d'un milieu fini, l'expression du facteur d'intensité de contrainte est fonction d'une constante A qui dépend de la géométrie du milieu :

$$K_I = A\Sigma\sqrt{l}. \quad (1.27)$$

Le critère de propagation de fissure proposé par Irwin en 1957 porte sur ces facteurs d'intensité de contraintes. En mode I, Irwin postule qu'il existe une valeur critique de K_I , appelée ténacité et notée K_{Ic} , qui dépend des caractéristiques du matériau. Si la longueur de la fissure est donnée, alors la contrainte critique dans un milieu infini au-delà de laquelle la fissure va se propager est définie selon :

$$\Sigma_c = K_{Ic}\sqrt{\frac{2}{l_c\pi}}.$$

Si la contrainte est donnée, alors la longueur critique de la fissure est définie selon :

$$l_c = \frac{2}{\pi} \left(\frac{K_{Ic}}{\Sigma_c} \right)^2. \quad (1.28)$$

Pour le mode I, Irwin relie la ténacité au taux de restitution d'énergie critique par :

$$K_{Ic} = \sqrt{\frac{8\mu G_c}{k+1}} \quad (1.29)$$

Plus généralement, pour un milieu élastique isotrope, le taux de restitution d'énergie peut être relié aux facteurs d'intensité de contraintes par (relation d'Irwin) :

$$G = \frac{k+1}{8\mu} (K_I^2 + K_{II}^2) + \frac{1+\nu}{E} K_{III}^2,$$

où $k = \frac{3-\nu}{1+\nu}$ en contraintes planes et $k = 3-4\nu$ en déformations planes; ν est le coefficient de Poisson, μ le module d'élasticité en cisaillement et E le module de Young.

A l'aide des équations (1.28) et (1.29), la longueur critique de la fissure est reliée à l'énergie de surface γ par :

$$\frac{l_c}{2} = \frac{16\mu\gamma}{\pi(k+1)\Sigma_c^2}. \quad (1.30)$$

On retrouve ainsi la relation de Griffith. Cette relation permet d'établir la longueur de fissure critique l_c au delà de laquelle la fissure va se propager et conduire à la ruine de la structure pour une contrainte Σ_c imposée en traction. Elle est fonction des propriétés mécaniques du matériau, du chargement appliqué au bord de l'élément de volume ainsi que de l'énergie de surface.

1.2.2 Modèle probabiliste : le critère de Beremin

Le critère de Beremin [6] constitue une approche probabiliste de la mécanique de la rupture fragile par clivage, basé sur l'hypothèse du maillon faible. L'idée consiste à calculer la probabilité de rupture P_R d'une structure de volume V soumise à un état de chargement donné λ . Ceci est rendu possible grâce à l'utilisation de la théorie du maillon le plus faible qui consiste d'une part à subdiviser l'élément de volume V en n volumes élémentaires V_0 , également appelés mailles, supposés de taille identique, et, d'autre part, à émettre l'hypothèse que la rupture d'une maille entraîne la ruine totale de la structure.

Les mailles, supposées ne contenir qu'une fissure et une seule, doivent être statistiquement indépendantes. Une fissure ne peut être contenue dans deux ou plusieurs mailles. L'indépendance statistique des mailles implique que la probabilité de la non-rupture de la structure de volume V , sous un chargement quelconque λ , $1 - P_R(V, \lambda)$, est égale à la probabilité de non rupture de l'ensemble des mailles de volume V_0 , $1 - p_r(V_0, \sigma_i)$, soumise chacune à un état de contrainte σ_i , conséquence qui peut s'écrire :

$$1 - P_R(V, \lambda) = \prod_{i=1}^n [1 - p_{r_i}(V_0, \sigma_i)], \quad (1.31)$$

ou encore :

$$\ln(1 - P_R(V, \lambda)) = \sum_{i=1}^n \ln(1 - p_{r_i}(V_0, \sigma_i)), \quad (1.32)$$

cette expression a été obtenue sans émettre la moindre hypothèse sur les probabilités de rupture des mailles $p_{r_i}(V_0)$. L'expression (1.32) constitue donc la forme la plus générale qui puisse être obtenue à partir de la théorie du maillon faible. En faisant l'hypothèse que la probabilité de rupture des mailles est faible, la relation (1.32) devient :

$$\ln(1 - P_R(V, \lambda)) \simeq - \sum_{i=1}^n p_r(V_0, \sigma_i). \quad (1.33)$$

Dans le cas d'une structure soumise à une contrainte homogène, la relation (1.33) donnant la probabilité de rupture de la structure sous un chargement λ s'écrit à partir de (1.33) :

$$P_R(V, \lambda) = 1 - \exp(-n p_r(V_0, \sigma)) = 1 - \exp\left(-\frac{V}{V_0} p_r(V_0, \sigma)\right), \quad (1.34)$$

où l'influence de la taille de la structure sur la probabilité de rupture est mise en évidence; celle-ci augmente avec le volume de la structure.

Si la structure est maintenant soumise à une contrainte hétérogène, elle peut être subdivisée en un grand nombre de volumes élémentaires δV , chacun étant soumis à une contrainte σ homogène. La probabilité de rupture de la structure devient donc :

$$P_R(V, \lambda) = 1 - \exp\left[-\sum \frac{\delta V}{V_0} p_r(V_0, \sigma)\right] = 1 - \exp\left[-\int_V p_r(V_0, \sigma) \frac{dV}{V_0}\right]. \quad (1.35)$$

Afin d'établir une expression analytique de P_R , il convient à présent d'estimer p_r dont l'expression reste jusqu'ici inconnue.

Selon Beremin, la probabilité $P(l_0)$ de trouver une fissure de longueur comprise entre l_0 et $l_0 + dl_0$ dans une maille est asymptotiquement, pour l_0 grand (Figure 1.3) :

$$P(l_0) = \frac{\alpha}{l_0^\beta} \quad (1.36)$$

Ainsi, la probabilité de rupture d'une maille de volume V_0 soumise à une contrainte σ_i est égale à la probabilité de trouver une fissure de longueur supérieure à la longueur critique l_{0c} (Figure 1.3) :

$$p_r(V_0, \sigma) = \int_{l_{0c}}^{+\infty} P(l_0) dl_0 = \frac{\alpha}{\beta - 1} l_{0c}^{1-\beta} \quad \text{si } \beta > 1. \quad (1.37)$$

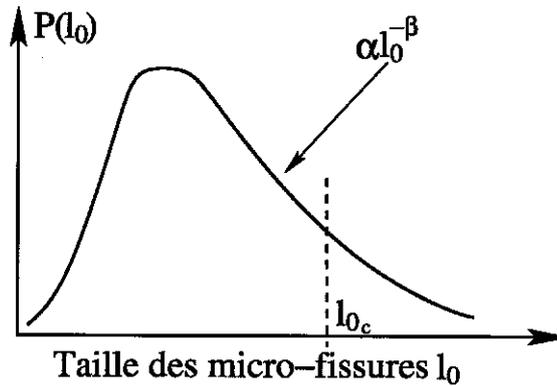


FIG. 1.3 – Représentation schématique de la distribution de la taille des défauts

Le clivage ne résultant que d'une rupture des liaisons interatomiques dans une direction perpendiculaire au plan de rupture [33], soit selon le mode I de la mécanique de la rupture, l'expression de la longueur critique au-delà de laquelle la fissure se propage est donnée par la relation (1.28), relation qui, combinée avec (1.37), permet d'obtenir la probabilité de rupture d'une maille :

$$p_r(V_0, \sigma) = \left(\frac{\sigma}{\sigma_u}\right)^m \quad \text{avec} \quad \begin{cases} m = 2\beta - 2 > 0 \\ \sigma_u = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\beta - 1}{\alpha}\right)^{\frac{1}{m}} K_{Ic} \end{cases} \quad (1.38)$$

m et σ_u sont les paramètres de Weibull que l'on détermine par un couplage de données expérimentales et de calculs par éléments finis [22]. Ainsi, la probabilité de rupture d'une structure de volume V soumise à un chargement λ s'exprime en fonction des paramètres de Weibull et du volume des mailles par :

$$P_R(V, \lambda) = 1 - \exp \left[- \int_V \left(\frac{\sigma}{\sigma_u}\right)^m \frac{dV}{V_0} \right]. \quad (1.39)$$

La contrainte σ est assimilée à la contrainte principale maximale positive. Le déclenchement du clivage étant favorisé par l'apparition de déformation plastique, le volume V dans l'expression (1.39) représente le volume V_p de la structure qui a été plastifié.

L'expression (1.39) peut également s'écrire sous la forme suivante, faisant intervenir la contrainte de Weibull σ_w :

$$\begin{cases} P_R(V, \lambda) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u}\right)^m \right] \\ \sigma_w = \left(\int_{V_p} \sigma^m \frac{dV}{V_0} \right)^{\frac{1}{m}} \end{cases} \quad (1.40)$$

Cette dernière expression de la probabilité de rupture est facile d'utilisation en post - traitement de calculs par éléments finis. Notons que le critère de Beremin dépend clairement du volume de la structure. De plus, le volume de la maille V_0 doit être assez grand pour que la probabilité d'y trouver une fissure de taille suffisante ne soit pas trop faible. En revanche, il ne doit pas être trop grand afin de conserver l'hypothèse d'indépendance statistique des mailles. Généralement, dans les aciers, le volume élémentaire V_0 est pris égal à $50\mu m^3$

1.2.3 Déformation plastique en pointe de fissure

Selon la théorie de l'élasticité linéaire, le champ de contrainte en pointe de fissure présente un comportement asymptotique en $1/\sqrt{r}$ où r est la distance à la pointe de fissure. Ceci ne tient pas compte d'une plastification du fond de fissure. Le gradient de contrainte réel peut être mieux décrit par le champ de contrainte introduit par Hutchinson, Rice et Rosengren (champ HRR) dans le cas de la plasticité confinée⁴. Celui-ci s'exprime en fonction du facteur d'intensité de contrainte K , de la limite d'élasticité de la matrice σ_0 et de deux fonctions f et g dépendant du coefficient d'écroûissage du matériau par :

$$\sigma = \sigma_0 g(\theta) f(u),$$

avec $u = \frac{r}{(K/\sigma_0)^2}$. Le couple (r, θ) correspond aux coordonnées cylindriques d'un point situé à une distance r de la pointe de fissure et dont le rayon vecteur fait un angle θ avec le plan de la fissure. En injectant ce champ de contrainte dans l'expression de la probabilité de rupture (1.40), le facteur d'intensité de contrainte critique K_{Ic} s'exprime en fonction de P_R par :

$$K_{Ic} = \left[\ln \left(\frac{1}{1 - P_R} \right) \left(\frac{V_0 \sigma_u^m}{BC_m} \right) \right]^{\frac{1}{4}} \sigma_0^{1 - \frac{m}{4}}, \quad (1.41)$$

où la relation $dV = B(rdrd\theta)$ a été utilisée. La constante B représente l'épaisseur de l'éprouvette et C_m est une constante qui dépend du paramètre de Weibull m et du coefficient d'écroûissage de la matrice. La relation (1.41) traduit le fait que la ténacité évolue avec l'épaisseur B de l'éprouvette. De même, une variation de température se traduit par une variation de la limite d'élasticité du matériau qui induit, au travers de la relation (1.41), une variation de K_{Ic} : plus la température augmente, plus la limite d'élasticité diminue et donc plus la ténacité augmente.

L'expression (1.41) permet de prendre en compte la dispersion des tenacités obtenues expérimentalement par essais sur mouton Charpy. En effet, cette expression donne une valeur du facteur d'intensité de contrainte critique K_{Ic} pour une probabilité de rupture P_R de l'éprouvette.

Une illustration schématique de l'encadrement des résultats expérimentaux par la relation (1.41) pour deux valeurs de P_R est donnée sur la figure (1.5).

1.3 Contexte industriel de l'étude

Il est temps maintenant de préciser plus complètement le contexte industriel de notre étude et ses enjeux. Dans son domaine de fonctionnement nominal, l'acier de cuve est, du point de vue de la rupture, sollicité dans son domaine ductile. Sous l'effet de l'irradiation qu'il subit au cours de l'exploitation, l'acier se fragilise, risquant, à terme, de fonctionner dans son domaine de transition fragile - ductile⁵, domaine où règne une compétition entre les mécanismes de la rupture fragile (rupture par clivage) et de la rupture ductile (germination, croissance et coalescence de cavité). Afin de suivre l'évolution du domaine de transition fragile - ductile de l'acier de cuve au cours de son exploitation, des campagnes d'essais sur mouton Charpy sont menées périodiquement (Figure 1.4). Cet essai consiste à rompre un barreau entaillé par un impact sur ce dernier à l'aide d'un mouton-pendule. L'énergie absorbée par le barreau pour se rompre est appelé résilience. Cette

⁴En réalité, le champ réel est émoussé par l'écoulement plastique.

⁵Ceci n'est en réalité valable que dans des situations accidentelles tels qu'un choc froid pressurisé suite à une brèche sur le circuit primaire. L'acier en peau interne de la cuve, fragilisé par l'irradiation, pourrait alors "voir" une température de son domaine de transition

énergie recouvre l'ensemble des mécanismes locaux mis jeu lors de l'impact : déchirure ductile, propagation de fissure, etc. Notons l'effet fragilisant de la vitesse de déformation du matériau sur la courbe de résilience : plus la vitesse d'impact est élevée, plus la courbe de résilience est décalée vers les hautes températures.

Comme l'illustre la figure 1.4, l'irradiation tend à abaisser le palier ductile de l'acier et décale sa zone de transition vers les hautes températures. Aux basses températures, l'acier de cuve a plutôt un comportement de type fragile : il nécessite peu d'énergie pour se rompre et les mécanismes locaux, notamment ceux de clivage, sont relativement bien décrits par le critère de Beremin. Aux hautes températures, l'acier a plutôt un comportement ductile : l'énergie emmagasinée par l'acier pour se rompre est plus importante. Les mécanismes locaux mis en jeu dans ce domaine sont relativement bien décrits par des modèles tels que ceux de Gurson ou de Rousselier.

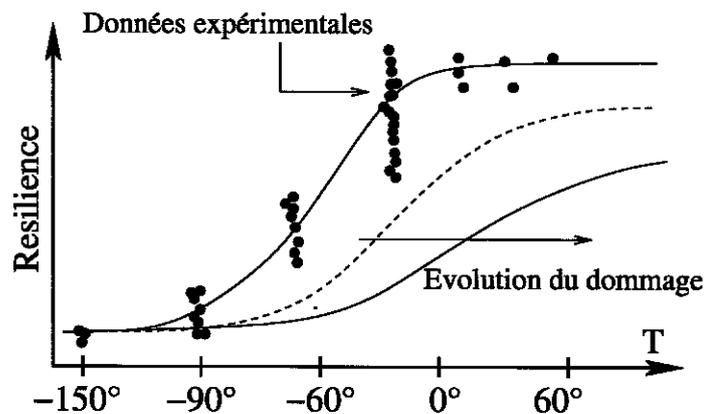


FIG. 1.4 – Représentation schématique de l'évolution de la transition fragile - ductile obtenue par essais sur mouton Charpy

Bien que les paliers ductiles et fragiles soient correctement décrits par les modèles de Gurson [39] (ou Rousselier [79]) et Beremin [6] respectivement, ces modèles sont incapables à eux seuls de décrire l'ensemble des mécanismes locaux mis en jeu dans la zone de transition fragile - ductile. En effet, une confrontation entre le critère de Beremin et les énergies à rupture obtenues expérimentalement (Figure 1.5) permet de mettre en évidence le caractère insuffisamment prédictif de ce dernier dans la zone de transition.

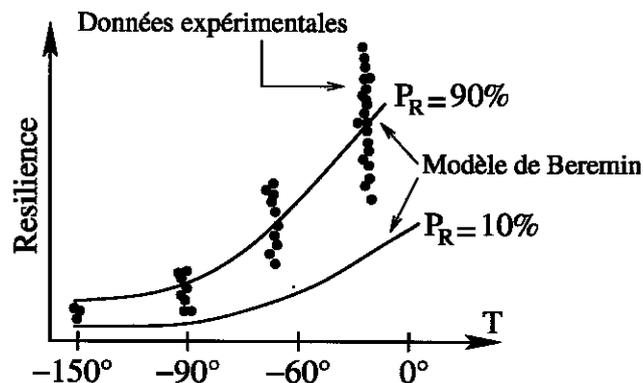


FIG. 1.5 – Représentation schématique de la sous estimation de l'augmentation de la ténacité par le critère de Beremin

Le critère de Beremin décrit correctement la dispersion des résultats expérimentaux obtenue aux basses températures. En revanche il sous-estime l'augmentation de la ténacité avec la température. Cette faiblesse peut être surmontée par un simple ajustement des paramètres de Weibull m et σ_u avec la température : $m = m(T)$ et $\sigma_u = \sigma_u(T)$. Ceci revient à faire dépendre les paramètres de Weibull de la température et donc nécessite de disposer d'un jeu de paramètres par température. Cette démarche purement phénoménologique ne permet pas de prendre en compte les mécanismes locaux mis en jeu dans la zone de transition fragile - ductile. Cette mauvaise prise en compte de l'élévation de l'énergie à rupture en fonction de la température conduit à prévoir un endommagement précoce de l'acier de cuve et donc à sous-estimer sa durée de vie.

Des observations expérimentales récentes [75] ont montré la présence d'amas de sulfure de manganèse (MnS) au voisinage de sites de clivage (Figure 1.6) [55]. Ces amas sont soupçonnés jouer le rôle de

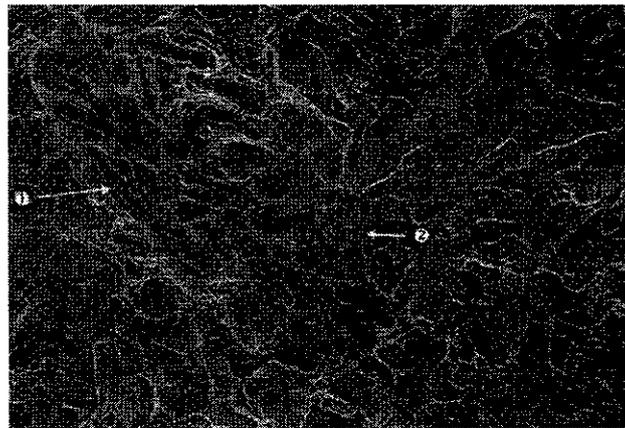


FIG. 1.6 – Amas de Sulfure de Manganèse. Extrait de la thèse de Renevey [75]

concentrateur de contrainte, favorisant le déclenchement du clivage sur des défauts tels que des carbures proches. Le travail entrepris au cours de cette thèse vise à analyser cette hypothèse par l'étude micromécanique de la présence de tels amas sur les champs de déformation locaux et sur l'activation des mécanismes ductiles et fragiles. En cohérence avec certaines données expérimentales, nous supposons que la décohésion entre la matrice et les particules de MnS s'opère dès les premiers stades de chargement ⁶.

Une analyse inclusionnaire des particules de MnS sur un acier de cuve a révélé, grâce à un traitement d'analyse d'images, que leur forme était plutôt ellipsoïdale avec des dimensions moyennes, selon les directions longitudinale, transverse et axiale, respectivement de $12\mu\text{m}$, $10\mu\text{m}$ et $8\mu\text{m}$ [75]. La forme ellipsoïdale est toutefois peu prononcée. La teneur du matériau en particules de MnS est très faible et fluctue selon les cuves considérées : elle varie approximativement entre $f_s = 0,0175\%$ [88] et $f_s = 0,09\%$ [75] et tend à fluctuer légèrement selon la direction d'observation. La distance inter-inclusionnaire est de l'ordre de 40 à 50 μm selon la direction d'observation [43]. L'analyse d'images effectuée par Renevey [75] sur une face orthogonale à la direction transverse montre que les particules de MnS sont regroupées en amas distants d'environ 0,5 à 1 millimètre mais la nature de l'amas reste pour le moment inconnue. Une modélisation par éléments finis récente [42] [43] montre que l'influence de la présence d'amas de MnS dans la rupture ductile est importante; elle est

⁶Notons que, dans la réalité, certaines particules de MnS ne se décollent pas forcément de la matrice. Toutefois cette hypothèse va considérablement simplifier le développement et l'utilisation des outils de changement d'échelle qui seront utilisés au cours de cette thèse. Une campagne d'essais plus poussée à différentes températures permettra de délimiter le domaine de validité de cette hypothèse.

faible en revanche pour ce qui est du déclenchement du clivage. Toutefois, cette dernière conclusion n'est tirée qu'à partir de l'étude d'une unique cavité de forme ellipsoïdale représentant un amas de MnS.

Dans notre étude, les particules de MnS seront assimilées, pour des raisons de simplicité, à des trous de forme sphérique ou cylindrique. La prise en compte de la température se fera au travers des seules courbes d'écroutissage de l'acier de cuve, obtenues expérimentalement [75] (Figure 1.7).

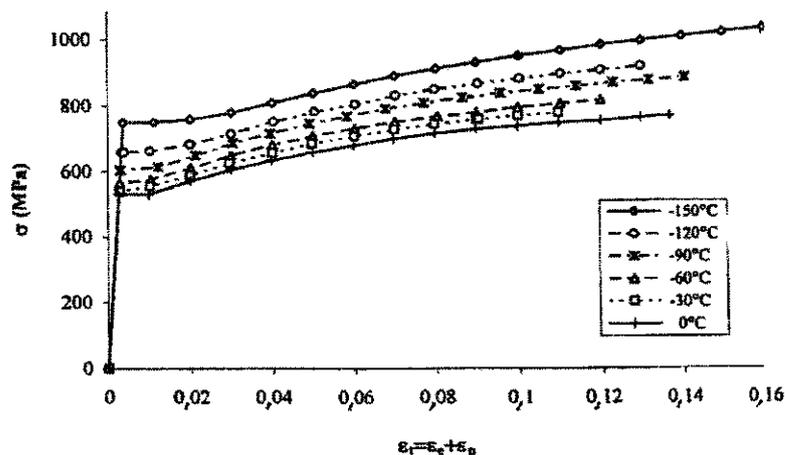


FIG. 1.7 – Courbe d'écroutissage de l'acier de cuve. Extrait de la thèse de Renevey [75]

La démarche envisagée vise à utiliser ou à développer des modèles de changement d'échelle, numériques et analytiques, afin de rendre compte de l'effet d'une répartition hétérogène d'amas sur les mécanismes locaux mis en jeu dans la zone de transition fragile - ductile. De telles méthodes de changement d'échelle permettent d'estimer le comportement macroscopique d'une structure à l'échelle d'un volume élémentaire représentatif et donnent accès aux champs locaux dans ce dernier au voisinage des pores et des amas de pores.

La rupture fragile est abordée au travers du critère de Beremin, critère qui est appliqué à partir des champs locaux issus des modèles de changement d'échelle. L'application de ce critère à partir de la seule contrainte principale maximale macroscopique issue des modèles de changement d'échelle aurait pour effet de masquer les fluctuations des champs locaux qui peuvent s'avérer décisives pour l'activation des mécanismes locaux. Une étape d'évolution de la microstructure au travers de la croissance de cavités couplée au critère de Beremin permettrait de représenter la compétition entre les mécanismes locaux dans la zone de transition : croissance de cavités et rupture par clivage.

Avant de rentrer un peu plus dans le détail des modèles de changement d'échelle, nous présentons un petit détour par une étude expérimentale visant d'une part à valider les hypothèses émises précédemment et, d'autre part, à montrer l'importance des hétérogénéités des champs locaux induites par la présence de particules de MnS.

1.4 Mesure des champs locaux

La mesure des champs locaux à la surface d'une éprouvette de traction, dans des zones bien définies, est une étape importante pour une meilleure compréhension des phénomènes locaux mis en jeu.

Celle-ci est rendue possible grâce à un marquage de la surface et à une technique de corrélation des images des zones étudiées, prises à différentes étapes de chargement. Le lecteur intéressé par plus de détails concernant ces techniques expérimentales se reportera à Bornert [15], Bretheau [20] ou Doumalin [30]. Dans l'étude que nous rapportons ici, ces techniques permettront la mise en évidence de l'hétérogénéité des champs locaux due non seulement à la présence de particules de MnS mais aussi à la présence de paquets de cémentite, à une échelle beaucoup plus fine, au travers d'un essai de traction mené dans le cadre d'un partenariat entre l'ENSAM de Metz (LPMM), le LMS et EDF. Ces paquets de cémentite sont également soupçonnés être une source potentielle de déclenchement du clivage. Le lecteur intéressé pourra se référer à [69] pour de plus amples informations sur les mécanismes microstructuraux responsables du déclenchement du clivage.

1.4.1 Technique des micro-grilles

Le principe de la technique de corrélation d'images consiste à comparer deux images, dites image de "référence" et image "déformée", afin de déterminer le champ de déplacement en différents points de l'image. Cette technique nécessite donc la connaissance des coordonnées d'un même repère dans l'image de référence et l'image déformée, afin d'évaluer son déplacement par différence. En raison du changement de niveau de gris local que subit l'image lors des différentes acquisitions, cette méthode ne peut fonctionner que si le contraste du repère considéré est différent du contraste de ses points voisins. En l'absence de contraste naturel dans le matériau ou de détails à la surface du matériau qui persistent au cours de la déformation, on a recours à un marquage de la surface servant de repère. Les marquages sont de nature diverse [15] : ils peuvent être déposés aléatoirement, par exemple, par projection de peinture (mouchetis); ils peuvent aussi présenter une géométrie régulière, horizontale et verticale ou consister en un arrangement de points régulièrement espacés; il sont obtenus par dépôt d'or par microlithographie [1] (Voir Annexe A). Cette dernière technique permet une analyse plus fine des champs de déformations locaux.

Le matériau que nous utilisons pour cet essai provient de la débouchure de virole d'un acier 16MND5 forgé par Framatome pour Kawasaki en 1984. Sa teneur en soufre est quatre fois plus faible que celle du matériau qui va être étudié dans le chapitre 2; ce dernier est fourni par EDF et provient de la débouchure de la virole B de la cuve 12. Ceci explique le faible nombre de particules de MnS observé sur ce premier matériau.

Cette faible teneur du matériau en particules de MnS ne nous permettra pas d'étudier les champs locaux inter- et intra amas. Nous nous limiterons au cas de particules isolées. Parmi les sites étudiés, nous comptons cinq sites comprenant une particule de taille variant de 5 à 20 μm et de formes différentes (sphérique et ellipsoïdale) et un site comprenant un grain (Figures 1.9c). Ce dernier a pour but de mettre en évidence plus facilement l'influence de la répartition en paquets des particules de cémentite, du fait de l'absence de particules de MnS.

Afin d'obtenir des informations à une échelle très fine (échelle des paquets de cémentite), des grilles de pas de 0,6 μm et de 1 μm ont été déposées, comme l'illustrent les figures 1.8 et 1.9. Dans le cas des grilles dont l'espacement entre les barreaux est très fin, la taille du faisceau ne doit pas être trop importante, afin de ne pas balayer toute la surface de la zone étudiée lors de l'étape b du dépôt de grille (Annexe A), et ne doit pas être trop petite, afin de disposer de barreaux de grille de largeur raisonnable.

L'épaisseur des barreaux de grille est très fine, de l'ordre de 0,2 μm . Il est très difficile avec les moyens expérimentaux actuels de faire des pas de grille d'une distance inférieure à 0,6 μm tout en conservant une épaisseur suffisante pour les barreaux.

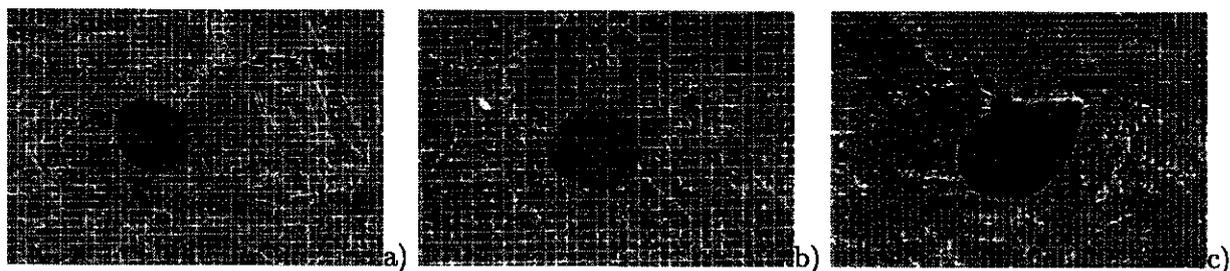


FIG. 1.8 – Taille des particules a) $5\mu\text{m}$ b) $9\mu\text{m}$ c) $9,6\mu\text{m}$ Pas de grille a) $0,6\mu\text{m}$ b) $1\mu\text{m}$ c) $0,6\mu\text{m}$

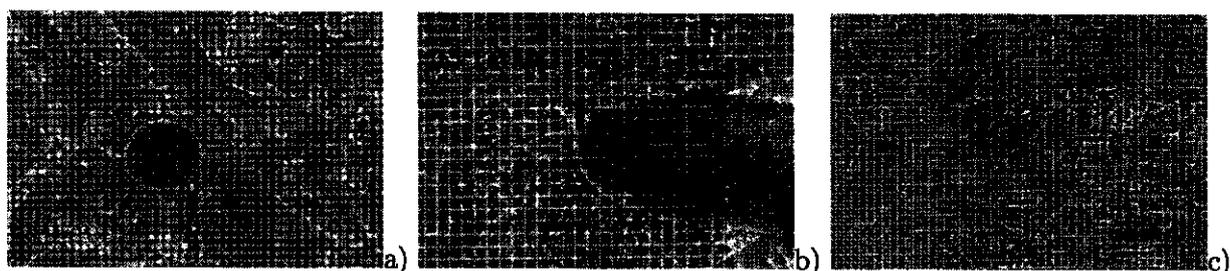


FIG. 1.9 – Taille des particules a) $5\mu\text{m}$ b) $20\mu\text{m}$. c) Ancien grain austénitique. Pas de grille a) $0,6\mu\text{m}$ (taches) b) $1\mu\text{m}$ c) $1\mu\text{m}$ (grilles)

1.4.2 Acquisition d'une image

Les images des zones étudiées lors de cet essai de traction ont été prises à Metz au moyen d'un microscope électronique à balayage (M.E.B.). Ce sont des images numériques d'une résolution de 1024×704 pixels.

Afin de vérifier la bonne qualité des images prises au M.E.B., on se propose d'appliquer la méthode de corrélation sur des images qui n'ont subi qu'un mouvement de corps rigide, une translation par exemple (Figure 1.10). Notons que les deux images présentent des histogrammes de niveaux de gris différents.

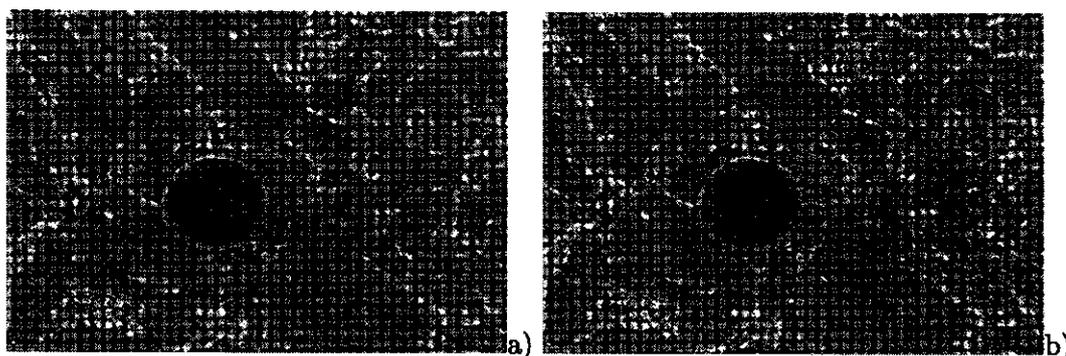


FIG. 1.10 – Images présentées sur la figure 1.9a avant et après légère translation dans la direction horizontale (mouvement de corps rigide)

L'image dite "déformée" correspond donc à l'image de référence légèrement translattée (Figure 1.10b). Aucun chargement n'ayant été appliqué sur l'éprouvette, les déformations obtenues devraient être théoriquement nulles en chaque point de la zone étudiée. La figure 1.11 montre que les déformations mesurées ne sont, en réalité, pas nulles. Ces déformations sont obtenues à partir du schéma

d'intégration c (Figure A.2 de l'Annexe A)

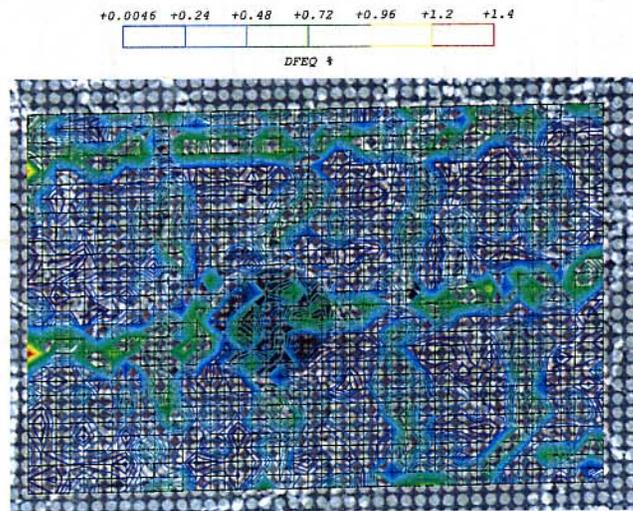


FIG. 1.11 – *Estimation de l'erreur : Calcul du champ de déformation local sur deux images translattées de la figure 1.10*

La déformation se localise dans des bandes quasi horizontales et quasi verticales d'espacement régulier. L'amplitude de la déformation dans ces bandes n'excède pas 1%. En dehors de ces bandes, la déformation est quasiment nulle. Cette non nullité du champ de déformation résulte certainement du bruit de fond apparaissant lors de l'acquisition de l'image et d'arrondis systématiques dans le traitement.

Ce test d'erreur est important si les déformations locales dues à une sollicitation externe sont très faibles, i.e., de l'ordre du pourcent. Dans ce cas, il est difficile de conclure sur l'origine de l'hétérogénéité du champ de déformation local : est-elle due à une hétérogénéité microstructurale ou à du bruit de mesure (voir [30] pour une discussion sur l'origine de ces erreurs) ? Dans notre cas, les déformations locales étant relativement importantes (plusieurs dizaines de pourcents), les erreurs dues à l'acquisition d'une image numérique sont négligeables.

1.4.3 Déroulement de l'essai

Afin de mettre en évidence l'hétérogénéité des champs locaux au voisinage des particules de MnS et des paquets de cémentite, un essai de traction a été réalisé par Raphaël Pesci (LPMM). Cet essai est mené sur une éprouvette de traction plate à une température d'environ -90°C , température caractérisant la zone de transition fragile - ductile du matériau. Il se décompose en une succession d'étapes de chargement (Figure 1.12) à la fin desquelles l'éprouvette est déchargée et une image numérique de chaque zone étudiée est prise au M.E.B.

La direction de traction est selon le sens horizontal des images. Les images obtenues à la fin de chaque étape de chargement, corrélées avec les images prises avant déformation, permettront de suivre l'évolution du champ de déformation local dans les zones étudiées au cours de l'essai et de mettre en évidence les hétérogénéités microstructurales induisant une hétérogénéité de déformation.

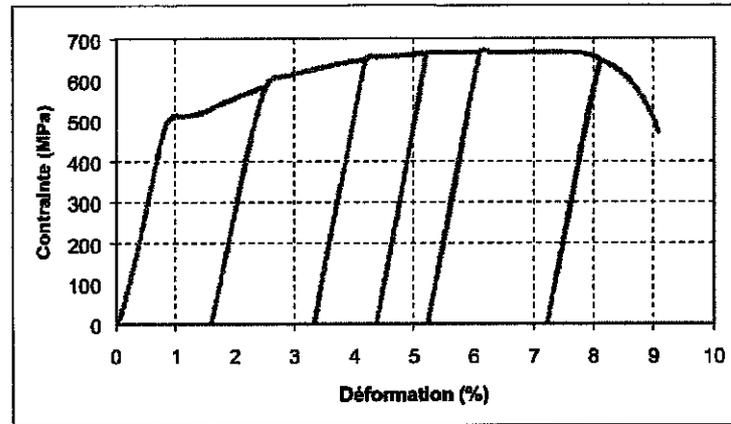


FIG. 1.12 – Courbe de traction macroscopique

1.5 Analyse des champs locaux

La technique de corrélation d'images a été appliquée aux différentes images prises à la fin de chaque étape de chargement. Les déformations étant très importantes, notamment au voisinage des particules de MnS, l'image de référence considérée n'est pas l'image à l'état non déformé mais l'image de l'étape précédente, les champs locaux de déplacement étant ramenés sur la configuration initiale, c'est-à-dire l'image à l'état non déformé. Le schéma d'intégration retenu pour l'estimation du champ de déformation au voisinage de chaque intersection de barreaux de grille est le schéma c (Figure A.2 de l'Annexe A). Ce schéma d'intégration offre un bon compromis entre l'information disponible sur le contour du domaine et la localité de la mesure.

Les figures 1.13, 1.15 et 1.16 représentent les cartes des déformations équivalentes déterminées après rupture. Ces cartes sont superposées sur les images avant déformation des différentes zones correspondantes afin de mettre en évidence l'origine de l'hétérogénéité des champs locaux de déformation. Il apparaît que les fortes déformations observées au voisinage des particules sont uniquement dues à la décohésion entre les particules et la matrice et à la croissance du pore correspondant.

Les figures 1.13 et 1.14 laissent apparaître des zones très peu déformées et, au voisinage des particules, des bandes à fort niveau de déformation dont l'orientation est d'environ $\pm 45^\circ$ par rapport à la direction de traction. Cette orientation est directement liée au chargement macroscopique (traction simple) mais la position des bandes dépend de la microstructure. Les zones à fort niveau de déformation apparaissent rapidement, dès les premières étapes de chargement. Une fois apparues, elles absorbent la majeure partie de la déformation macroscopique, augmentant ainsi l'amplitude de la déformation qui y règne.

Sur les figures 1.15, l'apparition de bandes fortement déformées d'orientation $\pm 45^\circ$ par rapport à la direction de traction est aussi mise en évidence. Une hétérogénéité de déformation est clairement présente, se traduisant par des zones plus déformées que d'autres au voisinage des particules. Cette hétérogénéité de déformation n'est pas uniquement liée à la présence de particule de MnS dans le matériau. Le regroupement en paquets de la cémentite induit également une hétérogénéité de déformation dont l'amplitude est comparable à celle induite par les particules de MnS (Figure 1.16).

La figure 1.16a présente la carte des déformations équivalentes obtenues à la rupture de l'éprouvette sur le grain austénitique. Une bande de localisation de la déformation à $\pm 45^\circ$ par rapport à la

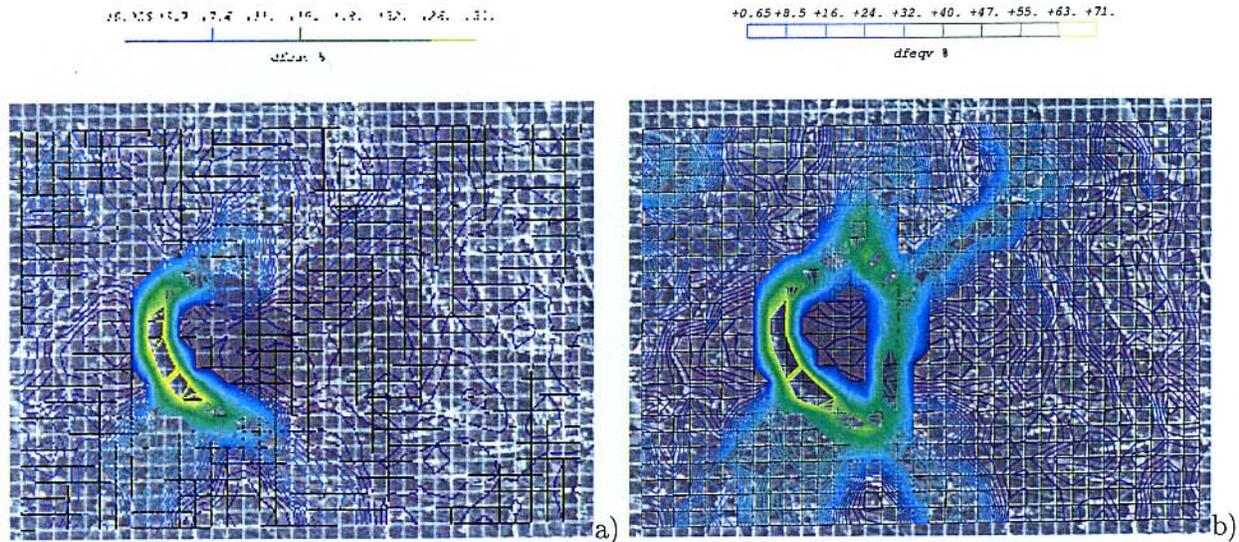


FIG. 1.13 – Cartes des déformations équivalentes locales sur l'image 1.8a : a) Premier séquençage
b) A la rupture de l'éprouvette

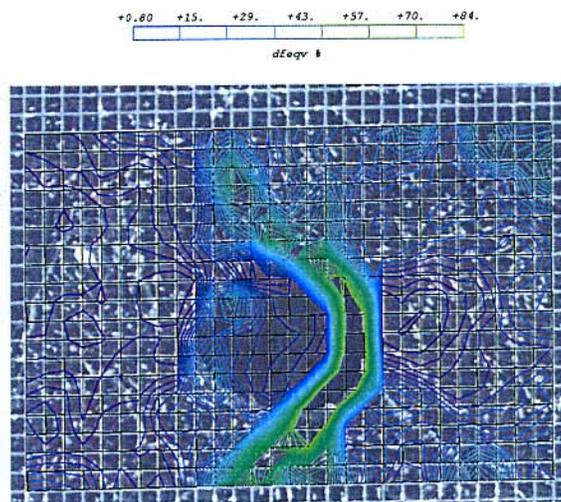


FIG. 1.14 – Cartes des déformations équivalentes locales à la rupture de l'éprouvette : sur l'image 1.8b

direction de sollicitation est aussi mise en évidence mais uniquement sur une partie du grain. Cette carte des déformations présente clairement une hétérogénéité de la déformation au sein même du grain. Celle-ci est-elle due à la présence de paquets de cémentite ou à une hétérogénéité cristalline au sein d'un ancien grain d'austénitique ? Ce grain est-il composé de sous-grains d'orientation cristalline différente ? Il est difficile de trancher sur ces questions. Des remarques similaires peuvent être faites à propos de l'hétérogénéité de déformations observée sur la figure 1.16b.

On peut donc s'interroger sur l'existence d'un lien entre l'hétérogénéité microstructurale (d'origine cristalline) et l'hétérogénéité des champs de déformations. Cet essai n'a pu mettre en évidence un tel lien par manque de connaissance précise sur la microstructure (cristalline) du matériau étudié : une analyse EBSD (Electron Back Scattering Diffraction) des zones étudiées après rupture du matériau n'avait pas donné de résultat satisfaisant à cause d'un mauvais état de surface. Cette analyse nous

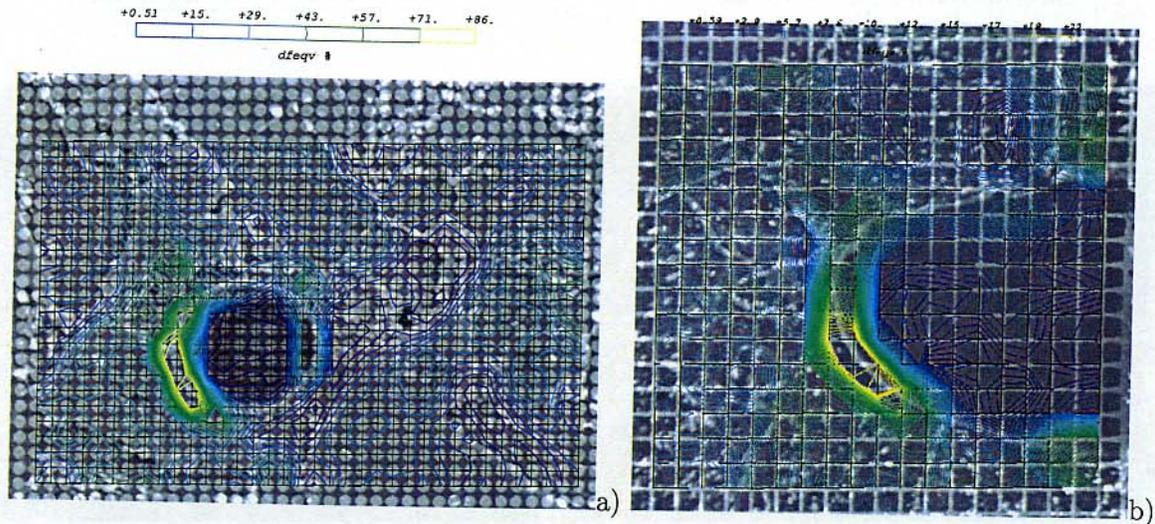


FIG. 1.15 – Cartes des déformations équivalentes locales à la rupture de l'éprouvette : a) image 1.9a
b) image 1.9b

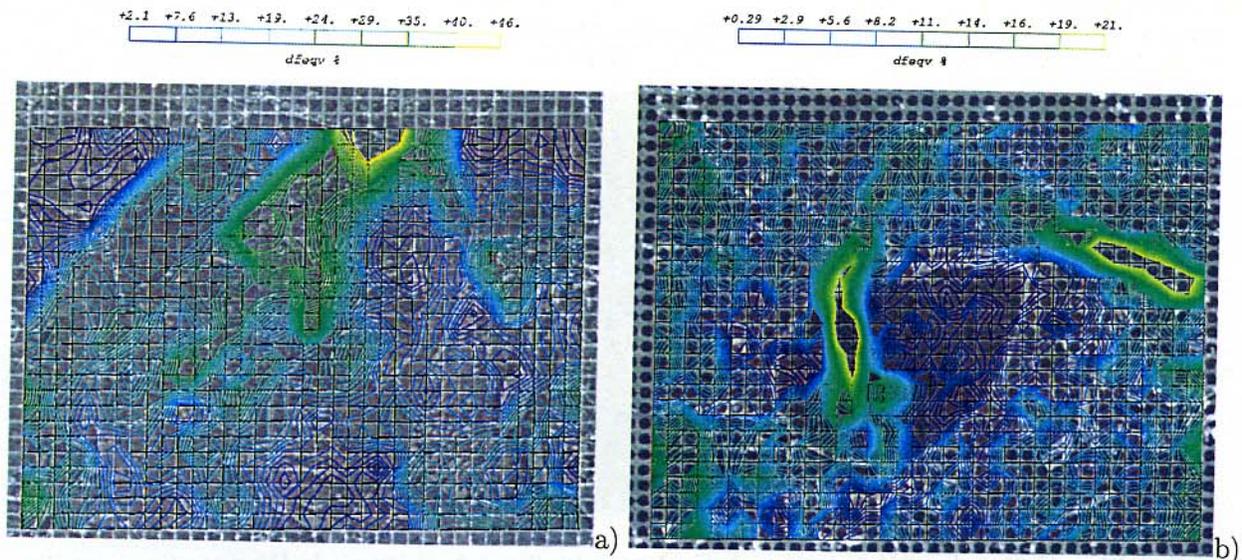


FIG. 1.16 – Cartes des déformations équivalentes locales à la rupture de l'éprouvette sur : a) image 1.9c b) image 1.8c

aurait pourtant permis de connaître l'orientation cristalline des différents grains constituant les zones étudiées. La carte des orientations cristallines ainsi obtenue aurait été superposée aux cartes des déformations équivalentes obtenues par corrélation d'images, afin de mettre en évidence un éventuel lien entre l'hétérogénéité de déformation et l'hétérogénéité des orientations cristallines.

Il serait intéressant d'effectuer une analyse par EBSD lors d'un prochain essai, avant la pose de grille, afin de répondre à toutes ces questions. Ceci permettrait de mieux comprendre l'origine de la bande de localisation de la déformation observée, par exemple, sur la figure 1.16. Toutefois, cet essai de traction nous a permis d'observer une décohésion rapide entre les particules de MnS et la matrice, plus précisément pour la majeure partie des particules de MnS présentes dans les zones étudiées. L'hypothèse qui consiste à assimiler les particules de MnS à des pores est donc raisonnablement

justifiée. Toutefois, il serait nécessaire de procéder à plusieurs essais identiques pour différentes températures afin de mettre en évidence le domaine de validité de cette hypothèse. Dans la suite de cette étude, nous n'étudierons pas l'effet de la présence de paquets de cémentite sur le déclenchement du clivage et nous ignorerons aussi l'hétérogénéité microstructurale associée à la nature cristalline de la matrice.

Un autre essai de traction a également été envisagé. Celui-ci aurait été mené à une échelle plus grande que celle considérée dans cette étude et aurait donc permis de mettre en évidence une hétérogénéité de déformation inter- et intra-amas. Ceci aurait été rendu possible grâce au dépôt de micro-grilles d'un pas d'environ $15\mu\text{m}$ sur toute la zone utile d'une éprouvette de traction plate et par l'étude par corrélation d'image de toute la zone utile. Cet essai n'ayant pu aboutir avant la fin de cette thèse, il reste tout de même d'actualité pour des travaux futurs.

Nous nous limiterons, dans ce qui suit, à l'étude de l'effet des particules de MnS sur la rupture fragile et ductile de l'acier de cuve au travers de méthodes de changement d'échelle. Au vu des cartes de déformations expérimentales, il apparaît pleinement justifié d'appliquer des critères de rupture, notamment celui de Beremin pour la rupture fragile, à partir de champs locaux issus des modèles de changement d'échelle, à l'échelle des particules (ou des cavités) et non à partir de champs macroscopiques, beaucoup trop "moyennés". Ces derniers lissent les fluctuations des champs locaux induites par la présence d'hétérogénéités microstructurales. En revanche, l'hypothèse de sphéricité des pores n'est pas pleinement justifiée au vu de cette première excursion vers l'analyse des particules de MnS et des champs locaux qu'elles induisent. Toutefois, cette hypothèse va faciliter le développement et l'utilisation des outils de changement d'échelle qu'il est maintenant temps de présenter.

1.6 Méthodes de changement d'échelle

Cette partie résume les principes de base des méthodes de changement d'échelle dans les matériaux hétérogènes. Ces principes conduisent à des bornes ou des estimations, plus ou moins pertinentes selon les hypothèses retenues, des propriétés mécaniques du matériau hétérogène à l'échelle d'un volume élémentaire représentatif (V.E.R.).

1.6.1 Principes de base et méthodologie

La micromécanique des milieux hétérogènes a pour objectif de décrire le comportement macroscopique d'une structure hétérogène à l'échelle d'un volume élémentaire représentatif (V.E.R.) pour une sollicitation macroscopique donnée (Figure 1.17) à partir d'informations sur les mécanismes élémentaires de déformation des phases constitutives et sur la répartition spatiale, la forme et l'orientation de ces dernières.

Il faut dans un premier temps définir l'échelle de départ d : dans notre problème, doit-on prendre en compte des informations à l'échelle des paquets de cémentite ou à une échelle plus grande, celle des particules de MnS, pour prendre comme exemple la microstructure de l'acier de cuve présentée précédemment ? Il n'y a pas de recette bien définie pour le choix de cette échelle de départ. Elle dépend d'un (ou plusieurs) phénomène physique observé expérimentalement et qui est jugé suffisamment pertinent pour avoir l'impact principal sur le comportement macroscopique ou sur les propriétés étudiées.

Supposons fixée la taille des hétérogénéités d (Figure 1.17) à prendre en compte. Il nous faut à présent définir la taille l du V.E.R. l est une échelle intermédiaire entre l'échelle de la structure

L dite échelle macroscopique et l'échelle des hétérogénéités d , dite échelle microscopique, telle que $d \ll l \ll L$. Le V.E.R. peut être représenté comme un échantillon de la structure, pour le modélisateur, dont les résultats obtenus doivent être représentatifs du comportement global du milieu d'origine. Ce V.E.R. doit également être représentatif de la structure en terme de distribution de phases, de la forme et de l'orientation des hétérogénéités la composant.

Le V.E.R. ainsi défini, il s'agit de déterminer le comportement macroscopique à l'échelle de ce dernier. Cette détermination se décompose en trois étapes.

La première étape est celle de la représentation : il s'agit de mettre en œuvre des modèles qui prennent en compte des informations sur la morphologie et sur le comportement des éléments constituant le V.E.R. dont la taille est largement inférieure à celle de la structure de départ.

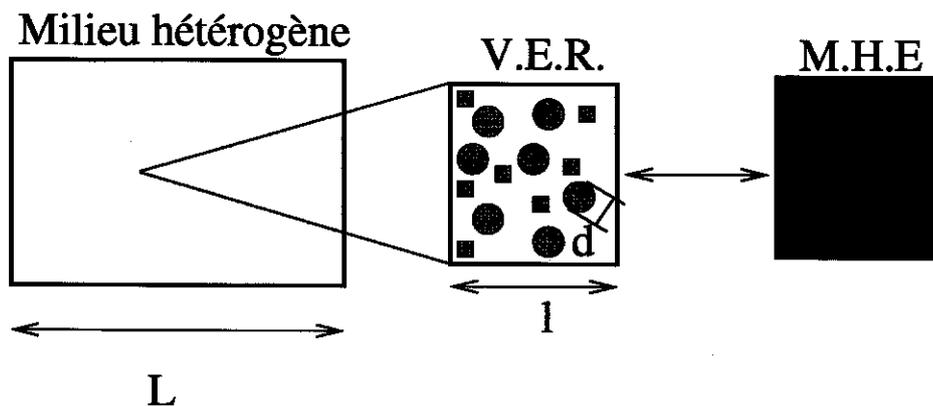


FIG. 1.17 – Passage de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique : $d \ll l \ll L$

La seconde étape est celle de la localisation : quelle est la valeur des champs locaux de contrainte $\sigma(x)$ et de déformation $\varepsilon(x)$ en tout point du V.E.R. pour une sollicitation macroscopique en déformation E ou en contrainte Σ imposée? Il convient donc de calculer ou d'estimer pour une sollicitation macroscopique donnée l'état des contraintes et des déformations en chaque point du V.E.R.

La troisième et dernière étape dite d'homogénéisation vise à calculer la grandeur macroscopique duale de celle imposée précédemment, en fonction des grandeurs à l'échelle locale par une simple opération de moyenne sur le V.E.R. :

$$\Sigma = \langle \sigma(x) \rangle_{V.E.R.} \quad \text{et} \quad E = \langle \varepsilon(x) \rangle_{V.E.R.} \quad (1.42)$$

Supposons que le V.E.R. soit soumis à une déformation macroscopique E . Le problème de localisation permet d'obtenir le champ de déformation $\varepsilon(x)$ induit par E en chaque point x du V.E.R. quel que soit le comportement des phases, linéaire ou non-linéaire. Connaissant $\varepsilon(x)$ et après application de la loi de comportement local $\sigma(x) = f(\varepsilon(x))$, on en déduit le champ de contrainte associé $\sigma(x)$. Puis par une opération de moyenne adéquate (1.42), on obtient la contrainte macroscopique Σ . La démarche est en tout point identique lorsque le V.E.R. est soumis à une contrainte macroscopique Σ .

Les trois étapes qui constituent la méthodologie à suivre pour déterminer le comportement du V.E.R. et l'état des grandeurs locales à l'échelle des hétérogénéités peuvent être menées à l'aide de modèles analytiques, de modèles numériques ou même expérimentalement [30].

1.6.2 Élasticité linéaire hétérogène

L'objectif est de calculer les tenseurs des modules effectifs du milieu homogène équivalent (M.H.E.), L^{hom} ou S^{hom} . Pour ce faire, nous supposons que le V.E.R. d'un matériau hétérogène est sollicité en déformation ou contrainte macroscopique connue. Les différents éléments de ce V.E.R. sont supposés avoir un comportement élastique linéaire.

Calcul des tenseurs effectifs : Approche directe

Dans le cas de l'élasticité linéaire, les grandeurs macroscopiques sont directement reliées aux grandeurs microscopiques grâce aux tenseurs dits de localisation, selon :

$$\varepsilon(x) = A(x) : E \text{ et } \sigma(x) = B(x) : \Sigma. \quad (1.43)$$

Les tenseurs d'ordre 4, $A(x)$ et $B(x)$, désignent respectivement le tenseur de localisation des déformations et le tenseur de localisation des contraintes. Ils satisfont de plus l'égalité suivante :

$$\langle A(x) \rangle_{V.E.R.} = I \text{ et } \langle B(x) \rangle_{V.E.R.} = I, \quad (1.44)$$

I est le tenseur identité d'ordre 4 et l'opérateur $\langle * \rangle_{V.E.R.}$ désigne une opération de moyenne de la grandeur $*$ sur le V.E.R.

Les tenseurs des modules effectifs L^{hom} ou des souplesses effectives S^{hom} (propriétés mécaniques du milieu homogène équivalent, M.H.E.) reliant les grandeurs macroscopiques entre elles ($\Sigma = L^{\text{hom}} : E$ ou $E = S^{\text{hom}} : \Sigma$), sont fonctions des tenseurs de localisation de la déformation et des contraintes respectivement, et des modules d'élasticité $L(x)$ et de souplesses $S(x)$ selon :

$$L^{\text{hom}} = \langle A(x) : L(x) \rangle_{V.E.R.} \text{ et } S^{\text{hom}} = \langle B(x) : S(x) \rangle_{V.E.R.}. \quad (1.45)$$

Les deux approches ne donnent des résultats identiques que sous l'hypothèse que la taille des hétérogénéités soit petite par rapport à la taille du V.E.R.

Pour alléger l'écriture, nous omettons par la suite l'indice V.E.R.

Approches variationnelles en élasticité linéaire

La détermination des propriétés mécaniques d'un matériau hétérogène à l'échelle du V.E.R. pour des conditions aux limites données, revient à résoudre le problème local suivant :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma(x) = 0 & \forall x \in V \\ \sigma(x) = L(x) : \varepsilon & \forall x \in V \\ 2\varepsilon = \nabla u + \nabla u^t & \forall x \in V \\ + \text{Conditions aux limites sur } \partial V. \end{cases} \quad (1.46)$$

Les conditions aux limites peuvent être de type contraintes homogènes au bord (CH) : $\Sigma \vec{n} = \sigma \vec{n}$, déformations homogènes au bord (DH) $v = E.x$, périodique $v = E.x + v^*$ avec v^* périodique, ou plus généralement macrohomogène, c'est à dire assurant l'indépendance du comportement macroscopique par rapport aux conditions aux limites. Le champ de déplacement u solution du problème local (1.46) est également solution du problème de minimisation de l'énergie potentielle E_p définie selon :

$$E_p(u) = \inf_v \left\{ \frac{1}{2} \int_V \varepsilon(v) : L(x) : \varepsilon(v) \, dV - \int_{\partial V_\sigma} (\sigma \vec{n}) \cdot v \, ds \right\}, \quad (1.47)$$

pour tout champ de déplacement v cinématiquement admissible (CA) avec les conditions aux limites cinématiques. ∂V_σ correspond à la surface où la force $\sigma \vec{n}$ est imposée. De la même manière, le champ de contrainte σ solution du problème local (1.46) est également solution du problème de minimisation de l'énergie complémentaire E_p^* définie selon :

$$E_p^*(\sigma) = \inf_{\sigma^*} \left\{ \frac{1}{2} \int_V \sigma^* : L^{-1} : \sigma^* dV - \int_{\partial V_u} (\sigma^* \vec{n}) \cdot u ds \right\}, \quad (1.48)$$

pour tout champ de contrainte σ^* statiquement admissible avec des conditions aux limites statiques. ∂V_u correspond à la surface où le déplacement u est imposé.

Les approches variationnelles permettent d'encadrer les propriétés mécaniques d'un milieu hétérogène. Les formulations variationnelles (1.47) et (1.48) conduisent aux encadrements (1.49) de l'énergie du milieu hétérogène et donc des tenseurs effectifs L^{hom} et S^{hom} , ceci quel que soit le type de conditions aux limites envisagées, contraintes homogènes au bord (C.H.) ou déformation homogène au bord (D.H.) :

$$\begin{cases} -\langle \sigma^* : L^{-1} : \sigma^* \rangle + 2 \langle \sigma^* \rangle : E \leq E : L^{\text{hom}} : E \leq \langle \varepsilon^* : L : \varepsilon^* \rangle & \text{en D.H.} \\ -\langle \sigma^* : L^{-1} : \sigma^* \rangle \leq \Sigma : S^{\text{hom}} : \Sigma \leq \langle \varepsilon^* : L : \varepsilon^* \rangle - 2\Sigma : \langle \varepsilon^* \rangle & \text{en C.H.} \end{cases} \quad (1.49)$$

σ^* et ε^* sont respectivement statiquement et cinématiquement admissibles avec des conditions aux limites CH ou DH. Le tenseur des modules effectifs est fonction des tenseurs de localisation de la déformation $A(x)$ selon : $L^{\text{hom}} = \langle {}^t A(x) : L : A(x) \rangle$; définition équivalente à (1.45a) [92].

Il existe plusieurs méthodes conduisant à un encadrement rigoureux du tenseur des modules effectifs L^{hom} . Les plus simples et les moins pertinentes sont celles dites de Voigt et Reuss qui utilisent des champs d'essais uniformes en déformation :

$$L^{\text{hom}} \leq C_V = \langle L \rangle. \quad (1.50)$$

ou en contrainte :

$$L^{\text{hom}} \geq C_R = \langle L^{-1} \rangle^{-1}. \quad (1.51)$$

Les bornes de Voigt et Reuss ne prennent en compte que des informations d'ordre 1 sur la microstructure, i.e., la fraction volumique des phases. Une autre approche qui conduit à des bornes plus resserrées que celles de Voigt et Reuss est celle de par Hashin et Shtrikman [41].

Bornes de Hashin et Shtrikman

Nous rappelons brièvement la démarche générale suivie par Hashin et Shtrikman [41] pour établir un encadrement rigoureux des propriétés mécaniques du M.H.E. Le lecteur désireux d'avoir de plus amples détails sur la manière d'obtenir ces bornes se référera, par exemple, à Bornert [14] ou Zaoui [92] par exemple.

Le calcul de ces nouvelles bornes repose sur une reformulation du problème variationnel (1.49) (en DH par exemple). Elle est basée sur l'introduction d'un milieu linéaire homogène, de module L^0 , soumis à ses bords aux mêmes conditions aux limites que le milieu hétérogène et à un champ de polarisation p^* , supposé uniforme par phase dans les approches dites classiques :

$$p^* = \sum_{i=1}^n \chi_r(x) p_r^*,$$

où $\chi_r(x)$ est la fonction caractéristique de la phase r . p_r^* est le champ de polarisation dans la phase r . Le tenseur des contraintes σ^* est ainsi relié au tenseur des déformations ε^* par la relation $\sigma^* = L^0 : \varepsilon^* + p^*$. σ^* et ε^* sont respectivement SA et CA pour le problème initial et ε^* est fonction du tenseur de polarisation p^* selon $\varepsilon^* = \delta L^0 : p^*$. On définit ainsi une fonctionnelle de polarisation, fonction des tenseurs L^0 et p^* :

$$2HS^0(p^*, E) = E : L^0 : E + E : \langle p^* \rangle + \langle \varepsilon^* : p^* \rangle - \langle p^* : (\delta L^0)^{-1} : p^* \rangle, \quad (1.52)$$

qui permet de majorer et de minorer l'énergie effective du matériau hétérogène considéré en choisissant L^0 tel que $\delta L^0 = L(x) - L^0$ et $\delta S^0 = S(x) - S^0$ soient négatifs ou positifs, au sens des formes quadratiques associées, en chaque point x du V.E.R.. Avec $L^0 = \sup_x L(x)$ et $S^0 = \sup_x S(x)$ on obtient respectivement une borne supérieure ou inférieure pour l'énergie du milieu considéré.

La dérivation de bornes optimales passe par le calcul du champ de polarisation optimal. Ce calcul est possible analytiquement sous l'hypothèse d'isotropie de distribution des phases et sous l'hypothèse que les champs de polarisation soient uniformes par phase. Les bornes de Hashin et Shtrikman ainsi obtenues améliorent les bornes de Voigt et Reuss. Ceci est dû à la prise en compte d'une information supplémentaire sur la microstructure du matériau considéré : celle de l'isotropie de distribution des phases. Des résultats similaires peuvent être obtenus pour d'autres propriétés de la distribution des phases.

Approche par Motifs Morphologiques Représentatifs

Une démarche plus générale a été proposée par Stolz et Zaoui [80] pour la dérivation de bornes et d'estimations des propriétés mécaniques du M.H.E. Cette démarche est basée sur la notion de Motif Morphologique Représentatif (M.M.R.). Elle consiste à discrétiser la microstructure du V.E.R. de volume V en des sous-domaines disjoints d'extension finie λ , appelés motifs, de géométrie quelconque, de volume V_λ et en proportion $c_\lambda = \frac{V_\lambda}{V}$. L'ensemble des motifs de géométrie et de caractéristiques mécaniques identiques forme une famille appelée "famille de motifs morphologiques". Cette dernière est représentée par un motif de même géométrie et de propriétés mécaniques identiques appelé motif morphologique représentatif (Figure 1.18).

Une application adéquate du principe variationnel de Hashin et Shtrikman utilisant des champs de polarisation non uniformes au sein d'une même phase permet de construire un encadrement du comportement effectif du matériau hétérogène ainsi représenté. On introduit pour cela un milieu linéaire homogène de module L_0 soumis à son bord aux mêmes conditions aux limites que le milieu hétérogène et à un champ de polarisation p^* prenant des valeurs identiques aux points homologues de chaque motif i de la famille λ tel que :

$$p_\lambda^*(X_\lambda^i + x) = p_\lambda^*(x), \quad \forall x \in D_\lambda, \quad \forall i, \quad \forall \lambda.$$

Sous l'hypothèse de distribution isotrope des centres des motifs, les champs d'essai obtenus satisfont à l'équation suivante :

$$\forall \lambda \in [1, N], \quad \forall x \in D_\lambda, \quad \varepsilon_\lambda^M(x) = E_0 - \int_{D_\lambda} \Gamma^0(x, x') (L_\lambda - L^0) : \varepsilon_\lambda^M(x') d\omega(x') \quad (1.53)$$

où $\Gamma^0(x, x')$ représente l'opérateur de Green modifié associé à un milieu infini de module L^0 et $\varepsilon_\lambda^M(x)$ est la moyenne par points homologues du champ de déformation d'essai à l'intérieur du motif

représentatif λ , dont la distribution des modules locaux est donnée par $L_\lambda(x)$ sur le domaine D_λ qu'occupe le motif λ . Une opération de moyenne a été définie dans (1.53) : la valeur du champ local f en x sur le motif morphologique représentatif λ résulte de la moyenne du champ local f sur les points homologues des N_λ motifs λ :

$$f_\lambda^M(x) = \sum_{i=1}^{N_\lambda} f(X_\lambda^i + x) \quad (1.54)$$

On reconnaît dans (1.53) l'équation d'une inclusion composite de module $L_\lambda(x)$ plongée dans un milieu infini de référence de modules L^0 et soumise à la déformation E_0 à l'infini. Des opérations de moyennes adéquates sur ces champs conduisent à des bornes supérieures (inférieures) lorsque le milieu de référence est plus raide (plus souple) que toutes les phases. Une estimation auto-cohérente généralisée [16] est obtenue lorsqu'on attribue au milieu de référence les propriétés du milieu homogène équivalent. L'approche peut être étendue à d'autres propriétés de la distribution spatiale des centres des motifs. Les motifs morphologiques représentatifs λ peuvent être de géométrie quelconque. Le bord extérieur du motif dépend de la distribution des défauts dans le matériau; distribution isotrope, ellipsoïdale, etc. Une description plus détaillée de cette approche ainsi que la signification physique des champs locaux calculés dans l'inclusion composite sont discutées dans [91] ou [18] par exemple.

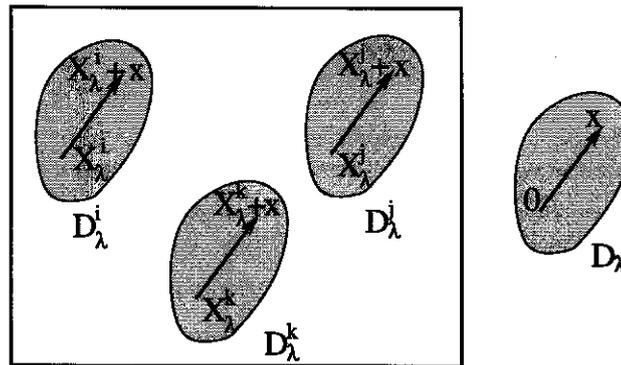


FIG. 1.18 – Exemple de Motifs Morphologiques Représentatifs

Le calcul des propriétés effectives d'une microstructure décrite par une telle approche revient à résoudre autant de problèmes auxiliaires composés d'inclusions composites plongées dans un milieu infini qu'il y a de motifs de géométrie et de propriétés mécaniques différentes dans le milieu considéré, comme l'illustre la figure 1.19.

L'assemblage des sphères composites de Hashin [40] est un cas particulier pouvant être décrit par cette approche. Les motifs correspondants sont des sphères composites de même taille. Il s'agit d'un moyen simple de représenter la microstructure d'un matériau hétérogène douée d'une morphologie inclusion/matrice. L'idée de Hashin consiste à paver tout l'espace du V.E.R. par un assemblage de sphères (ou de cylindres) composites homothétiques mais de fraction volumique identique valant la fraction volumique macroscopique (Figure 1.20). Les sphères composites également appelées motifs sont constituées d'un défaut sphérique entouré d'une matrice elle aussi sphérique et concentrique. Les motifs ne peuvent pas se chevaucher mais peuvent au mieux entrer en contact les uns avec les autres. En notant a le rayon du défaut et b celui de la matrice, la fraction volumique f du motif est définie selon $f^{1/3} = \frac{a}{b}$. La détermination des propriétés mécaniques d'une telle microstructure revient à étudier le cas d'une sphère composite soumise sur son bord externe à des conditions aux

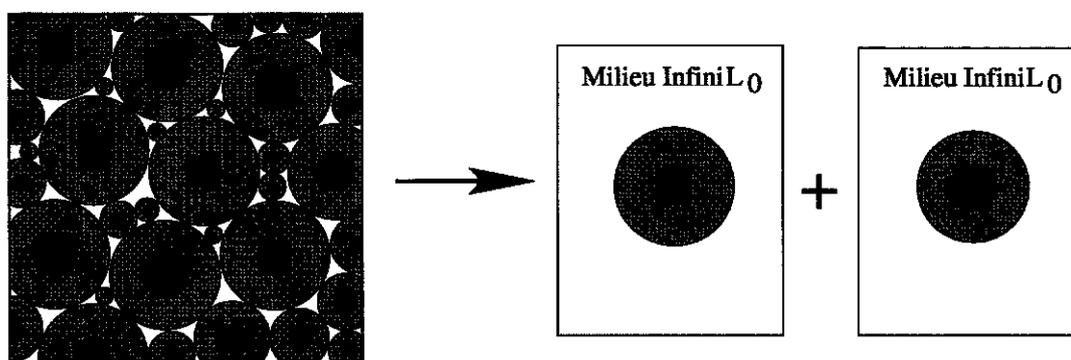


FIG. 1.19 – *Approche par motifs morphologiques représentatifs : description de la microstructure à partir de deux motifs distincts. Résolution à l'aide d'un problème auxiliaire composé de deux inclusions composites plongées dans un milieu infini de module L_0*

limites en déformation ou en contrainte homogène. Ceci revient à résoudre le problème d'une sphère composite de fraction volumique identique à la fraction volumique macroscopique, plongée dans un milieu infini possédant des propriétés mécaniques infiniment souple ou infiniment dure et soumis à chargement homogène à l'infini.

Dans le cas particulier où l'approche par M.M.R. s'applique à un assemblage de sphères composites de Hashin, un calcul analytique permet d'obtenir en encadrement rigoureux des propriétés mécaniques du milieu considéré, améliorant celui de Hashin sous l'hypothèse d'une distribution isotrope des centres des motifs. Ces bornes sont dues à Hervé et coll [44] et portent le nom de leurs auteurs : bornes HSZ (Hervé Stolz Zaoui). Elles sont obtenues en attribuant au milieu infini les propriétés mécaniques de la plus raide ou de la plus souple de toutes les phases. Notons également que, dans le cas où les propriétés mécaniques du milieu infini sont infiniment souples ou infiniment rigides, on retrouve les bornes de Hashin [40]. Si le milieu infini possède les propriétés mécaniques du milieu effectif L^{hom} , on obtient une estimation auto-cohérente du comportement, qui s'identifie au modèle de Christensen et Lo [24] dit "autocohérent généralisé" ou des "3 phases".

Il existe des milieux plus complexes et formés de plusieurs phases. C'est le cas par exemple des matériaux composés de billes de verre creuses noyées dans une matrice. Pour traiter ce type de problème, Hervé et Zaoui [45] ont généralisé le modèle à 3 phases à des motifs sphériques multi-couches à phases isotropes en milieu infini. Chaque couche possède ses propres propriétés mécaniques. Ce type de généralisation a également été proposé par ces mêmes auteurs [46] pour déterminer les propriétés mécaniques des milieux élastiques bidimensionnels multi-couches ayant un comportement local isotrope transverse par rapport à l'axe des fibres. Le domaine d'application de ces méthodes ne se limite pas au cas de matériaux composés de billes de verre creuses noyées dans la matrice. Il s'étend également à des matériaux plus complexes et peut s'avérer très utile en homogénéisation non-linéaire. Ce point est évoqué en détail dans le chapitre 4.

On peut également être confronté à des milieux dont la forme des défauts n'est pas rigoureusement sphérique et dont la distribution n'est pas isotrope mais plus généralement ellipsoïdale. La détermination des propriétés mécaniques d'une telle microstructure revient à résoudre numériquement le cas d'un motif noyé dans un milieu infini [14], la géométrie du motif étant directement liée à la

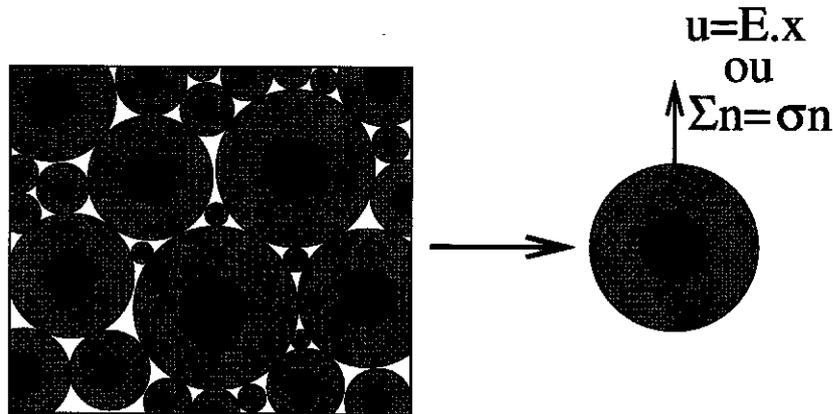


FIG. 1.20 – *Assemblage de sphères ou de cylindre composites + Hypothèse de Hashin pour la dérivéation de bornes pour les modules effectifs macroscopiques*

forme du défaut et à sa distribution. L'utilisation d'outils numériques pour résoudre les problèmes d'homogénéisation tant linéaire que non-linéaire est devenue incontournable. Nous reviendrons sur ce point un peu plus loin dans le texte.

1.6.3 Matériaux hétérogènes non-linéaires

Cette partie est consacrée à un bref rappel des techniques de base de l'homogénéisation non-linéaire qui permettent de déterminer le comportement macroscopique d'un matériau hétérogène dont les différents constituants ont un comportement non-linéaire. Dans le cadre de cette étude, nous supposons que le comportement de chaque phase est gouverné par un unique potentiel convexe, $w(\varepsilon)$ ou $\phi(\dot{\varepsilon})$.

Approche variationnelle en élasticité non-linéaire

La détermination du comportement macroscopique de structures composées de différentes phases ayant chacune un comportement non-linéaire régi par un potentiel $w(x, \varepsilon(x))$ de déformation n'est pas une tâche facile. Ce potentiel est fortement hétérogène puisqu'il fluctue d'un point x à l'autre dans le V.E.R. et dépend du champ de déformation en ce point. Le problème local à résoudre pour déterminer les champs de contrainte et de déformation locaux dans le V.E.R. pour des conditions aux limites données est le suivant :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma(x) = 0 & \text{dans } V \\ \sigma(x) = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(x, \varepsilon(x)) & \text{dans } V \\ 2\varepsilon = \nabla u + \nabla u^t & \\ \text{Conditions aux limites} & \text{sur } \partial V. \end{cases} \quad (1.55)$$

Notons que la démarche est similaire dans le cas de la viscoplasticité. Il suffit pour cela de remplacer ε par $\dot{\varepsilon}$. Le champ de déplacement u solution du problème local (1.55) est également solution du problème variationnel suivant, définissant le potentiel macroscopique du milieu hétérogène $W(E)$ comme le minimum sur tous les champs cinématiquement admissibles de la moyenne des potentiels locaux $w(x, \varepsilon(u(x)))$ sur le V.E.R., par exemple, pour des conditions aux limites en déformations

homogènes au bord :

$$W(E) = \langle w(x, \varepsilon(u(x))) \rangle = \inf_{v \in K(E)} \langle w(x, \varepsilon(v(x))) \rangle \quad \text{avec } K(E) = \{v, v = E \cdot x \text{ sur } \partial V\}; \quad (1.56)$$

l'indice *V.E.R* est volontairement omis pour raison de simplification d'écriture. De la même manière, le problème variationnel définissant le potentiel macroscopique de milieu hétérogène $U(\Sigma)$ est défini comme suit pour des conditions aux limites en contraintes homogènes au bord :

$$U(\Sigma) = \inf_{\tau \in S(\Sigma)} \langle u(\tau) \rangle \quad \text{avec } S(\Sigma) = \{\tau, \operatorname{div}(\tau) = 0 \text{ dans } V, \langle \tau \rangle = \Sigma\}. \quad (1.57)$$

Notons que, si le potentiel local $w(x, \varepsilon(x))$ régissant le comportement des phases dérive d'un potentiel, alors le comportement macroscopique dérive également d'un potentiel :

$$\Sigma = \frac{\partial W}{\partial E}(E).$$

Les potentiels macroscopiques $W(E)$ et $U(\Sigma)$ sont des fonctions convexes et duales :

$$W(E) + U(\Sigma) = \langle w(\varepsilon) \rangle + \langle u(\sigma) \rangle = \langle \sigma : \varepsilon \rangle = \Sigma : E.$$

Bornes de type Voigt et Reuss

Le cas le plus simple que nous pouvons considérer dans un premier temps afin d'obtenir un encadrement du potentiel macroscopique du matériau non-linéaire est celui qui généralise les bornes de Voigt et Reuss au cas d'un comportement non-linéaire du matériau hétérogène. La démarche utilisée pour obtenir cet encadrement consiste à supposer que les champs de contrainte et de déformation sont uniformes dans V :

$$\begin{cases} W(E) \leq w(E) = \sum_{r=1}^N f_r w_r(E) \\ U(\Sigma) \leq u(\Sigma) = \sum_{r=1}^N f_r u_r(\Sigma), \end{cases} \quad (1.58)$$

ou encore⁷[74] :

$$\left(U(\Sigma) = \sum_{r=1}^N f_r u_r(\Sigma) \right)^* \leq W(E) \leq w(E) = \sum_{r=1}^N f_r w_r(E). \quad (1.59)$$

f_r correspond à la fraction volumique de la phase r et N au nombre de phases. Un tel choix conduit à des bornes rigoureuses pour les potentiels effectifs en contrainte et en déformation. Dans le cas de matériaux isotropes et incompressibles, ayant localement un comportement en loi puissance de la forme :

$$w(\varepsilon) = \frac{\sigma_0 \varepsilon_0}{m+1} \left(\frac{\varepsilon_{eq}}{\varepsilon_0} \right)^{m+1},$$

⁷L'exposant * est relatif à la transformée de Legendre de la fonction $w(\varepsilon)$:

$$u(\sigma) = w^*(\varepsilon) = \sup_{\varepsilon} \{\sigma : \varepsilon - w(\varepsilon)\}$$

l'encadrement (1.59) devient:

$$\frac{\sigma_0^R \varepsilon_0}{m+1} \left(\frac{E_{eq}}{\varepsilon_0} \right)^{m+1} \leq W(E) \leq \frac{\sigma_0^V \varepsilon_0}{m+1} \left(\frac{E_{eq}}{\varepsilon_0} \right)^{m+1} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \sigma_0^R = \langle \sigma_0^{-n} \rangle^{-m} \\ \sigma_0^V = \langle \sigma_0 \rangle. \end{cases} \quad (1.60)$$

σ_0 est une contrainte de référence de la matrice, ε_0 , une déformation de référence, m un paramètre d'écroûissage et $n = m^{-1}$. Ces bornes ne prennent en compte que des informations d'ordre 1 sur la microstructure, à savoir la fraction volumique des phases. Dès que le contraste entre les phases devient important ou la linéarité élevée (n grand), ces bornes sont nettement séparées.

Ces bornes ne tiennent pas compte de la microstructure du matériau étudié hormis la fraction volumique des phases. Des approches plus élaborées, conduisant à des bornes plus resserrées incorporant des informations statistiques sur la microstructure des matériaux, ont récemment été développées.

Principe de linéarisation du comportement local

Afin d'utiliser les connaissances acquises en homogénéisation linéaire pour traiter les problèmes d'homogénéisation non-linéaire, il convient de transformer le problème d'homogénéisation non-linéaire de départ en un problème d'homogénéisation linéaire (Figure 1.21), problème que l'on traite avec un modèle linéaire approprié.

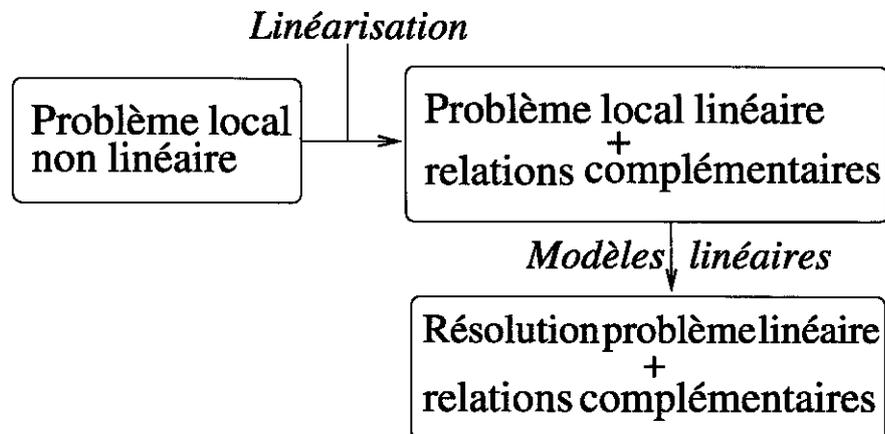


FIG. 1.21 – Principe général des extensions non-linéaires

Ceci est rendu possible grâce à une linéarisation du potentiel local $w(x, \varepsilon(x))$ au voisinage d'une déformation de référence ε_0^{eq} . Deux types de linéarisation sont notamment possibles : la linéarisation sécante et la linéarisation tangente, comme illustré sur les figures 1.22a et 1.22b.

La linéarisation sécante ou tangente du comportement local permet de passer d'un problème d'homogénéisation non-linéaire à un problème d'homogénéisation linéaire auquel est associé un jeu d'équations complémentaires non-linéaires. Ce dernier est résolu de manière exacte ou approchée à partir d'un modèle linéaire pertinent pour le problème étudié.

La linéarisation sécante du comportement local (Figure 1.22a) transforme le problème non-linéaire (1.55) en un problème linéaire possédant une infinité de modules sécants à déterminer de manière

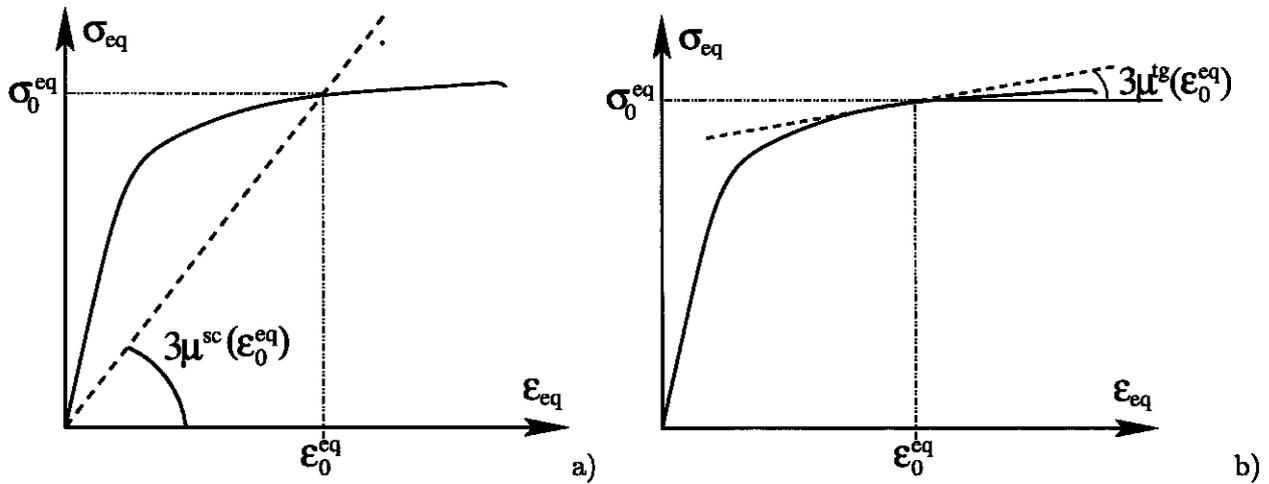


FIG. 1.22 – Différentes linéarisations a) sécante b) tangente

non linéaire au travers de la relation complémentaire :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div} \sigma(x) = 0 & \text{dans } V \\ \sigma(x) = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(x, \varepsilon(x)) & \text{dans } V \\ 2\varepsilon = \nabla u + \nabla u^t & \\ \text{Conditions aux limites} & \text{sur } \partial V \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div} \sigma(x) = 0 & \text{dans } V \\ \sigma(x) = L(x) : \varepsilon(x) & \text{dans } V \\ 2\varepsilon = \nabla u + \nabla u^t & \\ \text{Conditions aux limites} & \text{sur } \partial V \\ L(x) = L(\varepsilon_0^{eq}) : \text{Relation complémentaire} & \end{array} \right. \quad (1.61)$$

Sous l'hypothèse d'isotropie du comportement, les modules sécants $L(x)$ se décomposent sur deux projecteurs J et K :

$$L(\varepsilon) = 3kJ + 2\mu^{sc}(\varepsilon_{eq})K, \quad (1.62)$$

$J_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}$ et $K = I - J$ étant respectivement des projecteurs sur les parties sphériques et déviatoriques. I est le tenseur identité d'ordre 4. La non-linéarité du module sécant provient uniquement de la non linéarité du module de cisaillement $\mu^{sc}(\varepsilon_{eq})$. Le module de compressibilité k reste constant quel que soit le comportement du matériau.

Le choix de ε_0^{eq} est primordial pour déterminer les modules sécants en chaque point x du V.E.R. puisqu'il va influencer la valeur des modules sécants au sein de chaque phase. Il y a différents choix possibles pour ε_0^{eq} . Selon la méthode sécante classique due à Berveiller et Zaoui [8], les modules sécants sont pris uniformes par morceaux :

$$L(x) = \sum_{i=1}^n \chi_r(x) L_r$$

et ε_0^{eq} correspond à la moyenne de la déformation dans la phase r : $\varepsilon_0^{eq} = \langle \varepsilon \rangle_r$. Cette méthode néglige les fluctuations des champs locaux au sein des phases.

Selon l'extension sécante modifiée due à Suquet [83], où les modules sécants sont également pris uniformes par morceau, ε_0^{eq} correspond au moment d'ordre 2 de la déformation dans la phase r , $\varepsilon_0^{eq} = \sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r}$ dont une expression analytique peut être établie :

$$\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = \frac{1}{3f_r} E : \frac{\partial L^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} : E,$$

expression obtenue dans l'hypothèse d'un comportement isotrope des phases. Un autre choix de ε_0^{eq} a été proposé par Bornert et coll [16]. Celui-ci consiste à prendre des modules sécants uniformes par morceaux et à attribuer à ε_0^{eq} le moment d'ordre 1 de la déformation : $\varepsilon_0^{eq} = \langle \varepsilon_{eq} \rangle_r$. Ce choix permet de palier certaines faiblesses de l'extension sécante classique [8], tout comme l'extension sécante modifiée [83], par une meilleure prise en compte de l'hétérogénéité intra-phase; cependant il nécessite une évaluation numérique de $\langle \varepsilon_{eq} \rangle_r$ dans chaque phase r car aucune expression analytique n'est disponible.

Notons également que la méthode proposée par Bornert et coll [16] pour modéliser la réponse macroscopique d'un composite biphasé dont les constituants ont un comportement non-linéaire repose sur un couplage entre les méthodes d'homogénéisation non-linéaire basées sur une linéarisation sécante du comportement local et une description de la microstructure par une approche par Motifs Morphologiques Représentatifs qui permet de prendre en compte les fluctuations des concentrations locales observées dans les matériaux réels. Une démarche similaire est proposée dans le chapitre 4 mais dans le cadre de l'extension sécante modifiée.

La linéarisation tangente du comportement local transforme (Figure 1.22a) le problème non linéaire (1.55) en un problème linéaire suivant différent de (1.61) :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{div } \sigma(x) = 0 & \text{dans } V \\ \sigma(x) = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(x, \varepsilon(x)) & \text{dans } V \\ 2\varepsilon = \nabla u + \nabla u^t & \\ \text{Conditions aux limites} & \text{sur } \partial V \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{ll} \text{div } \sigma(x) = 0 & \text{dans } V \\ \sigma(x) = L^{tg}(\varepsilon_0^{eq}) : (\varepsilon(x) - \varepsilon_0^{eq}) + \sigma^0 & \text{dans } V \\ 2\varepsilon = \nabla u + \nabla u^t & \\ \text{Conditions aux limites} & \text{sur } \partial V. \end{array} \right. \quad (1.63)$$

Le tenseur des modules tangents $L^{tg} = \frac{\partial^2 w}{\partial \varepsilon^2}(\varepsilon_0^{eq})$ est en règle générale anisotrope même si le comportement local est isotrope. Dans le cas d'un matériau isotrope obéissant à (1.61b) et (1.62), le tenseur des modules tangents s'écrit :

$$L^{tg}(\varepsilon) = L(\varepsilon) + \frac{4}{3} \frac{1}{\varepsilon_{eq}} \frac{\partial \mu^{sc}}{\partial \varepsilon_{eq}}(\varepsilon_{eq}) \text{dev}(\varepsilon) \otimes \text{dev}(\varepsilon) \quad (1.64)$$

Notons également qu'une nouvelle approche, récemment proposée par Ponte Castañeda [73], n'a recours ni à une linéarisation sécante, ni à une linéarisation tangente du comportement local, mais à une approche intermédiaire.

Approches variationnelles basées sur l'introduction d'un Milieu Linéaire de Comparaison

Initialement, Talbot et Willis [87] ont proposé d'étendre l'approche variationnelle de Hashin et Shtrikman [41] au cas non linéaire en introduisant un milieu linéaire homogène de référence de potentiel $w^0 = \frac{1}{2} \varepsilon : L^0 : \varepsilon$ et de module effectif L^0 uniforme, de volume identique au milieu hétérogène, soumis aux mêmes conditions aux limites et à un champ de polarisation uniforme par morceaux. Par cette technique, ces auteurs aboutissent à une majoration de l'énergie du milieu hétérogène $W(E)$ quel que soit le choix de w^0 . Le milieu linéaire introduit n'est pas très riche : il ne contient que peu d'information sur la microstructure du matériau étudié.

Au début des années 90, Ponte Castañeda [70] et [71] a proposé une nouvelle approche variationnelle basée sur l'introduction d'un milieu linéaire de comparaison fictif multi-phasé. Cette approche variationnelle conduit à une majoration du potentiel effectif du milieu non-linéaire dont le statut

dépend du modèle d'homogénéisation linéaire appliqué au milieu fictif. Ce dernier a été introduit grâce à une linéarisation sécante du comportement local au voisinage d'une déformation de référence ε_0^{eq} qui est associée, dans cette approche, au moment d'ordre 2 de la déformation [83]. Ce point est abordé en détail dans le chapitre 4.

Une approche similaire a été proposée par Suquet [82] pour traiter le cas des matériaux hétérogènes dont le comportement local est gouverné par une loi puissance.

Une approche plus récente, également due à Ponte Castañeda [72], consiste à introduire cette fois-ci un milieu linéaire de comparaison fictif et également multi-phasé mais différent de celui introduit précédemment. Ce milieu fictif est un milieu thermoélastique dans lequel chaque phase r possède une précontrainte et un module tangent fonction d'une déformation de référence qui est associée à la moyenne de la déformation dans la phase correspondante. De par sa construction, ce principe variationnel ne fournit qu'une estimation du comportement global et conduit à deux estimations différentes du potentiel effectif selon que l'on envisage des conditions de contraintes ou de déformations homogènes au bord : cette méthode, dite du second ordre, souffre d'un "saut de dualité".

Toutes ces approches variationnelles ne peuvent être appliquées qu'aux matériaux hétérogènes dont le comportement des phases dérive d'un unique potentiel.

Pour finir nous citerons une autre approche qui permet d'estimer le comportement effectif d'un milieu hétérogène : il s'agit de la méthode affine [56] qui transforme un problème non linéaire en un problème linéaire grâce à une linéarisation affine du comportement local. Bien qu'utilisant la même linéarisation du comportement local que Ponte Castañeda [72], cette approche n'est pas fondée sur la même technique et comprend quelques faiblesses différentes de [72] et de [70] : bien qu'il n'y ait pas de saut de dualité, le comportement macroscopique issu d'une telle approche ne dérive pas forcément d'un potentiel. Cependant, elle est susceptible d'une extension aux comportements régis par deux potentiels.

1.7 Autres applications des principes de changement d'échelle

Les applications des méthodes de changement d'échelle abordent des horizons nouveaux. Par exemple, l'application des techniques de changement d'échelle s'étend au cas des matériaux hyperélastiques [51] (parmi d'autres...), aux problèmes d'évolution de microstructure, aux calculs de charge limite et encore aux matériaux gouvernés par plusieurs potentiels [62].

Lorsque, au cours de sa durée de vie, un matériau est soumis à des charges cycliques ou permanentes, sa microstructure évolue : création de nouvelles fissures, évolution de la forme des grains ou de la texture, création de nouvelles cavités, changement de la distribution des phases, etc. Il convient donc, pour rester le plus réaliste possible, de prendre en compte dans les modèles, numériques ou analytiques, cette évolution de la microstructure. Des modèles récents ont été proposés dans cette optique. Par exemple Gârăjeu et coll [35] proposent un modèle micromécanique pour modéliser l'anisotropie de l'endommagement dans les matériaux ductiles au travers de la croissance de cavités jusqu'à la coalescence. Ce modèle prend en compte l'évolution de la forme et de la distribution des cavités.

Attardons-nous un peu sur les calculs de charge limite et à la définition des domaines de résistance (ou de plasticité) macroscopique puisque, dans les chapitres qui vont suivre et notamment dans les chapitres 3 et 4, il sera souvent fait mention des surfaces d'écoulement.

Considérons le cas d'un matériau hétérogène où les différents constituants ont un comportement élastique-parfaitement plastique, sans écrouissage. Le domaine de résistance de chaque constituant

est caractérisé en chaque point x du V.E.R. par un ensemble convexe $P(x)$ dans l'espace des contraintes. Cet ensemble, appelé domaine de plasticité, est défini par une fonction seuil f dans l'espace des contraintes selon :

$$P(x) = \{\sigma, f(\sigma, x) \leq 0\}.$$

$P(x)$ définit l'ensemble des contraintes physiquement admissibles. Si chaque champ de contrainte local doit appartenir à un domaine de plasticité, il est fort probable qu'il en soit de même pour le champ des contraintes macroscopiques. Selon Suquet [81], l'ensemble des contraintes macroscopiques plastiquement admissibles appartient au domaine macroscopique suivant, selon le type de conditions aux limites choisi :

$$P^{hom} = \{\Sigma \text{ tel qu'il existe } \sigma(x) \text{ avec } \langle \sigma(x) \rangle = \Sigma, \sigma(x) \in P(x), \text{div} \sigma(x) = 0, \text{ pour tout } x \in V\}. \quad (1.65)$$

La frontière de P^{hom} est la surface d'écoulement du matériau hétérogène. Elle dépend du domaine de plasticité des différentes phases, de leur arrangement dans le V.E.R. et de leur fraction volumique. La détermination de ce domaine de plasticité (ou de résistance) macroscopique peut se faire selon une approche statique (1.65) ou selon une approche cinématique. L'énergie dissipative associée est définie par :

$$w(x, \varepsilon) = \sup_{\sigma^* \in P(x)} \sigma^* : \varepsilon. \quad (1.66)$$

Dans ce cas, $w(x, \varepsilon)$ est également appelé potentiel de dissipation plastique et est noté π . Selon Suquet [81], l'énergie effective $W(E)$ associée à $w(x, \varepsilon)$ par le principe variationnel (1.56) s'écrit :

$$W(E) = \sup_{\Sigma \in P^{hom}} \Sigma : E = \inf_{u \in K(E)} \langle w(x, \varepsilon) \rangle. \quad (1.67)$$

Le calcul de la surface d'écoulement des milieux poreux est un problème d'actualité. L'expression analytique de la surface d'écoulement la plus célèbre est celle de Gurson [39]. A partir des méthodes d'homogénéisation non linéaire que nous avons abordées dans la partie précédente et plus précisément à partir de (1.60), il est possible d'encadrer le domaine macroscopique P^{hom} . Pour les matériaux rigides parfaitement plastiques, c'est-à-dire pour $m = 0$, la borne de Reuss conduit à :

$$\sigma_0^R = \inf_{r=1, \dots, N} \sigma_0^{(r)}, \quad (1.68)$$

et la borne de Voigt reste inchangée. Si l'on dispose d'un composite à N phases rigides-plastiques, la borne de Reuss vaut la plus petite des limites d'élasticité parmi toutes les phases. La borne de Voigt, quant à elle, représente la moyenne de la contrainte limite de chaque phase. Pour un matériau composite, la surface d'écoulement est définie par une simple inclusion [74] :

$$\left\{ \Sigma \mid \Sigma_{eq} \leq \inf_{x \in V} \sigma_0(x) \right\} \subset P^{hom} \subset \left\{ \Sigma \mid \Sigma_{eq} \leq \langle \sigma_0 \rangle \right\} \quad (1.69)$$

D'autres méthodes numériques et analytiques existent pour estimer ou pour majorer la surface d'écoulement des milieux poreux. La majorité des problèmes d'homogénéisation actuels nécessite un recours à des outils de simulation numérique pour être traités.

1.8 Statut et amélioration du critère de Gurson .

Avant de commenter l'utilisation des techniques numériques en sciences des matériaux, on se propose de revenir sur le principe de mise en œuvre du critère de Gurson [39] et sur ses extensions micromécaniques.

1.8.1 Statut du critère de Gurson

Rappelons brièvement les principales étapes qui conduisent au critère de Gurson [39] déjà présenté dans le paragraphe 1.1.3.

Pour la classe particulière de microstructures qui est représentée par l'assemblage des sphères composites de Hashin [40], le critère (1.7) est une borne supérieure rigoureuse quel que soit le type de chargement considéré [67] [34]. Pour établir ce résultat, l'idée consiste à étudier le cas d'une sphère creuse de rayon externe b , à matrice rigide plastique, soumise à des déformations homogènes aux bords et à utiliser le principe variationnel définissant le potentiel de dissipation plastique macroscopique $\Pi(\dot{E})$ avec un champ de vitesse décomposé en une somme de termes traduisant un changement de volume, v^v , et un changement de forme, v^f , de la sphère :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Pi(\dot{E}) = \inf_{v \in K(\dot{E})} \langle \pi(\dot{\epsilon}(v)) \rangle \quad K(\dot{E}) = \{v, v = \dot{E}x \text{ sur } \partial V\} \\ v = v^v + v^f \text{ avec } v^v = \frac{A}{r^2} e_r \text{ et } v^f = Bx; \end{array} \right. \quad (1.70)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \pi(\dot{\epsilon}(v)) = \sigma_0 \dot{\epsilon}_{eq} & \text{dans la matrice,} \\ \pi(\dot{\epsilon}(v)) = 0 & \text{dans le pore.} \end{array} \right.$$

$\langle * \rangle$ représente la moyenne de $*$ sur V et B est un tenseur d'ordre 2. En choisissant un champ $v = \dot{E}x$ au bord de la matrice, les champs de vitesse v^v et v^f s'écrivent finalement :

$$\left\{ \begin{array}{l} v^v = \frac{\dot{E}_m b^3}{r^2} e_r \\ v^f = \text{dev} \dot{E} x, \end{array} \right. \quad (1.71)$$

où \dot{E}_m et $\text{dev} \dot{E}$ représentent respectivement la partie sphérique et la partie déviatorique du tenseur du taux de déformation macroscopique \dot{E} appliqué au bord extérieur de la sphère creuse. Avec une utilisation judicieuse de l'inégalité de Cauchy-Schwarz, permettant d'exprimer l'indépendance angulaire du potentiel de dissipation plastique macroscopique, le critère (1.7) conduit à une estimation par excès du domaine de résistance macroscopique [67] :

$$\Pi(\dot{E}) \leq \Pi^+(\dot{E}) = \sigma_0 \int_f^1 \left(\dot{E}_{eq}^2 + \frac{4\dot{E}_m^2}{y^2} \right)^{\frac{1}{2}} dy. \quad (1.72)$$

$\Pi^+(\dot{E})$ représente le potentiel de dissipation plastique macroscopique associé au critère (1.7) [36]. Le critère de plasticité de Gurson constitue donc une borne supérieure rigoureuse pour toute microstructure décrite par un assemblage de sphères de Hashin.

1.8.2 Extension micromécanique du critère de Gurson : Borne de Gārājeu

Les diverses extensions du critère de Gurson décrites dans le paragraphe 1.1.3 sont purement heuristiques et ne dérivent pas d'une démarche purement micromécanique. Gārājeu [34] propose d'étendre l'approche de Perrin [67] au cas d'une sphère creuse de rayon interne a et de rayon externe b , soumise à des déformations homogènes au bord et dont la matrice a un comportement viscoplastique non-linéaire (1.74). Le champ de vitesse v admissible avec les conditions de déformation homogène au bord est à nouveau décomposé en la somme de deux termes traduisant l'expansion v^v et le changement de forme v^f de la sphère creuse. Le problème variationnel est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Pi(\dot{E}) = \inf_{v \in K(\dot{E})} \langle \pi(\dot{\epsilon}(v)) \rangle \quad K(\dot{E}) = \{v, v = \dot{E}x \text{ sur } \partial V\} \\ v = v^v + v^f \text{ avec } v^v = \frac{\dot{E}_m b^3}{r^2} e_r \text{ et } v^f \text{ compatible avec } \text{dev} \dot{E} \cdot x \text{ au bord,} \end{array} \right. \quad (1.73)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \pi(\dot{\epsilon}(v)) = \frac{\sigma_0 \dot{\epsilon}_0}{m+1} \left(\frac{\dot{\epsilon}_{eq}(v)}{\dot{\epsilon}_0} \right)^{m+1} & \text{dans la matrice,} \\ \pi(\dot{\epsilon}(v)) = 0 & \text{dans le pore.} \end{array} \right. \quad (1.74)$$

Tout champ de vitesse v conduit à une majoration du potentiel (1.73a); l'expansion de la sphère est décrite par la composante sphérique du taux de déformation macroscopique \dot{E}_m et son changement de forme par la partie déviatorique du taux de déformation macroscopique \dot{E}^d . Le choix effectué par Perrin [67] est de considérer que le champ de vitesse $v^f = \dot{E}^d x$ est uniforme dans toute la matrice. Gārājeu n'émet aucune restriction sur le choix du champ v^f , i.e., la partie déviatorique du taux de déformation peut fluctuer au sein de la matrice.

Afin de simplifier le problème de départ (1.73), Gārājeu introduit un *milieu linéaire de comparaison* représenté par une sphère creuse, identique à celle du problème de départ, soumise aux mêmes conditions aux limites et dont la matrice a un comportement élastique linéaire isotrope :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{div}(\sigma) & \text{dans } V \\ \sigma_{ij} = \lambda \text{Tr}(\epsilon(v)) \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij}(v) & \text{dans la matrice} \\ v(x) = \dot{E} \cdot x & \text{sur } \partial V \\ \sigma(x) \cdot n(x) = 0 & \text{sur } \partial P, \end{array} \right. \quad (1.75)$$

où ∂V représente le bord extérieur de la sphère, ∂P celui du pore et le couple (λ, μ) les coefficients de Lamé. Le problème (1.75), traité par Christensen, a pour solution v :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_r = U_r(r) \sin^2 \theta \cos 2\phi \\ v_\theta = U_\theta(r) \sin \theta \cos \theta \cos 2\phi \\ v_\phi = U_\phi(r) \sin \theta \sin 2\phi. \end{array} \right. \quad (1.76)$$

Selon Gārājeu, le champ v^f , solution du problème d'élasticité linéaire (1.75), est admissible pour la minimisation (1.73). Ainsi, les champs (1.76) vont permettre de déterminer le module de cisaillement du milieu linéaire de comparaison soumis à des conditions de déformation homogène au bord :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu^{hom} = \mu \frac{1-f}{\tau(f)} \\ \tau(f) = \frac{1-f}{1 - \frac{5f(16+19f^{\frac{7}{3}})}{(3+2f)(16+19f^{\frac{7}{3}}) + 168f(1-f^{\frac{2}{3}})^2}} \end{array} \right. \quad (1.77)$$

Le potentiel de déformation macroscopique $\Pi(\dot{E})$ qui s'écrit finalement (indépendamment de μ) :

$$\Pi(\dot{E}) = \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0^m(m+1)} \int_f^1 \left(\frac{\dot{E}_{eq}^2}{\tau(f)} + \frac{4\dot{E}_m^2}{y^2} \right)^{\frac{(m+1)}{2}} dy, \quad (1.78)$$

est associé au critère de plasticité ($m \rightarrow 0$) :

$$\tau(f) \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 + 2f \cosh \left(\frac{3 \Sigma_m}{2 \sigma_0} \right) - 1 - f^2 = 0. \quad (1.79)$$

Le critère (1.79) constitue une borne supérieure rigoureuse pour tout assemblage de sphères composites de Hashin. Lorsque $\tau(f) = 1$, μ^{hom} correspond à la borne de Voigt (1.77a) et (1.79) se réduit au critère de Gurson. Lorsque $\tau(f)$ vaut l'expression donnée dans (1.77), le critère de plasticité obtenu, appelé "borne de Garajeu", améliore en cisaillement pur la borne de Gurson initiale et converge vers celle-ci en pression hydrostatique pure. On serait alors tenté de prendre $\tau(f) = 1 + \frac{2}{3}f$, qui correspond pour μ^{hom} (1.77a) à la borne de Hashin et Shtrikman, afin que le modèle (1.78) atteigne en cisaillement pur la borne supérieure rigoureuse de Hashin et Shtrikman (1.80) améliorant ainsi celle de Gārājeu et de Gurson. Néanmoins avec une telle valeur de $\tau(f)$, la surface de plasticité [53]

$$\left(1 + \frac{2}{3}f \right) \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 + 2f \cosh \left(\frac{3 \Sigma_m}{2 \sigma_0} \right) - 1 - f^2 = 0, \quad (1.80)$$

ne constituerait plus une borne pour l'assemblage des sphères composites de Hashin mais uniquement une estimation, appelé "Estimation Gurson-HS".

1.9 Techniques numériques

L'amélioration croissante de la puissance de calcul lors de ces dernières années favorise le développement d'outils de simulation numérique de plus en plus sophistiqués. Ces derniers permettent d'intégrer plus d'information sur la microstructure d'un matériau hétérogène et leurs implications en sciences des matériaux est désormais une étape incontournable. En effet, ces calculs de structures ou encore appelés *calculs de microstructures* permettent de mieux comprendre les mécanismes locaux de déformation au sein d'un matériau hétérogène à l'échelle des hétérogénéités [31] : distribution des contraintes induite par la présence de cavités ou de particules, incompatibilité de déformation entre grains voisins dans un polycristal, etc. Ces calculs, souvent très lourds de mise en œuvre, de par le grand nombre de degrés de liberté du problème, nécessitent souvent un recours à des techniques de calcul parallèle [49].

La donnée supplémentaire que fournissent ces calculs par rapport aux modèles de changement d'échelle classiques est une description plus détaillée de l'hétérogénéité locale de déformation ou de contrainte au sein d'une même phase. Cette dernière est souvent responsable de l'initiation de l'endommagement dans le matériau. Ces simulations numériques ont aussi pour objectif de prédire les propriétés effectives des matériaux hétérogènes et de les comparer aux bornes et estimations existant dans la littérature et constituent une base fiable pour situer de nouvelles bornes ou estimations dérivant des techniques d'homogénéisation.

Ces outils numériques sont le plus souvent alimentés par des images de microstructures provenant soit directement de l'expérimentation soit de procédés de simulation de microstructures [47]. En

effet, il n'est pas toujours possible d'avoir accès expérimentalement à des informations tridimensionnelles sur la microstructure d'un matériau hétérogène. Les informations bidimensionnelles sont faciles d'obtention et sont parfois suffisantes mais les informations 3D donnent une vision plus réaliste de la microstructure. D'où la nécessité de recourir aux outils de la morphologie mathématique pour générer des microstructures de morphologies diverses [47] : matériaux polycristallins, matériaux poreux, à amas, etc. Ces microstructures permettent ensuite d'alimenter divers codes de calculs en vue de déterminer le comportement macroscopique de la structure, l'hétérogénéité des champs locaux au sein des différentes phases, etc.

Par exemple, pour la détermination des propriétés effectives de matériaux hétérogènes dont les phases ont un comportement linéaire ou non linéaire, une méthode de calcul numérique par transformée de Fourier rapide a été proposée par Moulinec et Suquet [63] [64]. Elle permet, d'une part, de déterminer la réponse d'un matériau hétérogène de volume bidimensionnel (défauts sous forme de fibres longues) ou tridimensionnel contenant un grand nombre de défauts et, d'autre part, de donner accès aux champs locaux en chaque point du V.E.R. Cette méthode est décrite en détails dans le chapitre 3. Ce code de calcul est alimenté par une image de la microstructure pouvant provenir de l'expérience ou pouvant être simulée. De la même manière, Zohdi et coll [93] proposent une méthode numérique par éléments finis permettant de calculer le comportement macroscopique d'un milieu poreux 3D dont les cavités sont de forme sphérique ou ellipsoïdale et donnant également accès aux champs locaux au voisinage de ces dernières.

Les matériaux polycristallins peuvent également être étudiés au travers de simulations numériques complexes. Des microstructures 2D ou 3D contenant un grand nombre de grains sont générées à partir d'une partition de l'espace en cellules de Voronoï [26] et à chaque cellule est associée une orientation cristalline [2] [21]. Au travers de calculs par éléments finis, la distribution des contraintes et des déformations locales est accessible dans chaque grain et la réponse macroscopique du composite est déterminée.

Toutefois il reste nécessaire de comparer les champs locaux issus de modèles numériques à ceux obtenues expérimentalement [16] [37] parmi d'autres...

1.10 Conclusion

Dans cette partie, nous nous sommes attachés à décrire dans un premier temps les principaux modèles de la rupture fragile et ductile et dans un second temps, la méthodologie des méthodes de changement d'échelle. Avant d'utiliser et de mettre en œuvre des modèles d'homogénéisation non-linéaire pour mettre en évidence l'effet d'amas sur le comportement macroscopique et sur les mécanismes locaux mis en jeu dans la zone de transition fragile - ductile de l'acier de cuve, il est nécessaire d'étudier plus en détail la microstructure de cet acier : possède-t-il réellement une microstructure à amas isolés (amas mis en évidence au voisinage d'un site de clivage) ? Sinon, à quel type de microstructure avons-nous à faire ? Dispose-t-on d'un indicateur morphologique permettant de définir la morphologie d'une microstructure : aléatoire ou amas (de quel type) ? Cette analyse va également nous permettre d'avoir une estimation de la teneur en particules de MnS et de tester de manière plus pertinente l'hypothèse de sphéricité des cavités. La réponse à toutes ces questions fait l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 2

Simulation de microstructures et analyse statistique de la notion d'amas. Application à une microstructure réelle

Les propriétés mécaniques d'un matériau hétérogène dépendent fortement de l'agencement spatial de ses différents constituants. Les moyens informatiques actuels ne nous permettant pas de mettre en œuvre des calculs de structure sur la microstructure réelle du matériau hétérogène, il convient de ne prendre en compte que des informations statistiques sur la répartition spatiale des défauts qu'elle contient, leur forme, leur orientation, etc. Ces informations ne sont disponibles expérimentalement, en général, qu'au travers d'une ou plusieurs coupes 2D du matériau à étudier.

L'étude de la morphologie de la microstructure est une étape importante dans la caractérisation de la microstructure des matériaux hétérogènes; il a récemment été montré [59] d'un point de vue numérique, que le regroupement de trous cylindriques en amas à une influence non négligeable sur le comportement des matériaux poreux. Il convient donc de développer des indicateurs morphologiques capables de définir le type de la microstructure d'un matériau réel. Ce chapitre est consacré au développement d'un tel indicateur. Celui-ci est basé sur l'analyse statistique de la répartition hétérogène des défauts en amas par l'utilisation d'outils d'analyse statistique tels que la fonction distance. Notre attention se limite ici au cas des microstructures périodiques pour lesquelles la microstructure est complètement connue. Afin de mieux comprendre comment la fonction distance permet de distinguer des échelles microstructurales, une phase de simulation de microstructure de morphologies diverses (aléatoire, à amas isolés et connectés) est indispensable. La présentation des techniques de simulation de microstructures périodiques développées au cours de cette thèse constitue l'objet de la première partie de ce chapitre.

La phase de simulation de microstructures tient une place importante dans ces travaux et notamment dans les chapitres suivants. Elle va nous permettre d'alimenter divers types de calculs numériques, par éléments finis et par transformée de Fourier rapide. Ces calculs numériques ont pour but de montrer l'influence de la répartition hétérogène des pores en amas sur les modes de déformation locaux et sur l'activation des mécanismes de rupture ductile et fragile.

L'application de la fonction distance sur différentes microstructures, avec et sans amas, a pour but de comprendre comme cette dernière permet de mettre en évidence différentes échelles microstructurales. Une analyse complémentaire ayant pour but de faire la distinction entre les types d'amas (isolés, connectés ou aléatoires) est également menée. Cette étude est présentée dans la seconde partie, l'idée étant, à terme, d'appliquer ces outils d'analyse statistique sur la microstructure de l'acier

de cuve afin de mettre en évidence sa morphologie. Est-ce une microstructure à amas ? Ces amas sont-ils isolés ou connectés ? Une analyse par traitement d'images permettra de fournir des données supplémentaires telles que la forme des particules de MnS, leur orientation et leur proportion. Cette analyse constitue l'objet de la troisième partie.

Actuellement, les seules informations auxquelles nous avons accès expérimentalement sont celles provenant d'une coupe 2D d'un matériau hétérogène. L'information disponible sur cette coupe ne permet pas de conclure directement d'une part, sur la forme 3D des défauts (sont-ce des disques plats, de forme sphérique ou de forme allongée ?) et, d'autre part, sur l'agencement spatial des défauts dans le matériau réel tridimensionnel. La question de la pertinence des informations statistiques obtenues sur une ou plusieurs coupes 2D d'un matériau hétérogène vis-à-vis de celles issues du matériau réel sera abordée dans la partie 4 de ce chapitre.

2.1 Principe de simulation de microstructures périodiques

L'analyse d'images constitue une étape importante pour l'étude de la microstructure d'un matériau hétérogène. Elle permet d'extraire des informations statistiques sur la répartition des défauts, leur forme, leur orientation, ou encore d'étudier la forme des grains dans un polycristal, c'est à dire définir la frontière entre les différents grains, etc. [26].

L'analyse d'images, pour une application en science des matériaux, se décompose en trois séquences :

- a) Acquisition d'une ou plusieurs images
- b) Traitement de l'image et extraction d'informations pertinentes sur la microstructure
- c) Modélisation d'une microstructure à partir de ces informations.

Dans cette partie, nous présenterons des méthodes pour modéliser une microstructure, avec et sans séparation d'échelle, à partir d'informations tels que la taille des défauts, leur forme (sphérique ou cylindrique dans notre cas), leur proportion, etc. L'acquisition et le traitement des images seront abordés un peu plus loin dans le texte, i.e., lorsque nous étudierons la morphologie de la microstructure de l'acier de cuve.

2.1.1 Cas des microstructures aléatoires

La situation que nous souhaitons modéliser est celle d'un arrangement aléatoire de disques censé représenter la microstructure d'un matériau poreux (ou à particules). Plusieurs schémas sont possibles, donnant lieu à divers types de microstructures, en particulier les suivants auxquels il nous a semblé suffisant de nous intéresser :

- a) Schéma booléen classique
- b) Schéma de sphères dures
- c) Schéma de type "cerise".

Pour obtenir une image binaire de la microstructure, des grains primaires aléatoires sont implantés aux points d'un processus de Poisson. Ces grains peuvent être de forme quelconque : sphère, polyèdre, etc. Dans notre cas, ces grains primaires seront de forme circulaire en 2D et sphérique en 3D. Bien que la forme des pores ne soit pas sphérique en réalité¹, cette approximation permet une mise en œuvre plus simple. En d'autres termes, il suffit de tirer aléatoirement, selon un processus de Poisson,

¹Les particules de MnS sont majoritairement de forme allongée avec un rapport de forme de 0,5. Cette donnée provient de l'analyse expérimentale de la microstructure de l'acier de cuve menée dans la partie 3 de ce chapitre.

les coordonnées du centre (x, y) et le rayon r de chaque disque (grains primaires de forme circulaire) jusqu'à atteindre soit un nombre maximal de particules, soit une fraction surfacique maximale, selon le choix de l'utilisateur. Le choix du test d'arrêt est discuté plus loin dans le texte.

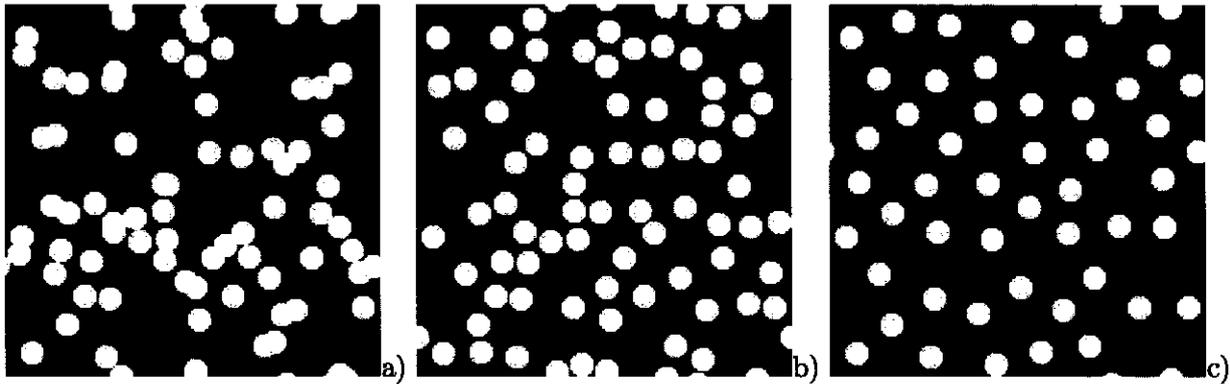


FIG. 2.1 – Exemples de microstructures aléatoires périodiques à taille de disques identique a) Schéma booléen classique b) Schéma de sphères dures c) Schéma de type “cerise”

Pour le schéma booléen classique, il n'y a aucune restriction sur la position des disques. Les disques peuvent se chevaucher (Figure 2.1a).

En revanche, pour le schéma de sphères dures et le schéma de type “cerise”, une condition sur la distance minimale séparant les disques doit être respectée : à chaque nouvelle implémentation d'un disque, la distance entre le bord du nouveau disque simulé et le bord de l'ensemble des autres disques déjà simulés est déterminée. La plus petite de ces distances doit au minimum être nulle dans le cas d'un schéma de sphères dures, autorisant ainsi les disques à entrer en contact mais interdisant le chevauchement entre disques voisins (Figure 2.1b).

Pour un schéma de type “cerise”, la plus petite de ces distances doit au minimum valoir une distance d_{min} positive et non nulle, fixée par l'utilisateur. Les disques ne peuvent donc ni se chevaucher, ni entrer en contact les uns avec les autres : leurs bords doivent au minimum être séparés d'une distance d_{min} (Figure 2.1c).

Afin de satisfaire la périodicité des images, deux conditions supplémentaires doivent être prises en compte. La première concerne les disques intersectant l'un des bords de l'image qui se voient découpés en deux parties (Figure 2.2b) ou en quatre parties si le disque intersecte l'un des quatre coins de l'image. La seconde condition, qui n'est à respecter que dans le cas de schémas de sphères dures ou de type “cerise”, concerne la prise en compte des disques dans les 8 images voisines (Figure 2.2a). La microstructure d'un matériau hétérogène est ainsi représentée par une image binaire où les défauts sont en blanc et la matrice en noir. Ces images peuvent être de formes différentes : carrée ou rectangulaire. Les images de forme carrée seront fréquemment utilisées par la suite. Elles sont de côté unitaire et leur résolution est définie par l'utilisateur.

Il est possible de résumer l'implémentation des disques pour les schémas de sphères dures et de type “cerise” en introduisant les ensembles A_i et B_j définissant respectivement les coordonnées du centre du nouveau disque simulé $A_i = (x_i, y_i)$ de rayon r_i et les coordonnées du centre des N disques déjà simulés $B_j = (x_j, y_j)$ de rayon r_j . La distance euclidienne minimale d_j devant séparer le bord des

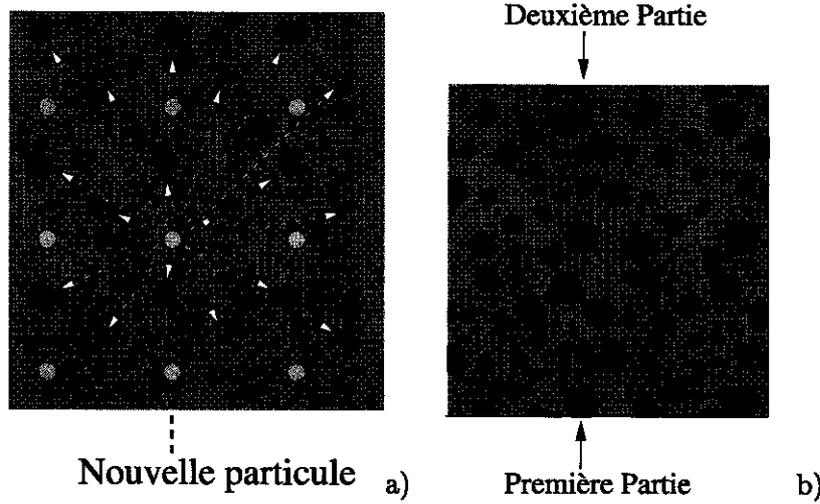


FIG. 2.2 – a) Distances aux bords des particules dans l'image finale (image centrale) et les 8 images voisines "fictives" b) Représentation schématique du traitement d'un défaut intersectant un des bords

disques est définie comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Schéma de sphères dures :} \\ d_j = \min_{i=1 \dots 9N} \left\{ d_i = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} - r_i - r_j \right\} \geq 0 \\ \text{Schéma de type "cerise" :} \\ d_j = \min_{i=1 \dots 9N} \left\{ d_i = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} - r_i - r_j \right\} \geq d_{\min} > 0. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

Dans ces équations, $9N$ correspond au nombre total de disques qu'il faut prendre en compte pour respecter l'hypothèse de périodicité de l'image finale : N disques dans l'image où sont implémentés les disques et N disques dans chacune des 8 images voisines "fictives" comme l'illustre la figure 2.2. Selon le schéma retenu, de sphères dures ou de type "cerise", le nouveau disque généré doit respecter l'une des conditions évoquées précédemment. Dans le cas contraire, ce disque n'est pas pris en compte et un nouveau disque est simulé, ceci jusqu'à le respect d'une des conditions 2.1 choisie par l'utilisateur. L'algorithme utilisé pour simuler les microstructures aléatoires est le suivant :

Implémentation i : N disques déjà simulés.

a) *Implémentation du disque N+1 (coordonnées du centre et du rayon).*

b) *Si schéma de sphères dures ou de type "cerise" : Vérification des conditions 2.1.*

c) *Condition respectée :*

oui : Implémentation du disque N+2

non : Nouvelle implémentation du disque N+1

d) *Test d'arrêt.*

(2.2)

L'algorithme (2.2) dépend fortement de l'histoire de la simulation. Il s'arrête une fois que le nombre de particules simulées atteint celui fixé par l'utilisateur ou dès que la fraction surfacique de particules atteint celle fixée par l'utilisateur. Une discussion plus approfondie est menée un peu plus loin dans le texte sur les différents choix possibles de test d'arrêt. Pour ce genre d'algorithme, l'implémentation de chaque nouveau disque dépend de l'histoire de la simulation puisqu'une condition sur la distance minimale devant séparer le bord de chaque disque doit être respectée.

Le choix de l'algorithme 2.2 est purement arbitraire. On aurait très bien pu commencer par simuler une microstructure suivant un schéma booléen classique puis réordonner les disques pour obtenir soit un schéma de sphères dures, soit un schéma de type "cerise" [29]. Cet autre type de simulation conduit à d'autres microstructures dont la fraction volumique est plus élevée, typiquement supérieure à 35%, fraction volumique maximale qui puisse être atteinte à partir d'un schéma de sphères dures [29]. Nous n'avons pas besoin de recourir à un tel algorithme du fait des faibles valeurs des fractions surfaciques recherchées.

Ce procédé de simulation de microstructures aléatoires peut être étendu en vue de modéliser une microstructure de Hashin [40]. L'assemblage des sphères composites de Hashin [40] constitue une représentation bien particulière de la microstructure d'un matériau hétérogène. Elle résulte d'un assemblage de sphères composites homothétiques, de fraction volumique identique égale à la fraction volumique macroscopique. Les microstructures aléatoires simulées à partir d'un schéma de type "cerise" tendent à s'en rapprocher lorsque la distance minimale devant séparer le bord des disques est suffisamment importante. Toutefois, à partir de la méthode de génération de microstructures décrite précédemment, il est possible de simuler une microstructure de Hashin. Pour ce faire, il suffit d'implanter des motifs élémentaires (disques circulaires de rayon r_d centrés dans une matrice circulaire de rayon $r_m > r_d$) aux points d'un processus de Poisson selon un schéma de sphères dures ou de type "cerise". Mais, dans ce cas, ce sont les motifs élémentaires qui peuvent entrer en contact sans se chevaucher.

Il existe une autre façon de générer une microstructure de Hashin, implémentée dans un programme de génération de sphères composites de Hashin développé par Hervé Moulinec (LMA, Marseille). La méthode consiste à remplir tout l'espace avec des sphères composites de grande taille. L'espace restant est ensuite comblé avec des sphères homothétiques de plus petite taille mais de rapport r_d/r_m constant. Le processus de remplissage s'arrête une fois l'espace quasiment rempli de sphères. Les zones vides sont alors comblées avec de la matrice. Nous n'obtenons ainsi pas un véritable assemblage de Hashin, puisque l'espace n'est pas rempli "à l'infini", mais le résultat final en est tout de même très proche. La microstructure simulée doit bien sûr respecter les conditions de périodicité décrites précédemment (figure 2.3).

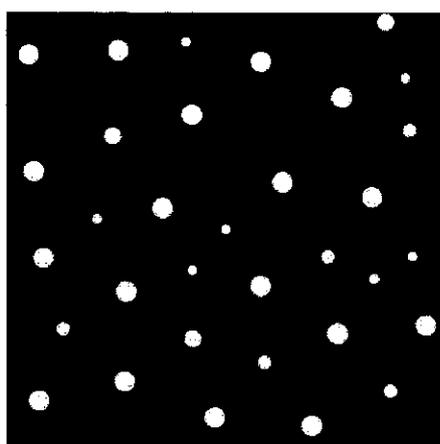


FIG. 2.3 – Assemblage de cylindres composites de Hashin

Le choix du paramètre d_{min} est purement arbitraire et peut déterminer diverses microstructures : plus ce paramètre est petit, plus la répartition des disques sera telle que la microstructure obtenue aura des zones plus denses que d'autres en disques. Mais ceci n'est pas suffisant pour obtenir une

microstructure présentant un effet de séparation d'échelle. Il faut recourir à des simulations plus sophistiquées basées sur l'intersection de schémas booléens de taille caractéristique différente.

2.1.2 Cas des microstructures à amas

Il nous faut à présent mettre en œuvre une méthode pour simuler des microstructures à amas afin de pouvoir comparer les informations statistiques obtenues sur des microstructures "aléatoires" (i.e, sans forcer la formation d'amas) et sur des microstructures à amas isolés et connectés. Afin de faciliter l'étude des informations statistiques provenant de ces deux types de microstructure, les microstructures à amas doivent pouvoir se distinguer aisément des microstructures "aléatoires" représentées sur la figure 2.1.

Exemple

A partir des modèles élémentaires décrits précédemment, il est possible de construire des structures plus complexes présentant des séparations d'échelles distinctes reproduisant les fluctuations des concentrations locales observées dans les matériaux réels [48] [47].

Pour mettre en œuvre des microstructures à plusieurs échelles, plusieurs méthodes sont possibles. Elles sont basées sur les unions ou les intersections de deux ensembles aléatoires indépendants :

- a) Mosaïque Poissonnienne + schéma booléen de disques
- b) Schéma booléen de disques à deux échelles.

Le modèle hiérarchique, permettant de simuler des microstructures présentant deux échelles séparées, est construit en deux étapes. La première consiste à définir un ensemble de cellules, à partir d'une partition de l'espace par des droites aléatoires de Poisson [27]. N'importe quelle partition aléatoire de l'espace peut être utilisée dans cette première étape. La deuxième étape consiste à intersecter chaque cellule par une réalisation d'un second ensemble aléatoire, les réalisations de deux cellules quelconques étant indépendantes. De la même manière, tout type de processus aléatoire peut être utilisé dans cette étape comme, par exemple, les schémas booléens définis précédemment (Figure 2.4).

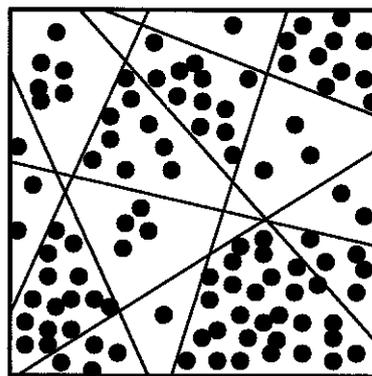


FIG. 2.4 – Représentation schématique d'un modèle hiérarchique à deux échelles : mosaïque Poissonnienne + schéma booléen de disques.

D'un point de vue purement numérique cette méthode s'avère relativement lourde de mise en œuvre. On lui préférera donc la seconde technique qui consiste à intersecter deux schémas booléens de taille caractéristique différente.

Intersection de schémas booléens

Cette méthode se décompose également en deux étapes. La première consiste à générer, selon le principe décrit dans le paragraphe 2.1.1, une microstructure aléatoire contenant des disques de rayon r_D^i . La seconde étape consiste également à générer une microstructure aléatoire contenant des disques de rayon r_{Am}^i . Mais les rayons des disques de la première réalisation sont beaucoup plus petits que ceux de la deuxième réalisation ($r_D^i \ll r_{Am}^i$), en vue de permettre une séparation d'échelle microstructurale. Il suffit ensuite de superposer fictivement les deux microstructures obtenues (Figure 2.5a) et de ne conserver que les disques dont le centre se situe soit à l'intérieur, soit à l'extérieur des disques de la seconde réalisation, donnant ainsi lieu à des microstructures, respectivement, à amas isolés (Figure 2.5b) ou à amas connectés (Figure 2.5c). Un schéma de sphères dures ou de type "cerise" aurait également pu être utilisé pour simuler les amas. Dans les deux étapes, les schémas booléens utilisés sont ceux définis dans le paragraphe précédent, à savoir un schéma booléen classique, de sphères dures ou de type "cerise".

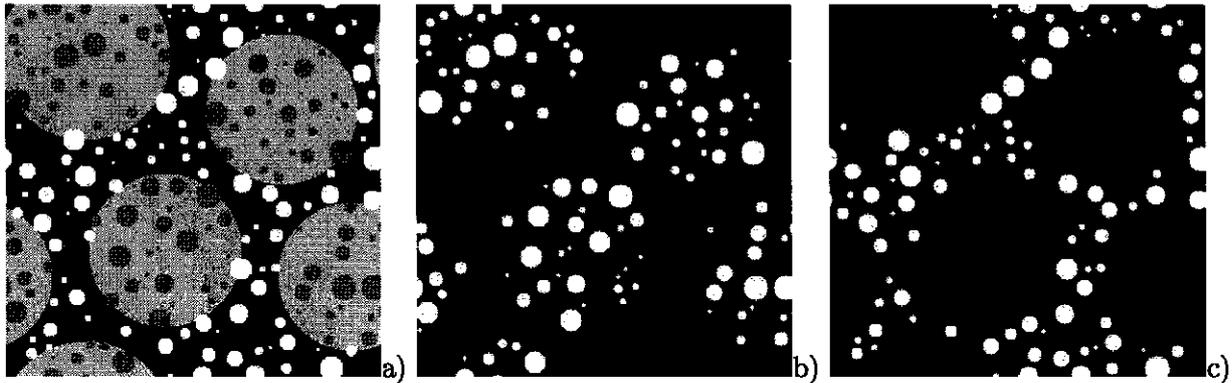


FIG. 2.5 – Exemples de microstructures périodiques à amas a) Superposition des schémas booléens b) Intersection des schémas booléens c) Complémentaire de l'intersection des schémas booléens

L'algorithme utilisé pour générer, en 2D, des microstructures à amas isolés ou connectés peut se résumer comme suit : en introduisant les ensembles D_i et Am_i correspondant respectivement aux coordonnées du centre (x_D^i, y_D^i) du disque i de rayon r_D^i et à la surface du disque j de centre (x_{Am}^j, y_{Am}^j) et de rayon r_{Am}^j tel que $r_D^i \ll r_{Am}^j$ ($D_i = \{x_D^i, y_D^i, r_D^i\}$ et $Am_i = \{x_{Am}^i, y_{Am}^i, r_{Am}^i\}$), l'intersection de deux schémas booléens peut se résumer selon l'algorithme suivant :

- a) Réalisation d'un premier processus aléatoire constitué de N disques D_i selon (2.2) et le type de schéma retenu (booléen classique, sphères dures ou cerise)
- b) Réalisation d'un second processus aléatoire constitué de M disques Am_i selon (2.2) et le type de schéma retenu (booléen classique, sphères dures ou cerise)
- c) Intersection des deux schémas booléens :
 - Microstructures à amas isolés : (2.3)

$$\begin{cases} \text{Pour } i = 1..N \quad j = 1..M \text{ si } D_i \in Am_j, \text{ Particule } i \text{ conservée} \\ \text{sinon, Particule éliminée.} \end{cases}$$
 - Microstructures à amas connectés :

$$\begin{cases} \text{Pour } i = 1..N \quad j = 1..M \text{ si } D_i \in Am_j, \text{ Particule } i \text{ éliminée} \\ \text{sinon, Particule conservée.} \end{cases}$$

Ce procédé de simulation n'est pas très coûteux en espace mémoire puisqu'il suffit de stocker en mémoire uniquement le rayon et les coordonnées du centre des disques des deux réalisations.

Afin d'obtenir une microstructure à amas isolés, il convient d'intersecter un schéma booléen classique ou de sphères dures ou de type "cerise" à l'échelle des défauts et un schéma booléen de type "cerise" à l'échelle des amas. Le complémentaire de cette intersection donnera une microstructure à amas connectés. Une microstructure à amas aléatoires, i.e., une microstructure où certains amas sont isolés et d'autres connectés, s'obtient en retenant un schéma booléen à l'échelle des amas. Le schéma retenu à l'échelle des défauts influe peu sur la nature des amas.

Dans les deux étapes de simulation de microstructure aléatoire de taille caractéristique différente, le test d'arrêt ne porte pas sur les fractions surfaciques des images mais sur le nombre de disques à implémenter : dans les deux cas un schéma de type booléen est imposé ainsi qu'un nombre de disques à implémenter. Dans ce type de simulation, le test d'arrêt ne porte ni sur la fraction surfacique, ni sur le nombre final de disques à obtenir. L'algorithme s'arrête une fois la microstructure à amas obtenue, i.e., une fois que l'intersection ou le complémentaire de l'intersection est réalisé. Avec ce genre d'algorithme, il est très difficile, voire impossible, de contrôler la fraction surfacique de l'image finale (après intersection). Pour obtenir la fraction surfacique désirée, il convient de faire plusieurs tentatives en jouant sur les paramètres de simulation : nombre de disques dans la première réalisation, distance minimale séparant le bord des amas (disques de la seconde réalisation), etc. De manière générale, la précision est assez bonne. Dans le cas des microstructures à amas avec des tailles de disques identiques, la fraction volumique finale correspond à la fraction volumique désirée pour les raisons qui seront évoquées dans le paragraphe 2.1.4. Pour les microstructures à amas avec des tailles de disques variables, la précision obtenue correspond à la précision désirée avec une erreur de moins d'un pourcent.

Le principe de l'intersection de schémas booléens est une méthode robuste conduisant à des microstructures à deux échelles microstructurales distinctes : échelle des amas et échelle des défauts. Cette méthode, bien que simple de mise en œuvre, nécessite un grand nombre de test, un par particule : le défaut est-il ou n'est-il pas dans l'amas ? Ainsi, plus le nombre de défauts est élevé, plus la génération de la microstructure sera longue. C'est néanmoins cette méthode qui sera utilisée dans la suite pour générer des microstructures à amas.

Autre méthode pour la modélisation de microstructures à amas

Une autre méthode permettant de générer des microstructures à amas isolés et connectés est également basée sur l'intersection de schémas booléens. Le principe de cette méthode diffère quelque peu de celui basé sur l'intersection de schémas booléens que nous avons présenté précédemment, mais conduit exactement au même résultat. Cette autre méthode permet de s'affranchir de certaines faiblesses de l'algorithme (2.3) évoquées précédemment.

Pour simuler une microstructure à amas, il convient dans un premier temps de générer un premier schéma booléen à l'échelle des amas (disques gris sur la figure (2.5)) dont le rayon des disques est noté r_{Am} . Dans un second temps, des grains primaires de forme circulaire et de rayon $r_D \ll r_{Am}$ sont implémentés aux points d'un processus de Poisson, points qui correspondent aux coordonnées du centre des disques. Suivant le type d'amas que l'on souhaite obtenir, les centres des disques se situent soit à l'intérieur, des disques de la première réalisation, soit à l'extérieur conduisant à des microstructures à amas isolés et connectés respectivement. Le principe de simulation conduisant à

des microstructures à amas se résume comme suit :

a) Réalisation d'un premier processus aléatoire constitué de M disques Am_i selon (2.2) et le type de schéma retenu (booléen classique, sphères dures ou cerise)

b) Intersection de schémas booléens :

Réalisation d'un second processus aléatoire constitué de N disques D_i selon (2.2) et le type de schéma retenu (booléen classique, sphères dures ou cerise)

- Microstructures à amas isolés : (2.4)

$$\begin{cases} \text{Pour } i = 1..N \quad j = 1..M \text{ si } D_i \in Am_j, \text{ Particule } i \text{ conservée} \\ \text{sinon, Particule éliminée.} \end{cases}$$

- Microstructures à amas connectés :

$$\begin{cases} \text{Pour } i = 1..N \quad j = 1..M \text{ si } D_i \in Am_j, \text{ Particule } i \text{ éliminée} \\ \text{sinon, Particule conservée.} \end{cases}$$

Le choix du schéma retenu (booléen classique, sphères dures ou cerise) lors de la première réalisation (échelle des amas) conditionne la microstructure finale : un schéma de type "cerise" donnera lieu à une microstructure à amas isolés ou connectés si les disques de la seconde réalisation sont générés respectivement à l'intérieur ou à l'extérieur des disques de la première réalisation. Une microstructure à amas aléatoires peut être obtenue en générant les disques de la seconde réalisation à l'intérieur des disques de la première réalisation, obtenue selon un schéma booléen classique ou selon un schéma de sphères dures. Naturellement, dans le cas de microstructures périodiques, il faut tenir compte de la présence de défauts dans les images voisines et ce pour les deux réalisations.

Cet algorithme nécessite plusieurs tests à chaque implémentation de disque dans la seconde réalisation. Il faut tester la distance minimale entre le bord des disques, si un schéma de sphères dures ou de type "cerise" est retenue, les conditions de périodicité et la position du centre du disque : est-il à l'intérieur ou à l'extérieur des disques de la première réalisation ?

Ce principe de simulation de microstructures à amas isolés ou connectés est identique à celui décrit dans le paragraphe précédent, sauf pour ce qui concerne le test d'arrêt. En effet, ce principe de simulation permet de contrôler la fraction volumique de l'image et utilise les mêmes tests d'arrêt que ceux utilisés pour générer des microstructures aléatoires et que l'on abordera un peu plus loin dans le texte, au paragraphe 2.1.4.

2.1.3 Extension aux microstructures tridimensionnelles

Ces méthodes de simulation de microstructures 2D périodiques peuvent être étendues au cas 3D sans aucune difficulté. Les grains primaires correspondent dans ce cas à des sphères. Il faut donc générer une variable aléatoire indépendante supplémentaire correspondant à la troisième coordonnée du centre de chaque sphère, dans la direction z .

Les microstructures à amas isolés et connectés sont obtenues selon le même principe que celui décrit pour le cas 2D, i.e., par l'intersection et le complémentaire de l'intersection de schémas booléens respectivement. Les figures 2.6 présentent un exemple de microstructure aléatoire (Figure 2.6a), à amas isolés (Figure 2.6b) et à amas connectés (Figure 2.6c), les trois microstructures ayant des tailles de sphères identiques. Mais, comme pour le cas 2D, il est possible de générer des microstructures 3D à taille de particules et d'amas variable.

Il reste à évoquer le choix des paramètres morphologiques pour la simulation 2D et 3D de microstructures aléatoires et à amas isolés et connectés. Pour les microstructures, aléatoires ou à amas, avec des tailles de défauts identiques, la taille de ces derniers est directement reliée à la fraction

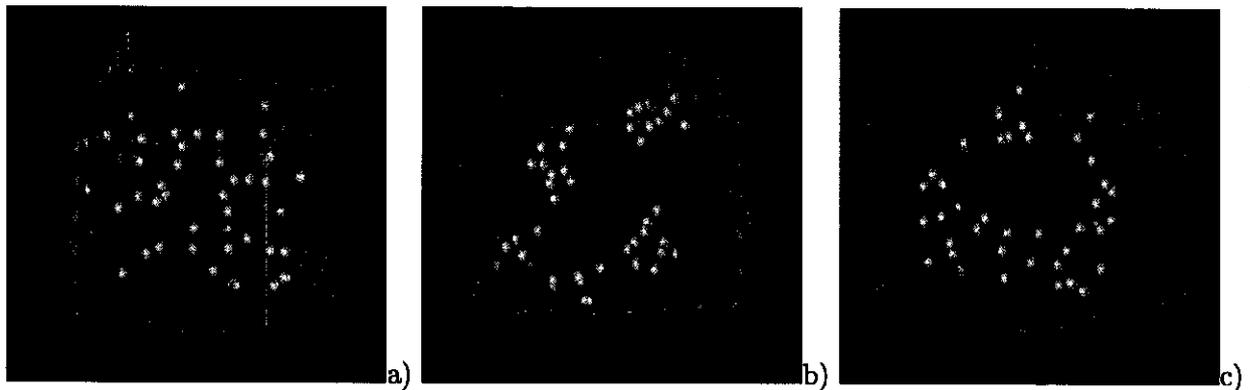


FIG. 2.6 – Exemples de microstructures périodiques 3D à amas à taille de trous identiques a) Aléatoire b) Amas isolés c) Amas connectés. Même nombre de particules et donc même fraction volumique $f = 0,6\%$

volumique désirée et au nombre de défauts voulus dans l'image. Nous reviendrons plus en détail sur ce point dans le paragraphe suivant.

Le choix de taille des amas influe sur la représentativité de la microstructure. En effet, plus le rapport entre la taille des amas et la taille des disques est grand, plus la microstructure à amas résultante possédera une séparation d'échelles appréciable. Si ce rapport est faible, la séparation d'échelle est moins nette et la notion d'amas sera plus difficile à définir.

Dans le cas des microstructures dont la taille des défauts et/ou des amas est variable, la loi utilisée est une loi uniforme : le rayon des disques généré est compris dans un intervalle fixé par l'utilisateur. Toutes les valeurs comprises dans cet intervalle ont la même probabilité d'être choisie.

2.1.4 Les tests d'arrêt

Plusieurs tests d'arrêt peuvent être envisagés et dépendent du type de microstructure considéré : aléatoire ou à amas, à taille de défauts identique ou variable. Dans le cas de microstructures aléatoires périodiques à disques de même taille, un test d'arrêt portant sur la fraction surfacique f_s est inutile : connaissant le rayon des disques et donc leur surface S_{disque} , il est possible de déterminer directement le nombre de disques N_{disque} nécessaire pour obtenir la fraction surfacique désirée selon :

$$f_s = \frac{S_{disque}}{S_{image}} N_{disque} \quad (2.5)$$

Inversement, connaissant le nombre de disque N_{disque} et la fraction surfacique f_s , il est possible par (2.5) de déterminer le rayon des disques. Un test portant sur le nombre de disques N_{disque} à simuler est donc suffisant. Ce test est également valable pour les microstructures à amas, à taille de défauts identique, obtenues par l'intersection de schémas booléens selon le principe (2.4) (paragraphe 2.1.2). Il en va de même pour les microstructures à amas obtenues selon le principe (2.3).

En revanche, dans le cas des microstructures périodiques avec des disques de taille variable, ce test n'est plus valable. Deux méthodes sont alors possibles pour obtenir la fraction volumique désirée. La première consiste, dans un premier temps, à imposer la fraction surfacique désirée. A chaque implémentation de disques (uniquement dans le cas des schémas de sphères dures ou de type "cerise"), la fraction surfacique de l'image est calculée. Le processus s'arrête une fois que la fraction surfacique choisie est atteinte. L'inconvénient de cette technique est que la fraction surfacique finale est souvent

plus grande que la fraction surfacique imposée. Plusieurs tentatives sont alors nécessaires pour obtenir la bonne fraction surfacique en augmentant ou diminuant selon le cas la valeur de la fraction surfacique de départ. Au final, l'erreur relative entre la précision obtenue et la précision souhaitée est de moins d'un pourcent.

La seconde méthode, plus astucieuse, consiste, comme dans le cas précédent, à se fixer une fraction surfacique de départ et à calculer après chaque implémentation la fraction surfacique de l'image. Lorsque la fraction surfacique de l'image devient supérieure à la fraction volumique désirée f , le rayon r du dernier disque (ou de la dernière sphère) est diminué de façon à obtenir la fraction surfacique voulue selon :

$$r = \left(\frac{3}{4\pi} (f - f^*) V_{image} \right)^{\frac{1}{3}},$$

où f^* est la fraction volumique atteinte avant la simulation du dernier disque. Pour le schéma booléen classique, les étapes b et c de l'algorithme (2.2) sont inutiles et il est très difficile dans ce cas de contrôler la fraction surfacique de l'image du fait du chevauchement possible entre les différents disques. Dans ce cas, un test d'arrêt possible consisterait à calculer, pour chaque nouveau disque implémenté, la proportion de zone blanche sur la taille de l'image. De manière discrète, la fraction surfacique de l'image f_s est définie comme le rapport entre le nombre de pixels blancs N_{PixB} sur le nombre de pixels total de l'image N_{PixIm} selon :

$$f_s = \frac{N_{PixB}}{N_{PixIm}},$$

ce résultat dépend bien entendu de la résolution de l'image et nécessite un "balayage" complet de l'image à chaque nouvelle implémentation de disques.

Dans le cas où un ensemble de microstructures aléatoires et à amas isolés ou connectés doivent être simulées en imposant une fraction surfacique égale en vue d'effectuer une comparaison, numérique ou statistique, bien précise entre ces différentes morphologies, il convient alors de simuler d'abord les microstructures à amas isolés ou connectés et de réarranger ensuite les disques afin d'obtenir des microstructures aléatoires. Techniquement, ce réarrangement consiste à conserver le rayon de chaque disque simulé et à ne tirer aléatoirement que les coordonnées du centre de chaque disque. Ce processus est utile lorsque des comparaisons sont menées sur des microstructures de morphologies diverses possédant toutes la même distribution de taille des disques et exactement la même fraction volumique. Ce processus de réarrangement ne marche pas dans le cas de microstructures obtenues par un schéma booléen.

2.2 Informations statistiques

La distinction entre une microstructure aléatoire classique et une microstructure à amas isolés ou connectés est une étape importante, puisque, comment nous allons le voir dans le chapitre suivant, sous une sollicitation identique, les deux microstructures ne présentent pas la même réponse. Il est donc indispensable, pour les distinguer, de mettre en œuvre des outils statistiques performants et pouvant s'appliquer à la microstructure d'un matériau réel. Nous présentons ici deux méthodes d'analyse statistique susceptibles de révéler l'existence de plusieurs échelles microstructurales. L'une est basée sur la covariance qui est brièvement rappelée en annexe B et l'autre sur la fonction distance que l'on va étudier plus en détail.

2.2.1 La fonction distance et ses extensions

Le regroupement des défauts en amas peut être étudié au moyen de la distribution des distances d'un point quelconque extérieur aux défauts à leur frontière. Il suffit pour cela de calculer pour chaque point de la matrice ou en chaque pixel i de l'image, la distance euclidienne d_i avec le bord du défaut le plus proche et d'en tracer les distributions, soit, en notant (x_i, y_i) les coordonnées du pixel i et (x_j, y_j) les coordonnées du centre du défaut j de rayon r_j :

$$d_i = \min_{j=1, \dots, M} \left\{ d_i = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} - r_j \right\}. \quad (2.6)$$

M correspond au produit du nombre de défauts N présent dans l'image et du nombre d'images qu'il convient de prendre en compte pour respecter l'hypothèse de périodicité de l'image finale; en d'autres termes, $M = 9N$ en 2D ($N \times (8$ images fictives + l'image de la microstructure)) et $M = 27 \times N$ en 3D ($N \times (26$ images fictives + l'image de la microstructure)).

Une extension de la fonction distance permet de prendre en compte la dispersion de la taille des défauts. Cette extension, appelée fonction distance normalisée, consiste à déterminer pour chaque point i de la matrice la distance euclidienne avec le bord du défaut j , notée d_i^j , normalisée par son rayon r_j et à prendre la plus petite de ces valeurs selon :

$$d_i = \min_{j, \dots, M} \left\{ \frac{d_i^j}{r_j} \right\}. \quad (2.7)$$

À partir du calcul de la fonction distance, il est possible de découper la microstructure en zones d'influence, appelées cellules de Voronoï selon leur définition classique. Celles-ci sont construites en attribuant à chaque défaut une certaine quantité de matrice correspondant à l'ensemble des points qui sont les plus proches, en termes de distance euclidienne, du centre de ce défaut. La zone d'influence I_i du point p_i (correspondant au centre du disque ou de la sphère i) peut se définir de la manière suivante [27] :

$$I_i = \{x : d(x, p_i) < d(x, p_{i \neq j})\}, \quad (2.8)$$

$d(x, p_i)$ représente la distance euclidienne du point x au point p_i . Une variante de cette définition est obtenue en considérant la distance au bord des disques et non à leur centre. Les figures 2.7a et 2.7b donnent une représentation en niveaux de gris de la fonction distance et des cellules de Voronoï respectivement. Contrairement aux cellules de Voronoï classiques (2.8), ces cellules sont formées de l'ensemble des points de la matrice qui sont les plus proches du bord du défaut : c'est une extension des cellules de Voronoï classiques (2.8).

Les cellules de Voronoï trouvent de nombreuses applications tant pour la représentation de certaines microstructures telles que celles des matériaux polycristallins [2] que pour la prise en compte d'informations statistiques sur la microstructure des matériaux hétérogènes permettant d'alimenter des modèles de changement d'échelle afin que ces derniers puissent prendre en compte les fluctuations des fractions volumiques locales pouvant être issues de l'expérience [17]. Afin de calculer la réponse mécanique de matériaux polycristallins 3D sous une sollicitation externe, la microstructure d'un tel matériau est construite à partir d'une partition de l'espace du V.E.R. en cellules de Voronoï. Chaque cellule possède sa propre orientation cristalline [2] [21] et celle-ci peut fluctuer d'une cellule à l'autre. La modélisation des polycristaux basée sur les cellules de Voronoï donne une représentation de la forme des grains plus réaliste (par rapport à celle observée expérimentalement) que celle basée sur une partition de l'espace par des droites de Poisson.

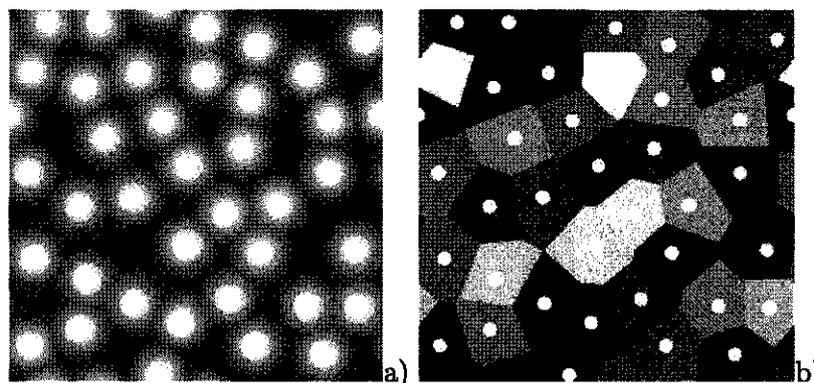


FIG. 2.7 – Représentation en niveaux de gris a) de la fonction distance b) des cellules de Voronoï

Les cellules de Voronoï peuvent aussi être mises à profit pour générer des matériaux biphasés [49] : chaque cellule possède alors ses propres propriétés mécaniques ou ses propres propriétés thermiques. Celles-ci peuvent varier d'une cellule à l'autre.

Les cellules de Voronoï peuvent également être à la base d'une méthode de simulation de microstructure aléatoire de disques ou de sphères censés représenter la microstructure d'un matériau hétérogène. Il s'agit du modèle de Stienen [27]. Pour construire ce modèle, on part d'une génération de points P_i selon un processus de Poisson et on détermine les zones d'influence (ou les cellules de Voronoï) associées à chaque point P_i . Le rayon de la plus grande sphère (ou du plus grand disque) de centre P_i , pouvant être inclus dans chaque cellule de Voronoï est ensuite déterminé. Dans ces conditions, les sphères (ou les disques) ne peuvent pas se chevaucher mais peuvent entrer en contact. Leur taille est nécessairement variable et corrélée à leur position. Ce type de modèle, contrairement à celui décrit précédemment, est plus long et plus difficile à mettre en œuvre.

2.2.2 Application à des microstructures simulées

L'étude de la distinction de microstructures de morphologies diverses est faite exclusivement à partir de la fonction distance. La même étude à partir de la covariance fera l'objet de travaux futurs. Afin de bien comprendre comment la fonction distance permet de mettre en évidence des effets de séparation d'échelles microstructurales, nous nous proposons de l'appliquer à des microstructures de morphologies diverses : aléatoires et à amas, isolés et connectés.

Différentes catégories de microstructures ont été simulées. La première est constituée d'une microstructure aléatoire et de deux microstructures à amas isolés et connectés. Toutes les microstructures présentent une taille de défauts identique (Figures 2.8). La deuxième catégorie est identique à la première. La seule différence réside dans la dispersion de taille des défauts (Figures 2.9). L'ensemble des microstructures possède la même fraction surfacique $f = 4,6\%$.

Les microstructures aléatoires à taille de défauts identique (Figure 2.8a) et variable (Figure 2.9a) ont été implémentés selon un schéma booléen de type de "cerise" avec une distance minimale devant séparer le bord de chaque défaut suffisamment élevée, de façon à obtenir une répartition uniforme des défauts. Par répartition uniforme des défauts, nous entendons que les défauts sont positionnés de manière homogène dans l'image. Les microstructures à amas isolés et connectés à taille de défauts identique (Figures 2.8b et 2.8c) et variable (Figures 2.9b et 2.9c) sont obtenues par la méthode de l'intersection des schémas booléens. Le schéma booléen retenu pour les deux échelles est le schéma de type "cerise". Afin d'obtenir un contraste assez prononcé entre l'échelle des défauts et l'échelle

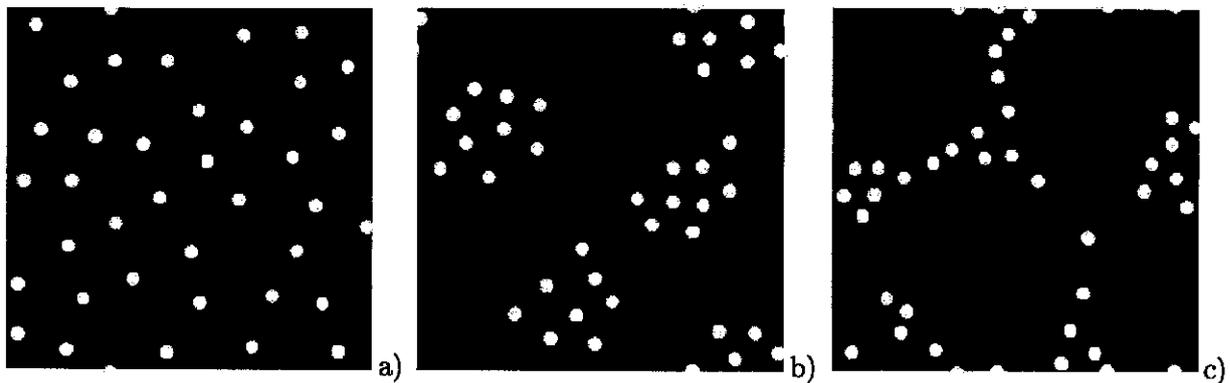


FIG. 2.8 – Microstructures périodiques simulées a) aléatoire classique de type “cerise” b) amas isolés c) amas connectés. $f_s = 4,6\%$, taille des défauts identique et donc même nombre de particules

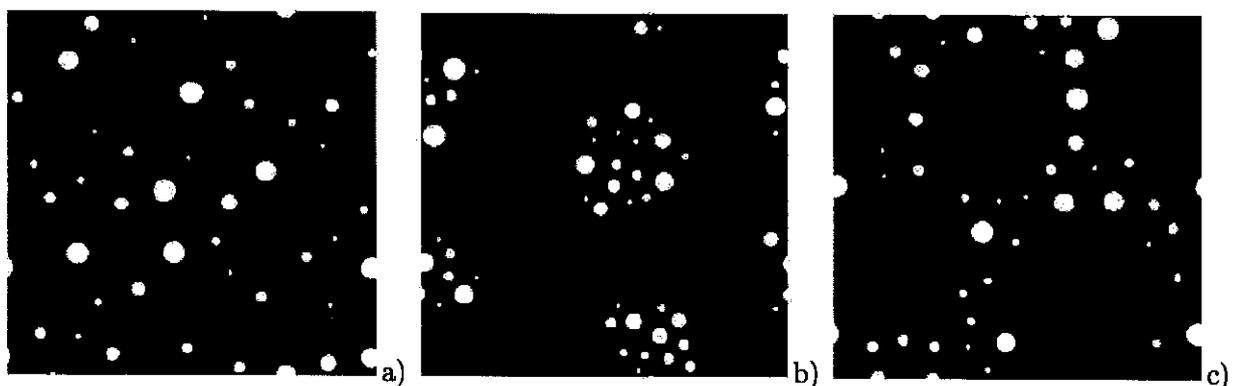


FIG. 2.9 – Microstructures périodiques simulées a) aléatoire classique de type “cerise” b) amas isolés c) amas connectés. $f_s = 4,6\%$, taille des défauts variable

des amas, le rapport entre la taille des défauts et la taille des amas doit être suffisamment grand, typiquement de l'ordre de 10 – 12 dans nos simulations.

A partir de la distribution de la fonction distance obtenue sur chaque microstructure (Figure 2.10a), il est possible de mettre en évidence un effet d'amas : une microstructure à amas isolés ou connectés présente une distribution de la fonction distance plus large qu'une microstructure aléatoire classique. En revanche, il est très difficile de différencier au travers des distributions de la fonction distance une microstructure à amas isolés d'une microstructure à amas connectés car les deux microstructures possèdent une largeur de la fonction distance identique. La distribution de la fonction distance normalisée, représentée sur la figure 2.10b, met en évidence à la fois un effet de séparation d'échelle et un effet de taille des particules. Les microstructures à amas se distinguent des microstructures aléatoires par une distribution de la fonction distance normalisée plus large, effet identique à celui attaché à l'utilisation de la fonction distance. Au contraire, un effet de taille de particule est mis en évidence. Celui-ci se traduit par une distribution de la fonction distance normalisée plus étroite dans le cas de microstructures à particules de taille variable que dans le cas des microstructures à taille de particules identique. Mais cette analyse statistique ne permet toujours pas de faire la différence entre une microstructure à amas isolés et une microstructure à amas connectés.

Notons toutefois que la résolution de l'image n'affecte pas les résultats obtenus sur les distributions de la fonction distance et de la fonction distance normalisée.

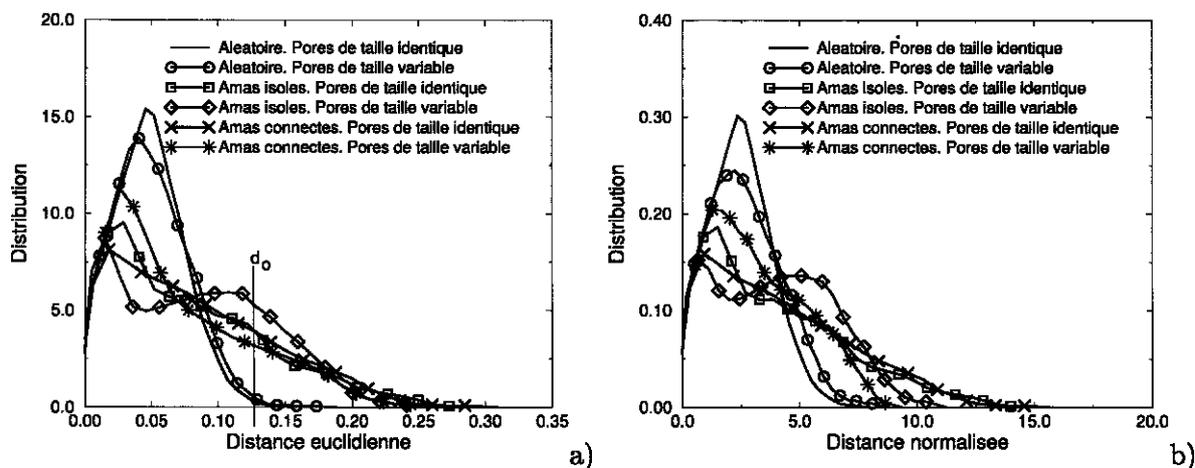


FIG. 2.10 – a) Distribution de la fonction distance b) Distribution de la fonction distance normalisée

2.2.3 Étude de connectivité

La fonction distance est un outil performant permettant de distinguer une microstructure aléatoire d'une microstructure à amas, mais est incapable de définir la nature de cet amas : isolés ou connectés. Cette distinction est d'autant plus importante que les deux catégories de microstructures à amas ne présentent pas la même réponse sous un même état de chargement².

Cette distinction est rendue possible grâce à un seuillage de l'image de la fonction distance et par une analyse de la connectivité de l'image obtenue. L'étape de seuillage consiste à définir pour chaque défaut une zone comprenant l'ensemble des points de la matrice (ou des pixels de l'image) dont la distance avec le bord du défaut le plus proche est plus petite qu'une distance de seuillage d_0 (Figure 2.10a).

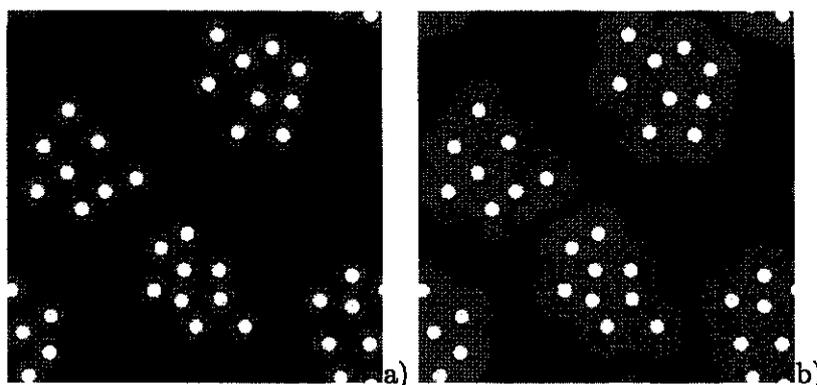


FIG. 2.11 – Images en niveaux de gris obtenues par seuillage de l'image de la fonction distance. Deux niveaux : a) $d_0 = 0,023$ b) $d_0 = 0,066$. Le côté de l'image est unitaire

Dans le cas de défauts de forme circulaire, cet ensemble connexe (en gris sur les images 2.11) est également de forme circulaire et son rayon est directement lié à la distance d_0 . L'analyse de connectivité permet de déterminer pour une valeur de d_0 donnée le nombre d'ensembles connexes indépendants :

²Cette étude est menée dans le chapitre 3 à partir de simulations numériques basées sur la transformée de Fourier rapide.

deux ou plusieurs ensembles connexes s'intersectant donnent lieu à un unique ensemble. Le graphe (2.12) représente l'évolution du nombre d'ensembles connexes (ou nombre de zones grises (Figures 2.11)) en fonction de la distance de seuillage d_0 . Ce graphe a été obtenu par une étude de connectivité sur des microstructures à taille de particules identique présentées sur les figures 2.8. Il est construit en calculant le nombre d'ensembles connexes indépendants pour différentes valeurs de d_0 .

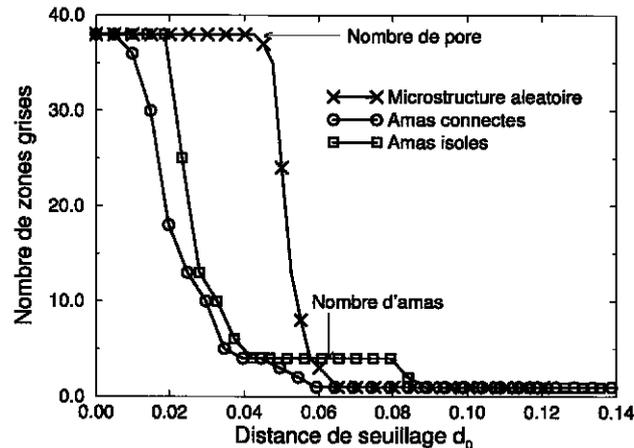


FIG. 2.12 - Évolution du nombre d'éléments connexes (ou zones grises indépendantes) en fonction de la distance de seuillage d_0 . Cas de microstructures avec des défauts de taille identique (Figure 2.8)

Lorsque d_0 est très petit, le nombre de zones grises correspond au nombre de défauts présent dans l'image. Lorsque d_0 augmente, ce nombre décroît en raison de l'intersection de zones grises. Cette décroissance apparaît plus tard pour la microstructure aléatoire que pour les microstructures à amas. Ceci résulte du fait que la distance minimale séparant le bord des défauts est plus importante pour la microstructure aléatoire que pour les microstructures à amas. Lorsque d_0 continue d'augmenter, une ligne horizontale apparaît uniquement dans le cas des microstructures à amas isolés. Le nombre de zones grises correspondantes donne le nombre d'amas présents dans la microstructure.

Nous disposons maintenant d'un indicateur morphologique permettant de différencier une microstructure à amas isolés d'une microstructure à amas connectés. Celui-ci s'applique à n'importe quelle microstructure, simulée ou expérimentale, représentée par une image binaire.

2.2.4 Extension au cas 3D

Les outils d'analyse statistique basés sur la fonction distance et sur l'étude de connectivité peuvent sans aucune difficulté majeure être étendus au cas des microstructures périodiques 3D. Les figures 2.13a et 2.13b présentent respectivement les distributions de la fonction distance et de la fonction distance normalisée obtenues sur les microstructures aléatoires et à amas isolés et connectés présentées sur les figures 2.6.

Comme pour les microstructures 2D, cet outil d'analyse statistique permet de faire la distinction entre la microstructure aléatoire (Figure 2.6a) et les microstructures à amas (Figures 2.6b et 2.8c) : les microstructures à amas ont une largeur de distribution plus étroite que la microstructure aléatoire. Mais cet outil ne permet toujours pas de différencier les microstructures à amas entre elles.

Cette distinction est également rendue possible par un seuillage de l'image de la fonction distance et par une analyse de la connectivité sur l'image obtenue selon la méthode décrite dans le paragraphe

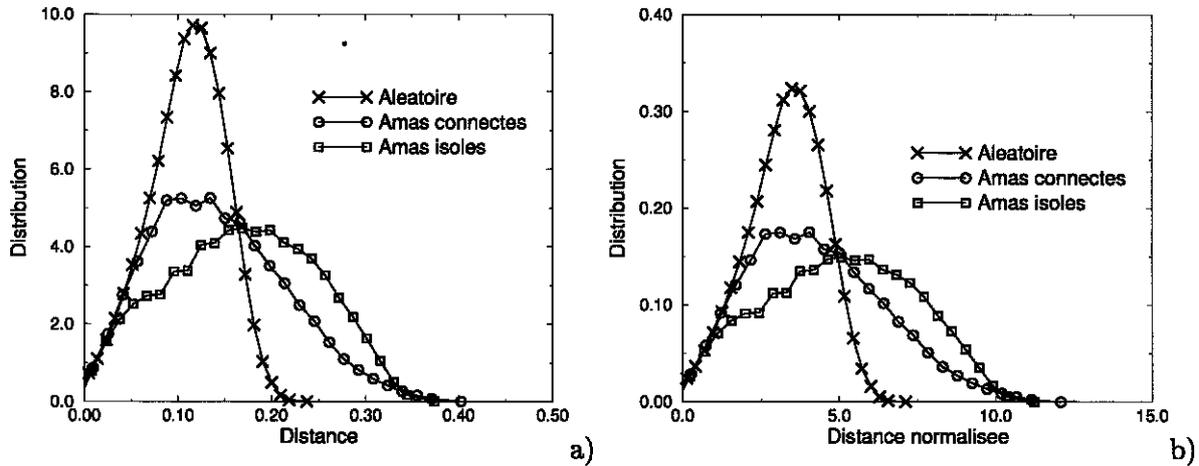


FIG. 2.13 – Cas de microstructures à taille de défauts identique (Figure 2.6) a) Fonction distance b) Fonction distance normalisée

précédent. La figure 2.14 présente le graphe de connectivité obtenu sur les microstructures présentées sur les figures 2.6. On constate également que la microstructure à amas isolés se différencie de la microstructure à amas connectés par son palier horizontal qui donne le nombre d'amas présents dans la microstructure.

L'étude de connectivité n'est pas gourmande en taille mémoire puisqu'elle ne considère que les coordonnées du centre et le rayon de tous les défauts.

Notons que ces analyses statistiques 3D peuvent être appliquées à des microstructures réelles obtenues, par exemple, par microtomographie [15] [4] ou par reconstruction de coupes 2D sériées [29]. Pour ce faire, il convient de fournir les coordonnées du centre et le rayon de l'ensemble des sphères en entrée des outils développés.

Nous disposons maintenant d'un indicateur morphologique 2D et 3D qui permet de différencier les microstructures de morphologies diverses. Cet outil statistique est-il sensible à la taille du V.E.R. ou aux paramètres microstructuraux tels que la distance entre le bord des défauts ou des amas, etc. ? C'est ce que nous examinons maintenant.

2.2.5 Analyse de sensibilité

Les informations statistiques obtenues précédemment en 2D ou 3D l'ont été à partir d'une unique réalisation par situation morphologique : aléatoire, amas isolés et connectés à taille de défauts identique. Les outils d'analyse statistique basés sur la fonction distance sont-ils sensibles aux paramètres microstructuraux de la microstructure considérée tels que la distance entre les défauts ou la distance entre les amas ? Cette sensibilité se répercute-t-elle sur les distributions de la fonction distance ou sur le graphe de connectivité ? Pour répondre à ces questions, cinq microstructures par morphologie sont générées et les distributions de la fonction distance ainsi que le graphe de connectivité sont recueillis sur chacune d'entre elles. Les microstructures sont de taille unité, 1×1 .

Dans un premier temps, une telle analyse est menée sur des microstructures périodiques à distribution uniforme de disques dont un exemple est représenté sur la figure 2.15a. Cinq réalisations de telles microstructures sont générées selon un schéma booléen de type "cerise" avec des rayons de disques identiques égaux à 0,018. La distance minimale devant séparer le bord de chaque disque utilisé dans ces simulations est $d_{min} = 0,08$. Le graphe de connectivité et la distribution de la fonction

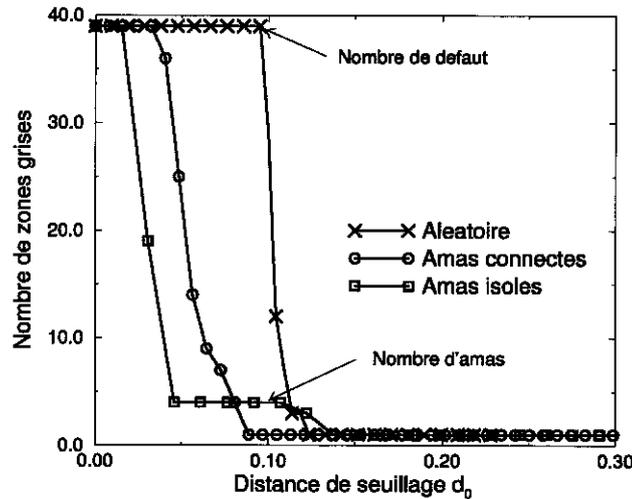


FIG. 2.14 – Évolution du nombre d'éléments connexes (ou de zones grises indépendantes) en fonction de la distance de seuillage d_0 . Cas de microstructures 3D à taille de défauts uniforme (Figure 2.6)

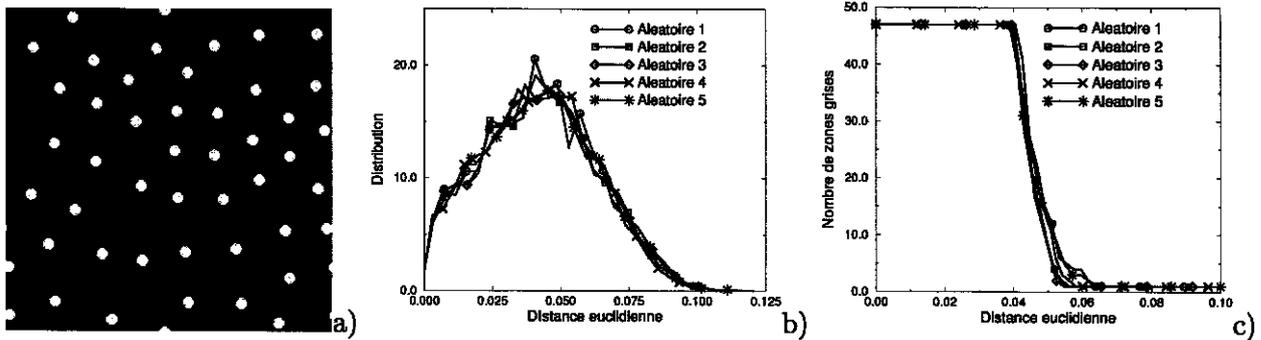


FIG. 2.15 – a) Exemple de microstructure aléatoire de type "cerise" $f = 5\%$ b) Distribution de la fonction distance c) Graphe de connectivité

distance obtenue sur chaque microstructure fluctuent très peu d'une microstructure à l'autre comme l'illustrent les figures 2.15b et 2.15c. La distance euclidienne d_i à partir de laquelle le nombre de zones grises commence à décroître vaut approximativement $d_i = 0,04$ (Figure 2.15c), soit la moitié de la distance d_{min} imposée pour générer ces microstructures. La distance d_i varie très peu d'une microstructure à l'autre et ceci résulte directement du mode de simulation. En effet, si des microstructures de type "cerise" à distance $d_{min} < 0,08$ ou de type sphères dures sont considérées, les fluctuations de la distance d_i seront plus importantes³.

En revanche, la distance euclidienne à partir de laquelle le nombre de zones grises tend vers 1 varie de $d_f = 0,055$ à $d_f = 0,064$. Cet écart tend à diminuer lorsque la distance euclidienne minimale devant séparer le bord des disques d_{min} augmente : la microstructure aléatoire ainsi obtenue est à distribution uniforme de disques et est proche d'une microstructure de Hashin à sphères de même taille. La décroissance du nombre de zones grises est alors très rapide et la différence entre les distances d_i et d_f est faible.

Une étude similaire est maintenant menée sur des microstructures à amas isolés et connectés. Les

³Voir un peu plus loin dans le texte, à la fin de ce paragraphe, pour une étude similaire mais avec une distance $d_{min} = 0,025$.

figures 2.16a et 2.17a présentent respectivement une microstructure à amas isolés et une microstructure à amas connectés avec des tailles de disques identiques. Elles contiennent le même nombre de disques que la microstructure aléatoire 2.15a et possèdent de fait la même fraction surfacique. Ces microstructures sont obtenues par l'intersection de deux schémas de type de "cerise". Le rayon des défauts est le même que pour la microstructure aléatoire, à savoir $r = 0,018$. Le rayon des amas est de 0,15 pour les microstructures à amas isolés et de 0,23 pour les microstructures à amas connectés. La distance minimale d_{min} devant séparer le bord des défauts, utilisée pour ces simulations est $d_{min} = 0,025$; celle devant séparer le bord des amas est $d_{min} = 0,2$ pour la microstructure à amas isolés et $d_{min} = 0,04$ pour les microstructures à amas connectés.

Comme pour les microstructures aléatoires, cinq microstructures à amas isolés et connectés sont générées. Les distributions de la fonction distance et le graphe de connectivité obtenus sur chaque microstructure fluctuent peu d'une microstructure à l'autre comme l'illustrent les figures 2.16b, 2.17b et 2.16c, 2.17c.

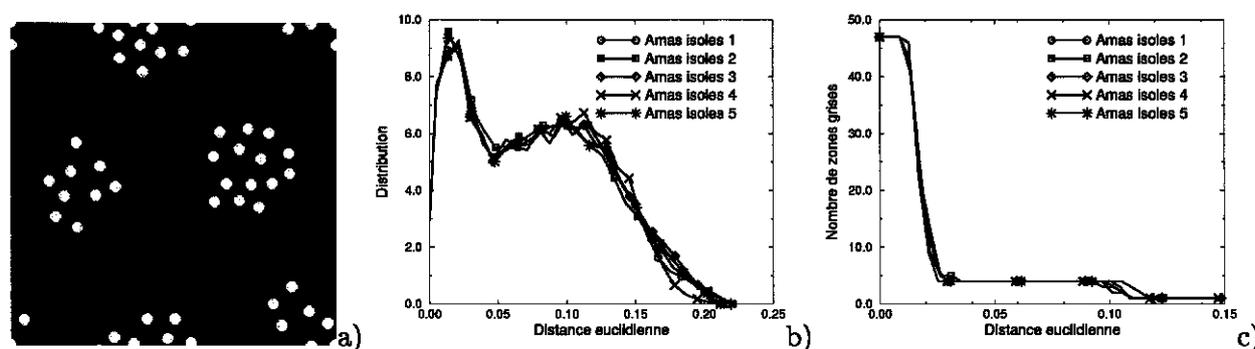


FIG. 2.16 - a) Exemple de microstructure à amas isolés $f = 5\%$ b) Distribution de la fonction distance c) Graphe de connectivité

Comme pour les microstructures aléatoires, la distance euclidienne à partir de laquelle le nombre de zones grises commence à décroître vaut la moitié de la distance euclidienne minimale devant séparer le bord des disques, à savoir $d_i = 0,012$. Cette valeur est obtenue pour les microstructures à amas isolés et connectés. Une fois le plateau atteint, le nombre de zones grises correspond au nombre d'amas présents dans la microstructure. Dans le cas des microstructures à amas isolés, la distance moyenne d_a à partir de laquelle le nombre de zones grises tend vers 1 correspond à la demi-distance devant séparer le bord des amas, i.e., $d_a = 0,1$. Ces faibles fluctuations des données

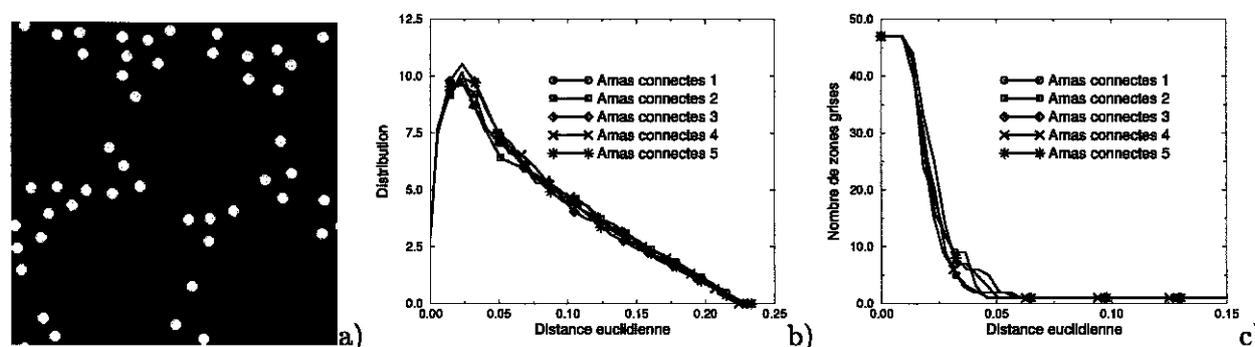


FIG. 2.17 - a) Exemple de microstructure à amas connectés $f = 5\%$ b) Distribution de la fonction distance c) Graphe de connectivité

statistiques telles que la largeur de la distribution de la fonction distance ainsi que les valeurs de d_i ou d_a obtenues sur chaque morphologie sont dues au fait qu'un schéma de type "cerise" a été utilisé, à l'échelle des défauts et à l'échelle des amas, pour générer toutes ces microstructures. Des fluctuations plus importantes auraient certainement été obtenues si un schéma de sphères dures avait été retenu pour générer ces microstructures à l'échelle des défauts et des amas.

Dans les microstructures à amas connectés, la pente avec laquelle le nombre de zones grises décroît pour tendre vers 1 semble très proche de celle obtenue sur des microstructures aléatoires (Figure 2.15c). Cette pente est juste translatée en raison d'une distance entre les bords des défauts plus importante pour les microstructures aléatoires que pour les microstructures à amas. Est-il possible de différencier une microstructure à amas connectés d'une microstructure aléatoire par une simple étude du graphe de connectivité? Afin de répondre à cette question, cinq microstructures aléatoires sont générées selon un schéma de type "cerise" (Figure 2.19a) mais en prenant la même distance minimale entre les bords des disques d_{min} que celle utilisée pour générer les microstructures à amas connectés présentées sur la figure (2.17a) soit $d_{min} = 0,025$.

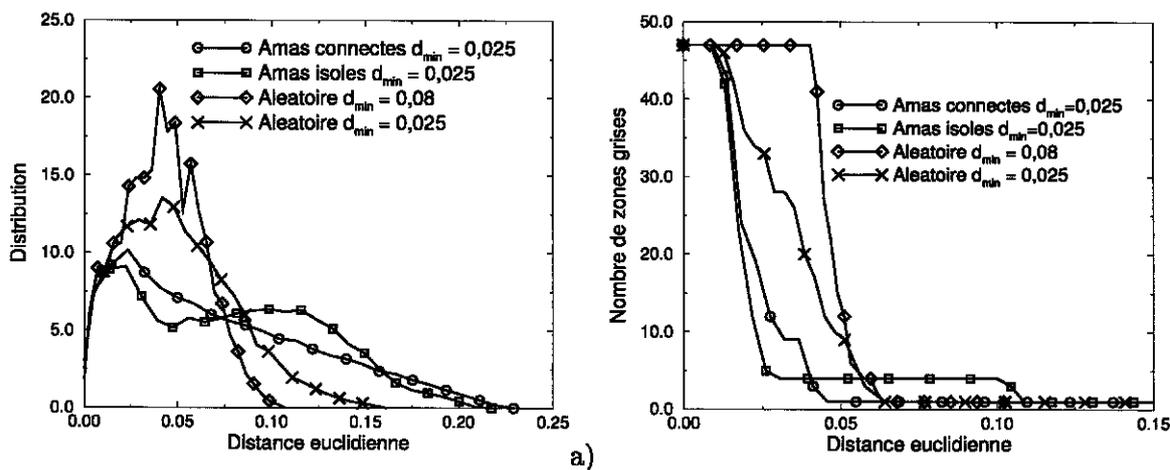


FIG. 2.18 – a) Distribution de la fonction distance b) Graphe de connectivité obtenu sur différentes microstructures

La microstructure 2.19a a une largeur de la distribution de la fonction distance plus importante que celle présentée sur la figure 2.15 mais cette largeur est plus faible que celles obtenues sur les microstructures à amas isolés et connectés (Figure 2.18a). Ce qui tend à dire que la microstructure 2.19a a une répartition des défauts plus hétérogène que la microstructure 2.15a avec des zones plus riches que d'autres en densité de défauts. La répartition hétérogène des défauts dans la microstructure 2.19a n'est toutefois pas aussi prononcée que les microstructures à amas.

Notons également que, pour une microstructure aléatoire à répartition non uniforme de défauts (Figure 2.19a), la largeur de la fonction distance fluctue légèrement d'une microstructure à l'autre (Figure 2.19b). Il en est de même pour le graphe de connectivité (Figure 2.19c). Les fluctuations sont plus importantes que dans le cas d'une microstructure aléatoire à distribution uniforme des défauts (Figures 2.15).

Le graphe de connectivité permet également de distinguer une microstructure aléatoire d'une microstructure à amas connectés même si celles-ci présentent une distance minimale entre le bord des défauts d_{min} identique. Cette différence se traduit par une pente plus raide pour les microstructures à amas connectés que pour les microstructures aléatoires (Figure 2.18b).

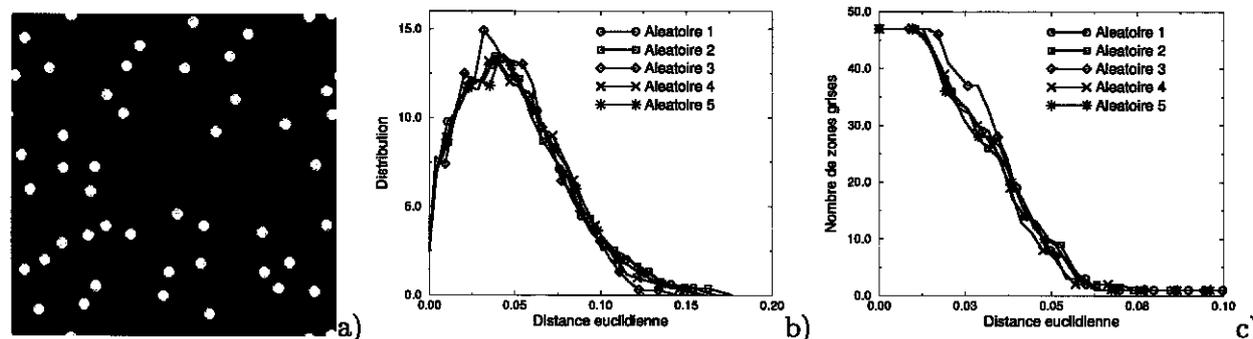


FIG. 2.19 - a) Exemple de microstructure aléatoire $f = 5\%$ $d_{min} = 0,025$ b) Distribution de la fonction distance c) Graphe de connectivité

La distribution de la fonction distance permet seulement de mettre en évidence un regroupement hétérogène des défauts en amas au sein de la microstructure. Elle ne permet pas d'avoir accès à des informations plus précises sur la microstructure. Le graphe de connectivité, en revanche, donne accès à la plus petite distance séparant le bord des défauts et le bord des amas. Bien que la distribution de la taille des défauts puisse être obtenue expérimentalement (point qui sera abordé plus en détails dans la suite), la taille des amas ainsi que le nombre de défauts les composant sont des données inaccessibles à partir de ces outils statistiques.

Dans le cadre de cette thèse, la caractérisation morphologique d'une microstructure a été faite uniquement au travers de la fonction distance et de ses extensions. Une étude similaire pourrait être envisagée avec la covariance. Celle-ci, peut comme évoqué précédemment, mettre en évidence des séparations d'échelles microstructurales [29]. Toutefois, permet-elle, comme la fonction distance, de faire la distinction entre une microstructure à amas isolés et une microstructure à amas connectés au prix d'un temps de calcul raisonnable? Fournit-elle des informations supplémentaires sur la microstructure d'un matériau hétérogène? Ces questions restent ouvertes.

Après avoir étudié le comportement de la fonction distance et du graphe de connectivité pour des microstructures de morphologies diverses, on se propose maintenant d'appliquer des outils d'analyse statistique à la microstructure de l'acier de cuve étudié en vue de définir sa morphologie.

2.3 Application à la microstructure de l'acier de cuve

Les outils d'analyse statistique basés sur la fonction distance permettent de caractériser la morphologie d'un matériau hétérogène. Il convient maintenant de les appliquer à la microstructure de l'acier de cuve en vue de caractériser plus précisément sa microstructure. Pour ce faire, il nous faut obtenir une image binaire de cette microstructure définie à partir des coordonnées du centre et du rayon de chaque défaut la composant. La zone en question est la zone utile d'une éprouvette de traction plate extraite au 3/4 de l'épaisseur de l'acier de cuve BQ12. Cet acier a déjà été étudié par Renevey [75]. Nous nous contenterons ici d'en rappeler quelques caractéristiques microstructurales. La composition chimique de cet acier est donnée dans le tableau 2.1.

La microstructure de cet acier est de type bainite revenue. Les carbures sont principalement sous forme de cémentite aciculaire ou de forme sphérique dont leur dimension caractéristique est de l'ordre de $0,1\mu\text{m}$. Pour plus de détails sur la microstructure de l'acier 16MND5, le lecteur pourra se référer par exemple à la thèse de Renevey [75] ou de Hausild [43].

C (%)	S (%)	P (%)	Mn (%)	Si (%)	Ni (%)	Cr (%)	Mo (%)
0,159	0,008	0,005	1,37	0,24	0,70	0,17	0,50
V (%)	Cu (%)	Co (%)	Al (%)	N (%)	O (ppm)	Sn (ppm)	As (ppm)
<0,01	0,06	<0,01	0,023	0,007	35-36	50	160

TAB. 2.1 – *Composition chimique de l'acier de cuve BQ12. Extrait de Renevey [75] et Carassou [22]*

2.3.1 Cartographie d'une éprouvette de traction

Il a été mis en évidence d'un point de vue expérimental la présence d'amas de sulfure de manganèse (MnS) au voisinage des sites de clivage lors d'essais de résilience par mouton Charpy [75]. La question que l'on peut se poser est de savoir comment sont réellement réparties les inclusions de MnS dans l'acier de cuve : les inclusions de MnS sont-elles regroupées en amas isolés, etc. ? Au contraire, sont-elles disposées aléatoirement dans le matériau sans regroupement en amas ? Pour répondre à ces questions, une étude expérimentale sur la répartition spatiale des particules de MnS a été menée. Celle-ci se traduit par la cartographie d'une face d'une éprouvette de traction plate afin d'avoir une vision aussi représentative que possible de l'agencement des particules de MnS. Ce travail nécessite la prise de plusieurs images de la microstructure ainsi que leur analyse par un logiciel de traitement d'images.

Dans un premier temps, nous décrivons la méthode utilisée pour cartographier une éprouvette de traction et, dans un second temps, nous présenterons les informations statistiques simples issues de cette cartographie et nous appliquerons les outils d'analyse statistique basés sur la fonction distance en vue de définir la morphologie de l'acier de cuve.

Principe de l'analyse d'images

Comme nous l'avons évoqué au début de ce chapitre, l'analyse d'images est une étape importante pour étudier la microstructure des matériaux hétérogènes. On rappelle qu'elle se décompose en trois étapes que sont l'acquisition d'images, l'extraction d'informations sur la microstructure et la modélisation d'une microstructure à partir de ces informations. Nous nous attacherons dans cette partie à décrire les deux premières étapes, la troisième étape étant abordée dans les parties précédentes.

L'acquisition de l'image se fait à l'aide d'un M.E.B ou à l'aide de moyens optiques suivant l'échelle des informations que l'on veut obtenir. Dans notre cas, l'utilisation du M.E.B s'avère être le moyen le plus judicieux au vu de la faible taille des particules présentes dans le matériau. L'image numérique provenant du M.E.B n'est pas directement exploitable par un logiciel d'analyse d'images. Elle doit avant tout subir plusieurs opérations de traitement d'images, telles que le seuillage et le filtrage des données.

Le seuillage est une étape importante dans l'analyse d'images. Elle permet de convertir une image définie par plusieurs niveaux de gris en une image binaire (noire = défauts et blanc = matrice). Cette opération est délicate et importante puisqu'elle correspond à une perte appréciable d'information. Différentes catégories de seuillage sont possibles [26]. Nous nous attarderons uniquement sur le seuillage à partir d'un histogramme des niveaux de gris. Le lecteur désirant obtenir de plus amples informations sur ces méthodes se reportera par exemple à Coster et Chermant [26].

Une image numérique provenant du M.E.B est définie par un histogramme des niveaux de gris. A chaque pixel est associé un nombre entier compris entre 0 et 255, correspondant à un niveau de

gris. Plusieurs méthodes de seuillage à partir de l'histogramme des niveaux de gris sont possibles. Le principe de seuillage utilisé dans la suite pour analyser les images de l'éprouvette de traction est basé sur une opération manuelle : elle consiste à borner les niveaux de gris de l'image. En effet, en notant $f(x)$ la fonction qui donne la valeur du niveau de gris en un pixel x de l'image X considérée (X est l'ensemble des pixels définissant l'image), cette opération de seuillage se définit comme suit :

$$Y = \{x \in X : \min \leq f(x) \leq \max\}. \quad (2.9)$$

Les valeurs du \min et du \max sont fixées par l'utilisateur. Cette méthode fonctionne relativement bien s'il existe déjà un contraste assez prononcé entre les différents constituants. Toutefois, la segmentation d'images peut donner lieu à des artefacts qui proviennent de zones possédant un niveau de gris local très élevé. Ils sont indésirables et il convient de s'en affranchir car ils peuvent fausser les résultats de l'analyse d'images.

Pour ce faire, plusieurs méthodes sont possibles : la première, basée sur un filtrage manuel consiste, à repérer la surface de l'ensemble des défauts (réels ou les artefacts) et à ne conserver que les défauts dont la surface est supérieure à une surface minimale fixée par l'utilisateur. Cette étape est très délicate et ne peut être utilisée que si les artefacts ne sont pas très importants. La seconde méthode⁴, plus robuste, consiste à utiliser des filtres basés sur les opérations de base de la morphologie mathématique que sont les opérations de dilatation et d'érosion d'un ensemble aléatoire A par un compact K . Dans le cas binaire, l'ensemble K est implanté en chaque point x de A et les opérations de dilatation et d'érosion doivent répondre aux questions suivantes [48] : K rencontre-t-il A ? K est-il inclus dans A ? Ces opérations peuvent se résumer comme suit :

Érosion. L'érodé d'un ensemble X par un ensemble B est l'ensemble des points x de l'image tel que B_x soit totalement inclus dans X :

$$Y = X \ominus \check{B} = \{x : B_x \subset X\}, \quad \check{B} = \{-x, x \in B\}. \quad (2.10)$$

B_x est un objet de forme B centré en x pouvant être représenté par un hexagone, une sphère, un disque, etc... de différentes tailles. Il suffit donc de placer l'élément B_x en chaque point x de l'espace et de poser la question suivante : B_x est-il complètement inclus dans X ? L'ensemble des réponses positives donne un nouvel ensemble Y appelé érodé de X par B_x [26]. Tous les détails plus petits que la taille de B_x disparaissent.

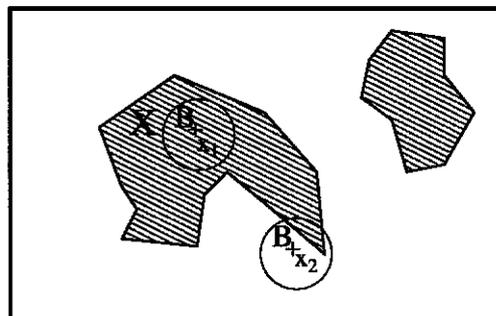


FIG. 2.20 – Principe de l'érosion par un objet B_x circulaire centrée en x : B_{x1} est complètement inclus dans X et B_{x2} ne l'est pas

⁴Bien que cette méthode ne soit pas utilisée par la suite pour des raisons évoqués plus loin dans le texte, il est tout de même intéressant de rappeler son principe.

Dilatation. Le dilaté d'un ensemble X par un ensemble B est l'ensemble des points x de l'image telle que l'intersection entre B_x et X ne soit pas réduite à l'ensemble vide :

$$Y = X \oplus \check{B} = \{x : B_x \cap X \neq \emptyset\}, \quad \check{B} = \{-x, x \in B\}. \quad (2.11)$$

De la même manière, il suffit de placer l'élément B_x en chaque point x de l'espace et de poser la question suivante : B_x touche-t-il l'ensemble X ? L'ensemble des points correspondant aux réponses positives constitue un nouvel ensemble Y .

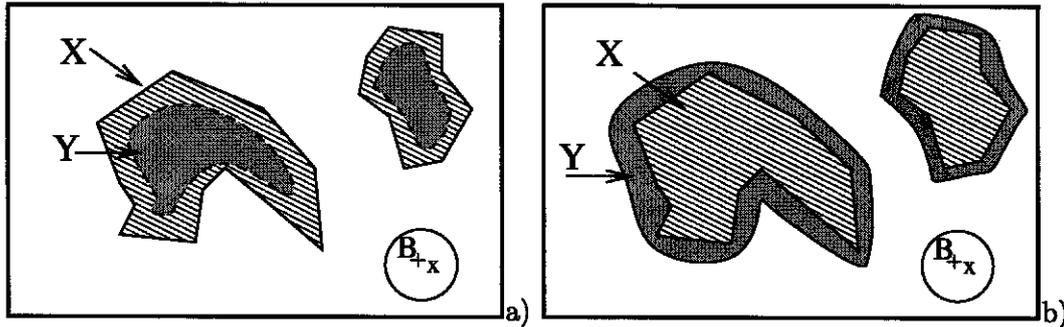


FIG. 2.21 – Représentation schématique de : a) Érodé Y d'un ensemble X par un disque B_x centré en x b) Dilaté Y d'un ensemble X par un disque B_x centré en x

Une fois les opérations d'érosion et de dilatation effectuées, l'image binaire obtenue peut être traitée par un logiciel d'analyse d'images en vue d'obtenir des informations sur la microstructure du matériau étudié. A partir de ces informations 2D, il est possible de construire des modèles de structures aléatoires en vue de définir les paramètres de la structure 3D.

Après ce bref rappel de quelques outils d'analyse d'images, nous allons présenter la méthode utilisée pour cartographier une éprouvette de traction plate afin d'en extraire des informations statistiques élémentaires sur la forme, la taille et la position des particules.

Principe de la cartographie

L'accès à la position du centre de chaque particule ainsi qu'à leur orientation et à leur forme ne peut être obtenu qu'au travers de l'analyse d'une face d'une éprouvette de traction. On dispose d'une éprouvette de traction plate (Figure 2.22) issue d'un échantillon d'une tubulure de l'acier de cuve BQ12 prélevé au 3/4 épaisseur. Sa longueur correspond à la direction circonférencielle du tuyau, sa largeur, au sens radial et son épaisseur, à l'axe du tuyau.

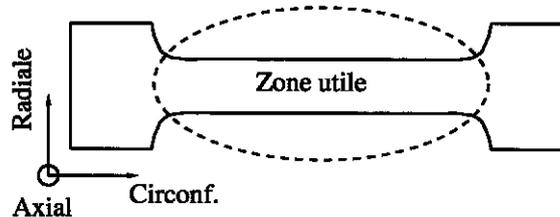


FIG. 2.22 – Éprouvette de traction plate

L'idée consiste à établir une cartographie de la zone utile de l'éprouvette, i.e., de déterminer la position de chaque particule dans le repère de l'éprouvette, en prenant un grand nombre d'images

de sa zone utile. La taille de la zone utile étudiée est de $3075\mu\text{m} \times 19140\mu\text{m}$. Ces images seront ensuite analysées par un logiciel de traitement d'images après avoir été traitées⁵.

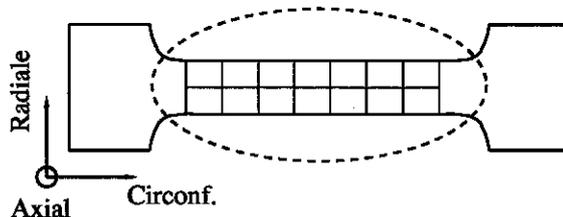


FIG. 2.23 – Principe de la cartographie

La toute première étape consiste à polir la surface de l'éprouvette que l'on souhaite étudier. Puis une attaque chimique au Nital 2% permet de révéler les particules de MnS. Cette attaque doit être menée dans certaines conditions afin de ne pas détruire les particules de MnS. En effet, si l'échantillon est plongé quelques secondes (5 à 6 secondes en pratique) dans le Nital, les particules de MnS seront rongées par l'attaque chimique. Pour tenter de révéler ces dernières tout en les conservant intactes, il convient de faire 3 à 4 attaques successives d'environ deux secondes. Après chaque attaque, l'échantillon est rincé à l'eau. Cette technique permet de ne pas endommager les particules de MnS et de les distinguer de la matrice.

L'outil utilisé pour prendre l'ensemble des images de la microstructure est le Microscope Électronique à Balayage (M.E.B.). La taille de l'image n'est pas choisie au hasard : une image de faible dimension permet d'avoir accès à des informations très précises sur la microstructure (particules de faible taille) et son temps d'acquisition est relativement rapide du fait du faible nombre de pixels nécessaire, mais nécessite un grand nombre d'images pour couvrir toute la zone utile de l'éprouvette. En revanche une image de grande dimension permet de couvrir une plus grande surface de la zone utile : un faible nombre d'images est donc nécessaire pour parcourir toute la zone utile mais son temps d'acquisition est élevé du fait du nombre important de pixels nécessaire pour avoir accès à des informations suffisamment précises sur la microstructure (particules de faible taille). Le logiciel de traitement d'image (ImageJ) ne pouvant recevoir des images à haute résolution, nous travaillerons avec la taille d'image suivante :

$$\begin{cases} \text{Abscisse} = 740\mu\text{m} - 2048 \text{ pixels} \\ \text{Ordonnée} = 575\mu\text{m} - 1632 \text{ pixels.} \end{cases}$$

Afin de couvrir la totalité de la zone utile de l'éprouvette, il faut prendre 4 images dans la largeur et 34 images dans la longueur, soit un total de 136 images. La résolution retenue (taille du pixel retenue : $0,36\mu\text{m}$ en abscisse et $0,35\mu\text{m}$ en ordonnée) nous permet de détecter facilement des particules de taille relativement petite, de l'ordre $4\mu\text{m}^2$. Nous prenons également le soin de ne pas faire intersecter une particule avec l'un des bords de l'image.

Afin de déterminer la position des particules au sein de chaque image, nous avons recours à un logiciel de traitement d'image. Ce traitement consiste à binariser l'image issue du M.E.B. Afin de simplifier cette opération, il est possible d'obtenir à l'aide du M.E.B. des images (en électrons retrodiffusés) qui présentent un fort contraste entre les particules et la matrice (Figure 2.24b). En effet, l'image sur la figure 2.24a est identique à celle de la figure 2.24b mais obtenue à partir des électrons secondaires. Il n'y a clairement aucun contraste marqué entre les particules et la matrice. Cette image sera très difficile, voire impossible, à segmenter.

⁵Ce travail de cartographie a été réalisé avec l'aide de Mathieu Dejean, étudiant en DEA de Mécanique et Matériaux, dans le cadre d'un Projet Pratique en Laboratoire.

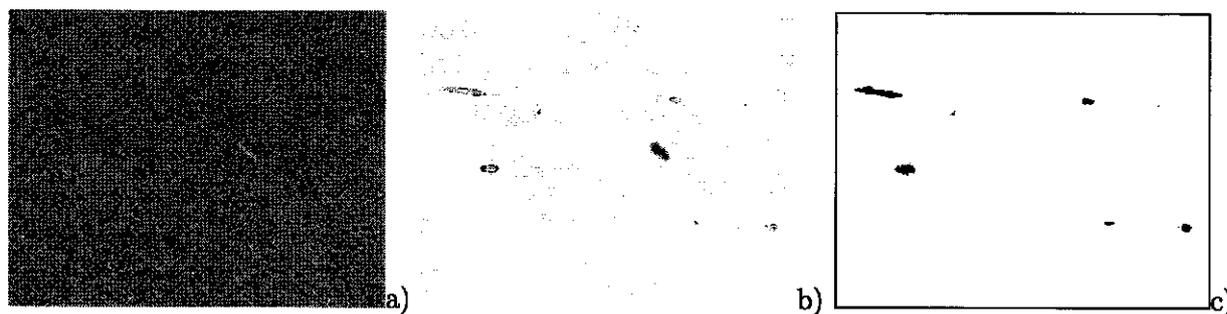


FIG. 2.24 – Étape de la cartographie. Acquisition d'une image sous MEB a) Électrons secondaires b) Électrons retrodiffusés c) Seuillage de l'image

La segmentation consiste à augmenter le contraste entre la matrice et les particules de façon à obtenir au final une image binaire suivant la démarche décrite précédemment, les particules étant en noir et la matrice en blanc (Figures 2.24c). Le logiciel de traitement d'image donne alors automatiquement la taille, les coordonnées du centre dans le repère de l'image⁶ et l'orientation de chaque particule. Notons que le contraste entre les particules et la matrice est tel qu'il n'a pas été nécessaire d'utiliser les opérations d'érosion et de dilation pour filtrer les images. Un filtrage manuel, basé sur l'encadrement des niveaux de gris de l'image (2.9) et sur la reconnaissance des défauts supérieurs à une certaine surface (définie par un nombre de pixels minimal), s'est avéré suffisant.

Il faut toutefois rester prudent car les impuretés (poussières, traces de rinçage, etc.) ont le même niveau de gris que les trous ou les particules. Une vérification de chaque image est donc nécessaire afin de ne prendre en compte que les particules et les trous.

Agencement spatial des particules de MnS

Une fois l'ensemble des images constituant la zone utile numérisées et traitées par le logiciel de traitement d'image, il ne reste plus qu'à exprimer les coordonnées de chaque particule dans le repère de l'éprouvette. La cartographie de la zone utile de l'éprouvette de traction obtenue est représentée sur la figure 2.25.

Notons que la cartographie de l'éprouvette de traction est exempte de particules sur les bords supérieurs et les bords inférieurs. Ceci est probablement un artefact dû au polissage et peut-être à un gradient de composition dans l'épaisseur du tube.

Les premières informations statistiques que nous pouvons obtenir à partir de cette cartographie sont les distributions des surfaces et des facteurs de forme (rapport du petit axe sur le grand axe des ellipsoïdes équivalents) qui sont représentées sur la figure 2.26.

Les inclusions de MnS sont majoritairement allongées (facteur de forme = 1 \Rightarrow Particules equiaxes) et elles sont toutes orientées dans la même direction, la direction circonférencielle, i.e., dans le plan horizontal de l'image (Figure 2.26c). Leur surface est très variable, la moyenne se situant aux alentours de $200\mu\text{m}^2$. Notons toutefois, que la majorité des particules ont un facteur de forme proche de 0,5 : nous n'avons donc pas à faire à des ellipsoïdes très allongés. L'hypothèse portant sur la sphéricité des particules de MnS n'est pas rigoureusement justifiée mais l'étude de l'effet de forme a volontairement été écartée de ce travail.

Il est impossible d'affirmer avec une vue en coupe de la microstructure si, dans l'épaisseur de

⁶L'origine de l'image correspond à son coin supérieur gauche.

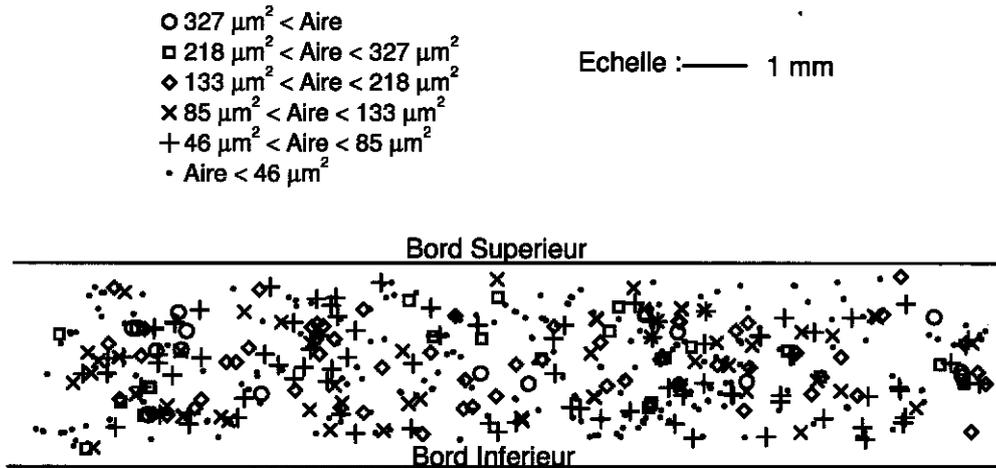


FIG. 2.25 – Cartographie de l'éprouvette de traction

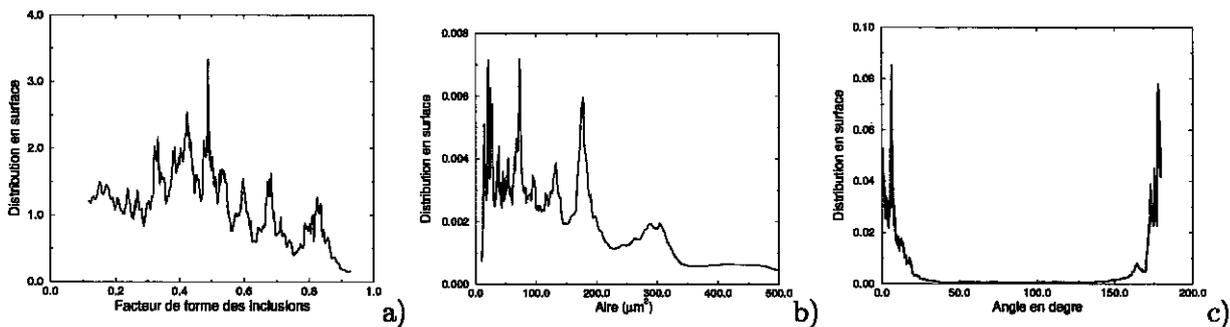


FIG. 2.26 – Informations statistiques sur les particules de MnS obtenues par analyse d'images a) distribution des facteurs de forme b) Distribution des surfaces c) Orientation des MnS

l'éprouvette, les particules ont la forme d'un disque ou sont très allongées (semblables à des fibres). Pour obtenir de ce type d'information, plusieurs coupes de la microstructures seraient nécessaires et un travail semblable à celui présenté dans cette partie devrait être mené. Par reconstruction des coupes, on serait capable de décrire la forme 3D des particules de MnS.

Une analyse inclusionnaire a été réalisé par Renevey [75] par un procédé d'analyse d'images. Il aboutit à la conclusion que les particules de MnS sont elliptiques, avec des dimensions moyennes selon les directions circonférencielle, axiale et radiale respectivement de $12\mu\text{m}$, $10\mu\text{m}$ et $8\mu\text{m}$. Leur forme ellipsoïdale est toutefois peu prononcée. Mais les inclusions que nous avons observées semblent plus allongées.

Cette cartographie de l'agencement spatial des particules de MnS fait apparaître des zones plus denses que d'autres en particules de MnS. Mais il est très difficile "à l'oeil nu" de reconnaître dans cette cartographie une microstructure bien particulière où les particules de MnS peuvent être regroupées en amas aléatoires, en amas connectés ou en amas isolés, ni de quantifier objectivement les tailles caractéristiques en jeu. Il est donc nécessaire d'appliquer les outils d'analyse statistique basés sur la fonction distance sur la microstructure de l'acier de cuve.

2.3.2 Informations statistiques basées sur la fonction distance

Grâce à la cartographie d'une éprouvette de traction, nous avons accès aux coordonnées du centre et à la surface de chaque particule. A partir de ces données, il est possible de reconstruire une image binaire de la microstructure. Pour des raisons de taille du problème, l'éprouvette est découpée en trois zones et la distribution de la fonction distance est déterminée sur chaque zone. Chaque image possède la même résolution : 1 pixel = $1\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$. En effet pour faire le traitement statistique, il faut garder l'image de la microstructure en mémoire. La fraction surfacique de chaque image est déterminée de manière discrète par la relation suivante :

$$f_s = \frac{N_{pixB}}{N_{pix}},$$

où N_{pixB} est le nombre de pixels blancs et N_{pix} , le nombre total de pixels dans l'image. Cette dernière relation est pratique dans le cas de recouvrement entre particules voisines. Dans le cas d'un non recouvrement entre défauts et dans le cas où aucune particule n'intersecte l'un des bords de l'image, la relation suivante peut être utilisée pour évaluer la fraction volumique de l'image :

$$f_s = \frac{\sum_i S_i}{S},$$

S_i étant la surface du défaut i et S la surface de l'image. Les figures 2.27 présentent une image binaire de la microstructure de l'éprouvette de traction plate.

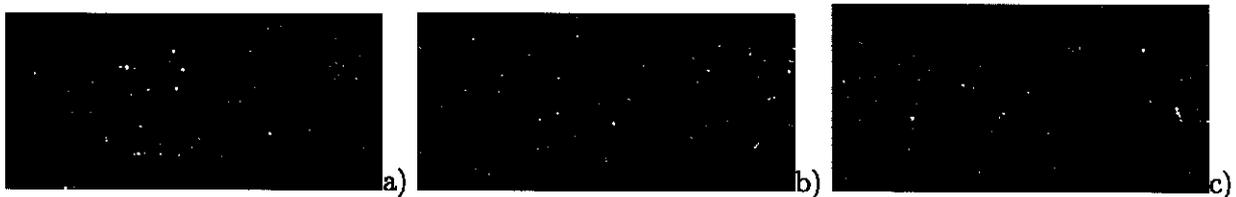


FIG. 2.27 - Les trois zones de l'éprouvette de traction a) Zone 1 $f_s = 0,6567\%$ b) Zone 2 $f_s = 0,5840\%$ c) Zone 3 $f_s = 0,5240\%$.

La fraction surfacique est très faible : elle vaut environ 0,6%. Cette fraction surfacique est plus importante que celle obtenue par Carassou [22] ou Renevey [75]. Ces auteurs aboutissent par analyse d'images à des valeurs de fractions volumiques beaucoup plus faibles que les nôtres : $f_v \simeq 0,09\%$. Les relations stéréologiques [48] permettent d'obtenir l'équivalence entre fraction surfacique mesurée à la surface d'un objet et fraction volumique de cet objet : $f_s = f_v$, sous l'hypothèse d'un domaine d'observation suffisamment grand [26] pour être représentatif. Dans notre cas la fraction volumique de l'acier de cuve serait donc d'environ $f_v = 0,6\%$. Il est un peu hâtif de conclure directement sur la fraction volumique de l'acier de cuve à partir d'une analyse d'une seule coupe de ce dernier. Des analyses inclusionnaires supplémentaires devraient être effectuées afin d'obtenir une estimation plus pertinente de la fraction volumique réelle de l'acier de cuve.

Pour obtenir les images présentées sur la figure 2.27, on suppose que les particules sont sphériques, hypothèse peu vraisemblable au vu de l'analyse expérimentale effectuée précédemment, mais qui simplifie considérablement la reconstruction d'une image binaire. On peut également noter, sur ces figures, un recouvrement possible entre deux particules voisines. Ce recouvrement provient de l'hypothèse émise sur la forme sphérique des particules : deux particules ellipsoïdales, allongées dans

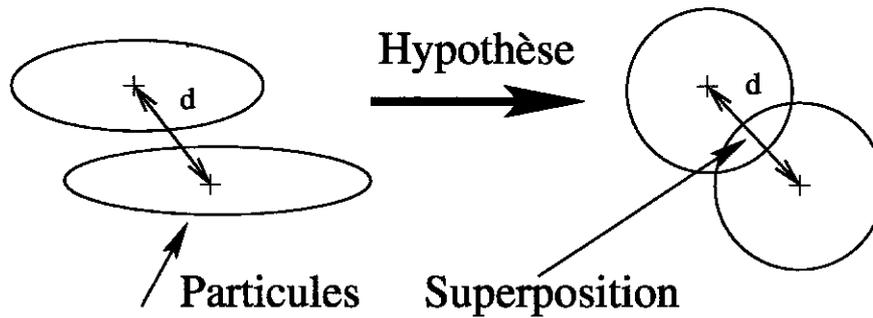


FIG. 2.28 – Passage d'une forme ellipsoïdale des particules à une forme sphérique

la même direction et ayant des centres très proches l'un de l'autre, peuvent par cette hypothèse se chevaucher (Figure 2.28).

Les figures 2.27 permettent, visuellement, de mieux mettre en évidence des zones de faible densité de particules. Mais une analyse statistique identique à celle effectuée sur des microstructures simulées donnera des informations plus pertinentes sur l'agencement spatial des particules. Pour simplifier, les trois zones sont supposées indépendantes les unes des autres, hypothèse naturellement fautive mais qui simplifie considérablement le problème. De plus, en l'absence d'information sur la distribution des défauts en dehors de l'image, on suppose qu'il n'y a aucun défaut hors de la zone d'étude. Une tentative de validation de ces hypothèses sera menée ultérieurement.

A partir des microstructures simulées, nous avons établi qu'une microstructure à amas se différencie d'une microstructure aléatoire classique par une distribution de la fonction distance plus large. Les figures 2.29 présentent les distributions des fonctions distances 2.29a et des fonctions distances normalisées 2.29b obtenues sur chacune des trois zones de l'éprouvette de traction. La largeur des distributions est quasiment identique pour les trois zones.

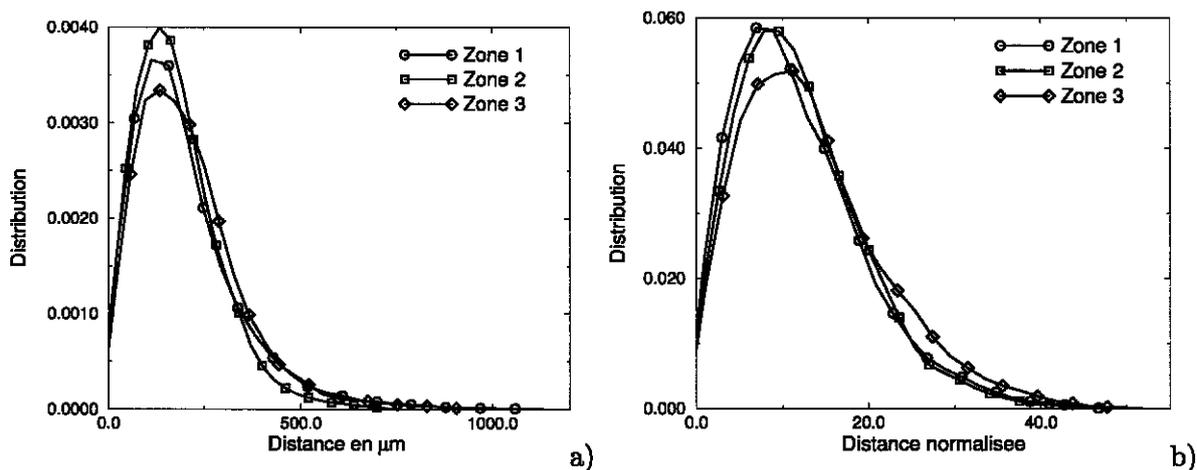


FIG. 2.29 – Informations statistiques issues de l'éprouvette de traction a) Fonction distance b) Fonction distance normalisée

Toutefois, la distribution de la fonction distance obtenue sur les trois zones de l'éprouvette ne permet pas directement de conclure sur la répartition hétérogène des particules. Il nous faut une microstructure de référence afin de faire une comparaison sur les distributions de la fonction distance. Cette microstructure de référence doit posséder la même distribution de granulométrie et, de fait,

la même fraction surfacique (uniquement dans le cas d'un non recouvrement des particules) que la microstructure réelle. Pour ce faire, on se propose de l'obtenir par une simple réorganisation de l'agencement des particules de la microstructure réelle puisque aucune particule n'intersecte avec le bord de l'image. Il suffit pour cela d'implémenter des variables aléatoires indépendantes correspondant aux coordonnées du centre de chaque particule, le rayon des particules étant déduit de la surface des particules obtenues expérimentalement. Les figures 2.30b et 2.30c présentent un tel réarrangement des particules pour la zone 1 de l'éprouvette. Les coordonnées du centre des particules sont implémentées selon un schéma de type "cerise" avec une distance minimale d_{min} devant séparer le bord de deux particules voisines de $50\mu\text{m}$ et $230\mu\text{m}$. La distance $d_{min} = 50\mu\text{m}$ conduit à une microstructure où la distribution des particules de MnS est telle qu'elle donne lieu à des zones plus denses que d'autres en défauts (Figure 2.30b). En revanche, la distance $d_{min} = 230\mu\text{m}$ conduit à une microstructure où les particules de MnS sont réparties de manière plus homogène (Figure 2.30c). Lors de ce réarrangement, il faut toutefois prendre garde à ne pas faire intersecter une particule avec le bord de l'image.

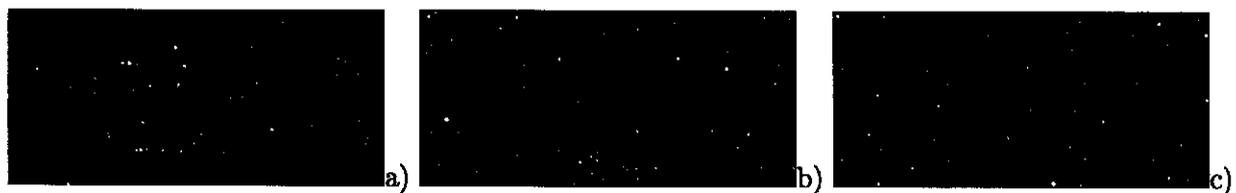


FIG. 2.30 – a) Zone1 initiale $f_s = 0,6567\%$ b) Réarrangement des particules dans la zone 1 $f_s = 0,7034\%$ $d=50\mu\text{m}$ c) Réarrangement des particules dans la zone 1 $f_s = 0,7034\%$ $d=230\mu\text{m}$

La fraction surfacique de la zone 1 réarrangée (Figure 2.30b et 2.30c) est légèrement supérieure à celle de la zone 1 initiale (Figure 2.27a). Ceci vient du fait que dans l'image réarrangée il n'y a pas de particules qui se chevauchent, contrairement à l'image initiale. L'écart entre les fractions surfaciques reste toutefois très faible. Le résultat n'est pas affecté par cette constatation. L'image 2.30c laisse apparaître moins de zones pauvres en particules que l'image 2.30b. L'analyse des fonctions distances (Figure 2.31) confirme cette observation. En effet, la zone 1 initiale possède une distribution de la fonction distance plus large que la zone 1 réarrangée, ce qui est une caractéristique des microstructures à amas. La différence entre les largeurs de la distribution de la fonction distance de la zone 1 initiale et de la zone 1 réarrangée ($d = 230\mu\text{m}$) est assez importante. Ceci signifie que la répartition hétérogène des MnS en amas donne lieu à des zones très intenses en densité de MnS et des zones à plus faible densité.

Une telle analyse peut également être mise en œuvre pour les zones 2 et 3 de l'éprouvette de traction (Figures 2.32 et Figures 2.33).

Des conclusions similaires à celles obtenues pour la zone 1 peuvent être faites : la largeur des distributions de la fonction distance et de la fonction distance normalisée est plus étroite pour la zone 3 initiale que pour la zone réarrangée (Figures 2.35). Il en va de même pour la zone 2 (Figure 2.34). Nous pouvons donc conclure que les particules de MnS sont regroupées en amas.

Cette analyse de l'agencement spatial des particules de MnS sur la surface de l'éprouvette de traction étudiée dans la partie précédente permet, grâce à une microstructure de comparaison de même granulométrie, de conclure que les particules sont regroupées en amas. En revanche il est impossible d'identifier rigoureusement la nature des amas : sont-ce des amas connectés ou des amas isolés ? Afin d'avoir une idée plus précise sur la nature des amas, il convient d'effectuer une analyse de connectivité de la microstructure (Figure 2.36).

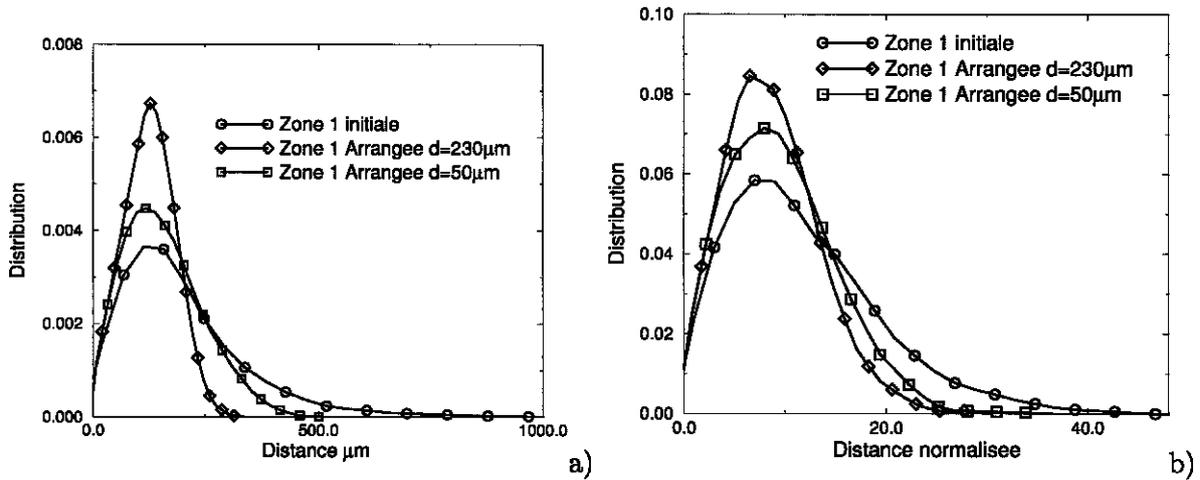


FIG. 2.31 – Comparaison entre la zone 1 initiale (Figure 2.30a) et la zone 1 réarrangée (Figure 2.30b et 2.30c) : a) Fonction distance b) Fonction distance normalisée

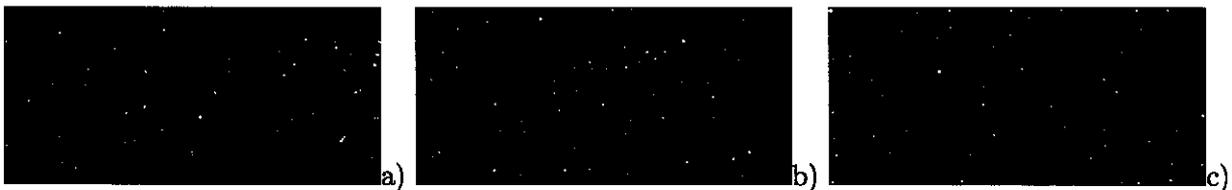


FIG. 2.32 – a) Zone 2 initiale $f_s = 0,5840\%$ b) Réarrangement des particules dans la zone 2 $f_s = 0,6069\%$ $d=10\mu\text{m}$ c) Réarrangement des particules dans la zone 2 $f_s = 0,6069\%$ $d=230\mu\text{m}$



FIG. 2.33 – a) Zone 3 initiale $f_s = 0,5240\%$ b) Réarrangement des particules dans la zone 3 $f_s = 0,5320\%$ $d=10\mu\text{m}$ c) Réarrangement des particules dans la zone 3 $f_s = 0,5320\%$ $d=230\mu\text{m}$

Au vu des résultats obtenus sur les zones 1, 2 et 3 de la microstructure expérimentale en termes d'analyse de la distribution de la fonction distance (Figures 2.31, 2.34 et 2.35) et de l'analyse de connectivité (Figure 2.36), analyses susceptibles de révéler la présence d'amas dans le matériau, le matériau d'étude rentre plutôt dans la gamme des microstructures à amas connectés et non dans celle des microstructures à amas isolés, du fait de l'absence de palier horizontal dans le graphe de connectivité comme l'illustrent les figures 2.36. Une représentation en niveaux de gris du seuillage de l'image de la fonction distance est présentée sur les figures 2.37 pour une valeur particulière de seuil.

Notons que le graphe de connectivité obtenu sur les zones 1 et 3 initiales montre que le nombre de zones grises obtenues sur ces microstructures lorsque la distance de seuillage est nulle est plus faible que celui obtenu sur les mêmes zones réarrangées. Ceci est dû à l'hypothèse faite sur la forme circulaire des défauts pour reconstruire l'image binaire qui induit, comme signalé précédemment,

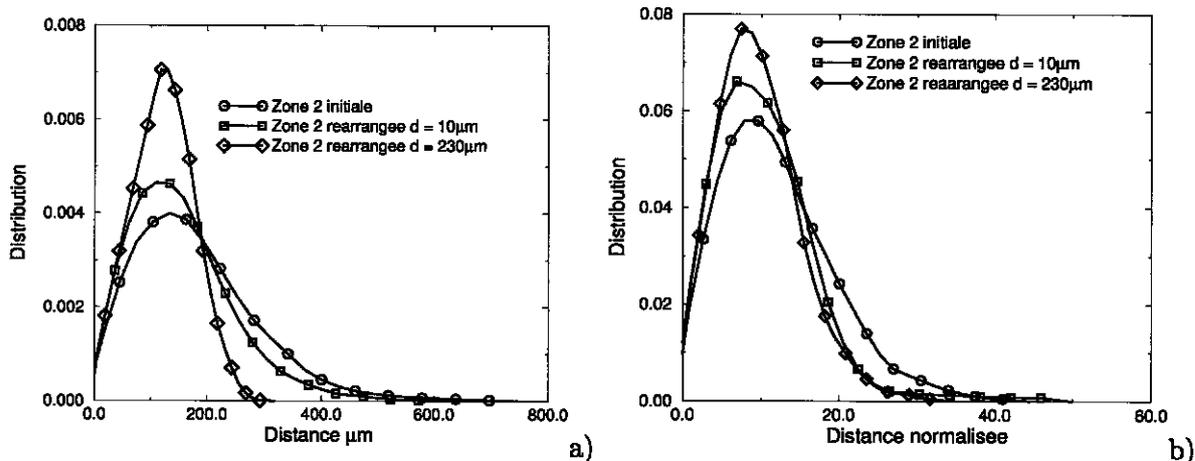


FIG. 2.34 – Comparaison entre la zone 2 initiale (Figure 2.33a) et la zone 2 réarrangée (Figure 2.32b et 2.32c) : a) Fonction distance b) Fonction distance normalisée

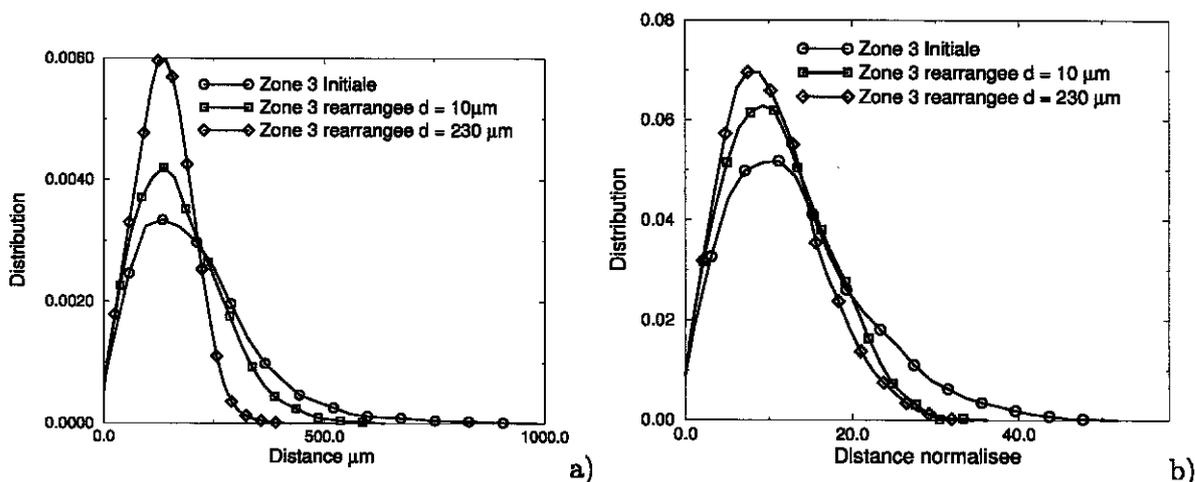


FIG. 2.35 – Comparaison entre la zone 3 initiale (Figure 2.33a) et la zone 3 réarrangée (Figure 2.33b et 2.33c) : a) Fonction distance b) Fonction distance normalisée

une superposition de plusieurs particules voisines.

Le graphe de connectivité obtenu sur les zones 1 et 3 initiales montre que le nombre de zones grises tend vers 1 pour une distance d'environ $260\mu\text{m}$. Cette valeur correspond à la demi-distance moyenne séparant le bord des particules de MnS. Ainsi, en cohérence avec l'étude menée dans le paragraphe 2.2.5, la distance entre amas voisins est de l'ordre de $2 \times 260\mu\text{m}$, soit $520\mu\text{m}$. Il est toutefois impossible de déterminer rigoureusement la taille des amas. Renevey [75] aboutit également à la conclusion, par un procédé d'analyse d'images, que les particules de MnS se regroupent en amas et qu'ils sont distants d'environ 0,5mm à 1mm. Nous aboutissons à la même conclusion sur la distance entre amas.

Par l'analyse de la queue de distribution de la fonction distance des zones 1 et 3, nous pouvons conclure que les points de la matrice les plus éloignés des particules de MnS le sont à une distance d'environ $950\mu\text{m}$. Cette distance est toutefois obtenue sans tenir compte de la présence de particules de MnS en dehors de l'image. Cette prise en compte aurait pour conséquence de faire baisser cette

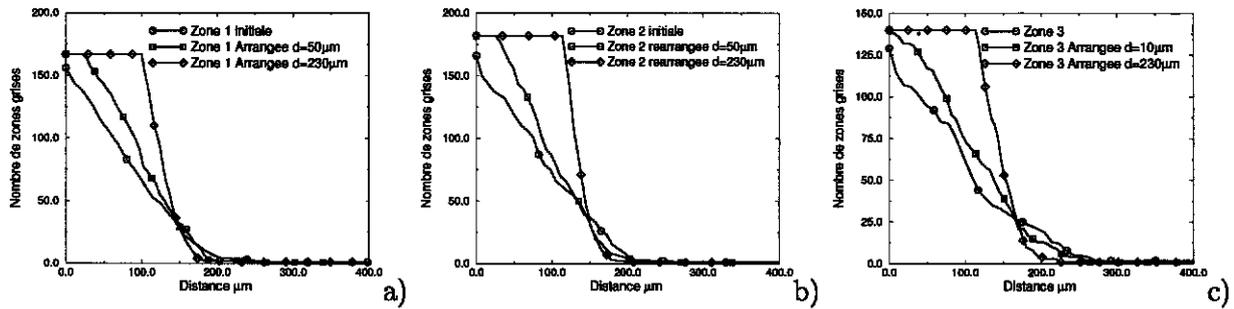


FIG. 2.36 – Graphe de connectivité a) Zone 1 b) Zone 2 c) Zone 3

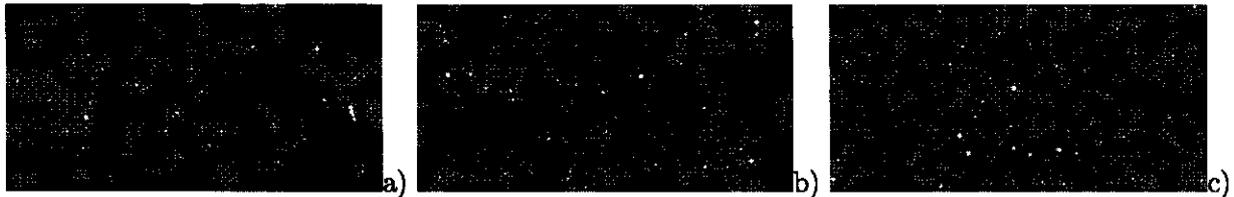


FIG. 2.37 – Représentation en niveau de gris de l'analyse de connectivité pour une distance de seuillage $d = 150\mu\text{m}$ a) Zone 3 initiale (Figure 2.33a) b) Zone 3 réarrangée (Figure 2.33b) c) Zone 3 réarrangée (Figure 2.33c)

distance.

Notons également que la forme exacte des amas n'est pas une donnée accessible à partir de cette analyse statistique : sont-ils de forme sphérique ou allongée ? L'analyse de la covariance pourra peut-être nous fournir une telle information.

La distribution de la fonction distance et le graphe de connectivité ne donnent pas non plus d'informations sur la taille des amas : sont-ils de taille millimétrique ? Cette donnée pourrait être accessible, notamment pour les microstructures à amas isolés, en calculant le covariogramme (Voir Annexe B) sur l'image de la fonction seuillée (Figure 2.37). La valeur du seuil correspond à la distance euclidienne à partir de laquelle le nombre d'éléments connexes tend vers une asymptote horizontale. On rappelle que cette dernière est caractéristique d'une microstructure à amas isolés et correspond au nombre d'amas présent dans la microstructure.

Une légère inflexion de la variation du nombre d'éléments connexes de la zone 3 initiale est également mise en évidence sur la figure 2.36c. Celle-ci peut traduire le fait que la microstructure de l'acier n'est pas rigoureusement une microstructure à amas connectés mais que certains amas peuvent être isolés, comme dans une microstructure à amas aléatoires.

Dans cette étude, nous nous sommes efforcé de comparer les informations statistiques en terme de fonction distance et de graphe de connectivité entre la microstructure expérimentale et une microstructure réarrangée selon un schéma de type "cerise", toutes deux possédant la même distribution de taille de défauts. Une étude similaire peut être envisagée mais, cette fois-ci, en réarrangeant les particules de MnS en amas isolés et connectés. Ceci est possible selon le processus (2.4) pour la génération de microstructure à amas : les amas sont implémentés selon un schéma booléen, de sphères dures ou de type "cerise", aux points d'un processus de Poisson (tirage aléatoire des coordonnées du centre et du rayon de chaque amas) et la position des particules est implémentée soit à l'intérieur des amas soit à l'extérieur. Le rayon des particules est celui obtenu expérimentalement. Ainsi, nous pouvons comparer la distribution de la fonction distance et le graphe de connectivité entre la zone initiale et la zone réarrangée pour différentes tailles d'amas, différents nombres d'amas, etc. Cette

étude complémentaire aurait pour objectif de situer les informations statistiques obtenues sur la microstructure réelle par rapport à des microstructures à amas de même distribution de taille des défauts.

Il reste également la question du traitement des points sur le bord de l'image. En effet, nous avons analysé les images indépendamment les unes des autres sans tenir compte de l'éventuelle présence de défauts en dehors de l'image par manque d'information sur la microstructure de l'acier. Quelle est alors la pertinence des informations statistiques obtenues avec une telle hypothèse? Ce point est abordé dans le paragraphe suivant.

2.3.3 Traitement des défauts sur le bord

Le cas des microstructures aléatoires, i.e., des microstructures qui sont exemptes de toutes conditions de périodicité, nécessite un traitement particulier car aucune information sur la distribution des défauts n'est disponible en dehors de l'image. Les informations statistiques issues d'une telle image ne tiennent pas compte de la présence de défauts en dehors de la zone d'étude, i.e., de l'image binaire de la microstructure. Ceci a pour conséquence d'induire une petite erreur sur les informations statistiques obtenues.

Dans le paragraphe précédent, la fonction distance a été appliquée sur chacune des trois zones de l'éprouvette sans se soucier de l'éventuelle présence de défauts en dehors de la zone d'étude, les trois zones étant supposées indépendantes les unes des autres : cette hypothèse est en partie fautive car les bords droit et/ou gauche d'images voisines selon la zone étudiée sont normalement liés. Cette hypothèse a toutefois l'intérêt de simplifier l'analyse statistique. La prise en compte de défauts hors de l'image devrait induire une petite erreur, sur les informations statistiques obtenue. Afin de quantifier cette erreur un calcul de la fonction distance est entrepris sur chacune des zones de l'éprouvette de traction. Ces zones sont toujours supposées indépendantes les unes des autres, mais cette fois-ci, en l'absence d'information en dehors des images, on va supposer qu'elles se répètent périodiquement. Cette hypothèse constitue un cas extrême mais permet de juger de la pertinence des informations statistiques obtenues précédemment. Elle est possible de mise en œuvre car aucune particule n'intersecte l'un des bords de l'image. Les figures 2.38a et 2.38b présentent respectivement les distributions de la fonction distance et de la fonction distance normalisée obtenues sur la zone 1 initiale (Figure 2.30a) et la zone 1 réarrangée (Figure 2.30b).

Les distributions de la fonction distance et de la fonction distance normalisée obtenues avec et sans condition de périodicité sont quasi-identiques, notamment dans le cas de la zone 1 réarrangée. La faible différence qui existe entre les distributions provient du traitement des points situés aux bords de l'image qui sont dépendants des conditions appliquées au bord de l'image. Dans le cas des microstructures aléatoires, n'ayant aucune information en dehors de l'image, il conviendrait de ne pas prendre en compte, pour l'obtention des distributions de la fonction distance et de ses extensions, des points qui se situent à proximité des bords de l'image. Mais la question de la définition de ces points reste pour le moment sans réponse. On constate tout de même que la conclusion générale n'est pas perturbée par un tel traitement. Quelles que soient les conditions envisagées, la microstructure réelle possède toujours une distribution de la fonction distance plus large que la microstructure réarrangée. Seule la queue de la distribution est affectée par ces conditions.

Pour tenter de mettre en évidence les zones sur les bords de l'image qui sont le plus affectées par ces types de conditions, une microstructure aléatoire de type "cerise" est générée en prenant bien soin de ne pas faire intersecter un disque sur l'un des bords de l'image afin de pouvoir appliquer sur

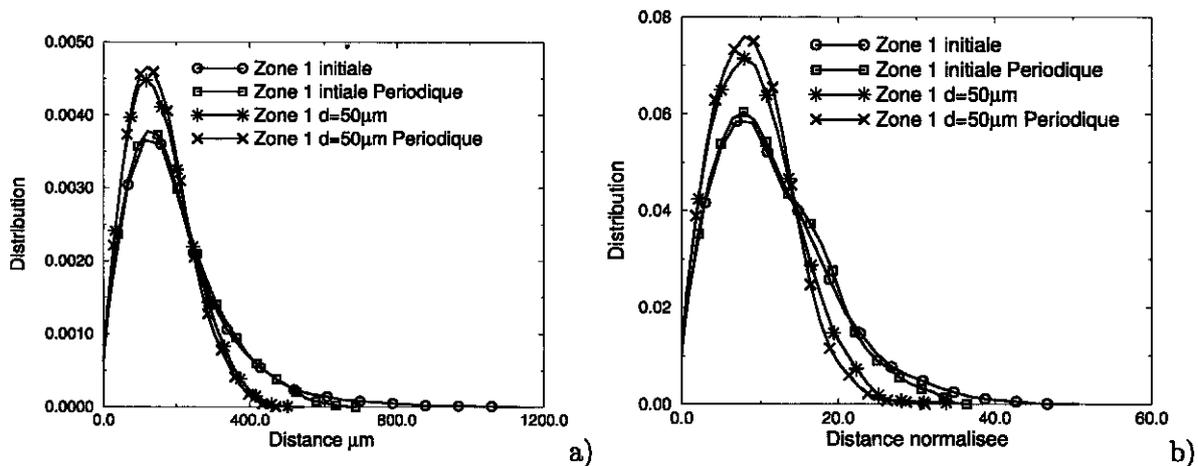


FIG. 2.38 – Comparaison de la fonction distance a) et de la fonction distance normalisée b) avec et sans condition de périodicité sur la Zone 1 initiale (Figure 2.30a) et la Zone 1 réarrangée (Figure 2.30b)

cette dernière des conditions de périodicité⁷.

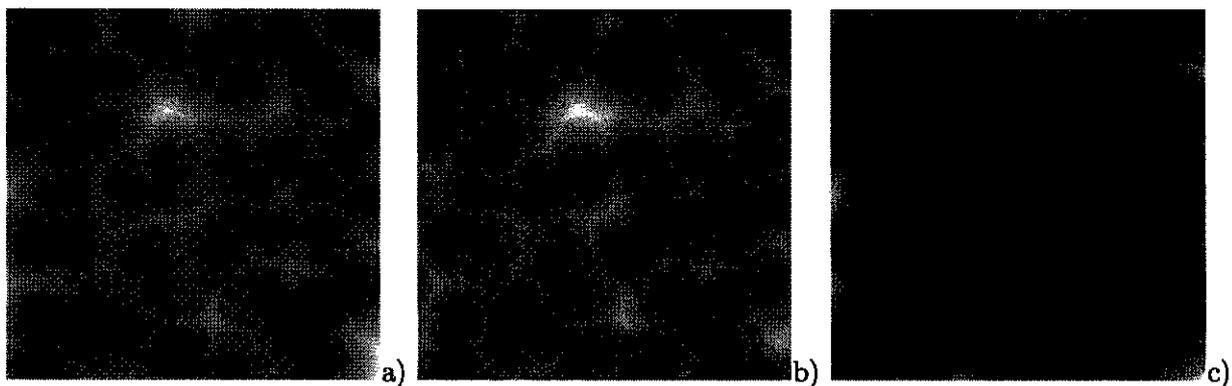


FIG. 2.39 – Images de la fonction distance a) Microstructure aléatoire b) Microstructure aléatoire avec une condition de périodicité c) Différence des deux images a et b

Les figures 2.39a et 2.39b présentent les cartes de la fonction distance calculées respectivement sans et avec condition de périodicité. La différence entre ces deux cartes (Figure 2.39c) est très faible hormis sur de petites zones sur les bords de l'image qui correspondent à des points dont la particule la plus proche est dans l'image voisine et non dans la zone étudiée. Ces zones induisent une petite perturbation sur la distribution de la fonction distance. Finalement, dans le cas où la zone étudiée est suffisamment grande, ne pas prendre en compte les défauts en dehors de l'image ne perturbe pas significativement les résultats statistiques obtenus.

Le calcul des distributions de cellules de Voronoï dans le cas des microstructures aléatoires requiert également un traitement particulier. Du fait du manque d'information sur la microstructure de l'acier en dehors de l'image, une cellule de Voronoï intersectant un des bords de l'image ne peut être prise en compte car elle n'est pas parfaitement définie. Il convient alors de l'éliminer. Les

⁷Notons qu'il serait également possible de procéder à la même analyse en générant une microstructure périodique et non aléatoire.

distributions des fractions volumiques locales, basées sur la décomposition en cellules de Voronoï, ne seront définies qu'à partir des cellules restantes, i.e., des cellules entières.

Partant du principe qu'il est difficile, voire impossible, de transposer au cas 3D les résultats obtenus à partir d'une seule coupe du matériau, un travail similaire serait à entreprendre pour un certain nombre de coupes sériées 2D du matériau obtenues, à savoir, repérage des coordonnées du centre et du rayon de chaque particule afin d'obtenir des images binaires de la microstructure sur lesquels seront appliqués des outils d'analyse statistique. L'objectif de ce travail fastidieux permettrait d'une part de conforter le résultat obtenu sur une coupe 2D et, d'autre part, d'avoir une idée plus précise sur l'agencement des particules au sein du matériau réel par reconstruction de la microstructure 3D à partir des coupes sériées 2D [29]. L'inconvénient majeur d'une telle méthode est sa nature destructive : il ne sera ensuite plus possible de corrélérer expérimentalement hétérogénéité microstructurale et hétérogénéité de déformation survenue lors d'un essai de traction, par exemple. Des coupes sériées peuvent également être faites après l'essai. L'autre difficulté est pratique : c'est un travail fastidieux et il est très difficile d'enlever une couche, d'épaisseur faible et précisément connue, d'une éprouvette.

Une utilisation récente des principes de la tomographie en science des matériaux permet d'avoir accès aux informations morphologiques tridimensionnelles sur la microstructure des matériaux hétérogènes [15]. La principale limitation de ces méthodes est directement liée à la résolution spatiale des images tridimensionnelles obtenues : tous les défauts plus fins que quelques microns disparaissent, typiquement $5\mu\text{m}$ dans les situations optimales pour un tomographe de laboratoire. Ces méthodes ne seraient donc d'aucun intérêt dans notre cas pour le moment.

Une tentative de radiographie de l'éprouvette de traction a toutefois été menée à l'INSA de Lyon par Eric Maire. L'objectif de l'expérience était d'étudier l'hétérogénéité de la répartition des particules de MnS dans l'éprouvette de traction. Malheureusement, la taille des défauts de MnS étant trop petite et les variations de densité trop faible, cette expérience n'a pas donné de résultat exploitable. Une telle expérience aurait aussi permis d'évaluer l'endommagement (décohésion entre matrice et inclusion, croissance de cavité, fissuration des MnS, etc.) au coeur de l'éprouvette de traction lors d'un essai de traction uniaxiale et de mettre en premier en évidence l'hétérogénéité de la distribution des particules de MnS dans l'épaisseur de l'éprouvette avant déformation.

Notons également qu'un essai de traction à température ambiante était prévu sur cette éprouvette de traction mais que, faute de temps, il n'a pu être réalisé avant la fin de cette thèse. Le principe et les objectifs de ce dernier sont toutefois brièvement rappelés. Cet essai aurait pour but de mettre en évidence expérimentalement l'hétérogénéité des champs locaux à la surface de l'éprouvette due à la présence d'amas de MnS. La déformation est-elle uniforme sur toute la surface de l'éprouvette où est-elle localisée dans les zones où règne une forte densité de particules de MnS? La technique utilisée pour mesurer les champs locaux à la surface de l'éprouvette est la technique de corrélation d'images utilisée dans le chapitre précédent pour mettre en évidence les champs locaux au voisinage des particules de MnS. Celle-ci sera appliquée à une échelle plus grande et sur toute la surface de la zone utile de l'éprouvette avec un pas de grille d'environ $15\mu\text{m}$. Ayant en possession une cartographie de l'éprouvette de traction et les champs de déformation obtenus à la surface de l'éprouvette pour différents états de chargement, il sera alors possible de corrélérer hétérogénéité microstructurale et hétérogénéité de déformation.

A l'opposé, on peut se poser la question de la pertinence des informations statistiques obtenues sur la coupe 2D de l'acier de cuve : est-ce que la microstructure 3D est également une microstructure à amas? Peut-on répondre à cette question par une simple analyse d'une ou plusieurs coupes d'un matériau? Afin de répondre à ces questions, on se propose d'étudier les informations statistiques issues de coupes 2D d'un matériau hétérogène 3D obtenues par simulation avec celles issues directement

du matériau 3D.

2.4 Passage 3D → 2D

La distribution des défauts dans un matériau hétérogène réel s'obtient en général expérimentalement au travers d'une coupe 2D de ce matériau. Une analyse statistique similaire à celle présentée dans le paragraphe précédent, i.e., analyse de la distribution de la fonction distance suivie d'une analyse de connectivité, permet d'avoir accès à des informations sur la morphologie du matériau réel hétérogène. Toutefois, les informations statistiques obtenues sur une coupe bidimensionnelle d'un matériau hétérogène sont-elles pertinentes vis-à-vis de sa microstructure réelle, i.e., 3D? On se propose de répondre à cette question au travers de simulations de microstructures 3D de morphologies variées (aléatoire, à amas isolés et connectés) suivies de la prise de plusieurs coupes 2D sur ces mêmes microstructures. La microstructure 3D ainsi que ses coupes 2D feront l'objet d'une analyse statistique basée sur la fonction distance.

2.4.1 Principe de la méthode

Afin de comparer les informations statistiques obtenues sur un matériau réel tridimensionnel et celles obtenues sur des coupes de ce dernier, la démarche proposée consiste à simuler une microstructure 3D aléatoire ou à amas, isolés ou connectés, et à intersecter cette microstructure avec des plans orthogonaux aux trois directions de l'espace pour simplifier.

Le principe d'obtention d'une ou plusieurs coupes de la microstructure 3D ne nécessite pas la mémorisation 3D de l'image de cette microstructure. En effet, il convient de ne garder en mémoire que les coordonnées du centre de chaque sphère ainsi que leur rayon. L'intersection d'un plan p distant de $d(x, p)$ avec les coordonnées du centre x de la sphère de rayon r_{3d} donne un disque de rayon r_{2d} qui s'exprime selon :

$$r_{2d} = \sqrt{r_{3d}^2 - d(x, p)^2}. \quad (2.12)$$

Sur chaque plan de coupe, la fraction surfacique de défauts est évaluée grâce à la connaissance du rayon de chaque disque et grâce à l'hypothèse de périodicité des images selon :

$$f_s = \frac{1}{S_{image}} \pi \sum_{i=1}^{N_{2d}} r_{2d,i}^2; \quad (2.13)$$

N_{2d} correspond au nombre de disques présents dans la coupe 2D et S_{image} à la surface de cette même coupe. Dans notre cas, $S_{image} = 1$ car les images 3D sont de volume unitaire et, par voie de conséquence, les coupes 2D sont de surface unitaire.

De la même manière, pour un nombre n de coupes dans une direction donnée i ($i = X, Y$, ou Z), l'écart type ET^i est défini selon :

$$ET^i = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (f_{s_j} - f_v)^2}, \quad (2.14)$$

où f_{s_j} représente la fraction surfacique de la j^{ieme} coupe et f_v la fraction volumique de la microstructure 3D. Il convient maintenant d'appliquer cette méthode sur des microstructures de morphologies diverses. Cette analyse a pour but de vérifier si l'étude d'une unique coupe de la microstructure en terme de fraction volumique et distribution des défauts permet de conclure sur la morphologie et la teneur en défauts de la microstructure 3D.

2.4.2 Cas des microstructures aléatoires

Considérons dans un premier temps une microstructure 3D aléatoire de côté unitaire (Figure 2.40) obtenue par un schéma booléen de type "cerise", de fraction volumique $f = 7,75\%$ et contenant 500 défauts de rayon r_{3d} identique $r_{3d} = \frac{1}{30}$. La microstructure est conçue de manière à obtenir une distribution uniforme des défauts, techniquement en imposant une distance minimale devant séparer le bord de chaque défaut assez élevée.

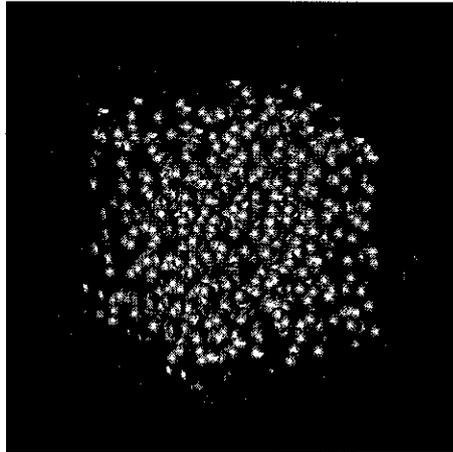


FIG. 2.40 – Microstructure périodique à répartition uniforme de défauts. Résolution de l'image : 100^3 Voxels. Fraction volumique $f = 7,75\%$

Afin d'extraire des coupes 2D de cette microstructure, celle-ci est intersectée par des plans orthogonaux aux trois directions de l'espace. Chaque coupe va nous apporter différentes informations : fraction surfacique de défauts, morphologie (grâce à la fonction distance et ses variantes), etc... A partir d'informations obtenues sur une coupe 2D d'un matériau hétérogène, il est possible d'en déduire des informations sur sa microstructure réelle (3D) à partir de relations stéréologiques [48]. Par exemple, si le domaine d'observation est suffisamment large, la fraction surfacique issue d'une coupe 2D doit correspondre à la fraction volumique de la microstructure réelle (3D), soit $f_s = f_v$. Est-il possible également à partir d'informations statistiques basées par exemple sur la fonction distance obtenues sur des coupes 2D de conclure sur la morphologie de la structure 3D ? Pour répondre à ces questions, la microstructure 3D est intersectée par 21 plans dans chaque direction. Les fractions surfaciques calculées sur chaque coupe grâce à la relation (2.13) sont reportées dans le tableau 2.2.

X,Y,Z	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50
f_s^X (%)	8,55	8,38	8,59	5,40	7,97	8,50	5,78	9,28	8,19	7,04	7,30
f_s^Y (%)	7,21	8,16	7,82	6,60	7,65	9,27	7,52	7,87	8,82	7,02	8,12
f_s^Z (%)	6,04	7,72	7,09	7,87	9,65	7,97	7,79	8,56	7,53	7,01	9,49
X,Y,Z	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	0,80	0,85	0,90	0,95	0,10	Moy
f_s^X (%)	8,58	7,64	7,05	8,51	9,14	8,66	6,89	9,49	5,40	8,55	7,85
f_s^Y (%)	6,75	9,10	5,68	9,48	6,71	8,55	7,61	8,36	8,27	7,21	7,80
f_s^Z (%)	5,56	11,04	6,47	7,59	8,47	10,38	6,17	7,68	6,62	6,04	7,75

TAB. 2.2 – Fraction surfacique obtenue sur chaque plan : 21 plans par direction

L'écart type ET calculé pour chaque direction de l'espace reste inférieur à 1,5% et vaut pour chaque

direction :

$$\text{écart type : } \begin{cases} ET^X = 1,184\% \\ ET^Y = 0,944\% \\ ET^Z = 1,426\%, \end{cases}$$

Ces écarts types sont assez élevés, de l'ordre de 20% de la fraction volumique initiale. Ceci signifie que les fractions surfaciques calculées sur les coupes 2D sont pour la plupart assez éloignées de la fraction volumique de la microstructure 3D. Ainsi, en considérant la fraction surfacique d'une seule coupe de la microstructure 3D pour évaluer la fraction volumique réelle de la microstructure, une erreur d'au moins 20% peut être commise. Celle-ci peut être plus importante si le domaine d'étude (la taille de l'image) est trop faible.

La fraction surfacique moyenne f_{moy} définie comme la moyenne des fractions surfaciques calculées sur chaque coupe est très proche de la fraction volumique de la microstructure 3D :

$$f_{moy} = \frac{1}{3} (f_{smoy}^X + f_{smoy}^Y + f_{smoy}^Z) = 7,80\%.$$

L'écart relatif entre f_{moy} et la fraction volumique réelle est de moins d'un pourcent. D'une manière générale, les fractions surfaciques calculés sur chaque coupe 2D sont pour la plupart très proches de la fraction volumique de la microstructure 3D. Toutefois, il existe pour certaines coupes un écart non négligeable avec la fraction volumique 3D. Cet écart peut être réduit en augmentant la taille du domaine de simulation et en considérant ainsi un plus grand nombre de sphères.

Des informations statistiques basées sur la fonction distance peuvent être extraites des coupes 2D. La figure 2.41 présente une comparaison entre la fonction distance et la fonction distance normalisée obtenues sur la microstructure 3D et sur certaines de ces coupes. Pour des raisons de lisibilité, uniquement 2 coupes par direction sont représentées sur ces figures.

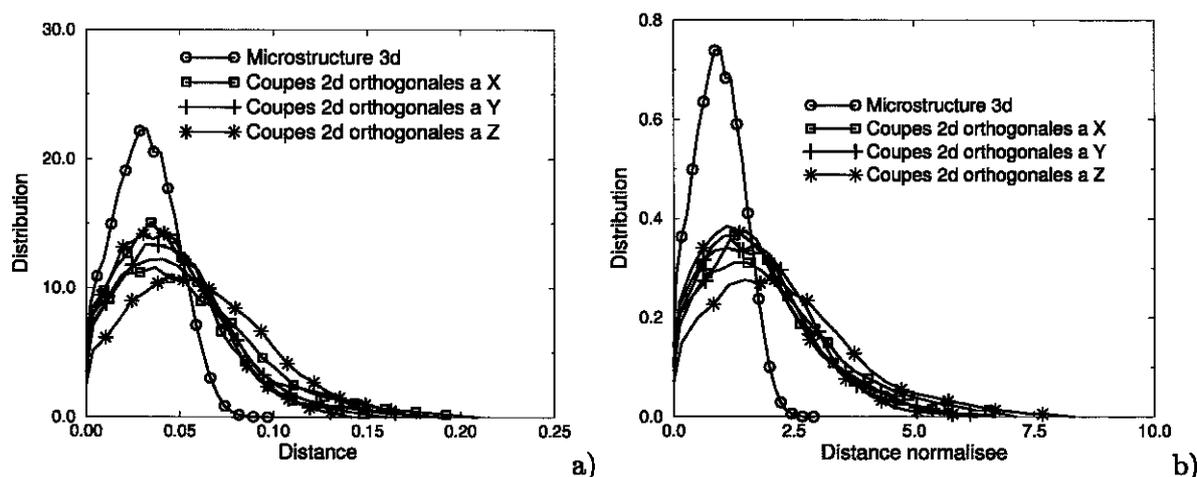


FIG. 2.41 – Comparaison des informations statistiques sur des coupes 2D et sur la microstructure 3D a) Distribution de la fonction distance b) Distribution de la fonction distance normalisée

La distribution de la fonction distance est plus large pour les coupes 2D que pour la microstructure 3D. Cet écart est une conséquence du schéma retenu pour générer la microstructure aléatoire : un schéma de type "cerise" où les cavités sont en répartition homogène⁸. En effet, les bords des cavités étant suffisamment éloignés les uns des autres, il y a de fortes chances que le plan intersectant la

⁸si la distance minimale séparant le bord des défauts est assez élevée.

microstructure 3D passe entre les cavités (Figure 2.42). Il apparaît donc sur les coupes 2D des zones où la proportion de défauts est plus faible (Figure 2.43) laissant ainsi penser que la microstructure 3D est une microstructure à répartition hétérogène de cavités.

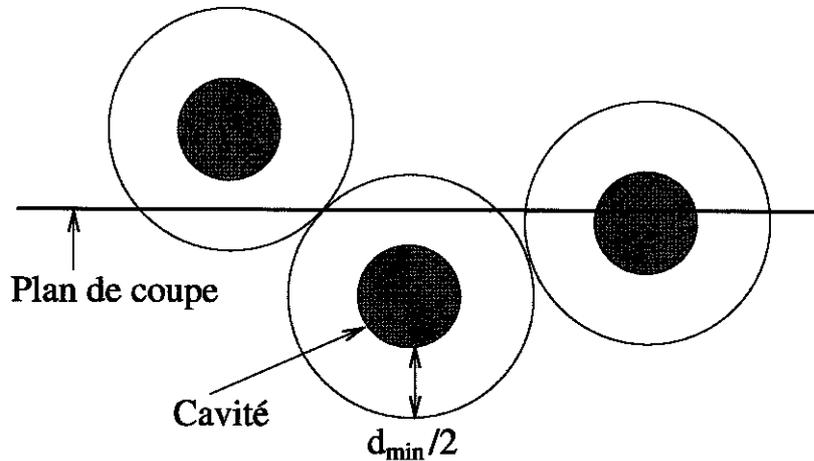


FIG. 2.42 – Intersection de particules distantes de d_{min} avec un plan horizontal

En revanche, il n'y a quasiment aucune différence sur les fonctions distances obtenues sur les coupes 2D. Les figures 2.43 montrent également que, bien que la microstructure 3D soit composée de défauts de taille identique, les coupes 2D sont, elles, à distribution de taille de défauts variable.

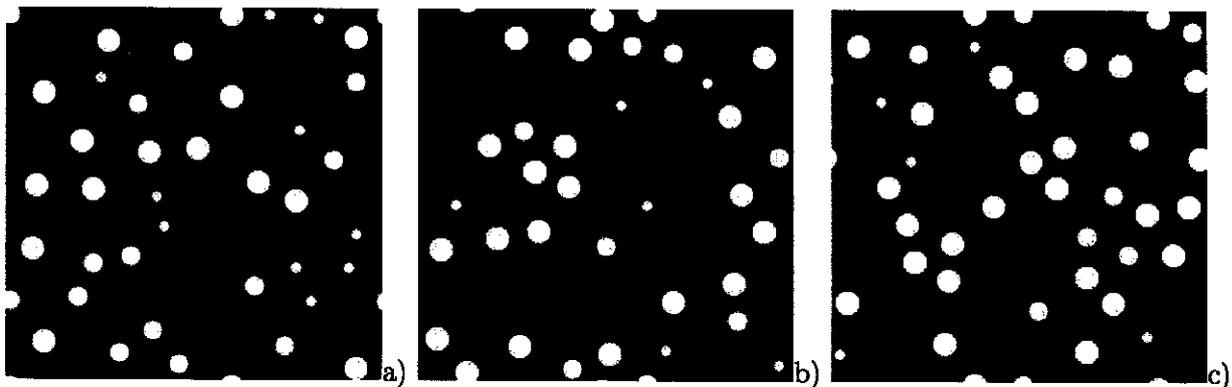


FIG. 2.43 – Exemples de microstructures 2D issues de la coupe de la microstructure aléatoire 2.40

Comme nous l'avons déjà évoqué précédemment, les coupes 2D d'une microstructure 3D de type "cerise" présentent une non uniformité de la répartition des défauts. Afin de mettre en évidence une éventuelle séparation d'échelle microstructurale sur les coupes 2D, on se propose de réarranger les défauts des microstructures présentées sur la figure 2.43 selon la même méthode utilisée pour la microstructure expérimentale. Techniquement, la procédure consiste à tirer aléatoirement de nouvelles coordonnées pour le centre de chaque particule sans modifier son rayon. La microstructure initiale et la microstructure réarrangée possèdent ainsi la même dispersion de la taille des défauts et, de fait, la même fraction volumique. Rappelons que cette procédure n'est possible que dans le cas de microstructures périodiques ou dans le cas de microstructures aléatoires si aucun défaut n'intersecte le bord de l'image. Le schéma retenu pour réarranger les défauts est le schéma de type "cerise" avec une distance minimale devant séparer le bord des défauts suffisamment grande de façon à obtenir

une microstructure à répartition homogène de défauts.

Les figures 2.44a, 2.44b et 2.44c présentent une réorganisation des défauts des microstructures représentées par les figures 2.43a, 2.43b et 2.43c respectivement selon un schéma de type "cerise".

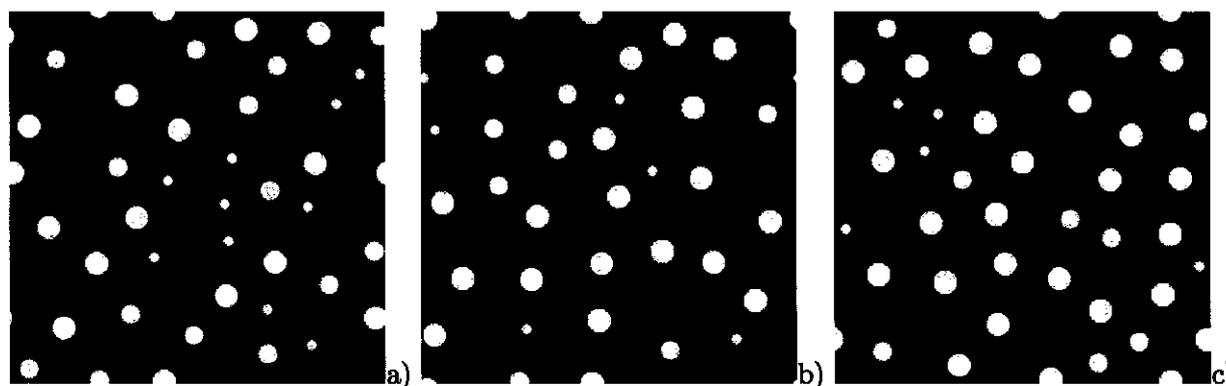


FIG. 2.44 – Microstructures présentées sur la figure 2.43 réarrangées selon un schéma de type "cerise"

Une comparaison entre les distributions de la fonction distance et de la fonction distance normalisée obtenues sur les microstructures initiales (Figure 2.43) et les microstructures réarrangées est présentée sur les graphes 2.45a et 2.45b respectivement.

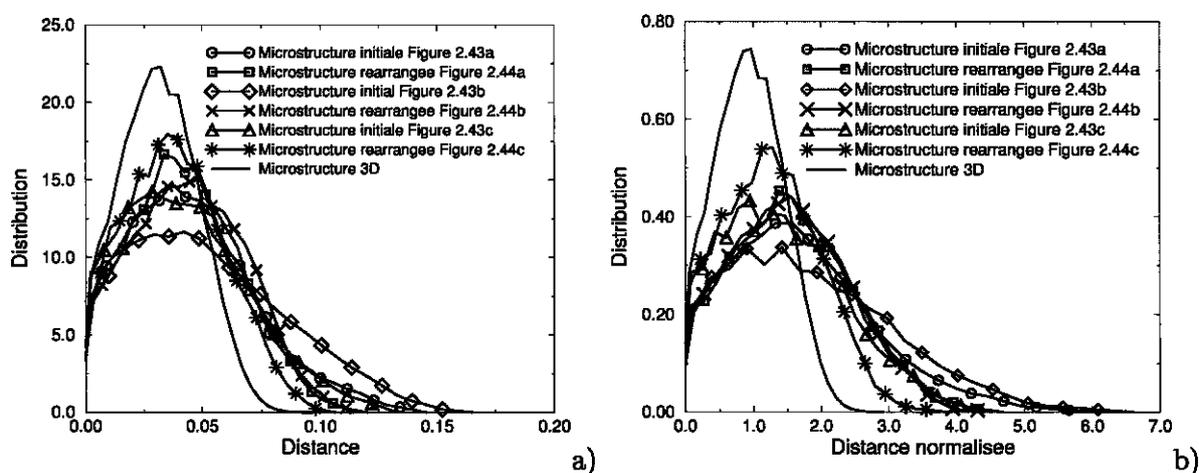


FIG. 2.45 – Comparaison des informations statistiques sur des coupes 2D initiales (Figures 2.43) et les coupes 2D réarrangées (Figures 2.44) a) Distribution de la fonction distance b) Distribution de la fonction distance normalisée

Les microstructure réarrangées possèdent une distribution de la fonction distance plus étroite que les microstructures initiales. Ceci traduit un regroupement hétérogène des défauts en amas dont les raisons ont déjà été évoquées précédemment. Ainsi, la seule information que nous pouvons extraire des coupes 2D est la fraction volumique de la microstructure 3D si la zone étudiée est suffisamment grande.

2.4.3 Cas des microstructures à amas

Une procédure identique à celle présentée dans le chapitre précédent est maintenant appliquée dans le cas des microstructures à amas connectés et isolés.

Les microstructures à amas connectés et isolés présentées sur les figures 2.46a et 2.46a respectivement sont obtenues par le complémentaire de l'intersection et l'intersection de deux schémas booléens de type "cerise" de tailles caractéristiques différentes. Leurs côtés sont de taille unitaire ($1 \times 1 \times 1$). La microstructure à amas connectés comprend 620 défauts de forme sphérique et de taille identique et possède une fraction volumique $f = 4,05\%$. La microstructure à amas isolés contient 178 défauts sphériques de taille identique repartis sur 8 amas et possède donc une fraction volumique $f = 1,16\%$. Le rayon des défauts dans les deux microstructures à amas vaut $r = 0,025$ et les amas sont pris de taille identique.

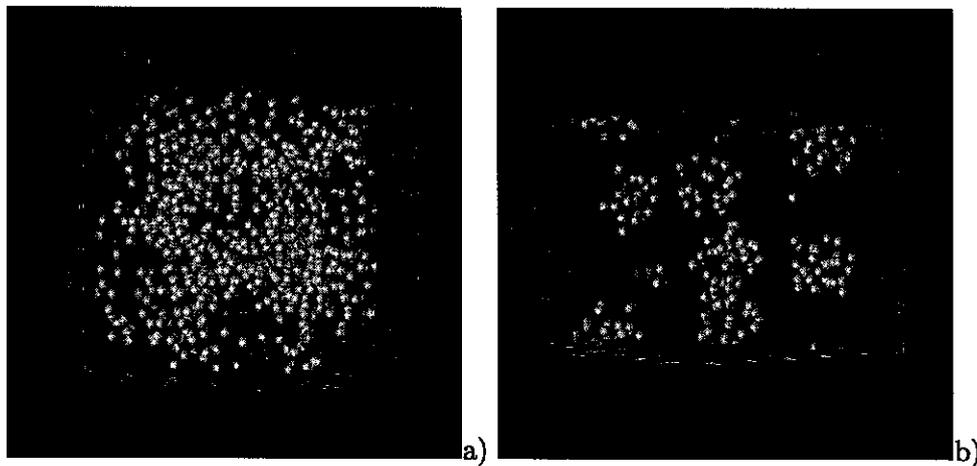


FIG. 2.46 – a) Microstructure périodique à amas connectés. Résolution de l'image : 256^3 Voxels. Fraction volumique $f = 4,05\%$ b) Microstructure périodique à amas isolés. Résolution de l'image : 256^3 Voxels. Fraction volumique $f = 1,16\%$

Les deux microstructures 3D sont intersectées par 21 plans régulièrement espacés et tous orthogonaux à l'une des directions de l'espace. La fraction surfacique obtenue sur chacune de ces coupes est représentée dans les tableaux 2.3 et 2.4.

X,Y,Z	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50
f_s^X (%)	3,08	4,07	4,07	4,57	2,89	4,11	3,58	5,27	4,88	5,35	3,00
f_s^Y (%)	2,89	6,24	5,52	5,44	5,68	3,07	3,82	3,18	2,63	3,10	3,94
f_s^Z (%)	3,36	5,05	4,29	6,11	4,51	4,14	3,78	4,26	4,15	2,81	4,47
X,Y,Z	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	0,80	0,85	0,90	0,95	0,10	Moy
f_s^X (%)	3,80	3,93	4,07	3,11	4,47	3,81	4,30	5,45	5,59	3,08	4,12
f_s^Y (%)	4,97	6,83	5,89	4,80	3,41	2,01	3,35	1,84	3,29	2,89	4,04
f_s^Z (%)	3,67	4,34	4,89	4,62	3,74	3,61	4,00	3,73	3,49	3,36	4,11

TAB. 2.3 – Intersection de la microstructure à amas connectés (Figure 2.46a) par 21 plans par direction. Tableau des fractions surfaciques obtenues sur chaque coupe 2D

X,Y,Z	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50
f_s^X (%)	1,13	1,61	0,93	1,42	0,73	1,12	2,01	1,99	1,85	1,17	0,47
f_s^Y (%)	0,51	1,39	1,46	1,83	0,97	1,74	1,06	1,65	1,11	1,19	1,66
f_s^Z (%)	0,49	1,10	1,45	2,15	2,14	1,22	1,26	1,07	1,28	1,40	0,80
X,Y,Z	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	0,80	0,85	0,90	0,95	0,10	Moy
f_s^X (%)	0,47	1,04	1,43	0,67	1,11	1,09	0,70	0,61	0,80	1,13	1,12
f_s^Y (%)	1,15	1,18	1,32	0,99	1,64	0,87	1,03	0,62	0,63	0,51	1,17
f_s^Z (%)	1,42	1,16	0,76	0,43	0,89	1,22	1,29	1,36	1,53	0,49	1,19

TAB. 2.4 – Intersection de la microstructure à amas isolés (Figure 2.46b) par 21 plans par direction. Tableau des fractions surfaciques obtenues sur chaque coupe 2D

A partir des tableaux 2.3 et 2.4 on établit l'écart-type ET pour chacune des directions :

$$\text{Amas connectés : } \begin{cases} ET^X = 0,824\% \\ ET^Y = 1,413\% \\ ET^Z = 0,699\%, \end{cases} \quad \text{Amas isolés : } \begin{cases} ET^X = 0,454\% \\ ET^Y = 0,393\% \\ ET^Z = 0,446\%, \end{cases}$$

Les écarts types sont assez importants : ils correspondent à environ 20% de la fraction volumique pour la microstructure à amas connectés et 40% pour les microstructures à amas isolés, soit une assez forte dispersion des résultats, notamment pour la microstructure à amas isolés. La fraction surfacique moyenne calculée sur l'ensemble des coupes est de :

$$f_{moy} = \frac{1}{3} (f_{smoy}^X + f_{smoy}^Y + f_{smoy}^Z) = 4,09\%,$$

pour la microstructure à amas connectés et de :

$$f_{moy} = \frac{1}{3} (f_{smoy}^X + f_{smoy}^Y + f_{smoy}^Z) = 1,16\%,$$

pour la microstructure à amas isolés.

Pour la microstructure à amas connectés, la fraction surfacique moyenne n'est pas rigoureusement égale à la fraction volumique réelle 3D. L'erreur relative est d'environ 1%. Cet écart est dû à la taille du domaine simulé : celui-ci est trop petit et ne contient pas suffisamment d'informations sur la microstructure réelle du matériau hétérogène. Le domaine de simulation devrait contenir un plus grand nombre d'amas. Toutefois, pour cette microstructure 3D, l'écart entre la fraction volumique réelle et la fraction surfacique moyenne f_{moy} est acceptable. Notons que pour la microstructure à amas isolés, la fraction volumique moyenne correspond à la fraction volumique 3D.

Les figures 2.47 et 2.48 présentent des exemples de microstructures 2D issues de coupes sur les microstructures 3D respectivement à amas connectés et à amas isolés. Le caractère hétérogène de ces microstructures est évident. Ces figures montrent clairement un agencement des particules sous forme d'amas connectés et d'amas isolés, morphologie identique à la morphologie réelle des microstructures correspondantes. Il faut rester prudent et ne pas conclure trop hâtivement car la morphologie en amas connectés et isolés ne se rencontre pas sur l'ensemble des coupes. Un grand nombre de coupes est toutefois nécessaire avant de conclure sur la morphologie de la microstructure 3D.

Les distributions de la fonction distance (Figure 2.49a) et de la fonction distance normalisée (Figure 2.49b) fluctuent d'une coupe 2D à l'autre. Ces fluctuations sont plus importantes que dans le cas des microstructures aléatoires à distribution uniforme des défauts.

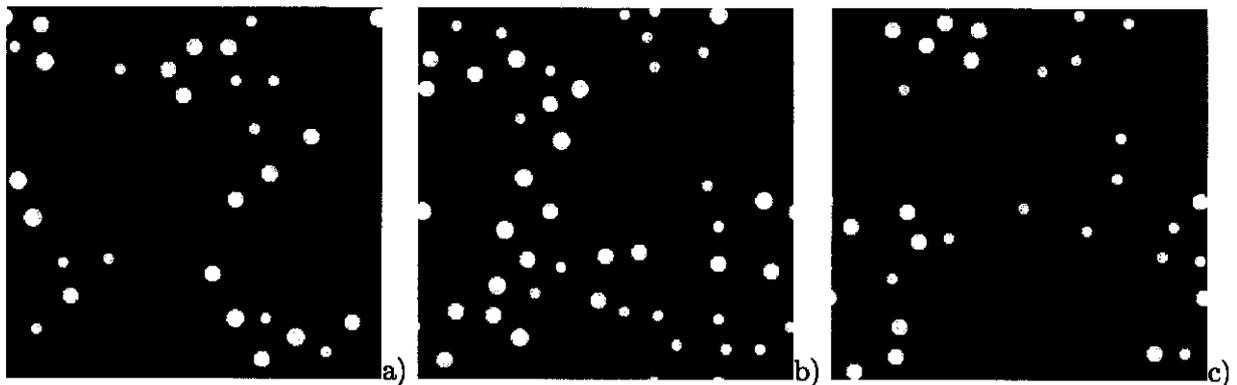


FIG. 2.47 – Exemples de microstructures 2D issues de la coupe de la microstructure à amas connectés 2.46a

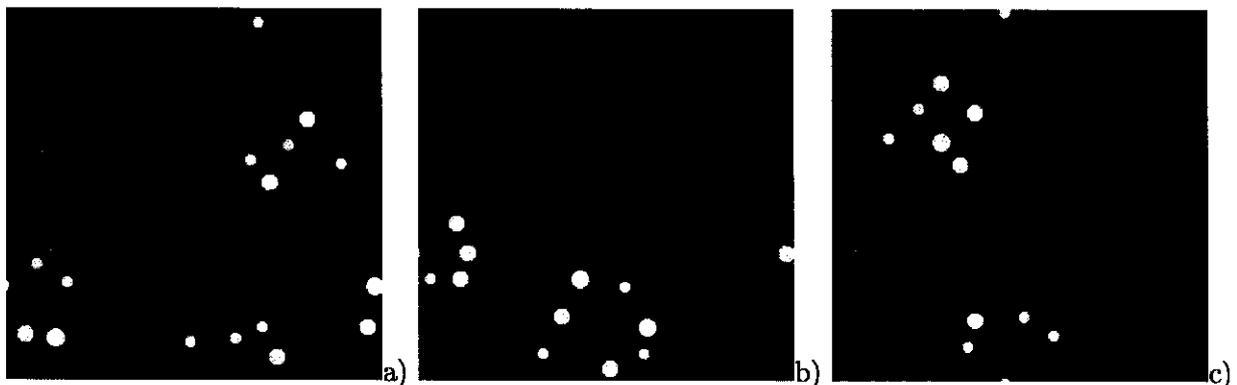


FIG. 2.48 – Exemples de microstructures 2D issus de la coupe de la microstructure 2.46b

Ces fluctuations résultent du fait que le caractère connecté ou isolé des amas en 3D n'apparaît pas sur toutes les coupes 2D. Certaines coupes sont donc plus hétérogènes que d'autres. Pour s'affranchir de ces fluctuations, un domaine de simulation plus important doit être considéré pour générer la microstructure 3D. Celui-ci contiendrait plus d'amas. Comme mentionné précédemment, il faut rester prudent avant de conclure sur la nature de la microstructure 3D par la seule analyse d'une coupe 2D. Un grand nombre de coupes est nécessaire et une reconstruction de la microstructure 3D à partir de ces coupes, par exemple à partir de coupes sériées ou par microtomographie si les défauts sont de taille suffisamment grande, reste le moyen le plus fiable pour déterminer rigoureusement la nature exacte de la microstructure 3D.

Il n'est pas nécessaire dans ce cas de réarranger les particules, comme ce fut le cas pour la microstructure aléatoire, en vue de détecter la présence d'une séparation d'échelle car celle-ci est bien nette au vu des images des coupes 2D (Figures 2.47 et 2.48). Notons également que, bien que la microstructure 3D possède un grand nombre de sphères de taille identique, les coupes 2D sont constituées de disques de taille variables.

Il semble que, d'après ce qui précède, nous pouvons faire la conclusion suivante : si la microstructure 3D est une microstructure à amas isolés, alors forcément nous obtiendrons des amas isolés sur les coupes 2D et si toutes les coupes 2D ont une microstructure à amas connectés, alors forcément la microstructure 3D est à amas connectés. Toutefois, les coupes 2D ne renseignent pas sur le nombre ni la taille des amas présents dans la microstructure 3D, notamment pour les microstructures à

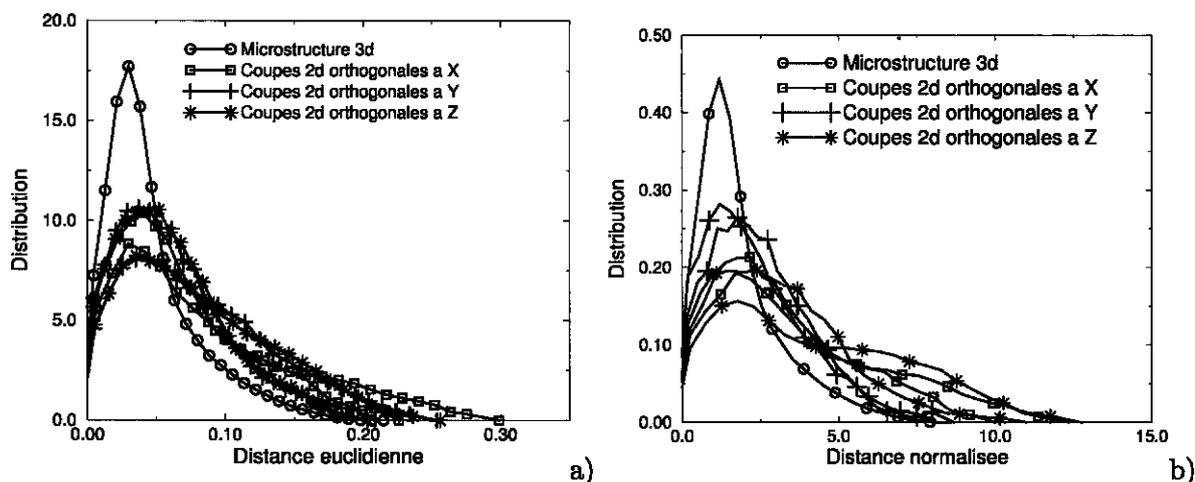


FIG. 2.49 – Comparaison des informations statistiques sur des coupes 2D et sur la microstructure 3D à amas connectés a) Distribution de la fonction distance b) Distribution de la fonction distance normalisée

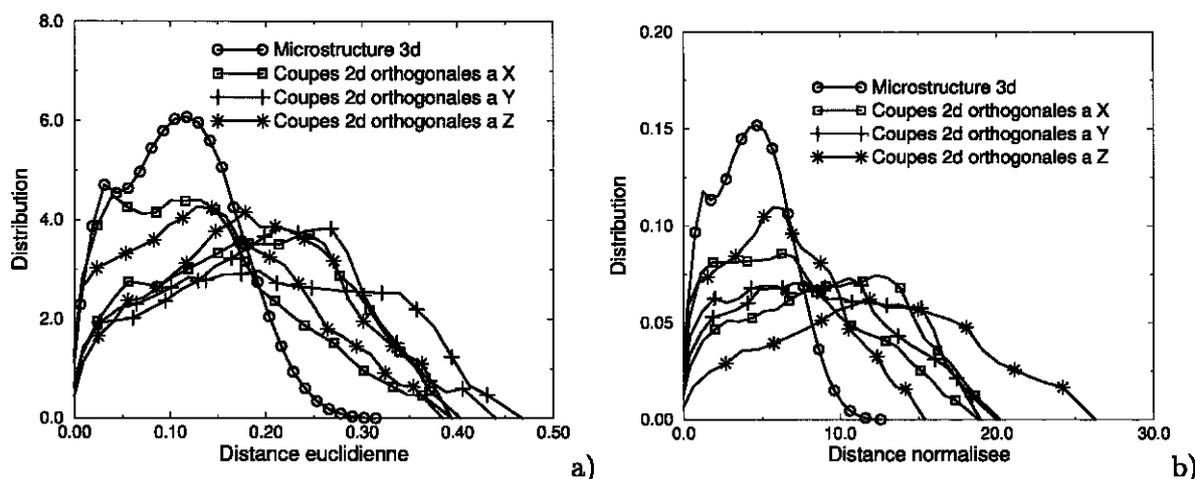


FIG. 2.50 – Comparaison des informations statistiques sur des coupes 2D et sur la microstructure 3D à amas isolés a) Distribution de la fonction distance b) Distribution de la fonction distance normalisée

amas isolés. Si le contraste entre la taille des défauts et la taille des amas est moins marqué, la conclusion s'avère plus difficile à mener car la notion d'amas est plus difficile à définir.

De manière générale, quel que soit le type de microstructure considéré, l'examen d'une unique coupe ne permet pas de conclure sur la forme 3D de ces disques : sont-ce des sphères (de taille identique ou variable) ou des cylindres ? La réponse à ces questions ne peut être obtenue que par une analyse de la microstructure réelle, i.e., 3D ou par reconstruction de coupes séries parallèles. Comme mentionné précédemment, cette microstructure 3D peut être obtenue par la prise d'un grand nombre de coupes expérimentales de la structure 3D dans une direction donnée et par assemblage de toutes ces coupes en vue de reconstruire la microstructure 3D. Chaque coupe 2D devra subir une analyse statistique identique à celle présentée dans le chapitre précédent : polissage, seuillage de la coupe en vue d'obtenir la position et la surface de chaque particule. La reconstruction de la microstructure 3D à partir des coupes 2D permettra d'avoir une vision plus précise de sa morphologie

réelle. Le gros inconvénient de cette méthode est sa nature destructive. On lui préférera une analyse de la microstructure par microtomographie qui, pour le moment, est limitée par la taille des défauts : des défauts de taille trop petite ne peuvent être détectés.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, une analyse statistique de la distribution des défauts a été présentée. L'objectif de cette étude était de développer un indicateur morphologique capable de nous renseigner sur la morphologie de la microstructure de l'acier étudié. Cette analyse est d'autant plus importante que les microstructures à amas et les microstructures aléatoires ne présentent pas la même réponse sous une même sollicitation. Ce point est abordé dans le chapitre suivant. Cette analyse, innovatrice, est menée par l'utilisation de la fonction distance et de ses variantes. Les principaux résultats de cette étude sont rappelés.

Cette analyse statistique est basée sur l'application de la fonction distance et de ses variantes sur des images binaires censées représenter la microstructure d'un matériau hétérogène. Ces outils d'analyse statistique font office d'indicateur morphologique permettant de distinguer une microstructure aléatoire d'une microstructure à amas isolés et connectés. Ces dernières sont obtenues par l'intersection de schémas booléens de taille caractéristique différente. Une analyse plus poussée, basée sur le seuillage de l'image de la fonction distance, permet de faire la distinction entre les microstructures à amas isolés et connectés. La fonction distance joue donc le rôle d'indicateur morphologique permettant de détecter la présence d'amas et d'en donner la nature, isolés ou connectés.

Ces outils d'analyse statistique ont été appliqués à une image binaire de la microstructure de l'acier de cuve. Cette image binaire est obtenue grâce aux outils de traitement d'image qui nous ont permis de déterminer la position et la surface de chaque particule de MnS présente dans la zone utile d'une éprouvette de traction. L'application de la fonction distance sur l'image binaire de la microstructure de l'acier de cuve ne permet pas de conclure directement sur sa morphologie. Il est nécessaire d'introduire une microstructure de référence possédant la même distribution de la taille de défaut que la microstructure initiale. La comparaison entre les distributions de la fonction distance obtenue sur les microstructures initiales et de référence permet de montrer le caractère hétérogène de la distribution des particules de MnS. L'analyse de connectivité quant à elle permet de conclure sur la nature connectée des amas.

La question de la pertinence des informations statistiques obtenues sur une coupe 2D d'un matériau hétérogène vis-à-vis de sa microstructure réelle, i.e., 3D a été évoquée. L'objectif était de savoir si les informations statistiques obtenues sur une coupe 2D sont directement transposables à la microstructure 3D. Pour répondre à cette question des coupes 2D ont été prises sur des microstructures 3D simulées, de morphologies diverses. Il apparaît que sous l'hypothèse d'une taille d'image suffisamment grande, les relations stéréologiques sont vérifiées. De plus si une microstructure 3D est une microstructure à amas isolés alors ses coupes 2D contiendront aussi des amas isolés. Il en va de même pour les microstructures à amas connectés. En revanche, cette conclusion ne s'applique pas aux microstructures aléatoires 3D obtenues par un schéma de type "cerise" : même si la microstructure 3D est une microstructure à répartition uniforme des défauts, ses coupes 2D contiennent une répartition hétérogène de défauts. Il faut donc rester prudent avant de conclure sur la morphologie de la microstructure 3D à partir d'informations statistiques obtenues sur des coupes 2D de cette dernière. L'étude de plusieurs coupes est un moyen de minimiser les erreurs. Ainsi, pour conforter les résultats obtenus sur la coupe 2D de l'acier étudié, d'autres analyses semblables devraient être menées.

Les outils de simulation de microstructures 2D et 3D, avec et sans amas, vont maintenant être mis à profit afin d'étudier l'effet d'une répartition hétérogène de cavités en amas sur la rupture fragile et ductile. Cette analyse est menée grâce à l'utilisation d'outils de simulation numérique basés sur la transformée de Fourier rapide et par des calculs par éléments finis.

Chapitre 3

Analyse numérique de l'effet d'amas sur la rupture fragile et sur la rupture ductile

Afin de mettre en évidence l'hétérogénéité des champs locaux au voisinage des amas et l'influence de ces derniers sur la rupture ductile et sur la rupture fragile au travers du critère de Beremin [6], on se propose d'utiliser deux méthodes numériques : la première repose sur des calculs par éléments finis classiques et la seconde sur les transformées de Fourier rapide. Ces méthodes sont appliquées à des microstructures 2D et 3D de morphologies diverses dont le principe de simulation a été décrit au chapitre précédent.

La modélisation de l'hétérogénéité de déformation induite par la présence d'amas peut se faire au travers de calculs par éléments finis classiques en dotant le milieu poreux d'un critère de Gurson avec une porosité initiale hétérogène. Cette étude constitue l'objet de la première partie de ce chapitre. Cette hétérogénéité de porosité locale est analysée par superposition d'un maillage d'éléments finis et d'une microstructure de matériau hétérogène. L'échelle à laquelle les simulations sont effectuées est une échelle que l'on baptisera "mésoscopique" intermédiaire entre l'échelle macroscopique et l'échelle microscopique.

Une méthode numérique basée sur la transformée de Fourier rapide a récemment été proposée par Moulinec et Suquet [63] [64], afin de déterminer le comportement macroscopique des milieux hétérogènes sous l'hypothèse de périodicité de la cellule de base. Contrairement aux calculs par éléments finis, cette méthode ne recourt à aucun maillage. Elle utilise directement une image numérique de la microstructure, pouvant être issue de l'expérience, constituée d'un quadrillage régulier de pixels en 2D, ou de voxels en 3D, de taille identique. Une telle méthode permet de déterminer le comportement macroscopique de microstructures complexes, dont les différents constituants ont un comportement linéaire ou non linéaire. Elle est également moins coûteuse en temps de calcul et moins lourde en espace mémoire que la méthode des éléments finis [58]. Ceci vient du fait qu'il n'y a pas de matrice de rigidité à calculer, mais uniquement une équation linéaire, dite de "Lippmann-Schwinger périodique" à résoudre, en chaque pixel ou voxel. Une description plus détaillée de la méthode est proposée en seconde partie de ce chapitre. La troisième et la cinquième parties concernent respectivement l'étude de l'influence des amas de pores sur la surface d'écoulement en 2D et 3D. Dans le cas 2D, un modèle de prévision de l'apparition de bande de localisation de la déformation basé sur la recherche des chemins de plus faible résistance est proposé en quatrième partie. La sixième et dernière partie est consacrée à l'étude de l'effet des amas sur la rupture fragile. Cette étude est réalisée grâce à

l'application du critère de Beremin [6] à partir des champs locaux issus des calculs par T.F.R. 2D et 3D dans le cas d'un comportement de la matrice sans, puis avec écrouissage.

3.1 Analyse par calculs par éléments finis

Afin de mettre en évidence l'effet d'amas sur le comportement macroscopique des milieux poreux et sur la rupture fragile, une méthode numérique basée sur les techniques de calculs par éléments finis est menée. Cette méthode, facile de mise en œuvre et peu coûteuse en temps de calcul, a pour unique objectif de se faire une première idée de l'effet des amas de cavités, isolés ou connectés, sur l'hétérogénéité des champs locaux et sur le comportement macroscopique.

3.1.1 Principe de la méthode

On se propose comme première voie de modélisation d'étudier l'effet de la répartition hétérogène des cavités en amas sur les modes locaux de déformation et sur la rupture fragile au travers de calculs par éléments finis. Il est illusoire de vouloir utiliser la technique des éléments finis pour déterminer la réponse d'un V.E.R. contenant un grand nombre de trous pour des raisons évidentes de temps de calcul et de taille mémoire. En revanche, elle peut être utilisée à une échelle intermédiaire dite échelle "méso". Cette échelle se situe entre l'échelle des cavités et l'échelle macroscopique. A cette échelle intermédiaire, le matériau est supposé obéir à un critère de type Gurson :

$$\left(\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + 2f \cosh\left(\frac{3}{2}\frac{\sigma_m}{\sigma_0}\right) - 1 - f^2 = 0,$$

mais avec une porosité f non uniforme. Celle-ci fluctue d'un point à l'autre au sein du matériau : $f = f(x)$. Afin de prendre en compte les fluctuations des concentrations locales observées sur un matériau réel, la microstructure de ce matériau est divisée en cellules de taille identique et possédant chacune une certaine fraction volumique de défauts. Cette dernière peut fluctuer d'une cellule à l'autre. Cette procédure revient à superposer un maillage d'éléments finis (Figure 3.1b) sur la microstructure d'un matériau hétérogène (Figure 3.1a) et à attribuer à chaque élément une fraction volumique uniforme de défaut : chaque point de Gauss du même élément possède la même fraction volumique de défauts. Celle-ci est définie comme le rapport entre le volume de défauts $V_{\text{défaut}}$ présent sur l'élément i et la taille de l'élément $V_{\text{élément}}$:

$$f_i = \frac{V_{\text{défaut}}}{V_{\text{élément}}}$$

La figure 3.1c représente schématiquement les fluctuations des concentrations locales après application d'une telle méthode. La taille des éléments ne doit pas être trop petite et notamment ne doit pas être plus petite que la taille d'une cavité. Dans ce cas, la fraction volumique de vide sur l'élément vaudrait 1 et le gradient des concentrations locales entre éléments voisins serait très élevé. La stabilité du calcul numérique ne serait alors plus assurée.

A la fin des années 80, Becker [5] a appliqué une méthode similaire sur une microstructure réelle obtenue expérimentalement. A partir de ces simulations numériques où le critère de Gurson-Tvergaard-Needleman (G.T.N.) est appliqué à l'échelle locale, il a montré que les zones à forte densité de cavités induisent une hétérogénéité de déformation d'amplitude plus élevée que les autres zones où la densité de cavité est plus faible. Plus récemment, une étude similaire a été effectuée par Decamp et coll [28]. Ces auteurs ont étudié l'effet de l'endommagement ductile (germination, croissance et

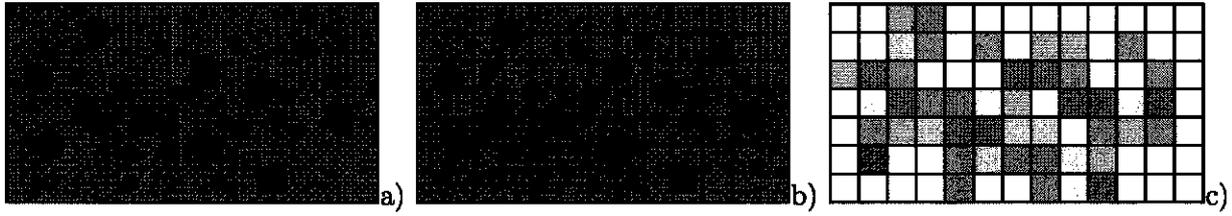


FIG. 3.1 – Représentation schématique de la méthode utilisée a) Microstructure d'un matériau hétérogène b) Superposition d'un maillage d'éléments finis sur la microstructure du matériau hétérogène c) Microstructure avec une porosité locale hétérogène

coalescence de cavités) sur la réponse macroscopique et le comportement à rupture d'un matériau poreux à l'aide de calculs par éléments finis et en appliquant à l'échelle locale le critère G.T.N. La même méthodologie est appliquée pour décrire l'initiation de la fissure en gardant une porosité homogène mais en prenant des paramètres de nucléation hétérogènes [9].

Il faut maintenant aborder la question du choix de la microstructure du matériau hétérogène. Afin d'évaluer l'effet d'une distribution hétérogène de trous en amas, on se propose de travailler sur des microstructures simulées et non issues de l'expérience. En d'autres termes, les méthodes de simulation de microstructures décrites dans le chapitre précédent sont mises à profit afin de générer des microstructures de morphologies diverses (aléatoire, à amas isolés ou connectés). Un maillage d'éléments finis est ensuite superposé, selon la procédure décrite précédemment, sur ces microstructures en vue de déterminer les fluctuations des concentrations locales, homogènes par éléments.

Notons toutefois qu'il est possible de raffiner le maillage sans changer la distribution des concentrations locales. Pour cela, il convient de superposer une grille plus fine et régulière sur la microstructure finale (Figure 3.1c). Ceci revient à subdiviser chaque élément en plusieurs éléments de même fraction volumique que l'élément de départ.

Avant d'appliquer cette méthode sur des microstructures 2D simulées, il convient de définir la méthode à utiliser pour évaluer l'effet d'une répartition hétérogène des défauts en amas sur la rupture fragile. Cette dernière est abordée au travers du critère de Beremin [6]. Celui-ci est appliqué à partir des champs locaux issus des calculs par éléments finis. On rappelle que le critère de Beremin [6] est une approche probabiliste de la rupture fragile par clivage qui donne une probabilité de rupture P_R de la structure sous un chargement λ , en fonction des contraintes principales maximales σ_I locales définies uniquement sur le volume V_p de la matrice qui a été plastifié :

$$\begin{cases} P_R(\lambda) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right] \\ \sigma_w = \left(\int_{V_p} \sigma_I^m \frac{dV}{V_0} \right)^{\frac{1}{m}} \end{cases} \quad (3.1)$$

La matrice est discrétisée en N_{el} de tailles identiques. Notons N_{elp} le nombre d'éléments qui ont été plastifiés. Le volume plastique V_p s'écrit comme suit en fonction du volume V_{p_i} de l'élément i :

$$V_p = \sum_{i=1}^{N_{elp}} V_{p_i}. \text{ Les éléments étant de taille identique, } V_{p_i} = V_{pel}, \text{ la contrainte de Weibull } \sigma_w \text{ s'écrit}$$

alors :

$$\sigma_w^m = \frac{V_{peI}}{V_0} \sum_{i=1}^{N_{eIp}} \sigma_{I_i}^m.$$

Il reste à aborder le choix de la méthode à employer pour le calcul de la contrainte principale maximale. En effet, deux possibilités s'offrent à nous. La première consiste à calculer, à chaque incrément, la contrainte principale maximale à partir du champ de contrainte moyen sur l'élément e : $\langle \sigma \rangle_e$. La seconde méthode, consiste à prendre pour chaque élément la plus grande des contraintes principales maximales positives parmi tous les points de Gauss i de l'élément e , soit :

$$\sigma_I^e = \max_{i=1, \dots, NPI} \sigma_{I_i}^e,$$

où NPI correspond au nombre de point de Gauss présent dans l'élément e . C'est cette seconde méthode qui est adoptée pour évaluer la contrainte de Weibull.

Afin de s'affranchir des effets de taille des structures considérées, on représentera une contrainte de Weibull normalisée $\tilde{\sigma}_w$ définie comme le rapport entre la contrainte de Weibull calculée sur une microstructure hétérogène σ_w et celle calculée sur une microstructure homogène σ_w^{Ref} contenant exactement le même nombre d'élément :

$$\tilde{\sigma}_w = \frac{\sigma_w}{\sigma_w^{Ref}} = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N_{eIp}} \sigma_{I_i}^m \right)^{\frac{1}{m}}_{\text{Hétérogène}}}{\left(\sum_{i=1}^{N_{eIp}} \sigma_{I_i}^m \right)^{\frac{1}{m}}_{\text{Homogène}}}$$

Cette normalisation permet de nous affranchir de la connaissance des constantes V_0 et σ_u nécessaires pour évaluer P_R . Seul le paramètre de Weibull m est nécessaire pour évaluer $\tilde{\sigma}_w$. Notons que le critère de Beremin est appliqué en post-traitement des calculs élasto-plastique par éléments finis.

3.1.2 Simulations numériques 2D

Considérons trois microstructures de morphologies diverses de fraction surfacique arbitraire $f = 4, 7\%$ et contenant chacune 54 cavités cylindriques de taille identique : une microstructure aléatoire (Figure 3.2a), une microstructure à amas isolés (Figure 3.3a) et une microstructure à amas connectés (Figure 3.4a). La microstructure aléatoire est simulée suivant un schéma de type "cerise" selon la procédure décrite dans le chapitre 2. Lors de la simulation, la distance minimale devant séparer le bord des défauts est suffisamment grande, de sorte à obtenir une microstructure à répartition uniforme des défauts.

Les microstructures à amas isolés et connectés sont obtenues respectivement par l'intersection et par le complémentaire de l'intersection de deux schémas booléens de taille caractéristique différente¹.

Notons que pour ces simulations numériques, il n'a pas été nécessaire de prendre en compte des conditions de périodicité. Une étude similaire aurait pu être entreprise en considérant le cas de microstructures périodiques.

¹Cette procédure de simulation de microstructure à amas isolés et connectés est abordée en détail dans le chapitre 2.

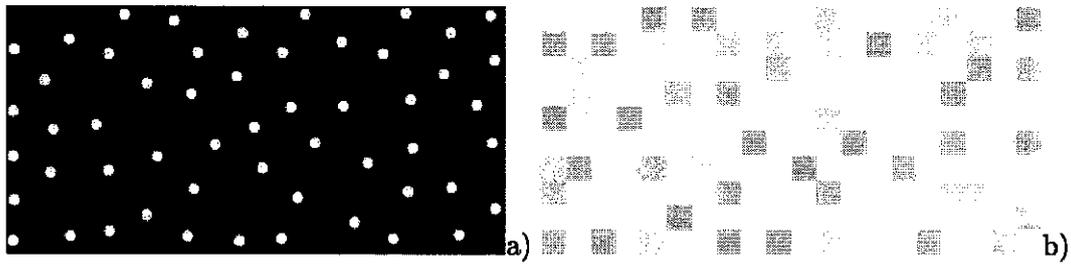


FIG. 3.2 – a) *Microstructure aléatoire simulée* b) *Microstructure à distribution hétérogène des concentrations locales*

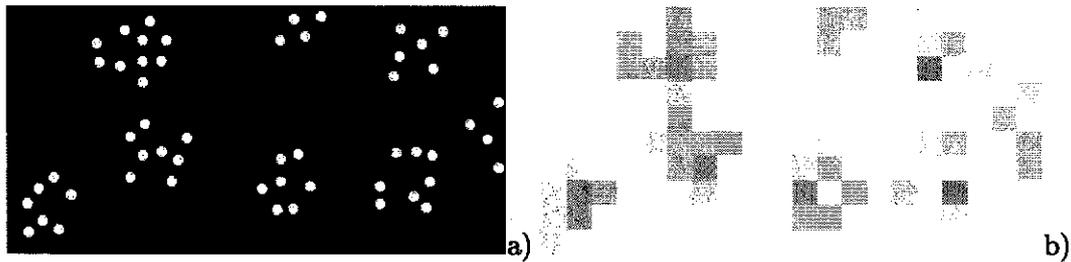


FIG. 3.3 – a) *Microstructure à amas isolés simulée* b) *Microstructure à distribution hétérogène des concentrations locales*

Un maillage éléments finis comprenant 20 éléments dans le sens de la longueur et 10 dans celui de la largeur est superposé sur chaque microstructure. Les fluctuations des concentrations locales résultant de cette intersection, sont représentées en niveaux de gris sur les figures 3.2b, 3.3b et 3.4b. Sur ces figures, un niveau de gris correspond à une concentration locale et les maillages d'éléments finis ne sont pas représentés. Chaque élément est ensuite subdivisé en quatre éléments de fraction surfacique identique. Les zones blanches correspondent aux zones où la fraction volumique est nulle : le comportement local est celui de von Mises. En revanche dans les zones de fraction volumique non nulle, le comportement local est décrit par un critère de Gurson.

Le chargement macroscopique retenu est un chargement en traction simple dans le plan horizontal des microstructures :

$$\Sigma = T e_1 \otimes e_1.$$

Bien entendu, d'autres cas de chargement macroscopique peuvent être appliqués. Toutefois, cette étude étant simplement une première voie de modélisation de l'effet des amas de trous sur la rupture fragile et ductile, seul ce chargement sera utilisé. Les calculs par élément finis sont menés dans le cadre des déformations planes. Les éléments utilisés pour ces simulations sont des éléments à 8 nœuds et 4 points d'intégration (élément CPE8R). La courbe d'écrouissage de la matrice est celle de l'acier de cuve à une température de 0°C, température pour laquelle l'acier a plutôt un comportement ductile. Cette courbe est disponible dans la thèse de Renevey [75].

Les conditions aux limites qui sont similaires pour les trois microstructures, sont représentées schématiquement sur la figure 3.5. Sur la base de chaque microstructures, les déplacements sont interdits selon la direction Y et sur la face latérale gauche, les déplacements sont interdits selon la direction X . La face supérieure de la microstructure (le bord du haut) est laissée libre de toutes contraintes. Le chargement est appliqué sur la face latérale droite.

Les figures 3.6, 3.7 et 3.8 présentent les cartes des déformations plastiques équivalentes ϵ_{eq}^p pour une contrainte de von Mises macroscopique identique, soit $\Sigma_{eq} = 650$ MPa, respectivement sur la

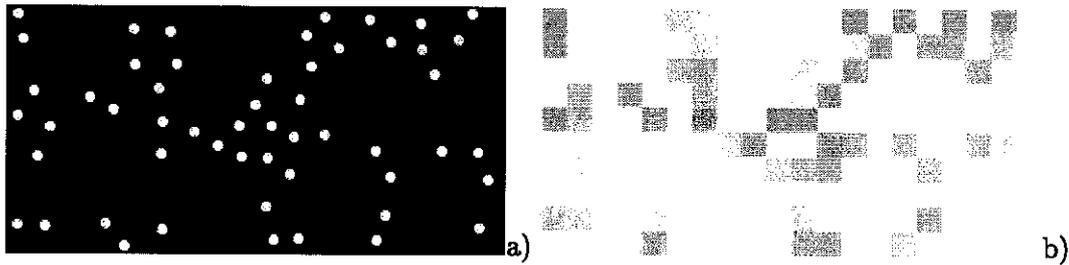


FIG. 3.4 – a) *Microstructure à amas connectés simulée* b) *Microstructure à distribution des concentrations locales hétérogène*

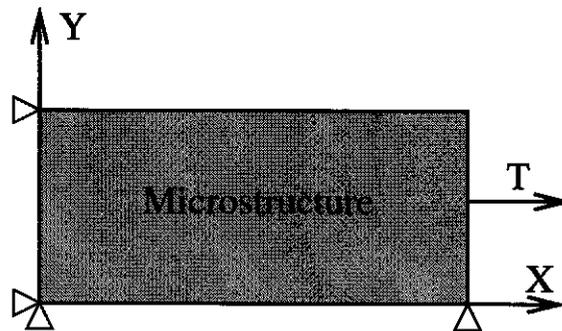


FIG. 3.5 – *Représentation schématique des conditions aux limites appliquées sur les microstructures*

microstructure aléatoire et sur les microstructures à amas isolés et connectés. On rappelle que la déformation plastique équivalente est définie comme suit :

$$\varepsilon_{eq}^p = \sqrt{\frac{2}{3} \varepsilon^p : \varepsilon^p},$$

où ε^p est la partie déviatorique du tenseur des déformations plastiques ε^p . Des bandes de localisation de la déformation à 45° sont mises en évidence. Elles sont plus diffuses dans le cas des microstructures aléatoires que dans le cas des microstructures à amas, isolés et connectés. Les microstructures à amas laissent apparaître plus de zones où la déformation plastique équivalente est nulle. Cette dernière est notamment très intense au sein des amas, pour la microstructure à amas isolés et dans les connections entre amas, pour la microstructure à amas connectés.

Pour les microstructures aléatoires, la déformation plastique commence à s'établir au voisinage des zones denses où la fraction volumique est la plus élevée. Ces zones vont ensuite communiquer entre elles.

Pour la microstructure à amas isolés, la déformation plastique équivalente commence à s'établir au sein des amas. Au cours du chargement, l'amplitude dans ces derniers augmente et les amas commencent à communiquer entre eux. Une fois qu'une bande de localisation est établie, l'amplitude dans cette dernière ne cesse de croître en fonction du chargement. Des constatations similaires sont faites dans le cas des microstructures à amas connectés à la différence que la déformation plastique commence à s'établir dans les connections entre amas.

Les courbes d'érouissage macroscopique obtenues sur chaque microstructure (Figure 3.9) montrent que l'effet d'une répartition hétérogène en amas n'a pas une grande influence sur le comportement macroscopique dans le cas d'une traction simple. De la même manière, l'évolution de la contrainte de Weibull normalisée montre que, pour un état de chargement donné, il n'y a pas de différence

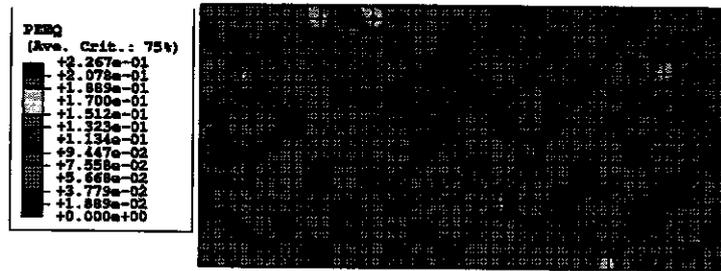


FIG. 3.6 – Cartes des déformations plastiques équivalentes sur la microstructure aléatoire 3.2



FIG. 3.7 – Cartes des déformations plastiques équivalentes sur la microstructure à amas isolés 3.3



FIG. 3.8 – Cartes des déformations plastiques équivalentes sur la microstructure à amas connectés 3.4

significative entre les différentes microstructures. Bien entendu, cette conclusion doit être confirmée par des simulations numériques supplémentaires en faisant varier la taille des éléments, le nombre d'éléments, etc. Cette constatation peut être due à la prise en compte de l'écroutissage de la matrice. Ce dernier tend probablement à lisser les fluctuations des champs locaux.

3.1.3 Conclusions

Le principal avantage de cette méthode réside dans sa simplicité de mise en œuvre et dans son faible coût en temps de calculs. Elle donne des indications sur l'établissement de la déformation plastique : se localise-t-elle principalement dans les amas? Les amas communiquent-ils entre eux? etc. Elle est toutefois limitée par la taille des éléments considérés. En effet, si la taille des éléments est très faible par rapport à la taille des cavités, la porosité sur certains éléments vaudra 1. La stabilité du

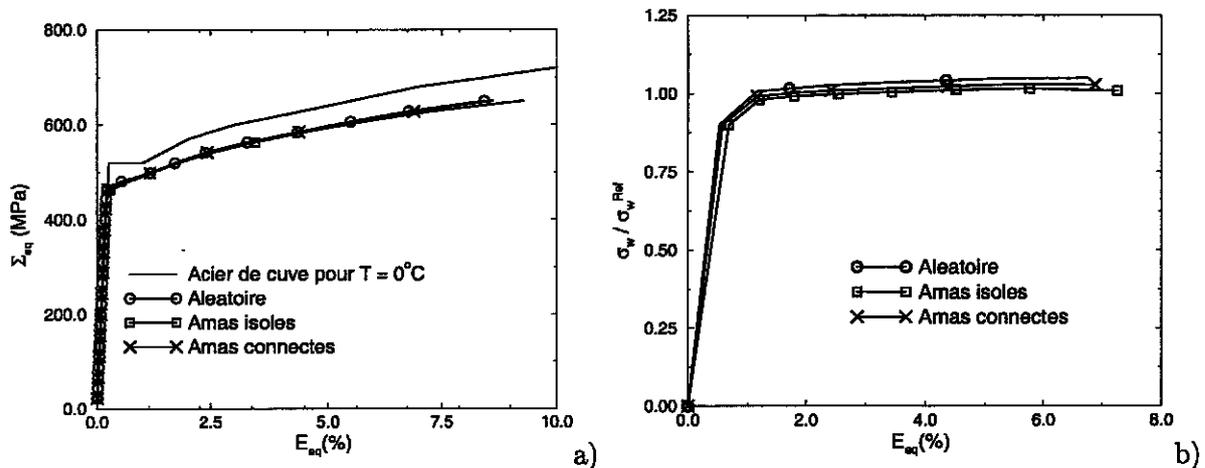


FIG. 3.9 – a) Courbes d'écroutissement macroscopique b) Évolution de la contrainte de Weibull

calcul n'est alors pas garanti. En revanche, si une taille d'éléments trop grossière est considérée, l'hétérogénéité des champs locaux résultant de l'interaction de cavités voisines sera masquée. Elle s'étend aisément au cas des microstructures 3D. Mais les calculs deviennent vite très lourds et très coûteux.

Il peut être envisagé d'appliquer une telle procédure à la microstructure de l'acier de cuve. En effet, dans le chapitre précédent, une cartographie de la zone utile d'une éprouvette de traction a permis d'obtenir une vision plus macroscopique de l'agencement des particules de MnS. En superposant un maillage d'éléments finis sur la zone utile de l'éprouvette ou sur une zone plus petite, on pourra estimer l'hétérogénéité des champs locaux induite par le regroupement des défauts en amas. Une étape de comparaison entre les champs locaux obtenus numériquement ou expérimentalement, lors d'un essai de traction par exemple, aurait pour but de tester la pertinence de la présente approche.

Afin d'obtenir des informations plus locales sur les mécanismes de déformation, on se propose d'utiliser une méthode numérique basée sur la transformée de Fourier rapide.

3.2 Méthode basée sur la transformée de Fourier rapide (T.F.R.)

Comme nous l'avons évoqué dans le chapitre 1, la détermination du comportement macroscopique d'un matériau hétérogène se fait au travers d'une démarche micromécanique. Celle-ci s'appuie sur des méthodes de changement d'échelle, numériques ou analytiques, visant à déterminer le comportement macroscopique d'une structure globale à l'échelle du V.E.R. Ces méthodes donnent également accès aux champs locaux au sein de ce V.E.R. au voisinage des défauts. Une méthode de résolution numérique basée sur la T.F.R. récemment proposée par Moulinec et Suquet [63] [64] permet de traiter les cas de microstructures complexes, i.e., permet de calculer le comportement macroscopique à l'échelle d'un V.E.R. contenant un grand nombre de défauts. L'avantage de cette méthode est son faible coût en temps de calcul. Dans un premier temps, le principe de cette méthode est décrit; elle est ensuite appliquée à différents types de microstructure afin d'évaluer l'effet de la répartition hétérogène des défauts en amas sur la contrainte seuil et sur la rupture fragile au travers du critère de Beremin [6].

3.2.1 Principe de la méthode

Un volume élémentaire représentatif (V.E.R.) de volume V d'un matériau hétérogène est constitué de différentes phases dont le comportement est supposé gouverné par un unique potentiel $w(x, \varepsilon(u))$ convexe en ε , de sorte que la relation contrainte-déformation s'écrit :

$$\sigma(x) = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(x, \varepsilon)$$

relation qui correspond à un comportement élastique non linéaire en transformations infinitésimales. Le V.E.R. est soumis à un chargement macroscopique, par exemple en déformation E , induisant des champs de contrainte $\sigma(x)$ et de déformation $\varepsilon(x)$ fortement hétérogènes et dont la moyenne sur le V.E.R. donne leur valeur macroscopique. Le problème local à résoudre pour déterminer l'état de contrainte et de déformation dans le V.E.R. sous une déformation macroscopique imposée s'écrit :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\sigma(x)) = 0 \quad \forall x \in V \\ \sigma(x) = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(x, \varepsilon(u)) \\ 2\varepsilon(u) = \nabla u + \nabla u^t \\ \langle \varepsilon(u) \rangle = E. \end{cases} \quad (3.2)$$

$\langle * \rangle$ représente une opération de moyenne sur le V.E.R. : $\langle * \rangle = \frac{1}{V} \int_V * dV$. Le problème local ainsi défini est mal posé car il est exempt de conditions aux limites. N'ayant aucune information sur la microstructure en dehors du V.E.R., celui-ci est supposé se répéter périodiquement. Ainsi, le problème (3.2) peut être "fermé" par des conditions aux limites de périodicité, c'est-à-dire que les champs locaux de contraintes et de déformations (et de fait de déplacement) sont périodiques. Ce dernier peut se décomposer en sa partie moyenne E et en une partie fluctuante $\varepsilon(u^*)$, de valeur moyenne nulle, selon :

$$\varepsilon(u) = E + \varepsilon(u^*), \quad \langle \varepsilon(u^*) \rangle = 0.$$

Par périodicité, le champ de déplacement u^* est périodique et la force $\sigma \cdot \vec{n}$ est anti-périodique, afin de respecter les conditions d'équilibre à la frontière entre deux cellules voisines :

$$\begin{cases} u^* \text{ périodique, noté } u^* \# \\ \sigma \vec{n} \text{ anti-périodique, noté } \sigma \vec{n} - \# \end{cases} \quad (3.3)$$

\vec{n} étant la normale sortante à la cellule de base. Le problème (3.2), complété par les conditions aux limites (3.3), tel qu'il est posé est très difficile à résoudre, voire impossible. L'idée consiste à "transformer" ce problème en un problème linéaire que l'on sait résoudre numériquement ou analytiquement. Il est classique en homogénéisation non linéaire de reformuler le problème (3.2) en introduisant un milieu linéaire homogène, de module c_0 , soumis à un champ de polarisation $\tau(x)$ et aux mêmes conditions aux limites périodiques (3.3) que le milieu hétérogène non linéaire :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\sigma(x)) = 0 \\ \sigma(x) = c_0 : \varepsilon(u) + \tau(x), \quad \tau(x) = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(x, \varepsilon(u)) - c_0 : \varepsilon(u) \\ 2\varepsilon(x) = \nabla u + \nabla u^t \\ \text{Conditions aux limites : } u^* \#, \sigma \vec{n} - \#. \end{cases} \quad (3.4)$$

Le problème (3.4) correspond à un problème de thermoélasticité linéaire pour lequel une solution en déformation est connue via l'utilisation du tenseur de Green périodique Γ^0 associé au milieu de

référence de module c_0 . Cette solution peut s'exprimer dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier par :

$$\begin{cases} \varepsilon(u) = -\Gamma^0 * \tau(x) + E \quad \forall x \in V \\ \widehat{\varepsilon}(\xi) = -\Gamma^0(\xi) : \widehat{\tau}(\xi) \quad \forall \xi \neq 0, \quad \widehat{\varepsilon}(0) = E, \end{cases} \quad (3.5)$$

où $\widehat{f}(\xi)$ représente la transformée de Fourier de la fonction $f(x)$ telle que :

$$\widehat{f}(\xi) = \langle f(x) \exp(-i\xi x) \rangle,$$

La détermination du champ de déformation ε en tout point du milieu hétérogène passe par la résolution d'une équation non linéaire (3.5). Une fois celui-ci connu, par application de la loi de comportement locale, on en déduit le champ de contrainte associé σ et, par une opération de moyenne, on remonte aux grandeurs macroscopiques Σ et E . Deux méthodes sont possibles afin de résoudre l'équation non linéaire (3.5) : l'une est basée sur un algorithme de point fixe et l'autre sur l'introduction d'un multiplicateur de Lagrange.

3.2.2 Méthode de résolution

L'équation (3.5), dite de Lippmann - Schwinger périodique est résolue numériquement par un simple algorithme de point fixe selon :

$$\begin{cases} \text{Itération } i : \varepsilon^i \text{ connu} \\ \sigma^i = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^i, x) \\ \text{Test de convergence.} \\ \tau^i = \sigma^i - c_0 : \varepsilon^i \\ \widehat{\tau}^i = F(\tau^i) \\ \widehat{\varepsilon}^{i+1} = -\Gamma^0(\xi) : \widehat{\tau}^i \quad \forall \xi \neq 0, \quad \widehat{\varepsilon}(0)^{i+1} = E \\ \varepsilon^{i+1} = F^{-1}(\widehat{\varepsilon}^{i+1}), \end{cases} \quad (3.6)$$

F et F^{-1} désignant respectivement la transformation de Fourier et son inverse. La résolution de l'équation non linéaire (3.5) fait intervenir des calculs dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier.

L'équation $\sigma^i = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^i, x)$ dans (3.6) est l'application de la loi de comportement locale : connaissant ε^i , on calcule σ^i .

L'avantage de cette méthode est d'éviter la résolution d'une équation non linéaire impliquant un produit de convolution dans l'espace réel (3.5a). Cette dernière est remplacée par une équation non linéaire mais uniquement définie par un simple "produit" de tenseurs dans l'espace de Fourier.

De plus, une propriété intéressante des fonctions définies dans l'espace de Fourier peut être mise à profit afin d'accélérer le temps de calcul : la propriété de symétrie $\widehat{f}(\xi) = \widehat{f}(-\xi)$ de la fonction \widehat{f} .

Une extension de cet algorithme permet de traiter le cas des matériaux biphasés dont les constituants ont un comportement élasto-plastique à écrouissage linéaire. La vitesse de convergence de cet algorithme dépend du contraste entre les phases : celui-ci diverge dans le cas des matériaux présentant un fort contraste entre les différents constituants. C'est le cas notamment des matériaux poreux et des matériaux à renforts rigides.

référence de module c_0 . Cette solution peut s'exprimer dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier par :

$$\begin{cases} \varepsilon(u) = -\Gamma^0 * \tau(x) + E \quad \forall x \in V \\ \widehat{\varepsilon(\xi)} = -\widehat{\Gamma^0(\xi)} : \widehat{\tau(\xi)} \quad \forall \xi \neq 0, \quad \widehat{\varepsilon(0)} = E, \end{cases} \quad (3.5)$$

où $\widehat{f(\xi)}$ représente la transformée de Fourier de la fonction $f(x)$ telle que :

$$\widehat{f(\xi)} = \langle f(x) \exp(-i\xi x) \rangle,$$

La détermination du champ de déformation ε en tout point du milieu hétérogène passe par la résolution d'une équation non linéaire (3.5). Une fois celui-ci connu, par application de la loi de comportement locale, on en déduit le champ de contrainte associé σ et, par une opération de moyenne, on remonte aux grandeurs macroscopiques Σ et E . Deux méthodes sont possibles afin de résoudre l'équation non linéaire (3.5) : l'une est basée sur un algorithme de point fixe et l'autre sur l'introduction d'un multiplicateur de Lagrange.

3.2.2 Méthode de résolution

L'équation (3.5), dite de Lippmann - Schwinger périodique est résolue numériquement par un simple algorithme de point fixe selon :

$$\begin{cases} \text{Itération } i : \varepsilon^i \text{ connu} \\ \sigma^i = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^i, x) \\ \text{Test de convergence.} \\ \tau^i = \sigma^i - c_0 : \varepsilon^i \\ \widehat{\tau^i} = F(\tau^i) \\ \widehat{\varepsilon^{i+1}} = -\widehat{\Gamma^0(\xi)} : \widehat{\tau^i} \quad \forall \xi \neq 0, \quad \widehat{\varepsilon(0)}^{i+1} = E \\ \varepsilon^{i+1} = F^{-1}(\widehat{\varepsilon^{i+1}}), \end{cases} \quad (3.6)$$

F et F^{-1} désignant respectivement la transformation de Fourier et son inverse. La résolution de l'équation non linéaire (3.5) fait intervenir des calculs dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier.

L'équation $\sigma^i = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^i, x)$ dans (3.6) est l'application de la loi de comportement locale : connaissant ε^i , on calcule σ^i .

L'avantage de cette méthode est d'éviter la résolution d'une équation non linéaire impliquant un produit de convolution dans l'espace réel (3.5a). Cette dernière est remplacée par une équation non linéaire mais uniquement définie par un simple "produit" de tenseurs dans l'espace de Fourier.

De plus, une propriété intéressante des fonctions définies dans l'espace de Fourier peut être mise à profit afin d'accélérer le temps de calcul : la propriété de symétrie $\widehat{f(\xi)} = \widehat{f(-\xi)}$ de la fonction \widehat{f} .

Une extension de cet algorithme permet de traiter le cas des matériaux biphasés dont les constituants ont un comportement élasto-plastique à écrouissage linéaire. La vitesse de convergence de cet algorithme dépend du contraste entre les phases : celui-ci diverge dans le cas des matériaux présentant un fort contraste entre les différents constituants. C'est le cas notamment des matériaux poreux et des matériaux à renforts rigides.

Dans le cas d'un comportement isotrope du milieu de référence, le module c_0 peut s'exprimer en fonction des coefficients de Lamé λ_0 et μ_0 selon :

$$c_{0ijkl} = \lambda_0 \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu_0 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}).$$

La vitesse de convergence est gouvernée par le choix des coefficients de Lamé λ_0 et μ_0 du milieu de référence. Pour les matériaux biphasés linéaires la meilleure vitesse de convergence est obtenue lorsque ces coefficients valent la moitié de la somme des coefficients de Lamé de chaque phase [63]. De manière plus générale, le choix optimal de ces coefficients est [60] :

$$\lambda_0 = \frac{1}{2} \left(\min_x \lambda(x) + \max_x \lambda(x) \right), \quad \mu_0 = \frac{1}{2} \left(\min_x \mu(x) + \max_x \mu(x) \right),$$

$\lambda(x)$ et $\mu(x)$ étant les coefficients de Lamé du milieu hétérogène non linéaire.

Remarque 1 :

Afin de travailler à taux de triaxialité des contraintes fixé, il est préférable de travailler à contrainte imposée, plutôt qu'à déformation imposée. La formulation à déformation imposée peut être utilisée itérativement afin de réaliser le contrôle des contraintes [58].

Il est souvent plus facile d'imposer une direction de chargement Σ^0 plutôt que le chargement lui-même et de ne contrôler qu'un paramètre de chargement t plutôt que le niveau de contrainte $k(t)$ [64] [58] :

$$\Sigma = k(t)\Sigma^0 \quad \text{et} \quad E : \Sigma^0 = t. \quad (3.7)$$

Dans les simulations par T.F.R. 2D et 3D effectuées un peu plus loin dans le texte, la détermination du comportement macroscopique se fera à contrainte imposée en n'imposant qu'une direction de contrainte Σ^0 .

Remarque 2 :

Les simulations numériques mises en œuvre dans la suite sur des microstructures 2D sont faites dans l'hypothèse des déformations planes généralisées [58] :

$$\begin{cases} u_1 = u_1(x_1, x_2) \\ u_2 = u_2(x_1, x_2) \\ u_3 = E_{33} x_3, \end{cases} \quad (3.8)$$

où u_3 est la troisième composante du champ de déformation qui est parallèle à la direction de l'axe des fibres. u_1 et u_2 sont les composantes du champ de déformation dans le plan transverse; plan orthogonal à l'axe des fibres. L'hypothèse des déformations planes généralisées implique que la composante ϵ_{33} du champ de déformation est uniforme dans le plan transverse vaut $\epsilon_{33} = E_{33}$ où E_{33} est une des composantes du tenseur des déformations macroscopiques E . Cette hypothèse implique que la surface du plan transverse reste plane au cours du chargement.

Toutefois, comme nous l'avons déjà mentionné, cet algorithme de point fixe ne converge pas dans le cas de matériaux présentant de forts contrastes entre les phases. C'est le cas notamment des milieux poreux. Il faut alors mettre en œuvre un algorithme plus sophistiqué.

3.2.3 Lagrangien augmenté

Pour pallier au problème de convergence de l'algorithme (3.6) rencontré pour des composites présentant un fort contraste entre les phases, un nouvel algorithme de résolution du problème local (3.2),

basé sur l'introduction d'un multiplicateur de Lagrange, a récemment été développé par Michel et coll [59] [60]. Cet algorithme est brièvement présenté ci-dessous.

Les champs de déplacement u et de contrainte σ , solutions du problème (3.2) avec des conditions aux limites de périodicité (3.3), sont également les champs solutions du problème variationnel suivant [74] :

$$W(E) = \inf_{v \in K^\#(E)} \langle w(\varepsilon(v)) \rangle, \quad (3.9)$$

où $\langle . \rangle$ représente la moyenne spatiale sur V , et $K^\#(E)$ est l'ensemble des champs de déplacement v cinématiquement admissibles avec des conditions aux bords de périodicité, noté :

$$K^\#(E) = \{v \text{ tel que } \varepsilon(v) = E + \varepsilon(u^*), u^* \# \}.$$

Le problème du Lagrangien augmenté repose sur une reformulation du problème variationnel (3.9) en un problème de minimisation sous contrainte :

$$W(E) = \inf_e \left\{ \inf_{v \in K^\#(E)} \langle w(e) \rangle \right\}, \quad \varepsilon(u) - e(x) = 0 \quad \forall x \in V. \quad (3.10)$$

Une méthode classique de résolution du problème de minimisation sous contrainte consiste à introduire un multiplicateur de Lagrange $\lambda(x)$ associé à la "contrainte" $\varepsilon(u) - e(x) = 0$. Le Lagrangien augmenté s'exprime sous la forme suivante :

$$\begin{cases} W(E) = \inf_e \inf_{v \in K^\#(E)} \sup_{\lambda} \{L(e, \varepsilon(u), \lambda)\} \\ L(e, \varepsilon(u), \lambda) = \langle w(e) \rangle + \langle \lambda : (\varepsilon(u) - e(x)) \rangle + \frac{1}{2} \langle (\varepsilon(u) - e(x)) : c_0 : (\varepsilon(u) - e(x)) \rangle. \end{cases} \quad (3.11)$$

Le dernier terme du Lagrangien augmenté $L(e, \varepsilon(u), \lambda)$ représente la partie augmentée qui ne modifie en rien le résultat mais qui améliore la convergence de l'algorithme utilisé pour résoudre le problème (3.11).

L'algorithme utilisé pour résoudre le problème (3.11) est l'algorithme d'Uzawa. Cet algorithme se décompose en trois parties :

Itération i : e^{i-1} et λ^{i-1} connus,

a) *Calcul de $\varepsilon(u^i)$, solution du problème variationnel suivant :*

$$\inf_{v \in K^\#(E)} L(e^{i-1}, \varepsilon(u^i), \lambda^{i-1}), \quad (3.12)$$

b) *Calcul de e^i , solution de l'équation non linéaire suivante en chaque points x :*

$$\inf_{e^i} L(e^i, \varepsilon(u^i), \lambda^{i-1}) \iff \frac{\partial w}{\partial e}(x, e^i) + c_0 : e^i(x) = c_0 : \varepsilon(u^i, x) + \lambda^{i-1}(x) \quad (3.13)$$

c) *Réactualisation de λ^i en chaque point x :*

$$\lambda^i(x) = \lambda^{i-1}(x) + c_0 : (\varepsilon(u^i, x) - e^i(x)). \quad (3.14)$$

A la convergence, $\varepsilon(u^i) = e^i$ et λ s'identifie à un champ de contrainte et est donné par la relation $\lambda = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(\varepsilon(u))$.

La partie (a) de l'algorithme d'Uzawa est un problème de thermoélasticité linéaire classique sur un milieu homogène de module d'élasticité c_0 , soumis à un champ de polarisation $\tau(x)$:

$$\tau(x) = \lambda^{i-1}(x) - c_0 : e^{i-1}(x) + c_0 : E. \quad (3.15)$$

Ce problème est identique au problème (3.4) dont la résolution est donnée par l'algorithme (3.6) en remplaçant τ par l'expression (3.15).

La partie (b) est une équation tensorielle non linéaire. Différents choix sont possibles pour la définition du potentiel en déformation $w(x, e^i)$. Pour plus de détails, le lecteur se référera à Michel et coll [59].

Une itération de l'algorithme d'Uzawa se décompose de la manière suivante, dans le cadre de la théorie de la déformation (pour la solution de la partie (b) du système d'équations (3.13)) :

$$\begin{aligned} & \text{Itération } i : e^{i-1} \text{ et } \lambda^{i-1} \text{ connu} \\ (a) \quad & \tau^{i-1}(x) = \lambda^{i-1} - c_0 : e^{i-1} + c_0 : E \\ (b) \quad & \widehat{\tau}^i = F(\tau^i) \\ (c) \quad & \widehat{\varepsilon}^{i+1} = -\Gamma^0(\widehat{\xi}) : \widehat{\tau}^i \quad \forall \xi \neq 0, \quad \widehat{\varepsilon}(0)^{i+1} = E \\ (d) \quad & \varepsilon^{i+1} = F^{-1}(\widehat{\varepsilon}^{i+1}) \\ (e) \quad & \text{Résolution de l'équation non linéaire (3.13) pour } e^i \\ (f) \quad & \text{Test de convergence.} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Le test de convergence porte respectivement sur la compatibilité et sur la relation contrainte - déformation selon :

$$\max \left(\frac{\|\varepsilon^i - e^i\|}{\|E\|}, \frac{\left\| \lambda^i - \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(\varepsilon^i) \right\|}{\left\| \left\langle \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(E) \right\rangle \right\|} \right) \leq \eta. \quad (3.17)$$

η vaut typiquement 10^{-5} dans toutes les simulations numériques qui sont présentées plus loin dans le texte. Comme nous l'avons évoqué précédemment, la vitesse de convergence de la méthode dépend du choix du tenseur c_0 . N'ayant aucune théorie permettant d'établir de manière rigoureuse le choix optimal de c_0 , celui-ci est déterminé par des tests numériques [59]. Son choix est peu influencé par le niveau de résolution de l'image. Il convient donc de le déterminer à faible résolution et de l'utiliser dans les calculs à résolution plus élevée. Dans les simulations 2D et 3D qui vont suivre, c_0 est déterminé de la manière suivante : $c_0 = 8c$, où c est le module d'élasticité de la matrice.

Comme nous l'avons évoqué en introduction de ce chapitre, cette méthode est peu coûteuse en temps de calcul. Contrairement à la méthode des éléments finis, il n'y a pas de matrice de rigidité à calculer mais uniquement une équation non linéaire à résoudre en chaque point du V.E.R. Elle permet de déterminer le comportement à l'échelle d'un V.E.R., de structures comprenant un grand nombre d'hétérogénéités, sous l'hypothèse de périodicité du V.E.R. D'un point de vue pratique, il est impossible d'appliquer cette méthode de calcul en chaque point x d'un V.E.R.. Ne disposant expérimentalement que d'une image d'une microstructure définie par un nombre fini de pixels ou de voxels, il convient alors de résoudre le problème local de manière discrète, en chaque pixel ou voxel de l'image. L'implémentation de l'algorithme sous sa forme discrète est décrite dans Michel, Moulinec et Suquet [59]. Le niveau de résolution de l'image aura un effet sur les valeurs des propriétés mécaniques obtenues à partir des algorithmes précédents.

Nous allons maintenant utiliser cette méthode pour évaluer l'influence de la répartition hétérogène des défauts en amas sur la surface seuil et sur la rupture fragile. Avant cela, il nous faut créer des images binaires représentant différentes configurations de microstructures : amas isolés, de Hashin, etc.

3.3 Surface d'écoulement de milieux poreux en 2D

La méthode de calculs par T.F.R est appliquée à des microstructures de morphologies diverses (aléatoires et à amas isolés ou connectés) afin d'évaluer les différences qu'elles engendrent sur la contrainte seuil pour différents modes de chargement macroscopique. Les résultats obtenus pour un chargement purement hydrostatique seront comparés à la solution analytique établie par Gurson [39].

3.3.1 Critère de plasticité de Gurson en 2D

Dans le cas d'un chargement macroscopique axisymétrique de la forme :

$$\Sigma = \Sigma_{11} (e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2) + \Sigma_{33} e_3 \otimes e_3,$$

e_3 étant parallèle à l'axe des cylindres, le critère de Gurson [39] constitue une borne supérieure rigoureuse de la surface seuil pour tout assemblage de cylindres composites de Hashin [40] dans le cas d'un comportement rigide plastique de la matrice. L'expression de ce critère de plasticité s'exprime en fonction de la limite d'élasticité de la matrice σ_0 et de la porosité macroscopique f du matériau poreux selon :

$$\left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + 2f \cosh\left(\frac{\sqrt{3}\Sigma_{\alpha\alpha}}{2\sigma_0}\right) - 1 - f^2 = 0, \quad (3.18)$$

où $\Sigma_{\alpha\alpha} = \Sigma_{11} + \Sigma_{22}$, et Σ_{eq} représente la contrainte équivalente de Mises. Pour une pression purement hydrostatique, la contrainte d'écoulement donnée par (3.18) vaut :

$$\frac{\Sigma_{\alpha\alpha}}{\sigma_0} = \pm \frac{2}{\sqrt{3}} \ln(f) \quad (3.19)$$

Pour établir son critère, Gurson suppose que toute la matrice a été plastifié. Il ne prend pas en compte l'apparition de bandes de localisation de la déformation pouvant intervenir entre pores voisins. A noter également qu'une autre expression analytique de la surface de charge des milieux poreux 2D a également été proposée par Gurson [39] dans le cadre des déformations planes :

$$(1 + 3f + 24f^6)^2 \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + 2f \cosh\left(\frac{\sqrt{3}\Sigma_{\alpha\alpha}}{2\sigma_0}\right) - 1 - f^2 = 0.$$

Cette expression analytique ne possède pas le statut de borne. Elle ne constitue qu'une estimation de la surface d'écoulement des milieux poreux dans le cadre des déformations planes.

Une extension heuristique du critère de Gurson visant à prendre en compte les interactions entre cavités [89] consiste à introduire un paramètre q en remplaçant la porosité f par une porosité effective qf . Cette modification du critère de Gurson ne permet pas de surmonter les déficiences qu'illustrent des calculs numériques récents de Francescato et coll. [32] et de Pastor et Ponte Castañeda [65] pour

les problèmes respectivement en contrainte plane et déformation plane d'un vide cylindrique enrobé d'une matrice elle aussi cylindrique. La surface d'écoulement obtenue par de tels calculs coupe l'axe des pressions hydrostatiques avec pente finie et non infinie, comme le suggère le critère de Gurson.

Les calculs par T.F.R. que nous allons maintenant mener vont également nous permettre de vérifier quel est l'état de la surface d'écoulement au voisinage des pressions hydrostatiques : coupe-t-elle l'axe des pressions hydrostatiques avec une pente finie ou infinie ?

3.3.2 Simulations de microstructures 2D

Afin d'étudier l'effet de l'hétérogénéité de la répartition des cavités cylindriques en amas sur la surface d'écoulement, différentes situations morphologiques sont considérées. La première (Figure 3.10) est constituée de microstructures aléatoires générées par un schéma de type "cerise" selon le principe décrit dans le chapitre précédent.

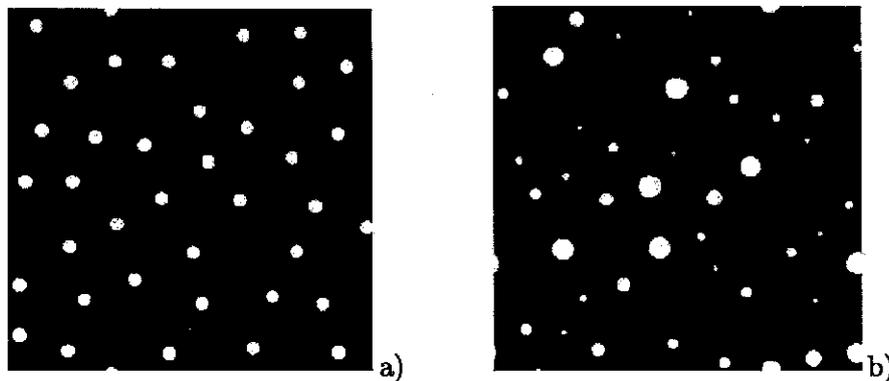


FIG. 3.10 – *Microstructures périodiques aléatoires, $f = 4,6\%$ a) Trous cylindriques de taille identique b) Trous cylindriques de taille variable*

Les deux autres situations morphologiques sont constituées de microstructures à amas isolés (Figure 3.11) et connectés (Figure 3.12) obtenue par l'intersection de schémas de type "cerise" de taille caractéristique différente.

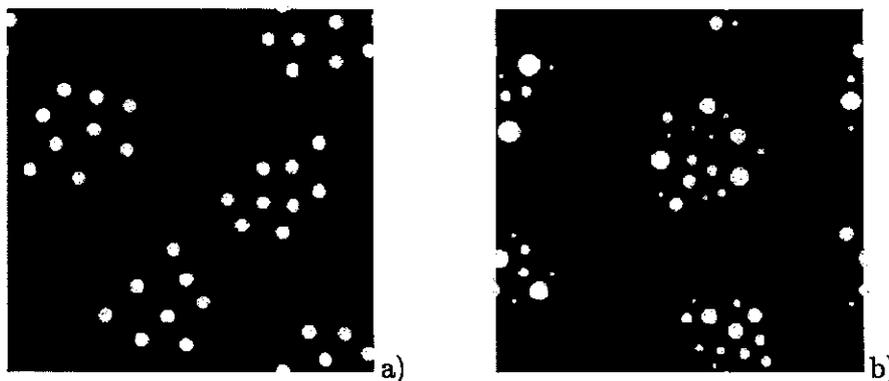


FIG. 3.11 – *Microstructures périodiques à amas isolés, $f = 4,6\%$ a) Trous cylindriques de taille identique b) Trous cylindriques de taille variable*

Afin d'évaluer l'effet de la dispersion de la taille des cavités sur la rupture ductile et la rupture fragile, des microstructures à taille de cavités identiques et variables sont considérées. En moyenne,

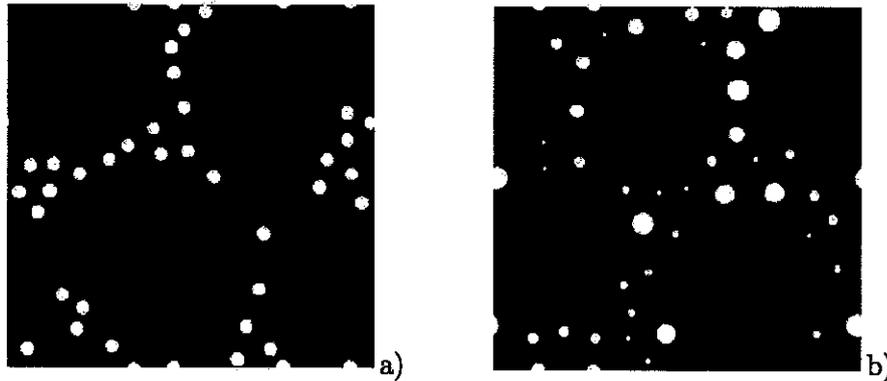


FIG. 3.12 – Microstructures périodiques à amas connectés, $f = 4,6\%$ a) Trous cylindriques de taille identique b) Trous cylindriques de taille variable

4 configurations pour chaque situation morphologique ont été générées. La fraction surfacique de pore sur l'ensemble de ces images est de 4,6%. Cette porosité s'éloigne de la porosité réelle rencontrée dans les aciers de cuve mais les calculs par T.F.R. 2D ont pour objectifs de dégager les tendances sur l'effet des amas sur la rupture ductile et sur la rupture fragile. Une porosité assez élevée permet d'accentuer ces tendances.

Dans le cas d'un comportement rigide plastique de la matrice régie par le critère de von Mises, le potentiel local est donné par la relation suivante :

$$w(x, \varepsilon) = \sigma_0 \varepsilon_{eq}. \quad (3.20)$$

Dans ce cas, l'équation non linéaire (3.13) n'est pas différentiable en 0. Pour pallier à cette difficulté, il convient de régulariser l'énergie (3.20) en y rajoutant une partie élastique. L'énergie régularisée s'écrit :

$$w(x, \varepsilon) = \frac{9}{2} k \varepsilon_m^2 + f(\varepsilon_{eq}) \quad \text{avec} \quad f(\varepsilon_{eq}) = \begin{cases} \frac{3}{2} \mu \varepsilon_{eq}^2 + \frac{\sigma_0^2}{6\mu} & \text{si } \varepsilon_{eq} \leq \frac{\sigma_0}{3\mu} \\ \sigma_0 \varepsilon_{eq} & \text{si } \varepsilon_{eq} \geq \frac{\sigma_0}{3\mu}, \end{cases} \quad (3.21)$$

Le comportement de la matrice est donc un comportement élastique parfaitement plastique, traité dans le cadre de l'élasticité non linéaire selon la théorie de la déformation. Bien entendu, l'ajout d'une partie élastique ne modifie pas la valeur de la contrainte d'écoulement macroscopique.

Dans le cas d'un comportement élastique-parfaitement plastique de la matrice, nous pouvons déterminer la surface d'écoulement pour chaque catégorie de microstructure simulée et pour divers modes de chargement. Nous nous plaçons dans le plan $(\Sigma_{eq}, \Sigma_{\alpha\alpha})$ avec $\alpha = 1, 2$ et les simulations numériques sont réalisées sur des images contenant 1215×1215 pixels. De plus, les simulations qui suivent sont menées dans le cadre des déformations planes généralisées.

3.3.3 Cas d'une triaxialité de contraintes infinie

Le premier cas de chargement extrême que nous allons étudier est un chargement macroscopique purement hydrostatique, conduisant à une triaxialité des contraintes infinie et donc à une contrainte

d'écoulement se situant sur l'axe des pressions hydrostatiques dans le plan $(\Sigma_{\alpha\alpha}, \Sigma_{eq})$ pour $\alpha = 1, 2$:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & T & 0 \\ 0 & 0 & T \end{pmatrix},$$

l'axe de révolution des cylindres étant parallèle à la troisième direction e_3 . L'évolution des contraintes d'écoulement Σ_m normalisées par la limite d'élasticité de la matrice σ_0 , en fonction de la déformation hydrostatique macroscopique, E_m , obtenues pour l'ensemble des microstructures simulées, est représentée sur la figure (3.13). La courbe $\Sigma_m = f(E_m)$ est construite point par point : pour un paramètre de chargement t donné (voir algorithme 3.7) l'état de contrainte et de déformation macroscopique est calculé.

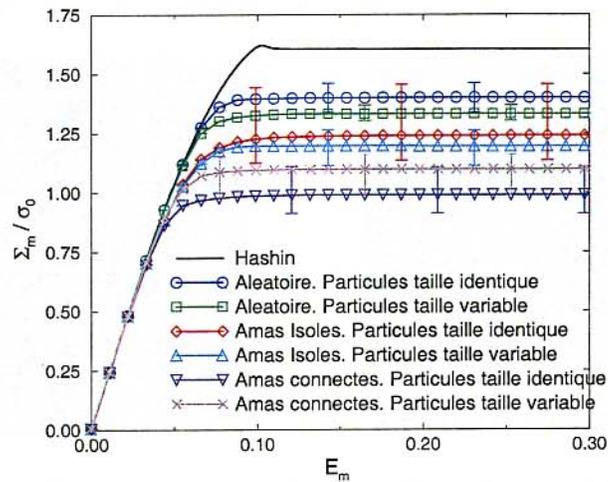


FIG. 3.13 – Contrainte d'écoulement pour un chargement purement hydrostatique

Pour un tel chargement, les microstructures à amas ont une réponse plus souple que les microstructures aléatoires : plus on s'écarte d'une microstructure de type Hashin, plus on abaisse la contrainte d'écoulement. Les microstructures à amas connectés (Figures 3.12) présentent une contrainte seuil beaucoup plus souple que les microstructures à amas isolés (Figures 3.11). Notons que la contrainte d'écoulement obtenue sur la microstructure de Hashin simulée ne coïncide pas avec la solution exacte (3.19); ceci est dû au fait que la microstructure de Hashin simulée n'est en réalité pas une véritable microstructure de Hashin car l'espace n'est pas rempli indéfiniment avec des cylindres composites².

Ces tendances sont liées à l'apparition de bandes de localisation de la déformation plus ou moins diffuses selon le type de microstructure. Une fois que la déformation commence à se localiser en bandes (Figures 3.14, 3.15 et 3.16), ces dernières vont absorber la majeure partie de la déformation macroscopique, favorisant ainsi la formation de zones où la déformation est très intense (les bandes de localisation) et des zones dites "mortes", où la déformation est quasiment nulle.

Une microstructure aléatoire a tendance à localiser beaucoup plus qu'une microstructure à amas. Ainsi, moins la déformation se localise en bande, plus la contrainte seuil sera élevée (Figures 3.14, 3.15 et 3.16). Dans les microstructures aléatoires ou à amas à taille de trous variable, les bandes de localisation ont tendance à passer par les trous de plus grande taille, ce qui laisse à penser que ces trous régissent la rupture du matériau.

²Le principe de la méthode de génération d'une telle microstructure est décrit dans le chapitre 2

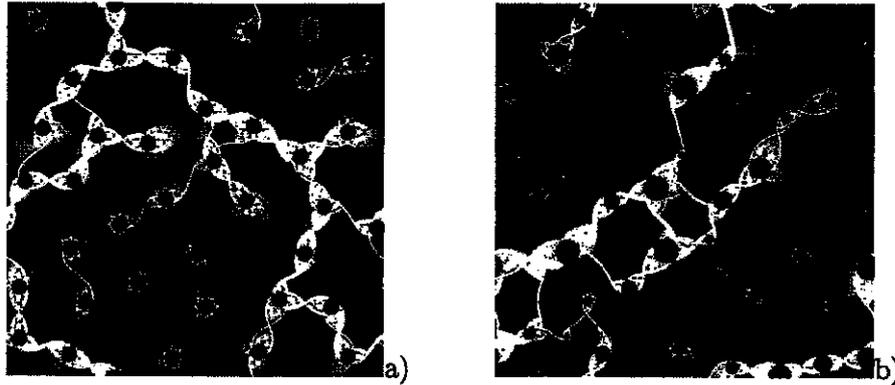


FIG. 3.14 – Exemple de bandes de localisation sur des microstructure aléatoire a) Cavités cylindriques de taille identique b) Cavités cylindriques de taille variable

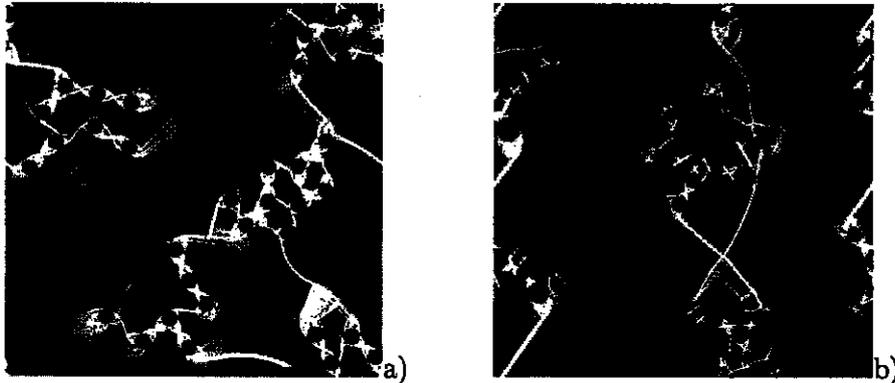


FIG. 3.15 – Exemple de bandes de localisation sur des microstructures à amas isolés a) Cavités cylindriques de taille identique b) Cavités cylindriques de taille variable

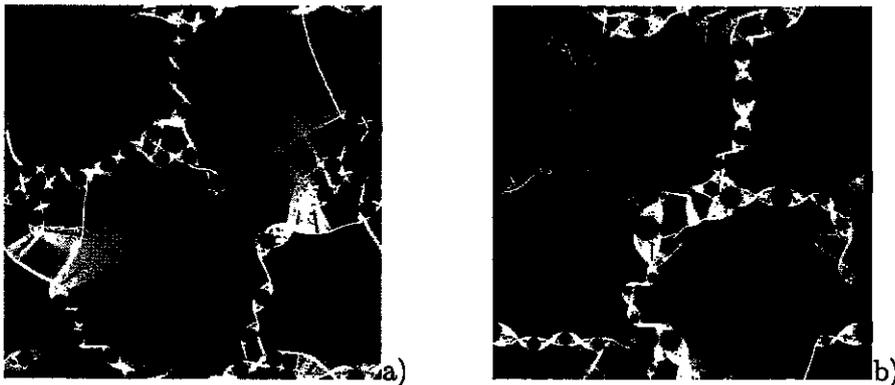


FIG. 3.16 – Exemple de bandes de localisation sur des microstructures à amas connectés a) Cavités cylindriques de taille identique b) Cavités cylindriques de taille variable

Il existe également une différence de contrainte d'écoulement entre les microstructures à amas isolés (Figure 3.15) et les microstructures à amas connectés (Figure 3.16). Cette différence provient du fait que, dans les microstructures à amas isolés, la déformation se localise majoritairement à l'intérieur des amas alors que dans les microstructures à amas connectés, la déformation se localise dans les "chemins de trous" reliant les amas entre eux. Ces derniers facilitent le passage des bandes de

localisation.

Dans le cas des microstructures aléatoires, de faibles fluctuations sur la valeur de la contrainte d'écoulement sont observées. L'amplitude de ces fluctuations est plus importante dans le cas des microstructures à amas isolés et connectés. Ces fluctuations sont dues à la faible taille du domaine considéré pour effectuer les simulations numériques. Ainsi, pour une situation morphologique donnée, une petite perturbation des paramètres microstructuraux telle que la distance minimale séparant le bord des trous ou des amas, entraîne une fluctuation non négligeable des contraintes d'écoulement. Pour s'en affranchir, la taille du domaine de simulation doit être plus importante afin de pouvoir contenir beaucoup plus d'amas et, ainsi, d'augmenter la richesse des informations sur la microstructure [49].

3.3.4 Cas d'une triaxialité des contraintes nulle

Le deuxième mode de chargement extrême que nous envisageons est celui qui conduit à une contrainte hydrostatique nulle ($\Sigma_{\alpha\alpha} = 0$) dans le plan ($\Sigma_{\alpha\alpha}, \Sigma_{eq}$) pour $\alpha = 1, 2$, i.e., telle que la contrainte d'écoulement du matériau hétérogène se situe sur l'axe des déviateurs. Plusieurs chargements sont envisageables : un chargement macroscopique axisymétrique ou un chargement macroscopique faisant intervenir une composante de cisaillement dans le plan transverse.

Le cas d'un chargement axisymétrique de la forme :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & T & 0 \\ 0 & 0 & S \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

permet de situer la contrainte d'écoulement sur l'axe des déviateurs avec $T = 0$ et $S \neq 0$. Ce type de chargement ne correspond pas à un cisaillement pur mais à une traction uniaxiale dans la troisième direction, i.e., dans le sens des fibres. Dans ce cas, la contrainte d'écoulement obtenue est indépendante de l'arrangement des fibres dans la cellule de base [59]. Une solution analytique pour Σ_{eq} est connue et est de la forme : $\Sigma_{eq} = (1 - f) \sigma_0$ où σ_0 correspond à la limite d'élasticité de la matrice et f à sa porosité macroscopique. Pour un tel chargement et pour de faibles niveaux de triaxialité, il est également observé que toute la matrice a été plastifiée, ce qui correspond à l'hypothèse émise par Gurson [39] pour établir son critère de plasticité (3.18). Ainsi, la surface seuil obtenue par la méthode de T.F.R. et celle obtenue par Gurson coïncident, quel que soit le type de microstructure envisagée [59] [60]. Toutefois, pour de fortes triaxialités, la surface seuil obtenue par les calculs par T.F.R. forme une droite verticale et correspond à une réponse plus souple que Gurson, du fait que la localisation de la déformation en bande n'est pas prise en compte par ce dernier. La mise en évidence d'un effet d'amas sur la contrainte d'écoulement pour les basses triaxialités avec un tel mode de chargement est donc impossible.

Deux autres types de chargement, conduisant à une triaxialité des contraintes nulle, sont toutefois envisageables. Le premier est un chargement axisymétrique semblable au chargement axisymétrique classique (3.22) mais dont deux composantes ont été échangées dans le but d'avoir des niveaux de contraintes macroscopiques différents dans les deux directions du plan transverse, plan orthogonal à l'axe des cylindres. Ce chargement, noté Chargement A, se met sous la forme suivante :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & T \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

Pour un tel chargement un taux de triaxialité nul dans le plan $(\Sigma_{\alpha\alpha}, \Sigma_{eq})$ pour $\alpha = 1, 2$ implique la relation $T = -S$. Le tenseur des contraintes macroscopiques ainsi défini correspond à une combinaison entre une traction dans le sens des fibres et dans une des directions du plan transverse et une compression de même amplitude dans la direction perpendiculaire du plan transverse.

Le second chargement qui conduit à une triaxialité des contraintes nulle, noté Chargement B (3.24), résulte d'une combinaison entre un chargement purement hydrostatique et un chargement en cisaillement pur dans le plan transverse :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} T & \gamma & 0 \\ \gamma & T & 0 \\ 0 & 0 & T \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Ce chargement, plus général que le chargement axisymétrique, permet de considérer le cas du cisaillement pur dans le plan transverse pour lequel $T=0$ et $\gamma \neq 0$.

Les chargements A et B sont appliqués aux différents types de microstructures simulées précédemment (Figures 3.10, 3.11 et 3.12), avec $T = -S$ pour le chargement A et $(T = 0, \gamma \neq 0)$ pour le chargement B. Les contraintes d'écoulement obtenues pour chaque situation morphologique sont représentées sur la figure 3.17. Notons que, pour le chargement A, uniquement les microstructures à taille de cavités identiques sont considérées.

Les tendances obtenues sur les contraintes d'écoulement pour les chargements A et B sont similaires à celles obtenues pour un chargement purement hydrostatique à savoir que les microstructures à amas ont une contrainte d'écoulement plus basse que les microstructures aléatoires. Pour le chargement B, les microstructures à amas connectés présentent une contrainte d'écoulement plus faible que les microstructures à amas isolés. Une fluctuation globale d'environ 10% de la contrainte d'écoulement est observée. En revanche, pour le chargement A, c'est la tendance inverse qui est obtenue : les microstructures à amas isolés présentent une contrainte d'écoulement plus faible que les microstructures à amas connectés, mais la fluctuation des contraintes d'écoulement est très faible (environ 2%). Cette tendance, moins prononcée que pour le chargement B, peut très bien s'inverser en considérant un plus grand nombre de microstructures par configuration.

Ces fluctuations de la contrainte d'écoulement sont dues à l'apparition de bandes de localisation de la déformation qui sont plus diffuses dans une microstructure aléatoire que dans une microstructure à amas isolés ou connectés (Figures 3.18, 3.19 et 3.20). On constate également que, pour le chargement B, contrairement à un chargement en pression hydrostatique pure, la déformation se localise préférentiellement en bandes dans des plans horizontaux et verticaux. Ces plans sont orientés à 45° pour le chargement A (Figures 3.18a et 3.19a).

L'orientation des bandes de localisation de la déformation est directement liée à l'orientation du chargement macroscopique. En revanche, pour un chargement purement hydrostatique, l'orientation des bandes n'est fonction que de l'agencement spatial des pores dans le V.E.R.

Dans le cas du chargement B, la microstructure de Hashin a une contrainte d'écoulement du même ordre de grandeur que les microstructures aléatoires, contrairement au cas d'un chargement en pression hydrostatique pure. A noter également que l'effet de taille des particules influe peu sur la valeur de la contrainte seuil quelle que soit la situation morphologique considérée.

Une différence sur la contrainte d'écoulement est également observée entre les microstructures à amas isolés et connectés pour le chargement B. Elle se traduit par un écoulement plastique plus précoce pour les microstructures à amas connectés. Cet effet n'est pas manifesté par le chargement A : la contrainte d'écoulement obtenue sur les microstructures à amas isolés et connectés sont globalement

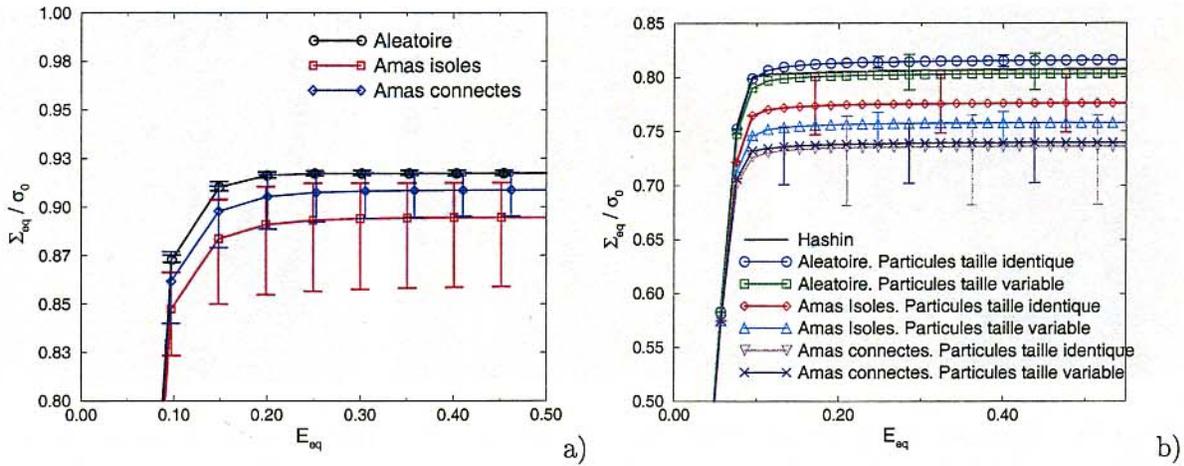


FIG. 3.17 – Courbes d'écrouissage macroscopiques, $f = 4,6\%$. a) Chargement A (3.23) pour des microstructures à taille de cavités identique b) Chargement B (3.24) pour des microstructures à taille de cavités cylindriques identique et variable

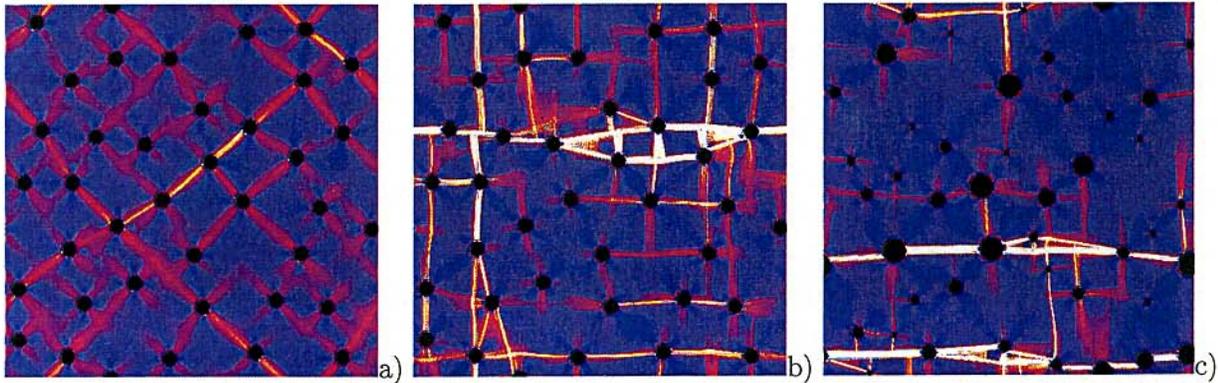


FIG. 3.18 – Exemple de bandes de localisation sur des microstructure aléatoire a) Cavités cylindriques de taille identiques Chargement A b) Cavités cylindriques de taille identiques Chargement B c) Cavités cylindriques de taille variables Chargement B

du même ordre de grandeur. Pour une situation morphologique donnée, le chargement B conduit à une contrainte d'écoulement plus basse que le chargement A. Ceci est dû à une localisation et à une amplitude de la déformation équivalente dans les bandes de localisation moins importante pour le chargement A que pour le chargement B (Figures 3.18a, 3.19a et 3.20a).

Quel que soit le chargement considéré, les fluctuations de la contrainte d'écoulement autour d'une valeur moyenne sont importantes dans le cas d'une microstructure à amas connectés. La localisation de la déformation en bande dépend donc fortement de l'agencement spatial des pores : si les "chemins de trous" se situent dans des plans parallèles aux plans de cisaillement, la déformation aura plus de facilité à s'y localiser. Ainsi, plus l'angle entre les "chemins de trous" et les plans de cisaillement est faible, plus la contrainte seuil est basse. Comme pour le cas d'un chargement purement hydrostatique, les fluctuations de la contrainte d'écoulement sur une même morphologie sont dues à la faible taille du V.E.R. considéré.

Notons que, quel que soit le type de chargement envisagé, les bandes de localisation de la déformation traversent les pores, contrairement aux milieux biphasés (à inclusions plus dures que la matrice)

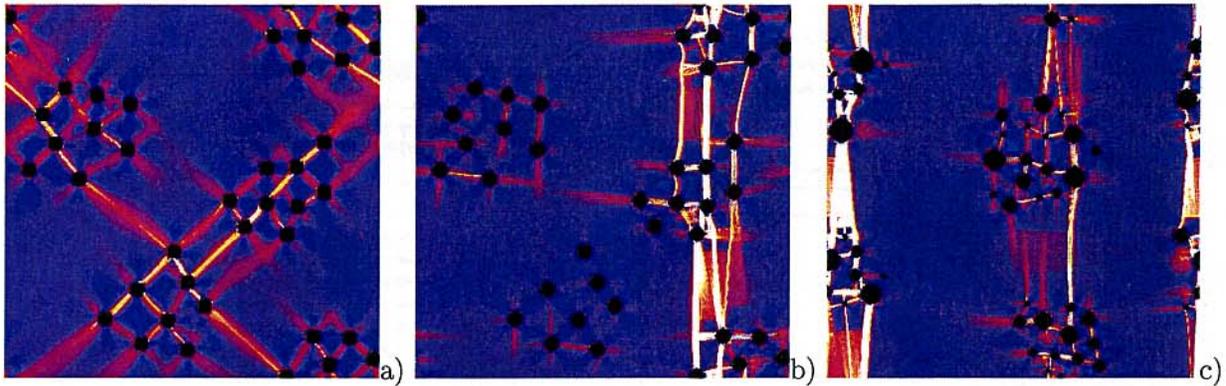


FIG. 3.19 – Exemple de bandes de localisation sur des microstructures à amas isolés a) Cavités cylindriques de taille identiques Chargement A b) Cavités cylindriques de taille identiques Chargement B c) Cavités cylindriques de taille variables Chargement B

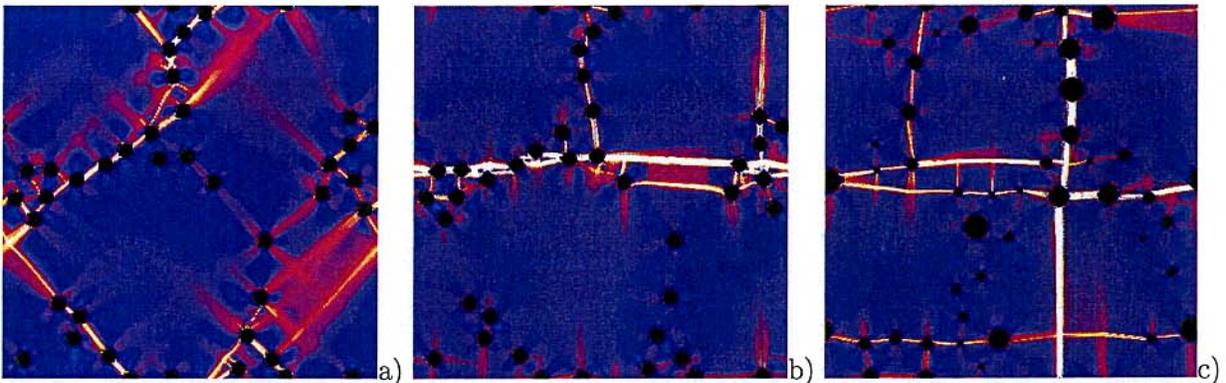


FIG. 3.20 – Exemple de bandes de localisation sur des microstructures à amas connectés a) Cavités cylindriques de taille identiques Chargement A b) Cavités cylindriques de taille identiques Chargement B c) Cavités cylindriques de taille variables Chargement B

dans lesquels les bandes de localisation de la déformation contournent les défauts et les amas [63].

3.3.5 Surface d'écoulement des milieux poreux 2D

Après avoir étudié la réponse des matériaux poreux sous des sollicitations macroscopiques conduisant à une triaxialité des contraintes nulle et infinie, nous nous intéressons maintenant à la réponse de ces mêmes matériaux pour des triaxialités intermédiaires comprises dans l'intervalle $]0, \infty[$, afin de déterminer la surface de plasticité pour chaque situation morphologique (aléatoire, amas isolés et connectés). Pour des raisons de simplicité, nous limitons notre étude aux microstructures à taille de cavité identique.

Dans l'intervalle $]0, \infty[$, trois taux de triaxialité des contraintes différents sont considérés : $\tau = \frac{1}{3}$, $\tau = 1$ et $\tau = 3$. Afin de tracer la surface d'écoulement d'un milieu poreux, il convient de se fixer une triaxialité des contraintes et de déterminer la courbe $\Sigma_m = f(E_m)$ ou $\Sigma_{eq} = f(E_{eq})$ suivant la valeur de la triaxialité considérée. La valeur de la contrainte d'écoulement Σ_m^∞ ou Σ_{eq}^∞ "à l'infini" est ensuite déterminée : c'est la valeur pour laquelle il n'y a plus d'évolution de Σ_m ou Σ_{eq} en fonction

de E_m ou E_{eq} respectivement. D'une manière symbolique, Σ_{eq}^∞ est défini selon :

$$\Sigma_{eq}^\infty = \lim_{E_{eq} \rightarrow +\infty} F(E_{eq}),$$

où F est la courbe de comportement macroscopique du milieu hétérogène. Une définition identique peut être écrite pour Σ_m^∞ . Le point Σ_{eq}^∞ est sur le bord de P^{hom} qui correspond au domaine de résistance effectif d'un matériau hétérogène et qui est défini selon [81] :

$$P^{hom} = \{ \Sigma \text{ tel qu'il existe } \sigma(x) \text{ avec } \langle \sigma(x) \rangle = \Sigma, \sigma(x) \in P(x), \text{div} \sigma(x) = 0, \forall x \in V, \sigma \cdot n - \# \}, \quad (3.25)$$

où le symbole $-\#$ signifie anti-périodique. Le bord de P^{hom} est la surface d'écoulement macroscopique qui dépend du domaine de résistance des phases et de leur géométrie. Une fois ce point déterminé, il est aisé de calculer Σ_m^∞ à l'aide de la définition de la triaxialité des contraintes :

$$\tau_{2d} = \frac{\Sigma_{\alpha\alpha}^\infty}{2\Sigma_{eq}^\infty}, \quad \alpha = 1, 2.$$

La surface de charge est construite point par point et, pour chaque point, il convient de déterminer la valeur de la contrainte d'écoulement.

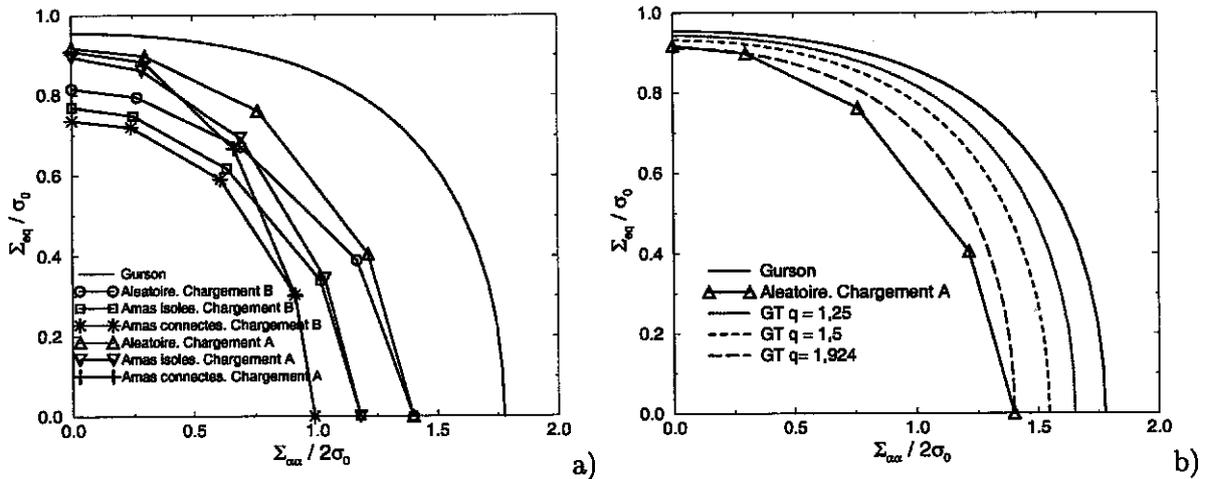


FIG. 3.21 – Surface de charge des milieux poreux 2D. a) Comparaison entre le modèle de Gurson et les calculs par T.F.R. 2D sur différentes configurations à taille de trous identique b) Comparaison entre les modèles de Gurson et Gurson-Tvergaard (GT) pour trois valeurs de q différentes et les calculs par TFR sur les microstructures aléatoires selon le Chargement A

La figure (3.21a) présente les surfaces d'écoulement obtenues à partir du critère de Gurson (3.18) et des calculs par T.F.R. 2D menés sur les microstructures aléatoires et à amas, isolés et connectés, avec des tailles de cavités identiques et sous les chargements macroscopiques définis selon (3.23) et (3.24). Les surfaces d'écoulement obtenues par les calculs par T.F.R. 2D sont nettement plus "souples" que celle de Gurson quel que soit le chargement considéré. De plus, contrairement à la borne de Gurson, les surfaces d'écoulement coupent l'axe des pressions hydrostatiques avec une pente finie. Ceci est cohérent avec les simulations numériques 2D effectuées sur un cylindre creux par Pastor et Ponte Castañeda [65] dans le cadre des déformations planes et par Francescato et coll. [32] dans le cadre des contraintes planes. La pente avec laquelle les surfaces d'écoulement coupent

l'axe des pressions hydrostatiques dépend fortement de la morphologie de la microstructure. Cette pente est plus importante pour les microstructures à amas connectés que pour les microstructures aléatoires et à amas isolés³. Une reformulation du critère de Gurson (3.18) a récemment été proposée par Pellegrini [66]. Cette reformulation conduit à un critère phénoménologique qui permet de pallier certaines déficiences du critère de Gurson. Notamment, ce critère prévoit une pente finie au voisinage de l'axe des pressions hydrostatiques et est en bon accord avec les résultats numériques de [65].

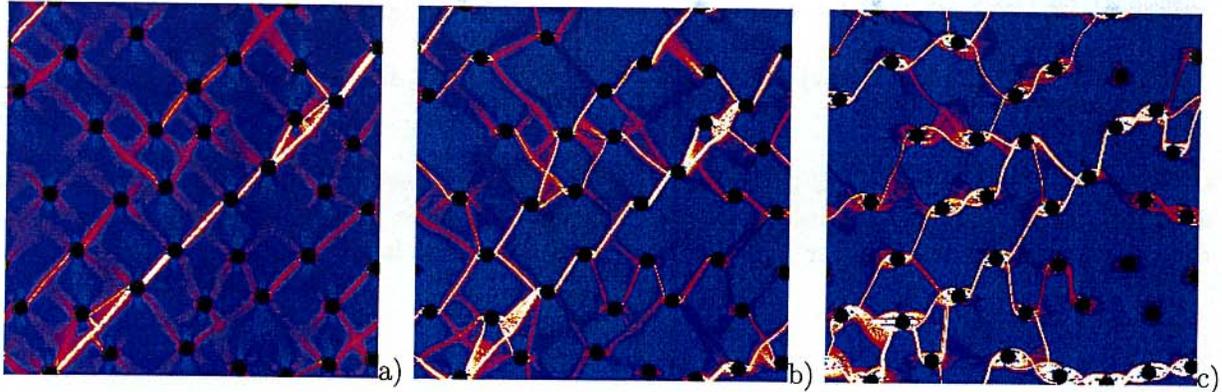


FIG. 3.22 – Cartes des déformations équivalentes locales pour le Chargement A a) $\tau = \frac{1}{3}$, b) $\tau = 1$, c) $\tau = 3$. Microstructure aléatoire à taille de cavités identique

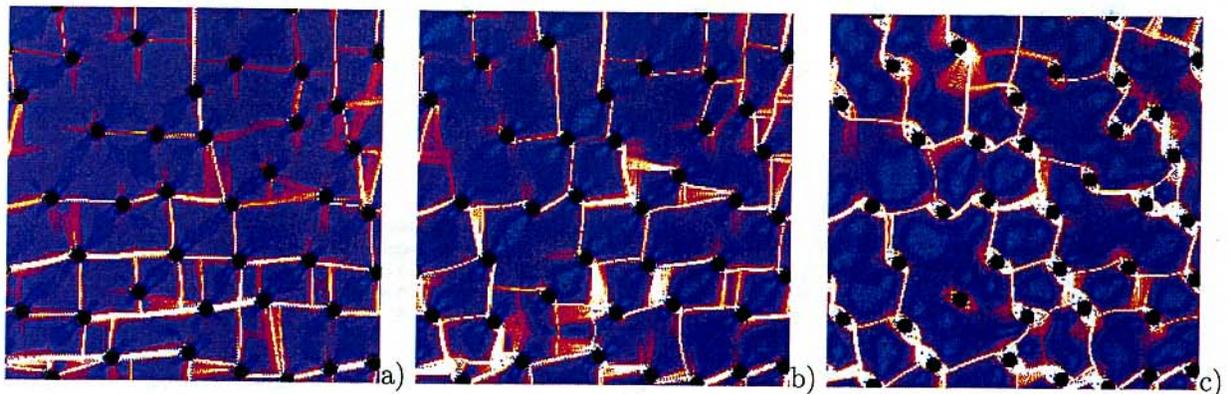


FIG. 3.23 – Cartes des déformations équivalentes locales pour le Chargement B a) $\tau = \frac{1}{3}$, b) $\tau = 1$, c) $\tau = 3$. Microstructure aléatoire à taille de cavités identique

Les surfaces d'écoulement obtenues à partir du chargement B sont plus souples que celles obtenues à partir du chargement A, hormis pour un chargement purement hydrostatique où les deux chargements conduisent au même résultat. Pour une morphologie donnée, l'écart entre les deux surfaces d'écoulement est maximal pour les faibles triaxialités et tend à se réduire en fonction de l'augmentation de la triaxialité des contraintes. L'ajout d'une composante de cisaillement dans le tenseur des contraintes macroscopiques rend la réponse de la microstructure plus souple. La figure 3.21b montre que l'introduction d'un paramètre q dans le critère de Gurson ne permet pas de rendre compte de l'assouplissement de la contrainte d'écoulement dû aux interactions entre cavités voisines. Pour que la surface d'écoulement du modèle de Gurson-Tvergaard (GT) soit très proche de celle

³Pour plus de rigueur, des calculs par T.F.R. 2D sont actuellement en cours en considérant des triaxialités des contraintes supérieures à 3 afin de définir plus précisément le caractère fini de la pente au voisinage de l'axe des pressions hydrostatiques

obtenue par des calculs par T.F.R. sur les microstructures aléatoires à taille de trous identique selon le chargement A, il faudrait un paramètre q supérieur à 1,9 (Figure 3.21b).

Les figures (3.22) et (3.23) présentent les cartes des déformations équivalentes obtenues sur une microstructure aléatoire à taille de cavités identique, pour différentes valeurs de la triaxialité des contraintes, dans le cas des chargements A et B respectivement. Plus la triaxialité des contraintes augmente, moins l'orientation des bandes de localisation de la déformation dépend du chargement macroscopique.

3.4 Bandes de localisation de la déformation

3.4.1 Étude de l'hétérogénéité de déformation

Les calculs par T.F.R. 2D menés dans la partie précédente montrent que, même si la contrainte d'écoulement n'évolue plus, toute la matrice n'a pas forcément été plastifiée (sauf dans le cas d'un chargement axisymétrique à faible niveau de triaxialité). En effet, il existe des zones, où la déformation s'est localisée en bandes et des zones où la déformation est très faible, appelées "zones mortes". Une fois que la déformation se localise en bandes, la répartition de la déformation n'évoluera plus : la majeure partie de la déformation macroscopique va être absorbée par les bandes, augmentant ainsi l'amplitude de la déformation qui y règne et les zones dites "mortes" resteront à faible niveau de déformation.

Comme nous venons de le souligner, les microstructures à amas présentent une contrainte d'écoulement plus faible que les microstructures aléatoires, quel que soit le mode de chargement (pression hydrostatique pure ou cisaillement pur). Partant du principe que la proportion de bandes de localisation de la déformation influe sur la valeur de la contrainte d'écoulement, il est donc possible de proposer le postulat suivant :

Postulat 1 *Plus la zone de matrice à faible niveau de déformation est importante, plus la contrainte d'écoulement est faible.*

Une tentative de démonstration de ce postulat peut être menée en considérant le principe variationnel suivant, exprimant le potentiel de dissipation plastique macroscopique $\Pi(E)$ en fonction du potentiel de dissipation plastique microscopique $\pi(\varepsilon)$:

$$\Pi(E) = \inf_{v \in K(E)} \langle \pi(\varepsilon(v)) \rangle = \langle \pi(\varepsilon(u)) \rangle, \quad (3.26)$$

avec u , le champ de déplacement solution du problème de minimisation (3.26) et $K(E)$ l'ensemble des champs de déplacement cinématiquement admissibles avec des conditions aux limites données (dont le choix importe peu pour la présente étude). Dans le cas des matériaux en loi puissance, le potentiel de dissipation plastique s'écrit :

$$\pi(\varepsilon(u)) = \frac{\sigma_0 \varepsilon_0}{m+1} \left(\frac{\varepsilon_{eq}(u)}{\varepsilon_0} \right)^{m+1},$$

avec σ_0 la limite d'élasticité de la matrice, et m le paramètre d'écrouissage. Le potentiel de dissipation plastique est naturellement nul dans les pores. L'amplitude du potentiel de dissipation plastique dans les zones "mortes" est négligeable par rapport à l'amplitude de ce dernier dans les zones localisées, à cause du faible niveau de déformation qui y règne. L'équation (3.26) ne fait alors intervenir que le potentiel de dissipation plastique dans les bandes $\langle \pi(\varepsilon(u)) \rangle_{bande}$ en proportion

$$c_{\text{bande}} = \frac{V_{\text{bande}}}{V}, \text{ selon :}$$

$$\Pi(E) \simeq (1 - f)c_{\text{bande}} \langle \pi(\varepsilon(u)) \rangle_{\text{bande}}. \quad (3.27)$$

Ainsi, plus la proportion de bandes est importante, plus l'amplitude du potentiel de dissipation plastique est importante et donc plus la contrainte seuil est élevée.

Une méthode de prévision de la position de bandes de localisation, récemment proposée par Doumalin [30] et appliquée avec succès dans le cas des matériaux biphasés fer/argent, va être mise à profit sur certaines de nos microstructures périodiques dans le but de prévoir les zones susceptibles de favoriser la localisation de la déformation en bande.

3.4.2 Modèle de prévision des bandes de localisation

Nous avons mis en évidence l'apparition de bandes de localisation de la déformation dans les milieux poreux de manière quantitative. On constate que, dans le cas d'un chargement en cisaillement pur, l'orientation des bandes est directement liée au chargement macroscopique : la déformation se localise dans des bandes parallèles aux plans $x = 0$ et $y = 0$. Il est toutefois très difficile de définir l'orientation des bandes dans le cas d'un chargement purement hydrostatique.

Le principe de cette méthode est fondé sur l'hypothèse que l'orientation d'une bande est directement liée au chargement macroscopique appliqué sur le matériau et que la position de la bande est directement liée à la microstructure du matériau hétérogène. Ce modèle est basé sur le principe qu'une bande peut facilement s'établir si elle sollicite peu de matrice.

Cette méthode consiste à construire une carte donnant, en chaque point de la microstructure, la probabilité d'y trouver une déformation importante. Cette déformation sera d'autant plus importante en ce point que l'on pourra y faire passer facilement une bande de cisaillement. L'établissement d'une bande de cisaillement est d'autant plus facile qu'elle sollicite peu de matrice, c'est à dire qu'un plan contenant beaucoup de pores est plus facile à cisailier qu'un plan contenant beaucoup de matrice. Ainsi, pour un plan donné, plus la proportion de pores est élevée, plus la probabilité qu'une bande passe par ce point est élevée.

La technique utilisée pour prévoir l'apparition de bandes de localisation de la déformation consiste donc à faire passer, en chaque point de la microstructure, une droite faisant un certain angle avec l'horizontale ⁴ et à mesurer, sur cette droite, la proportion de "phase molle" (les pores) : il suffit de rechercher le chemin de plus faible résistance. La longueur de la droite utilisée correspond, dans notre cas, à la taille de l'image. Des longueurs de droites plus importantes ne modifient en rien le résultat obtenu.

Un exemple de prévision des bandes de localisation de la déformation est représenté sur les figures 3.24 et 3.25. Ces cartes font apparaître les chemins de plus faible résistance. On s'attend à ce que ces zones soient le lieux d'apparition des bandes de localisation. L'ensemble des points en "noir" sur les images 3.24b et 3.25b représentent les zones où la probabilité qu'une bande de localisation de la déformation s'y établisse est très faible. En revanche, les zones les plus "blanches" correspondent à la probabilité la plus élevée pour le passage d'une bande de localisation de la déformation. Un bon accord peut être observé entre les bandes de localisation obtenues par des calculs par T.F.R et le modèle de prévision de bande. Toutefois, les cartes des déformations équivalentes locales (Figures 3.24a et 3.25a) montrent que les bandes de localisation ne sont pas rigoureusement horizontales ou

⁴l'angle étant nul dans le cas d'un chargement en cisaillement pur et égale à 45° dans le cas d'une traction simple macroscopique.

verticales. En réalité, elles sont légèrement tortueuses. Ce phénomène n'est pas pris en compte par le modèle de prévision de bande de localisation.

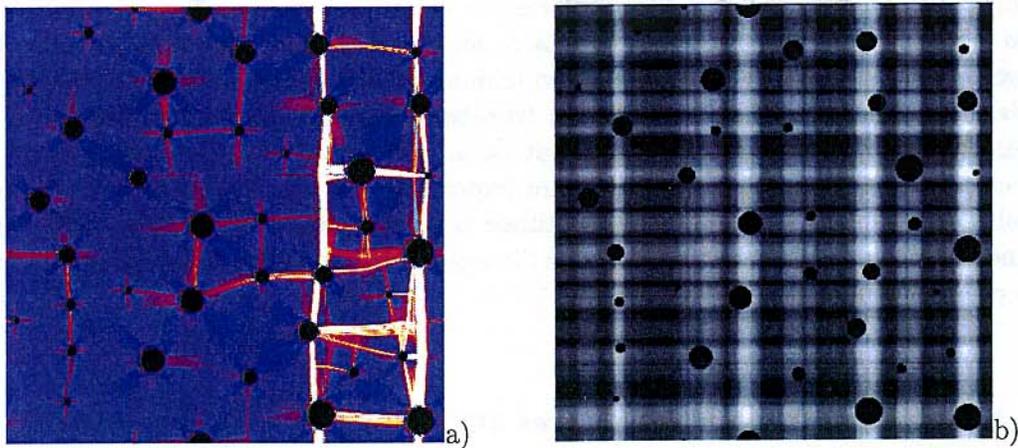


FIG. 3.24 – Détection des bandes de localisation dans une microstructure aléatoire a) Bandes de localisation de la déformation équivalente b) Modèle de prévision de bande

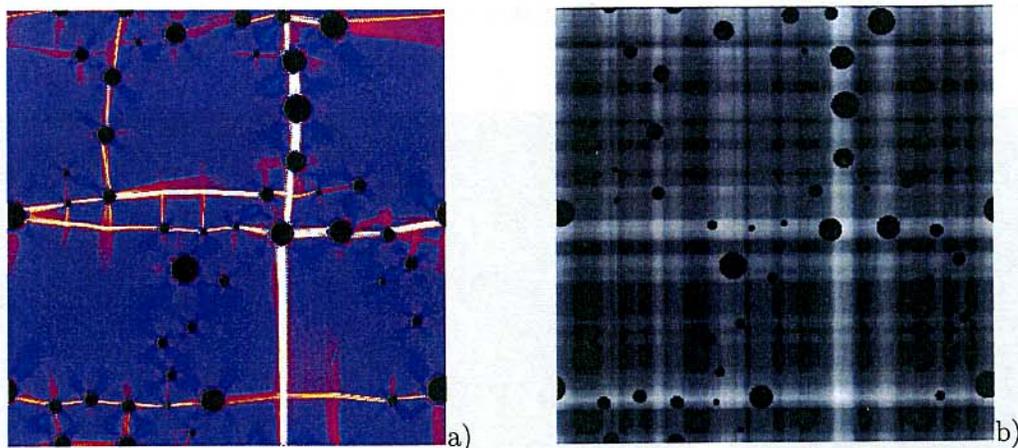


FIG. 3.25 – Détection des bandes de localisation dans une microstructure à amas connectés a) Bandes de localisation de la déformation équivalente b) Modèle de prévision de bande

A partir d'une carte de bandes de localisation de la déformation, est-il possible de déduire une estimation de la contrainte d'écoulement macroscopique du milieu hétérogène? Ceci revient à faire le chemin inverse à celui fait jusqu'à présent. A partir d'une carte de prévision de l'apparition de bandes de localisation de la déformation, est-il donc possible de déduire la contrainte d'écoulement macroscopique du milieu hétérogène? L'idée consisterait à construire par exemple des champs de déformation cinématiquement admissibles à partir des cartes de prévision de bandes de localisation de déformation. Ces derniers peuvent être obtenus par exemple en supposant qu'une bande de localisation de la déformation est le lieu de glissement entre deux corps rigide. Ce travail n'a pu être mené au cours de cette thèse mais fera l'objet de futurs travaux.

3.5 Surface d'écoulement des milieux poreux en 3D

Dans le cas 2D, les calculs par T.F.R. sur diverses morphologies de microstructure (aléatoires, à amas isolés et connectés) avec des tailles de cavités identiques et variables, ont permis de montrer l'effet de la répartition hétérogène des cavités en amas sur la contrainte d'écoulement. Dans cette partie, où les microstructures sont cette fois-ci tridimensionnelles, les objectifs visés sont similaires. Toutefois, nous étudierons en plus l'effet du troisième invariant des contraintes sur la surface de charge du matériau poreux. Le comportement de la matrice est élastique-parfaitement plastique. De tels calculs nécessitent un espace mémoire important et il est inconcevable de les mener avec une résolution d'images identique à celle utilisée pour les calculs 2D ($1215 \times 1215 \times 1215$ voxels). Ainsi, une étude sur l'effet de la résolution de l'image sur la contrainte écoulement sera menée pour certains chargements considérés.

3.5.1 Simulations de microstructures 3D

Afin de mettre en évidence l'effet de la répartition hétérogène de cavités en amas sur la contrainte d'écoulement, trois types de microstructures ont été générées : une microstructure aléatoire selon un schéma de type "cerise" (Figure 3.26a), une microstructure à amas isolés (Figure 3.26b) et une microstructure à amas connectés (Figure 3.26c). Chaque microstructure contient 39 cavités de forme sphérique et de taille identique. La fraction volumique macroscopique de chaque microstructure est de 0,6%. Cette porosité correspond à la porosité que nous avons obtenue par analyse d'images dans le chapitre 2.

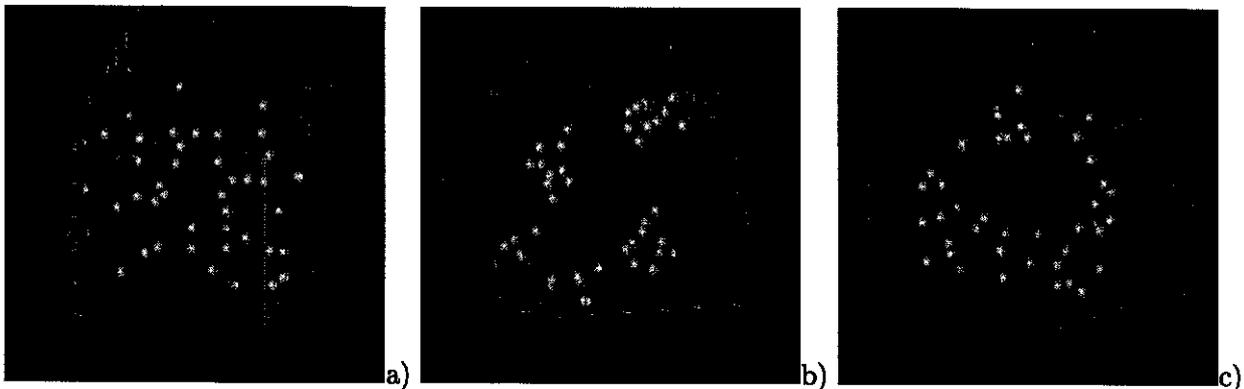


FIG. 3.26 – *Microstructures 3D avec une taille de trous identique $f = 0,6\%$ a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés*

Les microstructures à amas isolés et connectés sont obtenues respectivement par l'intersection et le complémentaire de l'intersection de deux schémas booléens de tailles caractéristiques différentes. Pour chaque situation morphologique, cinq microstructures sont générées.

Dans les simulations numériques qui vont suivre, le comportement de la matrice est supposé élastique parfaitement plastique, comme pour les simulations numériques 2D, dont la loi de comportement locale est donnée par l'expression (3.21). Les calculs sont menés dans le cadre de la théorie de la déformation et on rappelle que l'ajout d'une partie élastique n'a aucune influence sur la valeur de la contrainte d'écoulement.

3.5.2 Cas d'une triaxialité des contraintes infinie

Le premier cas de chargement que nous étudions est un chargement purement hydrostatique (3.28) qui conduit à une triaxialité des contraintes $\tau = \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}$ infinie :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & T & 0 \\ 0 & 0 & T \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

La valeur de la contrainte d'écoulement va être fortement influencée par la résolution de l'image. Pour étudier cette influence, des calculs par T.F.R. 3D ont été menés sur les microstructures aléatoires (Figure 3.27a), à amas isolés (Figure 3.27b) et à amas connectés (Figure 3.27c) pour trois gammes de résolution différentes : 32^3 , 64^3 et 128^3 voxels. L'influence de la résolution de l'image sur la contrainte d'écoulement est présentée sur les figures (3.27).

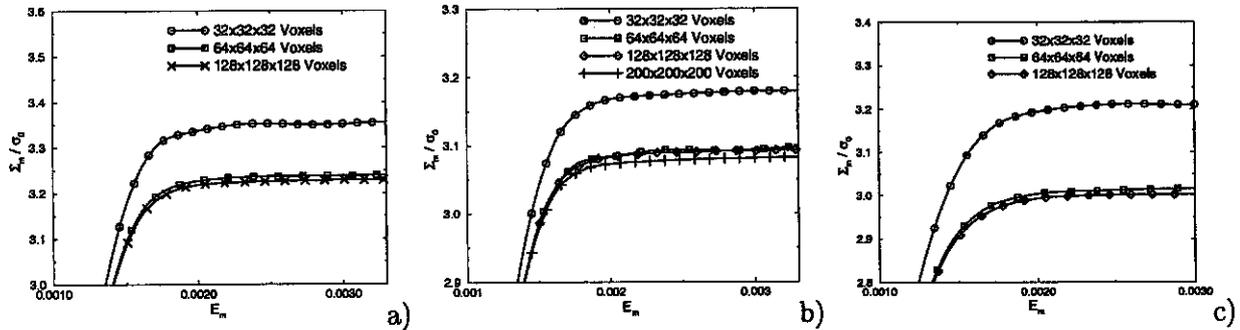


FIG. 3.27 – Effet de la résolution de l'image sur la contrainte d'écoulement a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

Quelle que soit la microstructure considérée, la valeur de la contrainte d'écoulement évolue très peu (moins de 0,5%) à partir d'une résolution d'image de 64^3 voxels. Dans le cas de microstructure 3D, une bonne estimation de la contrainte d'écoulement peut être obtenue pour une résolution d'image de 128^3 voxels. Cette constatation est intéressante, car au-delà 128^3 voxels de résolution, les temps de calcul sont prohibitifs (environ deux semaines de calculs pour une image de 200^3 voxels contre deux à trois jours de calculs pour une image de 128^3 voxels de résolution).

Dans le cas d'un chargement purement hydrostatique, la borne de Gurson s'écrit :

$$\frac{\Sigma_m}{\sigma_0} = \pm \frac{2}{3} \ln f, \quad (3.29)$$

et vaut, pour la valeur de porosité considérée :

$$\frac{\Sigma_m}{\sigma_0} = 3,41. \quad (3.30)$$

La figure (3.28) présente la valeur de la contrainte d'écoulement pour les trois microstructures présentées sur les figures (3.26), la résolution étant de 128^3 voxels pour chaque image. La contrainte d'écoulement de la microstructure aléatoire est plus souple que la borne de Gurson (3.30) ($\approx 5\%$ d'écart). De la même manière, les microstructures à amas isolés présentent une contrainte d'écoulement plus faible que les microstructures aléatoires et plus élevée que les microstructures à amas

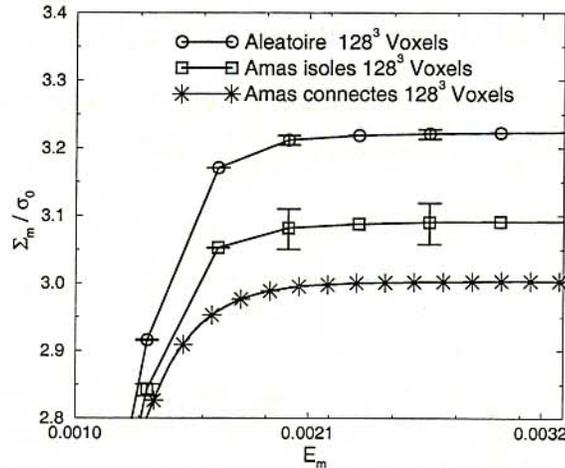


FIG. 3.28 – *Effet d'amas sur la contrainte d'écoulement. Image de 128^3 voxels de résolution. Chargement purement hydrostatique*

connectés. Comme pour le cas 2D, ces derniers conduisent à un écoulement précoce. L'écart relatif entre la borne de Gurson et les microstructures à amas connectés est d'environ 12%. Cet écart est moins important que celui obtenu dans le cas 2D (environ 50 %), différence qui s'explique par une plus faible teneur en vide pour les calculs par T.F.R. 3D que pour les calculs 2D. Les fluctuations des contraintes d'écoulement pour chaque morphologie sont plus faibles pour les microstructures aléatoires que pour les microstructures à amas. Ceci s'explique par le fait que le domaine de simulation utilisé pour les microstructures à amas isolés et connectés n'est pas assez grand. Ainsi, une petite perturbation des paramètres microstructuraux telle que la distance entre les trous ou la distance entre les amas entraîne une fluctuation de la contrainte d'écoulement, fluctuation qui est plus faible que dans le cas 2D en raison de la teneur plus faible en trous.

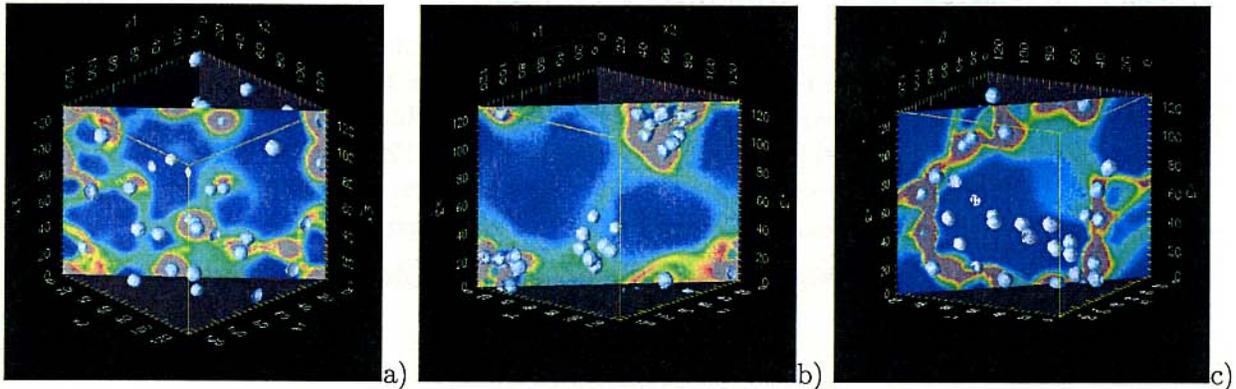


FIG. 3.29 – *Cartes des déformations équivalentes locales sur une coupe de la microstructure. Résolution des images : 128^3 voxels. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés*

Comme pour le cas 2D, la déformation équivalente locale tend à se localiser en bandes (Figures 3.29), zones où la déformation est très intense. Dans les microstructures à amas isolés, la déformation se localise principalement dans les amas alors que dans les microstructures à amas connectés, la déformation se localise principalement dans les “chemins de trous” reliant les amas entre eux. Dans les microstructures aléatoires, la déformation est également plus diffuse.

3.5.3 Cas d'une triaxialité des contraintes nulle

Le deuxième cas de chargement que nous allons étudier est celui qui correspond à une triaxialité des contraintes macroscopiques nulle. Plusieurs chargements sont envisageables; dans cette étude nous nous limiterons aux deux chargements suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Sigma = \begin{pmatrix} T & \gamma & 0 \\ \gamma & T & 0 \\ 0 & 0 & T \end{pmatrix} : \text{Chargement 1} \\ \Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{pmatrix} : \text{Chargement 2.} \end{array} \right. \quad (3.31)$$

Pour obtenir une triaxialité des contraintes macroscopiques nulle, il convient de prendre le jeu de paramètres suivant :

$$\begin{aligned} T = 0, \gamma \neq 0 \text{ pour le Chargement 1 (3.31a)} &\rightarrow \det \Sigma = 0, \\ S = -\frac{1}{2}T, T \neq 0 \text{ pour le Chargement 2 (3.31b)} &\rightarrow \det \Sigma = \frac{T^3}{4} \end{aligned}$$

$\det \Sigma$ représente le déterminant des contraintes macroscopiques (troisième invariant), ce dernier variant d'un chargement à l'autre.

Comme dans le cas d'un chargement purement hydrostatique, la résolution de l'image peut fortement influencer la valeur de la contrainte d'écoulement. La figure 3.30 présente l'influence de la résolution de l'image sur la valeur de la contrainte d'écoulement pour les deux chargements considérés (3.31a et 3.31b).

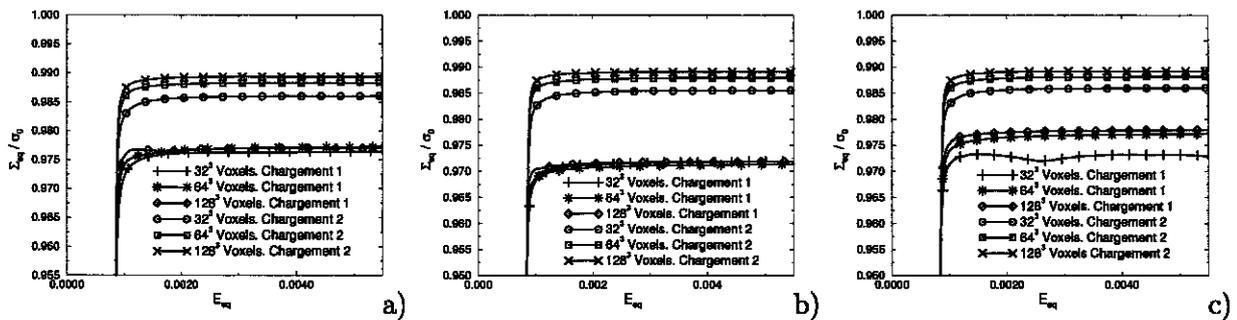


FIG. 3.30 – Effet de la résolution de l'image sur la contrainte d'écoulement a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

Dans le cas du chargement 1, la résolution de l'image a une très faible influence sur la valeur de la contrainte d'écoulement : l'écart relatif sur la contrainte d'écoulement entre les différentes résolutions est très faible. La valeur de la contrainte d'écoulement est un peu plus sensible à la résolution de l'image dans le cas du chargement 2, mais l'écart relatif sur la contrainte d'écoulement entre une résolution de 64^3 voxels et 128^3 voxels reste toutefois très faible ($\approx 0,15\%$).

Dans le cas du chargement axisymétrique (Chargement 2) la contrainte d'écoulement n'est que très faiblement sensible à la morphologie de la microstructure (Figure 3.31). Les contraintes d'écoulement obtenues sont très proches de la borne de Hashin-Shtrikman, dont l'expression analytique est définie

comme suit :

$$\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0} = \frac{1-f}{\sqrt{1+\frac{2}{3}f}} \quad (3.32)$$

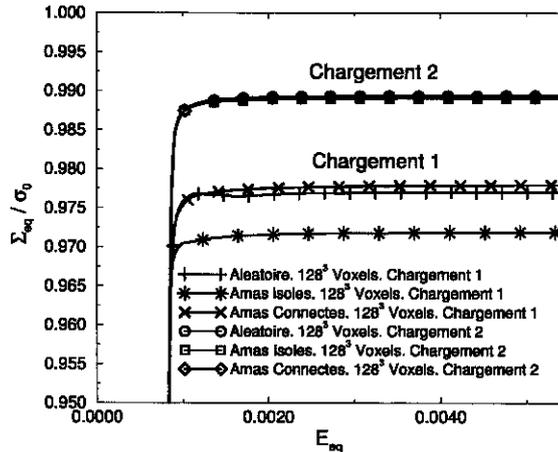


FIG. 3.31 – Effet des amas sur la contrainte d'écoulement. Triaxialité nulle : chargement 1 et 2. Résolution de l'image : 128^3 voxels

Les contraintes d'écoulement obtenues à partir du chargement 1 sont plus faibles que celles obtenues avec le chargement 2 : la composante de cisaillement a tendance à assouplir la réponse du matériau. Ce résultat est similaire à celui obtenu en 2D. Les deux types de chargement considérés (3.31a et 3.31b) ne donnent pas la même réponse sous une même triaxialité macroscopique fixée. Les contraintes d'écoulement dépendent donc du troisième invariant des contraintes, dépendance qui n'est pas très significative en raison de la faible fraction volumique des microstructures utilisée dans cette étude. Notons que Suquet et Ponte Castañeda [86] ont montré, par des développements au second ordre, dans le cas de matériaux non linéaires hétérogènes présentant un faible contraste entre les phases, que le comportement macroscopique de tels matériaux dépendait du troisième invariant de la déformation macroscopique. Nous aboutissons à une conclusion similaire mais pour un contraste infini entre les phases.

La figure (3.32) montre une représentation 3D des déformations équivalentes locales obtenues sous une sollicitation macroscopique suivant le chargement 1 (3.31a). Les plans de localisation sont plus nombreux dans le cas de la microstructure aléatoire que pour les microstructures à amas. La déformation équivalente locale tend à se localiser dans des plans verticaux : l'orientation de ces plans est directement liée à l'orientation du chargement macroscopique. La surface de ces plans n'est pas rigoureusement plane en raison de la présence de cavités dans un voisinage très proche.

Dans le cas 2D, un critère simple d'apparition de bande de localisation de la déformation a été utilisé. Celui-ci repose sur les hypothèses que l'orientation des bandes de localisation est directement liée au chargement macroscopique et que leur position dépend uniquement de la configuration locale des cavités. Un tel critère pourrait être étendu au cas 3D afin d'établir les zones dans la microstructure qui sont le plus propices au passage d'une bande de localisation. Nous n'avons pas eu le temps de mener à bien cette étude.

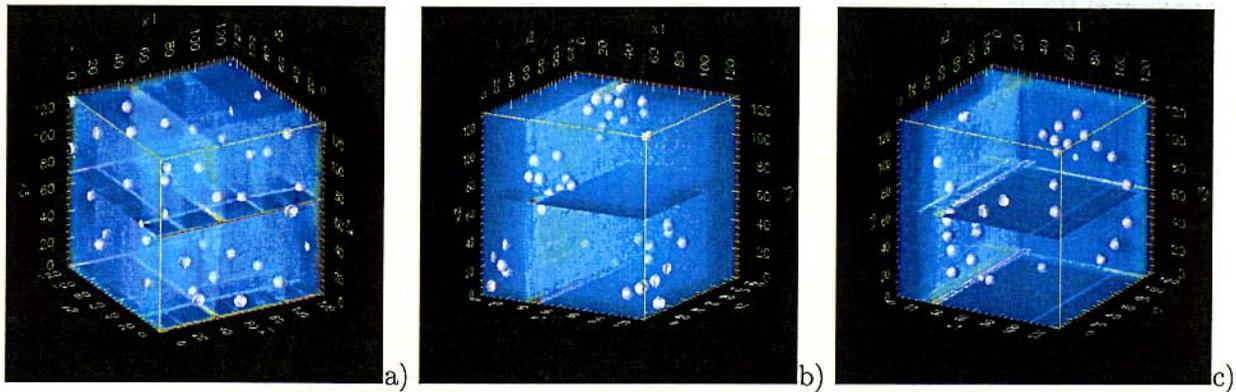


FIG. 3.32 – Cartes des déformations équivalentes locales. Résolution des images : 128^3 voxels. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

3.5.4 Surface d'écoulement 3D

Les contraintes d'écoulement obtenues par des calculs par T.F.R. 3D sur des microstructures aléatoires et à amas isolés et connectés sont, pour des triaxialités macroscopiques nulles et infinies, plus faibles que la borne de Gurson. Ceci est dû à une meilleure description de l'apparition de bandes de localisation de la déformation par les calculs numériques. Un effet du troisième invariant des contraintes a pu être mis en évidence dans le cas d'une triaxialité nulle. Nous allons maintenant considérer différents taux de triaxialité compris dans l'intervalle $[0, \infty[$ afin de tracer la surface de charge de chaque type de microstructure et de les comparer à celle de Gurson et de ses différentes extensions.

La prise en compte des interactions entre cavités a été étudiée au travers d'une démarche micro-mécanique par Michel et Suquet [61]. En considérant le cas d'une cavité sphérique entourée d'une coquille de matrice sphérique et poreuse, soumise à un chargement purement hydrostatique, ces auteurs aboutissent, selon une approche auto-cohérente, à l'expression du critère de plasticité suivant :

$$\left(1 + \frac{2}{3}f\right) \left[\left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + \frac{9}{4}C \left(\frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right)^2 \right] \leq (1-f)^2, \quad (3.33)$$

la constante C étant déterminée par l'équation non linéaire suivante :

$$\sqrt{C} \ln f - \arctan \sqrt{C} + \frac{\pi}{2} = 0.$$

Le critère (3.33) retrouve en cisaillement la borne de Hashin-Shtrikman, mais est plus souple que la borne de Gurson pour les fortes triaxialités.

La recherche de la surface d'écoulement des milieux poreux par l'approche par T.F.R. 3D suit la même démarche que celle exposée dans le cas 2D dans le paragraphe 3.3.5.

Les surfaces d'écoulement obtenues par des calculs par T.F.R. 3D sur des microstructures aléatoires et à amas isolés et connectés sont plus "souples" que la borne de Gurson pour toutes les valeurs de triaxialité des contraintes (Figure 3.33a) et ceci quel que soit le chargement considéré. Notons également que à la différence des milieux poreux 2D, la surface de charge ne coupe pas l'axe des pressions hydrostatiques avec une pente finie mais avec une pente infinie. Plus on s'éloigne d'une microstructure décrite par un assemblage de sphères de type Hashin, plus on abaisse la contrainte d'écoulement. Notons que d'un point de vue analytique, Suquet [85] a récemment montré que de

petites fluctuations des porosités locales ont tendances à rendre la surface de charge plus "souple" que celle de Gurson.

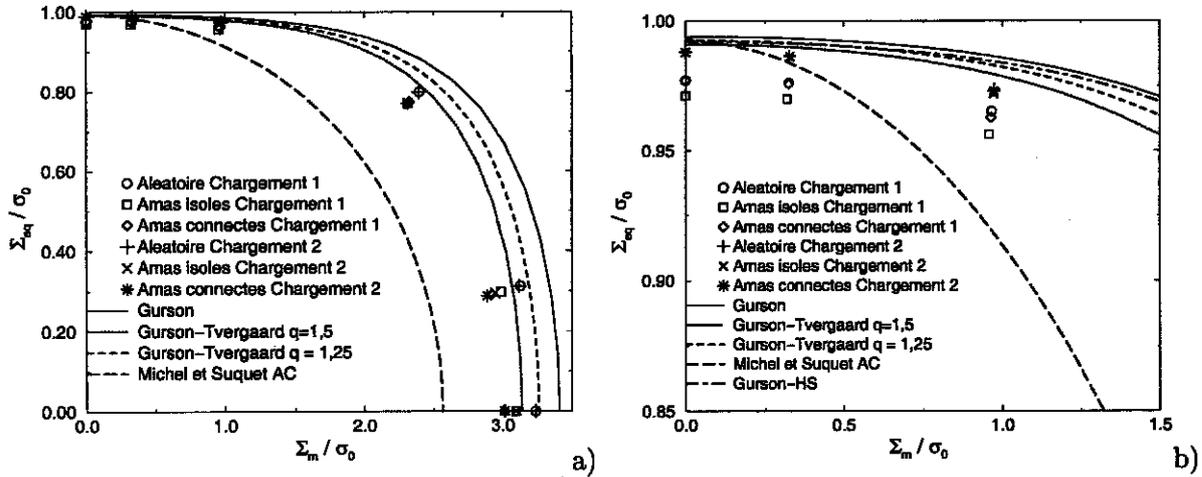


FIG. 3.33 – Surface d'écoulement des milieux poreux 3D. a) Comparaison entre les calculs par T.F.R. 3D et les modèles de Gurson, Gurson-Tvergaard et l'estimation AC de Michel-Suquet. Résolution des images 64^3 voxels b) Zoom sur les faibles triaxialités

La figure 3.33 montre que le troisième invariant des contraintes macroscopiques a une influence sur la surface d'écoulement. Mais cette influence tend à s'atténuer en fonction de l'augmentation de la triaxialité des contraintes. Comme pour les milieux poreux 2D, le chargement 1 rend la surface d'écoulement plus "souple" que celle obtenue à partir du chargement 2 : l'introduction d'une composante de cisaillement dans un des plans tend à assouplir la réponse du matériau. L'effet du troisième invariant des contraintes a été montré par Richelsen et Tvergaard [77] [78] par des calculs par éléments finis périodiques 3D sur un cube contenant en son centre une cavité sphérique. Le chargement considéré par ces auteurs est de la forme :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_3 \end{pmatrix} \text{ avec } \begin{cases} \Sigma_2 = \alpha \Sigma_1 \\ \Sigma_3 = \beta \Sigma_1 \end{cases}$$

Pour une triaxialité des contraintes fixée, le déterminant des contraintes $\det \Sigma$ varie en fonction des variations des paramètres α et β selon :

$$\det \Sigma = \alpha \beta \Sigma_1^3.$$

Les surfaces d'écoulement obtenues par ces auteurs sont également plus "souples" que celle de Gurson. Dans le cas d'un chargement axisymétrique, nos simulations numériques montrent que la surface d'écoulement de la microstructure aléatoire est à la fois très proche de l'estimation de Gurson-Tvergaard et de la borne de Hashin-Shtrikman (Figure 3.33b). Les microstructures à amas ne s'éloignent de cette estimation que pour des fortes valeurs de triaxialité. Pour les faibles triaxialités, les surfaces d'écoulement obtenues sur chaque microstructure diffèrent peu : la morphologie de la microstructure influe peu sur la valeur de la contrainte d'écoulement.

3.6 Effet d'amas sur la rupture fragile

Après avoir concentré nos efforts sur l'étude de l'effet des amas sur la surface de charge des milieux poreux en 2D et 3D, nous allons maintenant mener une étude pour comprendre l'effet de ces derniers sur la rupture fragile. Celle-ci est abordée au travers du critère de Beremin [6], appliqué à partir des champs locaux issus des calculs par T.F.R. 2D et 3D.

3.6.1 Critère de Beremin : principe d'application

On rappelle que le critère de Beremin [6] constitue une approche probabiliste de la rupture fragile, basée sur l'hypothèse du maillon faible. Pour un état de chargement donné, il donne une probabilité de rupture P_R de la structure définie selon :

$$\begin{cases} P_R = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right] \\ \sigma_w = \left(\int_{V_p} \sigma_I^m \frac{dV}{V_0} \right)^{\frac{1}{m}}, \end{cases} \quad (3.34)$$

V_p représentant le volume plastifié. Il est supposé que la plastification favorise le déclenchement du clivage. La contrainte principale maximale positive σ_I est nulle dans les zones qui n'ont pas été plastifiées. Les paramètres de Weibull m et σ_u sont gardés identiques quelle que soit la température de l'acier considérée.

L'étude de l'effet d'amas sur la rupture fragile est menée en appliquant le critère de Beremin à partir des champs locaux issus des calculs par T.F.R. 2D ou 3D. Les microstructures sont représentées par des images formées d'un quadrillage régulier de pixels (2D) ou de voxels (3D) de taille identique. Le volume V_p peut donc se décomposer en une somme de volumes élémentaires de taille finie selon : $V_p = n_p V_{pix}$; n_p étant le nombre de pixels ou de voxels qui ont été plastifiés dans l'image de volume V_{pix} et contenant n pixels ou voxels. Afin de ne pas tenir compte du volume des pixels on préférera évaluer l'effet de la répartition hétérogène des trous en amas sur la contrainte de Weibull σ_w normalisé par une contrainte de Weibull dite de référence, notée σ_w^{ref} , calculée sur une microstructure homogène de même taille que la microstructure hétérogène, i.e., contenant le même nombre de pixels :

$$\frac{\sigma_w}{\sigma_w^{ref}} = \frac{\left(\sum_{i=1}^{n_p} \sigma_I^m \right)^{\frac{1}{m}}_{\text{Hétérogène}}}{\left(\sum_{i=1}^{n_p} \sigma_I^m \right)^{\frac{1}{m}}_{\text{Homogène}}} \quad (3.35)$$

Cette normalisation présente également l'avantage de ne pas tenir compte des paramètres V_0 et σ_u dans les simulations, seul le paramètre m étant utilisé. Nous choisissons de prendre $m = 20$, paramètre de Weibull caractéristique de la rupture fragile. Ce paramètre reste identique quelle que soit la température envisagée. Dans les simulations numériques 2D et 3D, la température est prise en compte au travers des seules courbes de traction obtenues expérimentalement et qui sont disponibles dans [75]. La normalisation (3.35) permettra de mettre en évidence l'influence de la présence de

défauts dans le matériau sur la rupture fragile : les défauts ont-ils tendance à fragiliser le matériau ? L'application du critère de Beremin à partir de la contrainte principale maximale macroscopique négligerait les fluctuations des champs locaux dues à la présence de défauts, fluctuations qui peuvent s'avérer importantes pour le déclenchement du clivage.

Il reste encore à aborder la question de la contrainte principale utilisée pour calculer la contrainte de Weibull σ_w : pour un point donné, est-ce la contrainte principale maximale calculée à chaque étape de chargement ou est-ce la contrainte principale maximale sur l'ensemble de l'histoire du chargement ? Dans un calcul numérique même monotone, les composantes du tenseur des contraintes locales peuvent fluctuer d'un état de chargement à l'autre. Cette fluctuation, qui résulte d'un déchargement local, induit une fluctuation de la contrainte principale maximale positive σ_I et, de fait, de la contrainte de Weibull. Pour faire abstraction de ces fluctuations, on définit une contrainte principale effective $\tilde{\sigma}_I$ [54] tel que :

$$\tilde{\sigma}_I(t) = \max_{u \leq t} \sigma_I(u), \quad (3.36)$$

où t est le paramètre de temps assimilé dans notre étude à un paramètre de chargement. Pour chaque pixel, il convient donc de déterminer la contrainte principale maximale positive parmi tous les états de chargement antérieurs à l'état de chargement actuel.

La procédure utilisée en 2D et 3D pour l'application du critère de Beremin à partir des tenseurs des contraintes locales définis en chaque pixel de l'image est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Étape de chargement } i \\ a) \text{ Calcul des champs locaux de contraintes par la méthode de T.F.R.} \\ \text{(Version Lagrangien augmenté)} \\ b) \text{ Pour chaque pixel de l'image :} \\ \quad b.1) \text{ Le pixel est-il plastifié ?} \\ \quad \quad \text{Oui : étape suivante} \\ \quad \quad \text{Non : retour à b (Pixel suivant)} \\ \quad b.2) \text{ Calcul de la contrainte principale maximale positive} \\ \quad b.3) \text{ Application du test 3.36 et retour à b} \\ c) \text{ Calcul de la contrainte de Weibull. Nouvelle étape de chargement...} \end{array} \right. \quad (3.37)$$

Pour chaque étape de chargement, une fois que l'algorithme d'Uzawa (3.16) a convergé, nous avons accès aux tenseurs des contraintes et des déformations en chaque pixel de l'image. Il est alors possible d'en déduire, au travers de la résolution de l'équation non linéaire suivante, la contrainte principale maximale positive, pour tous les pixels :

$$P(\lambda) = -\lambda^3 + \text{Tr}\sigma\lambda^2 + \frac{1}{2} [\text{Tr}(\sigma^2) - (\text{Tr}\sigma)^2] \lambda + \det\sigma = 0. \quad (3.38)$$

La résolution de cette équation non linéaire se fait par l'utilisation de la méthode de Newton dont le processus itératif est donné par

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_0 \text{ donné} \\ \lambda_{n+1} = \lambda_n - \frac{P(\lambda_n)}{P'(\lambda_n)}. \end{array} \right.$$

Cet algorithme ne donne accès qu'à l'une des trois contraintes principales. Les deux autres résultent de la résolution de l'équation du second degré suivante, en notant λ_1 la solution de l'équation non linéaire précédente :

$$P(\lambda) = (\lambda - \lambda_1) (-\lambda^2 + A\lambda + B) \quad (3.39)$$

avec :

$$\begin{cases} A = \text{Tr}\sigma - \lambda_1 \\ B = -\frac{\det\sigma}{\lambda_1} \end{cases}$$

Il faut également s'assurer que la contrainte principale maximale est positive; elle n'a de sens que si elle est calculée sur une zone de matrice plastifiée.

3.6.2 Application de critère de Beremin en 2D

Afin d'évaluer l'effet d'une répartition hétérogène de trous cylindriques en amas sur la rupture fragile, différentes situations morphologiques sont considérées : des microstructures aléatoires (Figure 3.10a), à amas isolés (Figure 3.11a) et connectés (Figure 3.12a) et uniquement à taille de cavités identique. Le code de calcul par T.F.R. 2D ne prenant pas en compte l'écroutissage de la matrice, la matrice est supposée avoir un comportement élastique-parfaitement plastique. Plus précisément, le comportement de la matrice est celui de l'acier de cuve déterminé expérimentalement [75] mais sans l'écroutissage. Nous rappelons les différentes propriétés mécaniques de la matrice pour différentes températures :

T	E (MPa)	ν	σ_0 (MPa)
-150°C	200000	0,3	772
-90°C	200000	0,3	660
0°C	200000	0,3	520

TAB. 3.1 – Caractéristiques mécaniques de l'acier pour différentes températures

Le chargement que nous considérons est un chargement axisymétrique de la forme :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & T \end{pmatrix}; \quad (3.40)$$

chargement identique à celui utilisé dans les parties précédentes. Dans les simulations numériques, la résolution des images est de 1215×1215 pixels et les calculs sont menés sur quatre microstructures par morphologie pour une triaxialité des contraintes τ_{2d} fixée. A partir du tenseur des contraintes macroscopiques (3.40), une relation entre τ_{2d} , T et S est définie comme suit :

$$\begin{cases} \tau_{2d} = \frac{\Sigma_{\alpha\alpha}}{2\Sigma_{eq}} \text{ pour } \alpha = 1, 2 \\ S = \frac{1 + 2\nu\tau_{2d}}{2\nu\tau_{2d} - 1} T \text{ avec } \nu = \text{sign}(S - T) \end{cases} \quad (3.41)$$

Considérons dans un premier temps le cas d'une triaxialité des contraintes τ_{2d} égale à $\frac{1}{3}$. Pour un tel chargement, le jeu de paramètres T et S considéré est : $T = 1$ et $S = -0,2$ et correspond à une traction dans une des directions du plan transverse (selon x_1) et dans le sens des fibres (selon x_3) et, à une compression dans la direction perpendiculaire du plan transverse (selon x_2).

L'évolution de la contrainte de Weibull normalisée $\frac{\sigma_w^{ref}}{\sigma_w}$ (3.35) en fonction de la déformation macroscopique de von Mises E_{eq} est représentée sur la figure 3.34a. Celle-ci est calculée sur des microstructures aléatoires (Figure 3.10) et à amas isolés (Figure 3.11) et connectés (Figure 3.12), à taille

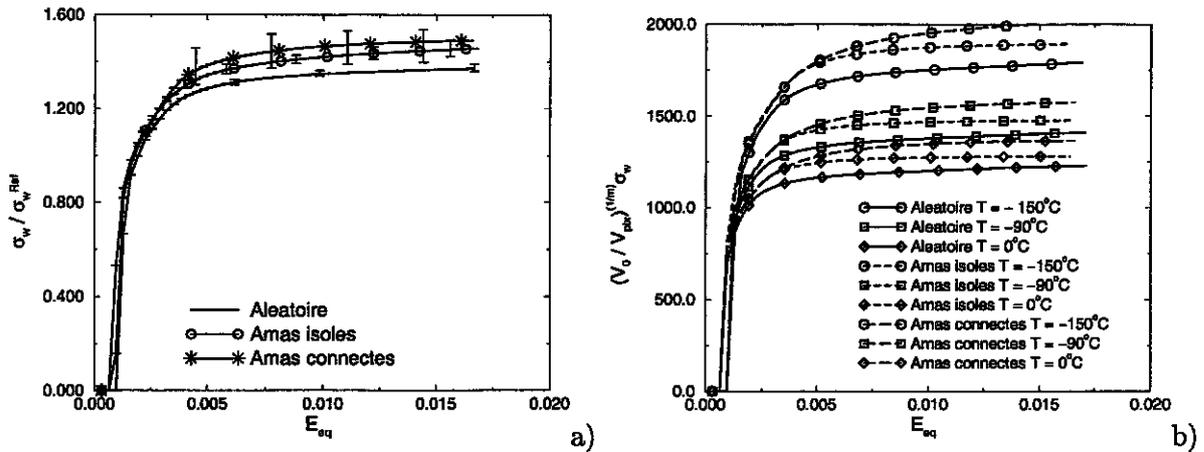


FIG. 3.34 – Cas d'une triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$ a) Effet d'amas sur la contrainte de Weibull normalisée b) Effet de la température sur l'évolution de la contrainte de Weibull

de cavité identique et en considérant quatre configurations par morphologie. Les microstructures aléatoires ont une contrainte de Weibull normalisée plus faible que les microstructures à amas. Cette constatation se traduit sur la probabilité de rupture de Beremin de la manière suivante : pour un état de chargement donné (par exemple pour une valeur de E_{eq} fixée) la probabilité de rupture d'une microstructure aléatoire est plus faible que celle obtenue sur une microstructure à amas isolés et connectés. De même, les microstructures à amas connectés ont une probabilité de rupture plus élevée, pour un chargement donné, que les microstructures à amas isolés. On se retrouve dans la même configuration que pour les surfaces d'écoulement : le regroupement de cavités cylindriques en amas connectés constitue la situation la plus critique en terme de rupture fragile et ductile.

Comme pour les contraintes d'écoulement, les fluctuations de la contrainte de Weibull normalisée, pour une même morphologie, sont moins importantes pour les microstructures aléatoires que pour les microstructures à amas. Un V.E.R. de taille plus grande tendrait à faire diminuer ces fluctuations. On peut également noter un effet de la température sur la contrainte de Weibull (Figure 3.34b) : plus la température augmente, plus la contrainte de Weibull diminue. Cette diminution induit une diminution de la probabilité de rupture de Beremin. Ainsi la fragilité du matériau tend à diminuer avec l'augmentation de la température.

Notons également que, quelle que soit la microstructure considérée, la contrainte de Weibull normalisée est supérieure à 1. Ainsi, l'application du critère de Beremin à partir des champs locaux permet une meilleure prise en compte des fluctuations de ces derniers qui se traduit par une augmentation, pour un état de chargement donné, de la probabilité de rupture.

Les figures 3.35 présentent les cartes des contraintes principales maximales obtenues sur des microstructures aléatoires et à amas, isolés et connectés. On constate que, dans les microstructures aléatoires, l'amplitude des contraintes principales maximales est très élevée au voisinage des cavités avec quelques interactions entre cavités voisines. En revanche, dans les microstructures à amas isolés et connectés, les contraintes principales maximales sont très intenses respectivement au sein des amas et dans les connections entre amas. Les zones en noir sur la figure 3.35c correspondent aux zones de matrice qui n'ont pas été plastifiées (Figure 3.36c). La valeur des contraintes principales maximales est naturellement nulle dans ces zones puisque cette dernière n'a de sens que si elle est calculée sur des zones de matrice plastifiées.

Sur ces cartes des contraintes principales maximales, les zones en blanc représentent les valeurs de

σ_I qui sont supérieures à 1100 MPa; dans les zones en rouge $\sigma_I = 950$ MPa et dans les zones vertes, $\sigma_I = 800$ MPa. Les zones blanches sont plus importantes pour les microstructures à amas isolés et connectés que pour les microstructures aléatoires.

Les cartes des contraintes de Mises locales (Figure 3.36) montrent que, dans certains cas, toute la matrice n'a pas été plastifiée comme illustré sur la figure 3.36c. Il existe de faibles zones au voisinage des amas où la contrainte de Mises locale reste inférieure à la limite d'élasticité de la matrice (les zones en rouge sur la figure 3.36c). Ce phénomène n'est pas propre à la morphologie de la microstructure : il est également observé sur des microstructures aléatoires et à amas isolés.

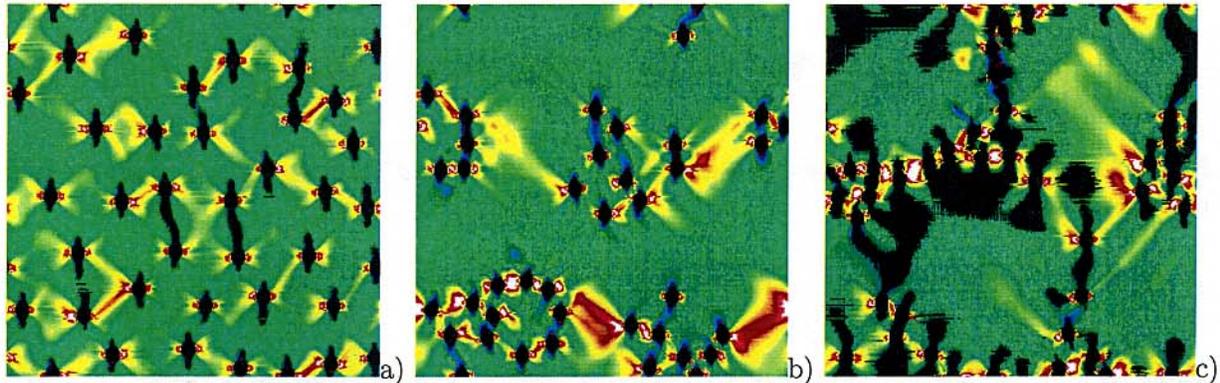


FIG. 3.35 – Cartes des contraintes principales maximales. Cas d'une triaxialité des contraintes $\tau_{2d} = \frac{1}{3}$, $T = -0.2$, $S = 1$. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

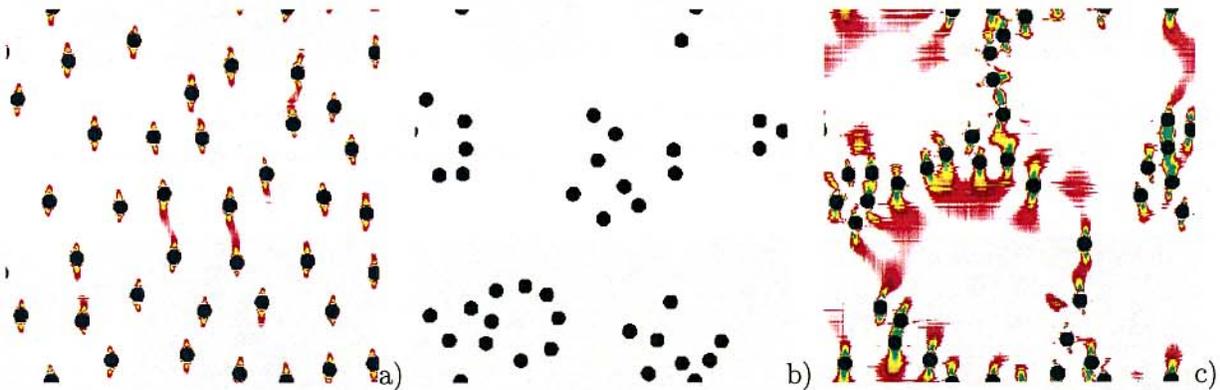


FIG. 3.36 – Cartes des contraintes de Mises locales. Cas d'une triaxialité des contraintes $\tau_{2d} = \frac{1}{3}$, $T = -0.2$, $S = 1$. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

Une étude similaire est menée dans le cas d'une triaxialité des contraintes $\tau_{2d} = 2,2$ pour laquelle $S = 1$ et $T = 0,6296$. L'évolution de la contrainte de Weibull normalisée est reportée sur la figure (3.37). L'augmentation de la triaxialité des contraintes tend à augmenter considérablement la probabilité de rupture du matériau pour une sollicitation donnée. En revanche, pour cette triaxialité des contraintes, les microstructures aléatoires possèdent une contrainte de Weibull normalisée supérieure aux microstructures à amas. C'est la tendance inverse de celle observée pour une triaxialité $\tau_{2d} = \frac{1}{3}$. Pour tenter de comprendre cet inversement de tendance étudions plus en détail les cartes des champs locaux de contrainte.

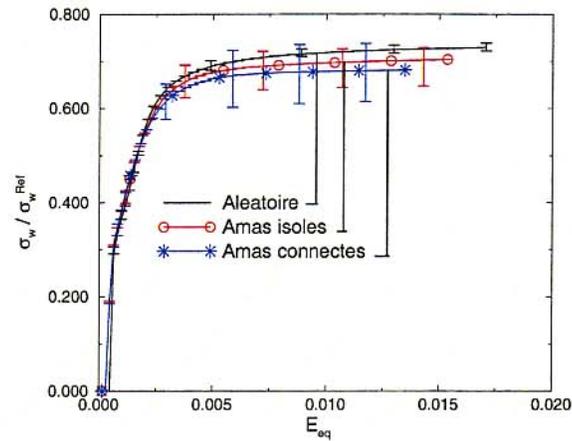


FIG. 3.37 – Cas d'une triaxialité des contraintes $\tau = 2, 2$. Effet d'amas sur la contrainte de Weibull normalisée

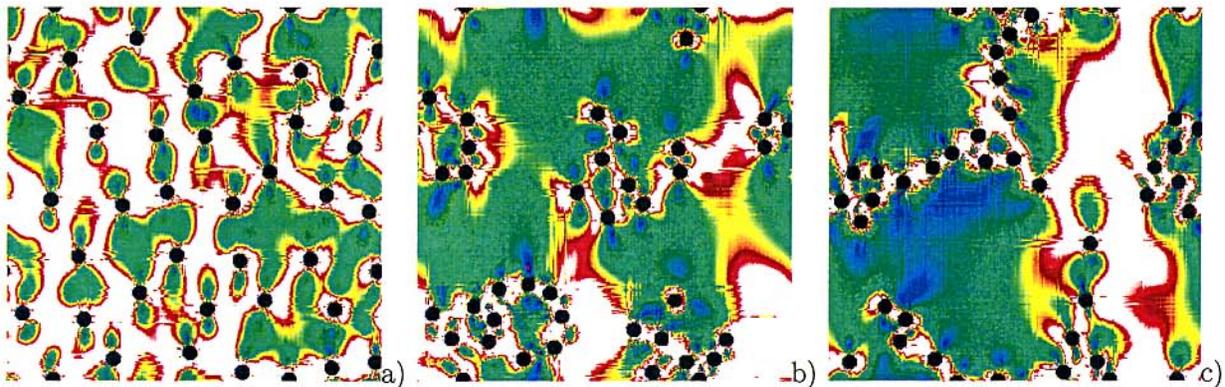


FIG. 3.38 – Cartes des contraintes de von Mises locales. Cas d'une triaxialité des contraintes $\tau_{2d} = 2, 2$, $T=0,6296$, $S=1$. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

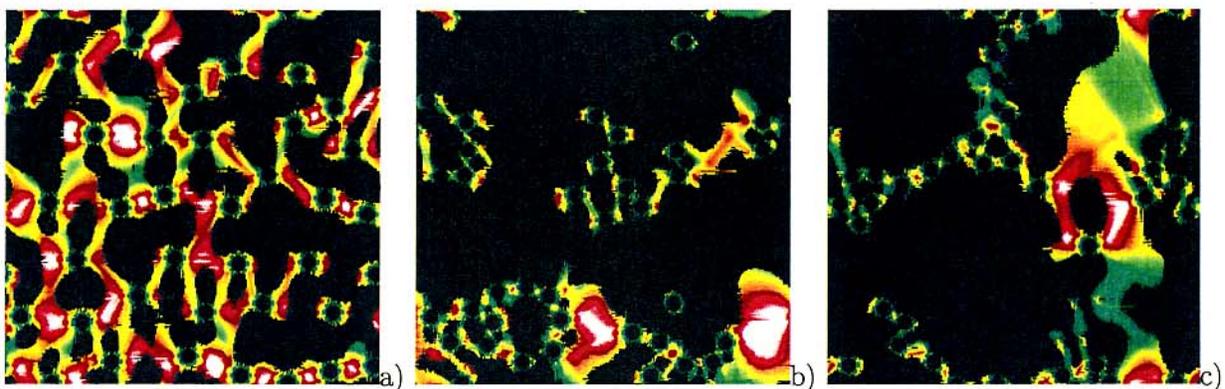


FIG. 3.39 – Cartes des contraintes principales maximales. Cas d'une triaxialité des contraintes $\tau_{2d} = 2, 2$, $T=0,6296$, $S=1$. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

Les cartes des contraintes principales maximales et des contraintes de Mises sont présentées sur les

figures 3.39 et 3.38 respectivement. Pour un tel chargement, on constate que toute la matrice n'a pas été plastifiée comme l'illustrent les figures 3.38 : les zones blanches correspondent aux zones où la matrice a été plastifiée. Les zones plastifiées sont plus limitées que dans le cas d'une triaxialité des contraintes $\tau_{2d} = \frac{1}{3}$ (Figures 3.36). Ceci induit que les zones, où la contrainte principale maximale, est non nulle sont moins importantes que dans le cas d'une triaxialité $\tau_{2d} = \frac{1}{3}$ (Figure 3.39). Les zones plastiques se localisent principalement au sein des amas isolés ou dans les connections entre amas pour les microstructures à amas isolés et connectés respectivement. Alors que dans les microstructures aléatoires une plus grande partie de la matrice a été plastifiée.

Pour une morphologie donnée, la proportion de matrice plastifiée peut varier d'une microstructure à l'autre. Plus la proportion de matrice plastifiée est faible, plus la zone où les contraintes principales maximales sont non nulles est faible. La figure (Figure 3.39) présente les cartes des contraintes principales maximales obtenues sur des microstructures aléatoires et à amas, isolés et connectés. Les zones en blanc correspondent aux zones où les contraintes principales maximales ont une amplitude supérieure à 1800MPa.

Toutefois les zones où la contrainte principale positive est non nulle, sont très faibles, notamment pour les microstructures à amas. Ceci peut, peut-être, expliquer le fait que, pour cette triaxialité des contraintes, les microstructures à amas possèdent une contrainte de Weibull normalisée plus faible que les microstructures aléatoires. Un autre chargement pourra peut-être inverser la tendance.

3.6.3 Application du critère de Beremin en 3D

Après avoir étudié l'influence de l'effet de la répartition hétérogène des défauts en amas sur la rupture fragile dans le cas 2D, il convient maintenant de faire une étude similaire dans le cas 3D. La procédure d'application du critère de Beremin est similaire à celle utilisée dans le cas 2D. La seule différence réside dans la prise en compte de l'écrouissage de la matrice. En effet, on rappelle que dans le cas 2D les calculs ont été effectués dans le cas d'un comportement élastique-parfaitement plastique de la matrice.

Les calculs par T.F.R. 3D sont également menés sur des microstructures de morphologies diverses mais de fraction volumique plus faible, soit $f = 0,6\%$ avec une résolution de 64^3 voxels. Le chargement que nous considérons dans cette étude est un chargement axisymétrique de la forme :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Deux triaxialités des contraintes sont considérées dans cette étude : une triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$ pour laquelle $T \neq 0$ et $S = 0$ et une triaxialité des contraintes $\tau = 2,2$ suivant laquelle $T = 1$ et $S = 0,6511$.

Les figures 3.40a et 3.40b représentent l'évolution de la contrainte de Weibull en fonction de la déformation équivalente macroscopique E_{eq} calculée sur des microstructures 3D de 64^3 voxels de résolution. On constate que, contrairement aux simulations 2D, il n'y a pas un effet significatif de la présence d'amas sur la contrainte de Weibull et de fait, sur la probabilité de rupture, quelle que soit la triaxialité des contraintes envisagée. Ceci est certainement due à la prise en compte de l'écrouissage qui a tendance à atténuer les fluctuations des valeurs des champs locaux au sein de la matrice. En revanche, l'augmentation de la triaxialité augmente significativement la valeur de la contrainte de Weibull et donc l'amplitude des champs locaux dans la matrice.

Il est maintenant nécessaire de confirmer de tels résultats en effectuant des calculs similaires sur

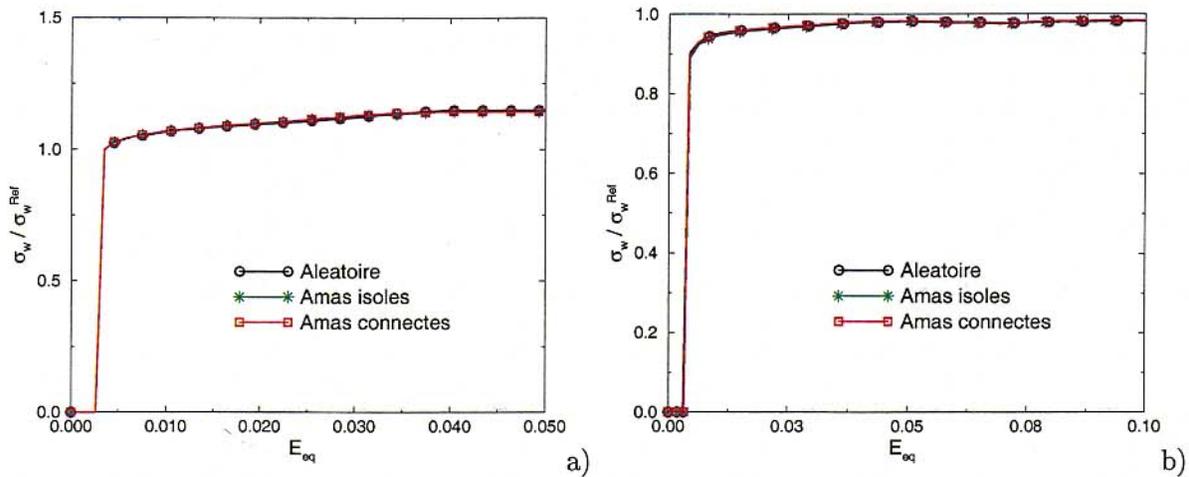


FIG. 3.40 – Évolution de la contrainte de Weibull. Courbe d'érouissage de la matrice = courbe d'érouissage de l'acier à $T = -150^\circ C$. a) $\tau = \frac{1}{3}$ b) $\tau = 2,2$

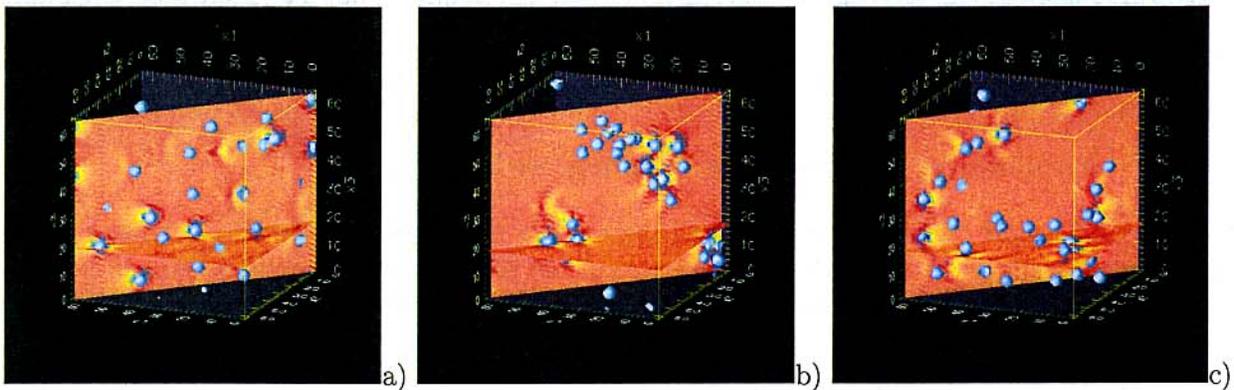


FIG. 3.41 – Cartes des contraintes principales maximales. Courbe d'érouissage de la matrice = courbe d'érouissage de l'acier à $T = -150^\circ C$. Triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

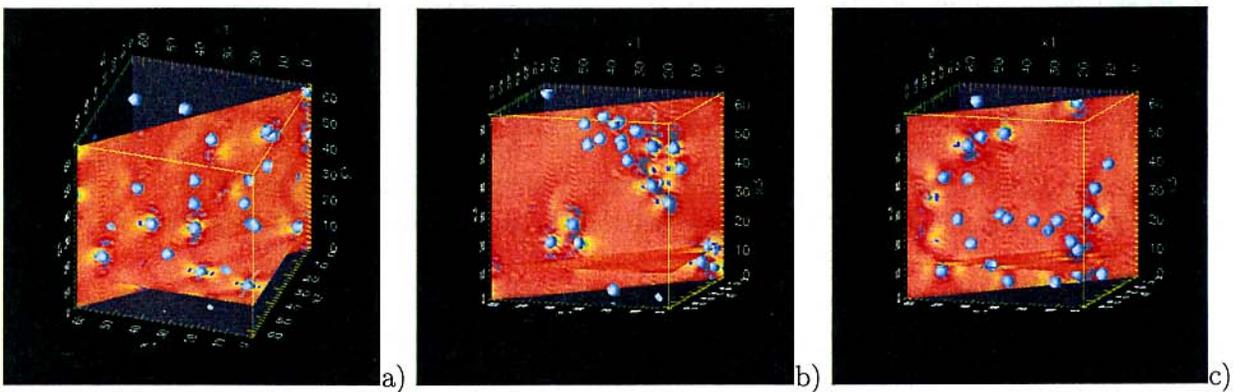


FIG. 3.42 – Cartes des contraintes principales maximales. Courbe d'érouissage de la matrice = courbe d'érouissage de l'acier à $T = -150^\circ C$. Triaxialité des contraintes $\tau = 2,2$. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

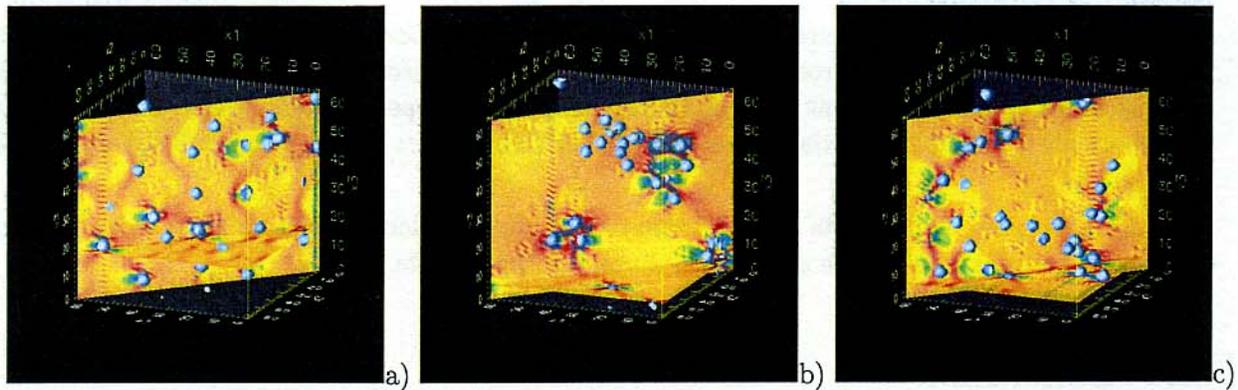


FIG. 3.43 – Cartes des déformations équivalentes locales. Courbe d'écroutissement de la matrice = courbe d'écroutissement de l'acier à $T = -150^{\circ}\text{C}$. Triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

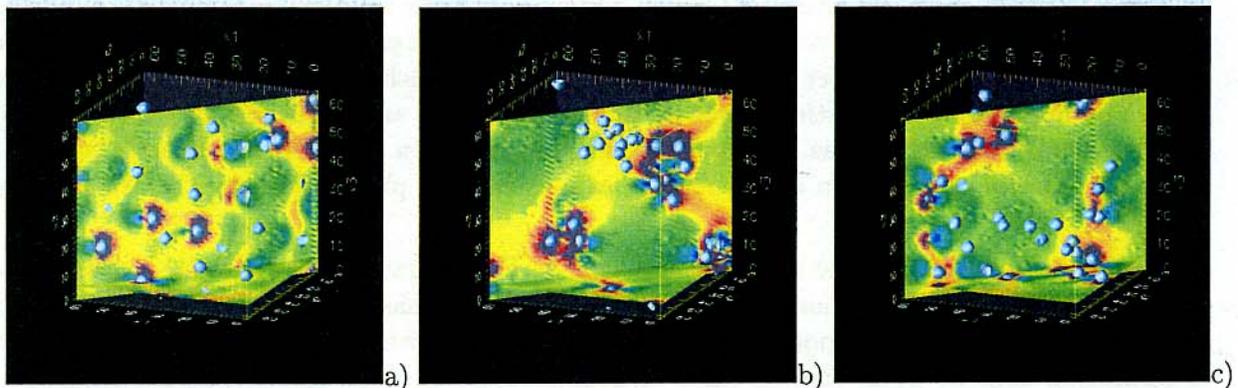


FIG. 3.44 – Cartes des déformations équivalentes locales. Courbe d'écroutissement de la matrice = courbe d'écroutissement de l'acier à $T = -150^{\circ}\text{C}$. Triaxialité des contraintes $\tau = 2,2$. a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

d'autres microstructures de morphologies diverses et de porosité identique, voire plus élevée afin d'accentuer les tendances. Ceci permettra de vérifier si sur un ensemble de réalisations la contrainte de Weibull fluctue beaucoup d'une réalisation d'une même morphologie à l'autre. Ceci fera l'objet de travaux futurs.

Les figures 3.41 et 3.42 présentent les cartes des contraintes principales maximales obtenues sur des microstructures de morphologies diverses dans le cas d'un chargement en traction simple ($\tau = \frac{1}{3}$) et pour une triaxialité des contraintes $\tau = 2,2$ respectivement.

On constate, comme en 2D, que les contraintes principales sont maximales dans les amas pour les microstructures à amas isolés et dans les connections entre amas pour les microstructures à amas connectés. Dans les microstructures aléatoires, les contraintes principales maximales sont plus intenses à proximité des cavités. En guise d'exemple, l'amplitude des contraintes principales maximales dans les zones rouges est supérieure à 900 MPa pour une triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$, et est supérieure à 1800 MPa pour une triaxialité des contraintes $\tau = 2,2$.

Notons que, le fait de prendre en compte l'écroutissement de la matrice tend à atténuer la formation de bande de localisation de la déformation. En effet, les figures 3.43 ne présentent plus de bandes de localisation de la déformation aussi prononcées que dans le cas d'un régime parfaitement plastique.

Dans les microstructures aléatoires, la déformation équivalente locale est très intense au voisinage des cavités. Alors que dans les microstructures à amas isolés et connectés, elle se localise principalement dans les amas de cavités et dans les connections entre amas respectivement. Cette constatation est valable quelle que soit la triaxialité des contraintes considérée : $\tau = \frac{1}{3}$ (Figure 3.43) ou $\tau = 2,2$ (Figure 3.44).

Pour cette dernière, l'amplitude de la déformation équivalente locale dans les amas et au voisinage des cavités est plus intense que dans le cas d'une traction simple.

3.7 Conclusion

Dans cette partie deux outils numériques ont été utilisés afin de mettre en évidence un effet d'une répartition hétérogène de pores en amas sur la rupture ductile et fragile. La première méthode est basée sur un calcul par éléments finis sur des microstructures 2D de morphologies diverses, où la matrice, supposée obéir au critère de Gurson, est constituée de fractions volumiques hétérogènes, i.e., qui fluctuent d'un élément à l'autre. Ces calculs ne montrent pas d'effet d'amas significatif sur le comportement macroscopique et sur la rupture fragile. En revanche, ils mettent en évidence la forte densité de la déformation plastique pour les microstructures à amas à la fois au sein des amas et dans les connections entre amas. Bien que très simple de mise en œuvre, cette méthode se retrouve vite inefficace dès lors que l'on désire obtenir les informations plus locales sur l'hétérogénéité des champs locaux.

Une méthode numérique basée sur la transformée de Fourier rapide à ensuite été utilisée en vue d'étudier l'effet d'une répartition hétérogène des défauts en amas sur la rupture ductile et fragile. Diverses situations morphologiques ont été considérées : microstructures aléatoires, à amas isolés et connectés, dont les pores sont de taille variable ou identique. Les calculs par T.F.R. 2D et 3D montrent un effet d'une répartition hétérogène des défauts en amas sur la rupture ductile. Celui-ci se traduit par une surface d'écoulement plus faible pour les microstructures à amas par rapport aux microstructures aléatoires. Ces dernières ont une surface d'écoulement plus souple que celle prévue par le critère de Gurson. En 2D, les surfaces d'écoulement obtenues par des calculs par T.F.R. coupent l'axe des pressions hydrostatiques avec une pente finie et non infini comme le prévoit le critère de Gurson. Dans le cas 3D, l'effet du troisième invariant des contraintes sur la surface d'écoulement a été montré.

Ces méthodes numériques ont permis d'étudier l'effet des amas de pores sur la rupture fragile. Celle-ci est abordée au travers du critère de Beremin qui est appliqué à partir des champs locaux issus des modèles numériques. Cet effet se traduit en 2D par le fait, que pour un état de chargement donné, les microstructures à amas sont plus fragiles que les microstructures aléatoires, dans le cas d'une triaxialité des contraintes de $\frac{1}{3}$. On rappelle que ces simulations ont été menées dans le cas d'une matrice élastique-parfaitement plastique. Dans les calculs 3D, l'écroutissement de la matrice est pris en compte et l'effet d'amas semble disparaître : il n'y plus d'effet d'amas sur la rupture fragile. La prise en compte de l'écroutissement tend certainement à atténuer l'hétérogénéité des champs locaux dans la matrice. Des calculs 3D similaires à ceux menés dans cette étude mais avec une matrice élastique-parfaitement plastique pourraient être envisagés afin de vérifier si, comme en 2D, un effet d'amas est observé sur la rupture fragile. Une conclusion similaire est faite dans le cas 2D, au travers d'un calcul par éléments finis. Notons que l'augmentation de la température rend la microstructure moins fragile.

Lorsque la triaxialité des contraintes augmente, i.e, pour une triaxialité des contraintes de 2,2, il n'y a toujours pas d'effet d'amas en 3D sur la rupture fragile. En revanche, en 2D, la tendance s'inverse :

les microstructures aléatoires sont plus fragiles que les microstructures à amas. Ceci résulte peut-être du fait que très peu de matrice a été plastifiée dans les microstructures à amas.

D'un point de vue plus général, un effet d'amas a pu être mis en évidence au travers de ces simulations numériques sur la rupture tant ductile que fragile (uniquement dans le cas d'un comportement élastique-parfaitement plastique de la matrice). Toutefois, en ce qui concerne la rupture fragile, il est impossible à partir des simulations effectuées de donner l'origine du déclenchement du clivage. Les amas induisent bien une hétérogénéité de contrainte et de déformation, mais on ne peut pas montrer que cette dernière favorise le déclenchement du clivage sur un défaut proche de ces derniers. Ceci est dû au critère de rupture utilisé : le critère de Beremin ne donne qu'une information globale et non locale. Le choix d'un autre critère de rupture fragile reste une question ouverte.

Chapitre 4

Homogénéisation non linéaire : surface de charge et champs locaux dans un milieu poreux

Des calculs numériques bidimensionnels et tridimensionnels basés sur la méthode des transformées de Fourier rapide (T.F.R.), rapportés dans le chapitre précédent, montrent un effet de la répartition hétérogène des défauts en amas sur la rupture ductile et sur la rupture fragile. Cette dernière est abordée au travers du critère de Beremin [6]. Ces calculs restent néanmoins lourds de mise en œuvre et très coûteux en temps de calcul. Le développement d'un modèle micromécanique moins lourd et moins coûteux en temps de calcul constitue l'objet du présent chapitre. Ce modèle repose sur un couplage entre les approches variationnelles pour l'homogénéisation des composites non linéaires et une description de la microstructure basée sur une approche par motifs morphologiques représentatifs (approche "M.M.R."). La mise en œuvre de ce modèle "semi-analytique" ainsi que les hypothèses sur lesquelles il repose sont décrites dans la première partie de ce chapitre.

La seconde partie est consacrée à l'étude de la pertinence de la surface d'écoulement obtenue par le modèle semi-analytique dans le cas d'un comportement élasto-plastique parfaitement plastique de la matrice et d'une représentation de la microstructure par un assemblage de sphères composites de Hashin et de Hashin généralisé, en la comparant d'une part aux prédictions de modèles existants tels que la borne de Hashin-Shtrikman et le modèle de Gurson et, d'autre part, à la surface d'écoulement obtenue par des calculs par T.F.R. 3D. Cette dernière comparaison fait l'objet de la troisième partie. Ces comparaisons ont pour principal objectif de situer la surface de charge issue du modèle analytique : améliore-t-elle celles issues d'autres modèles ? Dans ce cadre, une discussion est menée sur la méthode à employer pour décrire les fluctuations des concentrations locales dans un matériau réel et leurs conséquences sur la surface d'écoulement.

Avant d'appliquer le critère de Beremin à partir des champs locaux obtenus afin d'évaluer l'effet de la fluctuation des concentrations locales sur la rupture fragile, il faut vérifier la pertinence des champs locaux obtenus par le modèle semi-analytique. Pour cela, ces derniers sont comparés à ceux obtenus par des calculs par éléments finis et par des calculs par T.F.R. 3D avec écrouissage. Cette étude constitue l'objet des quatrième et cinquième parties de ce chapitre.

D'une manière plus générale, ce chapitre joue un rôle de synthèse puisqu'il confronte les résultats obtenus par les différents modèles, numériques et analytiques, en termes de surface d'écoulement, de champs locaux, de description de l'écrouissage et de l'effet des fluctuations des concentrations

locaux sur la rupture fragile et ductile.

4.1 Description du modèle semi-analytique

Le modèle micromécanique que nous proposons en vue d'évaluer l'effet d'une distribution hétérogène des défauts en amas sur la rupture ductile et sur la rupture fragile repose sur un couplage entre les approches variationnelles récentes pour l'homogénéisation des composites non linéaires et une représentation de la microstructure par une approche par Motifs Morphologiques Représentatifs [10]. Une approche similaire a déjà été proposée par Bornert et coll [16] dans le cadre des méthodes sécantes classiques et par Bornert [13] dans le cadre de l'extension sécante modifiée.

Les approches variationnelles récentes pour l'homogénéisation des composites non linéaires reposent, comme nous l'avons évoqué dans le chapitre 1, sur l'introduction d'un milieu linéaire de comparaison (M.L.C.). Celui-ci résulte d'une linéarisation sécante, tangente ou intermédiaire du comportement local. Dans notre étude, nous choisissons de travailler d'une part dans le cadre des méthodes sécantes modifiées, i.e, d'introduire un M.L.C. à répartition non uniforme de modules sécants et, d'autre part, dans le cadre de l'élasticité non linéaire. Nous rappelons brièvement le principe de la méthode sécante modifiée ainsi que la méthode de représentation de la microstructure retenue.

4.1.1 Approche sécante modifiée

Comme nous l'avons évoqué dans le chapitre 1, la détermination du comportement macroscopique d'un matériau hétérogène non-linéaire nécessite la résolution d'un problème local non-linéaire sur un V.E.R. où les champs de contrainte et de déformation sont fortement hétérogènes. Pour simplifier ce problème et pour mettre à profit les connaissances acquises en homogénéisation linéaire, on a recours à une linéarisation sécante du comportement local (1.61) au voisinage d'une déformation de référence. Le champ fortement hétérogène des modules sécants résultant de la linéarisation est remplacé par un champ uniforme par morceaux. Les modules sécants dans chaque phase sont déterminés par une relation complémentaire.

Pour prendre en compte les fluctuations des champs mécaniques locaux au sein de chaque phase, il faut modifier la relation complémentaire déterminant les modules sécants, homogènes par phase, en fonction d'une déformation de référence $E_{Ref}^{(r)}$, de telle sorte qu'une fluctuation du champ local induisant des non-linéarités au sein d'une phase se traduise par une modification des modules sécants de cette phase et donc par une modification du comportement macroscopique du matériau hétérogène. Cette modification a pour but de traduire macroscopiquement l'effet des non-linéarités locales. Dans cette optique, Suquet [83] propose de définir la déformation de référence dans la phase r du milieu linéaire de comparaison (M.L.C.), $E_{Ref}^{(r)}$, comme la moyenne du carré de la déformation équivalente locale dans le M.L.C., i.e., $E_{Ref}^{(r)} = \sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r}$, qui admet une expression analytique simple dans l'hypothèse d'isotropie de comportement des phases :

$$\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = \frac{1}{3f_r} E : \frac{\partial L^{hom}}{\partial \mu_r} : E, \quad (4.1)$$

où L^{hom} est le tenseur des modules effectifs du M.L.C., μ_r le module de cisaillement de la phase r et E la déformation macroscopique.

Le calcul des modules sécants au sein de chaque phase pour une sollicitation E donnée nécessite la

résolution du système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \text{Calcul de } L^{\text{hom}} \text{ à partir des } \mu_r \text{ et } k_r \text{ pour } r = 1, \dots, n \\ \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = \frac{1}{3f_r} E : \frac{\partial L^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} : E \\ L^{(r)} = L^r \left(\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r \right) = 3k_r J + 2\mu_r K. \end{cases} \quad (4.2)$$

Dans l'hypothèse d'un comportement isotrope du matériau hétérogène et de ses différentes phases, l'expression du moment d'ordre 2 (4.1) peut s'exprimer d'une part en fonction du module de compressibilité et de cisaillement du milieu homogène, k^{hom} et μ^{hom} respectivement, et, d'autre part, en fonction des deux paramètres macroscopiques que sont la triaxialité des contraintes τ et la déformation macroscopique de Mises E_{eq} . En notation indicielle, l'expression (4.1) s'écrit :

$$\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = \frac{1}{3f_r} (E_m \delta_{ij} + \varepsilon_{ij}) \left(3 \frac{\partial k^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} J_{ijkl} + 2 \frac{\partial \mu^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} K_{ijkl} \right) (E_m \delta_{kl} + \varepsilon_{kl}),$$

où ε correspond à la partie déviatorique du tenseur des déformations macroscopiques E , $\varepsilon = \text{dev} E$ et $E_m = \frac{1}{3} \text{Tr} E$ la partie sphérique de E . En utilisant les relations suivantes :

$$\begin{cases} J : J = J, K : K = K, J : K = 0, \\ \Sigma_{eq} = 3\mu^{\text{hom}} E_{eq}, E_{eq}^2 = \frac{2}{3} \varepsilon : \varepsilon \\ \Sigma_m = 3k^{\text{hom}} E_m \\ \tau = \frac{\Sigma_m}{\Sigma_{eq}}, \end{cases} \quad (4.3)$$

l'expression du moment d'ordre 2 devient :

$$\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r^{\frac{1}{2}} = E_{eq} \left(\frac{1}{f_r} \left(3 \left[\tau \frac{\mu^{\text{hom}}}{k^{\text{hom}}} \right]^2 \frac{\partial k^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} + \frac{\partial \mu^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} \right) \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.4)$$

Il faut noter par ailleurs que l'extension sécante modifiée coïncide [83] avec l'approche variationnelle de Ponte Castañeda [71] qui est rappelée en annexe C. Cette dernière permet d'obtenir une borne supérieure rigoureuse pour le comportement macroscopique d'un matériau hétérogène dont les constituants ont un comportement non-linéaire, lorsque l'on donnait une borne supérieure rigoureuse pour les modules effectifs du M.L.C.

Ainsi, suivant l'extension sécante modifiée, dans le cas d'un comportement isotrope du milieu homogène ainsi que de toutes les phases le constituant, les modules sécants au sein de chaque phase sont déterminés de manière non-linéaire selon (4.5) et ce quel que soit le comportement non-linéaire des phases (avec ou sans écrouissage), caractérisé par les courbes d'écrouissage $\sigma_{eq}^r(\varepsilon_{eq})$:

$$\forall \tau \text{ et } E_{eq} \text{ fixés} \begin{cases} \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = E_{eq}^2 \left[\frac{1}{f_r} \left(\frac{\partial \mu^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} + 3 \left[\tau \frac{\mu^{\text{hom}}}{k^{\text{hom}}} \right]^2 \frac{\partial k^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} \right) \right], \quad \forall r \in [1, n] \\ \mu_r = \frac{\sigma_{eq}^r \left(\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r \right)}{3 \sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r}}, \quad \forall r \in [1, n] \\ \{ k^{\text{hom}}, \mu^{\text{hom}} \} = F(f_r, k_r, \mu_r) \quad \forall r \in [1, n]. \end{cases} \quad (4.5)$$

Le moment d'ordre 2 est fonction des modules sécants de chaque phase, des propriétés macroscopiques du M.L.C., de la triaxialité des contraintes macroscopiques τ et de la déformation équivalente macroscopique E_{eq} . Le taux de triaxialité des contraintes τ représente le type de chargement macroscopique. Par exemple, $\tau = +\infty$ correspond à un chargement purement hydrostatique, $\tau = 1/3$ à une traction simple et $\tau = 0$ à du cisaillement, etc. Pour un jeu de paramètres (τ, E_{eq}) donné, les modules de cisaillement μ_r dans chaque phase r sont déterminés de manière itérative suivant un algorithme de point fixe. Le critère d'arrêt de cet algorithme est discuté un peu plus loin dans le texte.

Les modules k^{hom} et μ^{hom} sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement du milieu homogénéisé, fonctions de la fraction volumique et du module de cisaillement de chaque phase r . Ils sont déterminés par un modèle d'homogénéisation linéaire $F(f_r, \mu_r, \forall r \in [1, n])$ approprié à la microstructure du matériau hétérogène et qui est décrit dans le paragraphe suivant.

Il a été montré [19] que la méthode sécante modifiée combinée à la borne de Hashin-Shtrikman supérieure pour le M.L.C. biphasé, conduit au critère de plasticité suivant, qui n'est autre que la borne de Hashin et Shtrikman présentée dans le chapitre 1. Dans le cas d'un matériau biphasé (pores + matrice), dont la matrice est parfaitement plastique de contrainte critique σ_0 :

$$F(\Sigma_{eq}, \Sigma_m, f) = \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + \frac{9}{4}f \left(\frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right)^2 - (1 - f)^2 = 0. \quad (4.6)$$

Cette expression est obtenue en considérant un unique module sécant homogène dans la matrice. La surestimation de la contrainte d'écoulement en pression hydrostatique pure du critère (4.6), faiblesse qui a déjà été évoquée dans le chapitre 1, vient des hypothèses utilisées pour établir ce critère. En effet, dans cette approche, le module de cisaillement est uniforme au sein de toute la matrice. Or, en non-linéaire, cette hypothèse s'avère trop simplificatrice puisque les modules de cisaillement du milieu de comparaison sont fortement hétérogènes au sein de la matrice : ils fluctuent d'un point à un autre. Le modèle d'homogénéisation linéaire que nous devons mettre en œuvre pour décrire la microstructure du milieu hétérogène doit pouvoir prendre en compte cette répartition non uniforme des modules sécants au sein de la matrice.

4.1.2 Description de la microstructure

L'objectif majeur de l'analyse des milieux élastiques hétérogènes est la dérivation de bornes ou d'estimations pour leurs propriétés mécaniques macroscopiques L^{hom} à partir de la prise en compte de leur microstructure. La technique que nous souhaitons utiliser pour représenter la microstructure d'un matériau hétérogène est basée sur une approche par motifs morphologiques représentatifs (M.M.R.) développée par Stolz et Zaoui [80] et a été brièvement rappelée dans le chapitre 1. Nous rappelons que l'approche par M.M.R. consiste à décomposer un V.E.R Ω de volume V par un ensemble de sous-domaines disjoints de géométrie quelconque, représentative de la microstructure du composite. Les sous-domaines de géométrie et de propriétés mécaniques identiques sont regroupés et définissent une famille (λ) . Chaque famille est représentée par un motif de géométrie identique, appelé Motif Morphologique Représentatif. V_λ est le volume occupé par la famille λ et $c_\lambda = \frac{V_\lambda}{V}$ est sa fraction volumique.

Dans notre étude, la microstructure du matériau hétérogène (Figure 4.1a) et, de fait, du M.L.C. est représentée par un assemblage de sphères composites de Hashin généralisé (Figure 4.1c) qui possède la même distribution des fractions volumiques locales (Figure 4.1c) que le matériau hétérogène. Pour le moment, les méthodes à utiliser pour déterminer les fractions volumiques locales dans un

matériau hétérogène ont peu d'importance. Elles seront présentées dans le paragraphe 4.3.1. Pour des raisons de simplicité, les trous sont supposés de forme sphérique et en distribution isotrope au sein du V.E.R. Les M.M.R. peuvent donc être assimilés à des trous sphériques enrobés d'une coquille de matrice sphérique. La forme sphérique de la coquille de matrice est associée à l'hypothèse d'isotropie de distribution du centre des cavités. En effet, comme nous allons le voir, une solution semi-analytique pour L^{hom} n'existe que dans le cas d'une forme sphérique des cavités dont les centres obéissent à une distribution isotrope. Des cas plus généraux (cavités de forme ellipsoïdale en distribution ellipsoïdale) nécessiteraient l'utilisation d'outils numériques pour calculer L^{hom} [12].

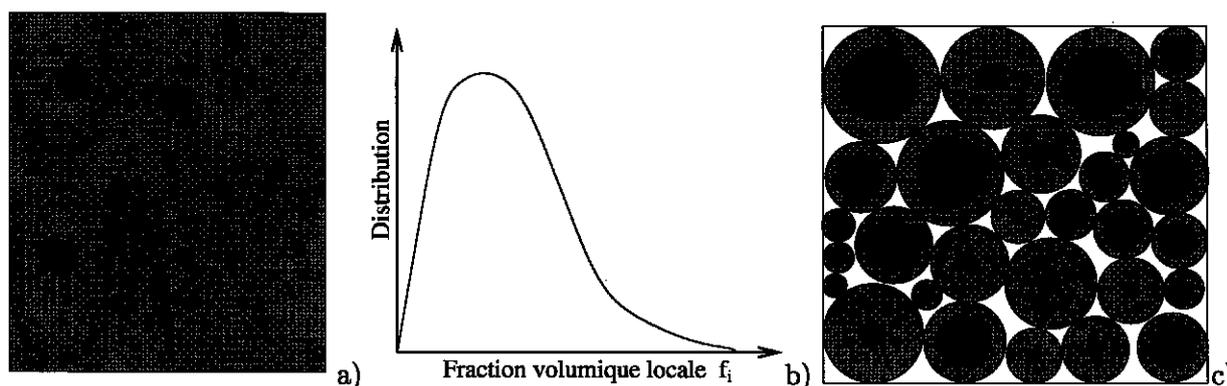


FIG. 4.1 – a) Microstructure d'un matériau hétérogène b) Distribution des fractions volumiques locales du matériau hétérogène c) Assemblage de sphères de Hashin généralisé possédant la même distribution des fractions volumiques locales que le matériau hétérogène

Ainsi, dans notre étude, un assemblage de Hashin généralisé résulte d'un assemblage de sphères composites, appelées aussi motifs, de fractions volumiques différentes et de tailles variables. Dans le cas où tous les motifs ont la même fraction volumique, nous nous ramenons à un assemblage de sphères de Hashin [40] classique.

Dans un premier temps, il faut se fixer une représentation de la microstructure : est-ce une microstructure de Hashin ou de Hashin généralisée ? Dans le second cas, il faut connaître les distributions des concentrations locales. Une discussion précise sur les méthodes à mettre en œuvre pour obtenir ces concentrations locales est menée au paragraphe 4.3.1. Les fractions volumiques locales f_i et la fraction volumique macroscopique f sont reliées par la relation suivante :

$$f = \sum_{i=1}^{N_m} c_i f_i,$$

où c_i est la proportion du motif i de fraction volumique f_i et N_m correspond au nombre de motifs. Dans le cas d'une microstructure de Hashin, $c_i = 1$ et $N_m = 1$.

La différence importante entre la borne de Hashin-Shtrikman (4.6) et le modèle semi-analytique que nous proposons est la prise en compte par ce dernier d'une répartition hétérogène des modules sécants au sein de la matrice du M.L.C. Pour ce faire, la matrice de chaque motif constituant le V.E.R. est discrétisée en couches concentriques, possédant chacune un module sécant homogène. Ce dernier peut fluctuer d'une couche à l'autre et est déterminé par l'extension sécante modifiée (4.5).

Selon l'approche par M.M.R., la détermination des propriétés mécaniques d'un V.E.R. composé de plusieurs motifs multi-couches revient à résoudre les problèmes auxiliaires associés à autant d'inclusions composites multi-couches qu'il y a de motifs de concentrations locales différentes.

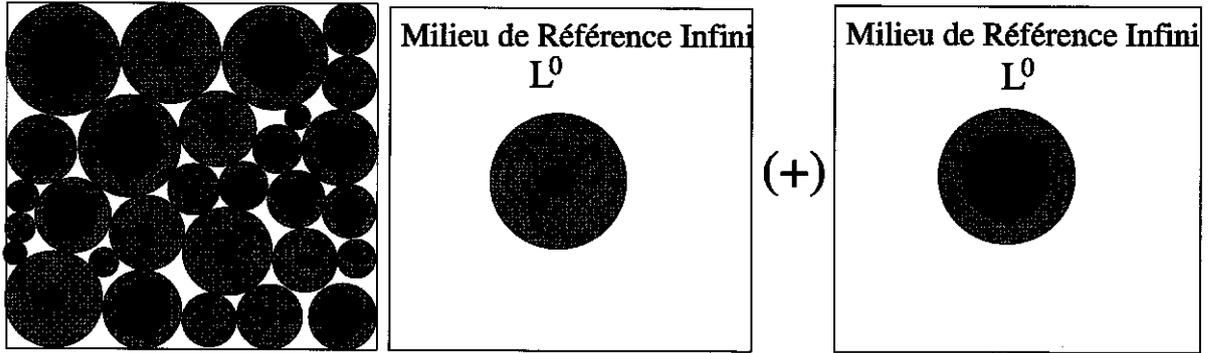


FIG. 4.2 – a) Assemblage de Hashin généralisé à sphères composites multi-couches (Figure 4.1c) b) Résolution par motifs multi-couches en milieu infini

Nous sommes maintenant confrontés à la résolution de problèmes auxiliaires attachés à une (ou plusieurs) inclusion(s) composite(s) multi-couches plongée(s) dans un milieu infini de propriétés mécaniques L^0 arbitraire pour le moment, soumis à l'infini à une déformation macroscopique E_0 . La résolution d'un tel problème conduit à une expression analytique des propriétés mécaniques du M.L.C., L^{hom} , composé de m motifs, chacun discrétisé en n couches concentriques [16] :

$$k^{\text{hom}} = \frac{\sum_{\lambda=1}^n \sum_{i=1}^m f_{\lambda}^i k_{\lambda}^i a_{\lambda}^i}{\sum_{\lambda=1}^n \sum_{i=1}^m f_{\lambda}^i a_{\lambda}^i}, \quad \mu^{\text{hom}} = \frac{\sum_{\lambda=1}^n \sum_{i=1}^m f_{\lambda}^i \mu_{\lambda}^i b_{\lambda}^i}{\sum_{\lambda=1}^n \sum_{i=1}^m f_{\lambda}^i b_{\lambda}^i}, \quad (4.7)$$

le résultat est fonction des modules de cisaillement μ_{λ}^i , de compressibilité k_{λ}^i et des concentrations f_{λ}^i (couche i du motif λ). a_{λ}^i et b_{λ}^i représentent respectivement la partie sphérique et la partie déviatorique du tenseur de localisation de la déformation A_{λ}^i et sont fonctions des propriétés mécaniques, des épaisseurs relatives de l'ensemble des couches et des fractions volumiques des motifs.

Preuve 1 *Considérons la microstructure du matériau hétérogène comme composée de n motifs λ de formes et de propriétés mécaniques différentes. Chaque motif est discrétisé en m couches concentriques. Le tenseur de localisation de la déformation dans la couche i du motif λ est défini selon :*

$$A_{\lambda}^i = a_{\lambda}^i J + b_{\lambda}^i K, \quad (4.8)$$

où les propriétés d'isotropie du comportement des phases et du comportement macroscopique ont été exploitées. Le tenseur de déformation moyen dans la couche i du motif λ , ε_{λ}^i , s'exprime en fonction de la déformation macroscopique E_0 selon :

$$\varepsilon_{\lambda}^i = A_{\lambda}^i : E_0, \quad (4.9)$$

tenseur qui admet la décomposition en une partie sphérique et une partie déviatorique :

$$\begin{cases} \text{tr}(\varepsilon_{\lambda}^i) = a_{\lambda}^i \text{tr}(E_0) \\ \text{dev}(\varepsilon_{\lambda}^i) = b_{\lambda}^i \text{dev}(E_0). \end{cases} \quad (4.10)$$

La relation linéaire qui lie tenseur des contraintes moyennes dans la couche i du motif λ au tenseur des déformations moyennes dans cette même couche en fonction du module sécant L_{λ}^i :

$$\sigma_{\lambda}^i = L_{\lambda}^i : \varepsilon_{\lambda}^i,$$

admet la décomposition suivante :

$$\begin{cases} \text{tr}(\sigma_\lambda^i) = 3k_\lambda^i \text{tr}(\varepsilon_\lambda^i) \\ \text{dev}(\sigma_\lambda^i) = 2\mu_\lambda^i \text{dev}(\varepsilon_\lambda^i) \end{cases} \quad (4.11)$$

Le M.L.C. étant supposé avoir un comportement isotrope, il vient naturellement les équations suivantes reliant les grandeurs macroscopiques :

$$\begin{cases} \text{tr}(\Sigma) = 3k^{\text{hom}} \text{tr}(E) \\ \text{dev}(\Sigma) = 2\mu^{\text{hom}} \text{dev}(E) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \Sigma = \sum_{\lambda=1}^n \sum_{i=1}^m f_\lambda^i \sigma_\lambda^i \\ E = \sum_{\lambda=1}^n \sum_{i=1}^m f_\lambda^i \varepsilon_\lambda^i \end{cases} \quad (4.12)$$

Une combinaison des équations (4.10), (4.11) et (4.12) conduit au résultat (4.7).

Le problème de l'inclusion composite multi-couches a été traité par Hervé et Zaoui [45]. Ces auteurs aboutissent, en exprimant les conditions de continuité du vecteur contrainte et du champ de déplacement à l'interface entre deux couches, à un système matriciel permettant de calculer a_λ^i et b_λ^i [45].

Vue la complexité du système matriciel permettant de calculer les modules de compressibilité et de cisaillement du M.L.C., un effort de programmation s'avère indispensable afin de mettre en œuvre ce modèle. Le calcul des dérivées dans l'expression du moment d'ordre 2 (4.4) est mené numériquement : lors d'une itération de l'algorithme de point fixe, l'ensemble des modules de cisaillement sont connus. Le calcul de la dérivée consiste à perturber un seul module de cisaillement et à garder les autres inchangés :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = \frac{1}{f_r} \left(3 \left[\tau \frac{\mu^{\text{hom}}(\mu_r)}{k^{\text{hom}}(\mu_r)} \right]^2 \frac{k^{\text{hom}}(\mu_r + d\mu_r) - k^{\text{hom}}(\mu_r)}{d\mu_r} + \dots \right. \\ \left. \dots + \frac{\mu^{\text{hom}}(\mu_r + d\mu_r) - \mu^{\text{hom}}(\mu_r)}{d\mu_r} \right) E_{eq}^2 \end{aligned} \quad (4.13)$$

Le choix des propriétés mécaniques du milieu infini va conférer à l'énergie effective $W(E)$ du milieu hétérogène et donc au comportement macroscopique soit le statut de borne supérieure rigoureuse pour l'assemblage de Hashin considéré, si on lui attribue les propriétés mécaniques de la plus dure de toutes les phases, soit le statut d'estimation autocohérente si on lui attribue les propriétés mécaniques recherchées ce qui nécessite une autre itération pour déterminer ces dernières. D'une manière générale, il y a cinq choix possibles pour les propriétés mécaniques du milieu infini :

- a) infiniment rigide → Borne de type Reuss,
- b) la plus molle de toutes les phases → Borne de type HSZ inférieure,
- c) les propriétés mécaniques du MHE → Estimation autocohérente,
- d) la plus dure de toutes les phases → Borne de type HSZ supérieure,
- e) infiniment souple → Borne de type Voigt.

L'algorithme (4.15) présenté ci-après est valable quel que soit le modèle utilisé pour décrire la microstructure du matériau hétérogène : assemblage de Hashin classique ou généralisé.

Comme nous l'avons évoqué précédemment, l'algorithme utilisé pour calculer les modules sécants dans chaque phase ou dans chaque couche et donc les propriétés mécaniques effectives est un algorithme de point fixe. Celui-ci est suffisant pour traiter un bon nombre de problèmes mais possède

toutefois quelques inconvénients. Nous reviendrons plus tard sur ce point. Le test d'arrêt de cet algorithme, pour un jeu de paramètres macroscopiques fixé (τ, E_{eq}) , porte sur les valeurs du moment d'ordre 2 calculé sur chaque couche i aux itérations j et $j - 1$:

$$\eta = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left[\frac{2 \left| \sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_i^j} - \sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_i^{j-1}} \right|}{\sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_i^j} + \sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_i^{j-1}}} \right]^2}, \quad (4.14)$$

n étant le nombre total de couches. On stoppe l'itération lorsque η reste inférieur à un seuil de l'ordre de 10^{-7} à 10^{-9} .

4.2 Surface d'écoulement du milieu poreux : Bornes et estimations

On se propose maintenant d'appliquer le modèle semi-analytique décrit précédemment en vue d'établir la surface d'écoulement pour des représentations de la microstructure par un assemblage de sphères de Hashin ou de Hashin généralisé et de la comparer au critère de Gurson et à ses diverses extensions.

4.2.1 Réponse sous chargement monotone à triaxialité fixée

Nous nous plaçons dans le cas d'une microstructure décrite par un assemblage de sphères de Hashin (Figure 4.3a). Le comportement de la matrice est élastique-parfaitement plastique, de limite d'élasticité σ_0 .

Étudions d'abord l'influence de la discrétisation de la matrice en couches sur le comportement du matériau hétérogène non linéaire pour différentes fractions volumiques (Figure 4.3b) et pour différents taux de triaxialité des contraintes.

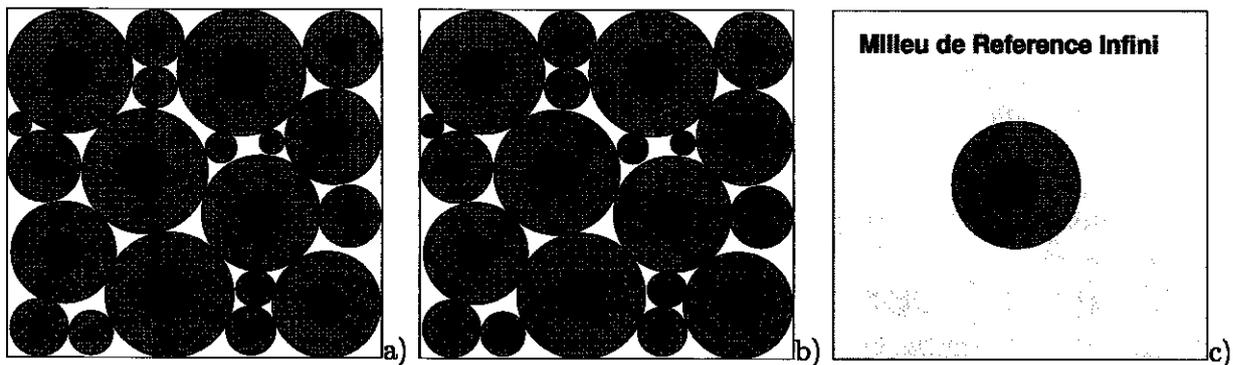


FIG. 4.3 – a) Assemblage de sphères composites de Hashin b) Discrétisation de la matrice en couches concentriques c) Motif multi-couches en milieu infini

Pour obtenir le comportement du matériau hétérogène, pour un nombre de couches n donné, il convient de se fixer une triaxialité des contraintes τ et de faire évoluer la déformation équivalente macroscopique E_{eq} . Pour chaque valeur de E_{eq} , les modules sécants sont déterminés dans chaque couche selon l'algorithme (4.15) et les propriétés mécaniques du M.L.C., μ^{hom} et k^{hom} , selon les relations (4.7) et le choix des propriétés mécaniques du milieu infini. La démarche à suivre peut

s'écrire sous la forme suivante :

Entrée : τ et E_{eq}^{max} fixés

Pour $E_{eq} = 0$ à E_{eq}^{max} Faire :

Initialisation des modules sécants par les modules élastiques

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = \mathbf{E}_{eq}^2 \left[\frac{1}{f_r} \left(\frac{\partial \mu^{hom}}{\partial \mu_r} + 3 \left[\tau \frac{\mu^{hom}}{k^{hom}} \right]^2 \frac{\partial k^{hom}}{\partial \mu_r} \right) \right], \quad \forall r \in [1, n] \\ \mu_r = \frac{\sigma_0}{3\sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r}}, \quad \forall r \in [1, n] \\ \text{Calcul de : } \{k^{hom}, \mu^{hom}\} \text{ selon (4.7)} \\ \text{Test de convergence (4.14)} \end{array} \right. \quad (4.15)$$

Sortie : $\Sigma_{eq} = 3\mu^{hom}\mathbf{E}_{eq}$

Fin Faire.

Pour la phase d'initialisation des modules sécants dans chaque couche, nous utilisons les modules d'élasticité de la matrice $\mu_{matrice}$ et $k_{matrice}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_{matrice} = \frac{E}{2(1+\nu)} \\ k_{matrice} = \frac{E}{3(1-2\nu)} \end{array} \right. \quad (4.16)$$

Dans ces simulations, le choix du paramètre de convergence retenu est $\eta = 10^{-9}$ et nous nous plaçons dans le cadre d'une approche autocohérente généralisée : les propriétés mécaniques du milieu infini sont ceux du milieu homogène équivalent : $L_0 = L^{hom}$.

Les figures 4.4a et 4.4b représentent l'effet de la discrétisation de la matrice en couches sur le comportement du milieu hétérogène dans le cadre d'une approche auto-cohérente.

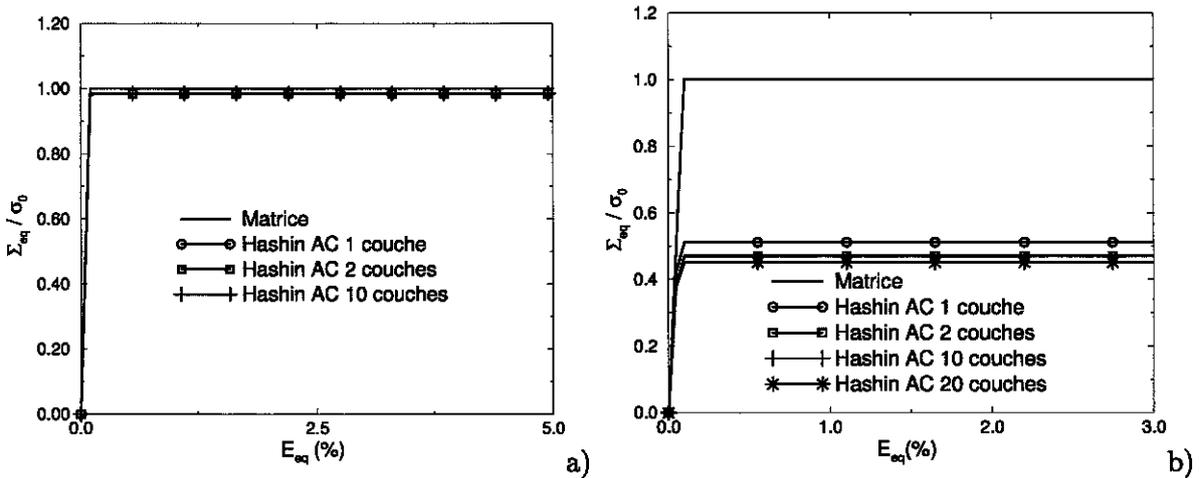


FIG. 4.4 – Influence de la discrétisation de la matrice en couches sur le comportement macroscopique
a) $f = 1\%$ $\tau = \frac{1}{3}$ b) $f = 10\%$ $\tau = 3$

Pour une faible porosité $f = 1\%$ et un faible taux de triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$, le nombre de couches a une très faible influence sur le comportement macroscopique (Figure 4.4a). En revanche,

plus la porosité macroscopique et la triaxialité des contraintes tendent à augmenter, plus la discrétisation de la matrice en couches influe significativement sur le comportement macroscopique du matériau poreux (Figure 4.4b). L'augmentation du nombre de couches tend à diminuer la limite d'élasticité du milieu hétérogène, cette dernière n'évoluant plus pour une discrétisation de la matrice supérieure à 10 couches (pour notre valeur de précision souhaitée).

Notons également que la partie élastique dans le comportement de la matrice ne sert qu'à initialiser les modules sécants dans chaque couche ce qui n'a aucune influence sur la valeur de la contrainte d'écoulement. Le comportement macroscopique du milieu poreux se décompose en trois phases. La première phase est une phase élastique : le comportement du milieu poreux est purement élastique. Dans la seconde phase, un coude apparaît sur la courbe : celui-ci est dû au fait que les couches commencent à être plastifiées. Les modules sécants dans certaines couches diffèrent des valeurs élastiques. La troisième et dernière phase correspond au plateau. Celui-ci est atteint lorsque l'ensemble des couches ont été plastifiées. La valeur de la contrainte au plateau ne dépend pas des modules d'élasticité.

4.2.2 Surface d'écoulement du milieu poreux

Après avoir décrit la procédure utilisée pour déterminer la réponse sous chargement proportionnel d'un milieu poreux, il convient maintenant de l'utiliser pour en déterminer la surface d'écoulement. La microstructure du matériau poreux sera décrite par des assemblages de Hashin classique et généralisé.

Principe d'obtention de la surface d'écoulement

La surface d'écoulement d'un milieu poreux ne peut être construite à partir du modèle semi-analytique que point par point. Ceci est possible à partir de l'algorithme utilisé pour déterminer le comportement macroscopique d'un milieu poreux dans le cas d'un comportement élastique parfaitement plastique de la matrice (4.15) et ce quelle que soit la description du milieu hétérogène.

La surface d'écoulement du milieu poreux ainsi définie est déterminée selon l'algorithme suivant :

$$\begin{array}{l}
 \text{Entrée : } E_{eq}^{max} \text{ fixé et choix de la description de la microstructure} \\
 \text{Pour } \tau = 0 \text{ à } +\infty \text{ Faire :} \\
 \quad \text{Pour } \mathbf{E}_{eq} = 0 \text{ à } E_{eq}^{max} \text{ Faire :} \\
 \quad \quad \text{Initialisation des modules sécants par les modules élastiques} \\
 \quad \quad \left\{ \begin{array}{l}
 \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = \mathbf{E}_{eq}^2 \left[\frac{1}{f_r} \left(\frac{\partial \mu^{hom}}{\partial \mu_r} + 3 \left[\tau \frac{\mu^{hom}}{k^{hom}} \right]^2 \frac{\partial k^{hom}}{\partial \mu_r} \right) \right], \quad \forall r \in [1, n] \\
 \mu_r = \frac{\sigma_0}{3 \sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r}}, \quad \forall r \in [1, n] \\
 \text{Calcul de : } \{k^{hom}, \mu^{hom}\} \text{ selon (4.7)} \\
 \text{Test de convergence (4.14)}
 \end{array} \right. \quad (4.17) \\
 \quad \quad \text{Sortie : } \Sigma_{eq} = 3\mu^{hom} \mathbf{E}_{eq} \\
 \quad \quad \text{Fin Faire} \\
 \quad \quad \text{Recherche de } \Sigma_{eq}^\infty \text{ et calcul de } \Sigma_m^\infty = \tau \Sigma_{eq}^\infty \\
 \text{Fin Faire.}
 \end{array}$$

La première boucle consiste à se fixer une triaxialité des contraintes τ et le choix du modèle, i.e., le choix des propriétés mécaniques du milieu infini : infiniment rigide, la plus molle de toutes les

phases, les propriétés mécaniques du MHE, la plus dure de toutes les phases, infiniment souple. La seconde boucle consiste à calculer le comportement macroscopique de la microstructure d'une manière similaire à celle définie par l'algorithme 4.15. Une fois que le comportement macroscopique est construit, il convient de déterminer Σ_{eq}^∞ qui correspond à la valeur de la contrainte d'écoulement asymptotique, le palier horizontal sur les figures 4.4. Une fois le palier atteint, Σ_{eq}^∞ n'évoluera plus, même si E_{eq} continue d'augmenter. D'une manière symbolique, Σ_{eq}^∞ est défini selon :

$$\Sigma_{eq}^\infty = \lim_{E_{eq} \rightarrow +\infty} F(E_{eq}),$$

où F décrit le comportement macroscopique du milieu hétérogène. Le point Σ_{eq}^∞ est sur le bord de P^{hom} qui correspond au domaine de résistance effectif du matériau hétérogène et qui est défini selon le type de conditions aux limites retenu [81] :

$$P^{hom} = \{ \Sigma \text{ tel qu'il existe } \sigma(x) \text{ avec } \langle \sigma(x) \rangle = \Sigma, \sigma(x) \in P(x), \text{div} \sigma(x) = 0, \text{ pour tout } x \in V \}. \quad (4.18)$$

Notons que le bord de P^{hom} est la surface d'écoulement macroscopique qui dépend du domaine de résistance des phases et de leur géométrie.

Une fois ce point déterminé, il est aisé de calculer Σ_m^∞ de par la définition de la triaxialité des contraintes :

$$\tau = \frac{\Sigma_m^\infty}{\Sigma_{eq}^\infty}.$$

Cette procédure est menée pour un nombre fini de valeurs de la triaxialité des contraintes $\tau \in [0, +\infty[$. Il est ainsi possible de construire la surface d'écoulement point par point dans le plan (Σ_{eq}, Σ_m) .

Microstructure décrite par un assemblage de Hashin

Dans un premier temps, on se place dans le cadre d'une représentation de la microstructure par un assemblage de sphères de Hashin (Figure 4.3a). On rappelle que, dans ce cas, le problème auxiliaire à résoudre pour déterminer les propriétés effectives du milieu hétérogène se réfère à une inclusion composite multi-couches de fraction volumique égale à la fraction volumique macroscopique. La matrice du motif est discrétisée en couches concentriques d'épaisseurs égales (Figure 4.3b et 4.3c). La surface d'écoulement est obtenue à partir de l'algorithme (4.17).

Dans le cas d'une discrétisation de la matrice en une couche, et lorsque les caractéristiques mécaniques du milieu infini sont celles de la plus dure de toutes les phases (la matrice dans ce cas), la borne obtenue (Borne HSNL : Hashin Shtrikman Non Linéaire) pour la surface de plasticité est confondue avec la borne de Hashin-Shtrikman (Borne HS) (4.6). Plus la matrice est discrétisée en couches, en pression hydrostatique pure, plus la surface de plasticité converge vers la borne de Gurson. Une discrétisation de la matrice en 20 couches suffit pour retrouver la borne de Gurson en pression hydrostatique pure (Figures 4.5 et 4.6b) avec un écart relatif d'environ 0,5% pour $f = 5\%$. Notons que la surface de plasticité obtenue est indépendante du module de Young du matériau.

La figure 4.5b donne une représentation polaire, dans le plan $(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}, \frac{\Sigma_m}{\sigma_0})$, de l'écart $\Delta\rho$ entre la borne de Gurson, les bornes et estimations existantes (borne de Gârăjeu (1.79) et estimation Gurson-HS (1.80) et la nouvelle borne (HSNL) et l'estimation (AC) obtenue à partir du modèle semi-analytique) pour une porosité $f = 5\%$. $\Delta\rho$ est calculé pour une triaxialité des contraintes τ donnée. Cette dernière est caractérisée par un angle θ défini selon $\theta = \arctan(\tau)$. $\theta = 0$ correspond à une

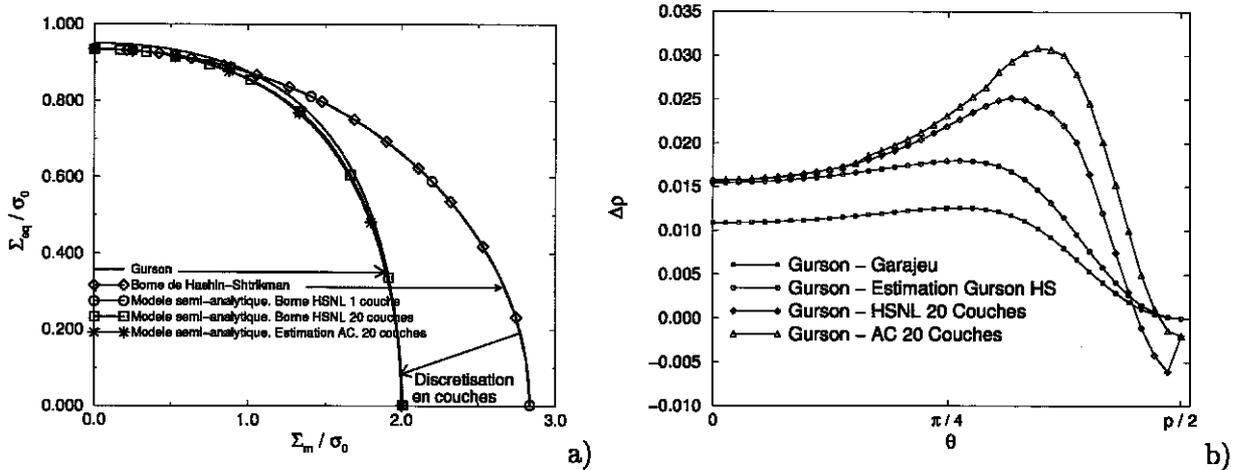


FIG. 4.5 - a) Surface de plasticité $f=5\%$: comparaison entre les différents modèles : Gurson (1.7), modèle semi-analytique en autocohérent (AC) et avec la borne (HSNL) b) Représentation polaire de la différence entre le modèle de Gurson et différents modèles : modèle semi-analytique en autocohérent (AC), avec la borne (HSNL) et modèle de Gārājeu

triaxialité des contraintes nulle et $\theta = \frac{\pi}{2}$, à une triaxialité des contraintes infinie. ρ est défini selon :

$$\rho = \sqrt{\left(\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^2 + \left(\frac{\Sigma_m}{\sigma_0}\right)^2}$$

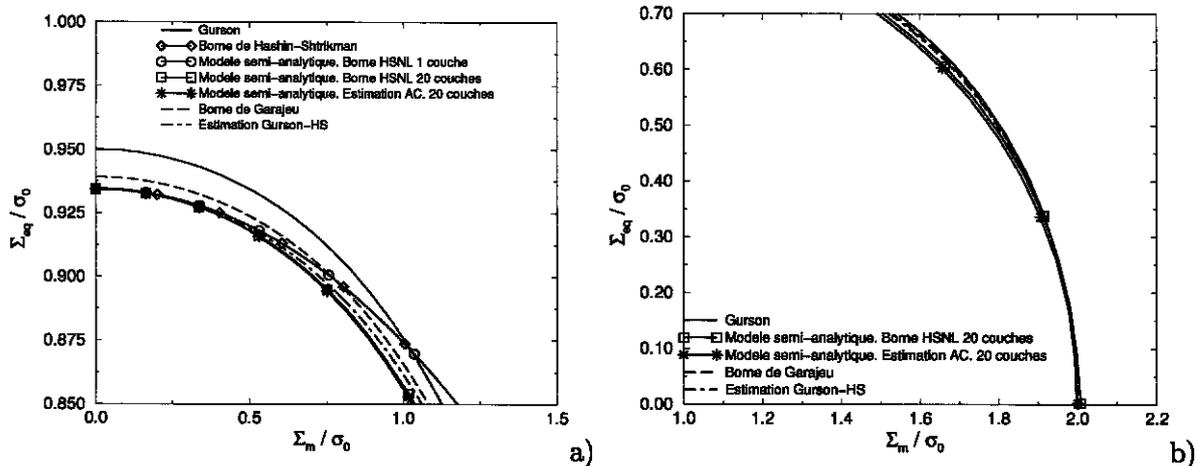


FIG. 4.6 - a) Zoom de 4.5 sur la contrainte d'écoulement en cisaillement + comparaison avec la borne de Gārājeu (1.79) et l'estimation Gurson-HS (1.80), b) Zoom de 4.5 sur la contrainte d'écoulement en pression hydrostatique

La discrétisation de la matrice en couches a également un effet sur la surface d'écoulement pour les faibles triaxialités des contraintes (Voir par exemple la figure 4.13 un peu plus loin dans le texte). En effet, pour une discrétisation de la matrice en 20 couches, la borne obtenue par le modèle semi-analytique est plus souple que la borne HS. Cet effet est toutefois nettement moins prononcé que pour les fortes triaxialités des contraintes. Cette différence est mise en évidence plus nettement sur le graphe présenté sur la figure 4.5b. Ainsi, la nouvelle borne obtenue à partir du modèle semi-analytique est plus souple que l'ensemble des autres bornes (Gurson, Gārājeu, Hashin-Shtrikman) quelle que soit la triaxialité des contraintes considérée sauf pour une triaxialité des contraintes

infinie où elle converge vers Gurson pour un nombre suffisant de couches.

L'estimation auto-cohérente (Estimation AC) de la surface de plasticité obtenue se situe en dessous de la borne quel que soit le taux de triaxialité. Au taux de triaxialité infini, une expression analytique donnant l'évolution des modules de cisaillement en fonction du rayon de la matrice peut être établie en utilisant uniquement l'hypothèse d'incompressibilité de la matrice. En prenant un champ de déplacement sous la forme $\vec{u} = u(r)\vec{e}_r$, le champ de déformation associé se met sous la forme suivante :

$$\varepsilon(u) = \frac{\partial u(r)}{\partial r} e_r \otimes e_r + \frac{u(r)}{r} (e_\theta \otimes e_\theta + e_\phi \otimes e_\phi).$$

L'hypothèse d'incompressibilité de la matrice implique la nullité de la trace et donne lieu à l'équation différentielle suivante :

$$\frac{\partial u(r)}{\partial r} + 2\frac{u(r)}{r} = 0,$$

où le champ de déplacement $u(r)$ solution est de la forme :

$$u(r) = \frac{A}{r^2}, \quad A = \text{Constante.} \quad (4.19)$$

Cette relation a été obtenue indépendamment du comportement en cisaillement de la matrice. Dans le cas d'un comportement rigide-plastique de la matrice, le module de cisaillement sécant est défini suivant :

$$\mu = \frac{\sigma_0}{3\varepsilon_{eq}}.$$

En utilisant la relation (4.19), le module de cisaillement au sein de la matrice varie suivant le rayon r selon :

$$\mu(r) = \frac{\sigma_0}{6A} r^3. \quad (4.20)$$

On peut vérifier numériquement qu'à taux de triaxialité infini, l'évolution radiale des modules de cisaillement converge vers la solution (4.20) pour un nombre suffisant de couches (environ 30 couches pour une porosité de 1%) (Figure 4.7b).

En cisaillement pur, une discrétisation de la matrice en une seule couche permet de retrouver la borne supérieure de Hashin et Shtrikman (Figure 4.6a). Pour les faibles triaxialités, la discrétisation de la matrice en couches a une faible influence sur la contrainte d'écoulement. En effet, l'évolution des modules de cisaillement au sein de la matrice en fonction du rayon n'est pas uniforme. Néanmoins, pour les faibles porosités, cette évolution est très faible (Figure 4.7a).

De manière générale, la borne et l'estimation obtenues pour la surface d'écoulement sont plus souples que les bornes obtenues par Gurson, Gârăjeu ou l'estimation Gurson-HS.

Une comparaison des surfaces de plasticité obtenues par notre approche avec des conditions aux limites de type déformations homogènes au bord (cas où le milieu infini possède les caractéristiques mécaniques d'une phase infiniment rigide) et par un calcul par éléments finis sur une cellule sphérique pour une porosité de 1% est représentée sur les figures 4.8 et 4.8b¹. Ces courbes montrent un effet de la discrétisation de la matrice en couches sur la surface de plasticité quel que soit le taux de triaxialité. Avec une couche, on retrouve en cisaillement pur la borne de Gârăjeu (Figure 4.8b). Pour une discrétisation de la matrice en 30 couches, la surface de plasticité est intérieure à la borne de Gârăjeu, sauf en triaxialité infinie, où elle converge vers celle-ci. De manière générale, la surface de plasticité obtenue par notre modèle, avec des conditions aux limites de type déformations homogènes

¹Les calculs par éléments finis sur cellule sphérique sont dus à Jean-Claude Michel (L.M.A Marseille)

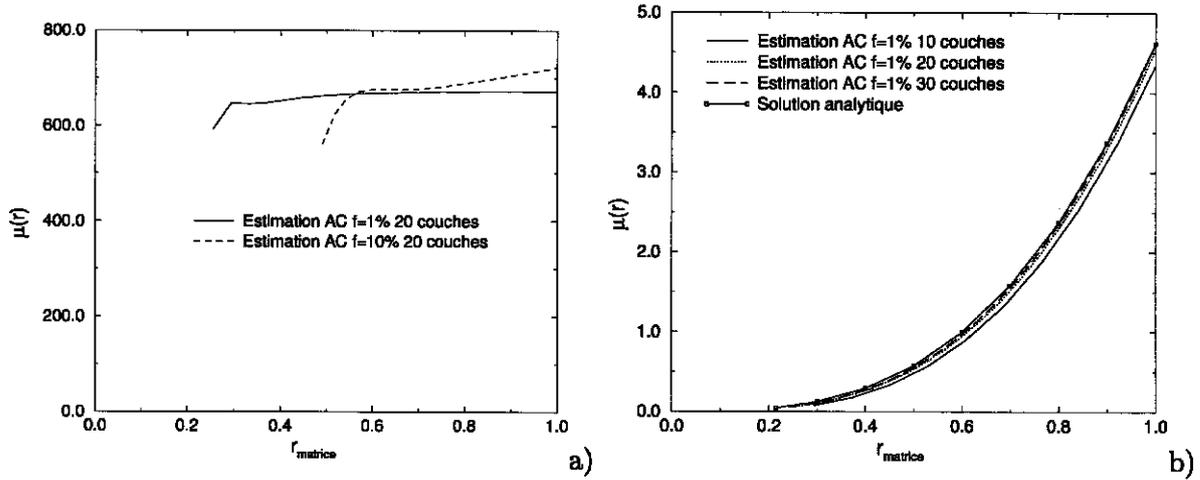


FIG. 4.7 – a) Évolution des modules sécants dans la matrice en cisaillement pur et pour différentes porosités b) Évolution des modules sécants dans la matrice en pression hydrostatique pure pour différentes couches

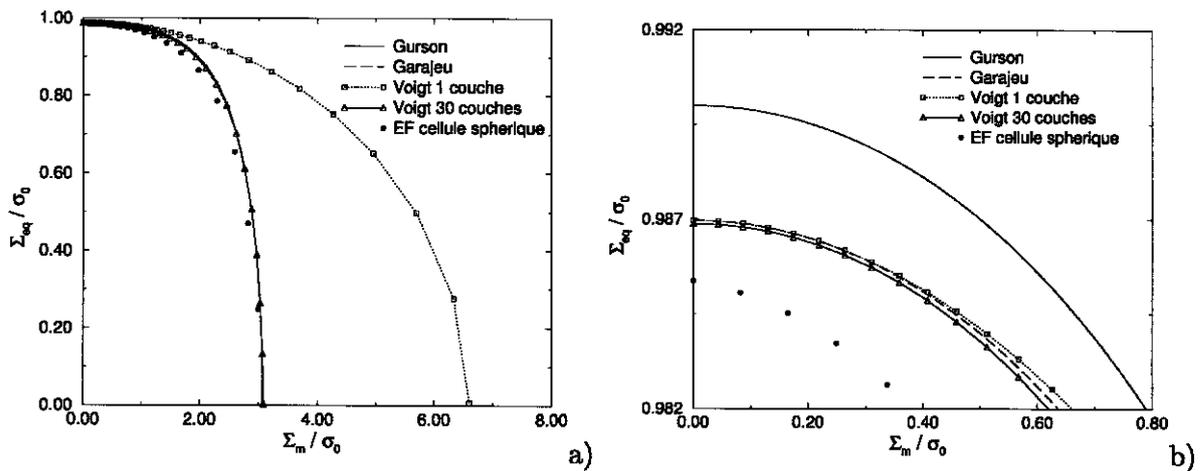


FIG. 4.8 – a) Surface de plasticité pour des déformations homogènes aux bords b) Zoom sur la contrainte en cisaillement

aux bords et avec une discrétisation de la matrice en 30 couches, est plus souple que celle de Gârâjeu mais est moins souple que celle obtenue par des calculs par éléments finis. Ceci montre que le modèle semi-analytique ne décrit pas suffisamment finement l'hétérogénéité orthoradiale.

Microstructure décrite par un assemblage de Hashin généralisé

Afin de prendre en compte les fluctuations des fractions volumiques locales, on utilise un assemblage de Hashin généralisé. La matrice de chaque motif est discrétisée en couches concentriques de même épaisseur (Figure 4.9). La surface d'écoulement est obtenue à partir de l'algorithme (4.17). On choisit de représenter la microstructure d'un matériau hétérogène par un assemblage de 2 sphères composites de fractions volumiques f_1 et f_2 différentes mais en même proportion :

$$f = c_1 f_1 + c_2 f_2,$$

avec $c_1 = c_2 = 0,5$; f correspond à la fraction volumique macroscopique du milieu poreux.

Pour une telle description de la microstructure, la surface de plasticité obtenue constitue une estimation ($L^0 =$ propriétés mécaniques du milieu homogène équivalent) où une borne ($L^0 =$ propriétés mécaniques de la plus dure de toutes les phases). Des problèmes de stabilité numérique, non résolus à ce jour (Voir le paragraphe suivant), ne nous permettent pas d'obtenir une borne pour la surface de plasticité. On s'attend à ce que la borne soit très proche de l'estimation auto-cohérente, tout en restant supérieure à cette dernière. Ainsi, toutes les surfaces d'écoulement issues du modèle semi-analytique dans le cas d'une description de la microstructure par un assemblage de sphères de Hashin généralisé ne possèdent que le statut d'estimation et seront obtenues selon une approche auto-cohérente généralisée ($L^0 =$ propriétés mécaniques du milieu homogène équivalent).

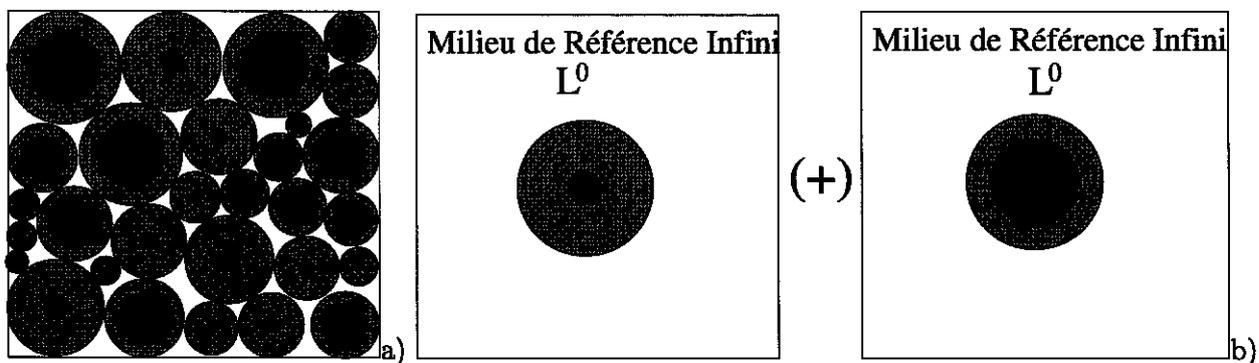


FIG. 4.9 – a) Assemblage des sphères composites de Hashin généralisé multi-couches b) Motifs multi-couches en milieu infini

En cisaillement pur, comme dans le cas d'une représentation de la microstructure par un assemblage de Hashin, la discrétisation de la matrice de chaque motif en couches n'a quasiment aucune influence sur la surface plasticité. Cette dernière est très proche de la borne de Hashin et Shtrikman bien que légèrement inférieure. En revanche, en pression hydrostatique pure, un effet d'amas peut être mis en évidence : la contrainte d'écoulement obtenue par ce modèle est plus souple que celle de Gurson. Elle est d'autant plus souple que le contraste entre les porosités locales est important : cette remarque est correct avec la contrainte $c_1 = c_2 = 0,5$ mais nous verrons un peu plus loin dans le texte qu'il n'en est rien dans un cas plus général. L'introduction du facteur q par Tvergaard rend la contrainte d'écoulement plus faible que celle prévue par le modèle semi-analytique. Mais ce dernier, contrairement au critère de Gurson-Tvergaard, ne nécessite l'ajustement d'aucun paramètre.

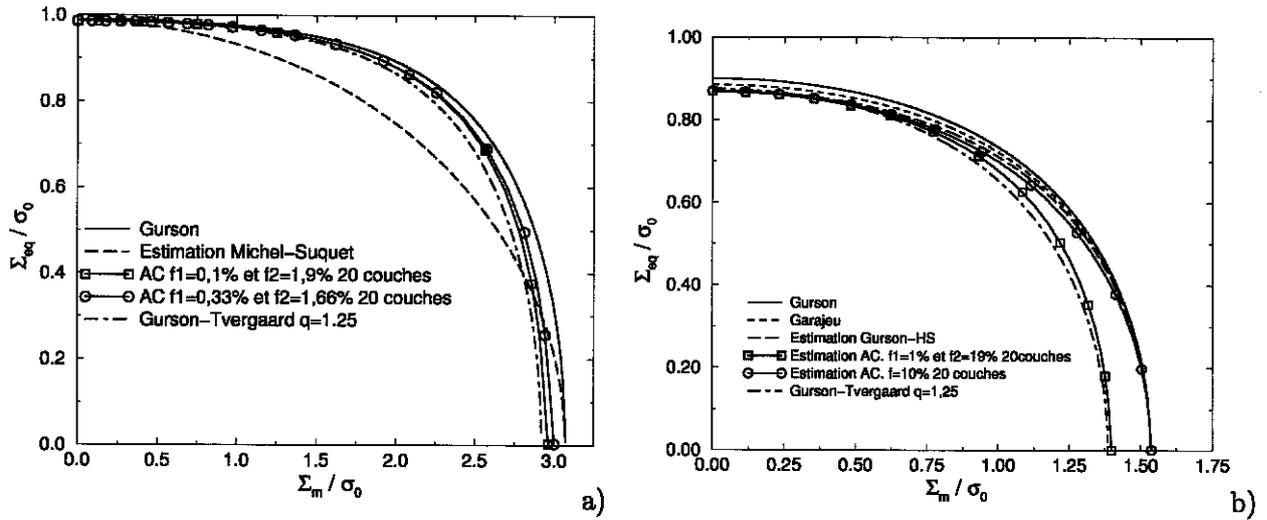


FIG. 4.10 - Surface de plasticité pour un assemblage de Hashin généralisé a) $f=1\%$ b) $f=10\%$

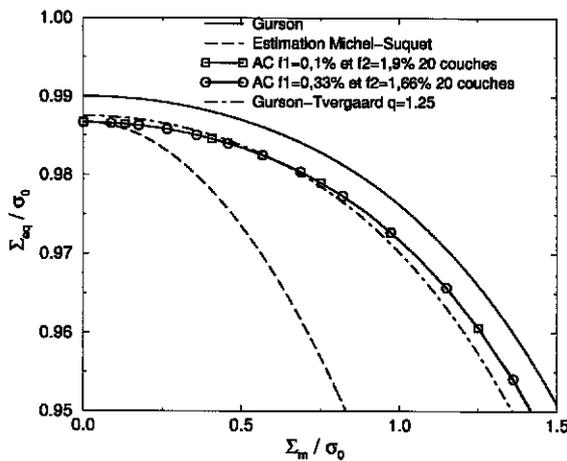


FIG. 4.11 - Zoom sur la contrainte en cisaillement pour $f=1\%$

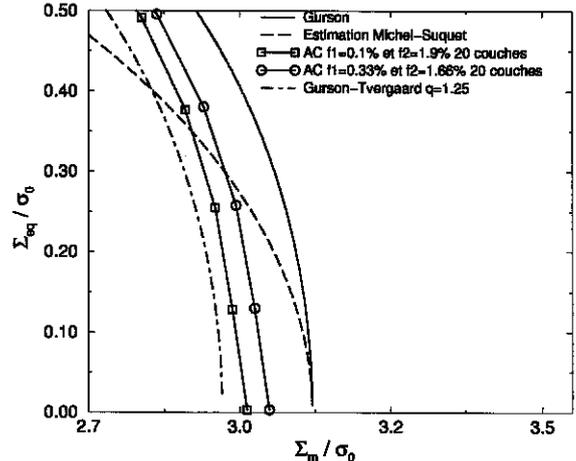


FIG. 4.12 - Zoom sur la contrainte d'écoulement en pression hydrostatique pour $f=1\%$

L'effet du contraste entre les fractions volumiques locales sur la surface d'écoulement peut aussi être étudié. Pour ce faire, la microstructure du matériau est supposée représentée par un assemblage de Hashin généralisé constitué de deux fractions volumiques locales différentes en proportion identique : $c_1 = c_2 = 0,5$. Pour cette étude, la porosité macroscopique est $f = 10\%$. En notant ξ le rapport entre f_2 et f_1 :

$$\xi = \frac{f_2}{f_1},$$

on fera varier ξ dans l'intervalle $[0, 1]$ (lorsque $\xi = 1$, on retrouve une microstructure de Hashin; lorsque $\xi = 0$ une des fractions volumiques locales est nulle, en l'occurrence f_2). Les comparaisons se font à proportions c_1 et c_2 fixées et identiques quelle que soit la valeur de ξ .

La figure 4.13a présente l'effet du contraste entre les fractions volumiques locales sur la surface d'écoulement pour différentes valeurs de ξ : 0, 0,3 et 1. Plus ξ augmente, plus la surface d'écoulement se contracte. Cet assouplissement est très prononcé pour les fortes triaxialités des contraintes, le cas

où $\xi = 0$ conduisant à la surface d'écoulement la plus souple.

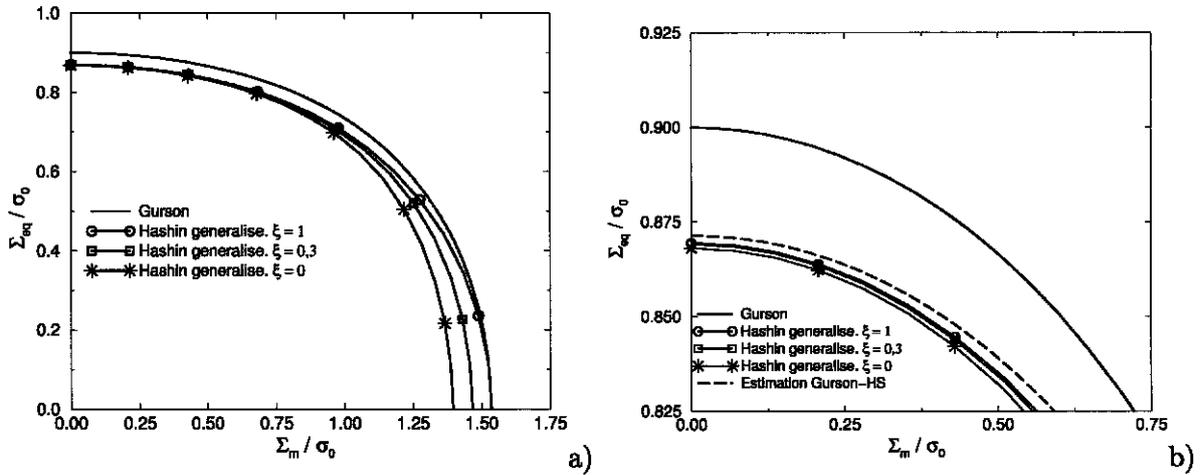


FIG. 4.13 – a) Effet du contraste entre les porosités locales sur la surface d'écoulement b) Zoom de a sur les faibles triaxialités des contraintes

Cet effet est également mis en évidence pour les faibles triaxialités des contraintes (Figure 4.13b) mais de manière moins prononcée. On constate également que, quelle que soit la valeur de ξ , les surfaces d'écoulement obtenues par le modèle semi-analytique sont intérieures à la borne de Hashin-Shtrikman et à l'estimation "Gurson-HS".

4.2.3 Minimisation par gradient

Dans le cas d'une représentation de la microstructure par un assemblage de sphères de Hashin généralisé, l'algorithme de point fixe ne converge pas lorsque l'on affecte au milieu infini les propriétés mécaniques de la plus dure de toutes les phases. Pour pallier cette difficulté, nous avons recours à un algorithme de descente par gradient pour déterminer la valeur des modules sécants dans chaque phase. Cet algorithme est censé être plus performant que l'algorithme de point fixe. L'idée consiste à chercher le minimum de la fonctionnelle de Ponte Castañeda (C.6), dont l'expression est rappelée ci-dessous, en nous restreignant dans un premier temps au cas d'un comportement rigide-plastique de la matrice :

$$\begin{cases} W(E) \leq \bar{W}(E) = \inf_{\mu_r > 0} \left\{ W^0(E, \mu_r) + \sum_{r=1}^n f_r V^{(r)}(\mu_r) \right\} \\ V^{(r)}(\mu_r) = \sup_{\varepsilon} \left\{ w^{(r)}(\varepsilon) - w_{(r)}^0(\varepsilon, \mu_r) \right\}. \end{cases} \quad (4.21)$$

Les modules sécants optimaux sont ceux qui minimisent la fonctionnelle (C.6). Dans le cas d'un d'un comportement rigide-parfaitement plastique de la matrice, de limite d'élasticité σ_0 , l'énergie macroscopique $W(E)$ peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\begin{cases} W(E) \leq \bar{W}(E) = \inf_{\mu_r > 0} \left\{ W^0(E_{eq}, \mu_r) + \frac{\sigma_0^2}{6} \sum_{r=1}^n \frac{f_r}{\mu_r} \right\} = \inf_{\mu_r > 0} \Phi(E_{eq}, \mu_r) \\ W^0(E_{eq}, \mu_r) = \frac{1}{2} E : L^{\text{hom}} : E = \frac{3}{2} \left(3k^{\text{hom}} \left[\tau \frac{\mu^{\text{hom}}}{k^{\text{hom}}} \right]^2 + \mu^{\text{hom}} \right) E_{eq}^2. \end{cases} \quad (4.22)$$

La condition d'optimalité des modules sécants (C.7) s'écrit dans le cas d'un comportement rigide plastique de la matrice :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mu_r}(E_{eq}, \mu_r) = \frac{1}{2f_r} E : \frac{\partial L^{\text{hom}}}{\partial \mu_r}(\mu_r) : E - \frac{\sigma_0^2 f_r}{6 \mu_r^2} = 0 \quad \forall r \in [1, n], \quad (4.23)$$

soit, en utilisant les relations (4.3) :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mu_r}(E_{eq}, \mu_r) = \frac{3}{2} \left(3 \left[\tau \frac{\mu^{\text{hom}}}{k^{\text{hom}}} \right]^2 \frac{\partial k^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} + \frac{\partial \mu^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} \right) E_{eq}^2 - \frac{\sigma_0^2 f_r}{6 \mu_r^2} = 0 \quad \forall r \in [1, n]. \quad (4.24)$$

L'algorithme de minimisation par gradient permet de déterminer les modules sécants assurant le minimum de la fonctionnelle (4.22) pour un jeu de paramètres (τ, E_{eq}) donné [7] :

τ et E_{eq} fixés

Itération i : $\forall r \in [1, n]$ μ_r^i connus, $m = 0$

Itération $i+1$:

$$a) \mu_r^{i+1} = \mu_r^i - s B^m \frac{\partial \Phi}{\partial \mu_r^i}(E_{eq}, \mu_r^i) \quad \forall r \in [1, n]$$

$$b) \text{Vérification de la règle d'Armijo : } \Phi(E_{eq}, \mu_r^i) - \Phi(E_{eq}, \mu_r^{i+1}) \geq \sigma B^m s \left\| \frac{\partial \Phi}{\partial \mu_r^i}(E_{eq}, \mu_r^i) \right\|^2$$

Règle non vérifiée : étape a avec $m = m + 1$

Règle vérifiée : étape c

$$c) \text{Test de convergence (4.14)}$$

(4.25)

Le terme $\sigma B^m s$ permet de contrôler la vitesse de descente de l'algorithme : σ , B , m et s sont des constantes qu'il convient d'ajuster. m est initialisé à zéro, B est compris dans l'intervalle $]0, 1; 0, 5[$, et σ dans l'intervalle $]10^{-5}; 10^{-1}[$ et $s = 1$.

Bien que plus robuste que l'algorithme de point fixe, l'algorithme de descente par gradient ne donne pas les résultats attendus : il n'est pas très stable même pour un faible nombre de couches par motifs (typiquement 2). Ceci résulte certainement de l'erreur induite par le calcul numérique des dérivées partielles. Une solution analytique de $\frac{\partial L^{\text{hom}}}{\partial \mu_r}$ permettrait peut-être de pallier toutes ces difficultés de convergence, solution analytique qui serait obtenue par dérivation de (4.7), ce qui constitue une opération lourde et fastidieuse. L'obtention pratique d'une borne supérieure pour la surface d'écoulement d'un milieu poreux décrit par un assemblage de sphères de Hashin généralisé reste donc un problème ouvert, les problèmes de défaut de convergence n'ayant pas été surmontés durant cette thèse.

Dans cette section, nous nous sommes restreint à l'étude d'un matériau hétérogène possédant deux fractions volumiques locales différentes mais en proportions identiques. Toutefois, ce modèle peut prendre en compte des distributions de concentrations locales pouvant provenir de l'expérience. La question de la méthode d'obtention de ces fractions volumiques locales est abordée dans la section suivante. Elle s'accompagne d'une comparaison entre les surfaces d'écoulement obtenues par des calculs par T.F.R. 3D et celle obtenue par le modèle semi-analytique.

4.3 Comparaisons avec des calculs par T.F.R. 3D

Cette partie est consacrée à la confrontation entre les surfaces d'écoulement obtenues par des calculs par T.F.R. 3D présentés dans le chapitre 3 et celles obtenues par le modèle semi-analytique. La

surface d'écoulement obtenue par ce dernier dans le cas de matériaux représentés par un assemblage de sphères de Hashin s'est avérée être tout à fait pertinente vis-à-vis de celles issues de modèles existants tels que celui de Gurson et ses extensions micromécaniques et de plus, possède le statut de borne supérieure rigoureuse. Toutefois, il reste à apprécier quelle est la pertinence de ce modèle lorsque l'on s'écarte de l'assemblage de sphères de Hashin pour couvrir des situations plus générales de fluctuation des concentrations locales.

4.3.1 Méthodes d'obtention des concentrations locales

Contrairement aux calculs par T.F.R., le modèle semi-analytique ne peut prendre en compte des informations statistiques sur la microstructure d'un matériau hétérogène qu'au travers des distributions des fractions volumiques locales de porosité. Il est à craindre qu'une mauvaise description de la microstructure en termes de fluctuations de concentrations locales induira une erreur importante sur la réponse du matériau hétérogène. Pour définir un motif de volume V_{MAT} (V_{MAT} = volume de matrice + volume du pore correspondant), il faut associer à chaque sphère i de rayon r_i et de volume V_i une certaine quantité de matrice telle que la fraction volumique f_i du motif i soit définie selon :

$$f_i = \frac{V_i}{V_{MAT}^i}. \quad (4.26)$$

Nous présentons deux méthodes permettant de définir V_{MAT}^i et d'obtenir ainsi les fluctuations des fractions volumiques locales dans un matériau hétérogène.

Une première méthode de réalisation de fluctuations de concentrations locales est basée sur un découpage de l'espace en cellules de Voronoï. A chaque défaut est associé une certaine quantité de matrice correspondant à l'ensemble des points qui sont le plus proches, en termes de distance euclidienne, du centre de ce défaut² (Figure 4.14a). La cellule de Voronoï associée au centre de la sphère i est de volume V_{MAT}^i . Ainsi, le rapport entre le volume de la sphère V_i et le volume de matrice associé définit une concentration locale f_i (4.26). Pour définir des motifs à partir de ces

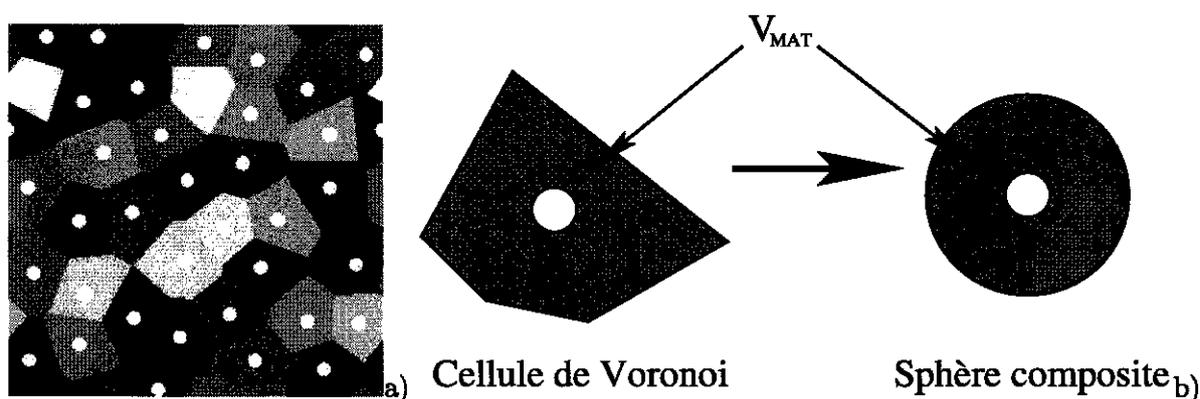


FIG. 4.14 – a) Partition de l'espace en cellules de Voronoï b) Approximation : cellule de Voronoï = Motif de concentration identique

concentrations locales, nous assimilons la quantité de matrice V_{MAT}^i attribuée à la sphère i à celle

²Le méthode pour obtenir les cellules de Voronoï est décrite dans le chapitre 2

d'une couronne sphérique de même volume (Figure 4.14b) dont le rayon R_{MAT}^i est défini par

$$(R_{MAT}^i)^3 = \frac{3}{4\pi} V_{MAT}^i.$$

Au final, il y a autant de motifs qu'il y a de cavités. L'inconvénient de cette méthode tient au fait qu'elle attribue à tous les défauts qui sont à la périphérie d'un amas une très faible fraction volumique, ce qui peut conduire à sous-estimer leur rôle dans le processus d'endommagement contrairement aux résultats obtenus par les calculs par T.F.R. 2D et 3D du chapitre 3.

Une seconde méthode permettant d'extraire les distributions des concentrations locales dans un matériau hétérogène consiste à appliquer le modèle de Stienen décrit dans le Chapitre 2 et que l'on rappelle brièvement : ce modèle consiste dans un premier temps à découper l'espace en cellules de Voronoï selon la même méthode que précédemment et, dans un second temps, à déterminer pour chaque cellule le rayon R_c de la plus grande coquille de matrice, centrée sur le défaut (Figure 4.15a), et qui doit être strictement incluse dans la cellule (Figure 4.15b). De par leur construction,

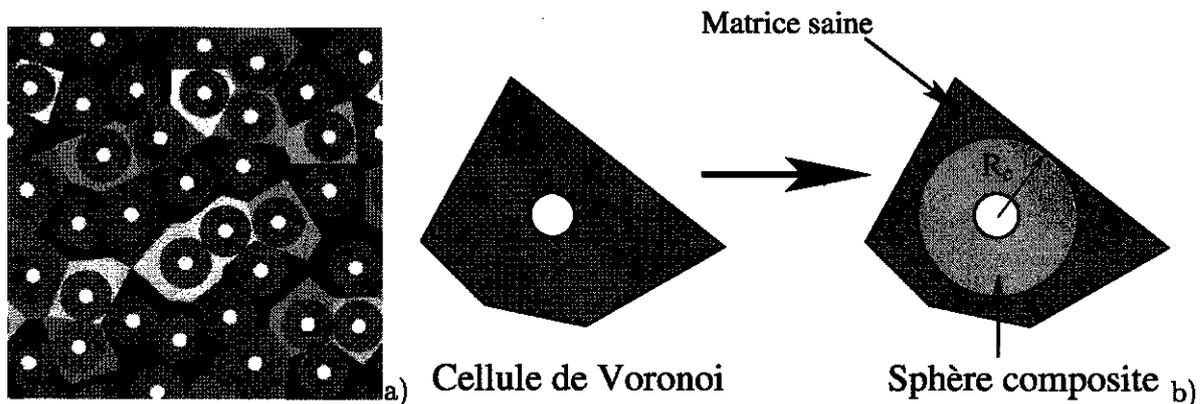


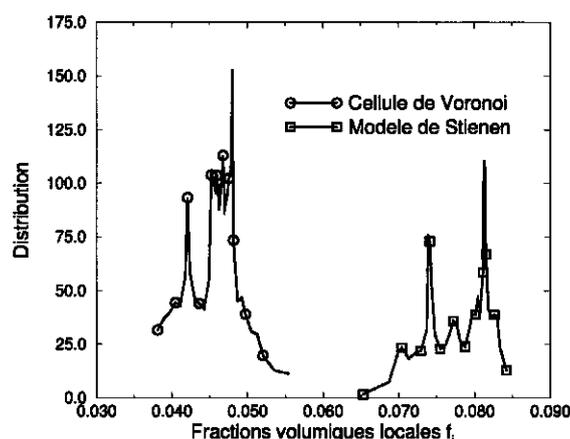
FIG. 4.15 - a) *Modèle de Stienen à l'échelle des motifs* b) *Approximation : cellule de Voronoï = Motif + matrice saine*

les motifs ne peuvent se chevaucher mais peuvent entrer en contact les uns avec les autres. Ils peuvent également être séparés par du matériau sain. Chaque cellule de Voronoï contient ainsi un motif (cavité de forme sphérique centrée sur une matrice sphérique) et de la matrice saine. Au final, nous avons autant de motifs qu'il y a de cavités ainsi qu'un motif supplémentaire représentant le matériau sain : c'est un motif homogène de porosité nulle dont la proportion c_{n+1} est donnée par la relation suivante :

$$c_{n+1} = 1 - \sum_{i=1}^n c_i, \tag{4.27}$$

n étant le nombre de motif de porosité non nulle. La fraction volumique locale des motifs de porosité non nulle est défini par $f_i = \left(\frac{r_i}{R_c^i}\right)^3$.

Les distributions en volume des fractions volumiques locales issues de la microstructure 2D (Figure 4.14a) au travers d'une partition de l'espace en cellule de Voronoï ou à partir du modèle de Stienen sont représentées sur la figure 4.16.

FIG. 4.16 – *Distribution des porosités locales*

4.3.2 Comparaison T.F.R. 3D / Modèle semi-analytique

Nous disposons maintenant de deux outils permettant d'extraire les fluctuations des concentrations locales sur un matériau hétérogène et d'en tracer des distributions directement exploitables par le modèle semi-analytique et ce quelle que soit la morphologie du matériau considéré. Nous sommes donc en mesure de pouvoir effectuer des comparaisons sur les surfaces d'écoulement obtenues par des calculs numériques par T.F.R. 3D³ et par le modèle semi-analytique. On rappelle que les chargements utilisés pour effectuer les calculs par T.F.R. 3D sont les suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Sigma = \begin{pmatrix} T & \gamma & 0 \\ \gamma & T & 0 \\ 0 & 0 & T \end{pmatrix} : \text{Chargement 1} \\ \Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{pmatrix} : \text{Chargement 2.} \end{array} \right. \quad (4.28)$$

Dans les comparaisons qui vont suivre, au sein des microstructures 3D aléatoires et à amas, les centres des cavités sont supposées être en distribution isotrope⁴ car, comme nous l'avons évoqué précédemment, de par sa construction le modèle analytique suppose que les défauts sont de forme sphérique et en distribution isotrope. L'étude de la distribution des cavités dans les microstructures 3D simulées n'a pu être menée au cours de cette thèse. Pour vérifier cette hypothèse, il conviendrait d'utiliser la covariance dont le principe est décrit en annexe B. Pour le modèle semi-analytique, le critère de convergence (4.14) η vaut $\eta = 4.10^{-8}$. Dans cette partie, la surface d'écoulement issue du modèle semi-analytique est obtenue dans le cadre d'une approche auto-cohérente.

Cas des microstructures aléatoires

En guise de première confrontation entre les surfaces d'écoulement obtenues par le modèle semi-analytique selon une approche auto-cohérente et les calculs par T.F.R. 3D, on considère une mi-

³Se référer au Chapitre 3 pour une description détaillée de la mise en œuvre de tels calculs

⁴Dans les simulations la distribution des cavités est périodique et ne peut donc être rigoureusement isotrope. Elle peut l'être dans la limite où le rapport entre la taille de la cellule et la taille des cavités est très grand voire infini, dans la mesure où dans le mode de simulations on n'introduit pas de direction privilégiée.

crostructure aléatoire (Figure 4.17a) de fraction volumique égale à 0,6% et contenant 39 pores de forme sphérique et de taille identique dans un cube unité.

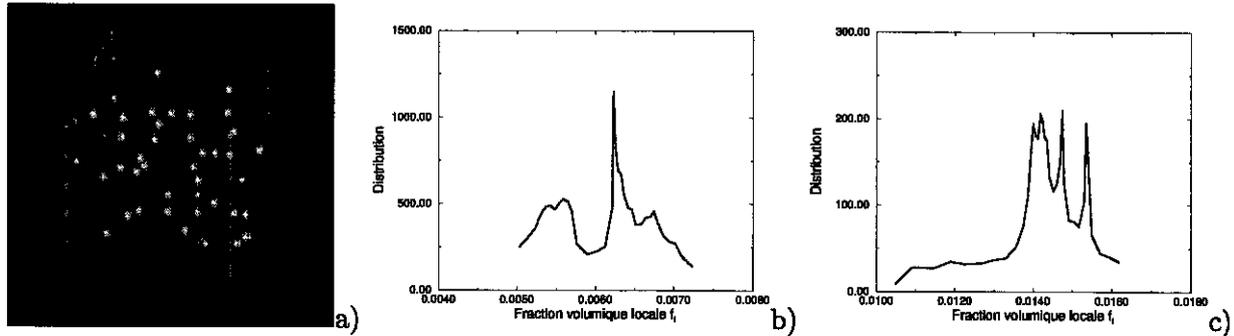


FIG. 4.17 – a) Microstructure 3D aléatoire. Distributions des concentrations locales b) Modèle de Voronoï c) Modèle de Stienen

Les figures 4.17b et 4.17c présentent les distributions des concentrations locales issues de la figure 4.17a selon respectivement le modèle de Voronoï et le modèle de Stienen. Les fractions volumiques locales issues du modèle de Stienen sont plus importantes que celles issues des cellules de Voronoï. Le principe utilisé pour que le modèle semi-analytique puisse prendre en compte ces fluctuations des concentrations est le suivant : quel que soit le modèle utilisé pour obtenir les fractions volumiques locales (Voronoi ou Stienen), à chaque cavité est associée une quantité de matrice (déterminée selon la procédure décrite dans le paragraphe 4.3.1), formant ainsi un motif. Pour simplifier, nous entrons dans le modèle analytique autant de motifs qu'il y a de cavités présentes dans la microstructure. Dans le cas d'une description de la microstructure à partir du modèle de Stienen, il y a un motif supplémentaire qui représente la matrice saine : c'est un motif homogène, i.e., de porosité nulle. Dans le cas de la microstructure aléatoire (Figure 4.17a), la proportion du motif homogène est $c = 56\%$.

Une autre technique, identique à celle utilisée dans [17], consiste à approcher la distribution des concentrations locales, par exemple, par une loi gaussienne et à segmenter cette dernière. Cette dernière reste toutefois peu adaptée à nos distributions des concentrations locales.

La figure 4.18 présente une comparaison entre les surfaces d'écoulement obtenues par les calculs par T.F.R. 3D et celles obtenues par le modèle semi-analytique dans le cadre d'une approche auto-cohérente généralisée. Une représentation des fluctuations des porosités locales au moyen des cellules de Voronoï ne permet pas de mettre en évidence un effet d'une répartition aléatoire de cavités sur la contrainte d'écoulement : la surface d'écoulement est très proche, pour les fortes triaxialités, de la borne de Gurson (Figure 4.19a). En revanche, lorsque la distribution des concentrations locales est obtenue à partir du modèle de Stienen, la surface de charge issue du modèle semi-analytique est très proche de celle issue des calculs par T.F.R. pour les fortes et pour les faibles triaxialités des contraintes.

Dans le cas des faibles triaxialités, l'importance de la méthode utilisée pour obtenir les fluctuations des concentrations locales est moindre (Figure 4.19b). La surface de charge obtenue par le modèle semi-analytique est au dessus de celle issue des calculs par T.F.R mais n'est pas trop éloignée de celle obtenue avec un chargement axisymétrique. Les valeurs de la contrainte d'écoulement obtenues à partir des différents modèles pour une triaxialité des contraintes nulle et infinie sont reportées dans le tableau 4.1.

Notons par ailleurs que le modèle semi-analytique ne représente pas l'effet du troisième invariant

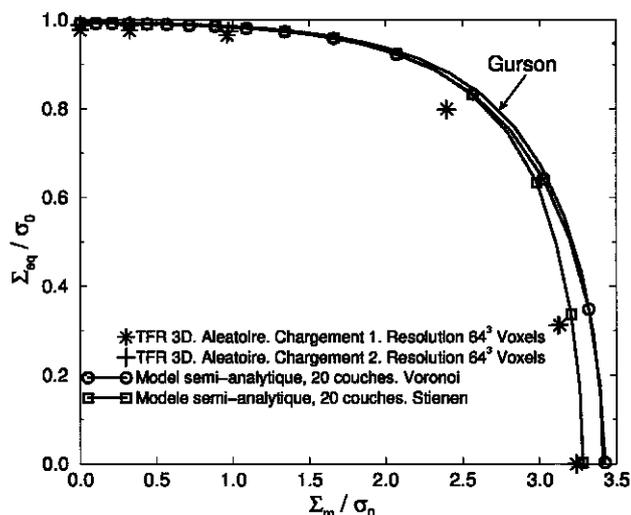


FIG. 4.18 – Surface d'écoulement obtenue pour la microstructure aléatoire (Figure 4.17a) Comparaison entre le modèle de Gurson, les calculs par T.F.R. 3D et le modèle semi-analytique

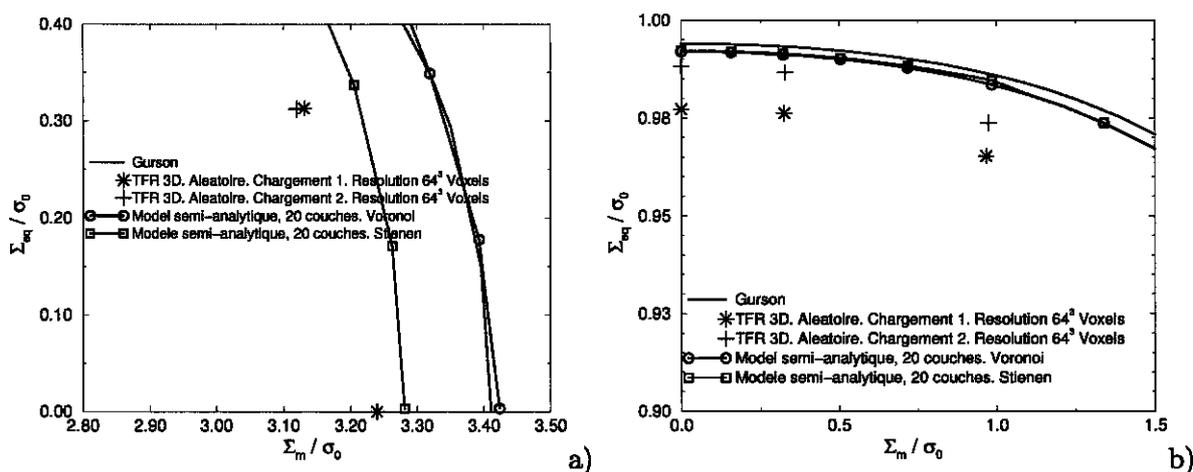


FIG. 4.19 – a) Zoom sur les fortes triaxialités b) Zoom sur les faibles triaxialités

des contraintes (Figure 4.19b). Ceci résulte du fait que les données macroscopiques nécessaires pour obtenir une surface d'écoulement sont la triaxialité des contraintes τ , qui fixe le chargement, et la déformation équivalente macroscopique E_{eq} , qui fixe l'amplitude du chargement. L'effet du troisième invariant pourrait être mis en évidence par le modèle semi-analytique si, au lieu d'imposer τ et E_{eq} , on imposerait directement le chargement au travers de E par exemple, comme pour les calculs par T.F.R. Ceci reviendrait à calculer directement le moment d'ordre 2 (4.1) et à ne pas le faire dépendre de la triaxialité des contraintes τ et de la déformation équivalente macroscopique E_{eq} .

Afin d'accentuer les tendances obtenues, des comparaisons similaires sont menées avec une fraction volumique plus élevée. Dans cette optique, une microstructure 3D aléatoire de fraction volumique $f = 4\%$ est simulée selon un schéma de type "cerise" (Figure 4.20). Elle contient 40 cavités de forme sphérique et de taille identique. Les distributions des fluctuations des concentrations locales obtenues sur cette microstructure à partir d'une partition de l'espace en cellules de Voronoï et du modèle de Stienen sont représentées sur les figures 4.20b et 4.20c respectivement.

	Gurson	HS	TFR 3D Axi.	TFR 3D Cis.	MSA Voro	MSA Stienen
$\frac{\Sigma_m}{\sigma_0}$	3,41	—	3,23	3,23	3,42	3,28
$\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}$	0,994	0,992	0,989	0,977	0,992	0,992

TAB. 4.1 – Comparaison des valeurs des contraintes d’écoulement entre les différents modèles pour des triaxialités des contraintes nulle et infinie pour une fraction volumique $f = 0,6\%$. MSA = Modèle semi-analytique

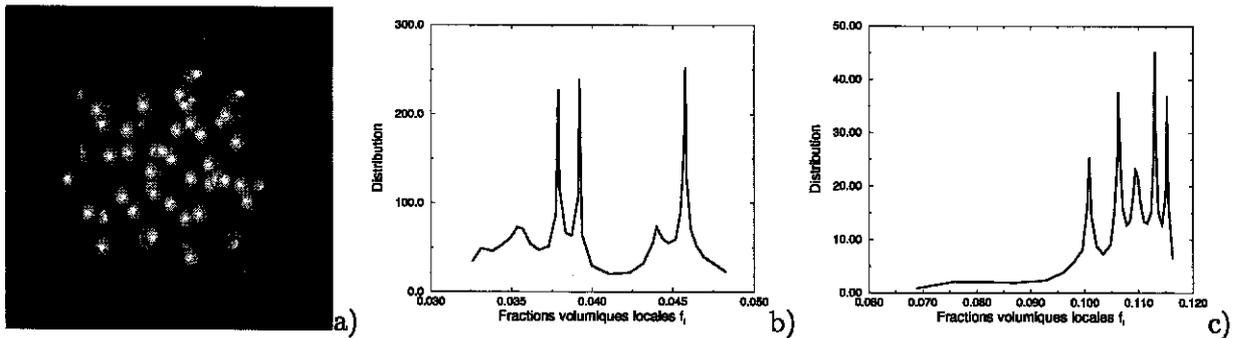


FIG. 4.20 – a) Microstructure 3D aléatoire $f = 4\%$. Distributions des concentrations locales b) Modèle de Voronoï c) Modèle de Stienen

Les tendances sont exactement les mêmes que celles obtenues pour une fraction volumique plus faible : la surface d’écoulement calculée à partir du modèle semi-analytique est très proche de celle issue de calcul par T.F.R. 3D pour un chargement purement hydrostatique et lorsque la distribution des concentrations locales est obtenue à partir du modèle de Stienen. La surface d’écoulement de type “Voronoi” (i.e., lorsque la distribution des fractions volumiques locales est obtenue à partir des cellules de Voronoï) converge vers la borne de Gurson (Figure 4.21). En revanche, pour les faibles triaxialités des contraintes, la méthode d’obtention des fractions volumiques locales n’influe quasiment pas sur la valeur de la contrainte d’écoulement. Les surfaces d’écoulement obtenues avec le modèle semi-analytique sont très proches de celles obtenues par des calculs T.F.R. 3D avec un chargement axisymétrique. Notons que l’effet du troisième invariant des contraintes s’accroît avec l’augmentation de la fraction volumique.

De la même manière, les valeurs de la contrainte d’écoulement obtenues à partir des différents modèles pour une triaxialité des contraintes nulle et infinie sont résumées dans le tableau 4.2.

	Gurson	HS	TFR 3D Axi.	TFR 3D Cis.	MSA Voro	MSA Stienen
$\frac{\Sigma_m}{\sigma_0}$	2,146	—	1,943	1,943	2,144	2,013
$\frac{\Sigma_{eq}}{\sigma_0}$	0,96	0,947	0,933	0,906	0,946	0,946

TAB. 4.2 – Comparaison des valeurs des contraintes d’écoulement entre les différents modèles pour des triaxialités des contraintes nulle et infinie pour une fraction volumique $f = 4\%$

Un bon accord sur les surfaces d’écoulement est observé entre le modèle semi-analytique de type “Stienen” et les calculs par T.F.R. 3D axisymétriques pour des triaxialités des contraintes nulle et infinie, l’écart étant maximal pour des triaxialités intermédiaires. Ceci est dû à une moins bonne

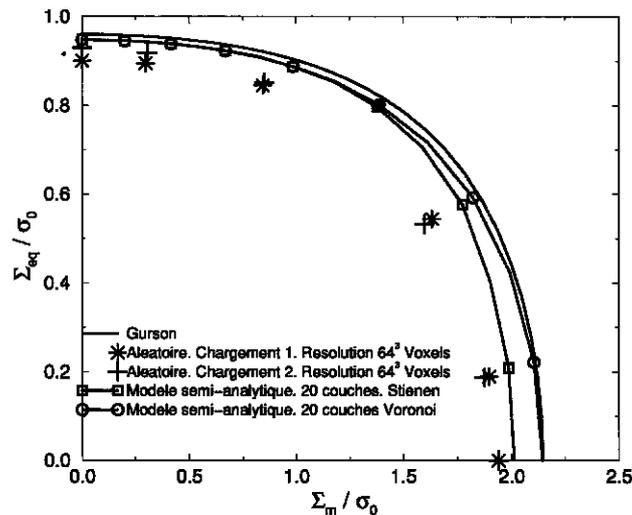


FIG. 4.21 – Surface d'écoulement obtenue pour la microstructure aléatoire (Figure 4.20a) Comparaison entre le modèle de Gurson, les calculs par T.F.R. 3D et le modèle semi-analytique

description des interactions entre cavités par le modèle semi-analytique. Finalement, quelle que soit la triaxialité considérée, les calculs par T.F.R. 3D donnent une surface d'écoulement intérieure à celle obtenue par le modèle semi-analytique. Ceci est dû à une meilleure description de la plasticité lors d'interactions entre cavités voisines. En effet, notre modèle suppose uniquement une évolution radiale de la plasticité alors que les interactions entre cavités font apparaître une localisation de la déformation prononcée sous forme de bandes : cette différence est due au fait que notre modèle est basé sur les champs moyens au sens des motifs alors que les calculs par T.F.R. sont basés sur les champs locaux avec localisation. Afin d'améliorer la description de ces interactions, il serait nécessaire (mais pas suffisant) de discrétiser la matrice dans la direction orthoradiale, en plus des couches concentriques. Malheureusement, aucun schéma linéaire donnant une expression analytique de k^{hom} et μ^{hom} n'existe actuellement pour ce type de discrétisation qui nécessiterait un recours à des outils numériques.

Cas des microstructures à amas

Intéressons-nous maintenant au cas des microstructures à amas. Pour effectuer une comparaison entre la contrainte d'écoulement obtenue par des calculs par T.F.R. 3D et celle obtenue par le modèle semi-analytique, nous procédons exactement de la même manière que pour les microstructures aléatoires. Nous disposons d'une microstructure à amas isolés (Figure 4.22) et d'une microstructure à amas connectés (Figure 4.23), toutes deux identiques à celles utilisées dans le chapitre 3. Elles possèdent une fraction volumique $f = 0,6\%$ et contiennent 39 sphères de taille identique. Ces microstructures ont été générées selon le procédé de l'intersection et du complémentaire de l'intersection de deux schémas de type "cerise" de tailles caractéristiques différentes. Ce procédé de simulation de microstructures est décrit en détail dans le chapitre 2.

Comme pour la microstructure aléatoire, les fractions volumiques locales sont extraites des deux microstructures à amas selon une partition de l'espace en cellule de Voronoï (Figures 4.22b et 4.23b) et selon le modèle de Stienen (Figures 4.22c et 4.23c). Notons cependant que la proportion de matrice saine est plus importante que celle issue de la microstructure aléatoire. Elle vaut pratiquement 95%.

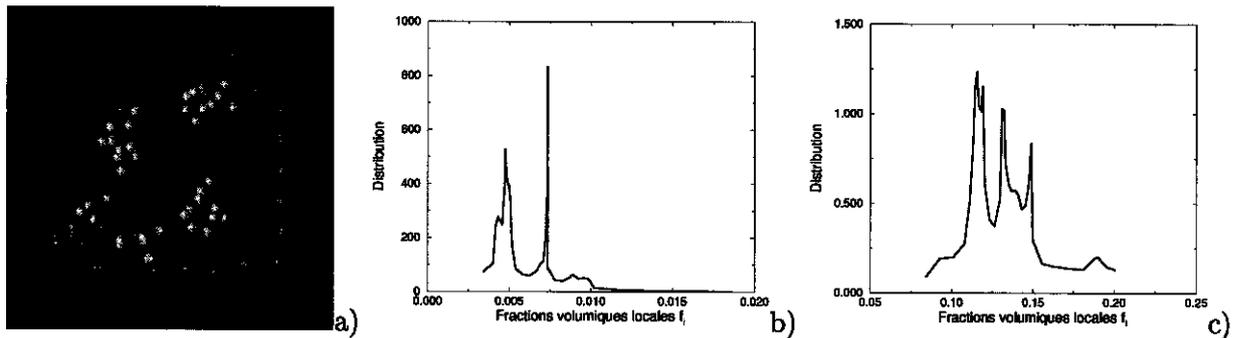


FIG. 4.22 – a) Microstructure 3D à amas isolés $f = 0,6\%$. Distributions des concentrations locales b) Modèle de Voronoï c) Modèle de Stienen

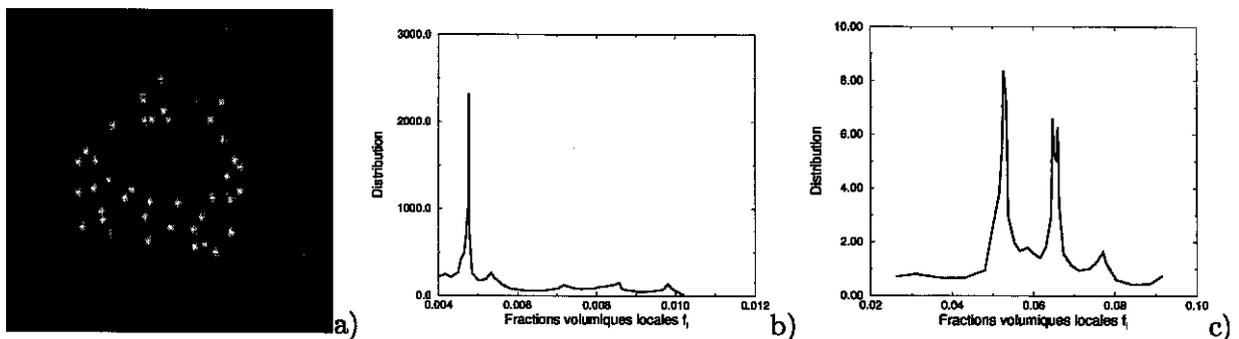


FIG. 4.23 – a) Microstructure 3D à amas connectés $f = 0,6\%$. Distributions des concentrations locales b) Modèle de Voronoï c) Modèle de Stienen

Dans le cas des microstructures à amas isolés et connectés, pour une forte triaxialité des contraintes, la contrainte d'écoulement prévue par le modèle semi-analytique est plus élevée que la borne de Gurson et ce, quel que soit le modèle utilisé pour obtenir les fractions volumiques locales. Notons cette fois-ci, que la surface d'écoulement obtenue à partir des cellules de Voronoï est plus proche de la borne de Gurson que celle obtenue à partir du modèle de Stienen. C'est la tendance inverse de celle obtenue pour les microstructures aléatoires. L'effet d'amas qui se traduit par une contrainte d'écoulement plus faible pour les microstructures à amas que pour les microstructures aléatoires n'est pas mis en évidence par le modèle semi-analytique.

Regardons plus en détails l'effet de la discrétisation de la matrice des motifs en couches sur les surfaces d'écoulement obtenues à partir du modèle semi-analytique. La surface d'écoulement obtenue à partir de la distribution des fractions volumiques locales selon le modèle de Stienen dépend très peu du nombre de couches (Figures 4.25) : la surface d'écoulement obtenue pour une discrétisation de la matrice des motifs en 1 couche et 10 couches est très faible, ce qui n'est pas le cas de la surface d'écoulement de type "Voronoï". Plus la matrice est discrétisée en couches, plus la contrainte d'écoulement converge vers la borne de Gurson pour les fortes triaxialités sans jamais l'atteindre ni passer dessous.

Nous constatons également que les surfaces d'écoulement de type "Stienen" dans le cas d'une estimation auto-cohérente généralisée et pour une discrétisation de la matrice en 1 et 10 couches sont très proches l'une de l'autre. La proportion de matrice saine est si importante, que les fluctuations des fractions volumiques locales n'ont quasiment aucun impact sur le comportement macroscopique

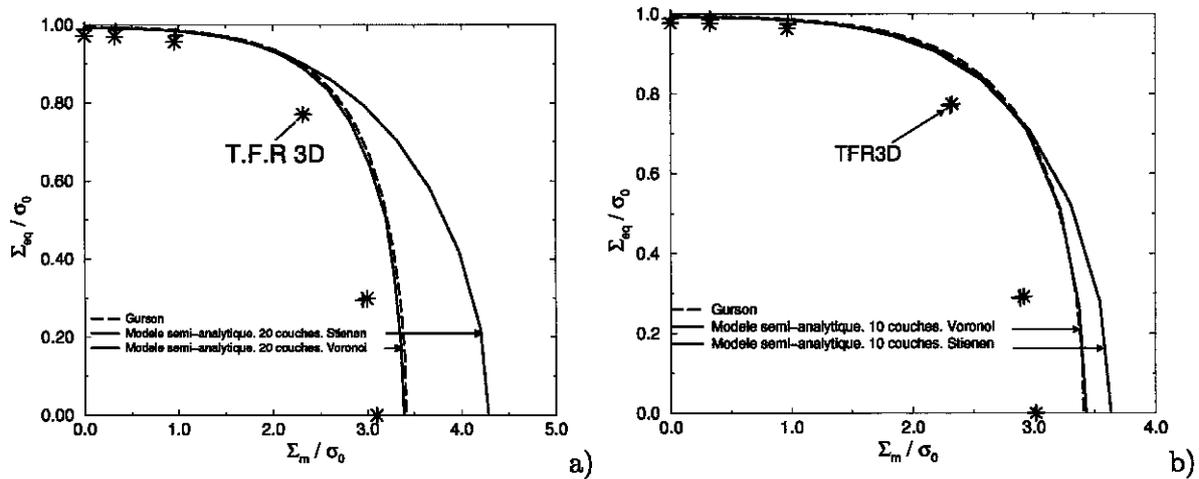


FIG. 4.24 – Comparaison entre le modèle de Gurson, les calculs par T.F.R. 3D (Résolution de 64^3 Voxels) et le modèle semi-analytique a) Microstructure à amas isolés 4.22 b) Microstructure à amas connectés 4.23

même en discrétisant la matrice de chaque motif en un nombre suffisant de couches. La présence de cavités n'induit donc pas une forte hétérogénéité des modules sécants dans la matrice du motif sain : ces derniers fluctuent très faiblement d'une couche à l'autre. Dans ce cas de figure, le matériau hétérogène se comporte comme si les modules sécants étaient uniformes dans toute la matrice : ce qui n'est autre que l'hypothèse faite pour établir la borne d'Hashin-Shtrikman (4.6). Pour cette raison, la discrétisation en couches n'influe que très peu sur la surface d'écoulement.

Une alternative peut être proposée pour déterminer la surface d'écoulement des milieux poreux à amas isolés. Cette méthode consiste à calculer les fractions volumiques locales à l'échelle des amas de cavités et non à l'échelle des cavités. En d'autres termes, il s'agit de calculer la fraction volumique de cavités dans chaque amas comme illustré schématiquement sur la figure 4.26.

En notant F_i la fraction volumique de l'amas i et v_i , le volume d'une cavité i , on a :

$$F_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^{N_{p_i}} v_j, \quad (4.29)$$

V_i est le volume de l'amas i et N_{p_i} , le nombre de cavités présente dans l'amas i . Il reste à aborder la question de la définition de V_i . Dans un souci de simplicité, V_i est défini à partir des paramètres utilisés pour simuler la microstructure à amas isolés. En effet, comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, une microstructure à amas isolés est générée par l'intersection de schémas booléens de tailles caractéristiques différente. On rappelle que pour chaque schéma booléen quatre variables aléatoires indépendantes sont implémentés : les coordonnées x , y et z du centre du disque et son rayon r tel que le rayon des cavités r_c soit largement inférieur au rayon des amas r_A . Pour une microstructure à amas isolés, le critère de conservation des cavités et le suivant : si le centre de la cavité i est contenu dans un des amas, alors elle est conservée. Ainsi, connaissant r_A et r_c , le volume V_i est défini comme suit :

$$V_i = \frac{4}{3} \pi (r_A + r)^3. \quad (4.30)$$

Lorsque les cavités sont de taille identique, on prend $r = r_c$ dans la relation (4.30). Si elles sont de

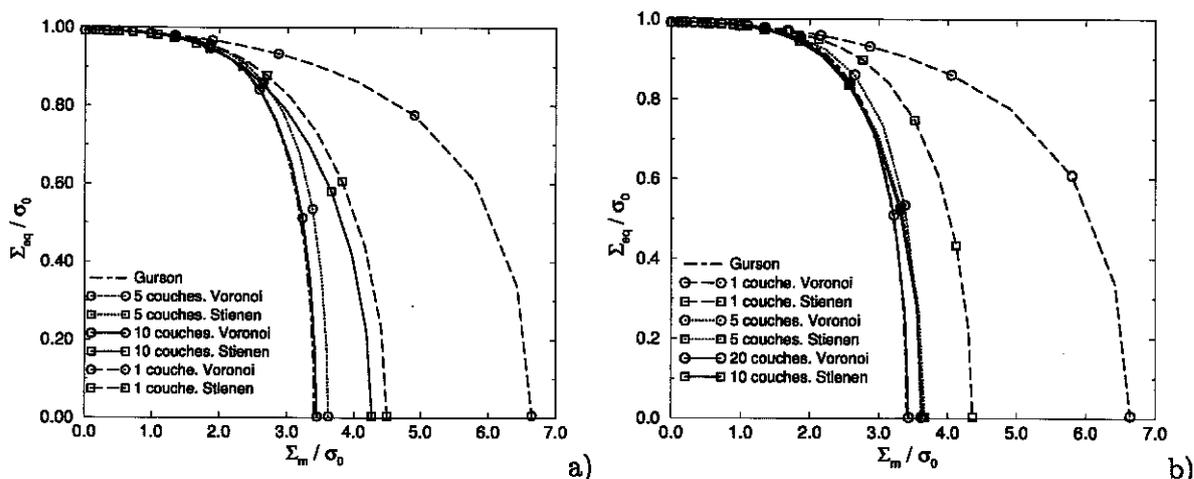


FIG. 4.25 – Effet de la discrétisation de la matrice en couches sur la surface d'écoulement a) Microstructure à amas isolés 4.22 b) Microstructure à amas connectés 4.23

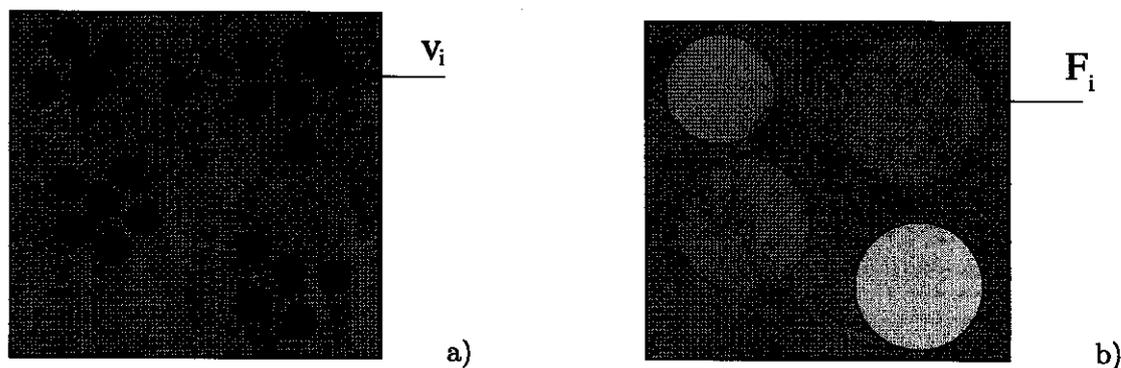


FIG. 4.26 – Représentation schématique de la méthode a) Microstructure à amas isolés b) Fractions volumiques à l'échelle des amas

taille variable, r correspond au rayon de la plus grande cavité composant l'amas i soit :

$$r = \max_{j=1, \dots, N_{p_i}} r_{c_j}.$$

Le principe d'application de la méthode est similaire à celui exposé précédemment, mais maintenant, il y a moins de motifs : un motif par amas et un motif homogène. De plus, nous supposons que les amas sont en distribution isotrope dans le V.E.R. Le motif i est alors composé d'une cavité sphérique entourée d'une matrice sphérique. La fraction volumique du motif i est celle de l'amas i . Cette technique est appliquée sur la microstructure à amas isolés présentée sur la figure 4.22 et la surface d'écoulement résultante est représentée sur la figure 4.27. Dans ce cas, la proportion de matrice saine est d'environ 83% et les fractions volumiques locales varient entre 3% et 4,5%.

Cette méthode ne permet toujours pas d'obtenir une surface d'écoulement intérieure à la borne de Gurson pour les mêmes raisons que celles évoquées précédemment. Le temps de calcul est beaucoup plus faible car il y a moins de motifs mais le résultat final semble très proche de celui obtenu à partir d'une discrétisation de l'espace en cellules de Voronoï (Figure 4.24).

A ce stade de l'étude, nous pouvons considérer que, pour arriver à mettre en évidence un effet d'amas à partir du modèle semi-analytique, il faut améliorer la démarche proposée et non chercher

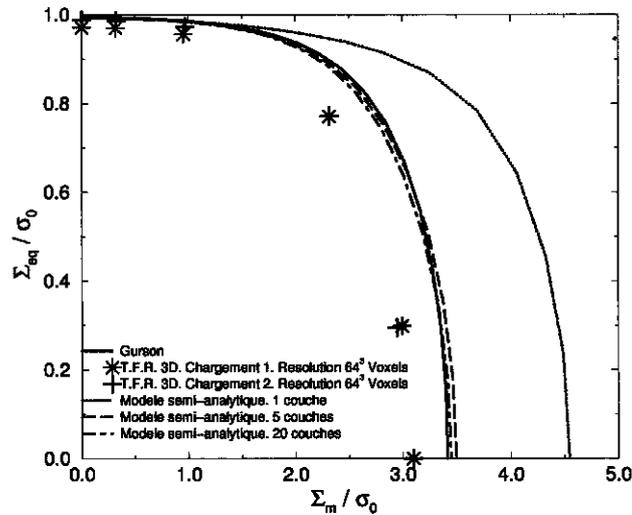


FIG. 4.27 – Surface d'écoulement obtenue pour la microstructure à amas isolés (Figure 4.22). Fractions volumiques locales à l'échelle des amas

le meilleur moyen pour obtenir les fluctuations des concentrations locales. Nous donnons, sans rentrer dans les détails, quelques pistes qui peuvent être explorées.

Une microstructure à amas connectés peut se représenter, par exemple comme un assemblage de sphères de Hashin ou de Hashin généralisées où les motifs sont représentés par une matrice saine de forme sphérique enrobée d'une coquille de matrice poreuse. Inversement, une microstructure à amas isolés peut être représentée comme une matrice poreuse de forme sphérique enrobée d'une coquille de matrice saine. Dans les deux cas, la matrice poreuse pourrait être décrite par un potentiel de type Gurson, ou l'un de ses dérivées, ou le modèle HSNL proposé ici, avec un fraction volumique égale à la porosité locale.

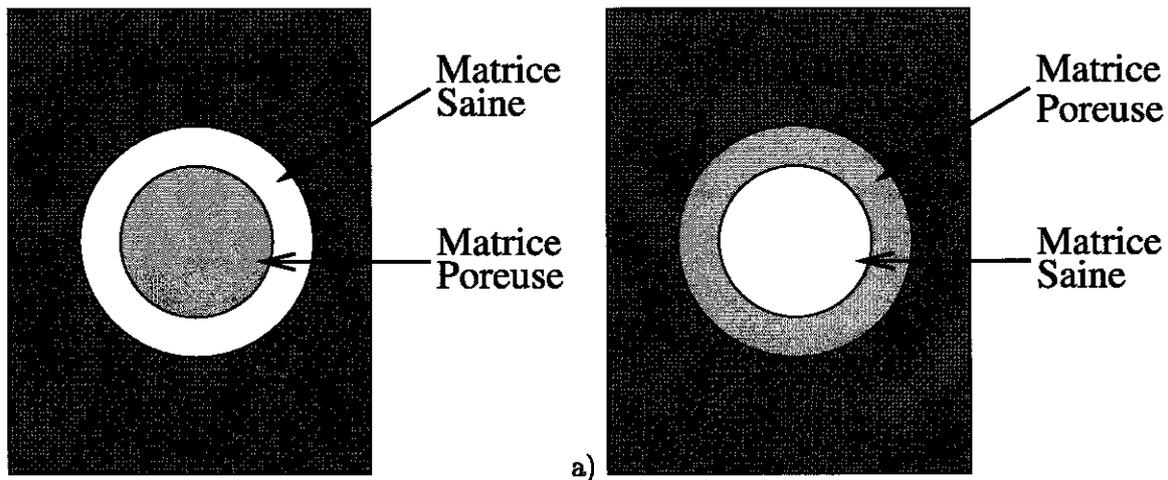


FIG. 4.28 – Problème d'inclusion composite plongée dans un milieu infini a) Matrice saine enrobant une matrice poreuse b) Matrice poreuse enrobant une matrice saine

Le matériau poreux à amas possède donc trois échelles distinctes : l'échelle macroscopique, l'échelle "mésoscopique" (échelle des amas) et l'échelle microscopique (échelle des cavités). A l'échelle intermédiaire (échelle "mésoscopique"), la porosité f est hétérogène et fluctue d'un point à point à

l'autre : $f = f(x)$ et les phases ne sont pas forcément incompressibles. La séparation d'échelle entre l'échelle intermédiaire et l'échelle microscopique est supposé suffisamment important pour que les cavités puissent être homogénéisées à l'échelle intermédiaire. Le matériau hétérogène à homogénéiser est donc composé de zones où la densité de cavités f_c est très faible voire nulle (les zones entre les amas) et des zones où la densité de cavités f_a est plus importante (les amas) comme illustré sur la figure 4.26b. Les deux zones obéissent à un critère de Gurson ou à ses dérivé. Dans le cas extrême de microstructures à amas, l'une des zones obéit au critère de von Mises et l'autre au critère de Gurson.

Le potentiel de dissipation plastique $\Pi(E)$ du matériau poreux dépend de la fraction volumique f selon :

$$\Pi(E, f) = \inf_{v \in K(E)} \langle \pi(f(x), \varepsilon) \rangle, \quad (4.31)$$

$\pi(f(x), \varepsilon)$ est le potentiel de dissipation plastique associé au critère de Gurson dont on rappelle l'expression analytique :

$$\pi(f(x), \varepsilon) = \sigma_0 \int_f^1 \left(\varepsilon_{eq}^2 + \frac{4\varepsilon_m^2}{y^2} \right)^{\frac{1}{2}} dy. \quad (4.32)$$

Le potentiel de dissipation plastique π dépend des deux invariants de la déformation ε_m et ε_{eq} : $\pi(f, \varepsilon) = \pi(f, \varepsilon_m, \varepsilon_{eq})$.

Il convient donc de résoudre le problème variationnel précédent en introduisant un milieu linéaire de comparaison. Les propriétés mécaniques de ce M.L.C. seraient déterminés par l'approche par motifs morphologiques représentatifs, le problème auxiliaire à résoudre étant composé d'une ou plusieurs inclusion(s) composites(s) multi-couches plongée(s) dans un milieu infini (Figures 4.28a et 4.28b).

Une méthode de résolution du problème variationnel (4.32) a été développée par Gârâjeu et Suquet [36] en vue de déterminer la surface d'écoulement d'un matériau hétérogène composée d'inclusions rigides et de cavités, les cavités étant de taille suffisamment petite pour que le matériau hétérogène puisse être traité comme un matériau à renforts rigides plongés dans une matrice dont le comportement local est gouvernée par le critère de Gurson-Tvergaard-Needleman.

Notons également qu'une approche variationnelle a récemment été proposée par Barthélémy et Dormieux [3] en vue de déterminer la surface d'écoulement d'un matériau hétérogène où la matrice est gouvernée par un potentiel local de type Drucker-Prager.

Conclusions et perspectives

Dans cette partie, un modèle semi-analytique a été proposé et appliqué à la recherche de la surface d'écoulement pour les milieux poreux dont les cavités sont de forme sphérique et dont les centres sont distribués de manière isotrope. Dans le cas d'une représentation de la microstructure par un assemblage de sphères composites de Hashin, le modèle semi-analytique conduit à une borne supérieure rigoureuse améliorant l'ensemble des bornes existantes pour toutes les valeurs de triaxialité des contraintes sauf en pression hydrostatique pure pour laquelle il se confond avec la borne de Gurson.

La prise en compte des fluctuations des concentrations locales au travers d'une représentation de la microstructure par un assemblage de sphères de Hashin généralisé montre un effet d'amas qui se traduit par un abaissement de la contrainte d'écoulement pour les fortes triaxialités des contraintes : la surface d'écoulement est plus souple que la borne de Gurson. Cet effet est similaire à celui obtenu

par le critère de Gurson-Tvergaard mais, dans notre cas, il n'y a besoin d'aucun ajustement de paramètres, ce qui constitue le gros avantage du modèle semi-analytique. Toutefois, dans ce cas, nous ne pouvons obtenir qu'une estimation de la surface d'écoulement car des problèmes de convergence de l'algorithme, non résolus à ce jour, ne nous permettent pas d'obtenir une borne supérieure.

Des comparaisons plus sophistiquées entre les surfaces d'écoulement obtenues à partir du modèle semi-analytique et à partir de calculs par T.F.R. 3D ont été menées sur des microstructures de morphologies diverses. Un accord correct est obtenu entre les deux modèles dans le cas de microstructures aléatoires et pour une distribution des fractions volumiques locales obtenue à partir du modèle de Stienen. Toutefois, le modèle semi-analytique ne permet pas de mettre en évidence un effet d'amas et ce quelle que soit la technique utilisée pour extraire les fractions volumiques locales.

Ce modèle peut également être étendu au cas 2D grâce à la solution analytique due à Hervé et Zaoui [46] du problème d'un cylindre composite multi-couche plongée dans un milieu infini. Le développement de ce modèle permettrait d'analyser l'effet d'amas sur les surfaces d'écoulement et de comparer ces dernières à celles obtenues par T.F.R. 2D dans le chapitre 3 (comparaisons identiques à celles menées dans cette partie pour le cas 3D). Ce travail n'a pu être mené au cours de cette thèse mais reste d'actualité pour des travaux futurs. Dans ce cas, le modèle semi-analytique 2D permet-il de pallier les faiblesses du critère de Gurson 2D ? La surface d'écoulement prévue par un tel modèle coupe-t-elle l'axe des pressions hydrostatiques avec une pente infinie ?

Rappelons que l'objectif final de cette étude est d'évaluer l'effet des fluctuations des concentrations locales sur la rupture fragile et ductile. Ce dernier a été abordé dans cette partie. Toutefois, avant d'appliquer le critère de Beremin à partir des champs locaux issus du modèle semi-analytique, en vu de modéliser la rupture fragile, il convient de comparer les champs locaux issus de ce dernier avec ceux issus de calculs par élément finis et de calculs par T.F.R. 3D. Ceci constitue l'objet de la prochaine partie.

4.4 Champs locaux dans un milieu poreux

L'objectif du modèle semi-analytique est d'évaluer l'effet d'une répartition hétérogène de cavités en amas sur la rupture ductile et sur la rupture fragile, abordée au travers de critère du Beremin, au prix d'un temps de calcul moins élevé que celui consommé par les méthodes numériques basées sur la transformée de Fourier rapide.

Après avoir évalué la pertinence du modèle semi-analytique dans la détermination des surfaces d'écoulement, il convient maintenant de vérifier si les champs mécaniques locaux issus de ce modèle sont cohérents vis-à-vis de ceux déterminés par des calculs par éléments finis. Ainsi, avant d'appliquer le critère de Beremin à partir des champs locaux issus du modèle semi-analytique, il convient de vérifier leur pertinence vis-à-vis, d'une part de calculs par éléments finis simples et, d'autre part, de calculs numériques basés sur la transformée de Fourier rapide. Nous vérifierons également si le modèle analytique décrit correctement l'écroutissage des milieux poreux.

4.4.1 Modèle semi-analytique : Estimation des champs locaux

Le problème auxiliaire que nous résolvons est composé d'inclusions composites multi-couches plongées dans un milieu infini. Une solution analytique en déplacement et donc en déformation ou en contrainte du problème de la sphère multi-couches peut être explicitée [45] en considérant les hypothèses de continuité des champs de contraintes et de déplacements à l'interface entre chaque couche. Le champ de déplacement en tout point d'une couche sphérique i de comportement élastique et de

module de Poisson ν_i , soumise à des conditions aux limites en cisaillement simple est de la forme :

$$\begin{cases} u_r^{(i)} = U_r^{(i)}(r) \sin^2 \theta \cos 2\phi \\ u_\theta^{(i)} = U_\theta^{(i)}(r) \sin \theta \cos \theta \cos 2\phi \\ u_\phi^{(i)} = U_\phi^{(i)}(r) \sin \theta \sin 2\phi, \end{cases} \quad (4.33)$$

avec :

$$\begin{cases} U_r^{(i)}(r) = A_i r - 6 \frac{\nu_i}{1-2\nu_i} B_i r^3 + 3 \frac{C_i}{r^4} + \frac{5-4\nu_i}{1-2\nu_i} \frac{D_i}{r^2} \\ U_\theta^{(i)}(r) = A_i r - \frac{7-4\nu_i}{1-2\nu_i} B_i r^3 - 2 \frac{C_i}{r^4} + 2 \frac{D_i}{r^2} \\ U_\phi^{(i)}(r) = -U_\theta^{(i)}(r). \end{cases} \quad (4.34)$$

Sous des conditions aux limites en pression hydrostatique pure, le champ de déplacement s'écrit simplement sous la forme :

$$u_r^{(i)} = F_i r + \frac{G_i}{r^2}. \quad (4.35)$$

Les coefficients A_i , B_i , C_i , D_i , F_i et G_i sont fonctions des modules de cisaillement dans chaque couche [45]. Ainsi, avant de calculer les champs locaux en chaque point de la matrice des motifs, il convient dans un premier temps de calculer les modules sécants au sein de chaque couche après s'être fixé une triaxialité des contraintes τ et une déformation équivalente macroscopique E_{eq} . L'algorithme peut se résumer comme suit :

Entrée : τ et \mathbf{E}_{eq} fixés

Initialisation des modules sécants par les modules élastiques

$$\begin{cases} \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r = \mathbf{E}_{eq}^2 \left[\frac{1}{f_r} \left(\frac{\partial \mu^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} + 3 \left[\tau \frac{\mu^{\text{hom}}}{k^{\text{hom}}} \right]^2 \frac{\partial k^{\text{hom}}}{\partial \mu_r} \right) \right], \quad \forall r \in [1, n] \\ \mu_r = \frac{\sigma_{eq}^r \left(\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r \right)}{3 \sqrt{\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_r}}, \quad \forall r \in [1, n] \\ \text{Calcul de : } \{k^{\text{hom}}, \mu^{\text{hom}}\} \text{ selon (4.7)} \\ \text{Test de convergence (4.14) } \eta = 10^{-9} \end{cases} \quad (4.36)$$

Calcul de : $\Sigma_{eq} = 3\mu^{\text{hom}} \mathbf{E}_{eq}$

Calcul des champs locaux en chaque point de la matrice

Les modules sécants au sein de chaque couche sont déterminés selon une approche autocohérente généralisée assurant une prise en compte des interactions moyennes entre cavités.

Les champs locaux issus du modèle semi-analytique ont la signification physique suivante : ce sont les moyennes des champs pris en chaque point homologue des motifs de forme et de caractéristique identique [80]. Ce point est abordé au chapitre 1.

Connaissant Σ_{eq} , il est aisé d'exprimer le tenseur des contraintes macroscopiques, par une combinaison d'un chargement macroscopique en traction simple suivant la direction 2 et d'amplitude $\nu \Sigma_{eq}$ et d'un chargement macroscopique en pression hydrostatique d'amplitude $\left(\tau - \frac{\nu}{3} \right) \Sigma_{eq}$:

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij} &= S (\delta_{i1} \delta_{j1} + \delta_{i2} \delta_{j2}) + T \delta_{i3} \delta_{j3} \\ &= \nu \Sigma_{eq} \delta_{i2} \delta_{j2} + \left(\tau - \frac{\nu}{3} \right) \Sigma_{eq} \delta_{ij}, \end{aligned}$$

avec $\nu = \text{sign}(T - S)$; δ_{ij} est le symbole de Kronecker. Dans ce qui précède, nous avons supposé que le tenseur des contraintes avait une forme axisymétrique.

Il est alors possible de déterminer, pour un taux de triaxialité donné, la valeur des champs de déformation et de contrainte locaux en chaque point X de la matrice par une combinaison judicieuse entre les champs de déplacement donnés par les équations (4.33) et (4.35). Une opération de dérivation permet de déduire le champ de déformation ε et l'application de la loi de comportement local :

$$\sigma(x) = L_r : \varepsilon(x) \quad \forall x \in r,$$

qui n'est autre que la relation linéaire reliant contrainte et déformation, permet de remonter au champ de contrainte $\sigma(x)$. On rappelle que L_r est le tenseur des modules sécants uniforme par morceau qui est déterminé selon l'extension sécante modifiée [83]. À terme, l'objectif est d'appliquer le critère de Beremin [6] à partir du champ de contrainte principale maximale obtenu par le modèle semi-analytique. Pour ce faire, une fois le champ de tenseur des contraintes connu en un point de la matrice, il convient de déterminer la contrainte principale maximale en ce point en résolvant une équation non linéaire, identique à celle utilisée dans le chapitre 3 pour les calculs par T.F.R. (3.38) et (3.39).

Toutefois, une fluctuation du champ de déformation autour de $\varepsilon(X)$ induit, par le comportement sécant de la matrice, une forte fluctuation du champ de contrainte autour de $\sigma(X)$ (Voir Figure 4.29). Pour restreindre la fluctuation du champ de contrainte, on détermine, pour un chargement macroscopique fixé, les champs de déformation locaux $\varepsilon(X)$ et on en déduit la valeur de la contrainte $\sigma(X)$ associée par le comportement non linéaire de la matrice suivant :

$$\sigma(X) = k \text{Tr}(\varepsilon(X)) \delta + 2\mu(\varepsilon_{eq}(X)) \text{Dev}(\varepsilon(X)) = f(\varepsilon(X)). \quad (4.37)$$

Ainsi, une fluctuation du champ de déformation entraîne une fluctuation moins importante du champ de contrainte. Toutefois, ce champ de contrainte n'est pas statiquement admissible.

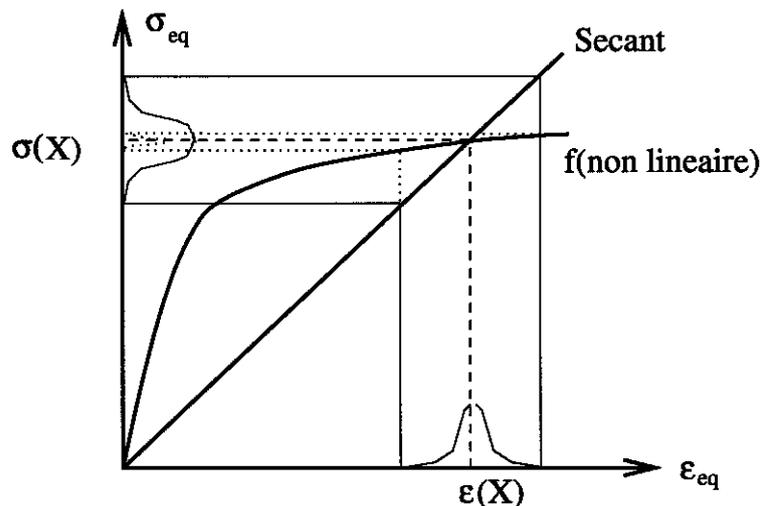


FIG. 4.29 – Comportement sécant et non linéaire

Afin de vérifier la pertinence des champs déterminés analytiquement, des calculs par éléments finis et par T.F.R. 3D seront mis en œuvre.

4.4.2 Modélisation par éléments finis

Pour effectuer des comparaisons entre les champs locaux issus du modèle semi-analytique et ceux issus de calculs par éléments finis, on se place dans le cadre de microstructure décrite par un assemblage de sphères composites de Hashin.

Approximation par un réseau périodique

Le premier type de calcul par éléments finis que nous proposons est basé sur l'hypothèse d'une microstructure périodique (Figure 4.30).

Un milieu périodique est défini par une cellule de base que l'on déplace par translation le long de trois vecteurs. Pour une structure périodique donnée, le choix des cellules de base n'est pas unique. En revanche, les propriétés effectives du matériau doivent être indépendantes du choix de cette cellule. Ce choix est souvent dicté par l'exploitation des symétries géométriques qui simplifient significativement l'exploitation des conditions aux limites de périodicité.

La situation que nous souhaitons modéliser est celle d'un arrangement hexagonal 3D périodique de particules alignées. Pour cet arrangement, la cellule unitaire vraie est un cylindre de section hexagonale. L'approximation faite pour permettre des calculs par éléments finis simples consiste à remplacer le cylindre de section hexagonale par un cylindre de même hauteur et de même volume mais de section circulaire. Cette approche est naturellement éloignée de la répartition réelle des

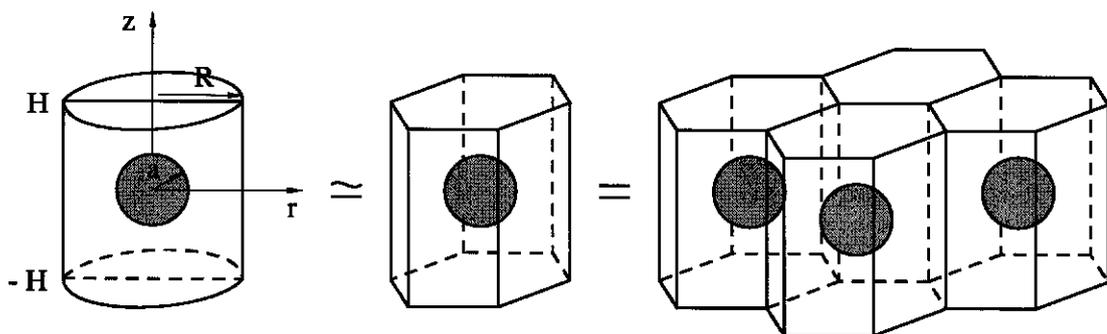


FIG. 4.30 – Approximation du réseau périodique tridimensionnel

pores dans le matériau étudié où les inclusions de sulfure de Manganèse sont regroupées de manière hétérogène en amas⁵. Toutefois, cette approximation va nous permettre de mettre en œuvre des calculs par éléments finis simples. Dans la suite, la valeur du rapport de forme des cellules est fixé à 1.

Dans le cas des milieux périodiques, les conditions aux limites en déplacement correspondent à des conditions de déformations homogènes aux bords auxquelles s'ajoute un terme correcteur u^* traduisant les fluctuations du déplacement dues à la présence d'hétérogénéités :

$$u = E \cdot x + u^*, \quad (4.38)$$

⁵L'étude de la morphologie de la microstructure de l'acier de cuve est décrite au chapitre 2

soit en coordonnées cylindriques dans le cas d'un chargement axisymétrique, en prenant l'axe z comme axe de révolution :

$$\begin{cases} u_r = \alpha r + u_r^*(r, z) \\ u_\theta = 0 \\ u_z = \beta z + u_z^*(r, z). \end{cases} \quad (4.39)$$

Le champ de déplacement u^* doit respecter les conditions aux limites de périodicité, i.e., il ne doit pas y avoir de fluctuations du champ de déplacement sur les faces opposées en $z = H$ et $z = -H$ ainsi que sur la face latérale en $r = +R$:

$$\begin{cases} u_r^*(R, z) = 0, & -H \leq z \leq +H \\ u_z^*(r, H) = u_z^*(r, -H) = 0, & 0 \leq r \leq R \\ u_r^*(r, H) = u_r^*(r, -H) = 0, & 0 \leq r \leq R \end{cases} \quad (4.40)$$

Le champ de déformation issu du champ de déplacement (4.39) s'écrit dans ce cas :

$$E = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (u \otimes n)_s ds = \alpha (e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2) + \beta e_3 \otimes e_3, \quad (4.41)$$

et la déformation équivalente calculée à partir de la déformation (4.41) vaut :

$$E_{eq} = \frac{2}{3} |E_{11} - E_{33}| = \frac{2}{3} |\alpha - \beta|.$$

De la même manière, on montre que la contrainte macroscopique associée au champ de déplacement (4.39) est axisymétrique :

$$\Sigma = S (e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2) + T e_3 \otimes e_3. \quad (4.42)$$

Par la suite, nous allons piloter les calculs par éléments finis en force, en appliquant un tenseur de contrainte macroscopique de la forme (4.42). Cela nous permettra de mener des calculs élastoplastiques à taux de triaxialité τ fixé tout au long du chargement. En effet la définition du taux de triaxialité et la forme de ce tenseur des contraintes nous permettent de définir une relation entre τ , T et S :

$$\tau = \frac{1}{3} \frac{2S + T}{|T - S|}.$$

Suivant le signe de $T - S$, une relation linéaire entre ces deux grandeurs peut être établie :

$$\begin{cases} \text{Si } T > S \Rightarrow T = \frac{3\tau + 2}{3\tau - 1} S \\ \text{Si } T < S \Rightarrow T = \frac{3\tau - 2}{3\tau + 1} S. \end{cases} \quad (4.43)$$

Pour des raisons de symétries de chargement et de géométrie, les calculs seront menés uniquement sur une moitié de cellule (Voir figure 4.33). Les conditions aux limites (4.39) se réduisent alors à :

$$\begin{cases} u_r(r = 0, z) = 0, & 0 \leq z \leq H \\ u_z(r, z = 0) = 0, & 0 \leq r \leq R \\ u_z(r, H) = U_z, & 0 \leq r \leq R \\ u_r(R, z) = U_r, & 0 \leq z \leq H. \end{cases}$$

Les conditions de déplacement uniforme sur le bord nous permettent de déterminer directement le tenseur de déformation macroscopique à partir de (4.41) :

$$E = \frac{U_r}{R} (e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2) + \frac{U_z}{H} e_3 \otimes e_3,$$

soit :

$$E_{eq} = \frac{2}{3} \left| \frac{U_r}{R} - \frac{U_z}{H} \right|. \quad (4.44)$$

Ainsi la partie équivalente du tenseur de déformation macroscopique peut se déterminer facilement par la simple connaissance du déplacement des bords extérieurs du cylindre et de ses propriétés géométriques.

Principe du modèle de la cellule emboîtée

La cellule cylindrique à base hexagonale permet de représenter la classe bien particulière de microstructures qu'est le réseau périodique à répartition hexagonale. Or, dans notre cas, les pores ou les inclusions de sulfure de manganèse ne sont pas réparties périodiquement dans le matériau mais aléatoirement, se regroupant dans certaines zones en amas. Le modèle proposé pour décrire une telle situation morphologique repose sur une description de la microstructure par un assemblage de sphères composites de Hashin ou de Hashin généralisé. La description de la microstructure retenue pour effectuer les calculs par éléments finis est l'assemblage des sphères composites de Hashin. On se ramène donc à étudier le cas d'une inclusion composite plongée dans un milieu infini suivant une approche "auto-cohérente" numérique afin de prendre en compte les interactions moyennes entre les cavités. Il n'y a aucune justification théorique du passage de l'assemblage des sphères composites de Hashin au problème de l'inclusion composite plongée dans un milieu infini non linéaire. Toutefois ces champs fournissent une estimation raisonnable des champs locaux réels dans un matériau poreux.

Pour déterminer numériquement le comportement macroscopique du matériau hétérogène à partir de cette méthode, il convient de faire un calcul numérique itératif. Dans un premier temps, on s'impose un chargement macroscopique en contrainte et on attribue au milieu infini, pour initialisation, la courbe d'érouissage de la matrice, c'est à dire celle attribuée à la matrice du motif. Après un premier calcul par éléments finis, la courbe d'érouissage macroscopique est calculée par une opération de moyenne des grandeurs locales sur le motif. Cette technique est détaillée un peu plus loin dans le texte. La matrice du milieu infini et la matrice du motif obéissent à un comportement de type von Mises. Ensuite, il faut comparer cette nouvelle courbe d'érouissage à celle imposée au milieu infini avant le calcul par éléments finis. Si elles sont identiques, il y a la convergence. Si elles sont différentes, il faut réitérer le processus en attribuant aux éléments du milieu infini la nouvelle courbe d'érouissage (celle calculée sur le motif) jusqu'à l'obtention de la convergence. Celle-ci est atteinte lorsque la courbe d'érouissage calculée sur le motif est confondue avec celle implantée dans le milieu infini. Ce principe est décrit schématiquement sur la figure 4.31. Ce modèle est appelé par la suite modèle "3-PhEF".

Ce processus étant très long, une alternative est proposée afin d'accélérer la convergence. La courbe d'érouissage du composite est tout d'abord déterminée par le modèle semi-analytique. Cette loi est ensuite implémentée dans ABAQUS : les éléments du milieu infini suivent la loi d'érouissage déterminée par le modèle semi-analytique et ont un comportement de type von Mises. A la fin des calculs élasto-plastiques, il faut vérifier que la loi d'érouissage macroscopique calculée sur le motif à partir des champs locaux obtenus par éléments finis coïncide avec celle du milieu infini, i.e., celle

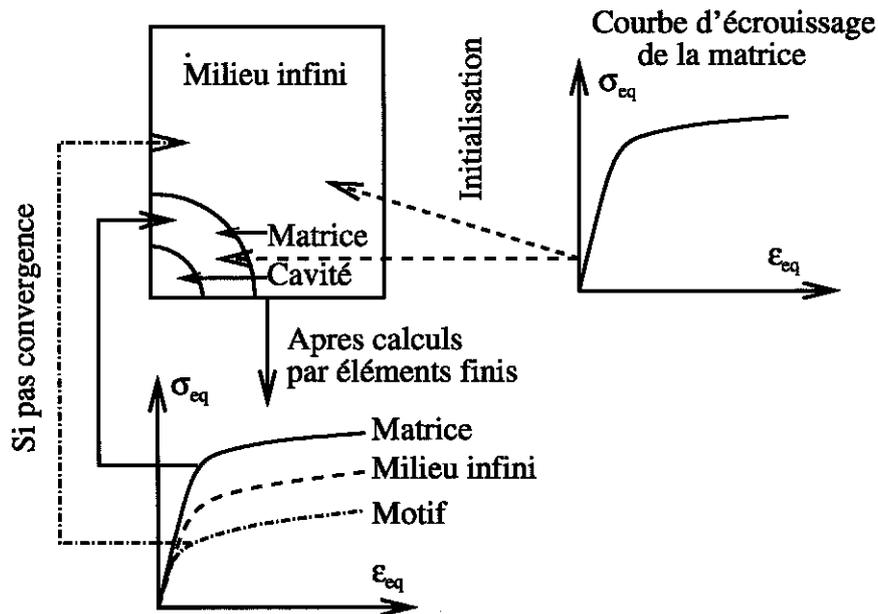


FIG. 4.31 – Principe du calcul du comportement macroscopique à partir du modèle 3-PhEF

déterminée par le modèle semi-analytique. D'un point de vue pratique, la convergence est atteinte en une seule itération. La figure 4.32 présente de manière schématique la méthode à suivre pour calculer le comportement macroscopique à partir du modèle 3-PhEF selon une approche autocohérente.

Le maillage de la cellule périodique ainsi que le modèle 3-PhEF sont représentés sur les figures 4.33a et 4.33b. Pour le calcul numérique de la cellule emboîtée (modèle 3-PhEF), il n'est pas possible de considérer un milieu rigoureusement infini. Pour ce type de calcul, la "taille" du milieu infini doit être grande par rapport à la taille du motif. D'un point de vue pratique, la dimension du milieu infini est définie comme étant 5 fois supérieure au rayon extérieur du motif. On peut s'assurer que les résultats ne varient pas si l'on considère un rapport entre taille de cavité et taille du milieu infini supérieur à 5.

La cellule périodique et le modèle semi-analytique représentent deux microstructures différentes, respectivement un arrangement périodique des pores et un assemblage aléatoire de pores. En revanche, le modèle semi-analytique et le modèle 3-PhEF représentent le même type de microstructure, i.e., une microstructure où les centres des cavités sont distribués de manière isotrope. On compare ainsi les champs mécaniques locaux issus de deux représentations identiques de microstructure. Néanmoins, les champs locaux issus du calcul 3-PhEF n'ont aucune justification théorique. La comparaison des champs locaux issus des différents modèles devra se faire sous une même sollicitation.

Hypothèses et problèmes

Les calculs par éléments finis sont effectués sous ABAQUS, dans le cadre des petites perturbations, à taux de triaxialité τ fixé et identique pour tous les pas de chargement. Un programme de post-traitement des calculs élasto-plastiques a été développé afin d'extraire, pour chaque incrément, la valeur des contraintes, des déformations et des contraintes principales, en chaque point de Gauss ainsi que le champ de déplacement aux nœuds (cas des milieux périodiques). Ce programme applique également le critère de Beremin à partir des champs locaux issus des différents modèles et détermine

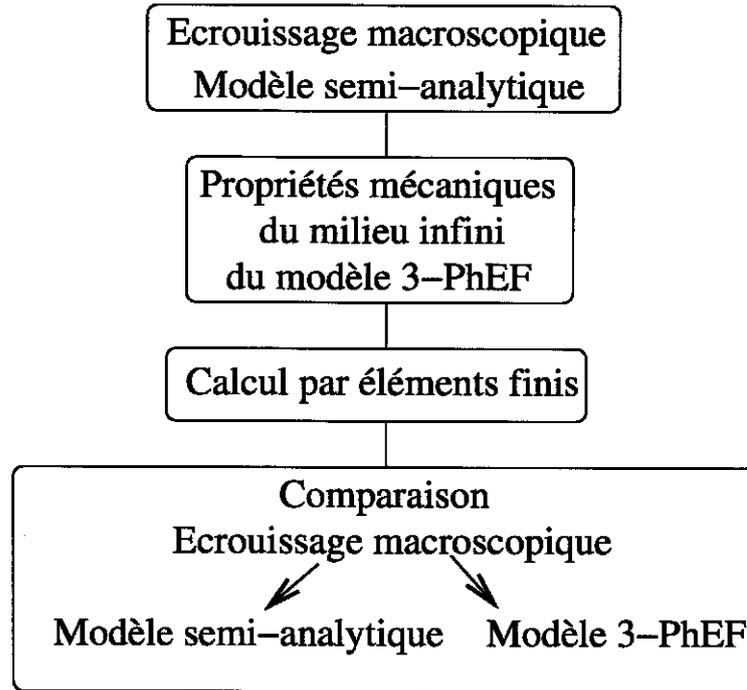


FIG. 4.32 – Principe mise en œuvre du calcul du comportement macroscopique à partir du modèle 3-PhEF

l'évolution de la probabilité macroscopique de rupture en fonction d'un paramètre de chargement. Les champs de contrainte et de déformation moyennes dans chaque élément sont déterminés grâce à la connaissance des composantes des différents champs en chaque point d'intégration et par une simple opération de moyenne, soit en notation indicielle (le poids des points de Gauss valant 1) :

$$\sigma_{ij}^{(p)} = \frac{1}{NPI} \sum_{k=1}^{NPI} \sigma_{ij}^{(p,k)} \quad \text{et} \quad \varepsilon_{ij}^{(p)} = \frac{1}{NPI} \sum_{k=1}^{NPI} \varepsilon_{ij}^{(p,k)}, \quad (4.45)$$

$\sigma_{ij}^{(p)}$ et $\varepsilon_{ij}^{(p)}$ représentent respectivement les composantes ij du champ de contrainte et du champ de déformation moyen dans l'élément p . $\sigma_{ij}^{(p,k)}$ et $\varepsilon_{ij}^{(p,k)}$ sont respectivement les composantes ij du champ de contrainte et du champ de déformation au point d'intégration k de l'élément p . NPI représente le nombre de point d'intégration dans chaque élément. Les champs de contrainte et de déformation macroscopique sont ensuite déterminés à partir des champs moyens sur les éléments, σ^p et ε^p , par une simple sommation :

$$\Sigma = \langle \sigma \rangle_{V_T} = \frac{1}{V_T} \sum_{p=1}^{Nelt} V_p \sigma^p \quad \text{et} \quad E = \langle \varepsilon \rangle_{V_T} = \frac{1}{V_T} \sum_{p=1}^{Nelt} V_p \varepsilon^p, \quad (4.46)$$

V_T étant le volume total - (pore ou inclusion) + matrice - et V_p , le volume de l'élément p . La partie équivalente de ces tenseurs est donnée par les conventions classiques :

$$\Sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \text{Dev}(\Sigma) : \text{Dev}(\Sigma)} \quad \text{et} \quad E_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \text{Dev}(E) : \text{Dev}(E)}. \quad (4.47)$$

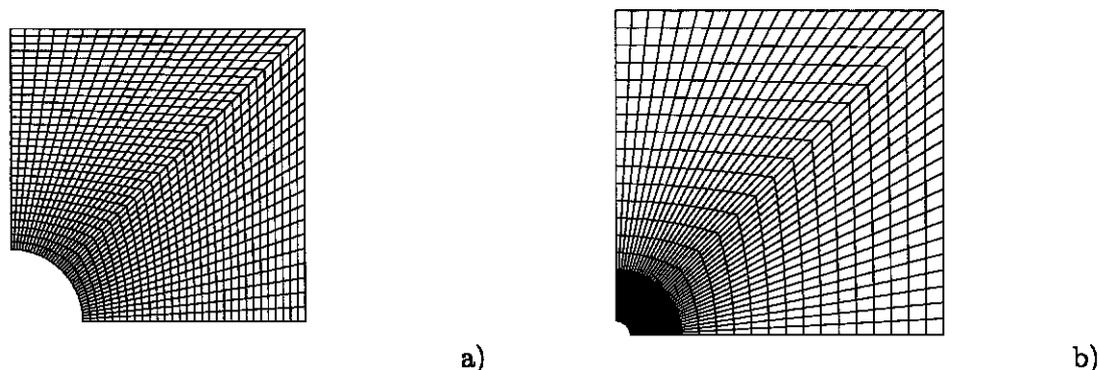


FIG. 4.33 – a) Maillage de la cellule périodique b) Maillage du modèle 3-PhEF : cellules emboîtées

Une difficulté spécifique aux milieux poreux réside dans la détermination de la moyenne du champ de déformation dans le pore puisque le champ de déplacement n'y est pas défini. Le problème ne se pose pas dans le cas des milieux périodiques puisque la déformation équivalente macroscopique est directement déterminée par les conditions aux limites de déplacement uniforme sur les bords (4.44). En revanche, dans le cas du modèle 3-PhEF, le calcul est plus complexe puisque, du fait de l'approche auto-cohérente, le champ de déplacement sur le bord externe de la sphère peut fluctuer. Il est donc nécessaire dans ce cas de calculer numériquement la moyenne du champ de déformation dans le pore selon :

$$\langle \varepsilon(x) \rangle_{pore} = \frac{1}{P} \int_P \varepsilon(x) dV = \frac{1}{P} \int_{\partial P} (\vec{v} \otimes \vec{n})_s dS. \quad (4.48)$$

Il reste à aborder la technique à utiliser pour calculer la contrainte principale maximale. Deux possibilités s'offrent à nous. La première consiste à calculer la contrainte principale maximale à partir du tenseur des contraintes moyen calculé sur l'élément. La seconde méthode consiste à prendre sur chaque élément, la plus grande des contraintes principales définie en chaque point de Gauss. C'est cette méthode qui est utilisée par la suite pour calculer les contraintes principales maximales à partir des calculs par éléments finis. On s'assurera également qu'elle est bien définie sur une zone plastifiée.

Afin de valider toutes les hypothèses, nous allons, dans un premier temps, considérer le cas d'un milieu biphasé et vérifier que, dans le cas des milieux périodiques, la déformation macroscopique équivalente donnée exactement par (4.44) coïncide avec celle obtenue en (4.47).

4.4.3 Comparaisons calculs par éléments finis / modèle semi-analytique

Cas des milieux biphasés

Afin de nous assurer que les méthodes décrites précédemment pour calculer les champs locaux en post-traitement des calculs par éléments finis et pour calculer le comportement macroscopique à partir du modèle 3-PhEF, nous proposons une brève comparaison entre les différents modèles. Pour ce faire, nous considérons un matériau biphasé constitué de particules sphériques noyées dans une matrice, représenté par un assemblage de sphères composites de Hashin. Le comportement de la matrice et des particules est élasto-plastique à écrouissage isotrope quasi linéaire (Figure 4.4.3), la matrice ayant une limite d'élasticité environ 3 fois plus importante que celle des inclusions. Ces

courbes d'écroûissage sont purement arbitraires. La fraction volumique des particules est de 5% et on considère un chargement en traction ($\tau = \frac{1}{3}$). On suppose une interface parfaite entre l'inclusion et la matrice. L'avantage de faire la comparaison avec un matériau biphasé réside dans le fait qu'il n'y a pas à calculer le champ de déformation moyen dans l'inclusion au travers d'une intégrale de contour (4.48).

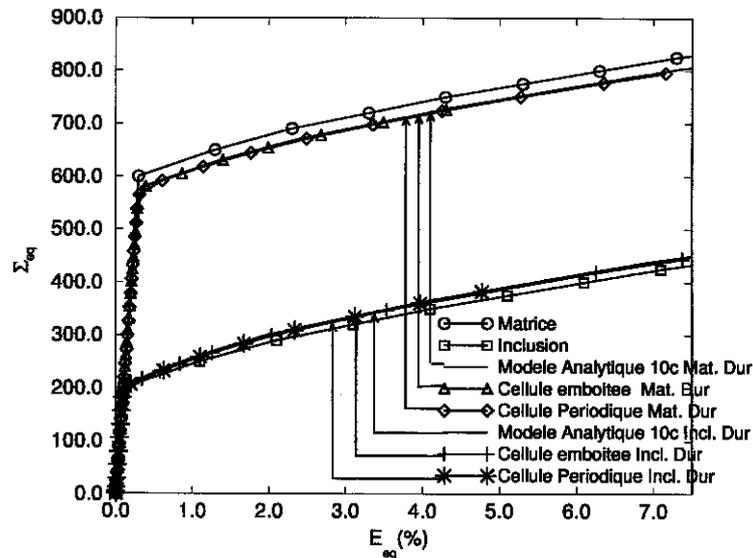


FIG. 4.34 – Comportement de la matrice et des inclusions et comportement effectif du motif : Modèle semi-analytique et calculs par éléments finis périodiques et cellules emboîtées (3-PhEF)

La courbe d'écroûissage macroscopique est obtenue à partir du modèle semi-analytique selon une approche autocohérente généralisée. La matrice et l'inclusion sont discrétisées en 10 couches. On constate sur la figure 4.4.3 qu'il y a un bon accord entre les courbes d'écroûissage déterminées par éléments finis (cellule périodique et modèle 3-PhEF) et par le modèle 3-Phases analytique. La méthode utilisée pour déterminer les champs macroscopiques à partir des champs moyennés sur les éléments donne des résultats satisfaisants : l'écart entre les relations (4.44) et (4.47) est infime.

On aurait également pu s'intéresser à la comparaison des champs locaux dans la matrice et dans l'inclusion entre les différents modèles, mais ceci sortirait du cadre de l'objectif de ce calcul. Ces comparaisons restent néanmoins d'actualité pour des travaux futurs.

Cas des milieux poreux

Intéressons-nous maintenant à la comparaison entre les différents modèles, numériques et semi-analytique, dans le cas de milieux poreux décrits par un assemblage de sphères composites de Hashin. Dans un premier temps, vérifions si le modèle semi-analytique décrit correctement l'écroûissage du milieu poreux. Pour ce faire, considérons un comportement de la matrice élastique avec écroûissage (Figure 4.35). Ce comportement est purement arbitraire. Les courbes d'écroûissage du milieu poreux obtenues à partir du modèle semi-analytique et à partir de calculs sur une cellule périodique pour deux taux de triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$ et $\tau = 2,2$ sont représentées sur la figure 4.35. On constate un accord correct entre les deux modèles. La différence est toutefois un peu plus prononcée pour une triaxialité des contraintes $\tau = 2,2$. Notons que, pour cette comparaison, il n'a pas été possible d'utiliser le modèle 3-PhEF car actuellement, un problème numérique non résolu à ce jour

ne nous permet pas de calculer $\langle \varepsilon(x) \rangle_{pore}$.

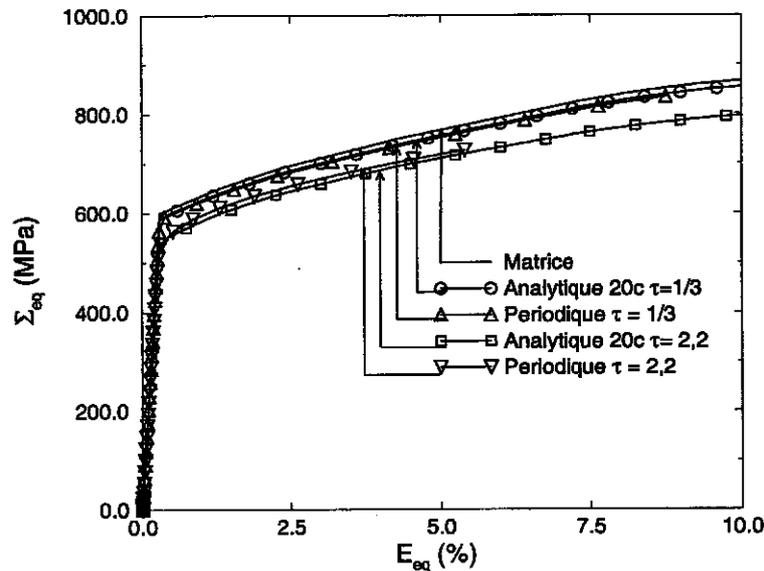


FIG. 4.35 – Courbes d'écroutissage de la matrice et courbes d'écroutissage macroscopiques obtenues à partir du modèles semi-analytique et d'un calcul périodique

Intéressons nous maintenant à la comparaison des champs locaux entre des différents modèles. Pour cela, nous utiliserons la la courbe d'écroutissage de l'acier à une température $T = -150^\circ$ disponible dans [75]. Ce choix est purement arbitraire. Une autre courbe d'écroutissage aurait aussi pu être considérée. Ces simulations numériques sont réalisées à contrainte équivalente macroscopique Σ_{eq} fixée car, dans le modèle 3-PhEF, ne pouvant calculer le champ de déformation moyen dans le pore, nous ne pouvons pas calculer E_{eq} .

Dans le cas d'un chargement macroscopique en traction simple (taux de triaxialité de 1/3) à contrainte équivalente macroscopique fixée d'amplitude $\Sigma_{eq} = 808\text{MPa}$ (ce qui correspond à une déformation équivalente macroscopique d'environ 5%) et pour une température de -150° , les cartes des contraintes équivalentes locales sont représentées sur les figures 4.37 et 4.38 pour des calculs par éléments finis respectivement, sur le modèle 3-PhEF et sur une cellule périodique. Notons que, pour le modèle 3-PhEF, $\Sigma_{eq} = 808\text{MPa}$ correspond à la contrainte de von Mises macroscopique calculée sur le motif. La figure 4.36 représente la carte des contraintes équivalentes locales issues du modèle semi-analytique, pour les mêmes conditions de chargement.

Le calcul périodique fait apparaître une bande de localisation des contraintes équivalentes à environ 45° par rapport à l'horizontale. Celle-ci traduit l'interaction avec un pore voisin. Cette bande est nettement moins marquée dans le calcul par éléments finis sur le modèle 3-PhEF et sur le modèle semi-analytique. Pour se faire une idée plus précise sur la répartition des champs locaux au sein de la matrice, il faut tracer les fonctions de distributions des contraintes équivalentes, des contraintes principales maximales et des déformations équivalentes. Celles-ci sont représentées sur les figures 4.39, 4.40 et 4.41 dans le cas d'un chargement en traction simple à contrainte équivalente macroscopique fixée ($\Sigma_{eq} = 808\text{MPa}$), pour une température de $T = -150^\circ\text{C}$ et pour une porosité de 1%.

La figure 4.39 représente les fonctions de distribution des contraintes équivalentes locales issues d'un calcul par éléments finis périodique, d'un calcul par éléments finis sur le modèle 3-PhEF et

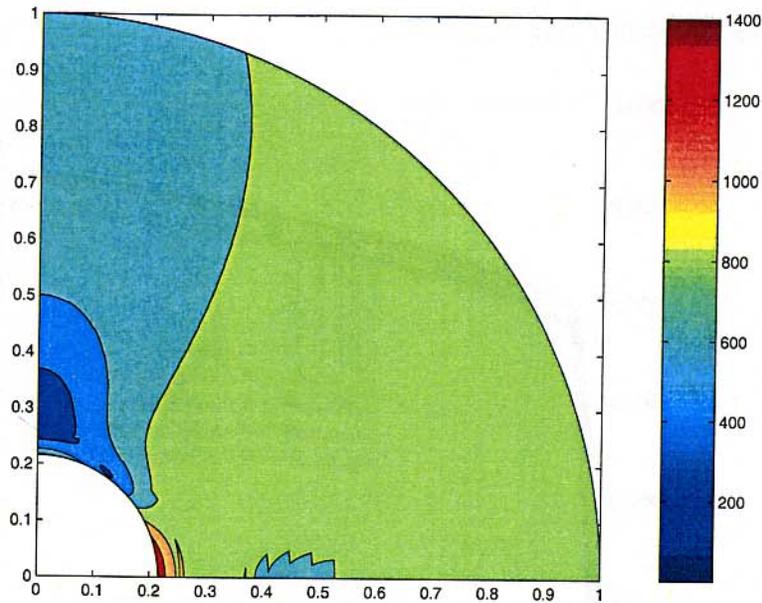


FIG. 4.36 – Contrainte équivalente : modèle semi-analytique à contrainte équivalente macroscopique fixée : 808MPa, $T=-150^\circ$, traction simple ($\tau = \frac{1}{3}$)

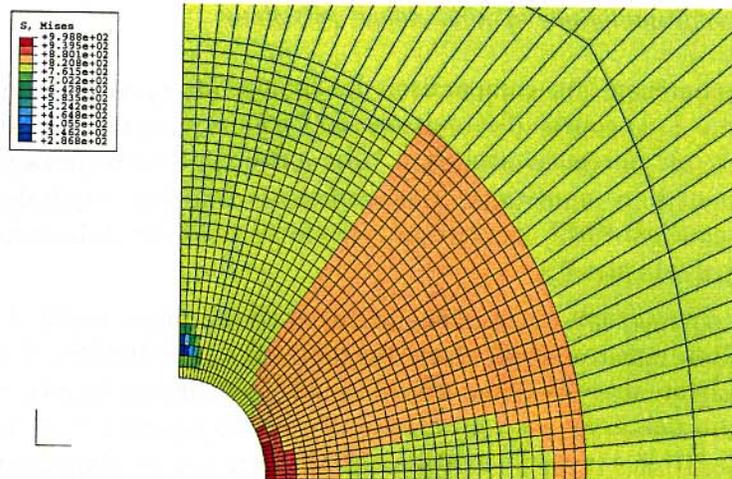


FIG. 4.37 – Contrainte équivalente : 3-PhEF à contrainte équivalente macroscopique fixée : 808MPa, $T=-150^\circ$, traction simple ($\tau = \frac{1}{3}$)

du modèle N-Phases analytique où les champs de contrainte sont déterminés, pour une déformation donnée, soit par le comportement sécant de la matrice (appelé “N-Phases analytique Secant”), soit par le comportement non linéaire de la matrice (appelé “N-Phases analytique NL”). La largeur de la distribution issue du modèle “N-Phases analytique NL” est beaucoup plus étroite que celle issue des autres modèles. L’amplitude de la distribution prévue par le modèle “N-Phases analytique Secant” est intermédiaire entre celles issues du modèle périodique et du modèle 3-PhEF. Le modèle “N-Phases analytique Secant” décrit bien les deux pics comme les modèles par éléments finis mais ne fait pas apparaître la petite “bosse” au début de la courbe. Le modèle “N-Phases analytique Secant” décrit de manière assez satisfaisante la répartition des contraintes équivalentes locales, ce qui qui

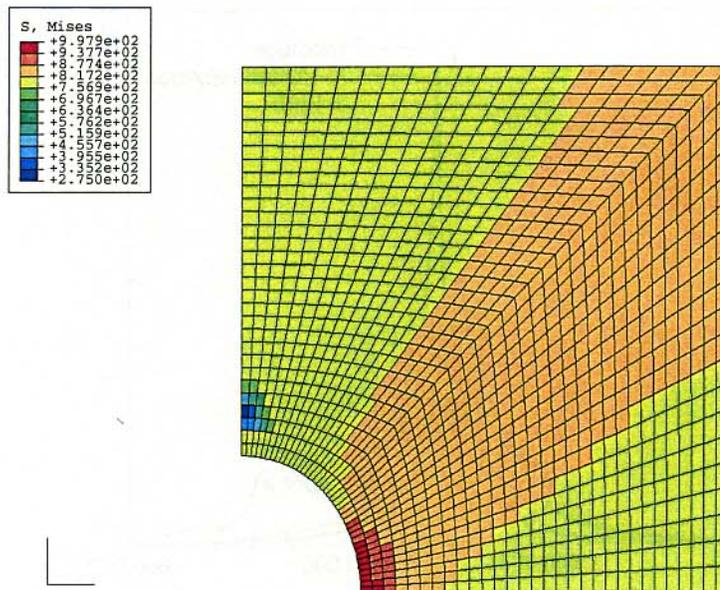


FIG. 4.38 – Contrainte équivalente : Cellule périodique à contrainte équivalente macroscopique fixée : 808MPa, $T=-150^{\circ}$, traction simple ($\tau = \frac{1}{3}$)

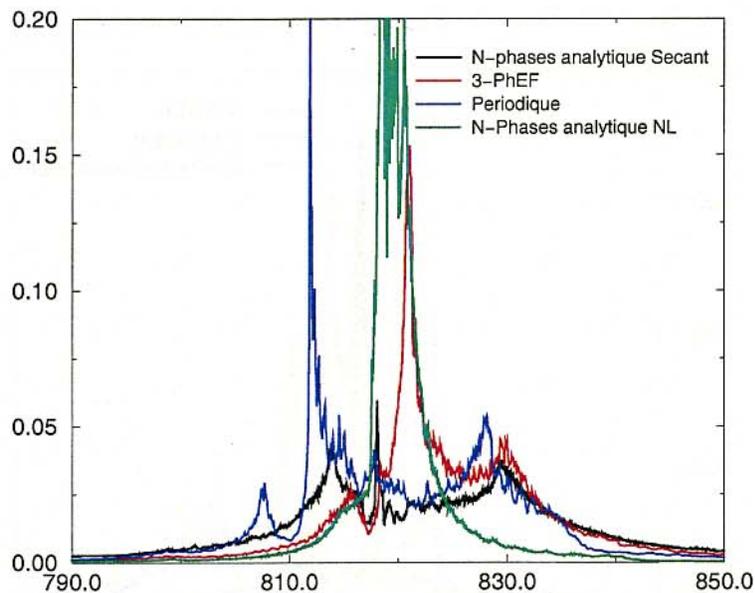


FIG. 4.39 – Fonction de distribution des contraintes équivalentes locales à contrainte macroscopique fixée : 808MPa, $T=-150^{\circ}\text{C}$

n'est pas le cas du modèle "N-Phases analytique NL".

Des remarques tout à fait similaires peuvent être faites pour les fonctions de distribution des contraintes principales maximales (Figure 4.40). Les contraintes principales maximales issues du modèle N-Phases analytique ont été uniquement déterminées, pour une déformation donnée, à par-

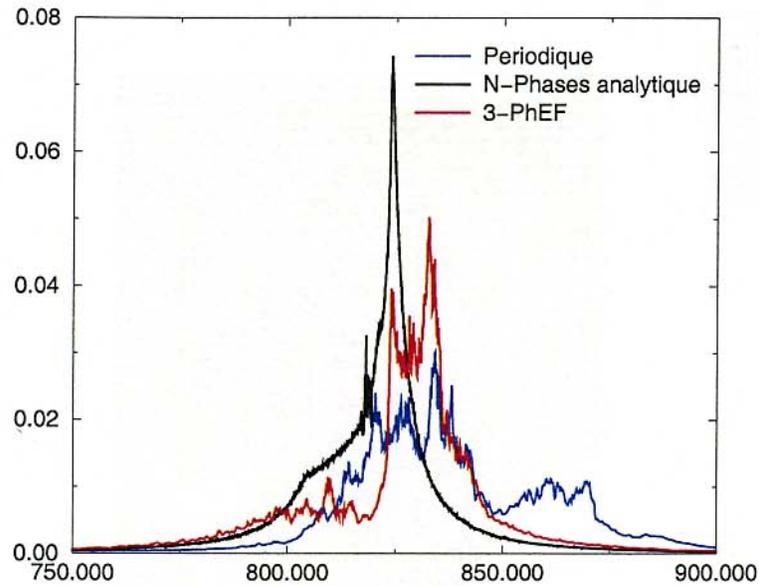


FIG. 4.40 – Fonction de distribution des contraintes principales maximales à contrainte macroscopique fixée : 808MPa , $T=-150^\circ\text{C}$

tir du comportement sécant de la matrice. Toutefois, la largeur de la fonction de distribution du modèle “N-Phases analytique” est un peu plus étroite que celle issue des modèles 3-PhEF et périodique.

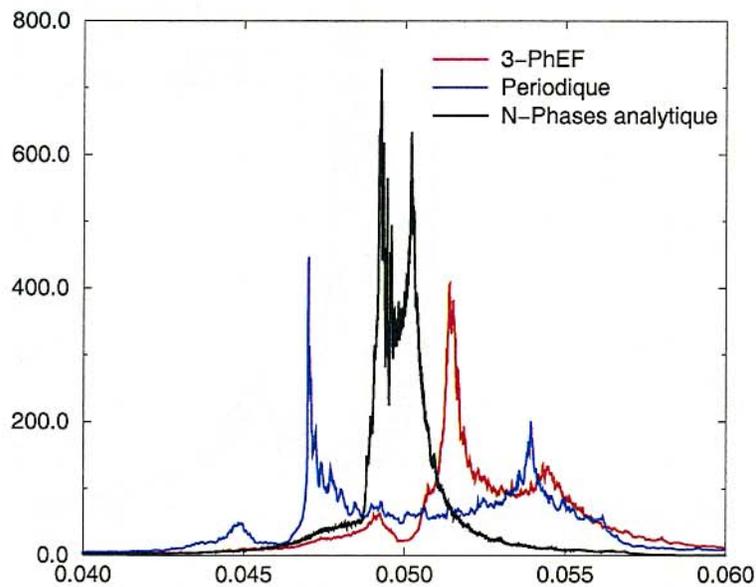


FIG. 4.41 – Fonction de distribution des déformations équivalentes locales à contrainte macroscopique fixée : 808MPa , $T=-150^\circ\text{C}$

Contrairement aux fonctions de distribution des contraintes équivalentes et des contraintes principales maximales, la fonction de distribution des déformations équivalentes issue du modèle semi-analytique n’est pas très proche de celle issue des calculs par éléments finis. Sa distribution est beaucoup plus étroite que la distribution du modèle périodique ou du modèle 3-PhEF. On peut

également constater que la fonction de distribution du modèle 3-PhEF est décalée par rapport aux prédictions des autres modèles. Ceci provient certainement d'un léger décalage, à contrainte équivalente macroscopique fixée, entre les courbes d'écrouissage du modèle N-Phases analytique et du modèle 3-PhEF. Des comparaisons similaires devraient être entreprises à déformation équivalente macroscopique fixée et pour différents taux de triaxialité.

4.4.4 Comparaison avec des calculs par T.F.R. 3D

Après avoir discuté la pertinence des champs locaux issus du modèle semi-analytique vis-à-vis de ceux issus de calculs par éléments finis sur une cellule périodique et sur une cellule emboîtée, il convient maintenant de confronter ces mêmes champs à ceux issus de calculs par T.F.R. 3D. Pour ce faire, trois microstructures de morphologies différentes sont considérées (Figure 4.42) : une microstructure aléatoire, une microstructure à amas isolés et une microstructure à amas connectés.

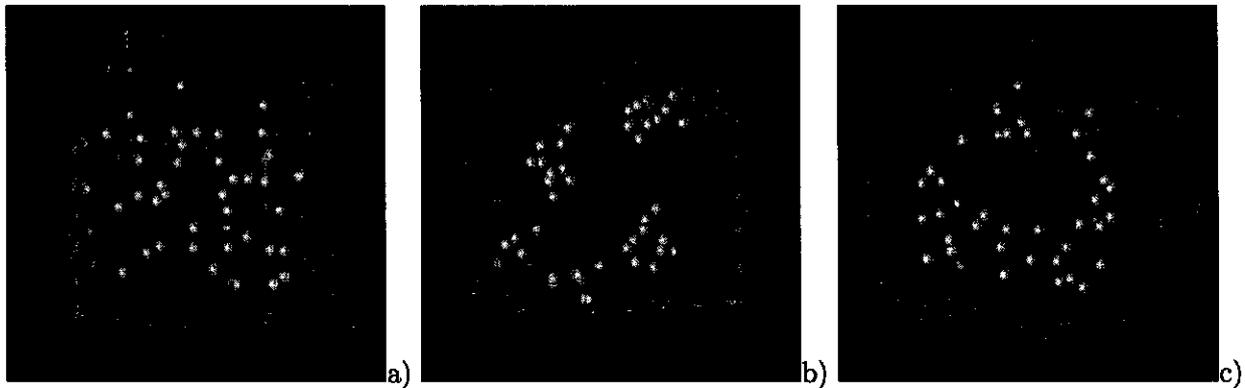


FIG. 4.42 – a) *Microstructure aléatoire* b) *Microstructure à amas isolés* c) *Microstructure à amas connectés*

Les calculs par T.F.R. 3D sont menés en contrainte imposée, ce qui nous permet de faire des comparaisons à taux de triaxialité des contraintes fixé, et le tenseur des contraintes macroscopique considéré est le suivant :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

La résolution utilisée pour les calculs par T.F.R. 3D est de 64^3 voxels. On peut s'assurer que la résolution de l'image a une influence quasi négligeable sur les propriétés mécaniques macroscopiques. La détermination du comportement macroscopique à partir du modèle semi-analytique se fait en première approximation en supposant une description de la microstructure du milieu poreux par un assemblage de sphères composites de Hashin.

La matrice est supposée avoir un comportement élastique linéaire avec écrouissage. La courbe d'écrouissage de la matrice retenue pour ces comparaisons est celle de l'acier de cuve pour une température $T = -150^\circ C$ (Figure 4.44). Le choix de la courbe d'écrouissage de la matrice est purement arbitraire : n'importe quelle courbe aurait pu être utilisée.

Pour une triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$ et $\tau = 2,2$, les courbes d'écrouissage du milieu poreux sont reportées sur les figures 4.44 et 4.43. Les calculs par T.F.R. 3D montrent que la morphologie de la microstructure n'a pratiquement pas d'influence sur le comportement effectif du milieu poreux

quel que soit le taux de triaxialité des contraintes. Ceci est dû à la prise en compte de l'écroûissage de la matrice qui tend à atténuer l'apparition de bandes de localisation de la déformation (Figure 4.45) qui sont très prononcées dans le cas d'un comportement élastique-parfaitement plastique de la matrice (comportement sans écroûissage) comme illustré dans le chapitre 3.

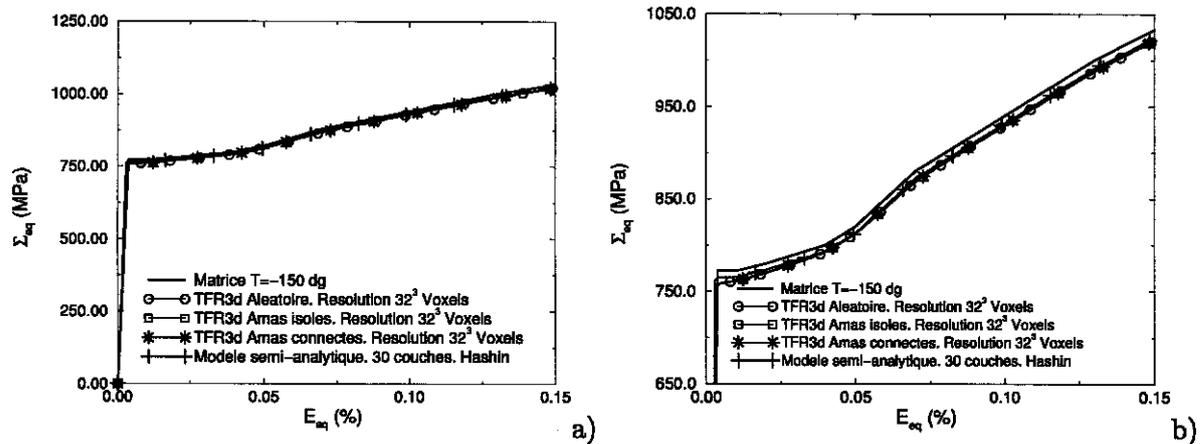


FIG. 4.43 – a) Comparaison des comportement effectifs entre les calculs par T.F.R. 3D et le modèle semi-analytique pour une triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$ b) Zoom de a

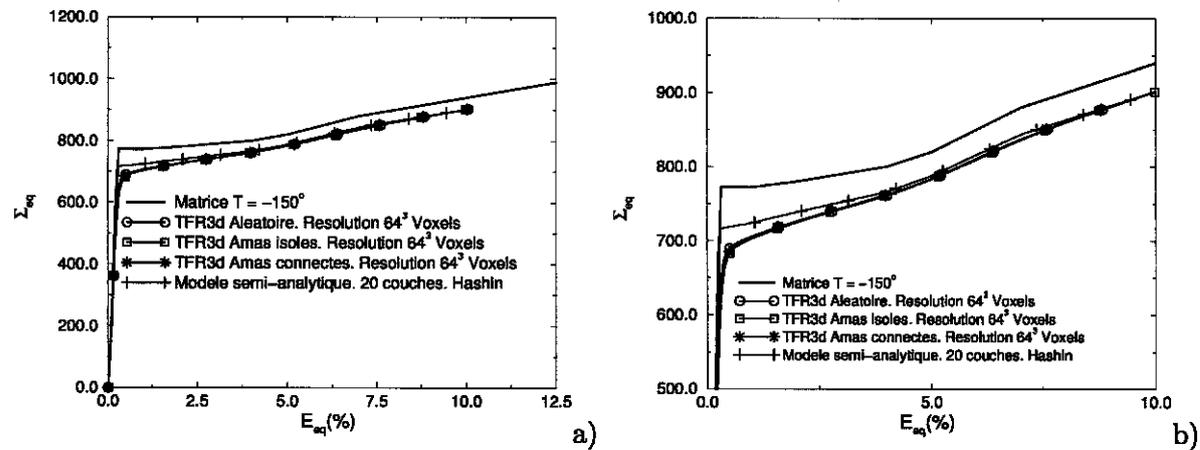


FIG. 4.44 – a) Comparaison des comportement effectifs entre les calculs par T.F.R. 3D et le modèle semi-analytique pour une triaxialité des contraintes $\tau = 2,2$ b) Zoom de a

Quelle que soit la triaxialité des contraintes, un accord acceptable est observé entre le modèle semi-analytique et les calculs par T.F.R. 3D. Notons toutefois que le comportement effectif obtenu à partir du modèle semi-analytique est plus raide que celui obtenu à partir des calculs par T.F.R. 3D. La différence est très faible, voire même négligeable, pour une triaxialité $\tau = \frac{1}{3}$ mais elle est plus importante pour une triaxialité $\tau = 2,2$, notamment pour les faibles valeurs de E_{eq} .

On s'assure que la prise en compte des fluctuations des concentrations locales obtenues à partir d'une partition de l'espace en cellules de Voronoï ou à partir du modèle de Stienen a très peu d'influence sur le comportement effectif. Pour des raisons de lisibilité, les courbes correspondantes ne sont pas reportées sur les figures 4.43 et 4.44. Ainsi, pour les faibles valeurs de porosité, la prise en compte des fluctuations des concentrations locales n'est pas vraiment nécessaire. La description de la microstructure par un assemblage de sphères de Hashin fournit une estimation raisonnable du

comportement effectif.

Si l'on étudie les cartes des déformations équivalentes locales présentées sur les figures 4.45, on constate effectivement que l'amplitude de ces dernières est plus grande au voisinage des pores et au sein des amas de pores mais qu'il n'y a pas de présence de bandes de localisation de la déformation très nette.

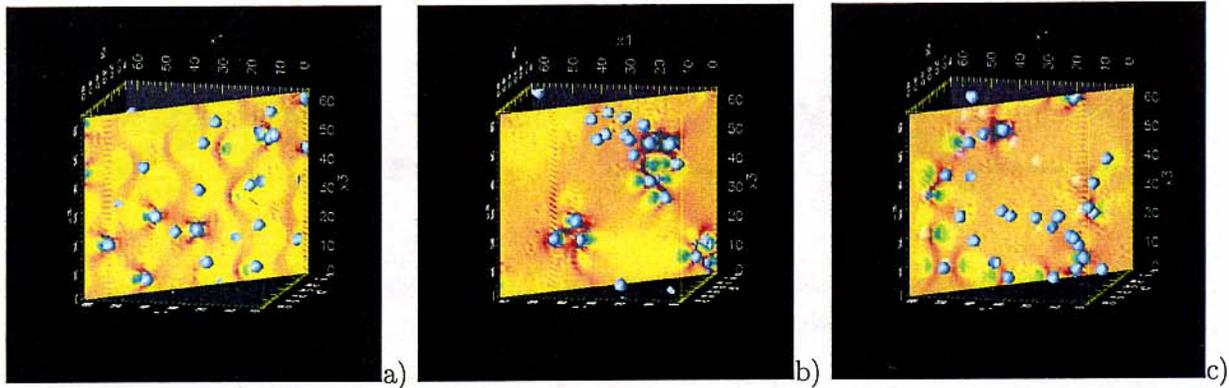


FIG. 4.45 – Cartes des déformations équivalentes locales pour une triaxialité macroscopique $\tau = \frac{1}{3}$. Courbe d'écrouissage de la matrice = courbe d'écrouissage de l'acier à -150°C a) Microstructure aléatoire b) Microstructure à amas isolés c) Microstructure à amas connectés

De la même manière on peut se poser la question suivante : les champs locaux issus du modèle semi-analytique sont-ils pertinents vis-à-vis de ceux issus de calculs par T.F.R. 3D ? Pour répondre à cette question, on se propose de déterminer les distributions des contraintes de von Mises locales, des contraintes principales maximales et des déformations équivalentes locales pour une triaxialité des contraintes fixée et pour un état de chargement donné. Les comparaisons se font à déformation équivalente macroscopique E_{eq} imposée ($E_{eq} = 4,9\%$ dans la suite) et pour une triaxialité des contraintes $\tau = \frac{1}{3}$. Notre étude se limite au cas de la microstructure aléatoire présentée sur la figure 4.42a.

On rappelle que, dans les calculs par T.F.R. 3D, les champs locaux sont obtenus en chaque voxel de l'image. On peut s'assurer pour ces calculs que la résolution de l'image n'a quasiment pas d'influence sur les distributions des champs locaux. Il en va de même pour ceux issus du modèle semi-analytique. Les figures 4.46a et 4.46b représentent respectivement les distributions des contraintes équivalentes locales σ_{eq} et des contraintes principales maximales locales σ_I .

La distribution des champs locaux issue du modèle semi-analytique est obtenue en supposant une description de la microstructure par un assemblage de Hashin classique et généralisé. Pour cette dernière, la distribution des fractions volumiques locales est obtenue à partir d'une partition de l'espace en cellules de Voronoï et à partir du modèle de Stienen (Voir figures 4.17b et 4.17c). Un accord acceptable est observé entre la distribution des champs locaux de contraintes équivalentes et de contraintes principales maximales obtenues à partir de calculs par T.F.R. 3D et du modèle semi-analytique. La largeur de la distribution des champs de contraintes locales obtenues à partir du modèle semi-analytique est plus importante que celle obtenue par les calculs par T.F.R. 3D.

Toutefois, c'est la tendance inverse qui est obtenue dans le cas des déformations équivalentes locales ε_{eq} . En effet, comme l'illustre la figure 4.47, la largeur des distributions des déformations équivalentes locales est plus étroite pour le modèle semi-analytique.

D'une manière générale, la tendance est similaire à celle obtenue par des calculs par éléments finis

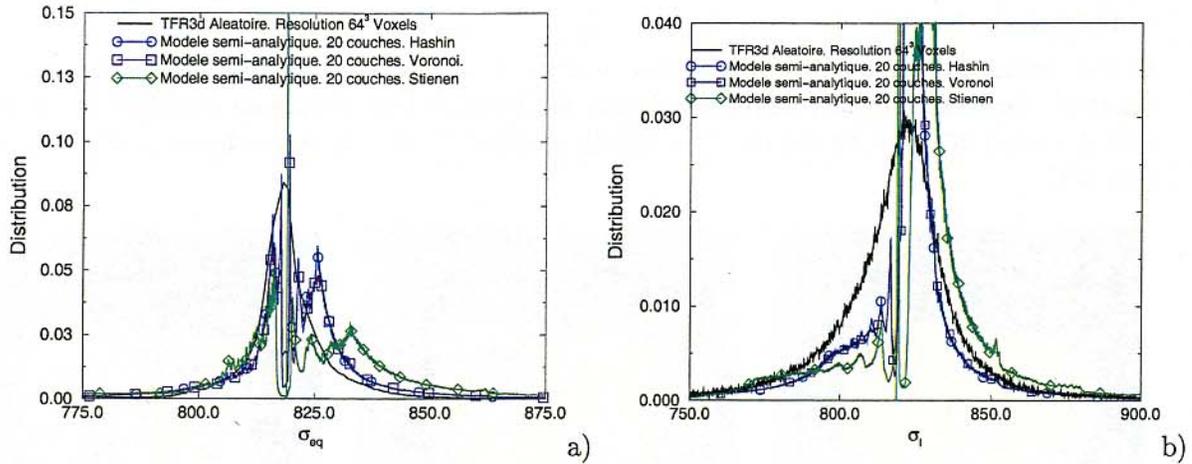


FIG. 4.46 – Microstructure aléatoire a) Distribution des contraintes équivalentes locales b) Distribution des contraintes principales maximales locales

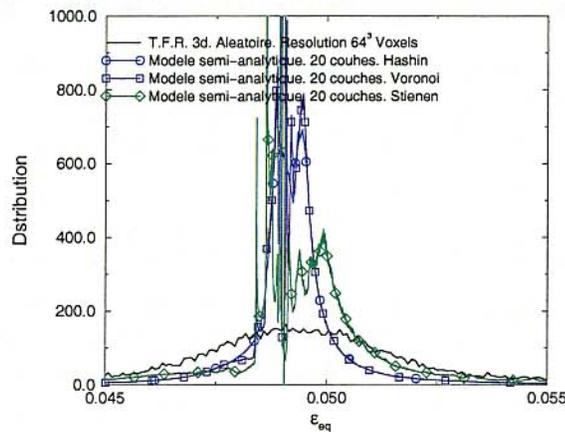


FIG. 4.47 – Microstructure aléatoire. Distribution des déformations équivalentes locales

menés dans le paragraphe précédent. Le modèle semi-analytique décrit bien l'écroissage des milieux poreux et la distribution des champs locaux de contraintes de von Mises et de contraintes principales maximales. En revanche, la description de l'hétérogénéité de déformation n'est pas très satisfaisante.

Toutefois on constate que, pour une description de la microstructure par un assemblage de Hashin généralisé, la méthode d'obtention des concentrations locales influe sur la distribution des champs locaux. En effet, la largeur de la distribution des champs locaux de contrainte et de déformation issus du modèle semi-analytique de type "Stienen" est plus importante que celle obtenue à partir du modèle semi-analytique de type "Voronoi".

4.5 Effet d'amas sur la rupture fragile

Après avoir comparé les champs locaux issus du modèle semi-analytique avec ceux issus de calculs par éléments finis et T.F.R. 3D avec écroissage, on se propose d'appliquer le critère de Beremin [6] à partir des champs locaux issus du modèle semi-analytique. L'objectif est d'évaluer l'effet des fluctuations des concentrations locales sur la rupture fragile. Pour ce faire, une particularisation du

critère de Beremin au cas des microstructures décrites par un assemblage de sphères composites de Hashin ou de Hashin généralisée est présentée. Une étude sur l'effet de la discrétisation de la matrice sur la probabilité de rupture est ensuite menée. Enfin, une comparaison entre la probabilité de rupture obtenue par le modèle semi-analytique et celle obtenue par des calculs par éléments finis est présentée.

4.5.1 Application du critère de Beremin

Afin d'appliquer le critère de Beremin à partir des champs locaux issus du modèle semi-analytique dans le cas d'une représentation de la microstructure par un assemblage de sphères de Hashin ou de Hashin généralisé, il convient de particulariser le critère de Beremin dans le cas d'une approche par motifs.

On rappelle que le critère de Beremin [6] est une approche probabiliste de la rupture fragile par clivage qui est basée sur l'hypothèse du maillon faible. Afin d'adapter ce critère aux microstructures étudiées, nous pouvons alors émettre les trois hypothèses suivantes:

- **Hypothèse 1** : La rupture d'une maille entraîne la rupture du motif.
- **Hypothèse 2** : La rupture d'un motif de la famille k entraîne la rupture de tous les motifs de cette même famille
- **Hypothèse 3** : La rupture d'une famille de motifs entraîne la rupture du V.E.R.

De manière générale, considérons un V.E.R de volume V , constitué de p familles de motifs. La famille k , de volume $V^{(k)}$ est en proportion c_k dans le V.E.R. L'hypothèse 1 permet d'écrire que la probabilité de non rupture d'un motif sous un chargement λ quelconque est égale au produit des probabilités de non rupture de chaque maille :

$$1 - P_{R_{motif}}(\lambda, V_{motif}) = \prod_{i=1}^N \left[1 - p_{R_{maille}}(\lambda, V_0^{(i)}) \right] \quad (4.50)$$

N étant le nombre de mailles. L'expression (4.50) constitue l'expression la plus générale qui puisse être écrite en partant de l'hypothèse du maillon faible. Sous l'hypothèse que la probabilité de rupture d'une maille est faible, la probabilité de rupture d'un motif⁶ s'écrit :

$$P_{R_{motif}} = 1 - \exp \left(- \int_{V_{motif}} \left(\frac{\sigma_I}{\sigma_u} \right)^m \frac{dV}{V_0} \right) \quad (4.51)$$

où σ_I est la contrainte principale maximale positive calculée dans les zones plastifiées du motif de volume V_{motif} . Dans l'hypothèse où la quantité $\int_{V_{motif}} \left(\frac{\sigma_I}{\sigma_u} \right)^m \frac{dV}{V_0}$ est faible, l'équation (4.51) s'écrit :

$$P_{R_{motif}} = \int_V \left(\frac{\sigma_I}{\sigma_u} \right)^m \frac{dV}{V_0}. \quad (4.52)$$

L'hypothèse 2 nous permet d'écrire que la probabilité de non rupture d'une famille de motifs est égale à la probabilité de non rupture de l'ensemble des motifs constituant cette famille, i.e.,

$$1 - P_R^{(k)} = \prod_{i=1}^{n_k} \left[1 - P_{R_{motif}}^{(i)} \right]. \quad (4.53)$$

⁶La démonstration de l'expression (4.51) est donnée dans le chapitre 1 lors de la mise en œuvre du critère de Beremin

L'indice k désigne la famille de motifs considérée et n_k désigne le nombre de motifs constituant cette famille. Dans l'hypothèse où tous les motifs ont la même probabilité de rupture et où cette probabilité de rupture est faible, l'équation (4.53) s'écrit :

$$P_R^{(k)} = n_k P_{R_{\text{motif}}} \quad (4.54)$$

ou encore, à l'aide de (4.54),

$$P_R^{(k)} = n_k \int_{V^{(k)}} \left(\frac{\sigma_I^{(k)}}{\sigma_u} \right)^m \frac{dV}{V_0}. \quad (4.55)$$

En posant $n_k = \frac{V}{V^{(k)}} f_k$ et en supposant que les motifs ont une forme sphérique, la relation (4.55) s'écrit :

$$P_R^{(k)} = \frac{3V}{4\pi (r_m^{(k)})^3} f_k \int_{V^{(k)}} \left(\frac{\sigma_I^{(k)}}{\sigma_u} \right)^m \frac{dV}{V_0}, \quad (4.56)$$

où $r_m^{(k)}$ est le rayon du motif de la famille k . Enfin, l'hypothèse 3 nous permet d'écrire que la probabilité de non rupture du V.E.R est égale au produit des probabilités de non rupture des motifs représentatifs, à savoir :

$$1 - P_R = \prod_{k=1}^p [1 - P_R^{(k)}]$$

ou encore, en considérant que la probabilité de rupture d'une famille de motifs est faible :

$$P_R = 1 - \exp \left[- \sum_{k=1}^p P_R^{(k)} \right] \quad (4.57)$$

soit, en utilisant la relation (4.56),

$$P_R(\lambda) = 1 - \exp \left[- \frac{3}{4\pi (r_m^{(k)})^3} \frac{V}{V_0} \sum_{k=1}^p f_k \int_{V^{(k)}} \left(\frac{\sigma_I^{(k)}}{\sigma_u} \right)^m dV \right] = 1 - \exp \left[- \frac{V}{V_0} \sum_{k=1}^p f_k \left\langle \left(\frac{\sigma_I^{(k)}}{\sigma_u} \right)^m \right\rangle_k \right] \quad (4.58)$$

où p représente le nombre total de motifs considérés pour représenter la microstructure du matériau hétérogène et $\langle * \rangle_k$ représente la moyenne de $*$ sur le motif de la famille k . La probabilité de rupture P_R dépend du volume V du V.E.R: plus le volume V est grand, plus la probabilité de rupture sera élevée. Afin de pouvoir comparer les probabilités de rupture obtenues sous différentes températures et sous différentes hypothèses, le volume V va être fixé et tous les calculs seront effectués avec ce même volume.

Dans la suite, nous utiliserons les paramètres de Weibull caractéristiques de la rupture par clivage :

$$\begin{cases} m = 20 \\ \sigma_u = 3015 \text{ MPa} \\ V_0 = (50\mu m)^3 \end{cases} \quad (4.59)$$

4.5.2 Comparaison avec des calculs par éléments finis

Afin de situer la pertinence du modèle semi-analytique pour l'application du critère de Beremin, nous comparons les évolutions de la probabilité de rupture calculées sur une cellule périodique et à partir du modèle semi-analytique dans le cas d'une représentation de la microstructure par un assemblage de Hashin. Cette comparaison doit être menée à volume identique et à fraction volumique identique, c'est-à-dire que le volume de matrice de la cellule périodique doit être identique au volume de matrice du motif. Ces deux conditions nous donnent le jeu d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} R^2 H - \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4}{3} (b^3 - a^3) \\ \frac{r^3}{R^2 H} = \left(\frac{a}{b}\right)^3 \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} R^3 - \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4}{3} (b^3 - a^3) \\ \frac{r^3}{R^3} = \left(\frac{a}{b}\right)^3 \end{array} \right. \quad (4.60)$$

Le système d'équations de droite résulte de l'hypothèse où $R = H$ dans la cellule périodique. Dans les systèmes d'équations (4.60), R désigne le rayon extérieur de cylindre de la cellule périodique, H sa demi-hauteur et r le rayon de la cavité. a et b désignent respectivement le rayon de la cavité et le rayon de la matrice de la sphère composite. Les paramètres de Weibull utilisés pour cette comparaison sont donnés par (4.59). Les courbes d'écroutissage de la matrice sont celles de l'acier de cuve à une température $T = -150^\circ C$ et $T = 0^\circ C$. Le taux de triaxialité des contraintes macroscopiques considérées est de $\tau = 2,2$. Les calculs sont menés avec un nombre d'éléments finis identique pour les deux modèles, numérique et analytique.

Notons que, pour cette comparaison, il n'est pas nécessaire de définir une taille d'élément. L'unique objectif de cette comparaison est de vérifier la pertinence du modèle analytique.

Dans le cas d'une discrétisation de la matrice de chaque motif en éléments, on prend en compte l'hétérogénéité des champs locaux dans la direction radiale et orthoradiale de la matrice. Les modules sécants ne fluctuent que dans la direction radiale et sont uniformes, au sein d'une même couche dans la direction orthoradiale. La probabilité de la rupture de l'ensemble du VER constitué de p motifs est :

$$P_R = 1 - \exp \left[-\frac{3}{4\pi r_m^3} \frac{V}{V_0} \sum_{k=1}^p f_k \int_{V^{(k)}} \left(\frac{\sigma_I^{(k)}}{\sigma_u} \right)^m dV \right] \quad (4.61)$$

où $V^{(k)}$ représente le volume de la matrice du motif k : la contrainte principale maximale est naturellement nulle dans le pore. Soit V_i le volume de l'élément i . En discrétisant la matrice d'un motif k en N éléments, à savoir $V = \cup_{i=1}^N V_i^{(k)}$, la probabilité de rupture du V.E.R devient :

$$P_R = 1 - \exp \left[-\frac{3}{4\pi r_m^3} \frac{V}{V_0} \left(\sum_{k=1}^p f_k \left\{ \sum_{i=1}^N V_i^{(k)} \left(\frac{\sigma_{Ii}^{(k)}}{\sigma_u} \right)^m \right\} \right) \right] \quad (4.62)$$

$\sigma_{Ii}^{(k)}$ étant la plus grande des contraintes principales positives dans l'élément i du motif k . La contrainte principale maximale est uniforme dans l'élément i du motif k .

Les évolutions de la probabilité de rupture calculées à partir du modèle semi-analytique et du modèle périodique sont représentées sur les figures 4.48a et 4.48b.

Un accord cohérent est obtenu entre les deux modèles. On note également que l'augmentation de la température tend, pour un état de chargement donné, à diminuer la probabilité de rupture. Pour ces comparaisons, la matrice du motif est discrétisée en 20 couches concentriques. Chaque couche est discrétisée en 60 éléments : 6 points d'intégration dans l'épaisseur de la couche et 10 points d'intégration dans la direction orthoradiale de la couche noté respectivement $6pt_r$ et $10\ pt_theta$

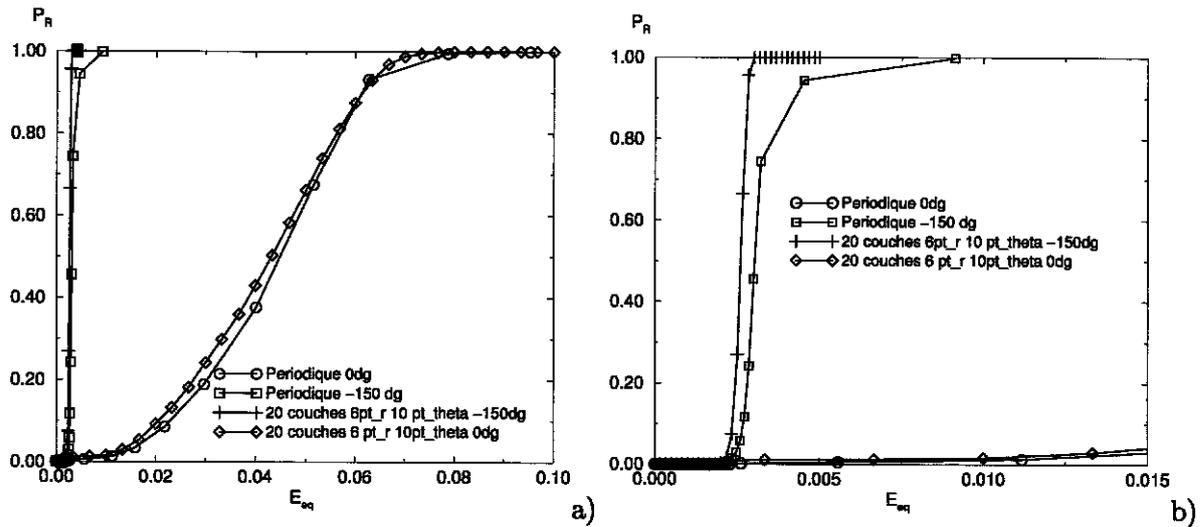


FIG. 4.48 – Comparaison des évolutions de probabilité de rupture entre le modèle semi-analytique et un calcul par éléments finis sur cellule périodique a) $\tau = 2,2$ b) Zoom de a

sur les légendes des figures 4.48a et 4.48b. La matrice de la cellule périodiques est discrétisée en 1200 éléments.

L'étude sur l'effet des fluctuations des concentrations locales sur la rupture fragile n'ayant pas encore entièrement aboutie, elle n'est pas présentée dans ce manuscrit mais reste évidemment d'actualité pour les travaux à venir.

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle semi-analytique qui est bâti sur un couplage entre les approches variationnelles récentes pour l'homogénéisation des composites non linéaires (méthodes sécantes modifiées) et une représentation de la microstructure par une approche par Motifs Morphologiques Représentatifs, les motifs consistant dans notre étude en des cavités sphériques entourées d'une coquille de matrice sphérique. Pour prendre en compte l'aspect hétérogène de la répartition des modules sécants au sein de la matrice, la matrice de chaque motif est discrétisée en couches concentriques.

Lorsque la matrice a un comportement élastique parfaitement plastique et lorsque la microstructure est décrite par un assemblage de sphères composites de Hashin, ce modèle semi-analytique permet d'obtenir une borne pour la surface d'écoulement améliorant les bornes existantes (Gurson, Gărăjeu, Hashin-Shtrikman) pour toutes les valeurs de triaxialité des contraintes et convergent vers la borne de Gurson pour une triaxialité infinie pour un nombre suffisant de couches.

Lorsque la microstructure est décrite par un assemblage de sphères composites de Hashin généralisé, l'estimation de la surface d'écoulement obtenue par le modèle semi-analytique montre un effet d'amas qui se traduit par un abaissement de la contrainte d'écoulement. Ce phénomène, similaire à celui obtenu par le critère de Gurson-Tvergaard, ne nécessite, contrairement à ce dernier, l'ajustement d'aucun paramètre.

Des comparaisons avec des calculs par T.F.R. 3D montrent un accord acceptable entre les deux modèles dans le cas de microstructures aléatoires lorsque les fluctuations des concentrations locales sont obtenues à partir du modèle de Stienen et non à partir d'une partition de l'espace en cellules

de Voronoï. Ce modèle semi-analytique n'est toutefois pas capable de décrire l'abaissement de la contrainte d'écoulement dû à la présence d'amas : dans le cas de microstructures à amas isolés et connectés, le modèle semi-analytique n'est pas en accord, en terme de surface d'écoulement, avec les calculs par T.F.R. 3D.

De la même manière, il s'avère que les distributions des contraintes équivalentes de von Mises et des contraintes principales maximales issues du modèle semi-analytique sont cohérentes vis-à-vis de ceux obtenus par des calculs par éléments finis sur une cellule périodique et sur une cellule emboîtée. Il en est de même pour la confrontation entre le modèle semi-analytique et les calculs par T.F.R. 3D avec écoulement. Toutefois la description de la déformation équivalente locale par le modèle semi-analytique est moins bonne.

Il reste notamment à évaluer l'effet des fluctuations des concentrations locales sur la rupture fragile et la confrontation, dans ce domaine, entre le modèle semi-analytique et les calculs par T.F.R. 3D.

Conclusion générale

La démarche qui a été proposée durant cette thèse en vue de décrire l'effet d'une répartition hétérogène des particules de MnS en amas sur la transition fragile-ductile apporte quelques éléments de réponse mais beaucoup de points restent pour le moment inabordés. En guise de conclusion, nous proposons un récapitulatif de l'ensemble des résultats obtenus ainsi qu'un bref rappel de la démarche générale proposée. Nous donnerons ensuite quelques pistes sur certains aspects qui n'ont pu être abordés au cours de cette thèse et mériteraient d'être approfondis.

Démarche générale

L'hypothèse qui est à la base de ces travaux est le rôle important joué par les particules de MnS et plus particulièrement de leur regroupement en amas, sur les mécanismes de la rupture ductile et fragile dans la zone de transition fragile-ductile des aciers de cuve de centrale nucléaire. L'originalité de la démarche proposée pour évaluer la compétition qui règne entre les mécanismes de rupture fragile et ductile dans la zone de transition est qu'elle utilise les outils de la micromécanique des matériaux hétérogènes. L'idée consiste à mettre en œuvre ou à développer des outils de changement d'échelles, numériques ou analytiques, en vue de déterminer le comportement macroscopique d'un matériau hétérogène en prenant en compte des informations sur sa microstructure : forme des cavités, distribution des défauts, présence d'amas, etc. Ces outils donnent également accès aux champs locaux au voisinage des défauts et des amas de défauts. La rupture fragile est abordée au travers du critère de Beremin qui est appliqué à partir des champs locaux issus des modèles de changement d'échelles. La compétition qui règne entre les mécanismes de rupture ductile (germination, croissance de cavités et coalescence) et fragile (propagation de fissures) est décrite au travers d'une modélisation couplée : évolution de la microstructure du matériau hétérogène et application du critère de Beremin. C'est en tout cas l'objectif final de l'étude. Deux hypothèses ont été émises dès le départ afin de simplifier le développement et l'utilisation des méthodes de changement d'échelles. La première concerne l'assimilation des particules de MnS à des pores : on suppose qu'il y a décohésion entre les particules de MnS et la matrice dès les premiers états de chargement. La seconde hypothèse suppose que les trous sont de forme sphérique ou cylindrique circulaire.

Principaux résultats

La première étape de cette étude passe par une analyse morphologique de la microstructure de l'acier de cuve : est-ce une microstructure à amas ? Si oui, de quel type sont ces amas : isolés, connectés ou aléatoires ? La réponse à cette question est importante car on peut montrer, du moins numériquement, le rôle néfaste que constitue la présence d'amas sur le comportement d'un matériau hétérogène. Nous reviendrons sur ce point. Une analyse inclusionnaire de la zone utile d'une

éprouvette de traction de l'acier de cuve BQ12, de surface d'environ $3\text{mm} \times 19\text{mm}$, a été réalisée (Chapitre 2). Il ressort de cette cartographie que les particules de MnS sont majoritairement de forme allongée, de surface moyenne d'environ $200\mu\text{m}^2$, avec un rapport de forme (rapport du petit axe sur le grand axe de l'ellipse équivalente) d'environ 0,5 et dont l'orientation est principalement dans la direction circonférencielle. La fraction surfacique obtenue est de 0,6%.

Pour détecter la présence d'échelles microstructurales, une approche originale a été développée. Elle consiste à utiliser la fonction distance pour caractériser la morphologie d'une microstructure. L'application de la fonction distance à des microstructures périodiques 2D et 3D, simulées et de morphologies diverses (microstructures aléatoires, à amas isolés et connectés, à tailles de défauts identiques et variables), a permis de mettre en avant le résultat suivant : *les microstructures aléatoires ont une largeur de distribution de la fonction distance plus étroite que les microstructures à amas, isolés et connectés*. Ce résultat important permet donc de faire la différence entre une microstructure aléatoire et une microstructure à amas mais ne donne pas accès à la nature de l'amas. Cette faiblesse est levée par un seuillage de l'image de la fonction distance suivi d'une étude de connectivité.

L'application de cet outil d'analyse statistique à la microstructure réelle de l'acier, obtenue par cartographie, montre que cette microstructure est plutôt une microstructure à amas connectés, les amas voisins étant distants d'environ 0,5mm. La géométrie et la taille des amas ne sont pas des données accessibles à partir de cet outil d'analyse statistique.

Nous avons donc développé un indicateur morphologique qui permet de caractériser la morphologie d'une microstructure et qui peut aussi s'adapter à des microstructures 3D obtenues expérimentalement.

La question de la pertinence des informations statistiques obtenues sur une coupe 2D vis-à-vis de celles obtenues sur la microstructure 3D réelle a été abordée. Par la prise de coupes séries 2D sur des microstructures 3D simulées de morphologies diverses et par l'analyse statistique de ces dernières, on obtient le résultat suivant : *si la microstructure 3D est une microstructure à amas isolés, les coupes 2D contiendront également des amas isolés. Donc, si toutes les coupes 2D ont une microstructure à amas connectés, il en sera de même pour la microstructure 3D*. En revanche, les paramètres microstructuraux obtenus en 2D (nombre d'amas, distance entre amas, etc.) ne sont pas directement transposables à la microstructure 3D.

Après avoir étudié en détail la microstructure de l'acier de cuve, une étude de l'effet d'amas de trous sur la rupture ductile et fragile a été entreprise. Une première approche a consisté à mettre en œuvre des calculs par éléments finis sur des microstructures 2D de morphologies diverses, dotant le milieu poreux d'un critère de Gurson avec une porosité initiale hétérogène (Chapitre 3). De telles simulations montrent, dans le cas d'une matrice écrouissable, que l'effet d'une répartition hétérogène de trous en amas a très peu d'influence sur la réponse macroscopique du matériau hétérogène ainsi que sur la rupture fragile.

La seconde approche a consisté à utiliser un outil de simulation numérique basé sur la transformée de Fourier rapide récemment développé au LMA de Marseille. Cet outil a été mis à profit pour, dans un premier temps, évaluer l'effet d'une répartition hétérogène de cavités en amas sur la surface d'écoulement des milieux poreux 2D et 3D pour différents chargements. En 2D et en 3D, on montre que les microstructures aléatoires ont une réponse plus souple que la borne de Gurson et ceci, quelle que soit la triaxialité des contraintes considérée. Les microstructures à amas ont une réponse plus souple que les microstructures aléatoires et les microstructures à amas connectés conduisent à un écoulement plastique précoce ce qui entraîne qu'elles possèdent une surface d'écoulement plus souple que les microstructures à amas isolés et que les microstructures aléatoires. En 2D, il semble que les *surfaces d'écoulement coupent l'axe des pressions hydrostatiques avec une pente finie* et non infinie

comme le prévoit le critère de Gurson. La valeur de cette pente dépend fortement de la configuration locale des cavités. Dans le cas 3D, *l'effet du troisième invariant des contraintes macroscopiques sur la surface d'écoulement a été montré*. Pour une triaxialité des contraintes donnée, les fluctuations des contraintes d'écoulement résultent de l'apparition de bandes de localisation de la déformation. Celles-ci sont plus diffuses pour une microstructure aléatoire que pour une microstructure à amas. Pour ces dernières, la déformation se localise principalement dans les amas isolés et dans les connexions entre amas pour les microstructures respectivement à amas isolés et connectés.

Le critère de Beremin, appliqué à partir des champs locaux issus des calculs par T.F.R. montre, *dans le cas 2D, un effet d'amas sur la rupture fragile*. Pour ces simulations 2D le comportement de la matrice est *élastique-parfaitement plastique*. Pour un chargement en traction et pour un état de chargement donné, les microstructures aléatoires ont une probabilité de rupture plus faible que les microstructures à amas. Les microstructures à amas isolés ont également une probabilité de rupture plus faible que les microstructures à amas connectés. Ainsi, les microstructures à amas connectés constituent le cas le plus critique pour la rupture tant ductile que fragile. Dans le cas 3D, les calculs sont menés avec *une matrice élasto-plastique avec écrouissage*, la courbe d'écrouissage étant celle de l'acier de cuve à une température de -150°C . Contrairement au cas 2D, l'effet d'amas n'a *guère d'influence sur la rupture fragile* et ceci quelle que soit la triaxialité des contraintes considérée ($\frac{1}{3}$ et 2,2).

Il reste cependant impossible de mettre en évidence les sites potentiels de déclenchement du clivage et donc de répondre à la question suivante : l'hétérogénéité des champs locaux induite par la présence d'amas favorise-t-elle le déclenchement du clivage sur des défauts proches des amas ou à l'intérieur de ces derniers ?

Un modèle semi-analytique 3D, moins coûteux en temps de calculs que les calculs par T.F.R., a été développé (Chapitre 4). Il résulte d'un couplage entre les approches variationnelles récentes pour l'homogénéisation des composites non linéaires et une représentation de la microstructure par une approche par motifs morphologiques représentatifs. L'idée consiste à représenter la microstructure d'un matériau hétérogène par un assemblage de sphères composites de Hashin généralisé de même distribution de fractions volumiques locales que le matériau réel. Dans le cas d'une représentation de la microstructure du matériau hétérogène par un assemblage de sphères de Hashin, ce modèle conduit à une *nouvelle borne pour la surface d'écoulement* améliorant les bornes de Gurson et de Hashin-Shtrikman pour toutes les valeurs de triaxialité des contraintes et convergent vers Gurson pour un chargement purement hydrostatique.

Lorsque la microstructure est décrite par un assemblage de sphères de Hashin généralisé, ce modèle prévoit un abaissement de la contrainte d'écoulement pour les fortes triaxialités des contraintes. Cette tendance, similaire à celle obtenue par le modèle de Gurson-Tvergaard, est obtenue sans *aucun ajustement de paramètres*. Dans le cas de microstructures aléatoires, la contrainte d'écoulement prédite par ce modèle est pertinente vis-à-vis de celle obtenue par des calculs par T.F.R. 3D. On vérifie également que ce modèle est cohérent en termes de distribution des champs locaux, de description de l'écrouissage et de réponse macroscopique vis-à-vis de calculs par éléments finis et de calculs par T.F.R. 3D.

Conclusions et perspectives

Au terme de ces travaux de thèse et au vu des résultats que nous avons obtenus, nous pouvons apporter quelques réponses au problème posé. *A la question : "y a-t-il un effet d'amas sur la rupture ductile ?", nous pouvons répondre : oui. Ceci a été montré au travers de modèles de changement d'échelles numériques et semi-analytiques. En revanche, l'effet d'amas sur la rupture fragile n'est*

montré que dans le cas d'une matrice élastique-parfaitement plastique. Dès que l'on prend en compte l'écroutissement de la matrice, cet effet semble disparaître. Il semble donc que les amas de MnS ne jouent pas de rôle majeur sur le déclenchement du clivage. Toutefois, il n'est pas impossible que l'hétérogénéité des champs locaux induits par la présence de ces amas favorise le déclenchement du clivage sur des défauts proches de ces derniers. Les simulations que nous avons menées ne permettent pas de vérifier cette hypothèse. Au vu des cartes des contraintes principales maximales (Chapitre 3), cette hypothèse ne semble pas si fausse. En effet, ces contraintes se concentrent principalement au sein des amas et dans les connections entre amas. Ceci laisse supposer qu'un défaut, tel qu'un carbure, proche de ces amas peut être une source potentielle du déclenchement du clivage. Toutefois, comme nous l'avons déjà évoqué, nous sommes incapable de prédire les zones de déclenchement du clivage. Ceci est dû au critère de rupture fragile utilisé. En effet, le critère de Beremin n'est peut-être pas un critère adapté pour évaluer ces zones car il ne donne qu'une information globale (une probabilité de rupture) à partir d'informations locales. La question du choix d'un autre critère est une question ouverte. Quoi qu'il en soit, pour évaluer si le déclenchement du clivage a bien lieu sur des défauts proches des amas, une modélisation multi-échelles devrait être mise en œuvre, traitant simultanément l'échelle des carbures, l'échelle des particules de MnS et l'échelle des amas de MnS.

Bien entendu, nous sommes encore loin de donner une réponse concernant le fond du problème à savoir sur la compétition entre les mécanismes de rupture fragile et ductile dans la zone de transition. Pour ce faire, il reste un bon nombre de problèmes à traiter et d'hypothèses à vérifier. Revenons un instant sur les hypothèses émises au départ de cette étude. Celle qui consiste à assimiler les particules de MnS à des pores est-elle valable quelle que soit la température considérée? Il est possible que toutes les particules de MnS ne se détachent pas de la matrice. Dans ce cas, nous avons à faire à un matériau hétérogène contenant des cavités et des particules. Quel est l'effet de la présence de particules sur la rupture fragile et sur la rupture ductile? Une campagne d'essais devrait être entreprise afin de vérifier cette hypothèse et une étude pourrait être menée sur l'effet de la présence de particules non détachées de MnS sur l'hétérogénéité des champs locaux et sur l'activation des mécanismes de rupture ductile et fragile.

La seconde hypothèse à vérifier est celle qui concerne la forme sphérique ou cylindrique des pores. D'un point de vue expérimental, nous avons montré que les particules étaient plutôt de forme allongée. Cette hypothèse a-t-elle une conséquence sur les conclusions obtenues? Une étude sur l'effet de forme des cavités sur la rupture ductile et fragile devrait également être menée.

Un problème plus général qui reste encore à aborder, concerne le problème de l'évolution de la micro-structure d'un matériau hétérogène. En effet, au fil du temps, de nouvelles cavités vont apparaître, ces dernières vont changer de forme et vont coalescer, des micro-fissures vont également apparaître, etc. Toutes ces évolutions n'ont pas été prises en compte dans nos travaux. Nous avons uniquement étudié la réponse d'un matériau poreux dans une configuration donnée. Il est donc primordial de prendre en compte toutes ces informations si l'on veut obtenir un modèle qui soit plus proche de la réalité et en l'occurrence, si l'on veut étudier la compétition qui règne entre les mécanismes de la rupture fragile et ductile dans la zone de transition. Ceci est possible, par exemple, à partir du modèle semi-analytique en passant par une phase de croissance des cavités. Cette méthode a été proposée par Bornert et coll [17]. L'idée consiste à évaluer, après chaque étape de chargement, la fraction volumique de chaque sphère composite en fonction de paramètres macroscopiques. Sous l'hypothèse d'incompressibilité de la matrice, on aboutit ainsi à l'expression de la fraction volumique motif k suivante :

$$f^k = f_0^k \frac{1 + \text{Tr} \left(\langle \varepsilon \rangle_{\text{pore}} \right)}{1 + \text{Tr} \left(\langle \varepsilon \rangle_{\text{motif}} \right)},$$

f_0^k étant la fraction volumique initiale du motif k . La forme des cavités ne change pas, ni leur distribution. Seuls le rayon du rayon des pores et, de fait, le rayon des motifs évoluent. Le critère de Beremin est toujours appliqué à partir des champs locaux issus du modèle semi-analytique. Il reste encore à aborder la question d'un critère de rupture ductile. On peut imaginer un critère portant sur le rayon des cavités : dès que le rayon des cavités atteint une valeur critique, la rupture ductile a lieu. Le choix de ce critère reste une question ouverte. Cette modélisation ne prend pas en compte le changement de forme des cavités et l'éventuelle évolution de la distribution des centres des motifs. Des modélisations plus sophistiquées devraient être développées pour prendre en compte toutes ces informations. Ainsi, après cette phase d'évolution de la microstructure, un couplage avec le critère de Beremin (ou un autre modèle) permettrait de décrire la compétition qui règne entre les mécanismes de rupture ductile et fragile au sein de la transition.

Bibliographie

- [1] L. ALLAIS, M. BORNERT, Th. BRETHERAU, and D. CALDEMAISON. Experimental characterization of the local strain field in a heterogeneous elastoplastic material. *Acta. Metall. Mater.*, 42(11):3865–3880, 1994.
- [2] F. BARBE, L. DECKER, D. JEULIN, and G. CAILLETAUD. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part1 : F.E. model. *Int. J. Plasticity*, 17:513–536, 2001.
- [3] J.-F. BARTHÉLÉMY and L. DORMIEUX. Détermination du critère de rupture macroscopique d'un milieu poreux par homogénéisation non linéaire. *C. R. Mécanique*, 331:271–276, 2003.
- [4] J. BARUCHEL, J.-Y. BUFFIÈRE, E. MAIRE, P. MERLE, and G. PEIX. *X-Ray tomography in material science*. Hermes Science, 2000.
- [5] R. BECKER. The effect of porosity distribution on ductile failure. *J. Mech. Phys. Solids*, 35:577–599, 1987.
- [6] F.M. BEREMIN. A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. *Metall. Trans.*, 14A:2277–2287, 1983.
- [7] D.P. BERTSEKAS. *Nonlinear Programming : Second edition*. Athena Scientific, 1999.
- [8] M. BERVEILLER and A. ZAOUÏ. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 26:325–344, 1979.
- [9] J. BESSON, L. DEVILLIERS-GUERVILLE, and A. PINEAU. Modeling of scatter and size effect in ductile fracture : application to thermal embrittlement of duplex stainless steels. *Engng. Fract. Mech.*, 67:169–190, 2000.
- [10] N. BILGER, F. AUSLENDER, M. BORNERT, and R. MASSON. New bounds and estimates for porous media with rigid perfectly plastic matrix. *C. R. Mécanique*, 330:127–132, 2002.
- [11] N. BILGER, M. BORNERT, F. AUSLENDER, A. ZAOUÏ, and R. MASSON. Surface d'écoulement macroscopique des milieux poreux : modification du critère de Gurson par une approche micromécanique. *Actes du XV^{ème} Congrès Français de Mécanique*, pages 1–6, Nancy, Septembre 2001.
- [12] M. BORNERT. A generalized pattern-based self consistent scheme. *Comp. Mat. Sci.*, 5:17–31, 1996.
- [13] M. BORNERT. Morphological effects at the local scale in two-phase materials. In A. Pineau and A. Zaoui, editors, *Micromechanics of plasticity and damage of multiphase materials*. Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [14] M. BORNERT. *Morphologie microstructurale et comportement mécanique ; caractérisations expérimentales, approches par bornes et estimations autocohérentes généralisées*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Novembre 1996.
- [15] M. BORNERT. Microextensométrie et tomographie. In *Passage micro-macro en mécanique des matériaux*, pages 1–29. Collège de l'Ecole Polytechnique, 2002.

- [16] M. BORNERT, E. HERVÉ, C. STOLZ, and A. ZAOUI. Self-consistent approaches and strain heterogeneities in two-phase elastoplastic materials. *Appl. Mech. Rev.*, 47:66–76, 1994.
- [17] M. BORNERT, R. MASSON, and A. ZAOUI. *Modélisation de la rupture ductile d'alliages métalliques hétérogènes: étude préliminaire : Rapport Final*. Contract EDF/DER/MTC., Avril 1999.
- [18] M. BORNERT, C. STOLZ, and A. ZAOUI. Morphologically representative pattern-based bounding in elasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 44:307–331, 1996.
- [19] M. BORNERT and P. SUQUET. Propriétés non linéaires des composites aléatoires - théories modifiées. In M. Bornert, Th. Bretheau, and P. Gilormini, editors, *Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 : Comportements non linéaires et problèmes ouverts*, pages 45–90. Hermès Science Publication, 2001.
- [20] Th. BRETHERAU. Approche expérimentale de l'homogénéisation. In M. Bornert, Th. Bretheau, and P. Gilormini, editors, *Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 : Comportements non linéaires et problèmes ouverts*, pages 147–170. Hermès Science Publication, 2001.
- [21] G. CAILLETAUD, S. FOREST, D. JEULIN, F. FEYEL, V. GALLIET, I. MOUNOURY, and S. QUILICI. Some elements of microstructural mechanics. *Comp. Mat. Sci.*, 27:351–374, 2003.
- [22] S. CARASSOU. *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié: Rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. PhD thesis, Ecole des mines de Paris, Octobre 1999.
- [23] J.L. CHABOCHE, P. SUQUET, and J. BESSON. Endommagement et changement d'échelle. In M. Bornert, Th. Bretheau, and P. Gilormini, editors, *Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 : Comportements non linéaires et problèmes ouverts*, pages 91–146. Hermès Science Publication, 2001.
- [24] R.M. CHRISTENSEN and K.H. LO. Solution for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *J. Mech. Phys. Solids*, 27:315–330, 1979.
- [25] C.C. CHU and A. NEEDLEMAN. Void nucleation effects in biaxially stretched sheets. *J. Engng Mater. Technol.*, 102:249–256, 1980.
- [26] M. COSTER and J.L. CHERMANT. *Précis d'analyse d'images*. Les presses du C.N.R.S., Les éditions du C.N.R.S., Paris, 1989.
- [27] M. COSTER and J.L. CHERMANT. On a way to material models for ceramics. *J. Eur. Ceram. Soc.*, 22:1191–1203, 2002.
- [28] K. DECAMP, L. BAUVINEAU, J. BESSON, and A. PINEAU. Size and geometry effects on ductile rupture of notched bars in a C-Mn steel : experiments and modelling. *Inter. J. Fracture*, 88:1–17, 1997.
- [29] A. DELARUE. *Prévision du comportement électromagnétique de matériaux composites à partir de leur mode d'élaboration et de leur morphologie*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, septembre 2001.
- [30] P. DOUMALIN. *Microextensométrie locale par corrélation d'images numériques : application aux études micromécaniques par microscopie électronique à balayage*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, Juin 2000.
- [31] S. FOREST, G. CAILLETAUD, D. JEULIN, F. FEYEL, I. GALLIET, V. MOUNOURY, and S. QUILICI. Introduction aux calculs de microstructures. *Mécaniques & Industries*, 3:439–456, 2002.
- [32] P. FRANCESCATO, J. PASTOR, and T.-H. THAI. Etude du critère de plasticité des matériaux poreux. *C. R. Acad. Sci. Paris, II*, 329:753–760, 2001.

- [33] D. FRANÇOIS, A. PINEAU, and A. ZAOUI. Viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du contact. In *Tome 2 : Comportement mécanique des matériaux*. Hermès, Paris, 1993.
- [34] M. GĀRĀJEU. *Contribution à l'étude du comportement non linéaire de milieux poreux avec ou sans renforts*. PhD thesis, Université Aix-Marseille 2, Octobre 1995.
- [35] M. GĀRĀJEU, J.-C. MICHEL, and P. SUQUET. A micromechanical approach of damage in viscoplastic materials by evolution in size and distribution of voids. *Comput. Methods Appl. Mech.*, 183:223–246, 2000.
- [36] M. GĀRĀJEU and P. SUQUET. Effective properties of porous ideally plastic or viscoplastic materials containing rigid particles. *J. Mech. Phys. Solids*, 45:873–902, 1997.
- [37] L. GÉLÉBART. *Approche multi-échelle du comportement d'alliage Ti–Al₄₈Cr₂Nb₂*. PhD thesis, Ecole polytechnique, Septembre 2002.
- [38] A. GRIFFITH. The phenomena of rupture and flow in solids. *Phi. Trans. Roy. Soc.*, pages 163–198, 1920.
- [39] A.L. GURSON. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I-Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Eng. Mat. Tech*, 99:1–15, 1977.
- [40] Z. HASHIN. The elastic moduli of heterogeneous materials. *J. Appl. Mech.*, pages 143–150, March 1962.
- [41] Z. HASHIN and S. SHTRIKMAN. A variational approach to the theorie of the elastic behavior of multiphase material. *J. Mech. Phys. Solids*, 11:127–140, 1963.
- [42] P. HAUSILD. *Transition fragile-ductile dans un acier faiblement allié*. PhD thesis, Ecole centrale Paris, 2002.
- [43] P. HAUSILD, C. BERDIN, P. BOMPARD, and C. PRIOUL. Influence des inclusions sur la rupture ductile d'un acier faiblement allié. *J. Phys. IV France*, 106:173–182, 2003.
- [44] E. HERVÉ, C. STOLZ, and A. ZAOUI. A propos de l'assemblage des sphères composites de Hashin. *C. R. Acad. Sci. Paris, II*, 313:857–862, 1991.
- [45] E. HERVÉ and A. ZAOUI. n-layered inclusion-based micromechanical modelling. *Int. J. Engng. Sci.*, 31(1):1–10, 1993.
- [46] E. HERVÉ and A. ZAOUI. Elastic behaviour of multiply coated fibre - reinforced composites. *Int. J. Engng. Sci.*, 33(10):1419–1433, 1995.
- [47] D. JEULIN. Random model texture models for material structures. *Stat. Computing*, 10:121–132, 2000.
- [48] D. JEULIN. Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoires. In M. Bornert, Th. Bretheau, and P. Gilormini, editors, *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 : Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*, pages 95–132. Hermès Science Publication, 2001.
- [49] T. KANIT, S. FOREST, I. GALLIET, V. MOUNOURY, and D. JEULIN. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *Int. J. Solids. and Struct.*, 40:3647 – 3679, 2003.
- [50] J. KOPLIK and A. NEEDLEMAN. Void growth and coalescence in porous plastic solids. *Int. J. Solids and Struct.*, 24:835–853, 1988.
- [51] N. LAHELLEC. Estimate of the homogenized hyperelastic behavior of periodic fiber-reinforced composites using the second order procedure. *C. R. Acad. Sci. Paris, II*, 319:67–73, 2001.

- [52] J.B. LEBLOND, G. PERRIN, and J. DEVAUX. An improved Gurson-type model for hardenable ductile metals. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 13(4):499–527, 1995.
- [53] J.B. LEBLOND, G. PERRIN, and P. SUQUET. Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids. *Int. J. Plasticity*, 10(3):213–235, 1994.
- [54] W. LEFEVRE, G. BARBIER, R. MASSON, and G. ROUSSELIER. A modified Beremin model to simulate the warm pre-stress effect. *Nucl. Engn. Design*, 216:27–42, 2002.
- [55] M. MÄNTYLÄ, A. ROSSOLL, I. NEDBAL, C. PRIOUL, and B. MARINI. Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel. *Journals of Nuclear Materials*, 264:257–262, 1999.
- [56] R. MASSON, M. BORNERT, P. SUQUET, and A. ZAOUI. An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 48:1203–1227, 2000.
- [57] F.M. MC KLINTOCK. A criterion for ductile fracture by the growth of holes. *J. Appl. Mech.*, 35:363–371, 1968.
- [58] J.-C. MICHEL, H. MOULINEC, and P. SUQUET. Effective properties of composites materials with periodic microstructure : a computational approach. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 172:109–143, 1999.
- [59] J.-C. MICHEL, H. MOULINEC, and P. SUQUET. A computational method based on augmented lagrangians and fast Fourier transforms for composites with high contrast. *Comput. Modelling Engrg. Sc.*, 1(2):79–88, 2000.
- [60] J.-C. MICHEL, H. MOULINEC, and P. SUQUET. A computational scheme for linear et non linear composites with arbitrary phase contrast. *Int. J. Numer. Meth. Engrg*, 52:139–160, 2001.
- [61] J.-C. MICHEL and P. SUQUET. The constitutive law of nonlinear viscous and porous materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 40(4):783–812, 1992.
- [62] J.-C. MICHEL and P. SUQUET. Nonuniform transformation field analysis. *A paraître dans Int. J. Solids and Struct.*, 2003.
- [63] H. MOULINEC and P. SUQUET. A fast numerical method for computing the linear and the nonlinear mechanical properties of composites. *C. R. Acad. Sci. Paris, II*, 318:1417–1423, 1994.
- [64] H. MOULINEC and P. SUQUET. Computer methods in applied mechanics and engineering. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 157:69–94, 1998.
- [65] J. PASTOR and P. PONTE CASTAÑEDA. Yield criteria for porous media in plane strain : second-order estimates versus numerical results. *C. R. Mecanique*, 330:741–747, 2002.
- [66] Y.-P. PELLEGRINI. Plasticity criterion for porous medium with cylindrical voids. *C. R. Mecanique*, 330:763–768, 2002.
- [67] G. PERRIN. *Contribution à l'étude théorique et numérique de la rupture ductile des métaux*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, Juillet 1992.
- [68] G. PERRIN and J.B. LEBLOND. Analytical study of a hollow sphere made of plastic porous material and subjected to hydrostatic tension - Application to some problems in ductile fracture of metals. *Int. J. Plasticity*, 6:677–699, 1990.
- [69] R. PESCI. *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale à plusieurs échelles du comportement et de l'endommagement d'un acier bainitique 16MND5 à basses températures*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, 2003.

- [70] P. PONTE CASTAÑEDA. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 39(1):45–71, 1991.
- [71] P. PONTE CASTAÑEDA. New variational principles in plasticity and their application to composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 40(8):1757–1788, 1992.
- [72] P. PONTE CASTAÑEDA. Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of non linear composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 44:827–862, 1996.
- [73] P. PONTE CASTAÑEDA. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : I-theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 50:737–757, 2002.
- [74] P. PONTE CASTAÑEDA and P. SUQUET. Nonlinear composites. In E. V. der Giessen and T. Wu, editors, *Advances in Applied Mechanics*, pages 171–302. Academic Press, New York, 1998.
- [75] S. RENEVEY. *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. PhD thesis, Université de Paris-Sud U.F.R scientifique d'orsay, Septembre 1997.
- [76] J. RICE and D. TRACEY. On the enlargement of voids in triaxial stress fields. *J. Mech. Phys. Solids*, 17:201–217, 1969.
- [77] A. B. RICHELSEN and V. TVERGAARD. Comparison of porous ductile material models and upper bound estimates. *Adv. Comp. Meth. Mat. Mod.*, 180:33–39, 1993.
- [78] A. B. RICHELSEN and V. TVERGAARD. Dilatant plasticity for upper bound estimates for porous ductile solids. *Acta. Metall. Mater.*, 42(8):2561–2577, 1994.
- [79] G. ROUSSELIER. Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture. *Nucl. Engn. Design*, 105:97–111, 1987.
- [80] C. STOLZ and A. ZAOUI. Analyse morphologique et approches variationnelles du comportement d'un milieu élastique hétérogène. *C. R. Acad. Sci. Paris, II*, 312:143–150, 1991.
- [81] P. SUQUET. Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. In E. Sanchez-Palencia and A. Zaoui, editors, *Homogenization Techniques for Composite Media*, pages 193–278. Springer, Berlin, 1987.
- [82] P. SUQUET. Overall potentials and extremal surfaces of power law or ideally plastic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 41(6):981–1002, 1993.
- [83] P. SUQUET. Overall properties of nonlinear composites : a modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda nonlinear variational procedure. *C. R. Acad. Sci. Paris, II*, 320:563–571, 1995.
- [84] P. SUQUET. *Rupture et plasticité Tome 1*. Cours de l'Ecole Polytechnique: Majeure de mécanique, Option : Matériaux et Structures, 2002.
- [85] P. SUQUET. Influence on the effective potential of composites of small fluctuations in the local volume fraction of the constituents. Non publié, 2003.
- [86] P. SUQUET and P. PONTE CASTAÑEDA. Small-contrast perturbation expansions for the effective properties of nonlinear composites. *C. R. Acad. Sci. Paris, II*, 317:1515–1522, 1993.
- [87] D.R.S. TALBOT and J.R. WILLIS. Variational principles for inhomogeneous non-linear media. *IMA J. Appl. Math.*, 35:39–54, 1985.
- [88] B. TANGUY. *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. PhD thesis, Ecole National Supérieure des Mines de Paris, 2001.
- [89] V. TVERGAARD. Influence of void on shear band instabilities under plane strain conditions. *Int. J. Frac.*, 17:389–407, 1981.

-
- [90] V. TVERGAARD and A. NEEDLEMAN. Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta. Metall. Mater.*, 32:157–169, 1984.
- [91] A. ZAOUÏ. Structural morphology and constitutive behaviour of microheterogeneous materials. In P. Suquet, editor, *Continuum Micromechanics*, CISM Lecture Notes, pages pp. 291–347. Springer Verlag, New York, 1997.
- [92] A. ZAOUÏ. *Matériaux hétérogènes et composites*. Cours de l'Ecole Polytechnique : Majeur de mécanique, 1999.
- [93] T.I. ZOHDI, M. KACHANOV, and I. SEVOSTIANOV. On perfectly plastic flow in porous material. *Int. J. Plasticity*, 18:1649–1659, 2002.

Annexes

Annexe A

Techniques de micro-grilles

A.1 Méthode de corrélation d'images

La technique utilisée pour estimer les champs locaux à la surface de l'éprouvette est la méthode de corrélation d'images [30]. Elle consiste à mettre en correspondance deux images numériques de la surface plane observée, l'une à l'état dit "de référence" et l'autre, dans un état dit "déformé", afin de mesurer le champ local de déplacement, u_x et u_y de la transformation matérielle. Un petit domaine, correspondant généralement à la zone entourant l'intersection des barreaux de grille, identifié par le niveau de gris de chaque pixel, est sélectionné dans l'image de référence. Le succès de la méthode réside dans la recherche du domaine de pixels, défini dans l'image de référence, le plus semblable en termes de niveaux de gris dans l'image déformée après application d'une transformation décrivant la déformation subie par le matériau (Voir figure A.1). Il faut donc estimer la transformation matérielle réelle sur ce domaine. Le choix le plus simple suppose que cette transformation est localement une translation. Un coefficient appelé "coefficient de corrélation" quantifie le niveau de ressemblance

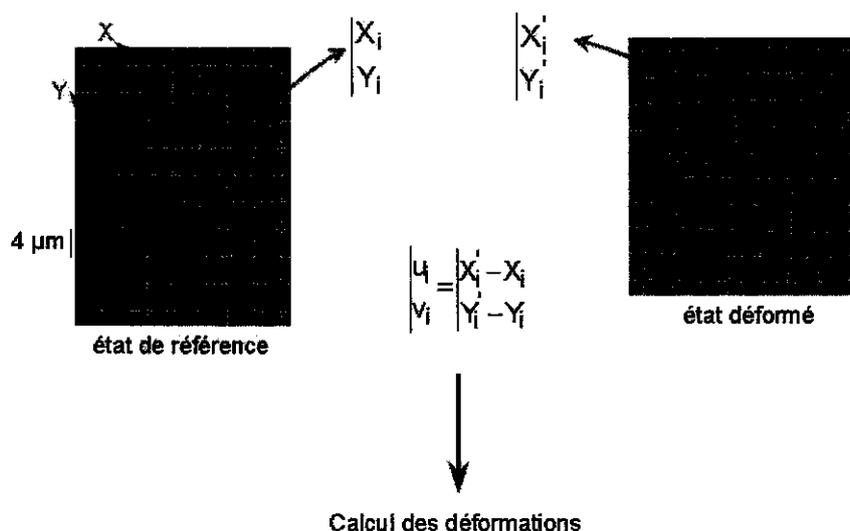


FIG. A.1 – Principe de la corrélation d'images. Extrait de Doumalin [30]

des deux petits domaines dans les deux configurations. Son minimum détermine le petit domaine déformé homologue et caractérise la transformation matérielle liant les deux domaines. Le champ

de déplacement est précis à un pixel près. La précision subpixel permet d'atteindre des valeurs non entières du déplacement des intersections de grilles (points de mesure). Pour y parvenir, il faut utiliser une interpolation, soit des niveaux de gris, soit du coefficient de corrélation, qui reconstruit l'information entre les valeurs connues de pixels [30]. Cette étape est importante dans le cas des matériaux où l'amplitude des déformations locales est faible. L'information subpixel permet alors d'avoir une estimation plus précise du champ de déplacement et, de fait, du champ de déformation. Elle est inutile dans le cas des matériaux subissant de fortes déformations locales.

La simple connaissance des champs de déplacement u_x et u_y ne permet pas de déterminer l'ensemble des composantes du tenseur des déformations linéarisé $2\varepsilon(x) = \nabla u + \nabla u^t$; seules les composantes planes de ce tenseur peuvent être évaluées en toute rigueur : $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{22}$; les autres ne peuvent être calculées. Des hypothèses supplémentaires sur la forme de la transformation matérielle en relation avec le type de sollicitation appliquée sont nécessaires pour évaluer les déformations en transformation finie.

Les déformations locales sont calculées à partir des composantes du champ de déplacement local u_x et u_y . La procédure utilisée au LMS consiste à calculer les déformations locales à partir des déplacements de chaque intersection de grille au moyen d'un schéma de dérivation discrète décrit dans [1]. La déformation en un point donné est évaluée à partir de la moyenne du gradient de déformation F sur un petit voisinage délimité par la position des intersections de grilles voisines dans les deux images [15] :

$$\begin{cases} F(X) = \frac{\partial \Phi}{\partial X} \approx \langle F(X) \rangle_{V(X)} = \frac{1}{|V(X)|} \int_{\partial V(X)} \Phi(u) \otimes n(u) dS_u, \\ E(X) \approx E_{V(X)}(X) = \frac{1}{2} \left({}^t \langle F(X) \rangle_{V(X)} \cdot \langle F(X) \rangle_{V(X)} - I \right) \neq \langle E(X) \rangle_{V(X)}, \\ \varepsilon(X) \approx \varepsilon_{V(X)}(X) = \frac{1}{2} \left({}^t \langle F(X) \rangle_{V(X)} + \langle F(X) \rangle_{V(X)} \right) - I = \langle \varepsilon(X) \rangle_{V(X)}, \end{cases} \quad (A.1)$$

où $V(X)$ est un élément de volume autour du point X (point dans la configuration initiale), $\partial V(X)$ sa surface externe, de normale sortante n . $E(X)$ représente le tenseur des déformations de Green-Lagrange et $\varepsilon(X)$ le tenseur des déformations linéarisées, évalué en un point X de la configuration de référence. $F(X)$ est le gradient de la transformation $\Phi(X)$. $E(X)$ et $\varepsilon(X)$ sont ainsi calculés par une simple intégrale de contour via le tenseur $F(X)$ (A.1). Plusieurs contours sont envisageables pour la détermination du champ de déformation local (Figure A.2).

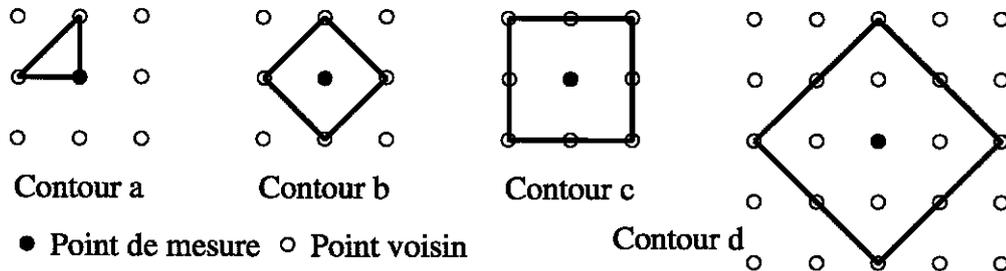


FIG. A.2 – Domaines d'intégration possible pour le calcul du tenseur des déformations locales

Plus le nombre de points définissant la mesure est important, plus la précision sur les composantes du champ de déformation sera élevée. En revanche, on perd la notion de localité de la mesure et l'hétérogénéité de déformation peut être lissée, ce qui est gênant lorsque l'on veut quantifier une hétérogénéité de déformation sur une petite zone.

A.2 Dépôt de micro-grilles

La mesure du champ local de déplacement n'est possible que si l'on dispose de points de repère qui restent inchangés au cours du chargement. En l'absence de contraste naturel, on a recours à un marquage de la surface à l'aide de micro-grilles, notamment en or.

Le dépôt de micro-grilles consiste à marquer la surface par des lignes régulières horizontales et verticales ou par un arrangement de points régulièrement espacés. Cette technique se décompose en cinq étapes [1] (Figure A.3) :

- a) Déposer un film de résine sur la surface polie de l'éprouvette. Un chauffage de l'éprouvette typiquement à une température de $140^{\circ}C$ pendant 30 minutes permet de le polymériser.
- b) Une irradiation de la résine à l'aide d'un Microscope Électronique à Balayage (M.E.B) permet d'attaquer la résine (rupture des chaînes moléculaires) sous forme de lignes horizontales et verticales ou sous forme de nuages de points périodiques.
- c) Un solvant adapté permet de dissoudre la résine irradiée
- d) De l'or est d'abord pulvérisé puis évaporé sur la surface.
- e) Le reste de la résine est enfin enlevé par un solvant sous une agitation ultrasonique.

La technique du mouchetis consiste à pulvériser au moyen d'une bombe de peinture aérosol la surface de l'échantillon : une première couche de peinture noire fournit un fond uniforme sur lequel sont superposées de petites taches blanches réparties aléatoirement et obtenues par un spray rapide. La taille des taches dépend de la taille des gouttes de peinture. Cette technique permet l'analyse des déformations à une échelle millimétrique.

En fonction de l'information que l'on souhaite obtenir ou du mode d'observation, l'une ou l'autre méthode va être utilisée : la pose de grille permet d'obtenir des informations beaucoup plus locales que le "mouchetis".

La taille des barreaux de grille et le diamètre des points sont directement liés au diamètre du faisceau d'électrons et à la poire d'émission (électrons secondaires) du M.E.B servant à irradier la résine.

A.3 Prise d'images numérique au M.E.B.

L'outil utilisé pour prendre des images de la microstructure est le microscope électronique à balayage (M.E.B.). Il permet de prendre des images de microstructure de taille diverse allant de $0,1\mu m$ à $1cm$ avec une résolution pouvant atteindre 4096×4096 pixels. La prise d'images constitue une étape importante pour l'application de la méthode de corrélation d'images. Pour obtenir une bonne image, il faut s'assurer que le contraste soit optimal, c'est-à-dire qu'il soit bien représenté par les 256 niveaux de gris disponibles pour le codage de l'image. Pour ce faire, une procédure consiste à représenter l'histogramme des niveaux de gris de l'image. Celui-ci ne doit pas avoir une largeur trop faible, ce qui signifierait que l'on n'utilise qu'une plage restreinte des niveaux de gris disponibles. Il ne doit également pas dépasser les limites extrêmes (0 et 255) pour éviter une saturation de l'image dans le noir ou dans le blanc; dans ce cas, il faut ajuster les conditions de contraste et de brillance. Il n'est pas nécessaire de réajuster le contraste et la brillance entre l'image de référence et l'image déformée afin d'obtenir le même histogramme des niveaux de gris car la forme du coefficient de corrélation intègre ces variations dans sa formulation [30]. La valeur du résultat de la corrélation n'est pas affectée par les variations de largeur et de valeur moyenne de l'histogramme des niveaux de gris.

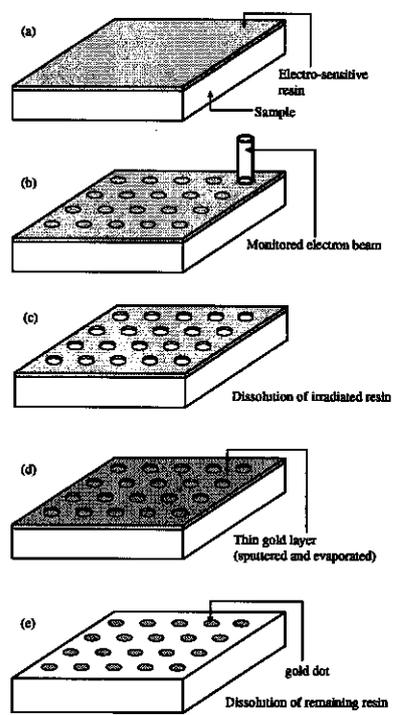


FIG. A.3 – Étapes de la pose de micro-grilles

Annexe B

Rappels sur la covariance

La calcul de la covariance d'un ensemble aléatoire A stationnaire consiste à évaluer la probabilité qu'un point x quelconque et que son translaté d'un vecteur h , le point $x + h$, appartiennent tous deux à l'ensemble aléatoire A :

$$C(h) = P\{x \in A, x + h \in A\}. \quad (\text{B.1})$$

Dans le cas où $h = 0$, C est réduit à la fraction volumique f_A de l'ensemble A et dans le cas où h est grand, i.e, lorsque h devient supérieur à la taille des grains ou des amas, C tend vers le carré de la fraction volumique de l'ensemble A :

$$\begin{cases} C(0) = f_A \\ C(\infty) = f_A^2. \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Ce palier n'est atteint que dans le cas des microstructures aléatoires suffisamment grandes et stationnaire ¹, et sans ordre à grande distance [48]. La périodicité des microstructures se traduit par une périodicité de la covariance.

Afin d'estimer la covariance à partir d'une image binaire d'une section plane, il suffit, dans un premier temps, de superposer une image binaire et son translaté d'un vecteur $-h$ puis, dans un second temps, de calculer la proportion de l'intersection entre l'ensemble aléatoire A (la phase blanche) et l'ensemble aléatoire A_{-h} (i.e., de l'image translatée d'un vecteur h) :

$$C(h) = P\{x \in A \cap A_{-h}\}. \quad (\text{B.3})$$

Une autre propriété intéressante satisfaite par un certain nombre de microstructures est celle de l'isotropie de la distribution des phases. Cette propriété peut se vérifier au travers de la covariance : la probabilité de trouver simultanément un point x dans la phase r et un point $x + h$ dans la phase s ne dépend que de la norme de h , notée $\|h\|$. Pour vérifier l'isotropie de distribution des phases d'une microstructure biphasée (ou binaire), il convient d'appliquer la définition (B.3) pour h se déplaçant suivant toutes les directions de l'image. Si les covariances sont différentes, la microstructure ne possède pas une distribution isotrope des phases [29] [48].

Les modèles présentant différentes échelles caractéristiques peuvent s'obtenir par l'intersection ou par l'union de deux ensembles aléatoires indépendants A_1 et A_2 . En définissant l'ensemble aléatoire

¹L'hypothèse de stationnarité signifie que la probabilité de trouver une certaine phase, dans un domaine V en un certain point ne dépend pas de la position de ce point dans V .

A comme l'intersection des deux ensembles aléatoires A_1 et A_2 , tel que $A = A_1 \cap A_2$, la covariance $C(h)$ correspond au produit des covariances définies sur A_1 et A_2 notées respectivement C_1 et C_2 [48] :

$$C(h) = P\{x \in A, x + h \in A\} = C_1(h)C_2(h). \quad (\text{B.4})$$

L'effet de séparation d'échelle se traduit par des inflexions du covariogramme [29] et la présence de plusieurs paliers. La covariance est un outil puissant permettant d'une part de mettre en évidence la notion d'isotropie de répartition des défauts et d'autre part, de caractériser des séparations d'échelles microstructurales. Elle peut se déterminer à partir d'images binaires de la microstructure selon la procédure décrite dans [26].

Annexe C

Rappel de l'approche variationnelle de Ponte Castañeda

La méthode sécante modifiée possède une interprétation variationnelle qui permet d'établir son statut de borne pour l'énergie effective du matériau hétérogène. Ce dernier supposé isotrope est caractérisé par un potentiel en déformation $w(x, \varepsilon(x))$ qui dépend du point matériel x dans le V.E.R. et du champ de déformation associé :

$$w(x, \varepsilon(x)) = \frac{1}{2}k(x) (\text{tr}\varepsilon(x))^2 + f(\varepsilon_{eq}^2(x)), \quad (\text{C.1})$$

$k(x)$ étant le module de compressibilité en un point x du V.E.R. et f une fonction croissante et concave. L'énergie effective du matériau hétérogène $W(E)$ est définie comme le minimum de la moyenne des potentiels de déformation w pour tout champ de déplacement v cinématiquement admissible avec des conditions de déplacement homogène au bord du V.E.R. selon :

$$W(E) = \inf_{v \in K(E)} \langle w(\varepsilon(v)) \rangle, \quad (\text{C.2})$$

l'ensemble $K(E)$ désignant l'ensemble des champs de déplacement v cinématiquement admissibles avec des conditions aux limites en déformation homogène sur le contour du V.E.R. ∂V :

$$K(E) = \{v, \text{ tel que } v = E.x \text{ sur } \partial V\}.$$

Ce problème variationnel est très difficile à résoudre analytiquement. Il convient de ramener le problème d'homogénéisation non linéaire (C.2) à un problème d'homogénéisation linéaire plus ou moins complexe que l'on sait résoudre.

L'intérêt de la formulation variationnelle de Ponte Castañeda [70] [71] réside dans l'introduction d'un *milieu linéaire de comparaison* multi-phasé. Pour ce faire, il est utile d'introduire la forme duale de la fonction $f(x)$, noté $f^*(y)$, grâce à la relation de Legendre-Fenchel :

$$f(x) = \inf_y \{x.y - f^*(y)\}. \quad (\text{C.3})$$

Ainsi, la fonction $f(\varepsilon_{eq}^2)$ s'exprime en fonction de la forme duale f^* selon [70] :

$$f(\varepsilon_{eq}^2) = \inf_{\mu(x) > 0} \left\{ \frac{3}{2}\mu(x)\varepsilon_{eq}^2 - f^*\left(\frac{3}{2}\mu(x)\right) \right\}. \quad (\text{C.4})$$

En remplaçant les expressions (C.1) et (C.4) dans la formulation variationnelle (C.2), le potentiel macroscopique en déformation prend la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} W(E) = \inf_{\mu(x) > 0} \{W^0(E, \mu(x)) + V(\mu(x))\} \\ W^0(E, \mu(x)) = \inf_{v \in K(E)} \left\langle \frac{1}{2}k(x) (\text{tr}\varepsilon(v))^2 + \frac{3}{2}\mu(x)\varepsilon_{eq}^2(v) \right\rangle \\ V(\mu(x)) = - \left\langle f^* \left(\frac{3}{2}\mu(x) \right) \right\rangle = \left\langle \sup_{\varepsilon} \left\{ f(\varepsilon_{eq}^2) - \frac{3}{2}\mu(x)\varepsilon_{eq}^2 \right\} \right\rangle. \end{array} \right. \quad (C.5)$$

Cette formulation variationnelle a été obtenue, d'une part, en inversant l'ordre de minimisation par rapport au champ de déformation ε cinématiquement admissible et par rapport au champ des modules de cisaillement $\mu(x)$ et, d'autre part, en exploitant la non-dépendance du terme $V(\mu(x))$ par rapport à ε .

La formulation variationnelle (C.5) peut être interprétée comme suit : l'énergie effective $W(E)$ du milieu hétérogène est déterminée via l'introduction d'un milieu linéaire de comparaison dont l'énergie $W^0(E, \mu(x))$ est définie selon :

$$W^0(E, \mu(x)) = \inf_{v \in K(E)} \langle w^0(\varepsilon(v), \mu(x)) \rangle = \frac{1}{2}E : L^{\text{hom}}(\mu(x)) : E.$$

La microstructure du milieu linéaire de comparaison (M.L.C.) est identique à celle du milieu hétérogène réel. La relation liant contrainte et déformation en tout point matériel x du M.L.C. n'est plus une fonction non linéaire du type (C.1) mais une fonction linéaire donnant lieu à un potentiel de la forme :

$$w(x, \varepsilon(x)) = \frac{1}{2}k(x) (\text{tr}\varepsilon(x))^2 + \frac{3}{2}\mu(x)\varepsilon_{eq}^2(v) = \frac{1}{2}\varepsilon(x) : L(x) : \varepsilon(x),$$

avec $L(x) = 3k(x)J + 2\mu(x)K$. Le M.L.C. est caractérisé par un champ de modules de compressibilité $k(x)$ et un champ de modules de cisaillement $\mu(x)$ solutions du problème de minimisation (C.5).

Le second terme $V(\mu(x))$ caractérise l'écart maximal en chaque point matériel x entre l'énergie du milieu hétérogène non linéaire $w(x, \varepsilon(x))$ et l'énergie du milieu linéaire de comparaison $w^0(\varepsilon(v), \mu(x))$ selon :

$$V(\mu(x)) = \left\langle \sup_{\varepsilon} \{w(x, \varepsilon(x)) - w^0(\varepsilon, \mu(x))\} \right\rangle.$$

Sous l'hypothèse de concavité de la fonction f , les formulations variationnelles (C.2) et (C.5) sont strictement équivalentes. La dernière est toutefois plus facilement implémentable que la formulation originale (C.2) car elle fait appel à des approximations qui ne sont pas accessibles avec la formulation variationnelle (C.2). Une simplification possible du problème (C.5) réside dans le remplacement du champ fortement hétérogène des modules de cisaillement $\mu(x)$ par un champ uniforme par morceaux :

$$\mu(x) = \sum_{r=1}^n \chi_r(x) \mu_r,$$

où n est le nombre de phases et μ_r , le module de cisaillement de la phase r uniformes dans cette dernière mais pouvant fluctuer d'une phase à l'autre. $\chi_r(x)$ est la fonction caractéristique qui vaut 1 lorsque x appartient à la phase r et 0 sinon. Avec cette approximation, le problème d'optimisation

ne donne plus la solution exacte du potentiel effectif du milieu hétérogène mais uniquement une borne supérieure, noté $\overline{W}(E)$:

$$\begin{cases} W(E) \leq \overline{W}(E) = \inf_{\mu_r > 0} \left\{ W^0(E, \mu_r) + \sum_{r=1}^n f_r V^{(r)}(\mu_r) \right\} \\ V^{(r)}(\mu_r) = \sup_{\varepsilon} \{ w_r(\varepsilon) - w_r^0(\varepsilon, \mu_r) \}. \end{cases} \quad (C.6)$$

Le milieu linéaire de comparaison est cette fois constitué de n phases de fraction volumique f_r et de module de compressibilité k_r et de module de cisaillement μ_r uniforme dans chaque phase. Les modules de cisaillement optimaux, i.e., ceux assurant le minimum de la quantité entre accolades dans l'expression (C.6a), sont solutions de l'équation suivante obtenue par dérivation de cette quantité par rapport à ces modules :

$$\frac{1}{2f_r} E : \frac{\partial L^{\text{hom}}}{\partial \mu_r}(\mu_r) : E + \frac{\partial V^{(r)}}{\partial \mu_r} = 0 \quad \forall r \in [1, n]. \quad (C.7)$$

En notant ε^0 le tenseur des déformations solution du problème de maximisation (C.6b), le second terme de l'équation (C.7) vaut :

$$-\frac{\partial V^{(r)}}{\partial \mu_r} = \frac{3}{2} (\varepsilon_{eqr}^0)^2, \quad (C.8)$$

où ε_{eqr}^0 est telle que :

$$\varepsilon_{eqr}^0 = \frac{1}{3\mu_r} \frac{\partial f^{(r)}}{\partial \varepsilon_{eqr}^0}(\varepsilon_{eqr}^0) \quad (C.9)$$

A un coefficient $\frac{3}{2}$ près, le premier terme de l'expression (C.7) correspond au moment d'ordre 2 de la déformation équivalente dans la phase r (4.1), conséquence qui conduit à l'égalité $\varepsilon_{eqr}^0 = \langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_{(r)}$. Ainsi, d'après (C.9) les modules sécants dans la phase r sont associés aux moments d'ordre 2 : $\mu_r = \mu_r \left(\langle \varepsilon_{eq}^2 \rangle_{(r)} \right)$, ce qui correspond au choix de l'extension sécante modifiée. Pour une déformation macroscopique E donnée, les modules sécants solutions du problème variationnel (C.6) sont solutions du système non linéaire suivant :

$$\begin{cases} (\varepsilon_{eqr}^0) = \frac{1}{3f_r} E : \frac{\partial L^{\text{hom}}}{\partial \mu_r}(\mu_r) : E \\ \mu_r = \frac{1}{3\varepsilon_{eqr}^0} \frac{\partial f^{(r)}}{\partial \varepsilon_{eqr}^0}(\varepsilon_{eqr}^0) = \frac{1}{3} \frac{\sigma_{eq}}{\varepsilon_{eqr}^0}(\varepsilon_{eqr}^0), \end{cases} \quad (C.10)$$

système identique à celui élaboré dans le chapitre 1 (4.2). Ainsi la procédure variationnelle de Ponte Castañeda [71] coïncide avec la méthode sécante modifiée de Suquet [83]. Notons que ce jeu d'équations montre que les modules sécants dans chaque phase r sont fonctions de la déformation macroscopique E .

On peut également s'assurer que le comportement effectif prévu par cette approche dérive bien d'un potentiel. La dérivée du potentiel effectif $\overline{W}(E)$ (C.6a) associée à l'équation d'optimalité des modules sécants (C.7) conduit à la relation contrainte-déformation macroscopique suivante :

$$\Sigma = L^{\text{hom}}(\mu_r) : E = \frac{\partial \overline{W}}{\partial E}(E).$$