



HAL
open science

Modélisation des effets de l'évolution microstructurale sur le comportement mécanique du superalliage monocristallin AM1

Anaïs Gaubert

► **To cite this version:**

Anaïs Gaubert. Modélisation des effets de l'évolution microstructurale sur le comportement mécanique du superalliage monocristallin AM1. Matériaux. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009. Français. NNT: . pastel-00580004

HAL Id: pastel-00580004

<https://pastel.hal.science/pastel-00580004>

Submitted on 25 Mar 2011

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.



ED n° 432 : Sciences des Métiers de l'Ingénieur

N° attribué par la bibliothèque

/--/--/--/--/--/--/--/--/--/--/

THESE

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris
Spécialité Sciences et Génie des Matériaux

présentée et soutenue publiquement par

Anaïs GAUBERT

le 30 novembre 2009

**MODELISATION DES EFFETS DE L'EVOLUTION
MICROSTRUCTURALE SUR LE COMPORTEMENT MECANIQUE
DU SUPERALLIAGE MONOCRISTALLIN AM1**

Directeur de thèse : Samuel Forest

Jury

Mme. C. REY	Rapporteur	Ecole Centrale Paris
M. A. HAZOTTE	Rapporteur	Université de Metz
M. B. APPOLAIRE	Examineur	Onera-LEM
M. F. COMTE	Examineur	Snecma
M. B. FEDELICH	Examineur	BAM
M. A. FINEL	Examineur	Onera-LEM
M. F. GALLERNEAU	Examineur	Onera
M. S. FOREST	Directeur de thèse	Ecole des Mines de Paris

ONERA The French Aerospace Lab
29, avenue de la Division Leclerc, 92322 Châtillon Cedex

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé à l’Onera au sein du département Matériaux et Structures Métalliques (DMSM). Je remercie le directeur Shigehisa Naka de m’y avoir accueillie.

Je tiens à remercier Bernard Fedelich d’avoir présidé le jury de thèse et tous les autres membres du jury d’avoir accepté de juger ce travail et d’avoir ouvert les discussions le jour de la soutenance. Je remercie tout particulièrement Colette Rey et Alain Hazotte pour la relecture minutieuse et approfondie du manuscrit. J’en profite également pour remercier Snecma pour l’intérêt porté à ce travail ainsi que la DGA pour avoir financé ces travaux.

Je souhaite exprimer ma profonde reconnaissance à Samuel Forest qui a accepté d’être mon directeur de thèse. Je le remercie pour ses qualités scientifiques et son éternel enthousiasme qui a été un grande source de motivation pour moi. Je souhaite également remercier toutes les personnes qui ont pris part à l’encadrement de cette thèse. Je pense en premier lieu à Franck Gallerneau et Serge Kruch qui m’ont laissé une grande autonomie dans mon travail tout en étant toujours derrière moi pour me soutenir. Je remercie aussi Alphonse Finel et Yann Le Bouar du LEM pour la collaboration fructueuse entre DMSM et le LEM. Je remercie Alphonse pour sa passion et sa manière d’expliquer les équations avec les mains. Je remercie Yann pour ses grandes qualités scientifiques et pédagogiques et pour m’avoir soutenue tout au long de cette aventure.

Sur le plan expérimental, j’ai bénéficié de l’aide de Pascal Paulmier pour la réalisation des essais mécaniques et Catherine Ramusat pour les observations microstructurales. Je les remercie pour la qualité de leur travail.

Enfin, je remercie toute l’équipe CEMN, les anciens de LCME et le LEM pour leur bonne humeur et l’aide qu’il ont pu me procurer. Merci à Pascale, Arjen, Frédéric, Vincent(s), Denis, Céline ... et tous les thésards pour avoir contribué à rendre ces trois années de thèse agréables. Une pensée particulière va à Jean Louis Chaboche pour les nombreuses discussions que nous avons eu et pour avoir relu minutieusement l’intégralité de mon manuscrit.

Table des matières

Introduction générale	13
1 L'AM1, microstructure et comportement	17
1.1 Introduction	18
1.2 Le superalliage monocristallin AM1	18
1.2.1 Généralités	18
1.2.2 Comportement mécanique	19
1.3 Cadre de la modélisation du comportement des superalliages monocristallins	22
1.4 Conclusion	23
2 Modélisation macroscopique du comportement de l'AM1	25
2.1 Introduction	26
2.2 Modélisation macroscopique du comportement des superalliages monocristallins	26
2.2.1 Modèle de Cailletaud	27
2.2.2 Modèle de Levkovitch	28
2.2.3 Modèle de Fedelich	29
2.3 Campagne expérimentale sur l'AM1 non vieilli	30
2.3.1 Essai 01 : écrouissage cyclique à 400°C	31
2.3.2 Essai 02 : essai cyclique en $R_\epsilon = 0+$	33
2.3.3 Essais 03 et 04 : essais à double vitesse à 950°C et 1100°C	34
2.3.4 Essai 09 suite : essai à fréquence croissante	35
2.3.5 Essais 05 et 09 : restauration de l'écrouissage	36
2.4 Extension du domaine de validité du modèle de comportement de l'AM1 à 950°C	38
2.4.1 Recalage du modèle sur la plage de vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s $^{-1}$	39

2.4.2	Proposition 1 : Modèle de type Norton	40
2.4.3	Proposition 2 : Modèle de type Norton avec deux potentiels	42
2.4.4	Proposition 3 : loi de viscosité de type sinus hyperbolique	48
2.4.5	Proposition 3 bis : loi de viscosité de type sinus hyperbolique, avec seuil	48
2.4.6	Discussion	51
2.5	Conclusion	52
3	Liens entre microstructure et comportement : une approche par homogénéisation classique	55
3.1	Introduction	56
3.2	Comportement des phases γ et γ'	56
3.2.1	Mécanismes de déformation plastique à haute température	57
3.2.2	Modélisation du comportement des phases γ et γ'	58
3.3	Simulation du comportement du matériau biphasé	58
3.3.1	Convergence au maillage	59
3.3.2	Comportement de l'AM1 à partir des propriétés des phases massives à 950°C	62
3.3.3	Identification du comportement de chaque phase dans l'alliage	63
3.4	Simulation d'essais de torsion	71
3.4.1	Simulation du comportement du matériau biphasé en cisaillement pur suivant $\langle 001 \rangle$	71
3.4.2	Simulation d'essais de torsion sur tube	73
3.5	Effets d'échelle de la microstructure	75
3.6	Conclusion	77
4	Etude expérimentale de la coalescence orientée	79
4.1	Introduction	80
4.2	Etude bibliographique de la mise en radeaux	80
4.2.1	Illustration du phénomène	80
4.2.2	Influence de la plasticité	83
4.2.3	Influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique	85
4.2.4	Conclusion de l'étude bibliographique	89
4.3	Description des essais	89
4.3.1	Matrice d'essais sur matériau vieilli	92
4.3.2	Essais de comportement complexes	93

4.4	Vieillisements et observation des microstructures vieilles	94
4.4.1	Vieillisements en fluage	94
4.4.2	Vieillisements sous chargement cyclique	102
4.5	Influence du vieillissement sur le comportement mécanique	106
4.5.1	Influence d'un vieillissement à 1050°C, 150 MPa	106
4.5.2	Influence de la contrainte de fluage	108
4.5.3	Influence de la température de fluage	108
4.5.4	Influence d'un vieillissement cyclique	111
4.6	Conclusion	113
5	Modélisation de la coalescence orientée	115
5.1	Introduction	116
5.2	Modélisation par la théorie des champs de phases	116
5.2.1	Description de la microstructure γ/γ'	117
5.2.2	Cinétique	118
5.2.3	Fonctionnelle d'énergie libre de Ginzburg-Landau	118
5.2.4	Traitement de l'élasticité	120
5.3	Implémentation numérique	122
5.3.1	Equations cinétiques	122
5.3.2	Algorithme de résolution de l'équilibre élastique	123
5.3.3	Discrétisation de l'espace	124
5.4	Simulations avec le modèle champs de phases élastique	125
5.4.1	Calibration des grandeurs physiques du modèle	125
5.4.2	Génération de la microstructure cuboïdale en 2D	128
5.5	Modélisation phénoménologique de la plasticité	130
5.5.1	Retour sur la théorie des champs de phases - couplage avec la viscoplasticité	131
5.5.2	Implémentation numérique	135
5.5.3	Diagramme de phases semi-cohérent	135
5.6	Simulation de la mise en radeaux	139
5.6.1	Comportement viscoplastique de la phase γ	139
5.6.2	Résultats numériques	140

5.6.3	Discussion	144
5.7	Vers des simulations champs de phases plus quantitatives ?	145
5.7.1	Génération de la microstructure cuboïdale	145
5.7.2	Etude des évolutions microstructurales sous chargement mécanique en 2D	156
5.7.3	Etude des évolutions microstructurales sous chargement mécanique en 3D	160
5.8	Conclusion	168
6	Size effects in generalized continuum crystal plasticity	171
6.1	Introduction	172
6.2	Cosserat modelling of simple shear in a two-phase laminate	174
6.2.1	The Cosserat model	175
6.2.2	Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear	176
6.3	Strain gradient plasticity : The “ <i>curlHP</i> ” model	180
6.3.1	Balance equations	180
6.3.2	Energy and entropy principles ; Constitutive equations	180
6.3.3	Application to single slip	181
6.3.4	Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear	182
6.4	Formulation of the <i>microcurl</i> model	183
6.4.1	Balance equations	183
6.4.2	Constitutive equations	184
6.4.3	Internal constraint	185
6.4.4	Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear	185
6.5	Overall size effects predicted by the models	187
6.5.1	Macroscopic stress-strain curve and kinematic hardening modulus	187
6.5.2	Size-dependent macroscopic flow stress	191
6.6	Discussion	199
6.6.1	Identification of material parameters	199
6.6.2	Extension to double slip	202
6.6.3	Application to γ/γ' microstructures	205
6.7	Conclusions	209
7	Modélisation à l'échelle macroscopique de l'influence des évolutions microstructurales sur le	

comportement mécanique de l'AM1	213
7.1 Introduction	214
7.2 Comment modéliser l'influence d'un vieillissement sur le comportement mécanique ?	214
7.2.1 Approche micro-mécanique	215
7.2.2 Approche macroscopique	215
7.3 Modèle macroscopique	217
7.3.1 Equations du modèle	217
7.3.2 Identification de l'adoucissement généré par la mise en radeaux	218
7.3.3 Identification de la cinétique de mise en radeaux	219
7.3.4 Simulation des essais suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$	221
7.3.5 Limites du modèle	221
7.4 Vers une modélisation de l'évolution de l'orientation de la microstructure	224
7.4.1 Modélisation	224
7.4.2 Cas élastique	226
7.4.3 Chargements suivant l'orientation $[001]$	226
7.4.4 Chargements suivant l'orientation $[011]$	229
7.4.5 Chargements suivant l'orientation $[111]$	231
7.4.6 Discussion	235
7.5 Conclusion	235
Conclusion générale et perspectives	237
A Techniques expérimentales	241
A.1 Eprouvettes	241
A.2 Dispositif expérimental	241
B Compléments sur le comportement de l'AM1 sous chargement cyclique répété	246
B.1 Mise en évidence des contraintes de compatibilité dans l'AM1	246
B.2 Simulations de chargements cycliques non symétriques par éléments finis sur la cellule élémentaire γ/γ'	247
B.2.1 Simulation de l'essai 02	247
B.2.2 Simulation d'un essai à plus grande amplitude de déformation	247
B.3 Conclusions	248

C	Dépouillement de l'essai 09 suite	250
C.1	Calcul de la déformation à partir du déplacement	250
C.2	Détermination de l'amplitude de déformation plastique	250
D	Compatibilité de nos essais avec la base de données expérimentales	253
D.1	Comportement à 950°C	253
D.2	Comportement à 1050°C	255
D.3	Comportement à 1100°C	256
D.4	Conclusions	256
E	Constantes élastiques des phases γ et γ'	259
E.1	Etude bibliographique des constantes élastiques de la phase γ et de l'alliage	259
E.2	Constantes élastiques de la phase γ'	261
F	Comportement visco-plastique des phases isolées à 1050°C	262
F.1	Systèmes octaédriques	262
F.2	Systèmes cubiques	262
F.3	Validation de l'identification	263
G	Effet d'histoire de la température	265
G.1	Etude bibliographique	265
G.2	Essais de comportement après surchauffe	266
H	Influence d'un vieillissement sur le comportement mécanique suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$	269
H.1	Influence d'un vieillissement en fluage	269
H.2	Influence d'un vieillissement cyclique	271
H.3	Conclusion	274
I	Viscoplastic phase field modelling of rafting in Ni base superalloys	275
I.1	Introduction	275
I.2	Phase field model	276
I.2.1	The Ginzburg-Landau free energy	276
I.2.2	Elastic energy	277

I.3	Viscoplastic coupling with the PFM	277
I.3.1	Viscoplastic model	277
I.3.2	Viscoplastic coupling with the PFM	278
I.4	Results	279
I.5	Conclusion and perspectives	279
J	Strain gradient plasticity solution for a two-phase plastic laminate	280
K	Cosserat solution for symmetric double slip	282
	Résumés	297

Introduction générale

Ce travail s'inscrit dans le contexte de la modélisation et de la prévision de la durée de vie des aubes de turbine haute pression (HP) des moteurs aéronautiques, et en particulier des moteurs destinés à des applications militaires. La turbine HP (figure 1) est située en sortie de la chambre de combustion, et de ce fait elle subit des chargements thermiques et mécaniques importants dans des conditions extrêmes (oxydation, etc.). Les superalliages base nickel ont été développés pour répondre à cette problématique. Ce sont maintenant des matériaux monocristallins qui sont utilisés pour les moteurs d'avions de chasse. En France, les recherches ont conduit au superalliage AM1 au début des années 80. Il est à l'heure actuelle utilisé pour le moteur M88 du Rafale.



FIG. 1. Aube de turbine haute pression du moteur M88.

Les industriels souhaitent aujourd'hui étendre l'utilisation des superalliages monocristallins à d'autres types de moteurs aéronautiques. En particulier, l'AM1 est utilisé pour la fabrication des aubes de turbine HP du moteur TP400 de l'avion de transport militaire A400m. Les conditions d'utilisation de ce moteur sont très différentes de celles du M88. En effet, ce dernier est plutôt soumis à des chargements de type fatigue, i.e. à des cycles thermomécaniques dont l'amplitude peut être relativement élevée. Au contraire, pour un avion de transport, les aubes de turbine HP sont soumises à des chargements de type fluage (maintien à contrainte constante pendant de longs temps correspondant aux phases de vol en croisière). Or, dans les superalliages base nickel, le fluage à haute température conduit à une évolution de la microstructure connue sous le nom de mise en radeaux, dont les conséquences sur le comportement mécanique sont généralement néfastes. La prise en compte de l'influence de la mise en radeaux sur le comportement de l'AM1 fait l'objet du Projet d'Etudes Amont (PEA) EGISTHE entre la DGA, Snecma et l'Onera notamment. Mon travail de thèse s'inscrit dans le cadre de cette étude contractuelle.

Le comportement mécanique des monocristaux de superalliages, hors évolutions microstructurales, a fait l'objet de nombreuses études. Il a pour principales caractéristiques d'être fortement anisotrope et dépendant de la température [Poubanne 89]. C'est pourquoi des modèles de comportement permettant de reproduire ces caractéristiques ont été développés. Cailletaud [Cailletaud 87, Méric 91] a proposé un modèle macroscopique basé sur les mécanismes physiques de la plasticité cristalline au travers de la loi de Schmid. Ce modèle a été identifié dans [Hanriot 93] pour l'AM1 en s'appuyant sur une très large base d'essais. Cette

base est principalement composée d'essais cycliques, effectués à des températures comprises entre 20°C et 1150°C, pour différentes orientations cristallographiques et sur une plage de vitesses de déformation comprises entre 10^{-2} et 10^{-5} s^{-1} . Ces différentes études ont permis l'obtention d'un modèle de comportement de l'AM1 utilisable en bureaux d'études car calibré sur une large base d'essais pour un nombre de paramètres matériaux réduit (10 paramètres caractérisant la viscoplasticité par température). Cependant des domaines de comportement restent inexplorés, en particulier celui des fortes vitesses de déformation (10^{-1} s^{-1}) et celui des faibles vitesses (typiquement 10^{-9} s^{-1} , ce qui correspond à des essais de relaxation de longue durée ou des essais de fluage). Mais surtout, le modèle de comportement actuel ne prend pas en compte d'éventuelles évolutions microstructurales induites par des chargements à haute température.

La mise en évidence d'évolutions microstructurales dans les superalliages base nickel en fluage à haute température a été faite dès les années 70. Ce sont des matériaux biphasés, composés de précipités γ' de forme cuboïdale répartis de façon quasi-périodique dans une matrice γ . Sous chargement de fluage à haute température, [Fredholm 87, Ayrault 89] notamment ont montré que les précipités ont tendance à coalescer de façon anisotrope pour former des plaquettes. L'orientation de ces plaquettes dépend de paramètres matériau tels que le désaccord paramétrique entre les deux phases, leurs propriétés élastiques, mais aussi du chargement. Plus récemment, [Espié 96, Ott 99] ont montré que la microstructure en radeaux a un comportement inférieur sous chargement monotone ou cyclique que la microstructure initiale cuboïdale. Ces études expérimentales ont donc permis de dégager les principales caractéristiques de la mise en radeaux et de ses influences sur le comportement mécanique. Cependant, ces auteurs se sont principalement intéressés à des conditions de vieillissement relativement simples (fluage essentiellement). De plus, l'étude de l'influence de la mise en radeaux n'est pas complète dans le sens où les auteurs n'ont pas vraiment étudié les conséquences de la mise en radeaux sur la viscosité ou l'écroutissage.

Une meilleure compréhension de la mise en radeaux et de ses conséquences passe par son étude à l'échelle mésoscopique. Deux types de modélisations ont été développées à l'échelle de la microstructure, d'une part la modélisation de la cinétique de mise en radeaux [Khachaturyan 83, Véron 95, Olschewski 95, Boussinot 07, Zhou 07a, Zhou 08] et d'autre part la modélisation de la plasticité [Espié 96, Nouailhas 97, Forest 00, Busso 00]. Ces modèles ont permis de mieux comprendre les paramètres physiques influant. Par exemple, les modèles de champs de phases ou le modèle de Véron [Véron 95] ont permis de mettre en évidence l'influence de la plasticité sur la coalescence orientée des précipités. Les modèles de mécanique des milieux continus généralisés [Forest 00, Busso 00] ou la dynamique des dislocations [Vattré 09b] tentent de reproduire les effets d'échelle observés en plasticité.

Les données expérimentales et les modélisations à l'échelle de la microstructure ont permis l'émergence de modèles macroscopiques rendant compte de l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique [Tinga 08, Fedelich 08]. Ces modèles consistent à ajouter une ou plusieurs variables internes décrivant le degré de mise en radeaux de la microstructure. Fedelich [Fedelich 08] a montré qu'un tel modèle permet de décrire l'adoucissement observé après mise en radeaux de la microstructure.

Ma thèse consiste donc à développer un modèle de comportement macroscopique qui prenne en compte les évolutions microstructurales sous chargement à haute température. La démarche multiéchelles et multi-physiques développée est résumée par la figure 2. Nous avons étudié la mise en radeaux puis son influence sur le comportement mécanique, d'une part d'un point de vue expérimental, et d'autre part grâce à des modélisations à l'échelle mésoscopique. L'objectif de ces modèles est double. Ils permettent de compléter la base de donnée expérimentale par des expériences numériques. En particulier, ils peuvent servir à l'étude de cas de chargements plus complexes. De plus, ils permettent une meilleure compréhension des phénomènes physiques mis en jeu afin d'en détacher les paramètres clés pour la modélisation macroscopique.

Le mémoire est présenté de la façon suivante. Le premier chapitre présente le matériau de l'étude l'AM1, sa microstructure et son comportement, ainsi qu'un état des lieux des modélisations du comportement mécanique développées pour les superalliages base nickel monocristallins.

Le deuxième chapitre propose une évaluation du modèle macroscopique sur toute la plage de vitesses de déformation 10^{-9} s^{-1} - 10^{-1} s^{-1} à haute température. Pour ce faire, des essais mécaniques complétant la base de données des années 90 ont été réalisés dans le cadre du PEA EGISTHE. Des essais à haute vitesse de déformation, des essais de restauration et des relaxations de longue durée montrent les limites

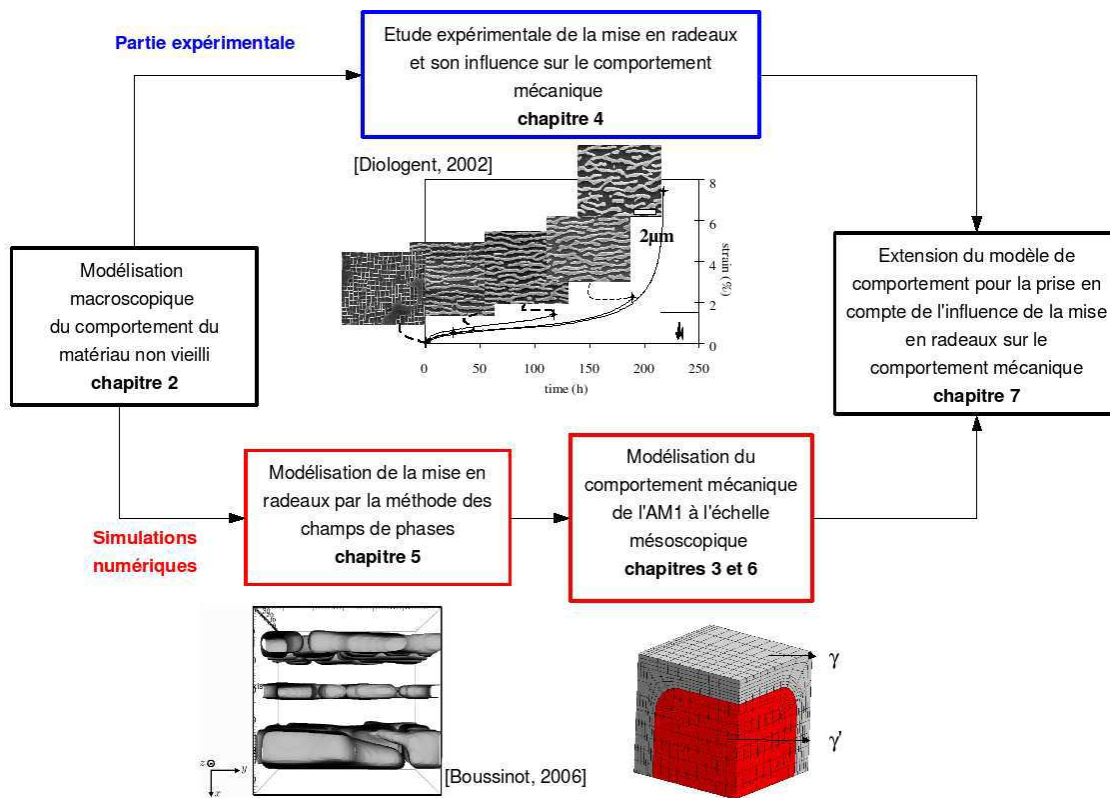


FIG. 2. Démarche suivie au cours de la thèse.

du modèle actuel. Des propositions d'extension du domaine de validité du modèle en terme de vitesse de déformation sont étudiées. Ce chapitre répond à une demande d'amélioration de la robustesse du modèle de comportement de la part des industriels.

Le troisième chapitre aborde la modélisation du comportement de l'AM1 à l'échelle de la microstructure à l'aide d'une approche par homogénéisation classique [Nouailhas 95, Espié 96]. Un modèle de comportement de type Cailletaud [Cailletaud 87, Méric 91] est attribué à chacune des phases. Leur comportement dans le superalliage est identifié à partir de résultats expérimentaux macroscopiques. La validité de cette approche est ensuite analysée par la simulation de cas de chargements complexes. Nous avons en particulier comparé simulations et résultats expérimentaux en torsion et en écrouissage cyclique pour différentes tailles de microstructures. Ce chapitre montre les avantages et les limites d'une telle approche.

Le chapitre 4 est consacré à l'étude de la mise en radeaux d'un point de vue expérimental. Après une revue bibliographique sur le phénomène et son influence sur le comportement mécanique, nous présentons les essais réalisés dans ce travail. Ils sont effectués selon le principe suivant. Les échantillons sont préalablement vieillis sous différentes conditions. Ils sont ensuite testés mécaniquement. Ce chapitre présente les résultats des vieillissements du point de vue mécanique ainsi que les observations micrographiques. Enfin, nous détaillons les résultats expérimentaux sur l'influence d'un vieillissement sur le comportement mécanique de l'AM1.

La modélisation de la mise en radeaux est abordée au chapitre 5. Nous avons utilisé le modèle champs de phases développé au Laboratoire d'Etude des Microstructures (LEM) [Boussinot 07]. La méthode des champs de phases est particulièrement adaptée à l'étude des évolutions microstructurales car elle se situe à l'échelle mésoscopique. Nous avons étendu le modèle de Boussinot par un couplage avec l'activité plastique dans les canaux de matrice [Gaubert 08, Gaubert 09]. La plasticité est décrite par une modélisation continue de type Cailletaud comme au chapitre 2. Une étude de l'influence de la plasticité sur la coalescence orientée dans les superalliage sous différentes conditions de chargement est proposée.

Le chapitre 6 poursuit la modélisation du comportement des superalliages proposée au chapitre 3 à l'échelle mésoscopique. Une des limites d'une modélisation continue de la plasticité à l'échelle de la microstructure est qu'elle ne permet pas de rendre compte des effets d'échelles (taille de précipité, etc.). Nous nous sommes donc intéressés aux milieux continus généralisés, et en particulier au milieu de Cosserat [Forest 03a, Forest 08]. Nous proposons une étude analytique des effets d'échelle prédits par ce type de modèles [Cordero 09].

Enfin, le dernier chapitre utilise les développements numériques et les résultats expérimentaux des chapitres précédents pour construire un modèle de comportement intégrant l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique de l'AM1.

Chapitre 1

L'AM1, microstructure et comportement

1.1 Introduction

Ce chapitre présente le matériau au centre de cette étude, le superalliage base nickel monocristallin AM1. Après une présentation du matériau et de sa microstructure nous décrivons les principales caractéristiques de son comportement mécanique. Enfin, il dresse un inventaire des modélisations du comportement mécanique développées pour cette classe de matériaux.

1.2 Le superalliage monocristallin AM1

1.2.1 Généralités

L'AM1 est un superalliage base nickel, dit à durcissement structural, dont la composition chimique pondérale est donnée par le tableau 1.1. Ce matériau présente trois échelles caractéristiques qui sont décrites ci-après.

Élément	Ni	Co	Cr	Mo	W	Ta, Nb	Al	Ti	C	Fe
Teneur visée	base	6-7	7-8	1.8-2.2	5-6	7.5-8.5	5.1-5.5	1	0.01	0.2

TAB. 1.1. Composition chimique de l'AM1 en pourcentage pondéral base nickel.

Échelle dendritique La présence de dendrites résulte du procédé de fabrication par solidification dirigée. La taille caractéristique des dendrites est de l'ordre de la centaine de microns comme on peut le voir sur la figure 1.1. Cette figure met en évidence la répartition non-homogène des éléments chimiques au sein de l'alliage. Des particules massives d'eutectique γ/γ' sont observées dans les régions interdendritiques. Les dendrites sont, elles, biphasées γ/γ' , mais avec des gradients de composition chimique. Un traitement thermique d'homogénéisation à 1300°C pendant 3h est effectué, d'une part dans le but d'éliminer les eutectiques γ/γ' formés au cours de la solidification, et d'autre part afin d'atténuer les ségrégations chimiques dendritiques.

Dans le cas des alliages de première génération tels que l'AM1, ce traitement s'avère relativement efficace [Espié 96, Caron 99] si bien qu'à notre connaissance il n'a pas été reporté de différences microstructurales significatives entre régions dendritiques et interdendritiques. En revanche, dans les alliages plus récents caractérisés par l'introduction d'éléments lourds tels que le rhénium ou le ruthénium, il persiste des inhomogénéités de compositions chimiques des phases γ et γ' après le traitement d'homogénéisation. Les régions dendritiques ont tendance à être plus riches en Re et Ru [Caron 99, Schulze 00], ce qui induit notamment une inhomogénéité du désaccord paramétrique au sein de l'alliage [Schulze 00]. Celle-ci peut affecter les évolutions microstructurales telles que la mise en radeaux. Ce point est notamment mis en évidence dans les travaux de thèse de M. Arnoux à l'ENSMA sur le MCNG, alliage de quatrième génération. Il observe une mise en radeaux plus rapide dans les régions dendritiques que dans les régions interdendritiques. Le même type d'observations a été fait dans [Peng 00] pour le CMSX-2 en fluage à basse température (760°C). En revanche, pour des températures plus élevées (850°C et plus), les inhomogénéités de microstructures sont nettement plus faibles. C'est pourquoi dans ce travail les ségrégations chimiques à l'échelle des dendrites sont négligées.

Échelle des précipités Les superalliages monocristallins sont des matériaux biphasés composés d'une matrice austénitique γ et de précipités de phase intermétallique γ' . Cette microstructure est obtenue par une succession de deux traitements thermiques de revenu qui induisent une microstructure relativement homogène. La figure 1.2 illustre la répartition quasi-périodique des précipités. Leur taille moyenne est de

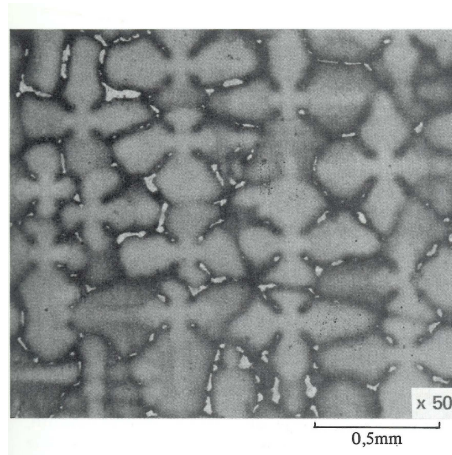


FIG. 1.1. AM1 brut de coulée d'après [Poubanne 89].

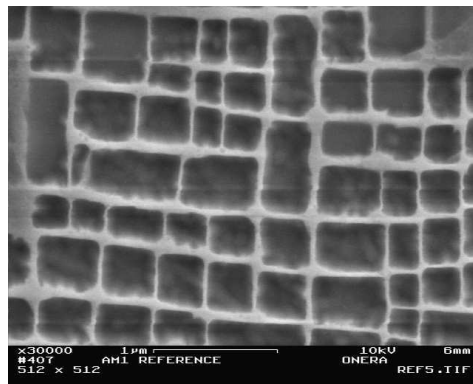


FIG. 1.2. Microstructure du superalliage AM1 d'après [Bonnand 06].

$0.45\mu m$ alors que celle des couloirs de matrice est de $0.1\mu m$. La fraction volumique de précipités est de l'ordre de 68 % dans l'AM1.

Échelle cristallographique La phase γ , correspondant à la matrice du superalliage, est une solution solide désordonnée de structure CFC. La phase γ' , de stoechiométrie $Ni_3(Ti, Al)$, possède quant à elle une structure ordonnée de type $L1_2$. La faible différence de paramètres de maille entre les deux phases permet une précipitation cohérente de la phase γ' . On définit le désaccord paramétrique (ou misfit) comme la différence relative des paramètres cristallins a_γ et $a_{\gamma'}$ des deux phases :

$$\delta = 2 \frac{a_{\gamma'} - a_\gamma}{a_{\gamma'} + a_\gamma} \quad (1.1)$$

Pour l'AM1, cette valeur est faiblement négative et décroît avec la température. D'après [Royer 93], les contraintes de cohérence sont relaxées élastiquement jusqu'à une température de $1150^\circ C$ dans le cas de l'AM1. Une illustration du misfit est présentée sur la figure 1.3.

1.2.2 Comportement mécanique

Le comportement particulièrement résistant des superalliages base nickel est dû à leur microstructure et aux interactions dislocations/particules qu'elle induit. La déformation plastique a lieu principalement dans

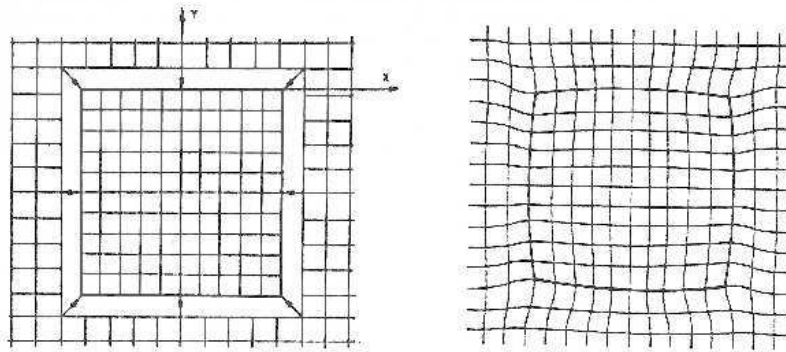


FIG. 1.3. Illustration des contraintes de cohérence, d'après [Royer 93].

la matrice γ , les précipités agissant comme des freins à la plasticité. Plusieurs modes de durcissement sont rencontrés dans ces alliages. Nous exposons ici les principaux :

- Durcissement par solution solide dans la matrice CFC. L'interaction entre le champ de contraintes créé par l'introduction d'atomes étrangers dans la structure et les dislocations rend le mouvement de ces dernières plus difficile. Les gros atomes de tungstène, molybdène et tantale sont ajoutés dans ce but ;
- Durcissement par précipitation. La présence des précipités γ' , plus durs que la matrice, oblige les dislocations soit à les contourner soit à les cisailer. Ces deux mécanismes ont un caractère durcissant. Le premier, appelé contournement d'Orowan, nécessite la courbure des dislocations, d'autant plus difficile que les couloirs de matrice sont étroits. L'autre possibilité, qui consiste à cisailer les précipités, est rendue difficile par leur caractère ordonné. Une dislocation, si elle veut entrer dans un précipité, doit modifier localement l'ordre ;
- Influence du désaccord paramétrique qui induit des contraintes de compression dans la phase γ et des contraintes de tension dans la phase γ' . De nombreux calculs par éléments finis ont été menés (voir par exemple [Glatzel 89, Ganghoffer 91, Benyoucef 94]) afin d'évaluer ces contraintes. Qualitativement, ces auteurs trouvent les mêmes résultats. Les couloirs subissent une compression tri-axiale de l'ordre de 200 à 400 MPa, et le précipité une traction tri-axiale de quelques dizaines de MPa.

Comportement monotone Au niveau macroscopique et de manière générale, le comportement mécanique des monocristaux de superalliages est anisotrope. La figure 1.4 illustre cette propriété à 950°C. Le comportement suivant la direction $\langle 001 \rangle$ se distingue clairement des comportements suivant $\langle 111 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ et $\langle 123 \rangle$. Le comportement suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ montre plus d'écrouissage que celui suivant les autres orientations.

Le comportement mécanique dépend également fortement de la température. Ainsi, schématiquement, deux plages de températures faisant intervenir des mécanismes de plasticité différents peuvent être distinguées : les basses températures, typiquement entre l'ambiante et 650°C, et les hautes températures à partir de 950°C environ. Aux températures comprises entre 650°C et 950°C, les deux types de mécanismes sont présents. Le comportement mécanique entre 20°C et 650°C est peu sensible à la vitesse de déformation. De plus, le comportement à 20°C est très proche de celui à 650°C. Macroscopiquement, [Chieragatti 87] et [Hanriot 93] ont observé la présence de macrobandes de glissement. A l'échelle de la microstructure on constate majoritairement le cisaillement des précipités sur de longues distances. De plus, à basse température, les monocristaux de superalliages exhibent une dissymétrie de la limite élastique entre traction et compression [Shah 84]. Elle a été quantifiée dans le cas de l'AM1 dans [Chieragatti 87, Hanriot 93] à différentes températures. A 650°C, cela se traduit par une contrainte moyenne d'environ 90 MPa pour un chargement symétrique suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$, et des valeurs négatives comprises entre -70 MPa et 110 MPa suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Ce phénomène trouve son origine dans les mécanismes de déformation plastique dans les précipités sur lesquels nous reviendrons au chapitre 3.

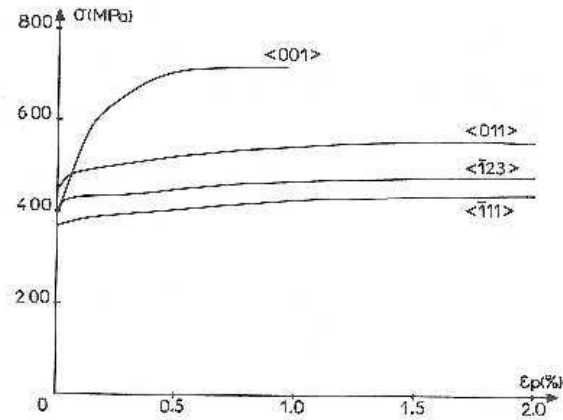


FIG. 1.4. Illustration du comportement anisotrope de l'AM1 en traction à 950°C d'après [Poubanne 89].

Entre 950°C et 1100°C, on observe une très grande sensibilité à la vitesse de chargement. A l'échelle microscopique, la déformation est localisée dans les couloirs de matrice. On observe principalement le contournement des précipités bien que des événements isolés de cisaillement de précipités soient également constatés. De plus, à haute température, des mécanismes thermiquement activés apparaissent, tels que la montée des composantes coins des dislocations aux interfaces γ/γ' ou le glissement dévié d'une dislocation de la matrice lorsqu'elle rencontre un précipité. Enfin, la dissymétrie traction/compression évoquée pour les basses températures devient plus faible (de l'ordre de 10 MPa) à haute température, sauf peut-être pour l'orientation $\langle 111 \rangle$ pour laquelle Hanriot a mesuré une limite d'écoulement supérieure d'environ 30 MPa en traction par rapport à la compression à 950°C.

Comportement cyclique Le comportement cyclique de l'AM1 possède les mêmes caractéristiques que le comportement monotone, c'est-à-dire anisotropie de déformation plastique et viscosité. Quelques précisions peuvent cependant être apportées. Tout d'abord, le comportement cyclique est caractérisé par une stabilisation très rapide du cycle dans le cas de chargements alternés. Typiquement le cycle stabilisé est obtenu après 3 cycles [Poubanne 89]. De plus, comme nous l'avons précisé au paragraphe précédent, à haute température et pour un chargement symétrique, les boucles d'hystérésis sont globalement symétriques. Ce n'est en revanche pas le cas à basse température où une asymétrie traction/compression est observée dans les superalliages. Enfin, il faut souligner que l'on observe une diminution sensible du domaine élastique lors d'essais cycliques. Ce phénomène, constaté par Poubanne [Poubanne 89] est illustré par la figure 1.5 pour l'orientation $\langle 123 \rangle$.

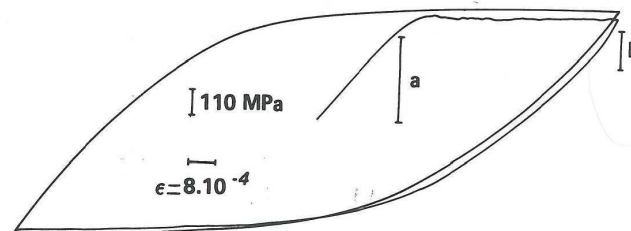


FIG. 1.5. Illustration de la diminution très rapide du domaine élastique de (a) à (b) durant le premier quart de cycle (AM1 $\langle 123 \rangle$ à 950°C), d'après [Poubanne 89].

Comportement en fluage En fluage aussi le comportement dépend fortement de la température. Marchal [Marchal 06], après [Matan 99], distingue trois gammes de températures. Les basses températures, autour de 750°C, pour lesquelles on observe un fluage primaire important, les températures comprises entre 850°C et 1000°C environ caractérisées par l'absence de régime stationnaire, et enfin les températures supérieures à 1000°C, suffisamment importantes pour induire des évolutions de la microstructure connues sous le nom de mise en radeaux. Cette classification n'est cependant pas figée. Ainsi, en appliquant une contrainte de fluage importante, de l'ordre de 300MPa, à 950°C, [Diologent 02] trouve un comportement similaire à celui observé à 1050°C, associé à une coalescence orientée. Nous reviendrons largement sur la mise en radeaux dans les chapitres suivants. Le comportement en fluage est également caractérisé par une forte anisotropie.

Glissement cubique Intéressons nous aux modes de déformation plastique des monocristaux de type CFC en nous basant sur le travail de Poubanne [Poubanne 89]. Un tel matériau possède 4 plans denses (111), dits plans octaédriques ou prismatiques, auxquels sont associés 3 directions de glissement de type $\langle 110 \rangle$ par plan. L'ensemble noté $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle(111)$ forme les 12 systèmes de glissement octaédriques. D'autres systèmes de glissement sont cependant envisageables malgré des énergies liées à la distorsion du réseau moins favorables. Il s'agit des 6 systèmes cubiques, notés $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle(001)$. Macroscopiquement, un chargement suivant une direction de type $\langle 111 \rangle$ induit effectivement du glissement cubique. Mais des études récentes au niveau expérimental [Bettge 99] et en dynamique des dislocations [Vatré 09a] semblent montrer que le glissement cubique apparent correspond plutôt microscopiquement à du glissement octaédrique en "zigzag" au sein des canaux de matrice.

Interaction entre les systèmes de glissement Dans un monocristal, les dislocations qui glissent sur un système donné créent un champ de contraintes qui rend plus difficile le passage des dislocations suivantes sur des plans parallèles (mécanisme d'auto-écrouissage). De plus, elles constituent un obstacle au glissement des dislocations sur d'autres plans de glissement. Cette interaction entre systèmes de glissement est appelée écrouissage latent, et entre dans la modélisation au travers de la matrice d'écrouissage introduite dans l'écrouissage isotrope du modèle de comportement utilisé à l'ENSMP et à l'Onera [Cailletaud 87]. Hanriot [Hanriot 93] a montré, à partir de simulations numériques, que la contribution de l'écrouissage latent telle qu'elle est proposée dans ce modèle est négligeable. De plus, Nouailhas a montré sur le CMSX-2 à 950°C qu'il ne semble pas y avoir d'interaction sensible entre systèmes de glissement grâce à des essais de traction-torsion [Nouailhas 93].

1.3 Cadre de la modélisation du comportement des superalliages monocristallins

Cette partie offre une revue bibliographique des différents types de modélisations du comportement mécanique des matériaux, et en particulier de celui des superalliages.

La modélisation du comportement mécanique des matériaux peut s'envisager à différentes échelles, présentées très schématiquement par la figure 1.6. La plasticité et l'écrouissage d'un matériau résultent de la création et du mouvement de dislocations. Les dislocations sont des défauts cristallins linéiques. L'échelle naturelle de leur étude est l'échelle atomique. Des modélisations à l'échelle atomique peuvent par exemple être utilisées pour étudier le durcissement par solution solide. Néanmoins, ce type de simulations ne permet pas d'accéder au comportement macroscopique d'un matériau. C'est pourquoi, on est obligé de se placer à des échelles plus grandes.

Nous pouvons distinguer les modélisations à l'échelle de la microstructure, typiquement à l'échelle du micron dans le cas des superalliages, et les modélisations purement macroscopiques qui ne prennent pas en compte le caractère hétérogène de la plasticité au sein du matériau. A l'échelle de la microstructure, que nous appellerons échelle mésoscopique dans ce mémoire, deux approches sont possibles. La première approche, par dynamique des dislocations [Devincre 01, Lemarchand 01, Groh 05], a l'avantage de rendre

compte du caractère discret de la plasticité. Elle contient intrinsèquement les effets d'échelle en plasticité de type Orowan ou Hall-Petch. En revanche, ces simulations restent très coûteuses en temps calcul. De plus, certains mécanismes, tels que la montée des dislocations, restent délicats à intégrer à des simulations par dynamique des dislocations, notamment en 3D. A l'Onera, A. Vattré a effectué sa thèse en parallèle à la mienne sur la modélisation par dynamique des dislocations du comportement des superalliages base nickel [Vattré 09a].

Une alternative consiste à utiliser la mécanique des milieux continus et des simulations à l'échelle mésoscopique. Dans ce cadre, la plasticité et l'écroutissage sont décrits par des variables continues. Dans le contexte des superalliages monocristallins base nickel, on peut se référer par exemple à [Nouailhas 97, Forest 00, Busso 00, Preußner 09]. L'hypothèse sous jacente consiste à considérer que les densités de dislocations sont suffisamment importantes pour être décrites par des variables continues. Ce type de simulation est beaucoup moins coûteux en temps calcul mais ne permet pas de reproduire un certain nombre de phénomènes physiques tels que les effets d'échelle de la microstructure. Les théories de mécanique des milieux continus généralisés sont des tentatives de reproduire ces effets [Busso 00, Forest 00].

Les simulations à l'échelle d'une structure font appel à des modèles macroscopiques [Méric 91, Nouailhas 90]. Ce type de modélisation ne rend pas compte du caractère hétérogène de la déformation plastique mais permet de réaliser des calculs de structure. Les hétérogénéités de déformation plastique peuvent être pris en compte par des modèles que je qualifie ici "d'homogénéisés". Ils prennent en compte la microstructure du matériau et réalisent une homogénéisation. Différentes règles d'homogénéisation sont proposées dans la littérature, des modèles auto-cohérents tels que ceux de Forest ou Estevez [Forest 96, Estevez 97], le modèle de Fedelich qui utilise des développement en séries de Fourier [Fedelich 02] ou des modèles analytiques [Svoboda 96, Tinga 08, Tinga 09].

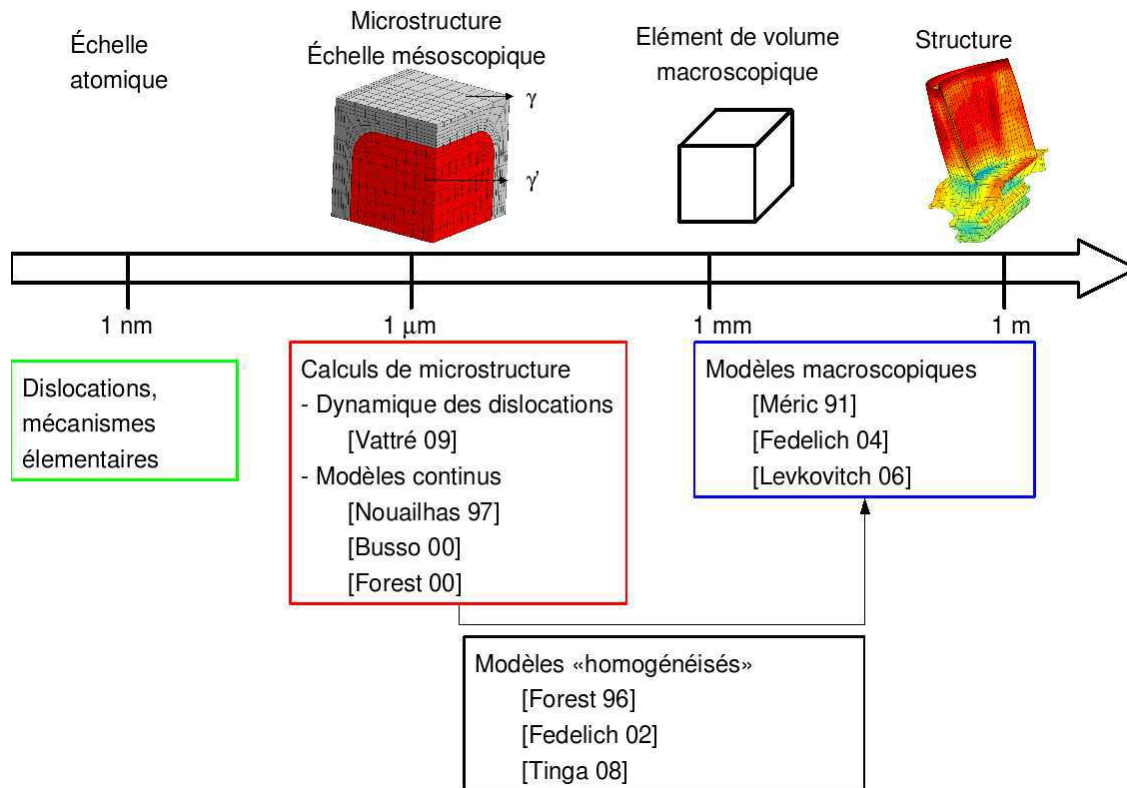


FIG. 1.6. Modélisation du comportement des superalliages monocristallins.

1.4 Conclusion

Ce premier chapitre a présenté brièvement une étude bibliographique des principales caractéristiques du comportement mécanique des superalliages monocristallins et en particulier de l'AM1. Puis nous avons dressé un panorama des différents types de modélisations du comportement envisageables suivant l'échelle d'étude. Comme nous l'avons souligné, chaque modélisation présente ses avantages et ses inconvénients. Dans ce travail, nous resterons dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Les modèles à l'échelle macroscopique dans le contexte des superalliages monocristallins sont étudiés au deuxième chapitre. Les simulations à l'échelle mésoscopique (échelle de la microstructure biphasée) sont abordées aux chapitres 3 et 6 du mémoire.

Chapitre 2

Modélisation macroscopique du comportement de l'AM1

Sommaire

1.1	Introduction	18
1.2	Le superalliage monocristallin AM1	18
1.2.1	Généralités	18
1.2.2	Comportement mécanique	19
1.3	Cadre de la modélisation du comportement des superalliages monocristallins	22
1.4	Conclusion	23

2.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude et à la modélisation du comportement macroscopique de l'AM1. Des lois phénoménologiques, macroscopiques, mais prenant en compte la cristallographie du matériau, ont été développées pour modéliser le comportement des monocristaux de superalliages. A l'Onera, on utilise couramment le modèle développé par Cailletaud à l'Ecole des Mines [Cailletaud 87, Méric 91]. Une étude bibliographique, centrée sur le modèle de Cailletaud, est proposée dans un premier temps. Nous verrons ainsi certaines limites du modèle dans sa formulation actuelle.

L'identification du modèle de Cailletaud pour l'AM1 dans sa version industrialisée a été effectuée par Hanriot [Hanriot 93] sur la base d'une large campagne d'essais cycliques sur une plage de températures allant de 20°C à 1100°C pour différentes orientations cristallographiques et vitesses de sollicitation. Néanmoins, certaines données expérimentales manquent encore. En particulier, le comportement sous des sollicitations très rapides, typiquement $\dot{\epsilon} = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$, ou sous des sollicitations très lentes (de l'ordre de $\dot{\epsilon} = 10^{-9} \text{ s}^{-1}$). C'est pourquoi, dans le cadre du PEA EGISTHE, quelques essais sur l'AM1 non vieilli ont été réalisés par P. Paulmier au laboratoire et sont présentés dans ce chapitre. Les simulations de ces essais à l'aide du modèle actuel sont confrontées aux résultats expérimentaux.

La suite de ce chapitre est divisée en deux parties. La première présente les essais effectués dans le cadre du PEA EGISTHE. Elle montre que le modèle actuel ne permet pas de reproduire de manière satisfaisante les effets de vitesse. La deuxième partie propose des voies d'extension du domaine de validité du modèle.

2.2 Modélisation macroscopique du comportement des superalliages monocristallins

Plusieurs modèles ont été proposés dans la littérature afin de rendre compte de l'anisotropie du comportement des monocristaux. Ils peuvent être classés en deux grandes catégories :

- les modèles macroscopiques basés sur la théorie des invariants ;
- les modèles cristallographiques.

Les modèles macroscopiques traduisent l'anisotropie cubique du matériau par un critère quadratique de type Hill [Nouailhas 90]. Cependant ce type de critères est insuffisant pour traduire le comportement du matériau sous sollicitations complexes telles que des essais de traction-torsion. En effet, un tube orienté suivant l'axe $\langle 001 \rangle$ et soumis à de la torsion pure présente une alternance de zones "molles" de type $\langle 011 \rangle$ et de zones "dures" de type $\langle 100 \rangle$ que le critère de Hill ne différencie pas en terme de contrainte d'écoulement. Des critères plus complexes, toujours basés sur la théorie des invariants, ont donc été développés à l'Onera [Nouailhas 95].

Quant aux modèles cristallographiques, ils sont basés sur une description plus physique de la déformation plastique des monocristaux puisque les relations de comportement sont écrites au niveau des systèmes de glissement. L'utilisation du critère de Schmid permet de modéliser l'anisotropie de comportement plastique. Cependant ces modèles restent de nature macroscopique au sens où ils décrivent le comportement d'un élément de volume homogène sans tenir compte d'hétérogénéités de microstructure, présence de grains ou de précipités par exemple.

Là encore il est possible de distinguer deux approches, suivant la "nature" des variables internes considérées dans les modèles. La première approche, illustrée par le modèle de Cailletaud [Cailletaud 87, Méric 91] fait appel à des variables internes phénoménologiques telles que l'écrouissage isotrope ou cinématique. Cette classe de modèles est finalement une généralisation des modèles macroscopiques [Lemaître 85] que l'on pourrait qualifier de multi-critères [Besson 01]. Les modèles d'écrouissage isotrope et cinématique ont en effet la même forme que dans les modèles purement macroscopiques mais sont déclinés pour chacun des systèmes de glissement. Parallèlement se sont également développés des modèles faisant explicitement appel à des densités de dislocations dans la lignée du modèle de Kocks et Mecking. L'évolution des densités de dislocations est alors généralement décrite comme la somme de termes sources

et de termes puits. Il existe une littérature très abondante sur ce sujet. Concernant les modèles pour superalliages base nickel monocristallins, on peut se référer à [Fedelich 99, Busso 00]. Ainsi, les paramètres entrant dans les modèles basés sur des densités de dislocations sont généralement plus "physiques" au sens où il correspondent à des quantités mesurables expérimentalement. De même on peut espérer une description plus précise du comportement car les lois d'évolution ont une justification physique. Notre sentiment est que malgré tout ces deux types d'approches sont tout à fait similaires car derrière une variable interne d'écrouissage cinématique ou isotrope se cachent finalement des densités de dislocations.

Cette section décrit dans un premier temps le modèle de Cailletaud. Deux autres modèles de comportement sont également décrits dans le but d'illustrer des possibilités d'enrichissement de ce modèle, le modèle de Levkovitch [Levkovitch 06], très proche du modèle de Cailletaud puis celui de Fedelich, appartenant plutôt à la classe de modèles à base de densités de dislocations.

2.2.1 Modèle de Cailletaud

Ce modèle a été proposé par [Cailletaud 87, Méric 91] et est utilisé pour l'AM1. Il a été industrialisé par Snecma pour le calcul de durée de vie des aubes de turbine. Il est basé sur la loi de Schmid qui indique que les cristaux se déforment plastiquement lorsque la cission résolue sur un système de glissement s atteint une valeur critique τ_c^s . La cission résolue s'écrit :

$$\tau^s = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{m}^s \quad (2.1)$$

où $\boldsymbol{m}^s = \frac{1}{2} (\underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s + \underline{\boldsymbol{n}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{l}}^s)$ est le tenseur d'orientation du système s avec $\underline{\boldsymbol{n}}^s$ la normale au plan de glissement et $\underline{\boldsymbol{l}}^s$ la direction de glissement.

La loi d'écoulement est écrite au niveau des systèmes de glissement. Elle fait appel à une formulation de type Norton avec seuil, classique en viscoplasticité macroscopique :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{k} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad (2.2)$$

$\dot{\gamma}^s$ est la vitesse de glissement sur le système s , n et k sont les coefficients de la loi de Norton ; r^s et x^s désignent respectivement les variables d'écrouissage isotrope et d'écrouissage cinématique.

L'écrouissage isotrope est défini par :

$$r^s = r_0 + Q \sum_r H^{rs} (1 - \exp(-b\nu^r)) \text{ avec } \nu^r = |\gamma^r| \quad (2.3)$$

où ν^r est le glissement cumulé sur le système s . r_0 désigne la limite d'élasticité initiale sur la famille de systèmes de glissement considérée. Les coefficients Q et b caractérisent respectivement la valeur asymptotique correspondant au régime stabilisé et la rapidité de la stabilisation. Quant à la matrice d'interaction H^{rs} , elle permet de tenir compte d'interactions entre systèmes de glissement. Classiquement, dans le cas des monocristaux de superalliages, elle est prise égale à l'identité (ce qui correspond à négliger l'écrouissage latent [Hanriot 93]).

L'écrouissage cinématique est non-linéaire :

$$x^s = c\alpha^s \text{ avec } \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\nu^s \alpha^s \quad (2.4)$$

Concernant l'écrouissage cinématique, un terme constant, noté x_0^s , peut être ajouté dans 2.4 permettant de traduire un décalage initial du domaine élastique :

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\nu^s \left(\alpha^s - \frac{x_0^s}{c} \right) \quad (2.5)$$

Ce terme est utilisé dans [Hanriot 93] pour modéliser la dissymétrie de la limite d'écoulement traction/compression à basse température évoquée au paragraphe 1.2.2 ou dans [Bonnand 06] pour modéliser des effets

de Rochet en fatigue. La vitesse de déformation macroscopique $\dot{\tilde{\epsilon}}^p$ est obtenue à partir du calcul des vitesses de glissement sur chacun des systèmes :

$$\dot{\tilde{\epsilon}}^p = \sum_{s=1}^{12} \tilde{m}^s \dot{\gamma}_{oct}^s + \sum_{s=1}^6 \tilde{m}^s \dot{\gamma}_{cub}^s \quad (2.6)$$

Ce modèle a été identifié dans [Hanriot 93] pour l'AM1. Il a été modifié par Boubidi [Boubidi 00] pour le SC16 et Marchal [Marchal 06] pour le PWA 1483 qui y ont ajouté un terme de restauration statique pour une meilleure description de la relaxation et du fluage. La loi d'évolution de la variable α^s s'écrit alors :

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\nu^s \alpha^s - \omega(\alpha^s) \quad (2.7)$$

Le terme $\omega(\alpha^s)$ permet de rendre compte des phénomènes de restauration de la microstructure qui surviennent lors de longs maintiens à haute température, tels que des ré-arrangements et des annihilations des dislocations. La formulation suivante est souvent utilisée [Lemaître 85] :

$$\omega(\alpha^s) = \left(\frac{c|\alpha^s|}{M} \right)^m \text{sign}(\alpha^s) \quad (2.8)$$

2.2.2 Modèle de Levkovitch

Dans [Levkovitch 06] est présenté un modèle de comportement dérivé de celui de Cailletaud et identifié sur le CMSX-4 à 950°C. Les principaux apports de Levkovitch au modèle de Cailletaud sont les suivants :

- l'écrouissage cinématique est modifié de façon à ce que la valeur à saturation dépende de la déformation plastique cumulée, ce qui donne sous forme intégrée pour un chargement symétrique isotherme :

$$x^s = \pm \frac{1}{\Phi(\nu^s)} \frac{c}{d} (1 - \exp(\pm d\gamma^s)) \quad (2.9)$$

$$\Phi(\nu^s) = \Phi_{sat} + (1 - \exp(\omega\nu^s)) \quad (2.10)$$

- la loi d'écoulement est modifiée pour tenir compte de la dépendance de l'adoucissement à la vitesse de déformation :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r_0^s}{k + r'^s} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad (2.11)$$

avec $r'^s = Q(1 - \exp(-b\nu^s))$;

- une interaction entre familles de systèmes de glissement est introduite au niveau de l'écrouissage isotrope car le glissement cubique est en réalité du glissement octaédrique en zig-zag.

La modification de la loi d'évolution pour l'écrouissage cinématique introduite dans [Levkovitch 06] est déjà présente dans la formulation initiale du modèle de Cailletaud [Cailletaud 87, Méric 91]. En effet, dans [Méric 91] une identification complète, avec écrouissage isotrope et modification du terme de rappel d'écrouissage cinématique, est proposée et montre un très bon accord entre résultats expérimentaux et simulations pour l'AM1 à 950°C. Ce type d'enrichissement permet généralement une description plus fine de la courbure de la courbe de traction en introduisant plus de degrés de liberté pour l'identification [Besson 01]. Une autre alternative consiste à superposer plusieurs termes d'écrouissage cinématique, classiquement caractérisés par des coefficients d d'ordre de grandeur très différents.

Le principal apport de Levkovitch réside dans la modélisation de l'adoucissement observé en traction pour certains monocristaux de superalliage. Comme le montre la figure 2.1, les courbes de traction exhibent une "bosse" dont l'amplitude est d'autant plus marquée que la vitesse de sollicitation est importante. Le fait de faire intervenir l'écrouissage isotrope sur le paramètre de résistance de la loi de Norton k dans l'équation (2.11) permet de décrire la dépendance à la vitesse de ce phénomène. Dans le cas de l'AM1, les données expérimentales que nous possédons ne montrent pas un tel adoucissement rapide en traction

suivant $\langle 001 \rangle$ (excepté dans [Espié 96] en traction à 950°C pour une vitesse de 10^{-3}s^{-1}). L'origine physique de cet adoucissement est d'ailleurs mal connue. D'après [Levkovitch 06], il s'agit d'une multiplication de dislocations mobiles sur les systèmes de glissement. Cette explication semble tout à fait plausible du fait de la dépendance de l'adoucissement à la vitesse de sollicitation.

L'introduction d'interactions entre systèmes octaédriques et cubiques permet d'améliorer les résultats en traction suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$. Les résultats en fluage sont également meilleurs que ceux obtenus avec le modèle de Cailletaud original grâce à l'introduction d'un terme de restauration statique de l'écroutissage.

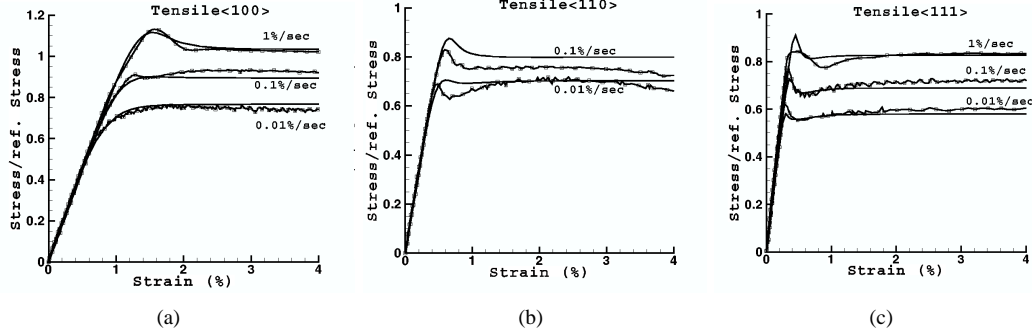


FIG. 2.1. Modèle de Levkovitch, comparaison expérience/simulation en traction monotone à 950°C pour différentes orientations cristallographiques, d'après [Levkovitch 06].

2.2.3 Modèle de Fedelich

Nous décrivons ici le modèle proposé par Fedelich dans [Fedelich 04, Fedelich 08]. D'autres modèles relativement semblables sont proposés dans [Busso 00, Tinga 08]. Ce modèle reprend une modélisation de viscoplasticité cristalline de type Cailletaud. Tout comme ce dernier, il considère les deux familles de systèmes de glissement octaédrique et cubique. Il s'en différencie en introduisant des paramètres plus physiques tels que des densités de dislocations ou la contrainte d'Orowan. La loi d'écoulement n'est pas une loi de Norton, mais une loi thermiquement activée faisant appel à un sinus hyperbolique (équation 2.12). De plus, une formulation différente est utilisée pour les systèmes cubiques comme le montre l'équation 2.13. En effet, dans ce modèle, le glissement cubique est engendré par le glissement octaédrique comme cela a été signalé précédemment. A contrario, le modèle de Cailletaud fait l'hypothèse qu'une loi de Schmid fictive peut être écrite pour ces systèmes cubiques. La pratique montre que l'identification des paramètres matériau pour les systèmes octaédriques sur des éprouvettes orientées suivant $\langle 001 \rangle$ et ceux pour les systèmes cubiques sur des éprouvettes orientées suivant $\langle 111 \rangle$ permet de prévoir correctement le comportement d'un essai suivant $\langle 011 \rangle$, ce qui valide cette hypothèse.

$$\dot{\gamma}_s^o = \rho_g^o \sinh \left[\frac{V_f^o}{kT} \tilde{\tau}_s^o \left\{ 1 - \left(\frac{1}{1 + \left(\frac{\tilde{\tau}_s^o}{\tau_{\text{Orowan}}^o} \right)^n} \right)^{1/n} \right\} \right] \text{sign}(\tau_s^o - x_s^o) \quad (2.12)$$

$$\dot{\gamma}_s^c = \rho_s^c \sinh \left[\frac{V_f^c \langle |\tau_s^c - x_g^c| - r_0^c \rangle}{kT} \right] \text{sign}(\tau_s^c - x_s^c) \quad (2.13)$$

où $\tilde{\tau}_s^o = |\tau_s^o - x_s^o|$, k est la constante de Boltzmann, T la température absolue, ρ_s la densité de dislocations sur le système s , V_f^i le volume d'activation associé à la famille de système i et x_g^i la variable scalaire associée à l'écroutissage cinématique. La variation de densité de dislocations sur les systèmes octaédriques est décrite par l'équation 2.14. Pour les systèmes cubiques, cette densité dépend du glissement octaédrique cumulé ν_i^o (équation 2.15).

$$\rho_s^o = \rho_0^o + (\rho_\infty^o - \rho_0^o) \left(1 - \exp \left(-\frac{\nu_s^o}{b^o} \right) \right) \quad (2.14)$$

$$\rho_s^c = \rho_0^c + (\rho_\infty^c - \rho_0^c) \sum_{i=1}^{12} \epsilon_{si} \left(1 - \exp\left(-\frac{\nu_s^o}{b^o}\right) \right) \quad (2.15)$$

où $\epsilon_{si} = \delta_{si}$ est un terme qui permet de tenir compte uniquement des systèmes qui ont le même vecteur de Burgers.

Les lois d'évolution des variables d'écrouissage cinématique α_s^o et α_s^c ont une forme classique avec un terme de rappel dynamique et un terme de restauration statique utilisant lui aussi une formulation de type sinus hyperbolique :

$$\dot{\alpha}_s^o = \dot{\gamma}_s^o - \dot{\nu}_s^o(x_s^o) - h^o(x_s^o) \quad (2.16)$$

$$g^o(x) = d^o \sinh\left[\frac{V_d^o x}{kT}\right] \quad (2.17)$$

$$h^o(x) = h^o \sinh\left[\frac{V_d^o x}{kT}\right] \quad (2.18)$$

Il est également intéressant de noter qu'à la différence de Cailletaud, Fedelich introduit deux variables d'écrouissage cinématique tensorielles \underline{X}^o et \underline{X}^c , associées aux variables α^o et α^c décrivant les contraintes internes. La composante de l'écrouissage cinématique sur le système s est alors obtenue par projection de ces variables :

$$\alpha^o = \sum_s \alpha_s^o \underline{m}_s \quad (2.19)$$

$$\underline{X}^o = c^o \alpha^o \quad (2.20)$$

$$x_s^o = \underline{n}_s \cdot \underline{X}^o \cdot \underline{l}_s \quad (2.21)$$

Par la description du modèle de Fedelich, nous avons souhaité illustrer la variété des lois d'écrouissage et de viscosité qui ont été développées pour décrire le comportement des monocristaux de superalliages. Pour des modèles plus classiques, [Chaboche 08] passe en revue un certain nombre de modèles.

Un des apports de ce modèle est de corrélérer le glissement cubique au glissement octaédrique. Les travaux de Vattré à l'Onera ou le modèle proposé par Tinga [Tinga 09] vont plus loin en supprimant les systèmes de glissement cubique.

Le modèle de Fedelich permet une bonne description du comportement sous chargement monotone car il parvient à décrire l'adoucissement mentionné au paragraphe précédent. De plus, d'après [Marchal 06] où ce modèle est identifié pour le PWA 1483 à 950°C, il est également meilleur que le modèle de Cailletaud dans la description du fluage. Enfin, le point fort de ce modèle, sur lequel nous reviendrons largement dans le chapitre 7, réside dans sa capacité à prendre en compte l'influence de la mise en radeaux sur la réponse mécanique du matériau. En revanche, les résultats obtenus avec les deux modèles sont semblables pour les chargements cycliques malgré le nombre plus important de paramètres considérés dans celui de Fedelich.

2.3 Campagne expérimentale sur l'AM1 non vieilli

Comme nous l'avons déjà souligné, la base de données expérimentales contient principalement des essais cycliques pour des vitesses de déformation comprises entre 10^{-5} et 10^{-3}s^{-1} . Dans le but d'étendre le domaine de validité du modèle de comportement de l'AM1, 7 essais sur le matériau non-vieilli ont été réalisés. Les points suivants ont été étudiés :

- Le comportement de l'AM1 à 400°C, pour couvrir un domaine de températures pour lequel aucun essai n'a été réalisé à notre connaissance sur ce matériau. Or la bibliographie montre que certains monocristaux de superalliages présentent une baisse de ductilité entre 20°C et 650°C ;
- Le comportement sous chargement cyclique répété. Ce type d'essai est très courant en fatigue et permet l'étude de la relaxation de la contrainte moyenne sous chargement dissymétrique. Nous avons souhaité étudier la réponse du modèle de comportement pour ce type de chargement ;

- Le comportement aux fortes vitesses de sollicitation pour lequel trois essais ont été effectués ;
- Le comportement aux faibles vitesses de sollicitation étudié au travers de relaxations de longue durée et d'essais de restauration.

Le tableau 2.1 donne la matrice d'essais réalisés sur le matériau non vieilli. Le dispositif expérimental est décrit dans l'annexe A. Nous attirons l'attention sur le fait que plusieurs essais comprennent des relaxations de longue durée à 950°C et 1100°C. Nous avons déjà mentionné l'existence d'évolutions microstructurales dues à des sollicitations menées à haute température et connues sous le nom de mise en radeaux. Il est très probable qu'une coalescence des précipités, impliquant une modification du comportement mécanique, intervienne au cours de ces essais, ce qui complexifie leur dépouillement. C'est également le cas pour des essais de fluage réalisés chez Snecma et décrits dans [de Bussac 93] qui seront utilisés dans ce chapitre pour l'extension du domaine de validité du modèle de comportement. Nous négligerons dans ce chapitre le phénomène de mise en radeaux. Son influence sur la réponse mécanique ainsi que sa modélisation est abordée dans la suite du document.

Essai	Eprouvette	Température [°C]	Orientation	Type
01	X6684-A	400	$\langle 001 \rangle$	Ecrouissage cyclique à niveau croissant de déformation $R_\epsilon = -1$
02	X6684-B	950	$\langle 001 \rangle$	Ecrouissage cyclique $R_\epsilon = 0^+$
03	X6684-C	950	$\langle 001 \rangle$	Double vitesse + relaxation 24h
04	X6684-D	1100	$\langle 001 \rangle$	Double vitesse + relaxation 24h
05	X6684-E	950	$\langle 001 \rangle$	Traction à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{s}^{-1}$ + décharge + fluage
09	X6686-D	950	$\langle 001 \rangle$	Traction à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{s}^{-1}$ + restauration
09 suite	X6686-D	950	$\langle 001 \rangle$	Ecrouissage cyclique à fréquence croissante $R_\epsilon = -1$

TAB. 2.1. Matrice d'essais sur le matériau non vieilli.

2.3.1 Essai 01 : écrouissage cyclique à 400°C

Deux niveaux de déformation ont été testés, $\Delta\epsilon = 1\%$ et $\Delta\epsilon = 2\%$. Les boucles contrainte-déformation sont présentées par la figure 2.2. Le premier niveau est élastique tandis que le seconde conduit à la rupture de l'éprouvette après seulement 14 cycles effectués à ce niveau. Concernant la réponse mécanique, la figure 2.2(b) montre un durcissement cyclique. Ce durcissement peut-être expliqué par d'importantes déformations locales observées sur l'éprouvette à l'issue de cet essai ("gonflement" de la partie utile de l'éprouvette et présence de bandes de glissement en surface). Le durcissement cyclique et la localisation de la déformation observés rendent délicat le dépouillement de cet essai. Nous avons donc concentré notre analyse sur la limite d'élasticité à 0.2%, qui d'après la figure 2.2 se situe aux alentours de 1000 MPa. Cette valeur est inférieure à celle simulée avec le modèle actuel (cf. figure 2.3). La littérature sur ce sujet montre deux types de comportements suivant l'alliage considéré :

- pour le PWA 1480 [Shah 84, Milligan 89, Dollar 88] (figure 2.4)(a) et le MC2 [Pessah-Simonetti 92], il a effectivement été observé une évolution de la limite élastique entre 20°C et 650°C.
- En revanche, le CMSX2 [Dollar 88] et le CMSX4 [Sengupta 94] ont une limite élastique constante sur toute la plage de températures 20°C-650°C.

La diminution de la limite élastique entre 20°C et 400°C est attribuée par [Milligan 89] à un certain type de mécanismes de cisaillement des précipités γ' par des superdislocations $a\langle 011 \rangle$ qui laissent derrière elles des boucles de défauts d'empilement. Ce mécanisme induit un durcissement à 20°C par création d'obstacles au mouvement des dislocations dans les précipités. C'est la disparition de ce mécanisme à 400°C qui expliquerait la diminution de la limite élastique. L'existence de ce mécanisme semble liée à la chimie de l'alliage [Dollar 88].

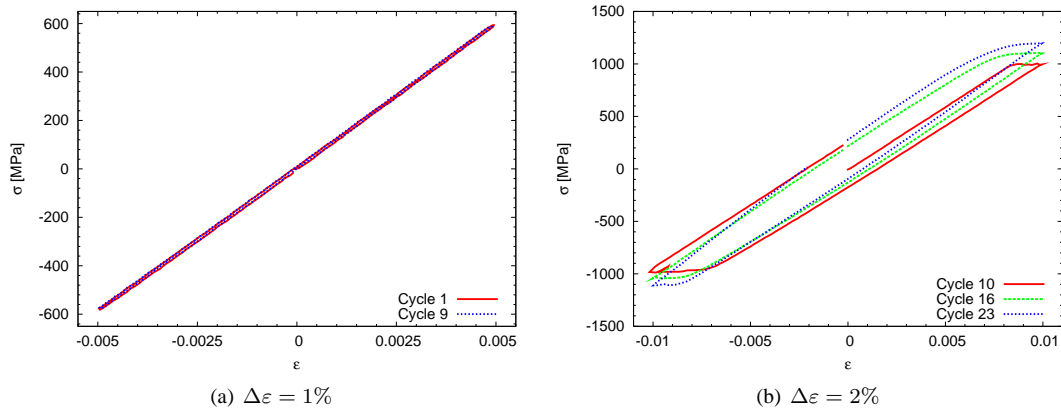


FIG. 2.2. Essai 01, comportement cyclique de l'AM1 à 400°C.

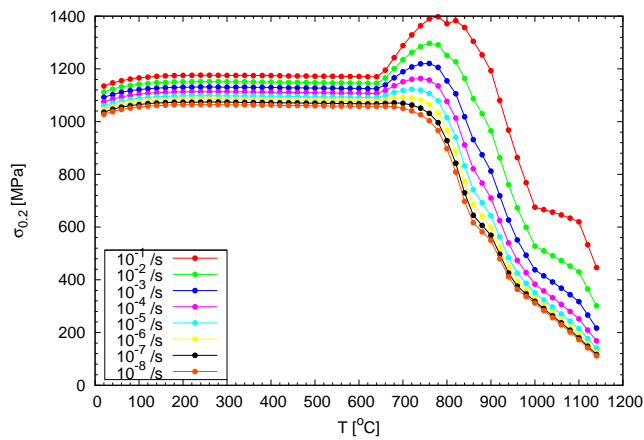


FIG. 2.3. Limite élastique à 0.2% de l'AM1 en fonction de la température obtenue par simulation avec le modèle actuel.

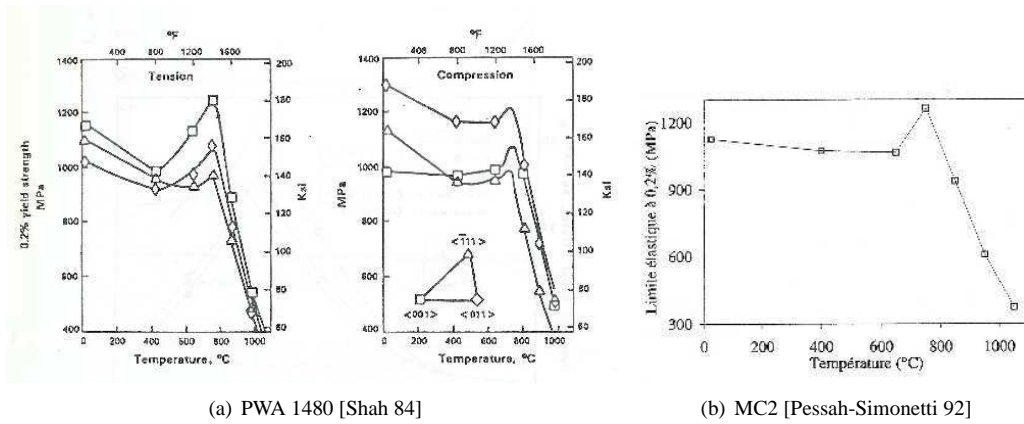


FIG. 2.4. Limite élastique de superalliages base nickel en fonction de la température.

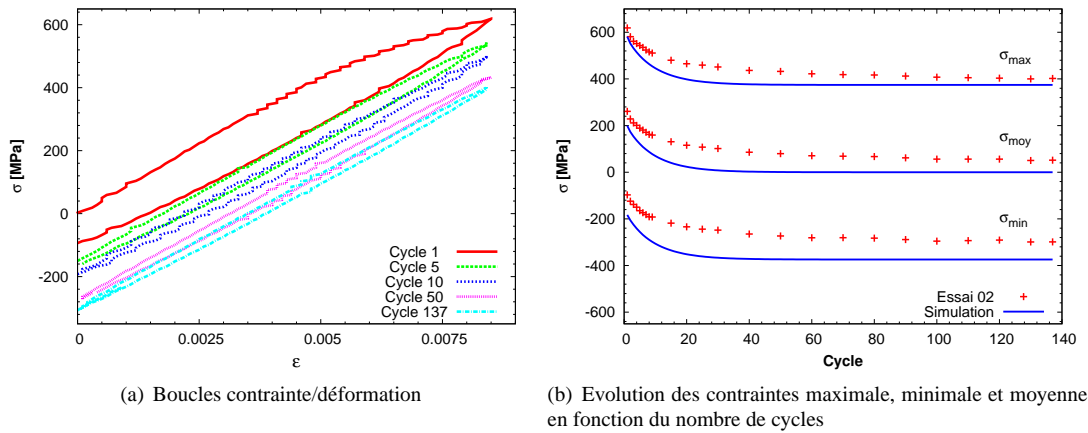


FIG. 2.5. Résultats de l'essai 02 et comparaison avec le modèle macroscopique.

Concernant l'AM1, on peut souligner la proximité de composition chimique avec le MC2. En conclusion, il semblerait que, d'après les données bibliographiques et notre essai, l'AM1 présente une diminution de la limite élastique entre 20°C et 400°C. Les paramètres du modèle cristallin à basse température, et notamment le seuil r_0 , devront donc être modifiés en conséquence.

2.3.2 Essai 02 : essai cyclique en $R_\epsilon = 0+$

Cet essai, réalisé à déformation imposée, a pour objectif l'étude de l'évolution de la contrainte moyenne lors d'un chargement cyclique répété. L'amplitude de déformation imposée est de 0.425% à une vitesse $\dot{\epsilon} = 10^{-3} s^{-1}$. Les résultats sont présentés par la figure 2.5 sur laquelle on peut constater une stabilisation de la contrainte moyenne aux alentours de 50 MPa. La figure 2.5(b) propose de plus une comparaison avec la simulation effectuée avec le modèle de comportement actuel. Le modèle de comportement de l'AM1 possède un écrouissage cinématique non-linéaire, ce qui implique une relaxation à zéro de la contrainte moyenne quelque soit l'amplitude de déformation appliquée.

Une étude approfondie du comportement de l'AM1 en fatigue alternée a été effectuée par Brien [Brien 95, Brien 96, Brien 01a]. Les auteurs s'appuient sur une campagne expérimentale d'étude des microstructures de déformation et de mesure de la contrainte moyenne en fonction de l'amplitude de déformation imposée et du nombre de cycles effectués. La figure 2.6 présente une comparaison de la contrainte moyenne mise en évidence par l'essai 02 et les données issues de [Brien 96]. Elle montre que la contrainte moyenne relevée en fatigue alternée dépend fortement du niveau de déformation imposé, la contrainte moyenne s'annulant pour les fortes sollicitations dans le domaine plastique. Pour le monocristal, on retrouve donc un comportement très semblable à celui bien connu des alliages polycristallins. Notre résultat concorde avec les mesures de Brien, les vitesses de sollicitations étant comparables.

Ces auteurs expliquent l'existence d'une contrainte moyenne en fatigue répétée par la nature composite du matériau. En effet, en considérant une cellule élémentaire périodique γ/γ' , on peut distinguer deux zones. Sur la figure 2.7, la partie 1 est composée du couloir horizontal de matrice et du précipité alors que la partie 2 ne contient que de la matrice. La phase γ' est plus dure que la phase γ ce qui génère des contraintes internes de compatibilité dans la zone 1. Ces contraintes internes se superposent au chargement appliqué. Les couloirs de matrice verticaux se plastifient donc plus rapidement que les couloirs horizontaux. Les observations MET dans [Brien 01a] confirment une anisotropie très marquée en terme de densité de dislocations entre couloirs horizontaux et verticaux pour les chargements les plus faibles ($\Delta\epsilon < 1.25\%$ d'après les auteurs). L'anisotropie disparaît pour les sollicitations plus importantes.

L'essai 02 a donc révélé un défaut majeur du modèle de comportement actuel. Celui-ci ne rend pas

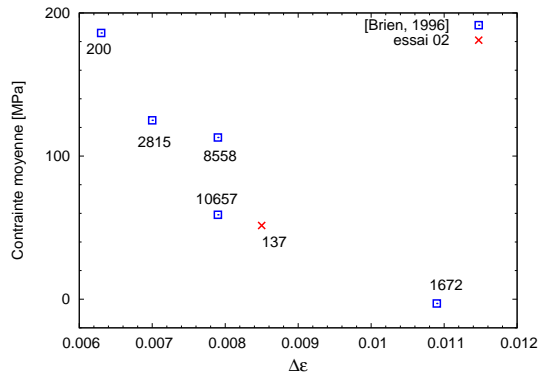


FIG. 2.6. Contrainte moyenne en fatigue répétée, comparaison de l'essai 02 et des données issues de [Brien 96, Brien 01a]. Les chiffres indiquent le nombre de cycles effectués.

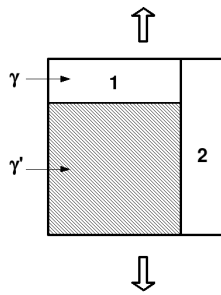


FIG. 2.7. Schéma de la microstructure γ/γ' différenciant les couloirs de matrice horizontaux et verticaux.

compte des l'existence d'une contrainte moyenne non nulle sous chargement cyclique dissymétrique. L'utilisation de termes d'écrouissage à seuil [Chaboche 97] permettrait de décrire la non-relaxation à zéro de la contrainte moyenne. Il nous a paru intéressant de nous pencher plus en détail sur ce problème de contrainte moyenne sous chargement cyclique répété. L'annexe B propose une analyse plus complète et des voies d'amélioration du modèle.

2.3.3 Essais 03 et 04 : essais à double vitesse à 950°C et 1100°C

Ces essais complexes permettent avec une seule éprouvette d'appréhender les effets de vitesse sur une large plage de taux de déformation : de $\dot{\epsilon} = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ à des vitesses très lentes, de l'ordre de 10^{-9} s^{-1} . Bouvard a montré dans ses travaux [Bouvard 06] que le modèle de comportement tel qu'il a été identifié conduit à des contraintes très élevées à haute fréquence (50Hz). Il a donc modifié la loi de viscosité en introduisant une loi à deux pentes, ce qui a pour effet de saturer la contrainte visqueuse à partir d'une certaine vitesse de déformation. C'est dans le but de vérifier cette hypothèse de saturation de la viscosité que nous avons conduit ces essais. Nous avons fait le choix d'étudier l'effet de la vitesse de déformation sur le comportement sur un seul essai en effectuant des changements de vitesse entre 10^{-3} et 10^{-1} s^{-1} pendant la traction. Une relaxation de 24h est ensuite réalisée de façon à quantifier le comportement de l'AM1 pour les très faibles vitesses. Pour finir, un deuxième cycle est effectué, également avec changements de vitesse et relaxation. Il est important de souligner ici les difficultés expérimentales soulevées par cet essai. Une vitesse de déformation de 10^{-1} s^{-1} est difficile à atteindre avec la machine de traction du laboratoire. La vitesse de déformation imposée effectivement varie entre 6.10^{-2} s^{-1} et 10^{-1} s^{-1} . De plus, la mesure de déformation à une telle vitesse peut être entachée d'erreurs.

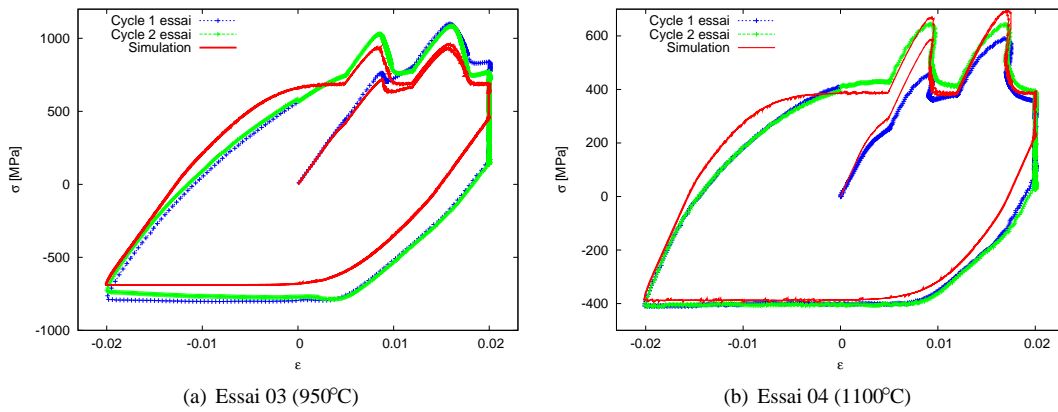


FIG. 2.8. Essais à double vitesse $10^{-3}/10^{-1} \text{ s}^{-1}$, comparaison résultats expérimentaux et simulations menées avec le modèle actuel.

Le figure 2.8 montre les résultats obtenus lors de ces essais ainsi que la comparaison avec les simulations effectuées avec le modèle dans son identification actuelle. Considérant ces résultats, un premier constat s'impose : les courbes simulées diffèrent notablement des courbes expérimentales, même pour les portions de traction effectuées à $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, vitesse se situant pourtant dans la plage d'identification des paramètres du modèle. Mais nous reviendrons sur ce point dans la section suivante. Concernant les fortes vitesses de déformation, aucune saturation notable de la viscosité ne semble être observée à 950°C . En effet, la différence entre la contrainte atteinte sur une portion à $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et celle atteinte sur une portion à $\dot{\varepsilon} = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ est la même pour la courbe expérimentale et la courbe simulée. En revanche, une légère saturation est visible à 1100°C . Concernant les relaxations, elles sont très mal décrites par la loi actuelle qui surestime fortement la contrainte atteinte asymptotiquement après une longue durée de relaxation.

2.3.4 Essai 09 suite : essai à fréquence croissante

Les essais à double vitesse de déformation (essais 03 et 04) n'ayant pas montré de saturation notable de la viscosité entre $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et 10^{-1} s^{-1} à 950°C , nous avons décidé d'effectuer un essai plus complet pour des fréquences comprises entre 0.016 Hz et 50 Hz. Les fréquences considérées nous obligent à travailler en déplacement imposé. La déformation est ensuite déduite du déplacement par calcul. Ce type d'essai est courant en fatigue, mais ici la difficulté réside dans l'acquisition de la courbe force-déplacement à haute fréquence. En effet, durant l'essai nous avons constaté un déphasage entre la force et le déplacement pour les hautes fréquences de sollicitation probablement dû à des problèmes d'asservissement (voir annexe C). Il nous semble délicat de faire la part entre le déphasage dû à des contraintes techniques de celui engendré par la viscoplasticité. C'est pourquoi nous focalisons notre analyse sur les valeurs extrémales de contrainte atteintes durant le cycle stabilisé. De plus, pour les fréquences de 25 Hz et de 50 Hz le nombre de points d'acquisition est relativement faible. La contrainte maximale atteinte durant le cycle est donc entachée d'une incertitude.

Le déplacement à imposer a également posé problème. L'idéal aurait été de conserver la même consigne tout en augmentant la fréquence. On aurait ainsi observé une diminution de la déformation plastique ce qui aurait facilité le dépouillement des essais. Mais on comprend bien que sur une plage de fréquences aussi étendue cela n'a pas pu être fait. Le déplacement à imposer a donc été réadapté à chaque fréquence testée afin de conserver une amplitude de déformation sensiblement constante. Le dépouillement de ces essais est précisé en annexe C. Le tableau 2.2 résume les résultats obtenus.

Ils sont également reportés dans le diagramme $(\Delta\varepsilon^p; \Delta\sigma/2)$ (voir figure 2.9(a)). On constate que l'essai 09a est cohérent avec les valeurs issues de [de Bussac 92] aux vitesses de déformation de 9.10^{-4} et 10^{-3} s^{-1} et que l'essai 09b est cohérent avec celle à 9.10^{-3} s^{-1} . Les essais 09c, 09d et 09e nous permettent

Essai	Fréquence Hz	Signal	$\Delta\varepsilon/2$	$\dot{\varepsilon}$ s^{-1}	$\Delta\sigma/2$ MPa	$\Delta\varepsilon^p/2$
a	0.016	Triangle	1.5%	$9.6 \cdot 10^{-4}$	817	0.0120
b	0.16	Triangle	1.25%	$8.0 \cdot 10^{-3}$	886	0.0058
c	1.6	Triangle	1.10%	$6.4 \cdot 10^{-2}$	850	0.0033
d	5	Triangle	1.05%	$2.1 \cdot 10^{-1}$	836	0.0026
e	5	Triangle	1.15%	$2.3 \cdot 10^{-1}$	894	0.0031
f	25	Sinus	1.2%	1.2	912	0.0035
g	25	Sinus	1.25%	1.3	934	0.0042
h	50	Sinus	1.20%	2.4	890	

TAB. 2.2. Résultats essai 09 suite.

de situer les courbes d'érouissage cyclique aux vitesses de $6 \cdot 10^{-2}$ et $2 \cdot 10^{-1} s^{-1}$ respectivement. Ils sont cohérents avec les points précédents. Les essais 09f, 09g et 09h (réalisés à 25 et 50 Hz) posent problème car il sont en dessous des points d et e (vitesse de déformation de $2 \cdot 10^{-1} s^{-1}$). La déformation plastique calculée et l'amplitude de contrainte sont probablement entachées d'erreur.

Afin de situer nos essais par rapport aux travaux de [Bouvard 06], nous nous plaçons à $\Delta\varepsilon^p = 0.0031$. Nous interpolons les valeurs de $\Delta\sigma/2$ et déterminons l'amplitude d'érouissage pour tracer un diagramme ($\dot{\varepsilon}^p ; \sigma_v = \Delta\sigma/2 - \Delta X/2 - R_0$) (cf. figure 2.9(b)). Les valeurs de l'amplitude d'érouissage cinématique et de seuil initial sont déterminées à l'aide du modèle de comportement. En effet, pour un chargement cyclique symétrique, on a :

$$\Delta X = 2 \frac{C}{D} \tanh \left(D \frac{\Delta\varepsilon^p}{2} \right) \quad (2.22)$$

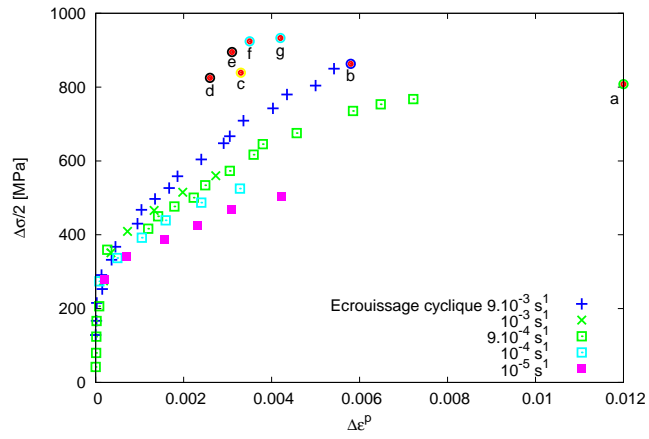
ce qui donne $\Delta X = 393$ MPa. La figure compare le modèle de [Bouvard 06] et nos points expérimentaux. Bouvard a utilisé un modèle à deux pentes avec la deuxième pente égale à $8n$. Comme le montre la figure 2.9(b), le régime des vitesses rapides est actif pour des vitesses de l'ordre de $2 \cdot 10^{-3} s^{-1}$, ce qui semble trop faible au vu de nos essais. Bien qu'il nous soit impossible de tirer de résultats quantitatifs pour les fréquences supérieures à 5 Hz, nos points semblent révéler un changement de régime vers $2 \cdot 10^{-2} s^{-1}$.

2.3.5 Essais 05 et 09 : restauration de l'érouissage

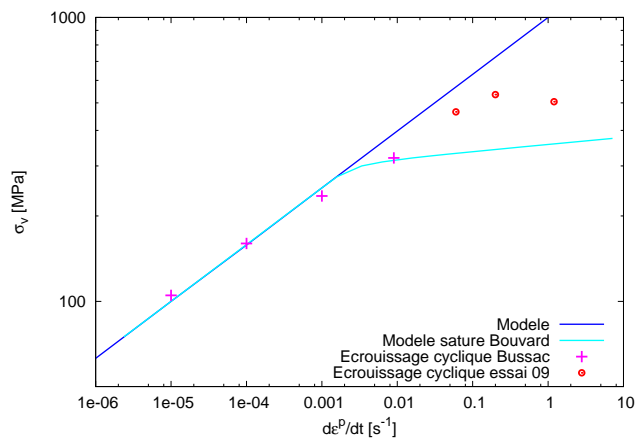
L'essai 05 est un essai de restauration. Après une charge jusqu'à 1.5% de déformation à une vitesse de $10^{-5} s^{-1}$, on se replace au centre du domaine élastique (1.25% de déformation) et, après être passé en force imposée à ce même niveau, on réalise un temps de maintien de 19h30mn. Pendant le maintien, si le phénomène de restauration statique opère, on s'attend à restaurer la microstructure (ré-arrangement et annihilation des dislocations), si bien que lors de la décharge on ré-écrouit le matériau. On doit donc obtenir une courbe de recharge proche de la courbe de charge initiale. Enfin on relance en déformation imposée à $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} s^{-1}$, un cycle complet d'érouissage (+ ou - 2.2%) que l'on termine par une relaxation à une déformation de 2.2% pendant 21h51mn. Les résultats obtenus lors de cet essai montrent un comportement très différent de celui attendu. Lors du maintien à contrainte constante, le matériau exhibe du fluage et la déformation augmente comme on peut le voir sur la figure 2.10, alors que l'on pensait être au centre du domaine d'élasticité.

L'essai 09 est le pendant de l'essai 05. Nous avons enregistré la courbe de recharge après une relaxation de 24h afin de la comparer à l'essai précédent. Cette recharge sera également comparée à une courbe de décharge/recharge à $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} s^{-1}$ réalisée sur la même éprouvette, juste avant la relaxation afin d'estimer la vitesse des phénomènes de restauration statique dans l'AM1. Le protocole expérimental est donc le suivant :

- érouissage à $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} s^{-1}$ jusqu'à une déformation de 1.5% ;
- décharge jusqu'à $\varepsilon = 0.75\%$, toujours à $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} s^{-1}$;
- recharge jusqu'à $\varepsilon = 1.75\%$;
- relaxation pendant 24 h à $\varepsilon = 1.75\%$;

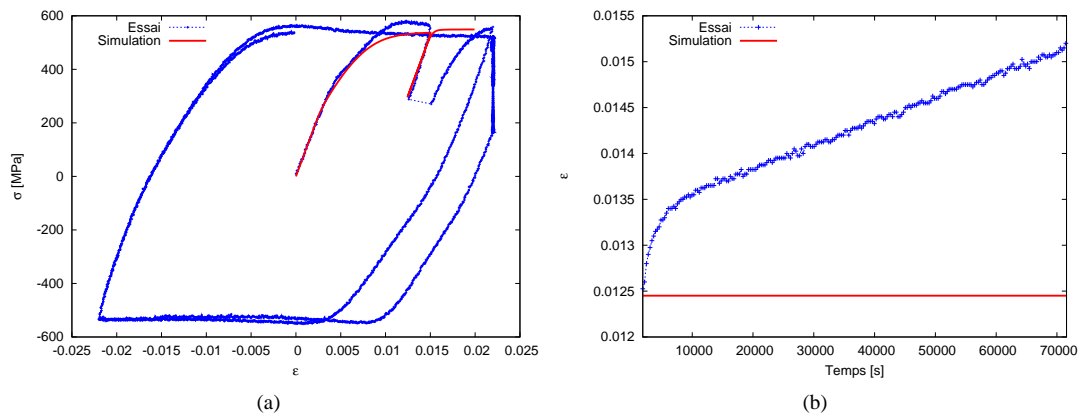


(a)



(b)

FIG. 2.9. Essai 09 suite. (a) Comparaison aux points d'érouissage cyclique issus de [de Bussac 92] (b) Comparaison avec le modèle actuel et le modèle proposé par [Bouvard 06] dans le diagramme contrainte visqueuse en fonction de la vitesse de déformation plastique.



(a)

(b)

FIG. 2.10. Essai 05 (a) Contrainte en fonction de la déformation (b) Déformation en fonction du temps pendant le maintien à contrainte constante.

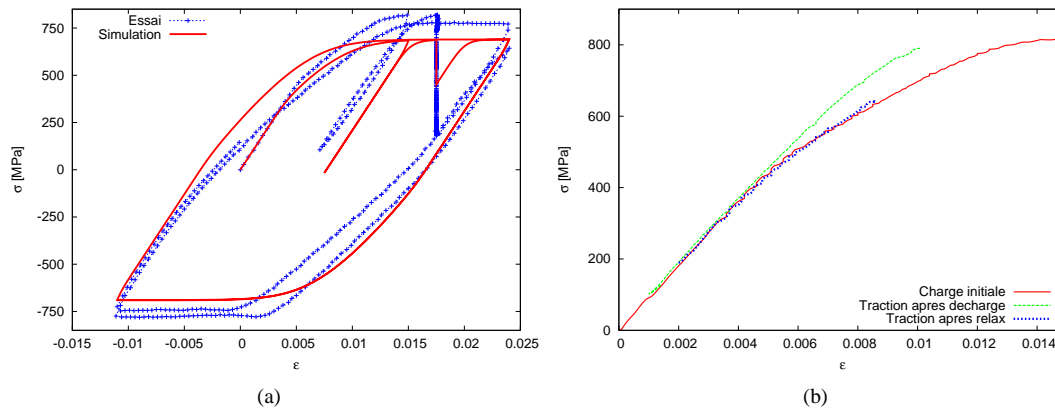


FIG. 2.11. Essai 09 (a) Comparaison essai/simulation (b) Superposition des trois charges (initiale, après décharge et après relaxation).

- recharge jusqu'à $\epsilon = 2.4\%$;
- cyclage.

La courbe expérimentale présentée par la figure 2.11 nous permet de tirer plusieurs conclusions :

- on observe un léger hystérésis lors de la décharge, ce qui nous fait penser que la limite élastique réelle est peut-être plus basse que celle indiquée par le modèle ;
- le matériau relaxe fortement, comme l'essai 03 l'a déjà montré ;
- la relaxation a entraîné une restauration de l'écrouissage puisque la courbe de recharge après relaxation est relativement proche de la courbe d'écrouissage initiale (cf. figure 2.11).

Conclusion de la partie expérimentale

Au vu des résultats expérimentaux décrits dans cette partie, la loi de comportement dans sa forme actuelle a comme principal défaut la mauvaise description des faibles vitesses de sollicitation. C'est pourquoi nous nous proposons par la suite d'étudier différentes formulations permettant un meilleur accord avec les données expérimentales sur ce point. Concernant les hautes vitesses de déformation, il semble également que le modèle ne donne pas entière satisfaction et qu'il faille envisager d'utiliser un modèle permettant de décrire le changement de pente observé.

Comme nous l'avons vu, l'essai 01 montre une diminution de la limite élastique entre 20°C et 400°C, ce qui va impliquer une ré-identification des paramètres à ces températures. Enfin, le problème de la relaxation de la contrainte moyenne soulevé par l'essai 02 sera laissé de côté car nous nous focalisons sur les phénomènes dépendant du temps qui sont essentiels à traiter pour rendre compte de l'évolution de la microstructure du matériau et de son influence sur le comportement.

2.4 Extension du domaine de validité du modèle de comportement de l'AM1 à 950°C

Les essais complémentaires réalisés dans le cadre du PEA EGISTHE ont montré que le comportement de l'AM1 est mal reproduit par le modèle actuel pour les faibles vitesses de sollicitation ainsi que pour les vitesses élevées. Des problèmes ont également été mis en évidence en traction à 950°C. C'est pourquoi, avant de proposer des améliorations de ce modèle, nous avons recoupé nos essais avec ceux de la base d'identification du modèle afin d'évaluer la dispersion matériau/laboratoire. Cette analyse est présentée en

annexe D. Nous avons également évalué finement la réponse du modèle dans la plage de vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s^{-1} par rapport aux résultats expérimentaux issus de [de Bussac 92] et aux nouvelles données apportées par nos essais. Comme le montre l'annexe D, les recouvrements entre données expérimentales ont été assez délicats à mener. Nous pouvons cependant conclure que nos essais sont globalement en accord avec ceux des années 90 sauf pour la température de 950°C pour laquelle nous avons relevé une différence relativement importante entre les essais monotones effectués dans le cadre de ce travail et les essais cycliques décrits dans [de Bussac 92] pour l'orientation $\langle 001 \rangle$ aux faibles déformations plastiques.

Les bases du modèle ayant été revues, nous pouvons passer à son amélioration. Notons que notre but ici est de modifier le moins possible la forme actuelle du modèle afin de rester dans un contexte industriel. Nous avons envisagé plusieurs solutions pour décrire correctement le comportement de l'AM1 sur toute la plage de vitesses 10^{-9} - 10^{-1} s^{-1} :

- Garder une loi de viscosité de type Norton, à laquelle on ajoute un terme de restauration statique pour la description des faibles vitesses de déformation et utiliser une deuxième pente de la même manière que [Bouvard 06] pour les vitesses élevées ;
- Opter pour une loi de viscosité de type sinus hyperbolique. Cette formulation a l'avantage de présenter une tendance à la saturation pour les fortes vitesses. En revanche, le terme de restauration est toujours nécessaire pour les faibles vitesses et les phénomènes de restauration de l'écrouissage observés durant l'essai 09 ;
- Une troisième solution consiste à garder une loi de Norton pour les vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s^{-1} et ajouter un deuxième potentiel "lent" pour la description de la relaxation et du fluage.

2.4.1 Recalage du modèle sur la plage de vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s^{-1}

Comme expliqué plus haut, nous commençons par ré-identifier la loi de viscosité du modèle actuel pour un meilleur accord avec les données monotones des essais 05 et 09. Nous avons conservé l'exposant de la loi de Norton et modifié le coefficient k . Les paramètres du modèle ainsi identifiés figurent dans le tableau 2.3.

r_0	c	d	k	n
MPa	MPa		MPa.s ^{1/n}	
69	215600	1960	780	5

TAB. 2.3. Coefficients octaédriques du modèle de comportement de type Norton recalé sur la plage de vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s^{-1} (950°C).

La base de données expérimentales dont nous disposons est maintenant relativement vaste. C'est pourquoi un ensemble conséquent de courbes sont à tracer pour estimer l'accord simulations/expériences et quantifier l'apport des améliorations successives que nous effectuons sur le modèle de comportement. Tout au long de cette section, les comparaisons avec les courbes expérimentales en traction monotone et en écrouissage cyclique sont présentées pour chaque modélisation proposée. Ici, le modèle reproduit très bien les essais monotones comme on peut le voir sur la figure 2.12(a). En revanche, pour les essais cycliques aux faibles déformations plastiques le modèle surestime la valeur de la contrainte (cf. figure 2.12(b)). Un important effet de vitesse est également présent car cette surestimation est d'autant plus prononcée que la vitesse de déformation est élevée. Asymptotiquement, la courbe cyclique semble rejoindre la prévision du modèle comme le montrent les points à $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} s^{-1}$. Un modèle à 5 paramètres est insuffisant pour décrire les deux régimes d'écrouissage observés sur l'AM1. Nous avons pris le parti d'une bonne description des valeurs de contraintes asymptotiques lorsque l'écrouissage cinématique est saturé, ce qui correspond également à un bon accord avec les essais monotones. Ce choix est justifié par la nécessité de bien représenter les essais complémentaires réalisés à des déformations plastiques relativement importantes.

Il nous semble également important de rassembler nos données en traçant les points dans le diagramme $(\sigma ; \dot{\varepsilon}^P)$ ou $(\sigma_v ; \dot{\varepsilon}^P)$ à ε^P donné. σ_v représente la contrainte visqueuse et s'exprime comme la valeur de la

contrainte σ moins celles des écrouissages isotropes et cinématiques. C'est une donnée liée à un modèle. Nous appelons régime des fortes vitesses la plage de vitesses comprises entre 10^{-2} et 10 s^{-1} ; le régime intermédiaire caractérise les vitesses comprises entre 10^{-5} et 10^{-2} s^{-1} . Les vitesses inférieures à 10^{-5} s^{-1} sont dans le régime des faibles vitesses. La figure 2.12(c) regroupe les données en traction monotone, en fluage et durant la relaxation effectuée pendant l'essai 09 (i.e. les régimes de vitesses intermédiaires et faibles) pour $\varepsilon^p = 0.75\%$. Le diagramme en contrainte visqueuse n'a pas pu être utilisé car le modèle prévoit des contraintes internes trop importantes et de ce fait écarte beaucoup de points. Les fortes vitesses n'ont pas pu être placées sur ce graphe car nous ne possédons pas de points à une telle amplitude de déformation plastique dans ce régime. Un deuxième diagramme, la figure 2.12(d), les présente avec les vitesses intermédiaires pour $\varepsilon^p = 0.15\%$ ($\Delta\varepsilon^p/2 = 0.15\%$ pour les données cycliques). Les simulations des essais 09 et 05 sont quant à elles présentées sur les figures 2.12(e), (f) et (g). La légère modification apportée à l'identification du modèle ne change pas sa réponse pour les fortes et les faibles vitesses.

Un terme de restauration statique tel que ce cela a été décrit au paragraphe 2.2 a été ajouté pour améliorer la description du régime des faibles vitesses comme le montre la figure 2.13. L'amélioration est bien réelle mais insuffisante à nos yeux. Les contraintes internes sont encore trop importantes. Un voie d'amélioration consiste à diminuer la valeur du seuil de plasticité r_0 et à augmenter la contrainte visqueuse en proportion. Cette approche est détaillée dans le paragraphe suivant.

2.4.2 Proposition 1 : Modèle de type Norton

Augmentation de la contrainte visqueuse Nous allons envisager ici le cas limite d'un seuil de plasticité initial nul. Il permettra d'apprécier toutes les potentialités d'une loi de viscosité de Norton. Les coefficients du modèle ainsi identifiés sont disponibles au tableau 2.4. Les paramètres d'écrouissage cinématique restent inchangés. Les figures 2.14(a) et (b) montrent que notre identification ne modifie pas la réponse dans le régime des vitesses intermédiaires. Les figures 2.14(c), (d), (e), (f) et (g) confirment que l'augmentation de la contrainte visqueuse améliore grandement la réponse du modèle pour les faibles vitesses de sollicitation, notamment en fluage.

r_0	c	d	K	n
MPa	MPa		MPa.s ^{1/n}	
0	215600	1960	687	7.46

TAB. 2.4. Coefficients octaédriques du modèle de comportement de type Norton sans seuil.

Ajout d'un terme de restauration statique Un terme de restauration statique reste tout de même nécessaire pour la description de la restauration de l'écrouissage se produisant au cours de l'essai 09. Nous avons identifié les paramètres suivants pour la restauration : $M = 600$ MPa.s^{1/m}, $m = 8$. Le terme de restauration introduit affecte légèrement la réponse en traction à 10^{-5} s^{-1} (cf. figure 2.15(a)), traduisant le compromis qui a dû être fait pour l'identification sur toute la plage de vitesses. La réponse en fluage et en relaxation est quant à elle grandement améliorée comme le montrent les figures 2.15(c), (f) et (g). La valeur de contrainte asymptotique obtenue en relaxation est correctement simulée. Cependant, le modèle ne reproduit pas la courbe en "s" présentée par la contrainte en fonction de la vitesse de déformation plastique. De ce fait la courbe de relaxation n'est pas tout à fait bien décrite dans son ensemble. De plus, on observe une augmentation de la déformation lors du maintien à contrainte constante. La figure 2.15(e) montre que ce modèle prévoit un comportement de type retard au fluage au lieu d'une courbe de fluage. Malgré les remarques soulignées précédemment, nous considérons que ce modèle remplit les objectifs fixés pour les faibles vitesses de déformation. Les fortes vitesses, toujours mal reproduites, sont traitées au paragraphe suivant.

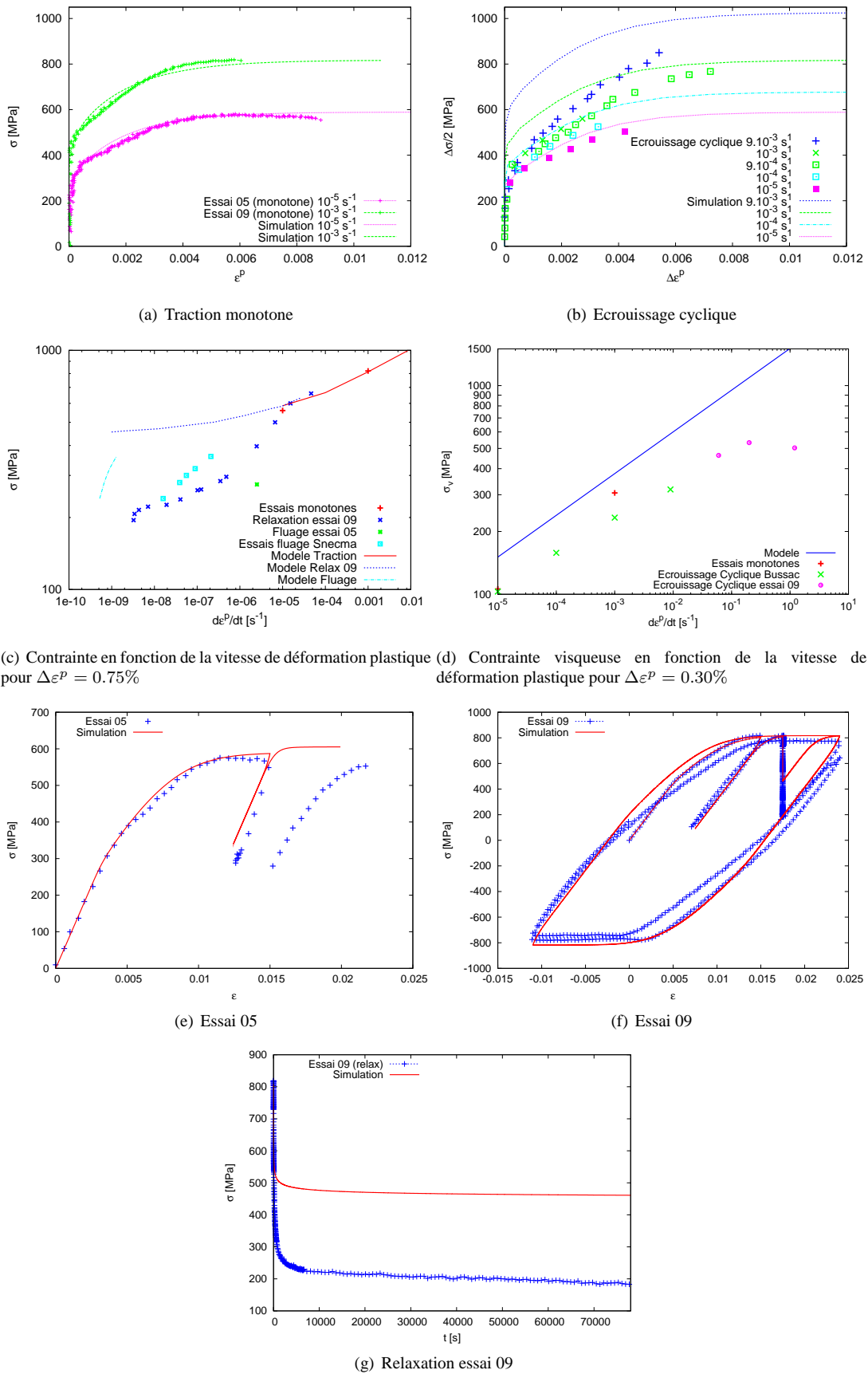


FIG. 2.12. Résultats du modèle de comportement actuel recalé sur la plage de vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s $^{-1}$. Les coefficients matériau correspondants sont donnés par le tableau 2.3.

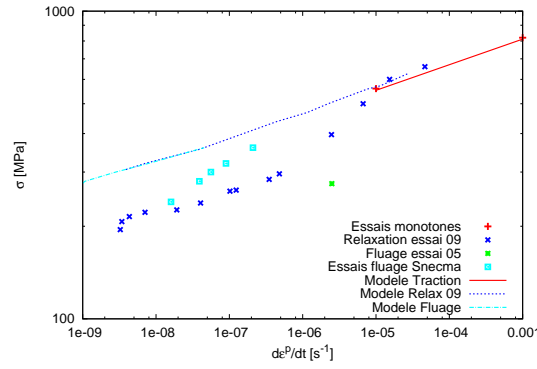


FIG. 2.13. Ajout d'un terme de restauration statique au modèle de comportement actuel recalé sur la plage de vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s^{-1} .

Ajout d'une deuxième pente pour les fortes vitesses Nous utilisons une loi de viscosité à deux pentes, tout comme dans [Bouvard 06], pour améliorer la réponse du modèle pour les fortes vitesses. La vitesse de glissement pour le système s s'écrit alors :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{k_1} \right\rangle^{n_1} \text{sign}(\tau^s - x^s) + \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{k_2} \right\rangle^{n_2} \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad (2.23)$$

Au paragraphe 2.3.4 la saturation proposée par [Bouvard 06] a été comparée aux nouvelles données expérimentales disponibles. Elles montrent une tendance à la saturation à partir d'une vitesse de $\dot{\epsilon}^* = 10^{-2} s^{-1}$. Nous avons donc choisi de rendre effectif le régime des fortes vitesses à partir de cette valeur. L'exposant n_2 est choisi en proportion de $n_1(T)$ avec $n_2 = \xi n_1(T)$, le paramètre ξ étant indépendant de la température. En l'absence de données quantitatives, et en s'inspirant d'une loi de viscosité de type sinus hyperbolique (voir la suite), nous avons jugé qu'un coefficient de proportionnalité $\xi = 3$ est une valeur raisonnable. On a :

$$k_2(T) = k_1(T) \epsilon^{*\frac{\xi-1}{\xi n_1(T)}} \quad (2.24)$$

L'utilisation de la formule 2.24 permet également de saturer le modèle actuel (c'est-à-dire sans modification de la viscosité) à $1100^\circ C$ et de valider les valeurs prises pour ξ et ϵ^* par comparaison avec les données issues de l'essai 04 (cf. figure 2.17).

r_0	c	d	k_1	n_1	k_2	n_2	M	m
MPa	MPa		$MPa \cdot s^{1/n_1}$		$MPa \cdot s^{1/n_2}$		$MPa \cdot s^{1/m}$	
0	215600	1960	687	7.46	455	22.38	600	8

TAB. 2.5. Coefficients octaédriques du modèle n°1 (modèle de type Norton avec saturation de la viscosité et terme de restauration statique).

2.4.3 Proposition 2 : Modèle de type Norton avec deux potentiels

Nous avons étudié une deuxième possibilité afin de mieux décrire les faibles vitesses de déformation avec un modèle de type Norton. Il s'agit d'ajouter un deuxième potentiel dit "lent", comme cela est proposé dans [de Bussac 93]. Le premier potentiel reste inchangé par rapport au modèle décrit au paragraphe 2.4.1. Quant au second, il est choisi sans écrouissage. La vitesse de glissement s'écrit dans ce cas :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{k_1} \right\rangle^{n_1} \text{sign}(\tau^s - x^s) + \left\langle \frac{\tau^s}{k_2} \right\rangle^{n_2} \text{sign}(\tau^s) \quad (2.25)$$

Les paramètres matériaux associés au deuxième potentiel sont : $k_2 = 2800 MPa \cdot s^{1/n_2}$ et $n_2 = 5.68$.

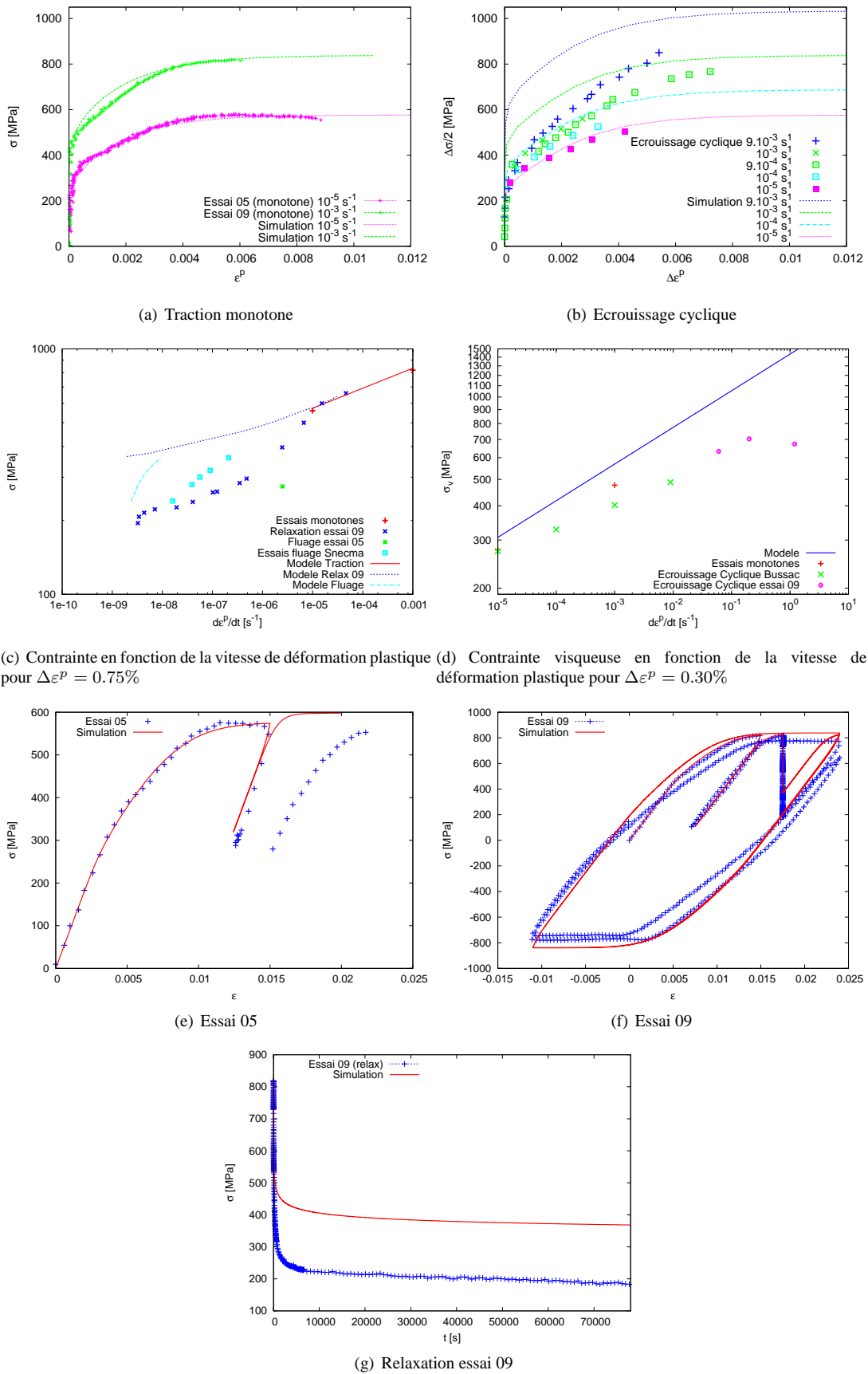


FIG. 2.14. Modèle de type Norton, augmentation de la contrainte visqueuse. Les coefficients matériau correspondants sont donnés par le tableau 2.4.

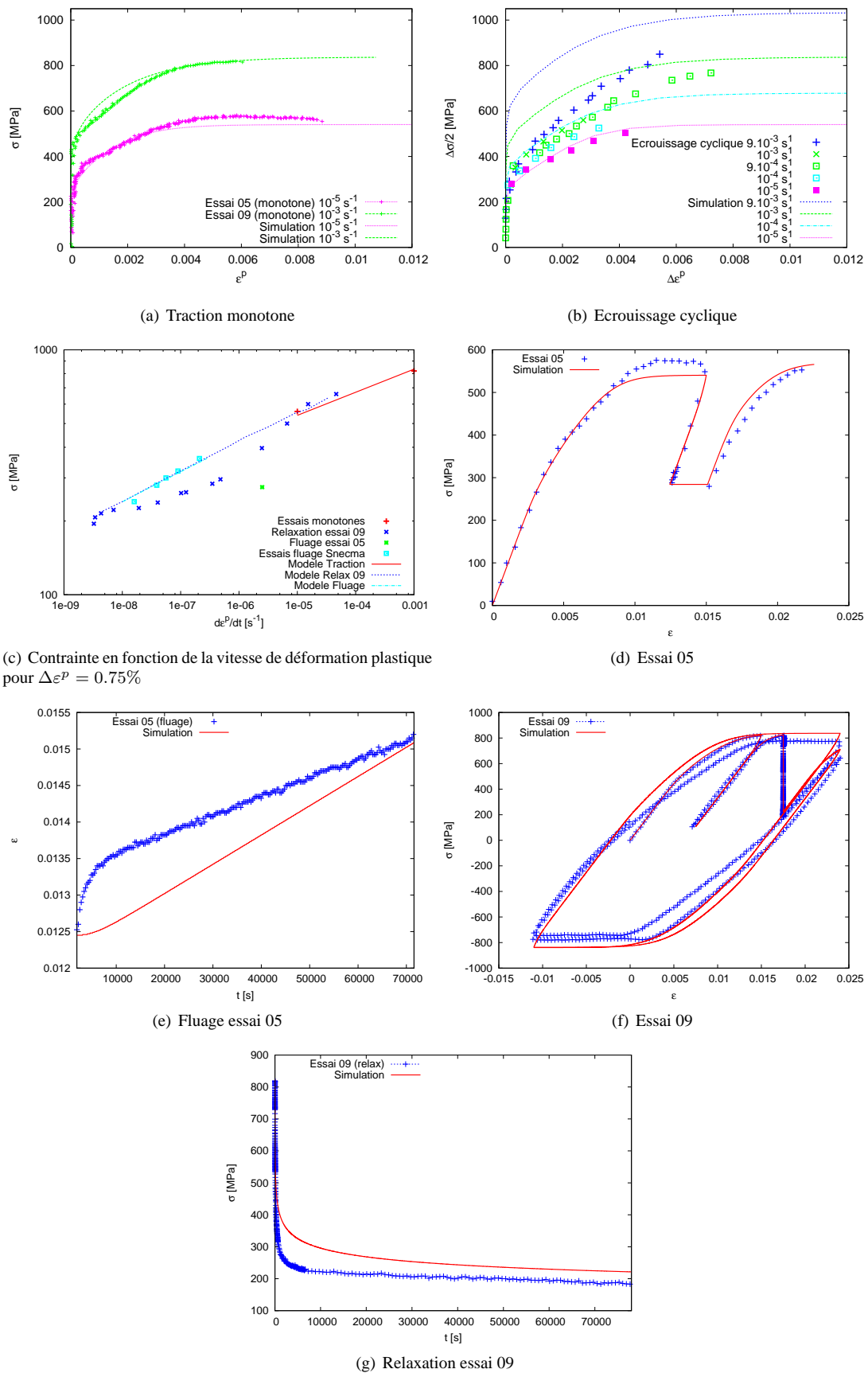
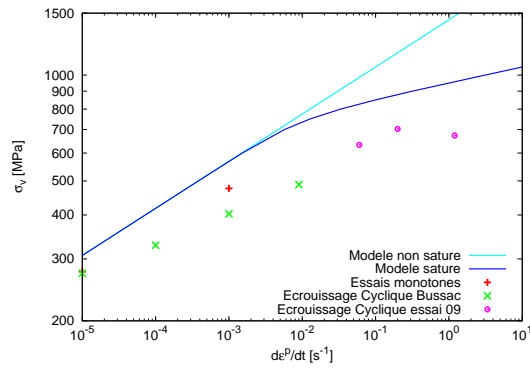
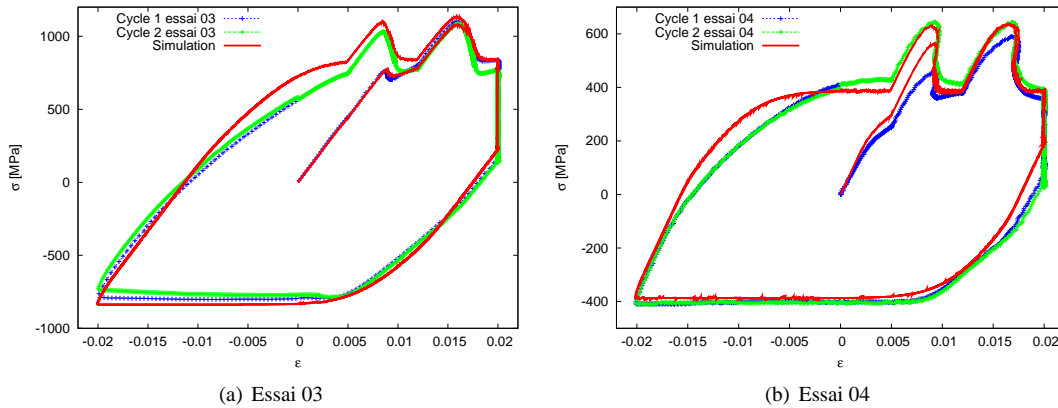


FIG. 2.15. Modèle de type Norton, ajout d'un terme de restauration statique.



(a)

FIG. 2.16. Modèle n°1 de type Norton, saturation de la viscosité pour les vitesses de sollicitation élevées par introduction d'un double Norton.



(a) Essai 03

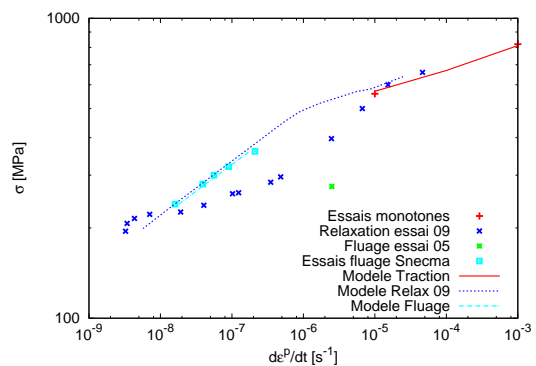
(b) Essai 04

FIG. 2.17. Utilisation d'un modèle à deux pentes pour décrire les fortes vitesses de sollicitation, validation sur les essais 03 et 04.

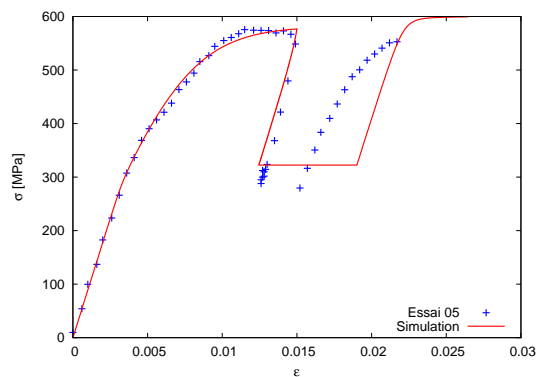
Les simulations menées avec ce modèle sont présentées par la figure 2.18. Les résultats en termes de relaxation et fluage sont plutôt bons. Seul bémol, la courbe de relaxation dans le diagramme $(\sigma ; \dot{\epsilon}^P)$ présente un "coude" à la transition entre les deux régimes de vitesse du modèle, ce qui se traduit par des vitesses de relaxation trop faibles pour des temps aux alentours de 10000 s puis trop rapides par la suite. Un moyen de gommer cette transition un peu brutale est d'ajouter un terme de restauration statique. Cette stratégie a été appliquée ici. Les paramètres matériau de ce deuxième modèle sont résumés par le tableau 2.6. Là aussi un compromis a dû être trouvé pour les vitesses de l'ordre de 10^{-5}s^{-1} , à la limite entre les deux régimes de vitesse. L'identification proposée n'est pas tout à fait assez dure pour l'essai de traction monotone à 10^{-5}s^{-1} mais permet d'améliorer la réponse en relaxation et en maintien à contrainte constante (essai 05) comme le montre la figure 2.19. Enfin, pour la description des essais à forte vitesse de déformation, il serait nécessaire d'ajouter une troisième viscosité comme cela a été fait pour le premier modèle proposé.

r_0	c	d	k_1	n_1	k_2	n_2	M	m
MPa	MPa		$\text{MPa.s}^{1/n_1}$		$\text{MPa.s}^{1/n_2}$		$\text{MPa.s}^{1/m}$	
69	215600	1960	687	7.46	2800	5.68	900	6

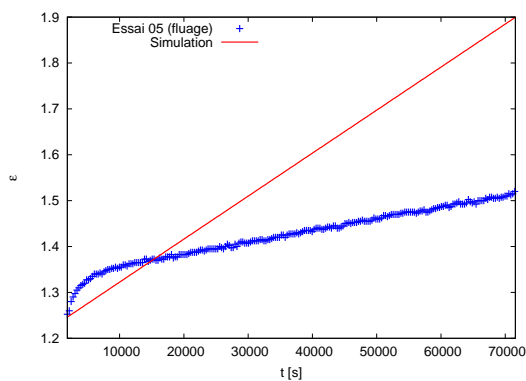
TAB. 2.6. Coefficients octaédriques du modèle n°2 de type Norton à deux potentiels.



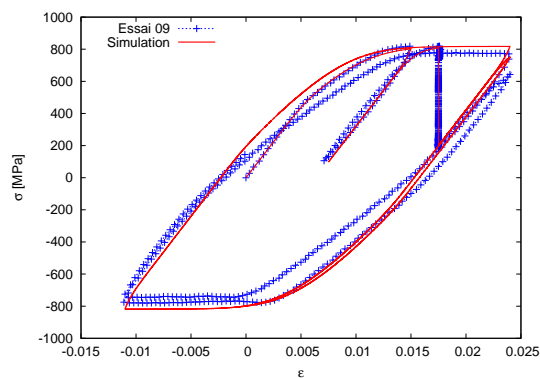
(a) Contrainte en fonction de la vitesse de déformation plastique pour $\Delta \epsilon^p = 0.75\%$



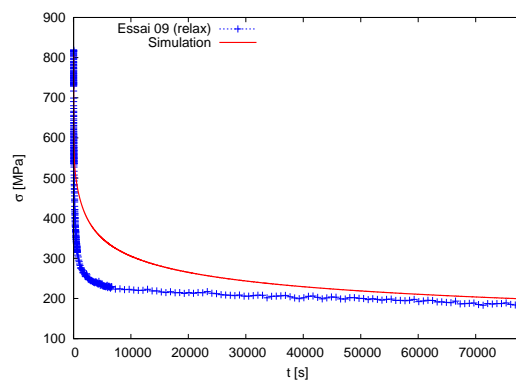
(b) Essai 05



(c) Fluage essai 05



(d) Essai 09



(e) Relaxation essai 09

FIG. 2.18. Modèle de type Norton à deux potentiels.

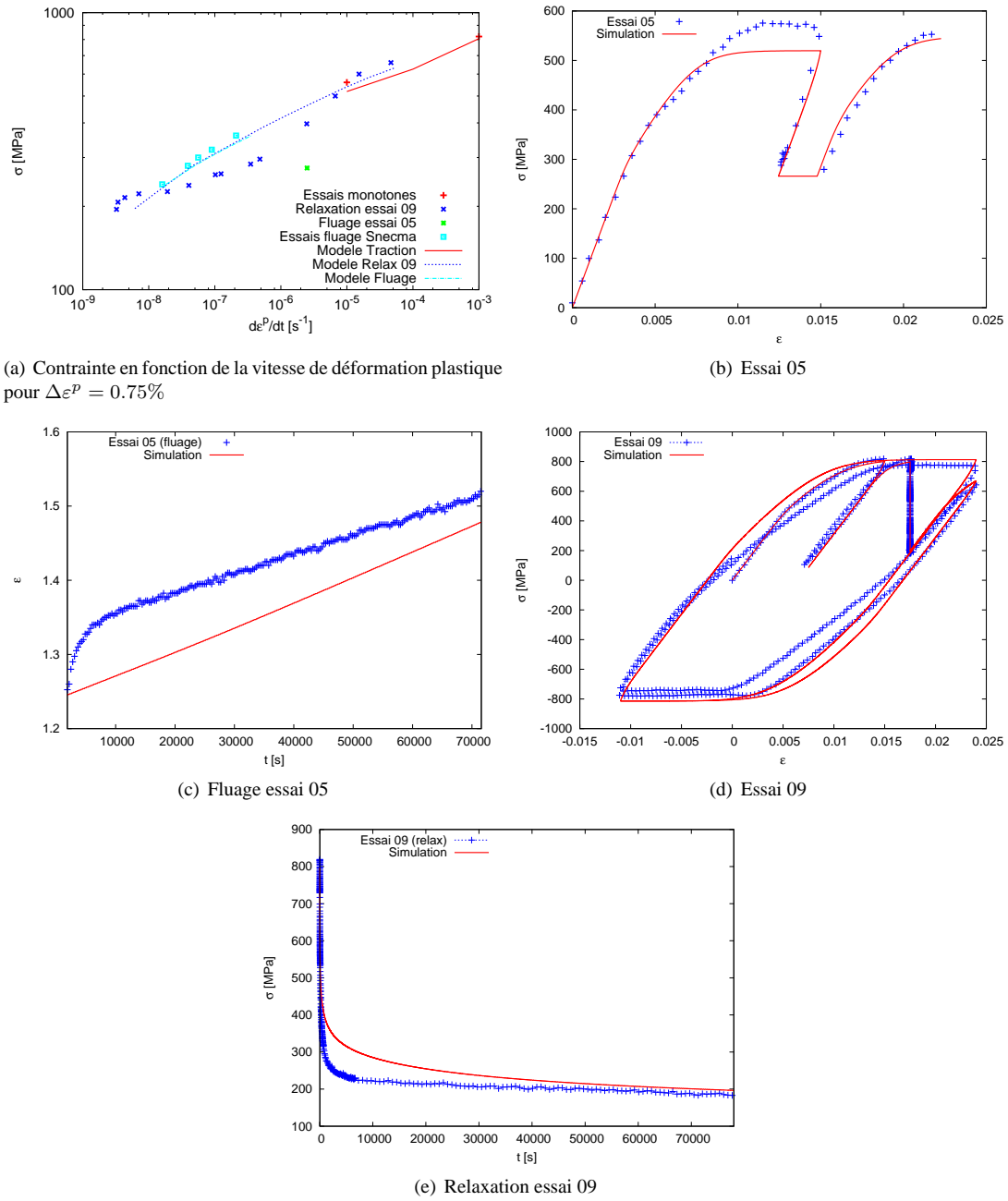


FIG. 2.19. Modèle n°2 de type Norton à deux potentiels. Ajout d'un potentiel de restauration statique. Les coefficients matériau correspondants sont donnés par le tableau 2.6.

2.4.4 Proposition 3 : loi de viscosité de type sinus hyperbolique

L'utilisation de lois de type Norton présente l'inconvénient de multiplier le nombre de coefficients matériau si on souhaite décrire un large domaine de vitesses. C'est pourquoi nous nous intéressons à des lois de viscosité en sinus hyperbolique, non linéaires dans le graphe $(\dot{\epsilon}^P; \sigma_v)$ contrairement à la loi de Norton. La vitesse de glissement s'écrit :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\epsilon}_0 \sinh \left(\frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{k} \right)^n \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad (2.26)$$

Comme précédemment, se pose la question des contraintes internes que nous estimons trop importantes dans le modèle actuel. La même démarche que pour l'identification de la loi de Norton va être adoptée. Dans un premier temps le coefficient r_0 est pris nul.

Identification de la loi de viscosité La première étape consiste à identifier la loi de viscosité sur le domaine des vitesses intermédiaires. Cette identification conduit aux paramètres matériau du tableau 2.7. La

r_0	c	d	$\dot{\epsilon}_0$	k	n
MPa	MPa		s^{-1}	MPa	
0	215600	1960	$3.70 \cdot 10^{-8}$	22.86	1

TAB. 2.7. Coefficients octaédriques du modèle de type sinus hyperbolique.

figure 2.20 présente les résultats obtenus avec ce modèle. Les résultats monotones et cycliques pour les vitesses de sollicitation intermédiaires sont globalement identiques à ceux obtenus avec une loi de Norton (figures 2.20(a) et (b)). Les faibles vitesses sont mieux décrites, que ce soit pour les essais de fluage que pour les essais de relaxation (figure 2.20(c), (e), (f), (g) et (h)). Enfin, comme nous l'avons mentionné, ce modèle présente une saturation de la viscosité pour les fortes vitesses (figure 2.20 (d)).

Ajout d'un terme de restauration statique Un terme de restauration statique peut éventuellement être ajouté au modèle précédent. Contrairement aux cas des propositions 1 et 2, il doit être effectif pour les vitesses très faibles (inférieures à $10^{-7} s^{-1}$) car le modèle en sinus hyperbolique donne déjà de bons résultats pour les vitesses comprises entre 10^{-7} et $10^{-5} s^{-1}$. Les paramètres du terme de restauration statique identifié sont : $M=900 \text{ MPa} \cdot s^{1/m}$ et $m=9$. Les comparaisons essais/simulations sont présentées par la figure 2.21. Elles montrent que la fin de la relaxation de l'essai 09 est mieux décrite avec la restauration de même que la recharge suivant la relaxation. La courbe simulée de la figure 2.21(d) montre une légère restauration non présente sans restauration statique (cf. courbe 2.20(g)). En revanche la vitesse de fluage de l'essai 05 simulée avec ce modèle est trop importante vis-à-vis de l'expérience.

Pour un modèle destiné à des applications industrielles, le gain apporté par l'ajout d'un terme de restauration au modèle en sinus hyperbolique doit être mis en balance avec les temps de calcul qui seront augmentés et des difficultés d'identification qui apparaîtront. Dans ce cadre, le terme de restauration ne nous semble pas nécessaire et nous préconisons plutôt un modèle tel que celui décrit dans le tableau 2.7, sans restauration statique.

2.4.5 Proposition 3 bis : loi de viscosité de type sinus hyperbolique, avec seuil

Le modèle en sinus hyperbolique qui vient juste d'être présenté a été identifié avec un seuil r_0 nul, à l'image de ce qui a été proposé pour les modèles de type Norton. Cette hypothèse peut paraître un peu brutale, c'est pourquoi nous avons souhaité voir si en prenant une valeur pas trop élevée pour r_0 , un modèle de viscosité de type sinus hyperbolique est capable de reproduire correctement l'ensemble des données expérimentales. L'identification de ce modèle est présentée par le tableau 2.8. Les résultats du modèle avec

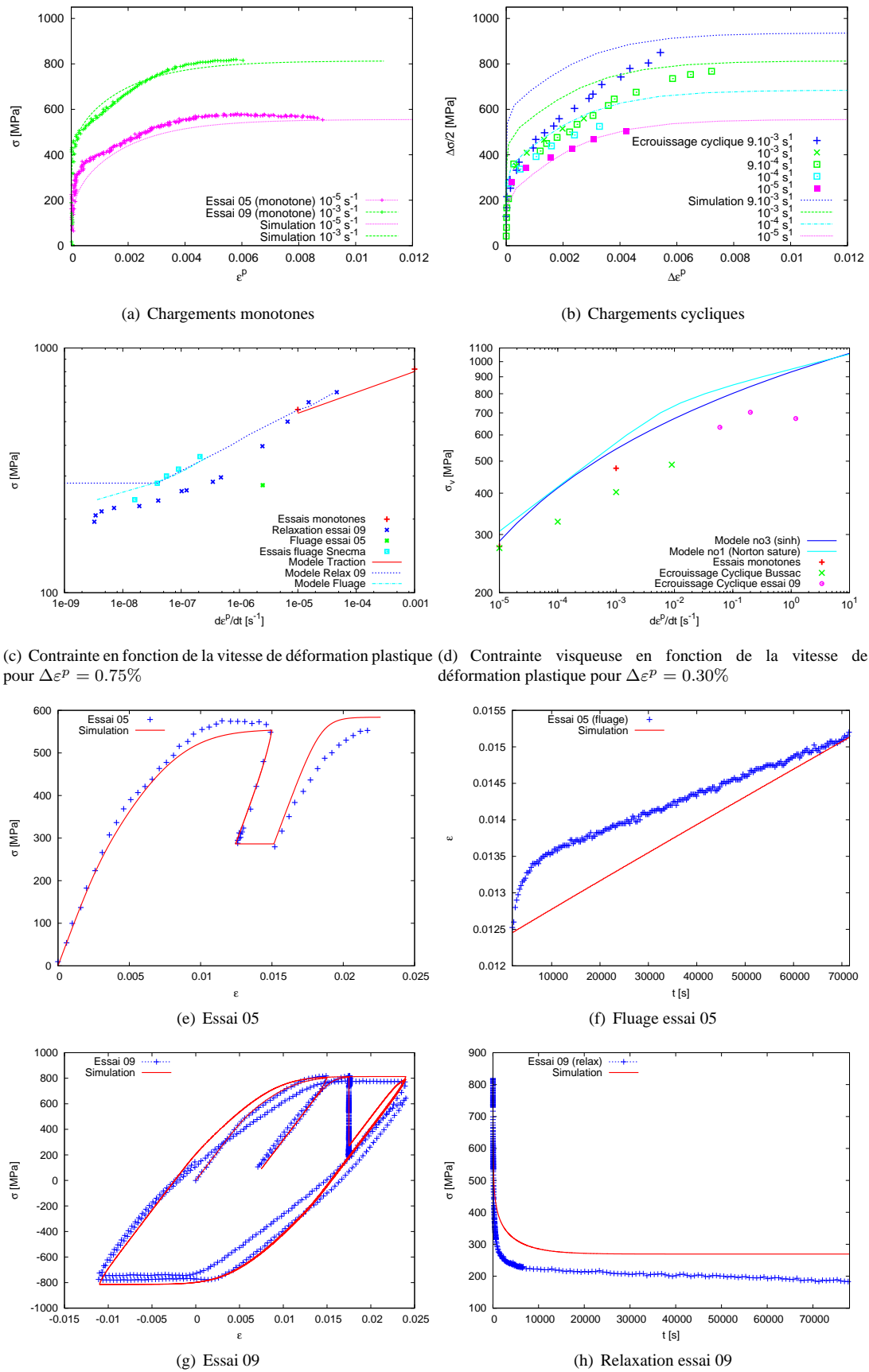
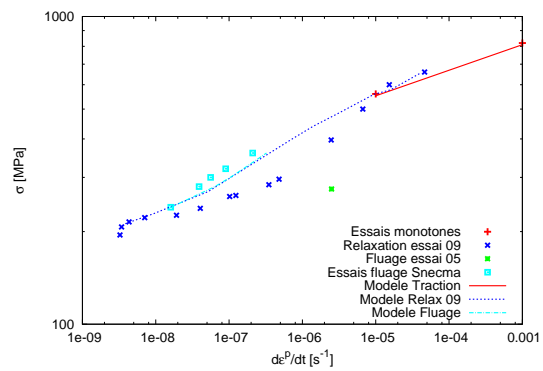
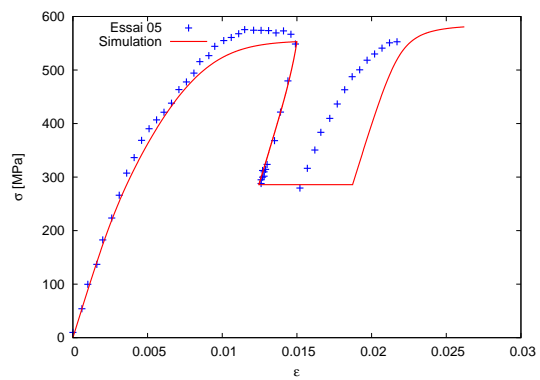


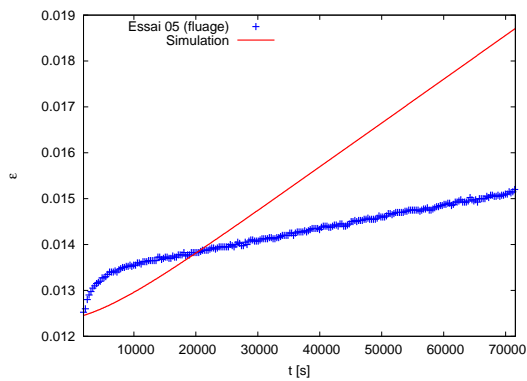
FIG. 2.20. Modèle de type sinus hyperbolique.



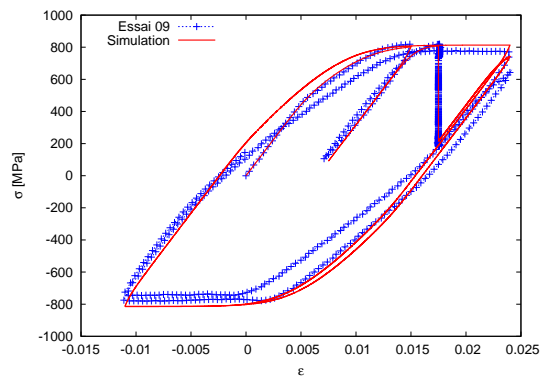
(a) Contrainte en fonction de la vitesse de déformation plastique pour $\Delta \epsilon^p = 0.75\%$



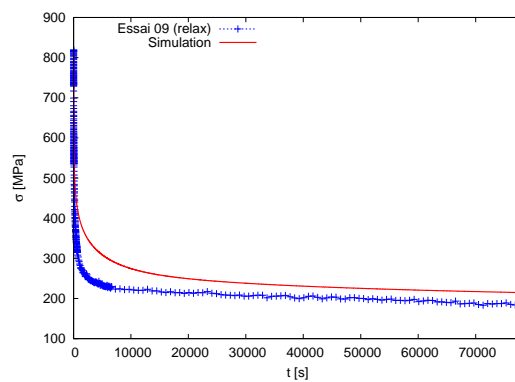
(b) Essai 05



(c) Fluage essai 05



(d) Essai 09



(e) Relaxation essai 09

FIG. 2.21. Modèle n°3 de type sinus hyperbolique avec terme de restauration.

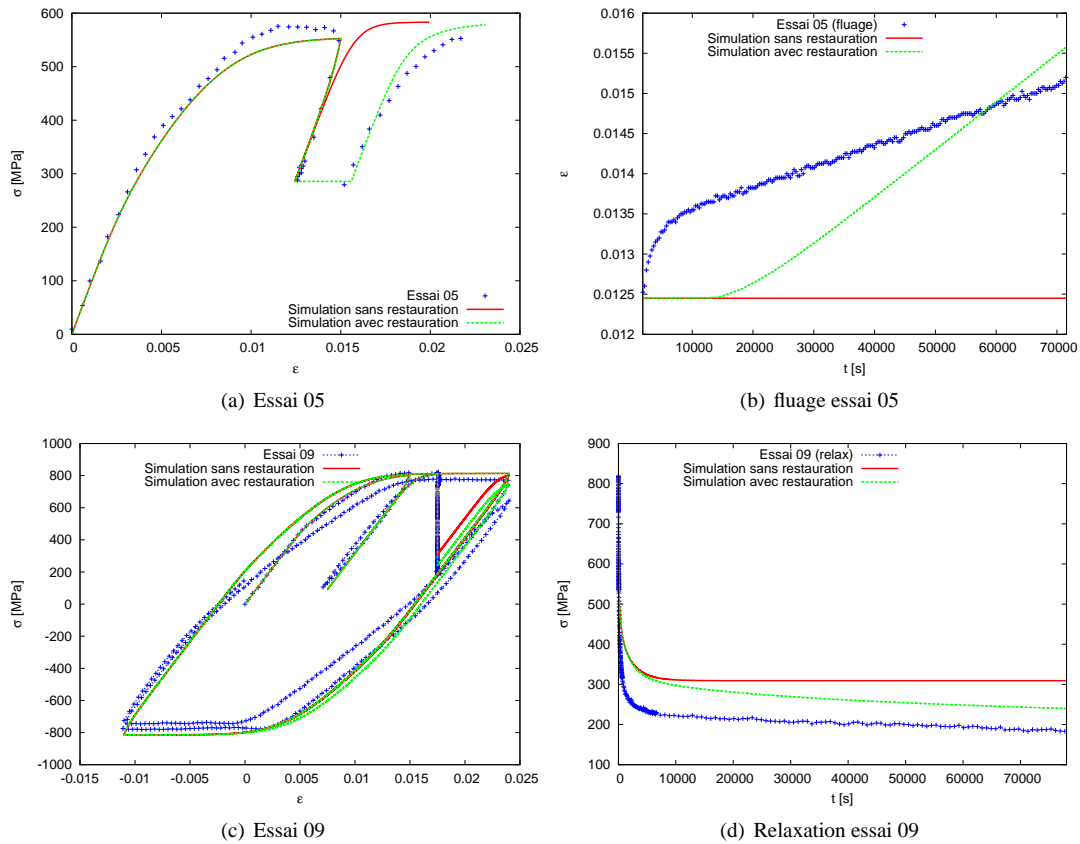


FIG. 2.22. Modèle de type sinus hyperbolique avec seuil, comparaison de formulation sans et avec restauration statique.

seuil ne sont pas différents de ceux du modèle sans seuil présenté au paragraphe précédent. L'ajout d'un terme de restauration statique a cependant ici une influence plus marquée. C'est pourquoi nous avons tracé à la figure 2.22 la comparaison d'un modèle de type sinus hyperbolique avec seuil, sans terme de restauration statique et avec.

r_0	c	d	$\dot{\epsilon}_0$	k	n	M	m
MPa	MPa		s^{-1}	MPa		$MPa \cdot s^{-1}$	
16	215600	1960	$7,80 \cdot 10^{-8}$	22.95	1	5000	5

TAB. 2.8. Coefficients octaédriques du modèle de type sinh avec seuil.

2.4.6 Discussion

Sur la base des essais présentés, nous avons étudié successivement trois formulations différentes pour modéliser la viscosité de l'AM1 à 950°C suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$:

- Un modèle de type Norton, sans seuil. Le comportement pour les faibles vitesses de sollicitation est décrit par l'introduction d'un terme de restauration statique. De plus, la viscosité est saturée pour les vitesses de sollicitation importantes à l'aide d'un double Norton ;
- Un modèle toujours de type Norton avec cette fois deux potentiels. En effet, un deuxième potentiel lent est ajouté pour décrire le comportement en fluage et en relaxation. Pour ce modèle, nous avons également considéré un seuil de plasticité nul ;

- Un modèle de viscosité de type sinus hyperbolique, avec ou sans seuil. Suivant la valeur choisie pour le seuil, il a été nécessaire d'introduire un terme de restauration statique.

Les deux premiers modèles, possédant des lois de viscosité de type Norton, ont montré qu'un nombre important de paramètres doit être ajouté pour la description du comportement sur toute la plage de vitesses 10^{-9} - $10s^{-1}$ (9 paramètres pour le modèle n°1 et 11 paramètres pour le modèle à deux potentiels). Pour des résultats comparables, un modèle de type sinus hyperbolique a été identifié, nécessitant pour sa part 5 paramètres matériau (si l'on fixe la valeur de l'exposant n à 1). L'identification de ce modèle sur toute la plage de température d'utilisation de l'AM1 a été réalisée par A. Roos dans le cadre du PEA EGISTHE sur la base de ce travail à $950^{\circ}C$. C'est la formulation avec un seuil nul qui a été retenue afin d'éviter l'introduction d'un potentiel de restauration statique. Néanmoins, nous avons relevé une restauration de l'érouissage au cours de l'essai 09 après une relaxation de $24h$. Ce phénomène n'est cependant pas décrit par le modèle proposé.

Nous avons souligné les difficultés de description des essais monotones et cycliques avec seulement un érouissage cinématique. Nous avons remarqué cette difficulté surtout à $950^{\circ}C$. La réalisation d'essais d'érouissage cyclique pourrait être envisagée dans le futur pour confirmer cet écart entre courbes monotone et cyclique pour cette température. Si cette tendance était confirmée, une loi d'écoulement présentant une sensibilité à la vitesse de déformation comme l'a proposé Levkovitch [Levkovitch 06] (cf. équation 2.11) pourrait être une voie d'amélioration du modèle sur ce point.

Enfin, même dans le domaine des fortes déformations plastiques pour lesquelles courbes monotone et cyclique sont superposées, la description des boucles d'hystérésis n'est pas parfaite. La figure 2.23 montre que la loi proposée dans le cadre du PEA EGISTHE ne permet pas une bonne description de la boucle d'hystérésis. Il faudrait envisager la superposition de plusieurs érouissages cinématiques afin d'avoir plus de degrés de liberté dans l'identification et obtenir un meilleur accord avec l'expérience.

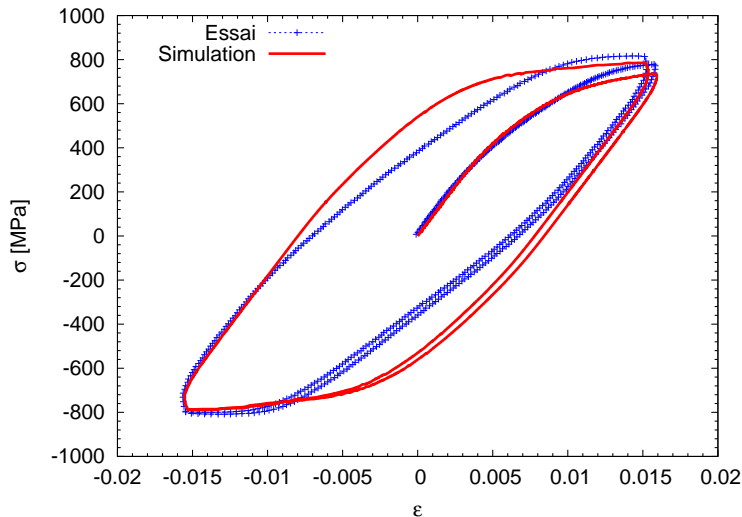


FIG. 2.23. Simulation de l'essai 09a (essai cyclique à $0.016Hz$) avec la loi de type sinus hyperbolique identifiée dans le cadre du PEA EGISTHE.

2.5 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à la modélisation à l'échelle macroscopique du comportement mécanique de l'AM1. Après avoir décrit le modèle de comportement utilisé à l'Onera [Méric 91], nous avons présenté les essais complémentaires sur le matériau non-vieilli réalisés dans le cadre du PEA EGISTHE. Ces essais

ont mis en évidence deux points principaux. Tout d'abord, le modèle de comportement dans sa formulation et son identification actuelles ne permet pas de décrire de manière satisfaisante les relaxations de longue durée, et de manière générale les chargements lents. De plus, la viscosité du matériau semble saturer pour des vitesses de sollicitation de l'ordre 10^{-1} s^{-1} . Cette tendance à la saturation n'est pas reproduite par le modèle actuel. Nous avons proposé de modéliser la viscosité de l'AM1 à l'aide d'un sinus hyperbolique. Cette formulation permet, avec un nombre réduit de paramètres, de décrire le comportement du superalliage sur la gamme de vitesse 10^{-9} - 10^{-1} s^{-1} .

L'identification proposée permet de mieux décrire le comportement de l'AM1 en fluage et en relaxation. Nous verrons au chapitre 4 que sous chargements mécaniques lents à haute température, on observe une évolution microstructurale connue sous le nom de mise en radeaux. Les paramètres matériau identifiés dans ce chapitre prennent en compte de manière implicite le phénomène de mise en radeaux. Au chapitre 7 de ce mémoire, nous proposons un modèle de comportement rendant compte des effets de la mise en radeaux sur le comportement mécanique.

Chapitre 3

Liens entre microstructure et comportement : une approche par homogénéisation classique

Sommaire

2.1	Introduction	26
2.2	Modélisation macroscopique du comportement des superalliages monocristallins	26
2.2.1	Modèle de Cailletaud	27
2.2.2	Modèle de Levkovitch	28
2.2.3	Modèle de Fedelich	29
2.3	Campagne expérimentale sur l'AM1 non vieilli	30
2.3.1	Essai 01 : écrouissage cyclique à 400°C	31
2.3.2	Essai 02 : essai cyclique en $R_e = 0+$	33
2.3.3	Essais 03 et 04 : essais à double vitesse à 950°C et 1100°C	34
2.3.4	Essai 09 suite : essai à fréquence croissante	35
2.3.5	Essais 05 et 09 : restauration de l'écrouissage	36
2.4	Extension du domaine de validité du modèle de comportement de l'AM1 à 950°C	38
2.4.1	Recalage du modèle sur la plage de vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s $^{-1}$	39
2.4.2	Proposition 1 : Modèle de type Norton	40
2.4.3	Proposition 2 : Modèle de type Norton avec deux potentiels	42
2.4.4	Proposition 3 : loi de viscosité de type sinus hyperbolique	48
2.4.5	Proposition 3 bis : loi de viscosité de type sinus hyperbolique, avec seuil	48
2.4.6	Discussion	51
2.5	Conclusion	52

3.1 Introduction

Le chapitre précédent a traité du comportement de l'AM1 à l'échelle macroscopique. Nous avons présenté ses principales caractéristiques puis nous avons abordé le problème de sa modélisation. Comme nous l'avons souligné, la modélisation à l'échelle macroscopique ne prend pas explicitement en compte le caractère biphasé du matériau. La problématique de ce travail sur les influences des évolutions microstructurales sur le comportement mécanique nous amène naturellement à nous intéresser au comportement à l'échelle des phases (échelle mésoscopique). L'objectif de ce chapitre est donc, à partir du comportement de chacune des phases, de modéliser le comportement de l'alliage grâce à des simulations à l'échelle de la microstructure.

Ce type de problématiques est très courant en mécanique des matériaux et a fait l'objet de nombreuses études dans le cas particulier des superalliages base nickel monocristallins comme nous l'avons vu au premier chapitre de ce mémoire. Nous restons dans le cadre de la mécanique des milieux continus classique. Les outils permettant de décrire le comportement des phases sont alors les mêmes qu'à l'échelle macroscopique, c'est à dire des modèles de comportement, plus ou moins phénoménologiques. Cependant l'utilisation de tels modèles à l'échelle mésoscopique repose sur l'hypothèse que la plasticité à cette échelle peut encore être décrite de manière continue. En d'autres termes, cela signifie que les densités de dislocations présentent dans les couloirs de matrice ou cisailant les précipités sont suffisamment importantes.

Connaissant le comportement individuel des phases, le comportement du matériau biphasé est obtenu par homogénéisation. Cependant, cette approche présente certaines limitations. Comme l'ont montré [Espié 96, Nouailhas 97], le comportement du matériau biphasé n'est pas la simple superposition du comportement des phases prises individuellement. Ces auteurs ont montré les limites de cette approche en soulignant que le comportement des phases dans le superalliage est différent de leur comportement massif. Ce phénomène est dû aux effets d'échelle observés en plasticité. Deux possibilités s'offrent alors. La première solution consiste à ré-identifier le modèle de comportement de chaque phase dans le superalliage comme l'a fait Espié dans sa thèse [Espié 96]. Une deuxième solution est de faire appel à la mécanique des milieux continus généralisés [Forest 00]. Cette approche est abordée au chapitre 6 de ce mémoire.

Nous suivons donc dans ce chapitre la même démarche que celle décrite dans [Espié 96, Nouailhas 97]. Dans un premier temps nous revenons brièvement sur les mécanismes de déformation des phases γ et γ' "massives". Cette étude bibliographique nous conduit à identifier un modèle de comportement pour les phases isolées. Nous verrons que ce modèle ne permet pas de reproduire correctement le comportement de l'AM1. La suite du chapitre propose une identification du comportement de chaque phase dans le superalliage. Enfin, la validité de l'approche est analysée en comparant les simulations à l'expérience dans le cas de chargements complexes ou de modifications de la microstructure.

3.2 Comportement des phases γ et γ'

Avant d'aborder le comportement plastique des phases γ et γ' , quelques précisions sont apportées sur leur comportement élastique. Les constantes d'élasticité des phases isolées et du matériau biphasé sont relativement bien documentées dans la littérature. Une identification pour l'AM1 à 950°C et 1050°C est proposée en annexe E. Les différences de constantes élastiques sont relativement faibles, de l'ordre de 10% comme le montre cette annexe. On peut donc considérer que les propriétés élastiques sont homogènes. Cette hypothèse est utilisée dans la grande majorité des simulations à l'échelle de la microstructure dans les superalliages [Nouailhas 96, Forest 96]. De même, nous avons vu au premier chapitre qu'il existe un désaccord de paramètre de maille entre les phases, ce qui génère des contraintes de cohérence. De nombreuses études se sont attachées à les quantifier à l'aide de simulations par éléments finis (voir par exemple [Glatzel 89, Ganghoffer 91, Feng 96]). En revanche, ces contraintes internes ne semblent pas avoir d'influence notable sur le comportement mécanique, dans le cadre de simulations à l'échelle de la microstructure [Espié 96, Nouailhas 96]. Par conséquent, nous négligerons le désaccord paramétrique dans ce chapitre.

3.2.1 Mécanismes de déformation plastique à haute température

Phase γ

De par sa cristallographie CFC, les dislocations qui se propagent dans la phase γ sont de type $1/2 \langle 110 \rangle$. Il s'agit des systèmes de glissement que nous avons qualifiés d'octaédriques dans le chapitre 1 de ce mémoire. Cependant, pour des raisons énergétiques, une configuration dissociée apparaît spontanément :

$$\frac{a}{2} \langle 110 \rangle = \frac{a}{6} \langle 211 \rangle + \frac{a}{6} \langle 12\bar{1} \rangle \quad (3.1)$$

séparée par une faute d'empilement. Dans [Benyoucef 94] est proposée une étude in-situ des mécanismes de déformation de la phase γ massive à 25°C et 800°C. [Pettinari 01] étudie l'influence de l'ordre à courte distance sur le comportement de phases γ' modèles. A faible température, les auteurs observent que la déformation plastique se localise. Par contre, à plus haute température, à partir de 900°C, le comportement de phases γ est plus homogène. Cet article propose également des résultats d'essais de comportement de ces phases γ massives, tout comme dans [Espié 96].

Phase γ'

La phase γ' se différencie de la phase γ par son caractère ordonné. Par conséquent, lorsqu'une dislocation parfaite cisaille une phase γ' , elle modifie la nature chimique des premiers voisins créant ainsi une paroi d'antiphase (APB). Ce défaut est très énergétique dans les superalliages. C'est pourquoi on observe en fait l'accouplement de deux dislocations parfaites de la matrice (appelée superpartielle). La deuxième dislocation permet de rattraper le défaut d'ordre. De plus, tout comme dans la phase γ , chaque superpartielle se décompose en deux partielles de Shockley, séparées par une faute d'empilement complexe. En résumé, une superdislocation de la phase γ' est dissociée en 4 partielles de Shockley séparées respectivement par une faute d'empilement complexe, une paroi d'antiphase et une faute d'empilement complexe.

Influence de la nature biphasée de l'alliage

Les phases γ et γ' présentent donc des comportements plastiques tout à fait différents. Globalement, la phase γ est moins dure que la phase γ' . Le mouvement des dislocations se fait par conséquent préférentiellement dans la matrice et aux interfaces γ/γ' comme l'ont montré de nombreux auteurs, par exemple [Fredholm 87, Benyoucef 94]. Trois mécanismes de propagation des dislocations sont rencontrés à haute température :

- le contournement d'Orowan ;
- la montée le long des interfaces. Après propagation dans les couloirs, les dislocations de matrice laissent contre les précipités γ' des brins orientés selon des directions de type $\langle 011 \rangle$. A haute température, sous contraintes modérées, par montée de leur composante coin, ces mêmes dislocations se réorientent et se déplacent jusqu'à atteindre un autre couloir γ pour y glisser comme l'a montré Fredholm [Fredholm 87] en fluage à 1050°C. Lorsque le glissement est assisté par la montée, les dislocations peuvent parcourir de grandes distances dans les couloirs de matrice ;
- le glissement dévié répétitif entre les plans $[111]$ de la matrice. Dans les couloirs de matrice les dislocations parfaites peuvent se propager sur de grandes distances en faisant des zigzags entre les interfaces. Ce type de glissement a été observé par Ayrault [Ayrault 89] à 1050°C en début de fluage.

Les superalliages base nickel ont fait l'objet de très nombreuses études si bien que l'on a maintenant une idée relativement précise des mécanismes de déformation plastique. Le contournement d'Orowan va contribuer à l'écrouissage. Les mécanismes de montée aux interfaces et de glissement dévié affectent la viscosité. Néanmoins, ces données expérimentales, souvent obtenues en microscopie par transmission, ne sont pas assez quantitatives pour remonter à l'identification d'un modèle. C'est pourquoi, l'identification du comportement des phases massives est réalisée à partir de données macroscopiques.

3.2.2 Modélisation du comportement des phases γ et γ'

Les données macroscopiques concernant le comportement des phases massives sont relativement rares. Dans [Espié 96], des essais monotones et cycliques à 650°C, 950°C et 1100°C sur un alliage de composition proche de celle de la matrice dans l'AM1 ont été effectués. Dans [Clément 96], le même type d'approche est utilisé pour étudier le comportement monotone de la phase γ de l'AM3 et le MC2 à 750°C et 900°C. Les données bibliographiques concernant le comportement des phases dans le superalliage sont encore plus rares. Des études de la cisssion résolue critique de chacune des phases sont disponibles [Nitz 98b, Nembach 06, Demura 07]. Des essais de nano-indentation sur du CMSX6 ont été réalisés par [Göken 99], mais il semble difficile de remonter au comportement inélastique de la matrice ou des précipités. Le paramètre r_0 est le paramètre le plus directement accessible. La figure 3.1 revient sur les données bibliographiques disponibles pour ce paramètre. Ces données ont été extrapolées à 950°C et 1050°C (points verts sur la figure 3.1). Les paragraphes suivants décrivent l'identification des autres coefficients du modèle.

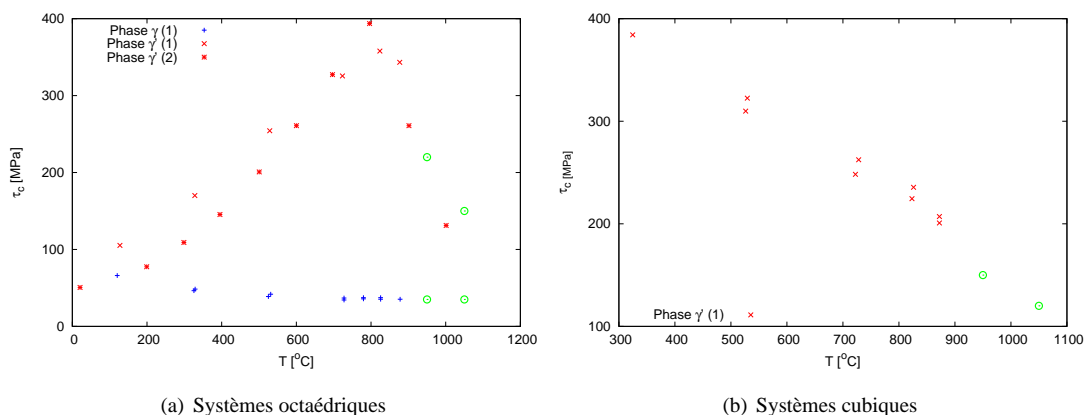
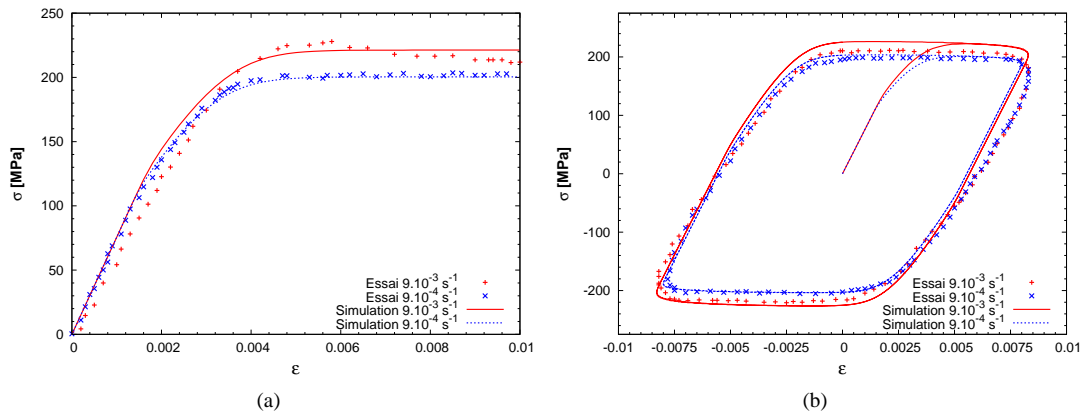


FIG. 3.1. Dépendance en température de la cisssion résolue critique des phases γ et γ' , les valeurs expérimentales sont issues de (1) [Nitz 98a] et (2) [Demura 07]; les valeurs retenues dans ce travail sont représentées par les symboles verts.

Le comportement de la phase γ massive a donc été identifié à 950°C à partir des données de [Espié 96] en utilisant un modèle de type Caillaud. Par rapport au chapitre précédent, nous ne nous intéressons ici qu'au comportement pour des vitesses de sollicitation intermédiaires, ce qui justifie l'emploi d'une loi de Norton. Les valeurs des coefficients visco-plastiques sont données par le tableau 3.1. La comparaison expérience/simulation est présentée par la figure 3.2. Nous notons que la matrice a un comportement très peu visqueux à 950°C. Il est alors intéressant de simuler le comportement du superalliage à l'échelle de la microstructure en introduisant le comportement visco-plastique identifié pour la phase γ massive et une phase γ' élastique.

Coefficient	r_0	c	d	K	n
	MPa	MPa		MPa.s ^{1/n}	
γ	35	200000	6200	75	5

TAB. 3.1. Coefficients du modèle de comportement pour les systèmes octaédriques de la phase γ massive à 950°C.

FIG. 3.2. Comportement monotone (a) et cyclique (b) de la phase γ à 950°C

3.3 Simulation du comportement du matériau biphasé

En première approximation, il est possible de considérer la microstructure de l'AM1 comme étant périodique ; la cellule élémentaire étant composée de cubes de γ' entourés de canaux de matrice. Des études antérieures [Espié 96, Nouailhas 97] ont souligné l'importance de prendre des coins arrondis pour les précipités. Les coins des précipités sont donc modélisés par un arc de cercle pour lequel nous avons choisi un rayon de 66 nm (voir figure 3.3). Nous avons choisi une taille de 450 nm pour les précipités et une largeur de couloir de matrice de 100 nm, conformément aux valeurs publiées dans la littérature (e.g. [Diologent 02]). Ces valeurs conduisent à une fraction volumique de précipités d'environ 68%.

Il s'agit alors d'attribuer un modèle de comportement à chacune des phases et la réponse macroscopique du matériau biphasé est obtenue en calculant les moyennes des tenseurs de déformation et de contrainte.

3.3.1 Convergence au maillage

Avant tout calcul, nous nous sommes intéressés aux problèmes de convergence au maillage. Cette étude est réalisée sur des calculs de traction suivant l'orientation (001). Dans ce cas précis, l'étude des symétries du problème permet de réduire le calcul à un huitième de cube. Des conditions aux limites en déplacement tout à fait classiques sont appliquées de façon à imposer un chargement de traction.

Trois maillages, m1, m2 et m3, de plus en plus raffinés ont été construits. De plus, nous avons considéré pour chacun des maillages une interpolation linéaire ou quadratique dans les éléments. Le maillage m3 quadratique correspond au maillage le plus fin que l'on peut raisonnablement simuler par un calcul éléments finis sans faire appel au calcul parallèle. Le tableau 3.2 et la figure 3.3 décrivent les caractéristiques de ces différents maillages.

Pour cette étude, nous considérons un comportement élastique pour les précipités et adoptons un modèle visco-plastique pour la matrice. Les paramètres de ce modèle correspondent à l'identification réalisée pour la phase γ massive (cf. tableau 3.1). La réponse du matériau biphasé en traction pour une vitesse de sollicitation de $\dot{\epsilon}=10^{-3} \text{ s}^{-1}$ pour chacun des maillages est comparée au maillage m3 quadratique de référence. La figure 3.4 présente les réponses obtenues avec les différents maillages. On constate une influence non négligeable de la finesse du maillage sur le comportement simulé puisque la contrainte à 1.8% de déformation varie dans une fourchette de 130 MPa entre le maillage le plus fin et le maillage la plus grossier. Un tel écart peut surprendre si l'on se réfère aux calculs tout à fait similaires effectués dans [Espié 96] où des maillages beaucoup moins fins sont utilisés. Il faut rappeler que le modèle de comportement pour la matrice utilisé dans nos calculs présente une viscosité très faible (tableau 3.1). Selon nous, c'est le caractère quasiment plastique du modèle de comportement de γ qui explique la forte dépendance au maillage observée dans nos

Maillage	Nombre d'éléments dans γ (*)	Nombre d'éléments dans γ' (*)	Nombre total d'éléments	Nombre de ddl
m1 linéaire	4	6	600	2178
m1 quadratique	4	6	600	8283
m2 linéaire	8	12	4680	14994
m2 quadratique	8	12	4680	58947
m3 linéaire	16	18	17744	53430
m3 quadratique	16	18	17744	213483

TAB. 3.2. Caractéristiques des maillages utilisés pour l'étude de convergence, (*) se référer à la figure 3.3(a) pour la définition de ces valeurs.

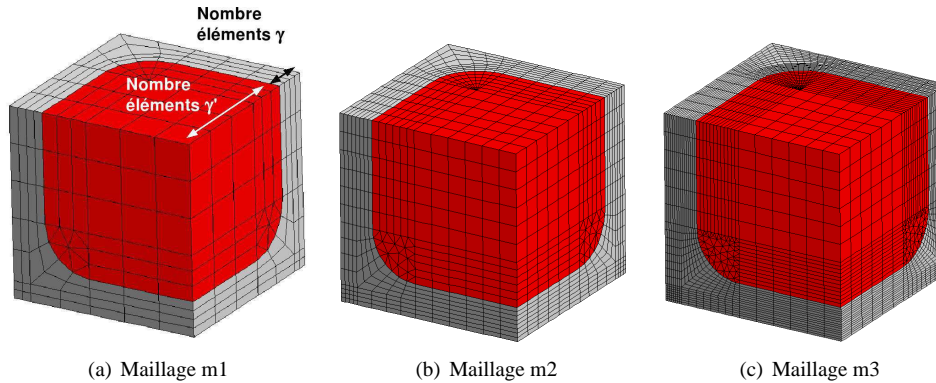


FIG. 3.3. Maillages utilisés pour l'étude de convergence. Pour chacun des maillage la phase γ' apparaît en rouge.

calculs.

A titre de comparaison, nous avons effectué les mêmes calculs en prenant le coefficient de résistance k de la loi de Norton 10 fois plus important que celui identifié pour la phase γ massive. La figure 3.5 montre que si le comportement de la matrice est plus visqueux, les résultats des simulations dépendent beaucoup moins de la finesse de maillage puisque la différence sur la contrainte à 1.8% de déformation calculée entre le maillage le plus grossier et la maillage le plus fin n'est alors que de 10 MPa. Cependant, malgré tout, les isovaleurs des champs de contrainte aux points de Gauss révèlent encore quelques problèmes de discrétisation. A titre d'exemple, la figure 3.6 montre la contrainte σ_{33} dans le plan xy pour le maillage m2 quadratique. On constate des variations de contrainte dans les éléments proches du coin du précipité. Ces problèmes de discrétisation sont néanmoins très localisés, d'autant plus localisés que le maillage est fin, ce qui explique que l'on n'observe très peu de différences sur la réponse macroscopique suivant le maillage utilisé.

Nous concluons de cette étude de convergence au maillage que l'utilisation du maillage m2 quadratique permet d'assurer une bonne précision du calcul quel que soit le modèle de comportement adopté pour chacune des phases. Par ailleurs, si les phases sont suffisamment visqueuses, le maillage m1 quadratique est suffisant. Par conséquent, suivant le comportement des phases, l'un ou l'autre des maillages sera retenu.

3.3.2 Comportement de l'AM1 à partir des propriétés des phases massives à 950°C

Ce paragraphe décrit les résultats de simulation du comportement du matériau biphasé à partir de celui des phases isolées identifié au paragraphe 3.2. Comme nous l'avons vu, la limite d'élasticité de la phase γ' étant très supérieure à celle de la phase γ , les précipités sont considérés comme élastiques. Quant à la matrice, nous lui attribuons un comportement visco-plastique dont les paramètres matériau sont donnés par le tableau 3.1. L'étude de convergence du paragraphe précédent montre qu'il faut utiliser un maillage

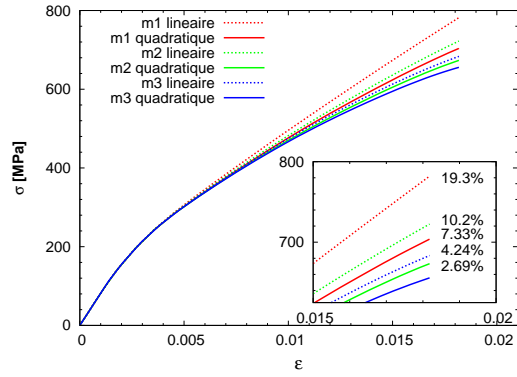


FIG. 3.4. Courbes contrainte déformation à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{s}^{-1}$ calculées avec les différents maillages, les pourcentages indiquent l'erreur relative sur la contrainte à 1.8% de déformation par rapport au maillage le plus fin.

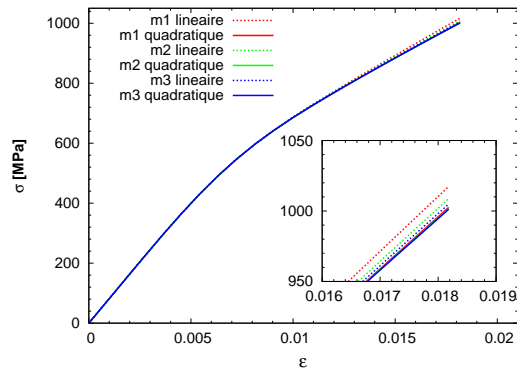


FIG. 3.5. Courbes contrainte déformation à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{s}^{-1}$; le paramètre de résistance de la loi de Norton $k = 750 \text{MPa} \cdot \text{s}^{1/5}$ pour la phase γ .

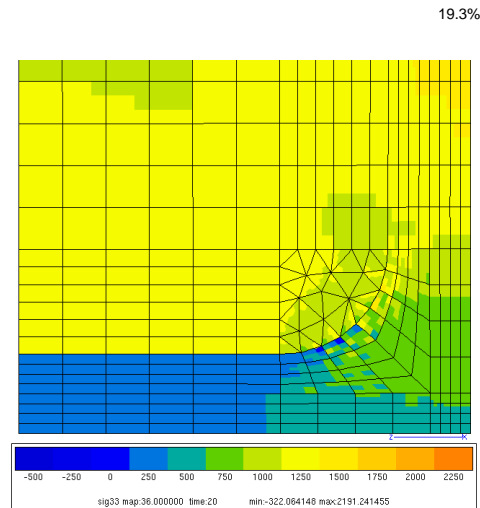


FIG. 3.6. Isovaleurs aux points de Gauss de σ_{33} pour le maillage m2 quadratique, le plan est le plan $y=0$ (centre du cube).

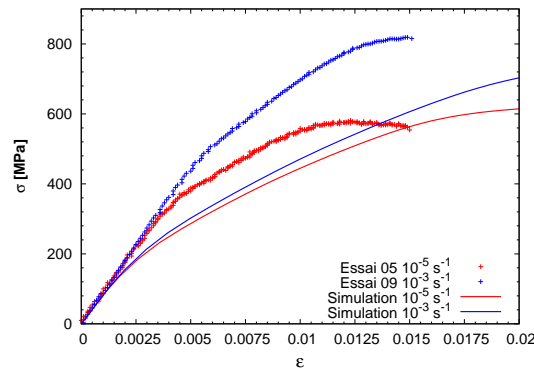


FIG. 3.7. Simulation du comportement monotone de l'AM1 par homogénéisation du comportement des phases massives

relativement fin dans ce cas ; les simulations décrites dans ce paragraphe ont été réalisées sur le maillage $m2$ quadratique. La figure 3.7 compare les résultats de simulations de tractions à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et 10^{-5} s^{-1} aux résultats expérimentaux obtenus au chapitre 1. Cette comparaison montre des différences significatives entre simulations et expériences :

- La limite élastique apparente de l'AM1 est plus élevée. Dans la simulation, le régime inélastique commence dès que le seuil de plasticité dans les couloirs de matrice est dépassé, soit pour une contrainte macroscopique d'environ 100MPa ;
- Les courbes expérimentales montrent un écrouissage beaucoup plus important que les courbes simulées ;
- Le superalliage est beaucoup plus sensible à la vitesse de chargement que ce que prévoit la simulation. En effet, la viscosité du matériau biphasé simulé est exactement égale à celle de la matrice et nous avons vu que la phase γ massive est très peu visqueuse.

Ce calcul amène à la conclusion que le comportement de chacune des phases est différent de leur comportement massif lorsqu'elles sont dans le matériau biphasé. Ce résultat n'est pas étonnant ; il avait déjà été mis en évidence par Espié dans sa thèse [Espié 96]. Les phénomènes de plasticité à l'échelle de la microstructure comportent un effet d'échelle lié au confinement des dislocations dans les couloirs de matrice. C'est ce qui explique les différences de limite d'élasticité entre la phase γ massive et dans le superalliage. De plus, il est très probable que la différence d'écrouissage observée entre essais et simulations soit due au fait que, lorsque la contrainte appliquée devient importante, les précipités ne sont plus élastiques et sont cisailés par les dislocations. Enfin, à haute température pour la vitesse de déformation de 10^{-5} s^{-1} , il est probable que la montée des dislocations aux interfaces γ/γ' contribue à la viscosité de l'AM1. Ce phénomène n'est absolument pas reproduit dans les simulations par éléments finis. Ces premiers calculs mettent donc en évidence la complexité des interactions plasticité/microstructure mise en jeu dans les superalliages.

Si l'on veut aller plus loin et reproduire par éléments finis le comportement de l'AM1 à l'échelle de la cellule élémentaire γ/γ' dans le cadre de la mécanique des milieux continus classique, nous devons réidentifier, à partir du comportement macroscopique de l'AM1, le comportement de chacune des phases dans le biphasé.

3.3.3 Identification du comportement de chaque phase dans l'alliage

N'ayant à notre disposition que le comportement macroscopique de l'AM1, cette identification est effectuée par une méthode inverse et de manière itérative jusqu'à ce que l'on trouve des coefficients matériau pour chacune des phases qui permettent de reproduire au mieux le comportement macroscopique de l'alliage. Nous entrevoyons là une des limites de cette approche. En effet, il n'y a pas de solution unique au problème car plusieurs jeux de coefficients différents peuvent conduire au même comportement macroscopique.

Comme cela a été signalé, le cisaillement des précipités est à prendre en compte pour décrire

Famille	Numéro	Plan de glissement	Direction de glissement	Facteur de Schmid [001]	Facteur de Schmid [111]	Facteur de Schmid [011]
octaédrique	1	(111)	$[\bar{1}01]$	$\frac{1}{\sqrt{6}} \approx 0.41$	0	$\frac{1}{\sqrt{6}} \approx 0.58$
	2		$[0\bar{1}1]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	0	0
	3		$[\bar{1}10]$	0	0	$\frac{1}{\sqrt{6}}$
	4	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[101]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	0	0
	5		$[011]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{2}{3\sqrt{6}} \approx 0.27$	0
	6		$[110]$	0	$\frac{2}{3\sqrt{6}}$	0
	7	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	$[011]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	0	0
	8		$[110]$	0	$\frac{2}{3\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$
	9		$[101]$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{2}{3\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$
	10	$(11\bar{1})$	$[110]$	0	0	0
	11		$[101]$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{2}{3\sqrt{6}}$	0
	12		$[011]$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{2}{3\sqrt{6}}$	0
cubique	13	(001)	$[\bar{1}10]$	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{8}} \approx 0.35$
	14		$[110]$	0	$\frac{\sqrt{2}}{3} \approx 0.47$	$\frac{1}{\sqrt{8}}$
	15	(100)	$[011]$	0	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	0
	16		$[0\bar{1}1]$	0	0	0
	17	(010)	$[101]$	0	0	$\frac{1}{\sqrt{8}}$
	18		$[110]$	0	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$\frac{1}{\sqrt{8}}$

TAB. 3.3. Facteur de Schmid suivant la direction du chargement.

l'écroissage de l'AM1. En tout, ce sont donc 20 coefficients qui sont à identifier pour décrire le comportement des systèmes octaédriques et cubiques des deux phases. Néanmoins, dans le but de restreindre ce nombre, un certaines hypothèses ont été fait.

Dans [Espíe 96], le choix a été fait de faire porter l'effet d'échelle sur la valeur du paramètre r_0 dans la matrice. Ainsi, une augmentation de r_0 permet une bonne description de la limite élastique du superalliage. Ce choix est contestable car il n'y pas de raison que l'effet d'échelle ne porte pas également sur l'écroissage cinématique. Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre consacré à la modélisation par les milieux continus généralisés au chapitre 6. Nous faisons ici le choix de ne modifier que les coefficients c et d . Les paramètres r_0 caractérisant le seuil de plasticité sont identifiés à partir des données expérimentales présentées par la figure 3.1. Nous prenons également l'exposant n de la loi de Norton identique pour les deux types de systèmes de glissements des deux phases et égal à 5. Le nombre de paramètres à identifier est maintenant de 12. L'identification des coefficients octaédriques et cubiques s'effectue en deux temps comme cela est expliqué par la suite.

Identification des coefficients des systèmes de glissement octaédriques

Dans un premier temps les coefficients des systèmes octaédriques sont déterminés à partir de simulations de traction et d'écroissage cyclique suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$. En effet, comme le rappelle le tableau 3.3, pour cette orientation seuls les systèmes octaédriques sont activés. Cependant, dans le calcul de microstructure, il peut exister des zones où la contrainte est fortement multiaxiale, typiquement aux coins des précipités. Cette hypothèse revient à négliger la contribution des systèmes cubiques qui peuvent éventuellement s'activer localement dans ces zones. Elle sera vérifiée a posteriori une fois les paramètres des systèmes cubiques identifiés.

Dans un premier temps, les paramètres octaédriques de la matrice sont déterminés de façon à reproduire le début de la courbe de traction. Le résultat de cette identification est présenté par la figure 3.8. On a

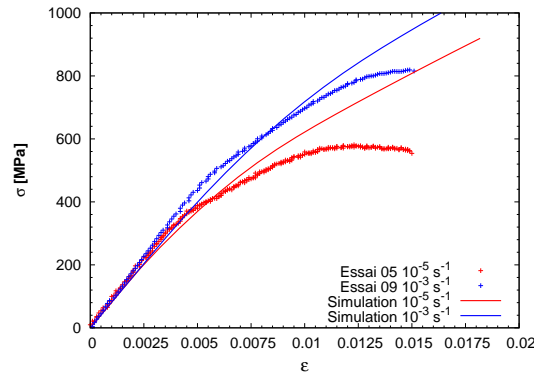


FIG. 3.8. Identification des paramètres des systèmes octaédriques de la phase γ à 950°C à partir d'essais de traction suivant $\langle 001 \rangle$ à $10^{-5} s^{-1}$ et $10^{-3} s^{-1}$.

constaté qu'il est impossible de reproduire le comportement de l'AM1 avec comme seuls paramètres libres les coefficients matériau de la matrice. En effet, comme le montre la figure 3.8, le fait de conserver la phase γ' élastique empêche d'atteindre le comportement saturé macroscopique du matériau biphasé. Nous avons trouvé deux approches dans la littérature. La première consiste à adopter un modèle de comportement visco-plastique pour la phase γ' . Une autre approche a été développée par Nouailhas [Nouailhas 97]. Dans cet article, un modèle de comportement pour la phase γ , basé sur une approche par invariants, est proposé. Ce modèle est caractérisé par un critère de plasticité dépendant de la pression hydrostatique. En d'autres termes, c'est la trace du tenseur de contrainte qui entre dans l'écriture du critère et plus seulement sa partie déviatorique, ce qui implique que la matrice est compressible plastiquement. Ce modèle a initialement été développé dans le but de reproduire de manière satisfaisante des essais de traction mais aussi des essais de torsion par des simulations de microstructure. Mais il permet également d'obtenir un bon accord entre simulation et expérience en traction [Nouailhas 97, Massaoudi 02].

Nous avons opté pour la première solution qui consiste à autoriser la plasticité dans les précipités. Cette hypothèse semble raisonnable au vue des cisssions résolues critiques relevées expérimentalement pour cette phase (cf. figure 3.1). Elle est d'ailleurs faite dans de nombreux travaux (e.g. [Espié 96, Fedelich 02]). Néanmoins, comme souligné dans [Benyoucef 03], la contribution du cisaillement des précipités semble faible devant la déformation subie par la matrice à haute température (850°C dans ces expériences in-situ). Ce problème reste donc encore à l'heure actuel ouvert.

Le tableau 3.4 précise les valeurs des paramètres octaédriques des phases γ et γ' ainsi identifiés. La figure 3.9 compare les résultats de l'identification proposée pour les systèmes octaédriques aux données expérimentales en traction et en écrouissage cyclique sur l'AM1 à 950°C. Un compromis a dû être trouvé afin de décrire au mieux l'ensemble des courbes de traction (figure 3.9(a)). En effet, cette figure montre que, si l'on décrit correctement la traction pour les fortes déformations on constate, en revanche, que la pente de la courbe notamment à $10^{-3} s^{-1}$ n'est pas très bien reproduite aux alentours de $\epsilon \approx 0.005$. De même, en écrouissage cyclique (figure 3.9(b)), la boucle obtenue par simulation pour la vitesse de $10^{-3} s^{-1}$ est beaucoup moins large que la boucle expérimentale. Nous nous heurtons ici aux mêmes difficultés que celles rencontrées au chapitre 1 pour l'identification du modèle macroscopique, à savoir la difficulté de reproduire de manière satisfaisante écrouissage cyclique et traction monotone avec un modèle à 5 paramètres.

Pour finir, il est intéressant de comparer sur une même figure le comportement de chaque phase tel qu'il a été déterminé dans ce travail et le comportement résultant du matériau biphasé (figure 3.10). Ainsi, le comportement de l'AM1 se situe entre celui des phases γ et γ' . De plus, la comparaison de la courbe de traction de la phase γ identifiée pour l'AM1 (figure 3.10) et celle de la phase massive (figure 3.2) souligne l'importance des effets d'échelle dans les superalliages. Nous avons expliqué la procédure suivie pour l'identification des paramètres des deux phases. Nous aimerions toutefois vérifier que les comportements des deux phases ainsi déterminés sont réalistes physiquement. Pour cela, nous avons fait un calcul d'ordre

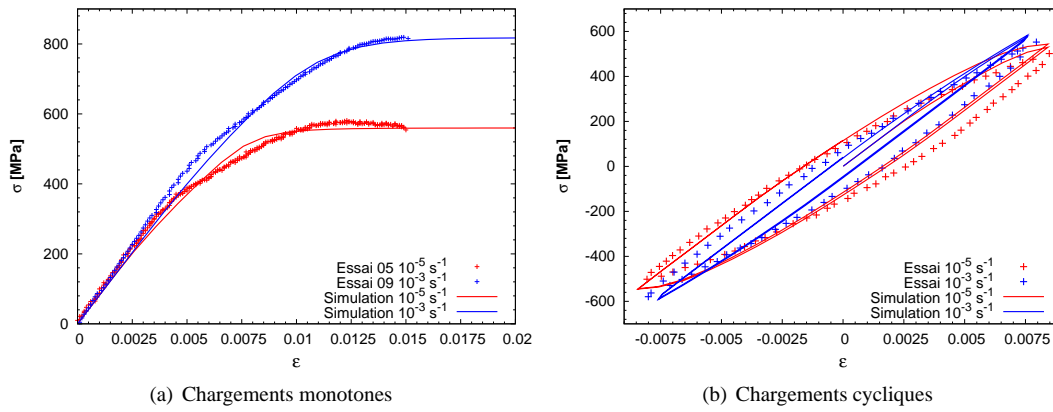


FIG. 3.9. Identification des paramètres des systèmes octaédriques de chacune des phases à 950°C à partir d'essais suivant $\langle 001 \rangle$ aux vitesses de sollicitation de $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. Les résultats expérimentaux en écrouissage cyclique sont issus de [de Bussac 92].

de grandeur à l'aide de l'équation d'Orowan qui lie la cission résolue à la distance entre obstacles :

$$\tau_{\text{orowan}} = \frac{C_{44}b}{d} \quad (3.2)$$

avec b la norme du vecteur de Burgers et d la distance entre obstacles. Modélisons le comportement de la phase γ en considérant que la contrainte à 0.2% de déformation plastique est la somme d'une cission critique, liée aux frictions de réseau, et d'une contribution de type Orowan. Dans le cas de la phase γ massive, la contribution d'Orowan est nulle, et, d'après la figure 3.2, on a $\sigma_{0.2} \approx 200 \text{ MPa}$. Quand cette phase est dans l'AM1, d est égal, pour un système octaédrique, à $\sqrt{2}x$ la distance entre deux précipités (égale en moyenne à 100 nm dans le cas de l'AM1). En prenant $b = 0.254 \text{ nm}$ ([Diologent 02]), on obtient une contribution d'Orowan de l'ordre de 400 MPa, soit $\sigma_{0.2} \approx 600 \text{ MPa}$. Cette valeur est en accord avec la contrainte à 0.2% de déformation plastique que l'on peut lire sur la figure 3.10. Ce simple calcul nous permet de nous rassurer quand à la validité des paramètres déterminés par les calculs de microstructure.

La figure 3.10 suscite également quelques commentaires sur notre identification des paramètres matériau de la matrice et des précipités. Comme on peut le voir, nous avons choisi un écrouissage relativement lent pour la phase γ , caractérisé par un coefficient $d = 2500$, et au contraire très rapide pour la phase γ' ($d = 100000$). Ce choix est difficile à justifier physiquement. Quant à la viscosité, elle est du même ordre de grandeur dans les deux phases, ce qui n'est pas forcément très physique. On entrevoit ici l'un des défauts majeurs d'une approche du comportement des superalliages par homogénéisation. Les paramètres matériau de chacune des phases sont difficiles à déterminer et à justifier physiquement. D'ailleurs il n'y a pas unicité sur les paramètres matériau comme le montrent les identifications réalisées par d'autres auteurs [Espié 96, Nouailhas 97].

L'étude du comportement de l'AM1 par simulation à l'échelle de la microstructure permet d'obtenir des informations sur les champs locaux. On peut en effet localiser les zones où se concentrent les contraintes et la plasticité, et estimer l'importance de la multiaxialité. La figure 3.11 présente les champs de contrainte σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} sur la cellule élémentaire ainsi que la déformation plastique ε_{33}^p sur la microstructure et dans la matrice. Sur la figure 3.11(a), nous rappelons la définition des axes, le chargement appliqué étant suivant la direction $-z$. Les figures 3.11(b), (c) et (d) montrent que le champ de contrainte est relativement uniforme dans le précipité. Comme on peut le voir sur les figures 3.11(e) et (f) la déformation plastique est la plus forte le long des arêtes et dans les coins des précipités.

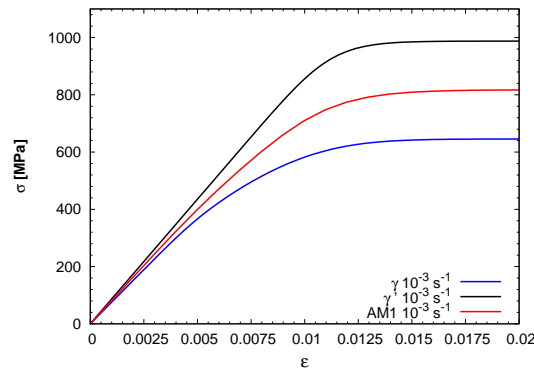


FIG. 3.10. Comportement monotone des phases γ , γ' et de l'AM1 à 950°C identifiés dans ce travail.

Identifications des coefficients des systèmes de glissement cubiques

Les coefficients des systèmes cubiques sont identifiés à partir d'essais suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$. Le tableau 3.3 montre que pour un chargement suivant cette orientation, ce sont les systèmes cubiques qui sont principalement activés. L'activation des systèmes octaédriques est également possible sous forte contrainte. Nous identifions donc les paramètres matériau relatifs aux systèmes cubiques avec les paramètres octaédriques identifiés précédemment. Nous rappelons que l'introduction du glissement cubique à l'échelle des phases peut paraître contestable puisque le glissement cubique est en fait un glissement octaédrique dévié [Bettge 99]. On peut cependant comprendre que l'écroutissage pour ce type de glissement est différent de celui présenté par du glissement octaédrique pur, ce qui justifie à nos yeux l'introduction des six systèmes cubiques fictifs. Enfin, pour cette orientation cristallographique, le chargement n'est plus symétrique par rapport aux plans $x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$ de la microstructure, ce qui nous oblige à effectuer les calculs sur la cellule élémentaire complète.

Nous avons identifié le comportement des phases γ et γ' suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ en nous basant à la fois sur des données expérimentales en traction obtenues dans le cadre du PEA EGISTHE (cf. chapitre 4, essai 10) et en écroutissage cyclique issues de [de Bussac 92] mais également à partir de la réponse du modèle macroscopique. Le modèle macroscopique utilisé pour cette identification est le modèle de comportement de l'AM1 identifié dans [de Bussac 92] et recalé, pour les chargements suivant $\langle 001 \rangle$, sur les données en traction monotone du PEA EGISTHE (paragraphe 2.4.1).

La figure 3.12 montre le résultat de notre identification des paramètres cubiques. Les coefficients identifiés sont présentés dans le tableau 3.4. En traction monotone, on obtient un bon accord entre les simulations à l'échelle de la microstructure et les simulations menées avec le modèle macroscopique. Il en résulte un bon accord avec l'expérience pour la vitesse de déformation de 10^{-5} s^{-1} . En revanche, la simulation sur-estime la contrainte pour la vitesse de déformation de 10^{-3} s^{-1} . Les comparaisons expérience/simulation sur les boucles stabilisées (figure 3.12(b)) montrent que les simulations sous-estiment la largeur des cycles pour les deux vitesses étudiées. De plus, on constate un écart d'environ 80 MPa sur la contrainte stabilisée entre expériences et simulations pour la vitesse la plus rapide.

La figure 3.13 représente la cission résolue macroscopique en fonction de la moyenne du glissement pour chacun des systèmes de glissement à $\varepsilon = 0.02$ pour la vitesse de 10^{-3} s^{-1} . Comme prévu par le critère de Schmid, trois systèmes de glissement cubique sont activés en traction suivant $\langle 111 \rangle$. Cependant ils ne s'activent pas tous avec la même intensité comme le prévoit le modèle macroscopique. Dans notre simulation, le système 14 contribue de manière plus importante à la déformation plastique que les systèmes 13 et 18.

La figure 3.14 présente les isovaleurs de quelques champs remarquables. Tout d'abord elle montre que le champ de contrainte σ_{33} est relativement homogène sur la microstructure, excepté aux coins des précipités. Ces contraintes importantes aux coins des précipités induisent localement l'activation de systèmes de glis-

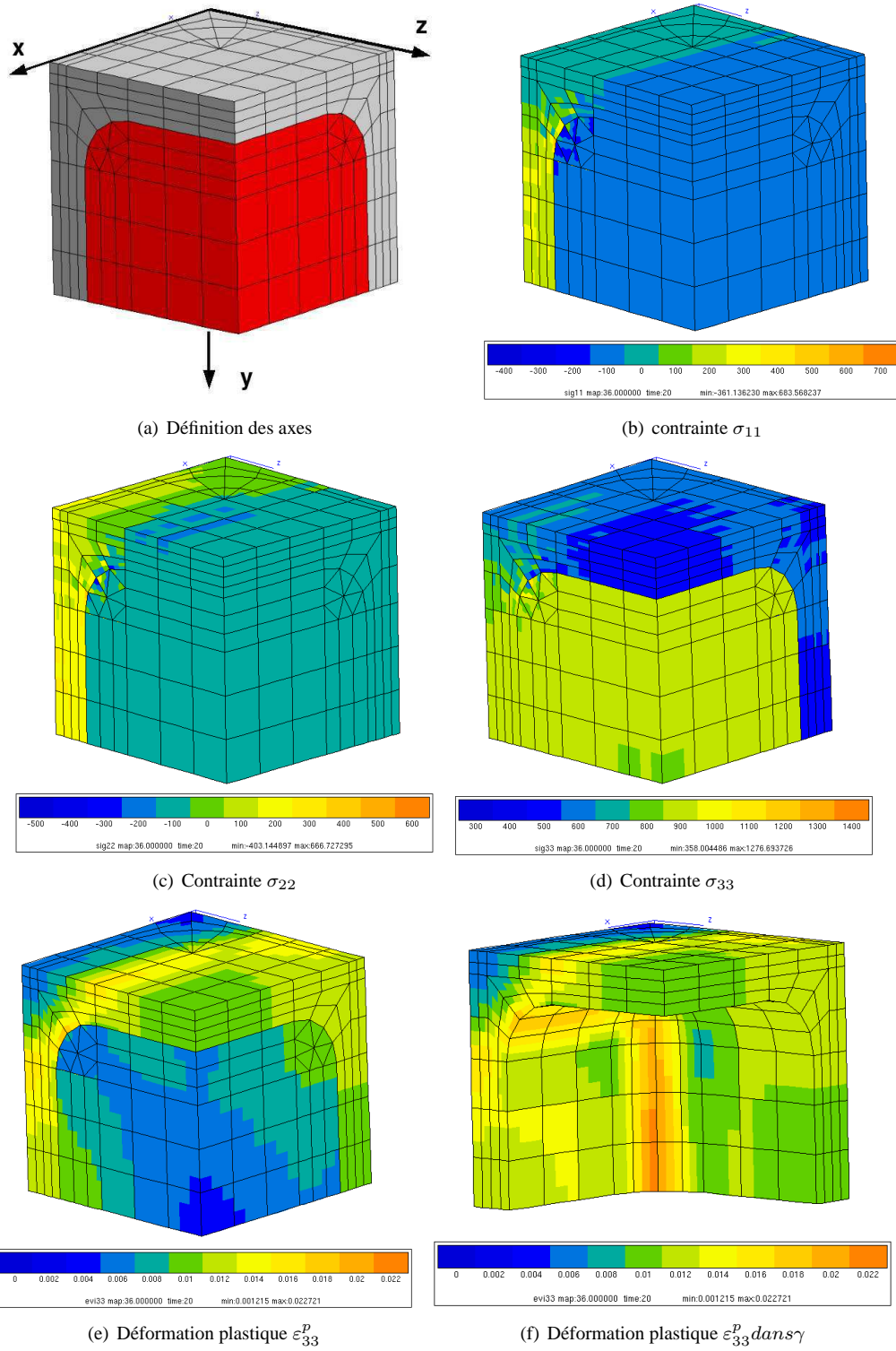


FIG. 3.11. Champs de contrainte et de déformation plastique locaux aux points de Gauss à 2% de déformation suivant [001] à $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

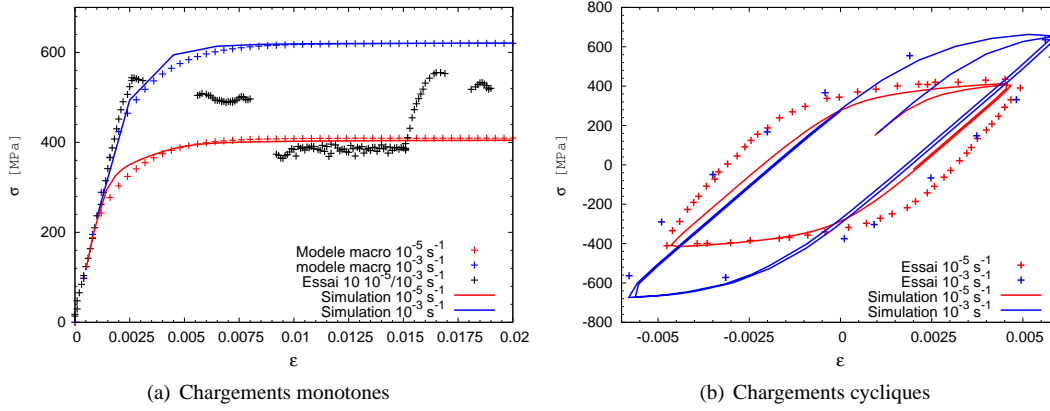


FIG. 3.12. Identification des paramètres des systèmes cubiques de chacune des phases à 950°C à partir d'essais monotones et cycliques suivant $\langle 111 \rangle$ à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

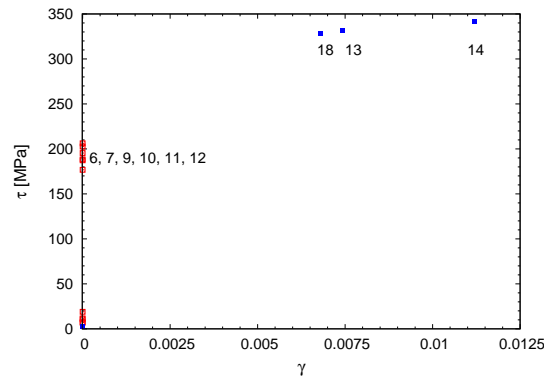


FIG. 3.13. Systèmes de glissement activés en traction suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $\epsilon = 0.02$.

Paramètre	Systèmes	r_0	c	d	k	n
		MPa	MPa		$\text{MPa} \cdot \text{s}^{1/n}$	
Phase γ	octaédriques	35	2.10^5	2500	750	5
	cubiques	20	5.10^7	10^6	750	5
Phase γ'	octaédriques	200	5.10^5	10^5	1000	5
	cubiques	150	5.10^6	10000	500	5

TAB. 3.4. Paramètres matériau des phases γ et γ' à 950°C.

sement octaédriques tels que le système 6 (figure 3.14(c)). Contrairement au cas de la traction suivant $\langle 001 \rangle$, les précipités se déforment moins plastiquement en traction suivant $\langle 111 \rangle$ comme le montrent les cartes de glissement sur les systèmes 14, 15 et 18. Le système 15 qui est non actif macroscopiquement est néanmoins activé localement, notamment aux coins des précipités.

Maintenant que nous disposons d'un jeu complet de paramètres matériau pour le comportement des phases, nous vérifions que l'hypothèse effectuée au paragraphe 3.3.3 est justifiée. Rappelons que nous avons négligé la contribution des systèmes cubiques pour un chargement suivant $\langle 001 \rangle$. Une simulation avec l'ensemble des systèmes de glissement a donc été réalisée. La moyenne du glissement cubique cumulé sur la microstructure est de 1.710^{-7} , contre 2.110^{-2} pour la moyenne du glissement octaédrique. De plus, aucune différence n'est visible sur la réponse macroscopique entre le calcul prenant seulement en compte le glissement octaédrique et le calcul avec tous les systèmes de glissement. L'hypothèse faite au paragraphe 3.3.3 est donc largement justifiée.

Comportement suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$

Un point important consiste à simuler par homogénéisation le comportement de l'AM1 suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$. En effet, au niveau macroscopique nous avons vu qu'une loi de Schmid sur les systèmes cubiques se justifie par les bons résultats obtenus pour cette orientation. Nous souhaitons donc vérifier que cette hypothèse est également valable à l'échelle de la microstructure pour les simulations par homogénéisation. La figure 3.15 présente la comparaison entre simulations avec le modèle macroscopique et simulations biphasées en traction monotone ainsi que la comparaison avec des résultats expérimentaux. En traction monotone, l'accord entre modèle macroscopique et simulations biphasées est aussi bon que celui montré pour les orientations $\langle 001 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. En revanche, la comparaison avec l'essai 12 (cf. chapitre 4) montre que la simulation à l'échelle de la microstructure ainsi que le modèle macroscopique surestiment fortement la contrainte.

Conclusions sur l'identification du comportement des phases γ et γ' dans l'AM1

Nous avons donc identifié un modèle de comportement pour chacune des phases. Le tableau 3.4 récapitule ce travail d'identification en donnant les paramètres des systèmes octaédriques et cubiques des deux phases. En conclusion, nous avons reporté sur la figure 3.16 les simulations en traction suivant les orientations $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ et $\langle 123 \rangle$ comparées aux résultats expérimentaux de [Poubanne 89]. La figure 3.16(a) présente les simulations effectuées avec le modèle macroscopique et la figure 3.16(b) les simulations à l'échelle de la microstructure. Globalement l'accord entre simulations et expériences est satisfaisant dans le sens où les simulations par homogénéisation donnent les bonnes tendances concernant l'anisotropie du comportement mécanique. On retrouve, dans l'ordre croissant de niveau de contrainte pour une même vitesse de sollicitation, les orientations $\langle 111 \rangle$, $\langle 123 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$. L'accord entre simulations et expériences n'est cependant pas parfait, même pour l'orientation $\langle 001 \rangle$. Une première raison vient du fait que les essais de [Poubanne 89] n'ont pas été effectués dans les mêmes conditions expérimentales et de nuance de matériau. Il est toujours délicat de comparer des résultats expérimentaux provenant de différentes campagnes expérimentales comme souligné dans l'annexe D. Pour les autres orientations, et notamment les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 123 \rangle$ activant simultanément systèmes octaédriques et cubiques, les différences ont été discutées au paragraphe précédent. Mais il est rassurant de constater que le modèle macroscopique ne donne pas forcément de meilleurs résultats.

Le travail d'identification étant validé sous chargement uniaxial, nous nous sommes intéressés aux limites de cette approche. Deux questions peuvent être posées :

- Que donnent les simulations à l'échelle de la microstructure sous chargement multiaxial ?
- Cette approche permet-elle de prévoir le comportement de l'AM1 pour des microstructures légèrement modifiées par rapport à la microstructure de référence ?

Ces deux points sont successivement abordés dans la suite du chapitre.

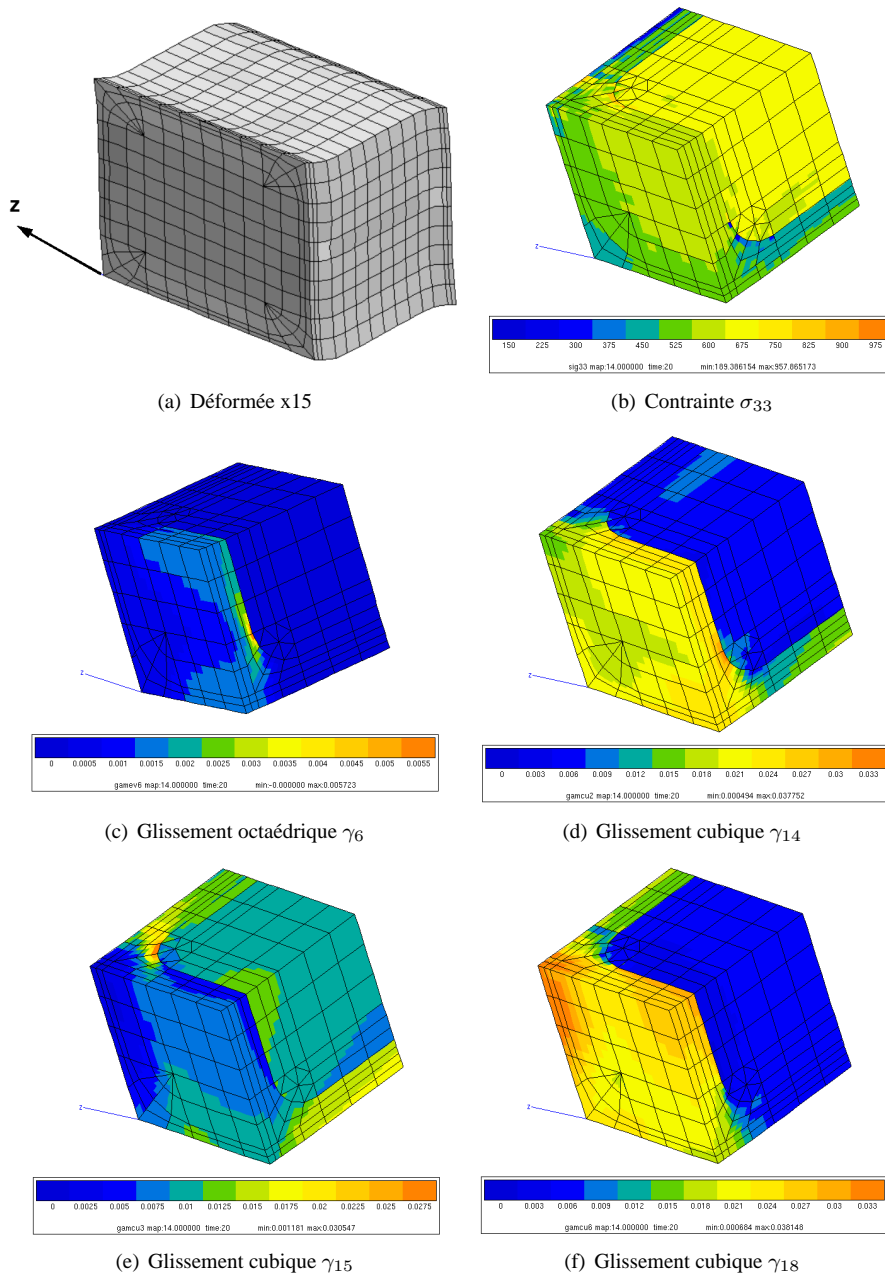


FIG. 3.14. Isovaleurs du champ de contrainte σ_{33} et des champs de glissement γ_6 , γ_{14} , γ_{15} , γ_{18} aux points de Gauss issues de la simulation de traction monotone à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ à $\epsilon = 0.02$.

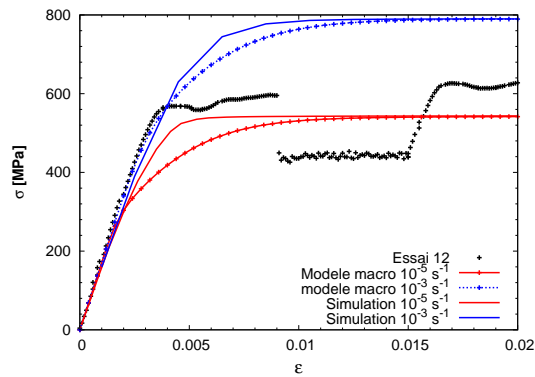


FIG. 3.15. Validation de l'identification d'un modèle visco-plastique à 950°C pour chacune des phases par comparaison avec des simulations d'essais monotones suivant $\langle 011 \rangle$ avec le modèle cristallin.

3.4 Simulation d'essais de torsion

La simulation du comportement en cisaillement constitue une validation de l'identification des paramètres visco-plastiques des deux phases. Nous commençons par comparer les simulations à l'échelle de la microstructure à la réponse du modèle macroscopique pour un chargement en cisaillement pur. La simulation des essais de torsion réalisés par Bonnand durant sa thèse [Bonnand 06] est ensuite comparée aux résultats expérimentaux.

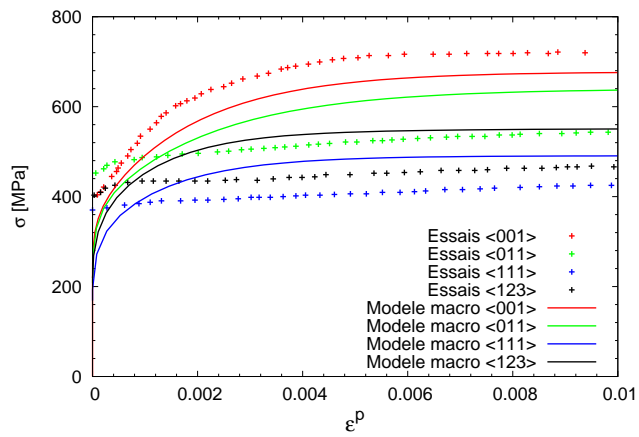
3.4.1 Simulation du comportement du matériau biphasé en cisaillement pur suivant $\langle 001 \rangle$

La réponse d'un monocristal en cisaillement pur suivant $\langle 001 \rangle$ dépend de l'orientation secondaire de l'échantillon [Nouailhas 93, Bonnand 06]. En effet, dans le cas d'un tube soumis à un chargement de torsion, on observe des bandes de déformation plus importantes dans les directions de type $\langle 011 \rangle$ que dans celles de type $\langle 100 \rangle$. La figure 3.17, issue de [Bonnand 06] montre qu'un modèle de comportement cristallin est capable de reproduire cette anisotropie observée expérimentalement [Nouailhas 93].

Nous avons donc effectué des simulations de cisaillement pur en déformation imposée suivant $\langle 001 \rangle$ en considérant les deux orientations secondaires $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$. Les résultats des simulations sont comparés à la réponse du modèle macroscopique (figure 3.4.1). Cette figure montre un bon accord entre les deux types de simulations pour l'orientation secondaire $\langle 001 \rangle$. En revanche le comportement suivant l'orientation secondaire $\langle 011 \rangle$ est mal reproduit par la simulation du matériau biphasé. Celle-ci surestime fortement la contrainte par rapport au modèle macroscopique. En d'autres termes, l'anisotropie en cisaillement est mal reproduite par nos simulations du matériau biphasé. Cette différence est surprenante étant donné que nous avons identifié les paramètres matériau des deux phases en partie à partir de simulations effectuées avec le modèle macroscopique.

En cisaillement pour l'orientation secondaire $\langle 100 \rangle$, quatre systèmes de glissement cubiques sont actifs, les 15, 16, 17, 18. La déformation plastique se concentre dans la matrice ; le précipité reste globalement élastique (voir figure 3.19). La figure 3.20 compare les simulations en considérant la phase γ' élastique ou visco-plastique. La comparaison montre que les deux courbes sont superposées, ce qui montre bien que le précipité reste élastique durant la simulation d'un chargement de cisaillement.

Nous n'avons pas retrouvé dans nos simulations en cisaillement les problèmes évoqués dans [Nouailhas 97]. Les auteurs avaient mis en évidence la difficulté de reproduire avec le même jeu de paramètres le comportement en traction et le comportement en cisaillement. Ici, même si l'anisotropie est mal reproduite, les simulations du matériau biphasé donnent le bon ordre de grandeur sur les contraintes.



(a) Modèle macroscopique

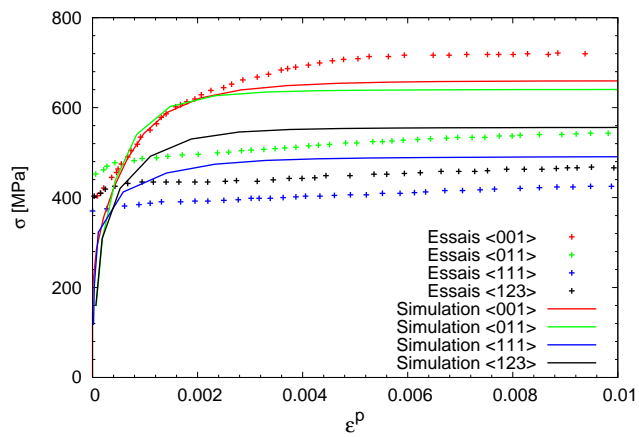

 (b) Simulations γ/γ'

 FIG. 3.16. Modélisation de l'anisotropie de comportement de l'AM1 à 950°C pour une vitesse de 10^{-4}s^{-1} . Les données expérimentales sont issues de [Poubanne 89].

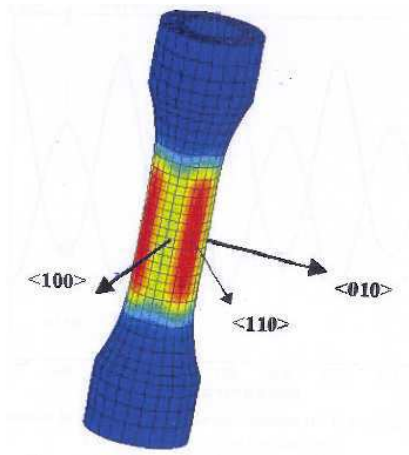


FIG. 3.17. Isovaleurs de la composante $\varepsilon_{\theta z}$ sous chargement de torsion d'un tube orienté suivant [001] obtenues par simulation avec le modèle cristallin de l'AM1, d'après [Bonnand 06].

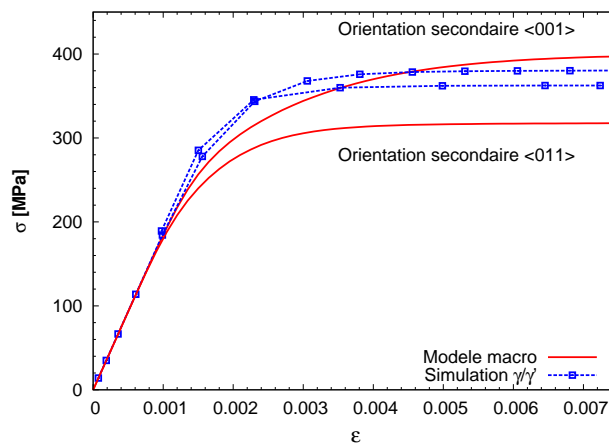


FIG. 3.18. Simulation de cisaillement pur et comparaison avec le modèle macroscopique.

3.4.2 Simulation d'essais de torsion sur tube

Dans sa thèse, Bonnand [Bonnand 06] a réalisé des essais de torsion sur tubes orientés suivant [001] à 950°C. Il a effectué deux types d'essais en couple imposé, des essais à 5 Hz et des essais avec des temps de maintien de 220 s. Nous avons simulé uniquement ces derniers. Les niveaux de chargement sont respectivement de 200, 330 et 400 MPa. Les mesures de déformations locales sont faites à l'aide d'un extensomètre dont la position angulaire est non maîtrisée mais connue. L'orientation de l'extensomètre est respectivement de -39° , -25° et 39° par rapport à la direction [100].

L'anisotropie mise en évidence au paragraphe précédent nous amène à effectuer les calculs sur le tube complet à la suite de Bonnand. Pour des raisons de temps de calculs nous n'avons pas effectué les simulations à l'aide de la méthode des éléments finis imbriqués (EF²). Nous avons opté pour une approche mixant la loi de comportement macroscopique et le calcul à l'échelle de la microstructure comme dans [Nouailhas 96]. Le calcul sur le tube entier, en tenant compte de la désorientation par rapport à l'axe [001], est effectuée avec le modèle macroscopique. Ces simulations nous donnent accès aux champs de contrainte locaux au niveau des points de l'extensomètre. La figure 3.21 présente la valeur du cisaillement ainsi calculée pour chacun des trois cas de chargement envisagés. Ces champs locaux sont ensuite appliqués comme

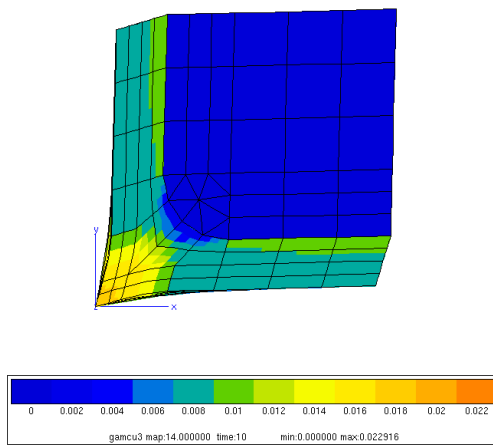


FIG. 3.19. Isovaleurs aux points de Gauss du glissement cubique 15 en cisaillement suivant $\langle 001 \rangle$ pour l'orientation secondaire $\langle 100 \rangle$. Un facteur 10 est appliqué sur la déformée du maillage.

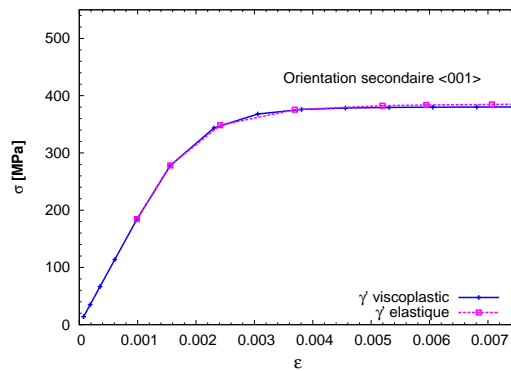


FIG. 3.20. Comparaison du comportement en cisaillement suivant l'orientations $\langle 001 \rangle$ du matériau dans le cas où les précipités sont élastiques et dans le cas où il sont visco-plastiques.

consignes au calcul à l'échelle de la microstructure.

La figure 3.22 présente les résultats des simulations d'essais de torsion sur tube. Sur ces figures nous avons également reporté la réponse du modèle macroscopique. On constate que les courbes simulées sont en accord avec les courbes expérimentales pour les chargement de 200 MPa et 330 MPa. Par contre, la simulation à l'échelle de la microstructure surestime fortement la déformation dans le cas du chargement de 400 MPa. Dans ce cas l'extensomètre est situé à un angle proche de 45° par rapport à $[100]$, donc proche de l'orientation $[110]$. Ce résultat n'est par conséquent pas étonnant puisque le paragraphe précédent a montré que nos simulations de microstructure reproduisent mal le comportement en cisaillement pour l'orientation secondaire $[110]$.

3.5 Effets d'échelle de la microstructure

Enfin, pour conclure cette partie consacrée à la modélisation du comportement de l'AM1 par homogénéisation périodique, nous reprenons des essais d'érouissage cyclique effectués par Espié [Espié 96] sur trois tailles de microstructure dont les caractéristiques sont reportées dans le tableau 3.5. Comme cela a été précisé, les paramètres visco-plastiques de chacune des phases ont été identifiés en prenant en compte

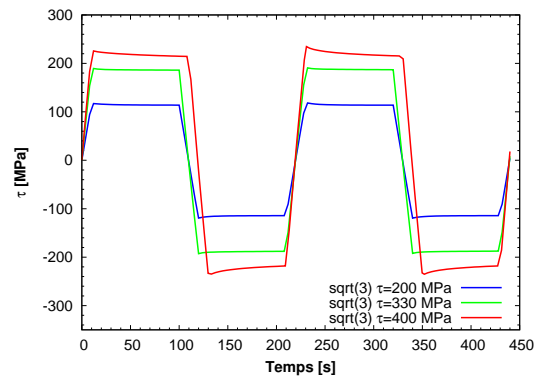


FIG. 3.21. Résultats des calculs de torsion sur tubes. La valeur du cisaillement au noeud 568 du maillage représentant la position de l'extensomètre est tracée en fonction du temps pour les trois cas de chargement avec temps de maintien testé dans [Bonnand 06].

le fait qu'elles sont dans le matériau biphasé, avec des dimensions et une morphologie données. Faisant varier la taille des couloirs et des précipités, il est peu probable que l'on obtienne un bon accord entre nos simulations et les essais d'Espé. Les calculs ont cependant été menés pour évaluer l'effet d'échelle induit par une légère modification des paramètres microstructuraux, sachant que le taux de phase est maintenu à peu près constant.

Microstructure	f	m	g
Taille des précipités [μm]	0.25	0.5	0.65
Taille des couloirs [μm]	0.104	0.135	0.170
Fraction volumique de précipités	57%	68%	67%

TAB. 3.5. Caractéristiques des microstructures testées dans [Espé 96].

La figure 3.23 compare essais et simulations. Le comportement des microstructures f et m est correctement reproduit. En revanche, les calculs par homogénéisation périodique prévoient une réponse trop dure d'environ 200 MPa pour la plus grosse microstructure. Celle-ci ne présente pourtant une taille supérieure que de 25% par rapport à la microstructure m. Nous mettons ainsi en évidence le deuxième inconvénient majeur de cette approche. Les coefficients matériau ne sont valables que pour une microstructure bien précise.

3.6 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à l'étude du comportement de l'AM1 à l'aide de simulations à l'échelle de la microstructure. Le comportement de chacune des phases de l'alliage a été identifié à partir du comportement du matériau biphasé. Ce chapitre a eu pour objectif de montrer les apports, mais aussi les limitations de cette approche.

Les simulations à l'échelle de la microstructure permettent, tout comme le modèle de comportement macroscopique, de reproduire l'anisotropie du comportement de l'AM1 en traction et en torsion. Elles permettent de plus d'avoir accès aux champs de contraintes et de déformations locaux. Enfin, elles permettent de reproduire des effets liés à la nature composite du superalliage. On pense à la non relaxation à zéro de la contrainte moyenne sous chargement cyclique dissymétrique. Ce point fait l'objet de l'annexe B.

Cependant, nous voyons deux limites de cette approche. La première concerne l'identification des paramètres matériau des deux phases. Nous avons proposé dans ce travail un jeu de paramètres qui permet de

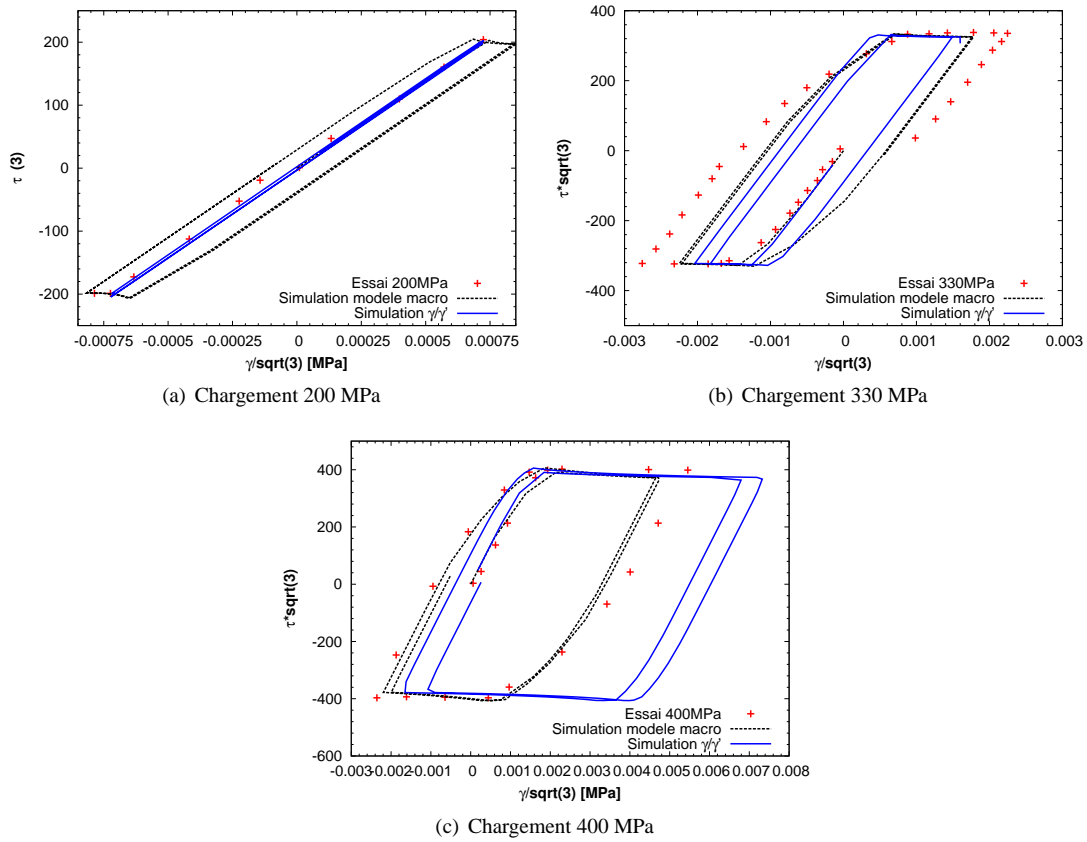


FIG. 3.22. Simulation des essais de torsion de [Bonnand 06] à l'aide de calculs de microstructure.

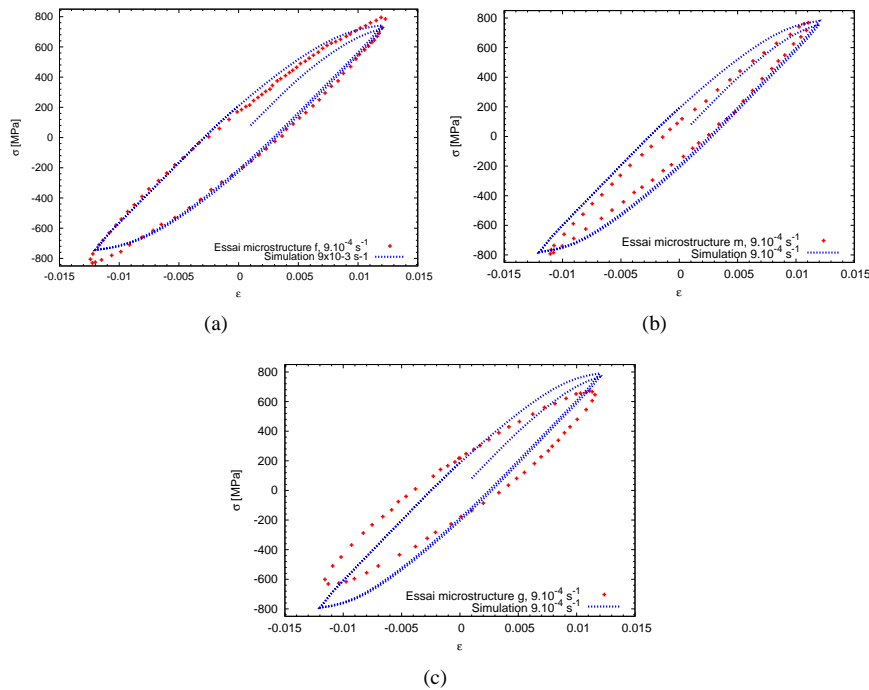


FIG. 3.23. Calculs périodiques sur différentes tailles de microstructures γ/γ' .

reproduire le comportement macroscopique de l'AM1. Néanmoins les valeurs des paramètres matériau ne sont pas uniques et on peut trouver plusieurs jeux de paramètres conduisant au même comportement macroscopique. Il faudrait avoir accès, soit par l'expérience, soit par des simulations plus fines, au comportement de chacune des phases dans le matériau biphasé. De plus, le jeu de paramètres matériau proposé est associé à une taille de microstructure donnée. Ceci constitue la seconde limitation de cette approche. Elle ne permet pas de rendre compte des effets d'échelle en plasticité. Comme nous l'avons déjà mentionné, les théories de mécanique des milieux continus généralisés tentent de reproduire ces effets. De tels modèles ont été étudiés dans le cadre de ce travail. Ils font l'objet du chapitre 6.

Chapitre 4

Etude expérimentale de la coalescence orientée

Sommaire

3.1	Introduction	56
3.2	Comportement des phases γ et γ'	56
3.2.1	Mécanismes de déformation plastique à haute température	57
3.2.2	Modélisation du comportement des phases γ et γ'	58
3.3	Simulation du comportement du matériau biphasé	58
3.3.1	Convergence au maillage	59
3.3.2	Comportement de l'AM1 à partir des propriétés des phases massives à 950°C	62
3.3.3	Identification du comportement de chaque phase dans l'alliage	63
3.4	Simulation d'essais de torsion	71
3.4.1	Simulation du comportement du matériau biphasé en cisaillement pur suivant $\langle 001 \rangle$	71
3.4.2	Simulation d'essais de torsion sur tube	73
3.5	Effets d'échelle de la microstructure	75
3.6	Conclusion	77

4.1 Introduction

Les aubes de turbine en superalliages monocristallins base nickel subissent d'importantes sollicitations mécaniques et thermiques. Ces conditions de fonctionnement induisent des évolutions microstructurales du matériau à haute température. Plusieurs phénomènes ont été mis en évidence par les industriels et chercheurs. Le premier phénomène est ce que l'on appelle classiquement la mise en radeaux des précipités. Il est notamment observé en fluage à haute température [Tien 71, Caron 83, MacKay 85, Fredholm 87, Ayrault 89]. La mise en radeaux est caractérisée par une coalescence orientée des précipités.

Ce vieillissement constitue le coeur des travaux menés durant cette thèse. Néanmoins, d'autres phénomènes de vieillissement peuvent intervenir. On pense par exemple à la précipitation des phases topologiquement compactes à haute température, étudiée en détail dans [Pessah-Simonetti 92]. Ce thème n'est pas abordé dans ce travail. Enfin, comme l'ont montré [Cailletaud 79, Cormier 06], un chargement anisotherme peut également avoir des conséquences sur la microstructure du matériau et son comportement mécanique. En effet, ces auteurs ont mis en évidence l'apparition d'une microstructure bimodale quand le superalliage subit une surchauffe puis une redescende en température rapide. La présence d'une fine précipitation dans les couloirs de matrice a un effet durcissant d'après [Cailletaud 79]. Ce phénomène peut se coupler à la mise en radeaux dans le cas de fluage anisotherme [Cormier 06]. Quelques essais ont été réalisés dans le cadre de ce travail en marge de l'étude de la mise en radeaux afin de tenter de quantifier l'influence de la reprécipitation dans l'AM1. Les résultats sont présentés en annexe G.

Ce chapitre aborde le phénomène de mise en radeaux, ou coalescence orientée, dans les superalliages monocristallins d'un point de vue expérimental. Une revue bibliographique est présentée dans la première partie du chapitre. La deuxième partie du chapitre décrit les essais réalisés dans le cadre de ce travail afin de caractériser les effets de la mise en radeaux sur le comportement mécanique. Les résultats expérimentaux sont présentés en deux temps. Dans un premier temps nous nous attachons à décrire les résultats des différentes conditions de vieillissement étudiées puis nous détaillons les effets de ces vieillissements sur le comportement mécanique de l'AM1.

L'étude bibliographique et l'étude expérimentale ont pour objectif de répondre aux deux questions suivantes :

- Quelles sont les mécanismes à l'origine de la mise en radeaux et quels sont les paramètres contrôlant les microstructures obtenues ?
- Quelles sont les conséquences des évolutions microstructurales sur le comportement mécanique du matériau ?

4.2 Etude bibliographique de la mise en radeaux

4.2.1 Illustration du phénomène

La mise en radeaux est un phénomène qui s'observe dans les superalliages à haute température et sous chargement mécanique. La microstructure cuboïdale présentée au premier chapitre évolue et on observe une coalescence orientée des précipités. La figure 4.1 présente l'évolution de microstructure de l'AM1 sous un chargement de fluage de 150 MPa à 1050°C. Cette sollicitation conduit à des précipités formant des plaquettes perpendiculaires à l'axe de traction. De telles évolutions morphologiques sont également observées sur les aubes de turbine en service comme l'ont montré [Drapper 89, Biermann 96]. Cependant, les microstructures peuvent être plus complexes du fait qu'elles subissent des chargements thermomécaniques complexes et multiaxiaux en contraintes, notamment à cause de la présence de canaux de refroidissement. Ces morphologies complexes ont poussé les auteurs à s'intéresser en premier lieu aux cas plus simples de mises en radeaux en fluage ou en fatigue uniaxiale, conditions de chargement pour lesquelles il existe une littérature abondante.

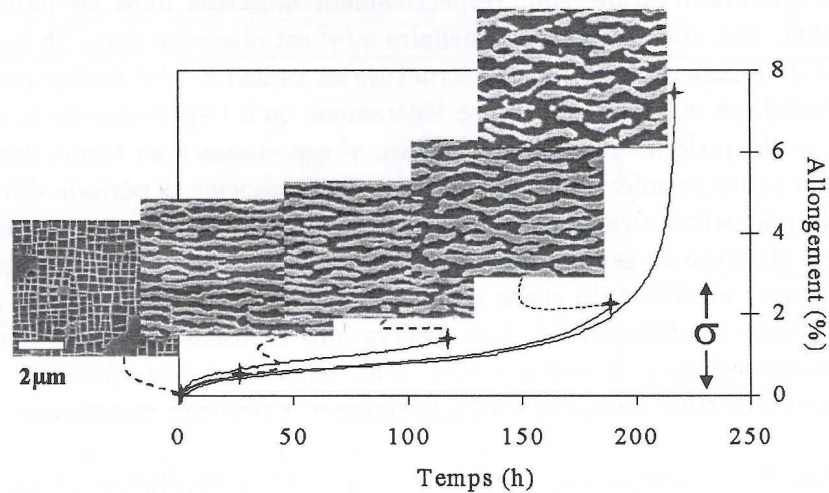


FIG. 4.1. Evolution de la microstructure de l'AM1 au cours d'un essai de fluage à 1050°C sous 150 MPa, d'après [Diologent 02].

Mise en radeau en fluage

L'essai de fluage est l'essai le plus couramment étudié en terme d'évolution morphologique des précipités. Il nous semble donc important de détailler la mise en radeaux dans ce cas. Une description approfondie peut être trouvée dans [Fredholm 87, Ayrault 89]. Ces auteurs ont étudié les mécanismes de déformation mis en jeu pendant un essai de fluage à haute température et leur corrélation avec l'évolution de la microstructure. La réponse d'un superalliage sous un chargement de fluage présente trois stades comme on peut le voir sur la figure 4.1 :

- Le fluage primaire correspond à une augmentation de la déformation plastique. A l'échelle microscopique cela se traduit par une augmentation de la densité de dislocations mobiles jusqu'à saturation et blocage de ces dislocations aux interfaces γ/γ' par création de réseaux. Parallèlement la microstructure évolue, et, à la fin du stade primaire, les radeaux sont formés ;
- Le stade secondaire est caractérisé par une vitesse de déformation constante. En effet, les réseaux de dislocations contribuent à limiter le nombre de dislocations mobiles. Les radeaux restent relativement stables pendant le fluage secondaire ;
- Le stade tertiaire correspond à une forte augmentation de la vitesse de déformation. La microstructure se déstabilise. Fredholm [Fredholm 87] relie le début du fluage tertiaire à l'inversion de connexité, la phase γ' devenant enveloppante. Ceci favorise son cisaillement par les dislocations comme cela a été montré par une étude comparative in-situ des comportements des microstructures cuboïdales et coalescées [Clément 06]. La ruine du matériau survient lorsqu'un nombre important de fissures sont présentes.

L'essai de fluage type présenté ci-dessus n'est en réalité pas applicable à tous les monocristaux de superalliage. Le comportement en fluage tertiaire varie suivant le matériau. Le MC2 par exemple ne présente pas d'inversion de connexité. Pour l'AM1, on peut distinguer deux phases durant le stade de fluage tertiaire. La première phase correspond à l'inversion de connexité. Elle pourrait être qualifiée de stade précurseur de l'endommagement ou de fluage accéléré. Puis, lorsque la déformation devient très importante, on se situe dans un stade d'endommagement durant lequel il y a amorçage et propagation de fissures.

Forces motrices sur la mise en radeaux

La compréhension des forces motrices régissant la mise en radeaux a fait l'objet de nombreux travaux. Classiquement, des approches en élasticité telles que celles proposées dans [Pineau 76, Nabarro 96,

Pollock 94, Kamaraj 03] mettent en évidence quatre facteurs influençant l'évolution de la microstructure :

- le signe du désaccord paramétrique ;
- la différence de constantes élastiques entre les deux phases ;
- le sens et la direction de la contrainte appliquée ;
- la température.

L'influence de la contrainte appliquée s'observe par exemple en comparant les microstructures issues d'essais de fluage traction et de fluage compression suivant $\langle 001 \rangle$. Le cas du fluage traction, nous en avons déjà parlé, conduit à la formation de plaquettes perpendiculaires à l'axe du chargement. On parle de coalescence de type N. En fluage compression, les précipités ont tendance à coalescer suivant des plans contenant l'axe de la contrainte (type P). Plus généralement, [Tien 71] présente une étude détaillée de la microstructure en fonction de l'orientation du chargement. Pour une contrainte orientée suivant l'axe $\langle 011 \rangle$, deux systèmes de radeaux parallèles aux directions $\langle 010 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$ coexistent. Enfin pour un chargement suivant $\langle 111 \rangle$, la microstructure évolue de façon isotrope. On peut en retenir que les radeaux ont tendance à se développer dans les plans de type $\{001\}$. Ces résultats généraux se retrouvent pour la plupart des superalliages industriels.

L'effet d'états de contraintes plus complexes a également été étudié. Karamaj [Kamaraj 98, Kamaraj 03] a effectué divers essais de fluage biaxiaux. Il a montré qu'un état de cisaillement pur parallèle à $\langle 011 \rangle$ produit des radeaux à 45° . En revanche un état de cisaillement pur parallèle à $\langle 001 \rangle$ ne produit pas de mise en radeaux. Pour un état de cisaillement combiné à de la flexion avec une contrainte de flexion supérieure à la contrainte de cisaillement, on retrouve les résultats classiques (radeaux perpendiculaires à l'axe de traction ou parallèles en compression). Nous avons parlé ici de la contrainte appliquée comme force motrice de la coalescence orientée. Nous verrons plus loin, dans le paragraphe traitant du rôle de la déformation plastique, que ceci n'est pas tout à fait correct.

Fredholm [Fredholm 87] a montré de plus une corrélation entre le signe du désaccord paramétrique et l'orientation des radeaux. Pour un misfit négatif (ce qui est le cas de la plupart des superalliages industriels), on observe une coalescence de type N en fluage traction suivant $\langle 001 \rangle$ et une coalescence de type P en fluage compression. Pour un alliage à misfit positif, ces résultats sont inversés. Ces résultats sont corroborés par les modèles élastiques tels que celui de Pineau [Pineau 76].

Enfin, la température joue un rôle majeur dans le phénomène de coalescence orientée puisqu'il fait intervenir la diffusion. Dans [Fredholm 87], des tests de fluage sur du CMSX-2, à 760°C et 750 MPa, sont menés jusqu'à rupture (temps de rupture : 1200 h, déformation à rupture : 18%). Les micrographies ne montrent qu'un début d'accolement latéral des précipités. Pour des temps à rupture comparables (environ 350 h), il faut, à 950°C , un temps de 70 h et une déformation de 0.3% pour observer une évolution microstructurale comparable, alors qu'à 1050°C , 1 h de fluage suffit. A 760°C , la cinétique est très lente. Il faut donc des temps très longs et/ou des déformations importantes pour provoquer une modification appréciable de la microstructure.

Mise en radeaux en fatigue et en fatigue thermomécanique

La mise en radeaux peut également être observée en fatigue à haute température [Hanriot 93, Espié 96, Frenz 96, Brien 96, Mughrabi 96] ou en fatigue thermomécanique [Kraft 95]. La figure 4.2, issue de [Frenz 96], présente l'évolution microstructurale qui peut être observée sous chargement cyclique à 980°C . Une vitesse de déformation relativement lente (10^{-5}s^{-1}) conduit à une coalescence très marquée des précipités suivant une direction à 45° de l'axe de chargement. Pour une sollicitation plus rapide de 10^{-3}s^{-1} , les auteurs observent un épaississement des couloirs de matrice ainsi qu'un début d'accolement des précipités. En revanche, il ne semble pas se dégager d'orientation préférentielle de la microstructure dans ce cas. On remarque de plus que l'évolution microstructurale observée pour la vitesse 10^{-5}s^{-1} s'accompagne d'un adoucissement marqué du matériau.

D'autres auteurs ont étudié les évolutions microstructurales sous chargements cycliques symétriques [Gabb 89, Glatzel 89]. Dans ces travaux, les vitesses de sollicitation sont de l'ordre de 10^{-3}s^{-1} . Les auteurs observent une augmentation de la taille des précipités accompagnée d'une modification morphologique. Les

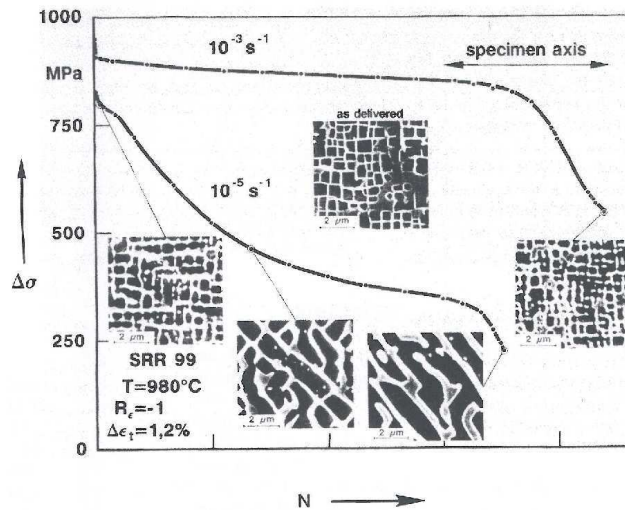


FIG. 4.2. Evolution de la microstructure durant un chargement cyclique alterné [Frenz 96].

précipités tendent à devenir plus arrondis. C'est également ce que l'on peut observer sur la figure 4.2.

Dans [Brien 95, Brien 96], une comparaison de la mise en radeaux en fatigue alternée et répétée est faite à 950°C dans l'AM1. Les essais présentés dans ces travaux sont conduits à une fréquence de 0.25 Hz, soit une vitesse de déformation de l'ordre de 10^{-3} - 10^{-2} s $^{-1}$. Dans les deux cas, une coalescence de type N est observée. Cependant un chargement alterné semble y conduire plus rapidement d'après les auteurs. Ainsi dans [Brien 96], des temps très courts sont relevés pour la mise en radeaux en fatigue alternée (environ une demi-heure à 950°C). Ces résultats semblent en contradiction avec les travaux cités précédemment, qui, pour des vitesses de sollicitation rapides ne montrent pas d'orientation privilégiée de la microstructure. Les travaux de Brien ont été effectués en microscopie par transmission, contrairement à Frenz et al. [Frenz 96] qui ont utilisé la microscopie à balayage. Le MET ne permettant pas l'observation de zones importantes du matériau, il est probable que localement Brien ait observé des radeaux de type N. La coalescence de type N a également été observée en fatigue répétée à 1100°C à 0.5 Hz dans [Zhou 07b].

Le cas de la fatigue thermomécanique est plus complexe. Une étude est proposée par Kraft [Kraft 95]. Suivant le cycle thermomécanique subi par le matériau, ils observent des radeaux de type N ou de type P. Par exemple, un cycle thermomécanique durant lequel le cyclage mécanique et le cyclage thermique sont en phase conduit à des radeaux perpendiculaires à l'axe de la sollicitation. A contrario, un cycle thermomécanique déphasé génère des radeaux de type P. L'orientation des précipités dépend donc de la nature du chargement, tension ou compression, durant la phase chaude du cycle thermique. Une fine précipitation de phase γ' est également observée dans les couloirs de matrice. Elle est due aux variations de fraction volumique de précipités entre la température la plus basse et la plus élevée, respectivement 600°C et 1100°C dans [Kraft 95].

4.2.2 Influence de la plasticité

Au paragraphe précédent, nous avons parlé de l'influence de la contrainte de fluage sur l'évolution morphologique des précipités. Cette section décrit plus précisément le rôle du chargement mécanique. Un chargement mécanique induit de la plasticité dans les couloirs de matrice γ . Un certain nombre d'auteurs ont mis en évidence de manière expérimentale le rôle des dislocations sur la mise en radeaux [Fahrman 96, Véron 97, Matan 99]. Un premier chargement de fluage à basse température, typiquement 850°C, est appliqué. Dans un deuxième temps, les échantillons pré-déformés sont placés à haute température, aux alentours de 1000°C, sous charge nulle. La microstructure résultante montre une coales-

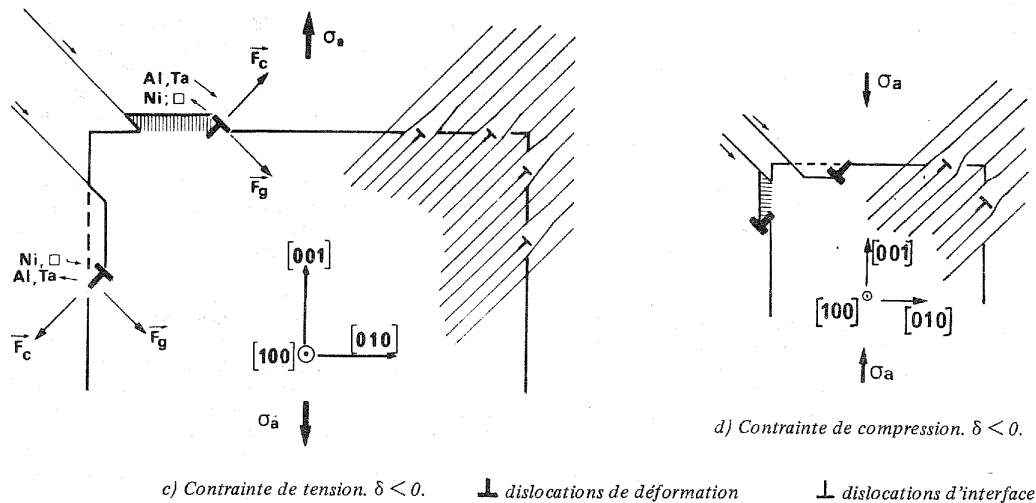


FIG. 4.3. Rôle des dislocations sur la coalescence orientée pour un alliage à misfit négatif. Suivant le sens d'application de la contrainte, les contraintes de cohérence sont relaxées par les dislocations dans les couloirs horizontaux ou verticaux. D'après [Carry 81].

cence des précipités, dont l'orientation dépend du pré-chargement appliqué. Ainsi, dans [Fahrman 96], un pré-chargement en fluage traction conduit à une microstructure coalescée de type N alors qu'un pré-chargement en fluage compression génère des radeaux de type P. Enfin, un échantillon soumis à un pré-chargement en traction puis en compression révèle une coalescence sans direction préférentielle. Ces évolutions sont visibles même pour des temps de maintien à haute température relativement courts (typiquement 1h dans [Fahrman 96]) pour lesquels la mise en radeaux en fluage n'a pas le temps de se mettre en place. Les auteurs en concluent que la plasticité influe sur la cinétique de mise en radeaux.

Une explication du rôle des dislocations sur l'évolution morphologique des précipités est proposée dans [Carry 81]. Deux types de dislocations sont présentes durant un essai de fluage. Un réseau de dislocations d'interface se forme afin de relaxer les contraintes de cohérence. Les contraintes engendrées par le désaccord paramétrique entre les phases γ et γ' sont en effet relaxées plastiquement lorsque la taille des précipités est trop importante. La figure 4.4 illustre les réseaux de dislocations d'interface. Les dislocations de déformation constituent le deuxième type de dislocations présentes dans le matériau. La contrainte appliquée fait propager des segments vis créant des dipôles coin dans les interfaces. Suivant le sens du chargement, traction ou compression, le signe du misfit et la face considérée, ces dipôles relâchent ou aggravent les contraintes de cohérence [Carry 81]. Ce phénomène est illustré par la figure 4.3. Pour un alliage à misfit négatif soumis à une tension suivant [001], les dislocations de déformation diminuent les contraintes de cohérence sur les faces perpendiculaire à l'axe [001] des précipités. Elles les augmentent sur les faces perpendiculaires à [100] et [010]. Par conséquent, les faces normales à [001] sont énergétiquement plus favorables que les autres et les précipités se développent perpendiculairement à la direction du chargement. En compression, ce sont les faces [100] et [010] des précipités qui sont favorisées. Des modélisations du rôle des dislocations sur les contraintes de cohérence ont été proposées, par exemple [Buffière 95, Véron 96, Brien 01b].

De nombreuses mesures du désaccord paramétrique pendant un essai de fluage confirment les calculs et modèles présentés au paragraphe précédent. [Biermann 95] notamment ont constaté que l'écart paramétrique des superalliages monocristallins à température ambiante devient anisotrope après une déformation en fluage à haute température. Le misfit devient légèrement négatif dans la direction perpendiculaire à la contrainte, ou en d'autres termes dans le plan des radeaux, et positif dans la direction parallèle à la contrainte, ou perpendiculairement aux radeaux. Cette anisotropie résulte des dislocations présentes aux interfaces γ/γ' . Ces mêmes mesures de désaccord paramétrique ont également été effectuées à chaud sur des superalliages préalablement déformés en fluage, sur de l'AM1 [Royer 98, Royer 01] ou du MCNG

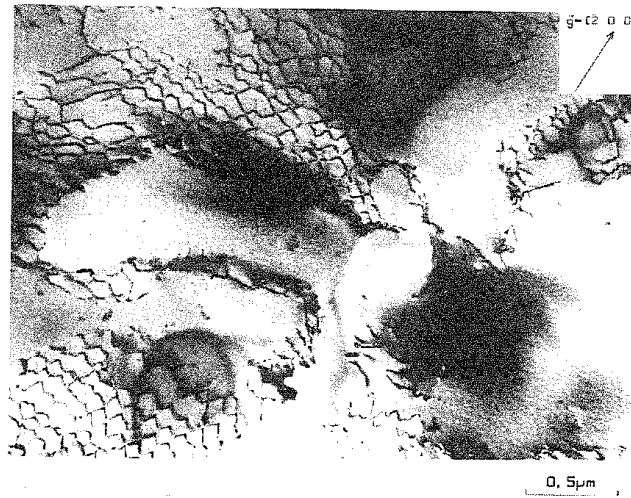


FIG. 4.4. Réseau de dislocations formé en fluage à 1050°C sur l'alliage 221 d'après [Fredholm 87].

[Diologent 02]. Ces mesures permettent d'approcher des valeurs de misfit pendant l'essai (figure 4.5).

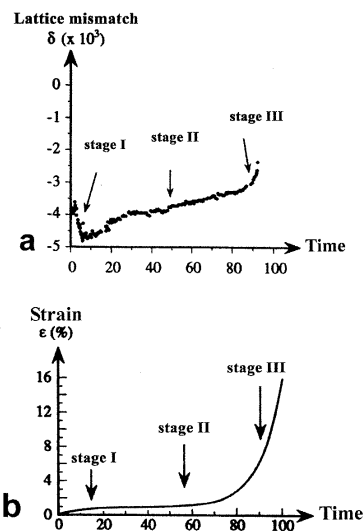


FIG. 4.5. Evolution du désaccord paramétrique parallèlement à l'axe de chargement et de la déformation pendant un essai de fluage [Royer 01].

La mise en radeaux est néanmoins possible sans plasticité. Dans [Racine 95], une étude approfondie des premières heures de fluage est menée. A 1050°C sous 100 MPa, elle montre que dans les cas où l'évolution morphologique est déjà engagée, des zones sans dislocations peuvent néanmoins présenter une coalescence notable. Les précipités semblent donc pouvoir changer de forme en l'absence de dislocations. Un essai original est proposé dans [Matan 99] sur la mise en radeaux à 950°C sur du CMSX4. La géométrie conique de l'éprouvette permet d'obtenir une variation de la contrainte de 150 à 300 MPa. Après avoir réalisé un essai de fluage d'une centaine d'heure sur une telle éprouvette, la microstructure est analysée, montrant des taux de mise en radeaux différents tout au long de l'éprouvette. Un recuit de 400 h à 950°C est mené à la suite duquel une nouvelle analyse d'image est réalisée. Cet essai met en évidence l'existence d'une contrainte seuil au dessous de laquelle les radeaux n'évoluent pas hors contrainte. Par conséquent, cet essai

met en évidence l'existence d'un régime de mise en radeaux élastique, très lent et d'un régime activé par les dislocations.

4.2.3 Influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique

Cette section aborde l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique des superalliages monocristallins. Premièrement, nous traitons de l'influence d'une pré-déformation en fluage traction ou compression, sur le comportement et la durée de vie en fluage. Dans un deuxième temps, l'influence sur le comportement cyclique et monotone est étudiée. Enfin, nous nous intéressons à l'influence de la coalescence orientée sur le comportement et la durée de vie en fatigue.

Influence sur le comportement en fluage

L'influence de pré-déformations en fluage traction ou compression a été notamment étudiée dans [MacKay 85, Ayrault 89]. Deux cas de figures ont été étudiés dans la littérature, le cas d'un pré-fluage en compression sur le comportement en fluage traction [Ayrault 89] et le cas inverse d'une pré-déformation en fluage traction sur le comportement en fluage compression [MacKay 85].

L'effet d'une pré-déformation en fluage compression se révèle endommageant comme on peut le constater sur la figure 4.6(a). En effet, le taux de pré-déformation augmentant, la durée de vie en fluage tension diminue. D'après [Ayrault 89], une perte de 80% sur la durée de vie en fluage traction à 1050°C, 170 MPa est observée pour une déformation initiale de 3.7%.

Deux résultats peuvent être tirés de la figure 4.6(a) :

- La déformation en fluage primaire est plus importante pour l'essai en tension pur. Une pré-déformation en fluage compression semble ralentir la cinétique au début du fluage. Ayrault [Ayrault 89] attribue ce phénomène à une réduction du libre parcours moyen des dislocations lorsque la microstructure se présente sous forme de plaquettes parallèles à l'axe de sollicitation. Une telle microstructure réduirait la déformation par glissement.
- En revanche, la durée du fluage secondaire est réduite par une pré-déformation en compression. Cette réduction est d'autant plus forte que la pré-déformation est importante ;

Quant à la microstructure obtenue, elle est présentée par la figure 4.6(b). Elle a un aspect très chahuté qui ressemble aux microstructures vieilles en fatigue alternée [Frenz 96]. Dans [Shui 06] est présentée l'évolution de la microstructure d'un superalliage préalablement déformé en fluage compression. Les auteurs montrent que les précipités, initialement sous forme de radeaux parallèles à la direction de la contrainte, s'inclinent progressivement jusqu'à un angle d'environ 45° par rapport à l'axe de sollicitation tel que l'on peut le voir sur la figure 4.6(b).

D'autres auteurs ont publié des résultats sur l'influence d'une pré-déformation en compression sur le fluage traction. Dans [Li 07], un échantillon de superalliage est pré-flué en compression à 1050°C sous 200 MPa pendant 6h puis testé en fluage à basse et haute températures. Le matériau pré-déformé est comparé au matériau initial en fluage à 800°C sous 600 MPa. Les auteurs [Li 07] retrouvent le même comportement que Ayrault [Ayrault 89], à savoir une cinétique ralentie en début de fluage mais une durée de vie plus courte pour le matériau pré-déformé. Cette durée de vie plus faible est attribuée au fait que les interfaces semi-cohérentes des précipités du matériau pré-déformé sont plus facilement cisailées que celles du matériau initial. En revanche, à 1000°C sous 200 MPa, le superalliage pré-flué montre une durée de vie plus longue que le matériau initial. Ce phénomène serait dû au fait que la montée des dislocations aux interfaces γ/γ' , mécanisme de déformation préférentiel à cette température, est ralentie. Ce résultat semble contradictoire avec les résultats de Ayrault [Ayrault 89]. Cependant, la pré-déformation appliquée dans [Li 07] est plus faible (elle vaut 0.32% contre 0.52% dans [Ayrault 89]). Comme souligné par [Ayrault 89], la durée de vie dépend fortement de la pré-déformation. Les résultats de [Li 07] semblent par conséquent indiquer que, si la pré-déformation est suffisamment faible, on peut tirer partie de la microstructure en plaquettes parallèles à la direction du chargement formée en fluage compression.

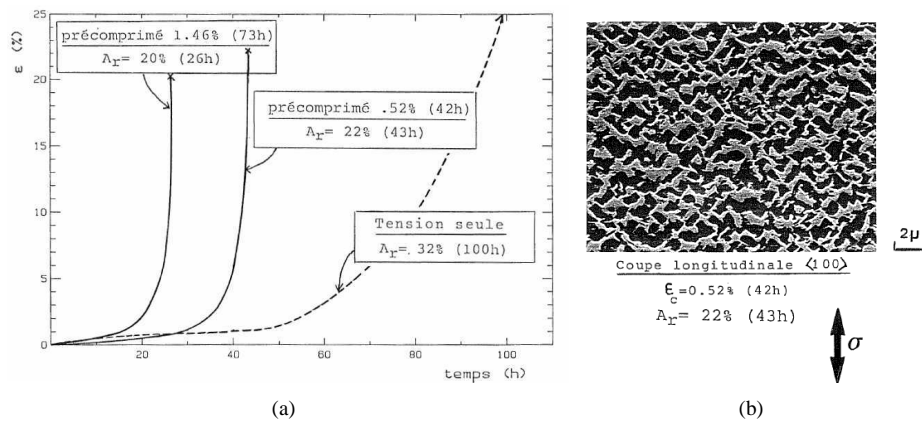


FIG. 4.6. Effet d'un pré-fluage compression sur le comportement de l'AM1 en fluage traction sous 170 MPa à 1050°C, d'après [Ayrault 89].

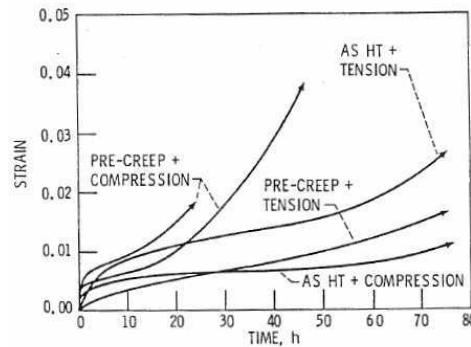


FIG. 4.7. Effet d'un pré-fluage traction sur le comportement en fluage compression du superalliage NASAIR 100 à 1000°C sous 207 MPa, d'après [MacKay 85].

L'influence d'une pré-déformation en fluage traction sur le comportement en fluage est étudiée dans [MacKay 85]. Ces auteurs montrent qu'un tel vieillissement conduit à des cinétiques de fluage plus rapides que celles observées sur le matériau non-vieilli ainsi qu'à des durées de vie plus courtes.

Influence sur le comportement monotone et cyclique

[MacKay 85] est la première publication à étudier l'influence de la microstructure sur la limite d'élasticité. Dans cet article, une diminution de la contrainte à rupture et de la limite à 0.2% d'une centaine de MPa est mise en évidence. Le mécanisme de déformation prédominant en traction est le cisaillement de la matrice γ et il est favorisé par une microstructure en radeaux dans laquelle les couloirs de matrice sont plus larges. [Pessah-Simonetti 92] trouve le même comportement pour l'alliage MC2.

L'étude la plus complète sur l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique que nous avons trouvée dans la littérature a été proposée par Espié durant sa thèse [Espié 96]. Il nous semble important de détailler ici les résultats obtenus durant ce travail. Différents types de vieillissements ont été mis en oeuvre sur l'AM1 à 1100°C, la mise en radeaux en fluage traction ou compression durant 20 h mais aussi l'évolution morphologique en fatigue. Les chargements utilisés en fatigue consistent en un cyclage à 10^{-3} s^{-1} avec un temps de maintien en traction ou en compression de 1 h. Le cyclage avec temps de maintien en traction conduit à des radeaux de type N et celui en compression à des radeaux de type P,

en accord avec les morphologies de vieillissement en fluage. De plus, deux amplitudes de déformations, conduisant à des microstructures plus ou moins fines, ont été étudiées ($\Delta\varepsilon=1.8\%$ et 2.0%).

Les comportements monotones et cycliques des différentes microstructures vieilles ont ensuite été évalués à 650°C et 950°C . A 650°C , la morphologie des précipités n'engendre aucun effet notable sur le comportement mécanique de l'AM1. En effet, comme nous l'avons vu au chapitre 1, à cette température la déformation plastique se produit en bandes de cisaillements. Les précipités, quelle que soit leur forme, sont cisailés.

En revanche, le vieillissement a un effet significatif à 950°C . Intéressons nous dans un premier temps aux microstructures issues d'un vieillissement en fluage. En traction monotone, les microstructures en radeaux N et P présentent un comportement moins résistant d'environ 125 MPa que la microstructure initiale en cubes. L'orientation des radeaux ne semble cependant pas jouer sur le comportement en traction. De plus, aucun effet de la mise en radeaux sur la viscosité n'a été mis en évidence entre 9.10^{-4} s^{-1} et 9.10^{-3} s^{-1} .

Pour un essai de traction compression, une différence entre radeaux N et P est mise en évidence pour les premiers stades de plasticité lors de la décharge, les radeaux N se plastifiant avant les radeaux P. Enfin, en écrouissage cyclique à déformation imposée croissante, le comportement adouci des radeaux par rapport aux cubes est retrouvé. Là aussi une influence de l'orientation des précipités est mise en évidence pour les amplitudes de déformation inélastique inférieures à 0.8% . Cette influence s'estompe à plus forte déformation, la déformation prenant le pas sur la microstructure. La limite élastique des radeaux N semble être plus faible que celle des radeaux P, elle-même plus faible que celle de la microstructure en cubes.

Comme signalé précédemment, une étude du comportement mécanique des morphologies issues de vieillissements en fatigue est également proposée dans [Espié 96]. Comme pour les radeaux obtenus par fluage, les microstructures N et P issues d'essais de fatigue à ($\Delta\varepsilon = 2.0\%$) montrent un comportement moins résistant que la microstructure en cubes. Cet adoucissement est encore plus prononcé que pour les radeaux obtenus par fluage. Le seuil de plasticité semble diminuer et l'adoucissement atteint environ 180 MPa à 2% de déformation imposée. En revanche, aucune influence de l'orientation des radeaux n'est observée en traction.

Les essais d'écrouissage cyclique sur les microstructure N et P obtenues par fatigue montrent une nette influence de l'orientation des radeaux. Le rôle de la plasticité introduite lors de vieillissements en fatigue est avancé pour expliquer les différences de comportement entre radeaux obtenus en fluage et en fatigue. Ces derniers présentent une densité de dislocations dans les couloirs de matrice, en plus des réseaux de dislocations d'interfaces présentes lors du fluage. Pour finir, Espié s'est penché sur l'influence de la taille des microstructures N et P obtenues en fatigue en diminuant la déformation imposée au cours du vieillissement. Il montre qu'en écrouissage cyclique, la microstructure de type P fine a un comportement très proche de celui de la microstructure non-vieillie.

Pour résumer, cette étude met en évidence une influence notable de la mise en radeaux sur le comportement mécanique de l'AM1 à 950°C , allant dans le sens d'un adoucissement. L'orientation des radeaux n'influe pas sur le comportement en traction monotone mais joue un rôle en écrouissage cyclique. Les microstructures obtenues en fatigue ont une résistance encore plus faible du fait de la déformation plastique cumulée mise en jeu lors du vieillissement. La figure 4.8 illustre ces résultats.

L'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique a également été étudiée à l'Onera dans le cadre d'un projet européen BRITE EURAM [Olschewski 95]. Comme le montre la figure 4.9, la mise en radeaux a peu d'effets sur le comportement mécanique à 1050°C . Cependant, l'amplitude de déformation imposée dans ces essais est relativement faible, ce qui peut expliquer la faible influence de la coalescence orientée mise en évidence.

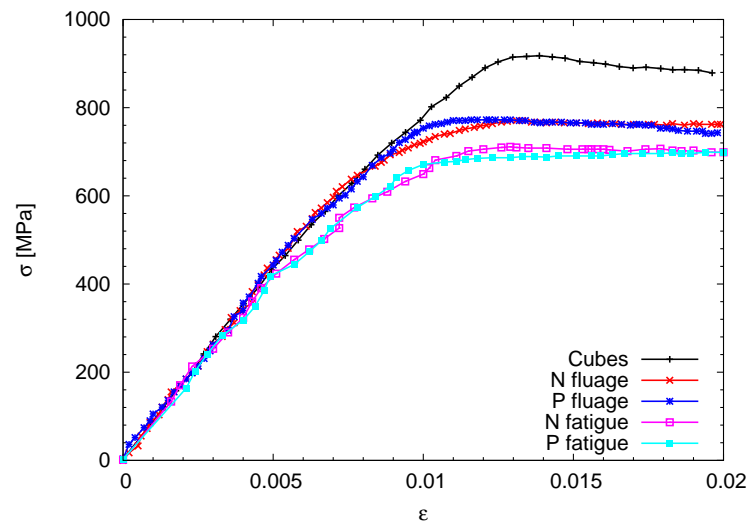
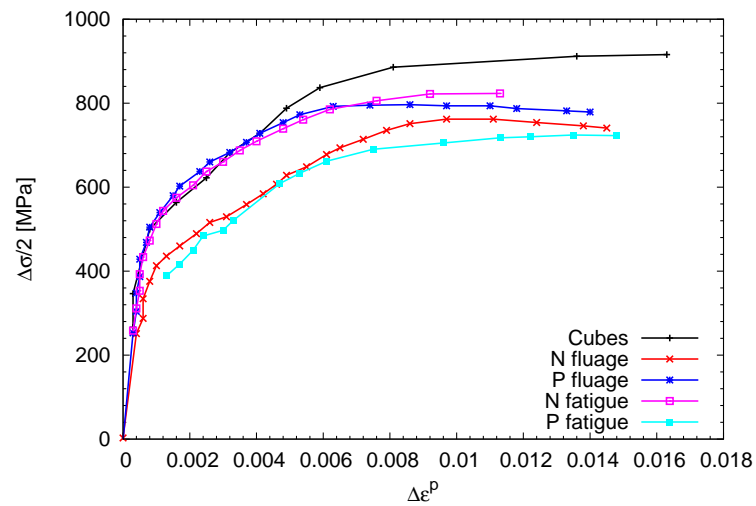
(a) Traction monotone à $\dot{\epsilon} = 9 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1}$ (b) Ecrouissage cyclique à $\dot{\epsilon} = 9 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1}$

FIG. 4.8. Influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ à 950°C d'après [Espié 96].

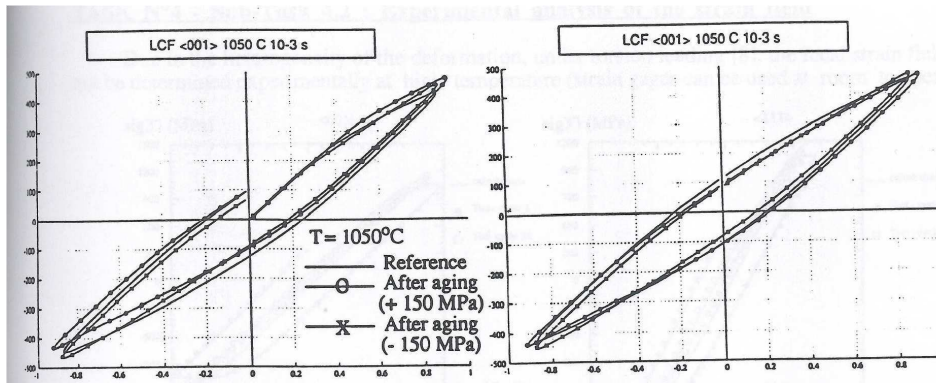


FIG. 4.9. Influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique à 1050°C , résultats issus du projet BRITE EURAM [Olschewski 95].

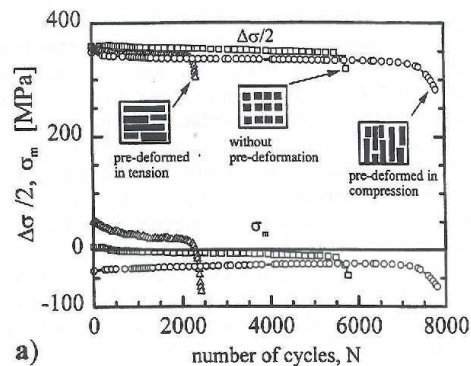


FIG. 4.10. Influence de la microstructure sur la durée de vie en fatigue d'après [Ott 99].

Influence sur le comportement en fatigue

Dans [Ott 99] la durée de vie en fatigue de trois types de microstructures est comparée : microstructure initiale en cubes, microstructures en radeaux de types N et microstructure de type P. Les auteurs trouvent une différence significative en terme de durée de vie des trois microstructures comme le montre la figure 4.10. Cette figure met également en évidence une légère différence en terme de réponse mécanique entre les trois microstructures pendant toute la partie de la durée de vie où le matériau n'est pas endommagé. Les courbes de durées de vie sont étayées de micrographies qui exhibent une direction de propagation de fissure fonction de la microstructure. Dans le cas de précipités cuboïdaux ou sous forme de radeaux de type N, les fissures se propagent perpendiculairement au chargement, la microstructure en radeaux étant plus défavorable que celle en cubes car dans ce cas la propagation ne montre aucun branchement. En revanche, les précipités en radeaux de type P obligent la fissure à se propager transversalement avec de nombreux branchements. La figure 4.11 illustre l'orientation de la fissure par rapport à la microstructure. Le même type de résultats a également été montré dans [Engler-Pinto 96], qui a de plus étudié le cas de la fatigue thermomécanique.

4.2.4 Conclusion de l'étude bibliographique

L'étude bibliographique qui a été menée permet de répondre aux questions posées en introduction du chapitre. La mise en radeaux est un phénomène diffusif qui se produit dans les superalliages base nickel sous chargement mécanique à haute température, globalement au dessus de 900°C . Les paramètres contrôlant la

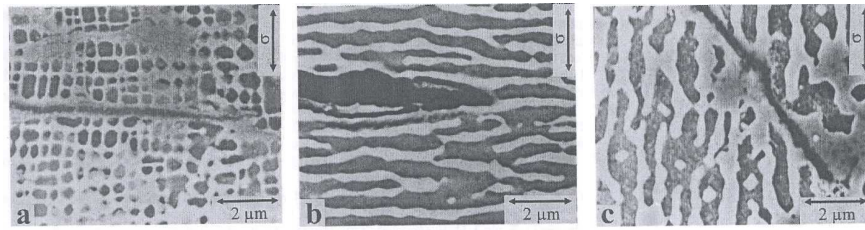


FIG. 4.11. Orientation de la fissure par rapport à la microstructure (a) précipités sous forme de cubes, (b) de radeaux de type N et (c) de radeaux de type P [Ott 99].

mise en radeaux sont donc le temps, la température et le chargement mécanique. Plus précisément nous avons vu que la plasticité dans les couloirs de matrice joue sur la cinétique de coalescence. Le terme de coalescence orientée est plus juste que celui de mise en radeaux car nous avons vu que suivant le chargement, fluage traction, fluage compression ou fatigue alternée, on peut obtenir des évolutions microstructurales très différentes.

La coalescence orientée des précipités a des conséquences sur le comportement mécanique et la durée de vie. De manière générale, elle a un effet adoucissant sur le comportement. Cet effet est bien marqué sur le comportement autour de 950°C. Par contre aucun effet n'est visible sur le comportement à basse température, typiquement 650°C, ou à très haute température (1050°C). De plus, elle conduit à une réduction de la durée de vie du matériau en fluage et en fatigue.

La suite du chapitre décrit les essais réalisés dans le cadre de cette thèse pour quantifier l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique.

4.3 Description des essais

Cette section est une présentation des essais de caractérisation des effets de la coalescence orientée sur le comportement mécanique. Les essais réalisés dans le cadre de ce travail ont pour objectif de recueillir les données expérimentales nécessaires à l'identification d'un modèle de comportement étendu dans lequel les effets de la mise en radeaux sur le comportement mécanique sont pris en compte. Leur principe est donc très simple. Les éprouvettes sont soumises à différentes conditions de vieillissement puis testées mécaniquement. Le premier paragraphe de cette section décrit le choix des conditions de vieillissement sur la base de l'étude bibliographique réalisée dans la section précédente. Le second décrit les essais de comportement complexes mis au point dans le but de pouvoir identifier sur une seule éprouvette tous les paramètres d'un modèle de comportement.

4.3.1 Matrice d'essais sur matériau vieilli

Comme l'a montré l'étude bibliographique, le vieillissement en fluage est un moyen privilégié de vieillissement du matériau. Tout comme dans [Espié 96], nous souhaitons comparer l'influence de l'orientation des radeaux N ou P sur le comportement de l'AM1. Les premiers vieillissements sont donc réalisés en fluage à 1050°C sous 150 et -150 MPa. Nous avons vu grâce à l'étude bibliographique que les paramètres contrôlant la coalescence orientée sont le temps, la température et le chargement mécanique. La bibliographie montre également que la microstructure en radeaux est relativement stable durant le stade de fluage secondaire [Diologent 02]. C'est pourquoi nous n'avons pas étudié l'influence du temps de vieillissement sur la réponse mécanique de l'AM1. Les durées de fluage sont choisies de façon à se situer au milieu du fluage secondaire. Nous nous sommes basés sur les données de [Diologent 02] pour calibrer la durée de fluage. Nous n'avons pas étudié le stade tertiaire car apparaît alors la notion d'endommagement. Ce point

fera l'objet de travaux ultérieurs à l'Onera.

En revanche, l'influence du niveau de contrainte et de la température sont à étudier dans le but de calibrer un modèle de comportement. Nous avons choisi 1050°C, 200 MPa pour l'étude de l'influence de la contrainte de fluage et 950°C, 300 MPa pour l'étude de l'influence de la température de fluage. Nous avons envisagé deux stratégies pour le dimensionnement de ces essais. La première consiste à se placer à une déformation plastique comparable à celle enregistrée après l'essai de fluage sous 150 MPa à 1050°C. La deuxième option est de tenter de se placer dans chaque cas au milieu du fluage secondaire. Or, pour l'influence de la température, on sait que la diffusion plus faible à 950°C doit être en quelque sorte compensée par une déformation plastique plus importante. Par conséquent nous avons retenu la deuxième option et calibrons le temps de vieillissement de façon à être au milieu du stade de fluage secondaire.

De plus, il est intéressant de se pencher sur l'influence de vieillissements en fluage suivant des orientations cristallographiques différentes de l'orientation $\langle 001 \rangle$ car à notre connaissance seule l'orientation $\langle 001 \rangle$ a fait l'objet d'une telle étude. Ainsi nous avons réalisé des vieillissements en fluage traction pour les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. L'étude bibliographique a également montré un adoucissement important du matériau lors de chargements cycliques alternés lents à haute température. Nous avons souhaité étudier ce point pour les trois orientations $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Les vieillissements en fatigue sont effectués en déformation imposée en $R_\epsilon = -1$ à une vitesse de 10^{-5} s^{-1} . Enfin, il est à noter que nous avons aussi étudié l'influence de la température à laquelle est effectué l'essai mécanique de caractérisation. Nous avons, à la suite du travail effectué à l'Onera dans les années 90 [Olschewski 95], étudié l'influence d'un vieillissement sur le comportement à 1050°C.

Durant les vieillissements à 1050°C, 200 MPa et 950°C, 300 MPa nous avons suivi la cinétique de mise en radeaux par l'intermédiaire d'un cyclage mécanique. Pour cela, nous effectuons un cycle en $R_\epsilon = 0$ à une vitesse de 10^{-3} s^{-1} avant puis au cours de l'essai de fluage. La comparaison de la réponse mécanique entre le cycle effectué avant l'essai de fluage et les cycles réalisés au cours de l'essai de fluage nous permettent de mesurer la cinétique de mise en radeaux. Ce suivi a pour objectif de vérifier l'hypothèse selon laquelle le comportement du matériau est stable pendant le fluage secondaire.

Essai	Eprouvette	Orientation	Conditions de vieillissement			Essai mécanique Température
			Température	Chargement	Temps	
06	X6684F	$\langle 001 \rangle$	Référence			950°C
07	X6686A	$\langle 001 \rangle$	1050°C	Fluage 150 MPa	72h	950°C
17*	X6685A	$\langle 001 \rangle$	1050°C	Fluage 200 MPa	12h	950°C
08	X6686C	$\langle 001 \rangle$	1050°C	Fluage -150 MPa	72h	950°C
14	X6686E	$\langle 001 \rangle$	1050°C	Fatigue 10^{-5} s^{-1}	24h	950°C
18*	X6685B	$\langle 001 \rangle$	950°C	Fluage 300 MPa	55h	950°C
16	X6686H	$\langle 001 \rangle$	Référence			1050°C
15	X6686F	$\langle 001 \rangle$	1050°C	Fluage 150 MPa	72h	1050°C
12	X2267A	$\langle 011 \rangle$	Référence			950°C
13	X2268B	$\langle 011 \rangle$	1050°C	Fluage 150 MPa	115h	950°C
20	X2270C	$\langle 011 \rangle$	1050°C	Fatigue 10^{-5} s^{-1}	24h	950°C
10	X5537B	$\langle 111 \rangle$	Référence			950°C
11	X5537D	$\langle 111 \rangle$	1050°C	Fluage 150 MPa	28h	950°C
19	X5538D	$\langle 111 \rangle$	1050°C	Fatigue 10^{-5} s^{-1}	24h	950°C

TAB. 4.1. Matrice d'essais de comportement sur matériau vieilli, les essais étoilés ont fait l'objet de suivi de la cinétique de mise en radeaux.

4.3.2 Essais de comportement complexes

Le nombre d'éprouvettes à notre disposition étant limité, nous avons dû mettre au point un essai de comportement complexe permettant d'identifier, sur une seule éprouvette, l'ensemble des paramètres d'un

modèle de comportement. Le deuxième chapitre de ce mémoire a introduit le formalisme des modèles de comportement phénoménologiques. Dans ce cadre, les paramètres suivants sont à identifier :

- La limite d'élasticité au travers du coefficients r_0 . Cette information est fournie par un essai de traction monotone ;
- La viscosité, ou en d'autres termes l'effet de la vitesse de chargement. Nous avons opté ici pour des changements de vitesse durant la traction de façon similaire à ce qui a été fait pour les essais 03 et 04 (chapitre 2) ; Les vitesses de chargement choisies sont 10^{-5} s^{-1} et 10^{-3} s^{-1} . Elles correspondent au domaine de vitesses classiquement étudié.
- L'écrouissage cinématique, caractérisé par les coefficients c et d , d décrivant la vitesse de saturation de l'écrouissage et c/d donnant la valeur à saturation ;

De plus, nous souhaitons avoir une information sur l'influence de la mise en radeaux sur une relaxation de longue durée notamment pour ce qui concerne les effets de restauration de l'écrouissage.

Ces considérations conduisent à l'essai type suivant :

- Un premier cycle avec changement de vitesse sur la première traction ;
- Un deuxième cycle avec toujours des changements de vitesses dans la partie du cycle en traction puis une relaxation ;
- Un troisième cycle identique au premier.

L'essai est réalisé en déformation imposée. La vitesse de base est $\dot{\epsilon}=10^{-3} \text{ s}^{-1}$. La valeur de la déformation maximale ϵ_{max} et le temps de relaxation t_{relax} sont adaptés à la température à laquelle l'essai est réalisé. En effet, le temps de relaxation est de 24 h à 950°C mais de seulement 2 h à 1050°C afin d'éviter que le matériau ne se mette en radeaux pendant l'essai de comportement.

Les essais de référence sur matériau non-vieilli sont présentés par la figure 4.12. Pour l'essai 06 suivant $\langle 001 \rangle$, nous avons effectué deux changements de vitesse en traction. Nous constatons sur la figure 4.12(a) que ce choix ne permet pas d'atteindre une contrainte stabilisée sur les portions à vitesse rapide. C'est pourquoi les essais réalisés par la suite ne comportent qu'un changement de vitesse.

Pour les trois essais à 950°C, les trois cycles réalisés se superposent relativement bien. Il est surtout intéressant de comparer les cycles 2 et 3 car une relaxation longue est effectuée durant le deuxième cycle. La déformation plastique et la température sont élevées. Tout les éléments sont donc réunis pour que l'on observe une mise en radeaux. Ce n'est a priori pas le cas à 950°C car nous n'observons pas de différence de comportement mécanique après la relaxation. En revanche l'essai 16 montre un adoucissement sur la portion à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ entre le cycle 2 et le cycle 3. Cet adoucissement n'est cependant pas visible sur les portions à vitesse rapide. Les micrographies réalisées après cet essai (figure 4.13) confirment un début d'évolution microstructurale, plus ou moins marqué suivant les régions de l'échantillon.

Les résultats des essais sont décrits en deux temps. Nous commençons par décrire les résultats des essais de vieillissement en terme de réponse mécanique et de microstructure. Il est à noter que les micrographies ont été réalisées à l'issue du vieillissement et de l'essai mécanique de caractérisation. Celui-ci s'effectuant à haute température, on ne peut pas écarter la possibilité d'une évolution microstructurale durant l'essai de comportement, quelle que soit la température. Nous avons souligné que la température de 1050°C associée à une sollicitation mécanique importante conduit à un début d'évolution morphologique des précipités après seulement environ 3h, ce que ne semblent pas montrer les essais de références à 950°C. Dans un deuxième temps, les résultats en termes d'influence sur le comportement mécanique sont présentés et analysés.

4.4 Vieillissements et observation des microstructures vieilles

4.4.1 Vieillissements en fluage

Le vieillissement de référence est celui effectué en fluage à 1050°C, 150MPa, pendant une durée de 72h (essai 07). La figure 4.14(a) montre un bon accord avec les résultats issus de [Diologent 02]. De plus, on constate sur la figure 4.14(b) que le vieillissement réalisé conduit au milieu du fluage secondaire comme

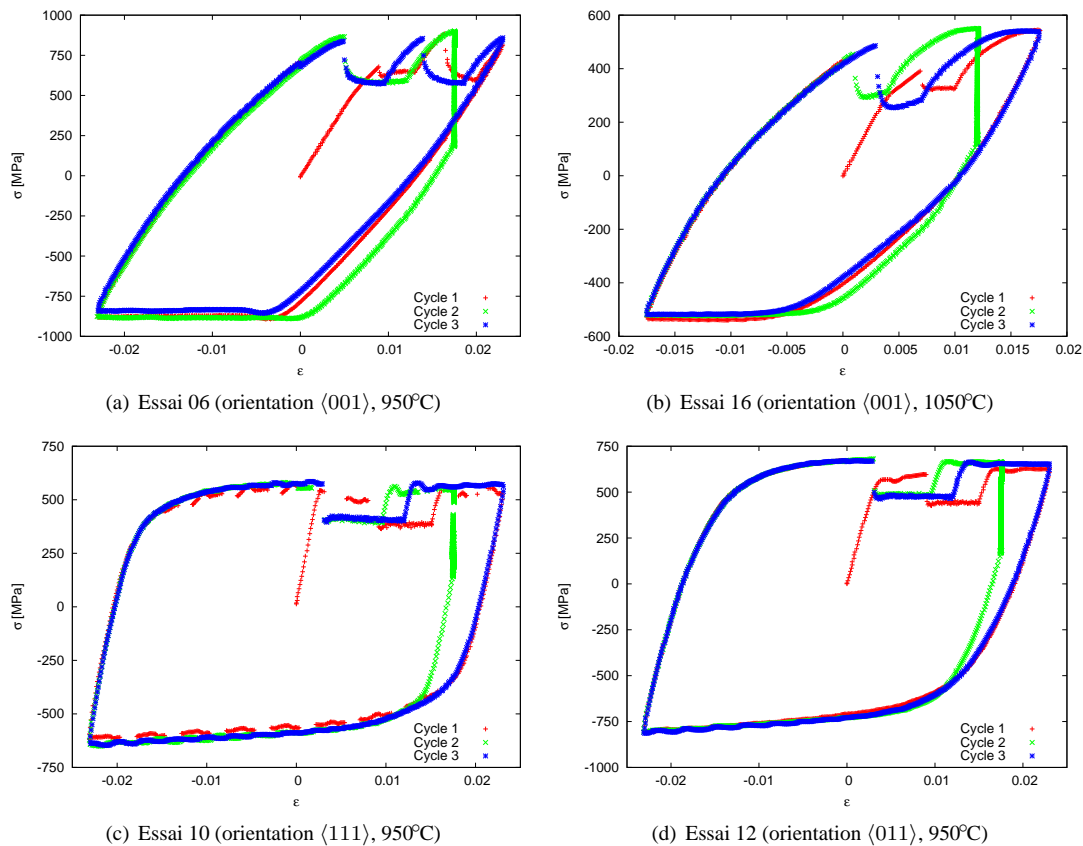


FIG. 4.12. Essais de comportement de référence sur matériau non-vieilli.

souhaité. Les micrographies (figure 4.15) réalisées après l'essai 07 montrent que la structure en radeaux est bien établie. Comme mentionné au cours de l'étude bibliographique, un chargement de fluage traction conduit à une microstructure sous forme de plaquettes normales à l'axe de sollicitation, ce que nous retrouvons ici.

Influence de la contrainte à 1050°C

Nous avons étudié l'influence d'une contrainte sur le comportement en fluage de l'AM1, tant en sens (traction ou compression, essai 08) qu'en intensité (essai 17). La figure 4.17(a) montre l'évolution de la valeur absolue de la déformation plastique en fonction du temps pendant les essais 07 et 08, pour lesquels la contrainte de fluage est respectivement de 150 et -150 MPa. Il est intéressant de constater que la déformation plastique est plus faible dans le cas du fluage compression. Nous retrouvons ici un résultat déjà mis en évidence dans [Ayrault 89]. La figure 4.17(b) compare fluage traction et fluage compression à différents niveaux de chargement. La différence de niveau de déformation plastique se retrouve en fluage sous 140 et 170 MPa. Elle est d'autant plus marquée que la contrainte de chargement est importante. En revanche, le sens de chargement, traction ou compression, ne semble pas affecter notablement la vitesse de fluage stationnaire.

Dans un deuxième temps, nous avons étudié l'influence de l'intensité de la contrainte sur le comportement en fluage. Comme signalé précédemment, le vieillissement a été interrompu après 4h afin de mesurer la cinétique de mise en radeaux. La courbe de fluage est présentée par la figure 4.19. On constate que le niveau de déformation diminue suite au cycle réalisé après 4h. En revanche la vitesse de déformation semble rester constante après l'interruption. Nous n'avons pas d'autres données expérimentales en fluage sous 200 MPa

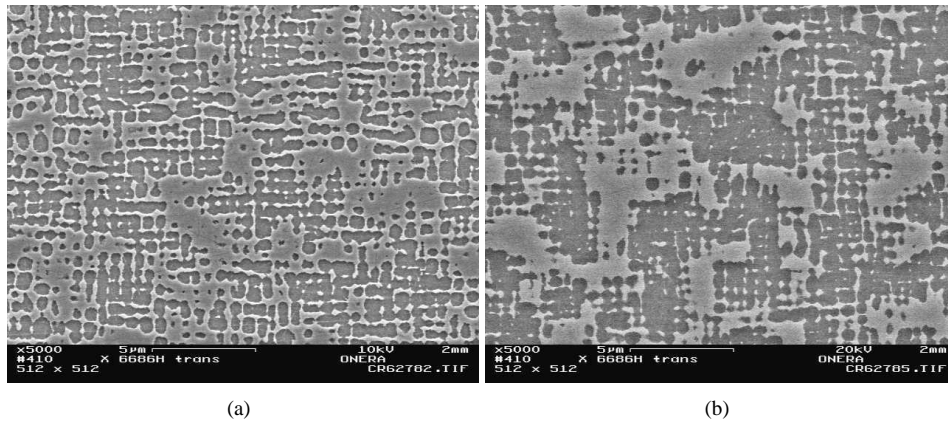


FIG. 4.13. Microstructure observée à l'issue de l'essai 16, sens travers (essai de référence à 1050°C). Suivant les zones, on observe un début de mise en radeaux des précipités plus ou moins marqué.

à 1050°C qui pourraient nous indiquer comment "recaler" les deux parties de courbes. Comme le montre la figure 4.19(b), nous avons choisi de recaler les données expérimentales de façon à avoir continuité de la déformation plastique entre les deux parties de la courbe. L'essai de fluage à 950°C au cours duquel le même type d'interruption a été réalisé et pour lequel nous disposons de données permet d'appuyer le recalage effectué.

La figure 4.19(b) compare les courbes de fluage des essais 07 et 17 ainsi que les données issues de [Ayrault 89]. On observe une forte influence de la contrainte de fluage sur la vitesse de déformation. Pour un chargement de 140 ou 150 MPa, le stade de fluage secondaire est bien net. A plus forte contrainte ce n'est plus le cas et on rentre rapidement dans le régime tertiaire. Cependant, les micrographies réalisées à l'issue de l'essai 17 montrent une mise en radeaux semblable à celle obtenue à l'issue de l'essai à 1050°C, 150 MPa (voir figure 4.20).

Influence de la température de fluage

L'essai 18, pour lequel un vieillissement en fluage à 950°C sous 300MPa a été réalisé, est présenté par la figure 4.21. Tout comme l'essai 17, cet essai a fait l'objet d'interruptions afin de mesurer l'évolution du comportement au cours du fluage. La figure 4.21 (a) présente la courbe de fluage brute. Les cycles effectués

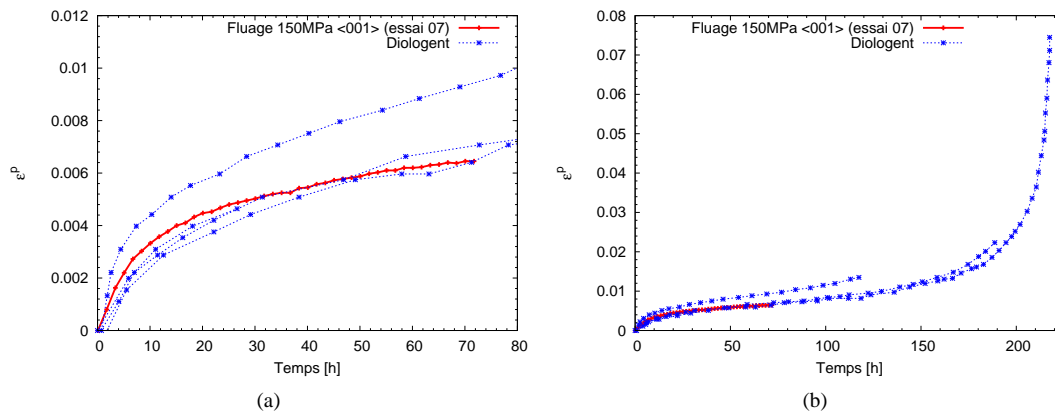


FIG. 4.14. Courbe de fluage à 1050°C et 150MPa, comparaison avec les essais de Diologent [Diologent 02].

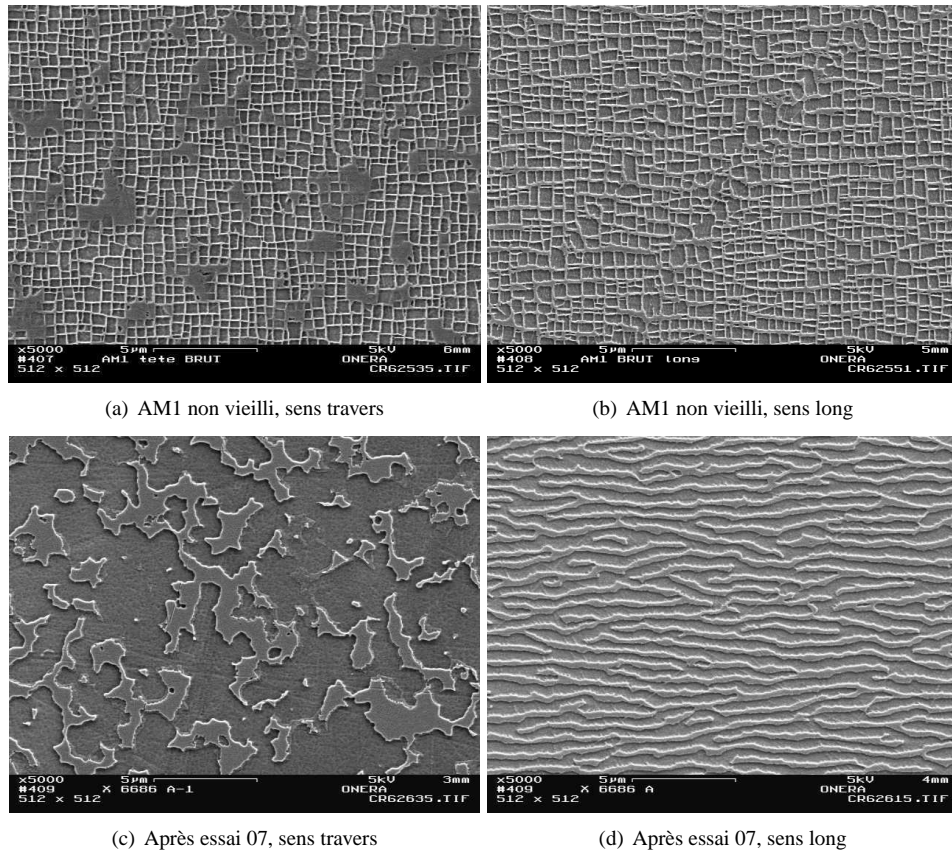


FIG. 4.15. Comparaison des micrographies de l'AM1 non vieilli et après un vieillissement en fluage traction sous 150 MPa à 1050°C.

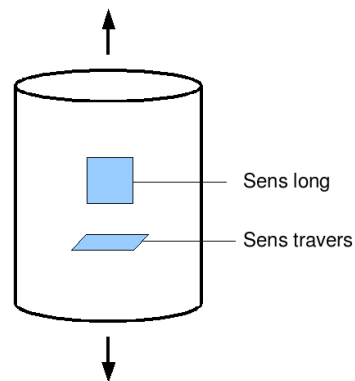


FIG. 4.16. Plans de coupe long et travers.

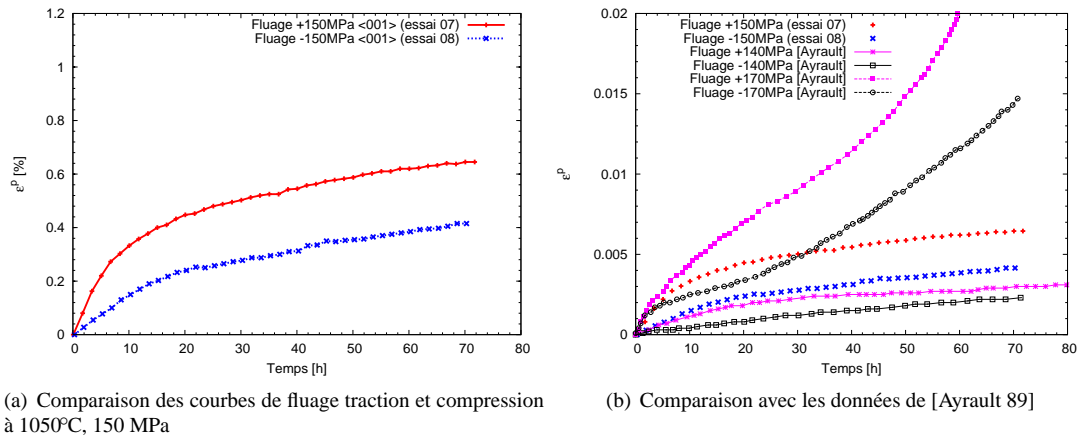


FIG. 4.17. Influence du sens de la contrainte en fluage à 1050°C.

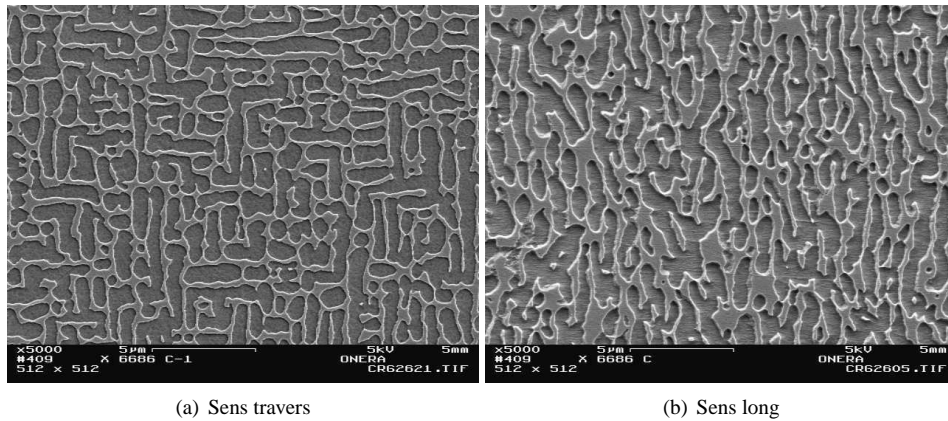


FIG. 4.18. Micrographies après fluage compression à 1050°C, 150 MPa (essai 08).

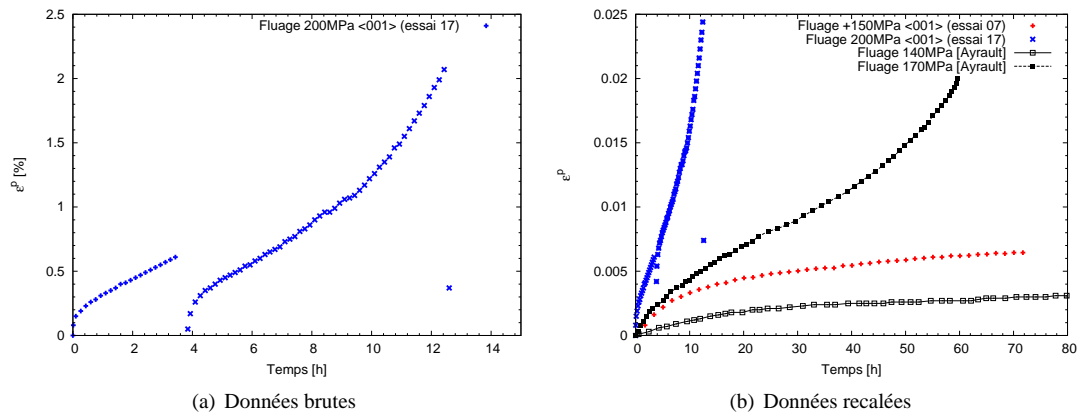
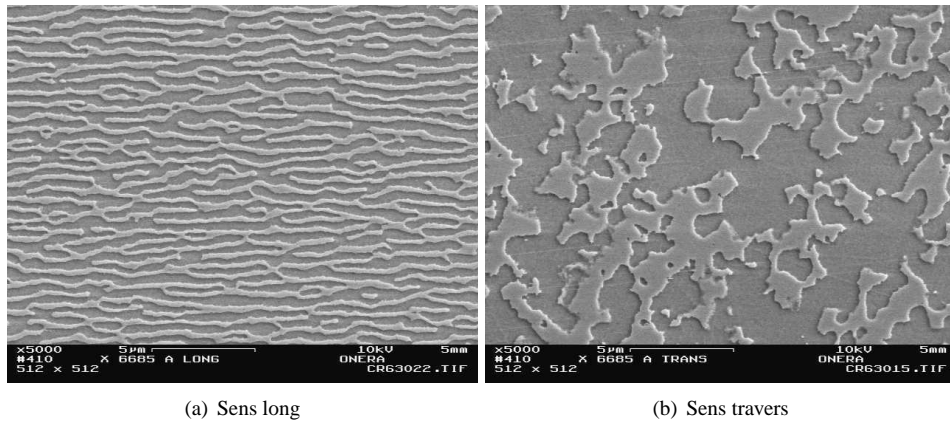


FIG. 4.19. Courbe de fluage à 1050°C, 200 MPa. La figure (a) présente les données de l'essai 17 brutes. Les données recalées sont comparées à la courbe de fluage sous 150 MPa (essai 07) et 140 et 170 MPa [Ayrault 89].



(a) Sens long

(b) Sens travers

FIG. 4.20. Micrographies réalisées à l'issue de l'essai 17 (vieillessement en fluage traction sous 200 MPa à 1050°C).

au cours du fluage affectent le niveau de déformation, comme précédemment à 1050°C sous 200 MPa. De plus, un arrêt accidentel de la charge et de la température s'est produit après 34h de fluage. On peut supposer que la microstructure du matériau n'a pas évolué pendant les 8h de coupure de l'essai puisque la température s'est brusquement arrêtée. Ces interruptions ne semblent pas affecter trop fortement la vitesse de fluage. En effet, un "recalage" du niveau de déformation après chaque interruption et du temps après 34h montre que la courbe obtenue est en bon accord avec un essai effectué sur le même matériau et dans les mêmes conditions [Diologent 02].

Contrairement au fluage à 1050°C sous 150 MPa, l'essai 18 ne présente pas de stade de fluage secondaire très marqué. La vitesse de déformation diminue aux alentours de 10h puis réaccélère après. Dans [Diologent 02], des observations de la microstructure et des structures de dislocations ont été réalisées après 5h et 50h de fluage. Après 5h, les précipités ont déjà presque entièrement coalescé. La mise en radeaux se poursuit entre 5h et 50h par un épaissement des couloirs de matrice. Ayrault [Ayrault 89] note également cette différence importante entre le fluage à 1050°C et 950°C. L'épaississement des couloirs de matrice à 1050°C se produit très rapidement pendant le fluage primaire et on observe une épaisseur des radeaux constante durant le secondaire. Comme le soulignent ces deux auteurs, à 950°C, la vitesse d'épaississement des couloirs est croissante durant tout l'essai. Enfin, d'après [Ayrault 89], à un taux de déformation égal, les radeaux produits à 950°C sont plus réguliers et plus rectilignes qu'à 1050°C.

Concernant les structures de dislocations, Diologent observe un cisaillement notable des précipités après 50h de fluage. Les réseaux de dislocations statiques sont également bien moins réguliers qu'à 1050°C. C'est d'après [Ayrault 89] la raison pour laquelle l'AM1 ne présente pas à proprement parler de stade de fluage secondaire à cette température.

Les micrographies réalisées à l'issue de l'essai 18 sont présentées par la figure 4.22. Elles montrent un état de mise en radeaux bien avancé. Néanmoins, des traces d'interfaces verticales sont visibles contrairement aux micrographies effectuées sur les échantillons flués à 1050°C.

Influence de l'orientation cristallographique

L'influence de l'orientation cristallographique sur le comportement en fluage a été étudiée à 1050°C sous 150 MPa. L'essai 13 correspond à un vieillissement en fluage suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$; l'essai 11 à un vieillissement en fluage suivant $\langle 111 \rangle$. Les courbes de fluage pour les orientations $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, et $\langle 111 \rangle$ sont comparées sur la figure 4.23.

Pour l'orientation $\langle 011 \rangle$, on observe une période d'incubation pendant laquelle le matériau ne flue pas ou très peu. Cette période concerne les 10 premières heures de fluage. Puis on observe un stade stationnaire

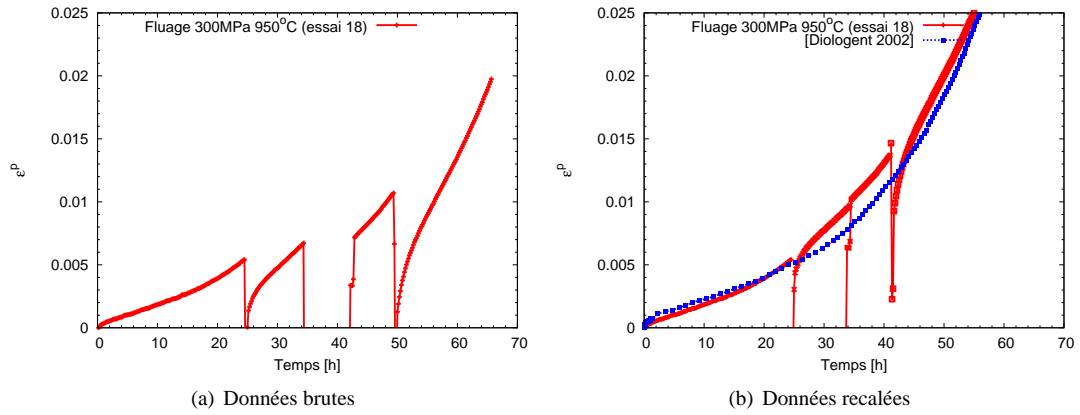


FIG. 4.21. Courbe de fluage à 950°C, 300 MPa comparée aux données de Diologent [Diologent 02].

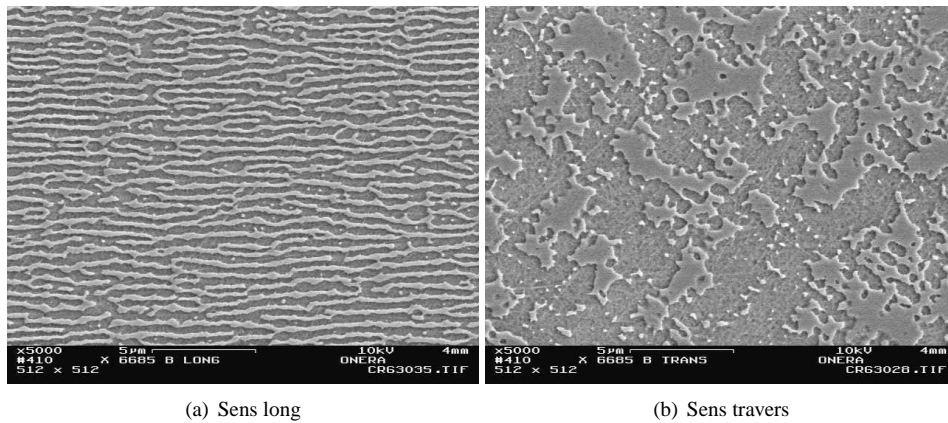


FIG. 4.22. Micrographies après fluage à 950°C sous 300 MPa (essai 18).

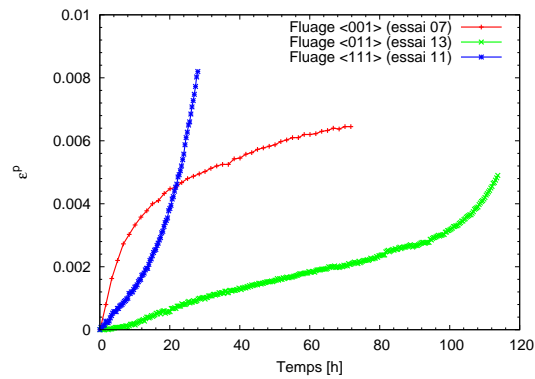
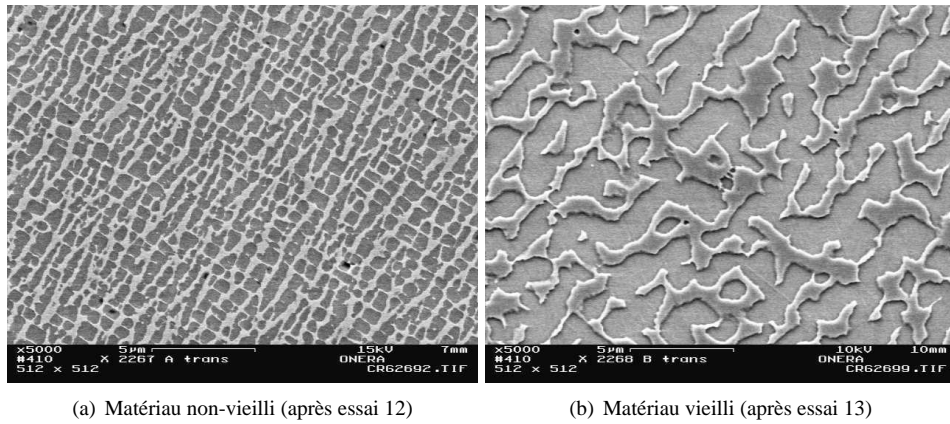


FIG. 4.23. Influence de l'orientation cristallographique sur le comportement en fluage à 1050°C sous 150 MPa.



(a) Matériau non-vieilli (après essai 12)

(b) Matériau vieilli (après essai 13)

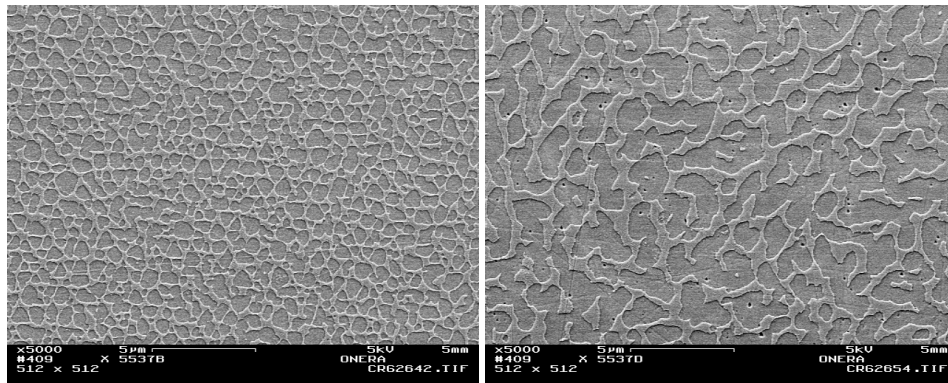
FIG. 4.24. Comparaison des microstructures non vieilles et vieilles en fluage à 1050°C, 150 MPa suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$.

bien marqué durant lequel la vitesse de déformation est égale à $3.3 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$. Après 100h de fluage la vitesse de déformation augmente rapidement, ce qui laisse penser que l'on entre dans le fluage tertiaire. Nous avons comparé nos données avec des données issues de la littérature sur l'influence de l'orientation cristallographique sur le comportement en fluage. Comme le montre Ayrault, la désorientation par rapport à l'orientation $\langle 011 \rangle$ influence fortement le comportement en début de fluage. Ainsi, pour une désorientation de 8° , une période d'incubation de 130 h est observée à 950°C sous 240 MPa alors que pour une désorientation de 14° aucune période d'incubation n'est observée. Cet écart engendre une grande dispersion sur la durée de vie à rupture de l'éprouvette en fluage suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$. La littérature met également en évidence le fait que l'anisotropie en fluage est d'autant plus prononcée que la température est basse [Ayrault 89, Sass 96]. La courbe de fluage suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ mesurée au cours de l'essai 11 met en évidence une déformation et une vitesse de déformation importantes, et supérieures à celles observées pour les orientations $\langle 001 \rangle$ et $\langle 011 \rangle$.

De manière générale, un chargement de fluage conduit à une coalescence des précipités parallèlement à un plan de type $\{001\}$, quelle que soit l'orientation du chargement appliqué [Khan 91]. Le fluage traction suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ conduit à des radeaux perpendiculaires à l'axe de chargement, le fluage traction suivant $\langle 011 \rangle$ à des radeaux inclinés à 45° par rapport à la contrainte. Pour une sollicitation suivant $\langle 111 \rangle$, les précipités coalescent simultanément suivant les trois plans de type $\{001\}$ conduisant à une microstructure relativement isotrope. Dans [Tien 71] un modèle énergétique permettant de retrouver ces résultats est proposé.

Les microstructures vieilles en fluage $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ ont été observées. La figure 4.24 présente les microstructures "non-vieilles" et après fluage suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$. Comme on peut le voir sur la figure 4.24(a), le "non-vieilli" est à nuancer car les micrographies ont été réalisées après l'essai de comportement complexe. Un début de coalescence des précipités est visible. La figure 4.24(b) présente une coupe longitudinale de la microstructure après vieillissement (et essai de comportement). Les précipités se présentent sous formes de parallélépipèdes alignés parallèlement à une direction $[100]$. Deux systèmes de plaquettes, normales aux directions $\langle 001 \rangle$ et $\langle 010 \rangle$ apparaissent. Une troisième famille, de normale $\langle 011 \rangle$, est également visible. Celle-ci est en fait une combinaison des deux premières. On constate de plus un épaississement important de la microstructure.

La même comparaison est effectuée pour le fluage suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ et est présentée par la figure 4.25. Une coupe transversale dans le matériau "non-vieilli" (essai 10) montre des précipités triangulaires 4.25(a). Après fluage, un épaississement conséquent de la microstructure est observé dû à la coalescence des précipités. On trouve des zones où cette coalescence est relativement isotrope (figure 4.25(b)), en tout cas sans orientation préférentielle marquée.



(a) Matériau non-vieilli (après essai 10)

(b) Matériau vieilli (après essai 11)

FIG. 4.25. Comparaison des microstructures non vieilles et vieilles en fluage à 1050°C, 150 MPa suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$.

Cinétique de mise en radeaux en fluage

Comme cela a été précisé, les essais 17 et 18 ont fait l'objet d'interruptions au cours du vieillissement en fluage de façon à évaluer la cinétique de mise en radeaux. La courbe de fluage à 950°C sous 300 MPa (essai 18), en bon accord avec un essai dans les mêmes conditions [Diologent 02], nous laisse penser que les interruptions durant le fluage et le cycle effectué n'influe pas trop sur le comportement en fluage. La question est moins claire pour l'essai 17 car nous n'avons pas de référence pour ces conditions de fluage. De plus, cet essai est réalisé à 1050°C, température pour laquelle les phénomènes de diffusion sont bien plus rapides qu'à 950°C. L'influence de la plasticité mise en jeu au cours des cycles intermédiaires est a priori plus grande qu'à 950°C.

La figure 4.26 présente le comportement cyclique en cours de fluage pour ces deux essais. Concernant l'essai 17 (figure 4.26(a)), nous avons eu des problèmes de mesure qui rendent difficile le dépouillement. Il semble tout de même que l'on observe un très léger adoucissement après 4 h de fluage, que l'on peut estimer à environ 30 MPa. L'adoucissement est plus prononcé après 14h de fluage. Il est de l'ordre de 60 MPa. Les conclusions de cette mesure de cinétique sont rendues complexes par le fait que la mise en radeaux a une influence très faible sur le comportement mécanique à 1050°C sous une vitesse de sollicitation de 10^{-3} s^{-1} comme nous le verrons par la suite. L'adoucissement observé après 14 h de fluage peut être interprété comme étant dû à l'entrée dans le stade de fluage accéléré. En effet, on observe à partir de 10 h de fluage à 1050°C, 200 MPa une nette augmentation de la déformation plastique.

Pour l'essai 18, deux interruptions ont été réalisées, après 25 h et 40 h de fluage (si on tient compte de l'arrêt de l'essai de 8 h). Un adoucissement d'environ 100 MPa est observé après 25h de fluage. Entre 25 h et 40 h de fluage, le comportement n'évolue pas sensiblement, ce qui nous permet de conclure que la mise en radeaux est achevée en un temps inférieur à 25 h à 950°C sous 300 MPa.

4.4.2 Vieillissements sous chargement cyclique

L'influence d'un vieillissement cyclique alterné à 1050°C sur le comportement mécanique fait l'objet des essais 14 pour l'orientation $\langle 001 \rangle$, 19 pour l'orientation $\langle 111 \rangle$ et 20 pour l'orientation $\langle 011 \rangle$. La vitesse de déformation a été choisie suffisamment lente, $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, de façon à reproduire l'adoucissement observé dans [Mughrabi 96].

La figure 4.27 montre les boucles contrainte déformation mesurées au cours du vieillissement de l'essai 14 ainsi que l'évolution de l'amplitude de contrainte. Un adoucissement d'environ 100 MPa est observé, ce qui est loin d'être négligeable rapporté à la contrainte maximale qui vaut 350 MPa au premier cycle. Les

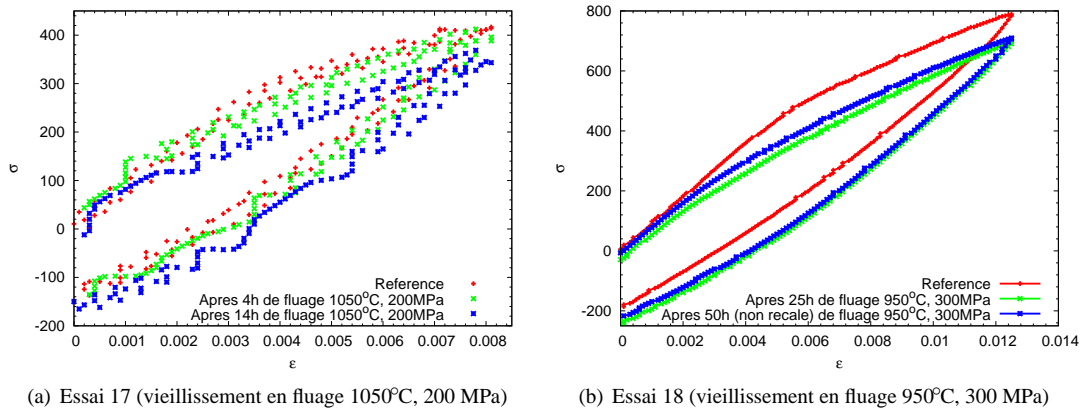
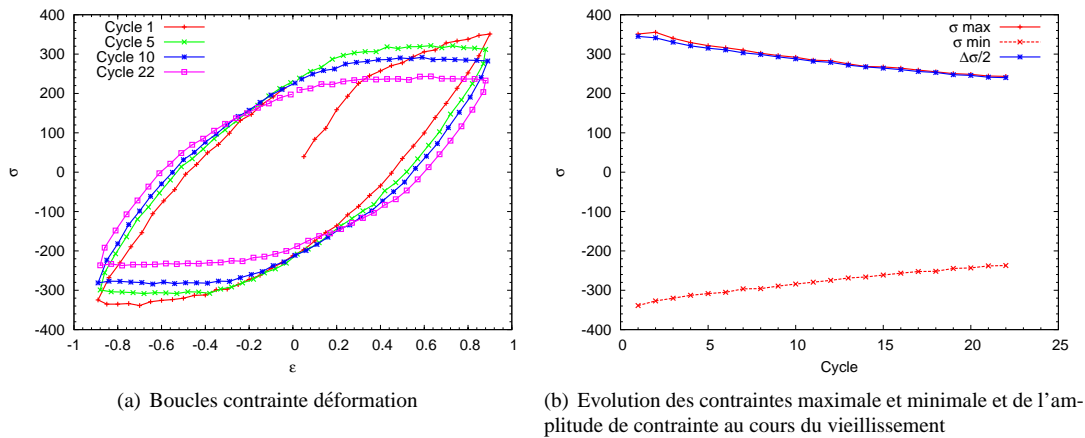


FIG. 4.26. Mesures de la cinétique de mise en radeaux au moyen de cycles effectués au cours des essais 17 et 18.


 FIG. 4.27. Vieillissement cyclique à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ à 1050°C pendant 24h suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ (essai 14).

micrographies correspondantes sont présentées par la figure 4.28. La figure 4.28(b) montre une orientation préférentielle de la microstructure à 45° par rapport à l'axe de chargement. De plus, comme après un vieillissement en fluage, la microstructure a épaissi et les précipités ont globalement une forme plus arrondie qu'à l'état non vieilli.

Le même type de vieillissement a été effectué sur des éprouvettes orientées suivant $\langle 011 \rangle$ (essai 20) et $\langle 111 \rangle$ (essai 19). Concernant l'orientation $\langle 011 \rangle$, dont les résultats sont présentés par la figure 4.29, un adoucissement d'une quarantaine de MPa est enregistré. Il est donc plus faible que pour l'orientation $\langle 001 \rangle$ mais la déformation plastique est elle aussi plus faible.

Les observations au MEB réalisées à l'issue de l'essai 20 montrent une microstructure orientée à 30° par rapport aux direction cubiques. Tout comme en fluage suivant cette orientation, on note l'existence de deux familles de plaquettes. D'ailleurs, on a remarqué la présence de micro fissures dans cette éprouvette (figure 4.31). On constate que la fissure s'est propagée suivant l'orientation de la microstructure.

Enfin, la figure 4.32 présente les résultats d'un vieillissement cyclique suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$. Pour cette orientation, l'adoucissement observé est d'environ 120 MPa. Contrairement au vieillissement en fluage suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$, le vieillissement cyclique conduit à une microstructure non isotrope. La figure 4.33 montre l'existence de deux systèmes de plaquettes.

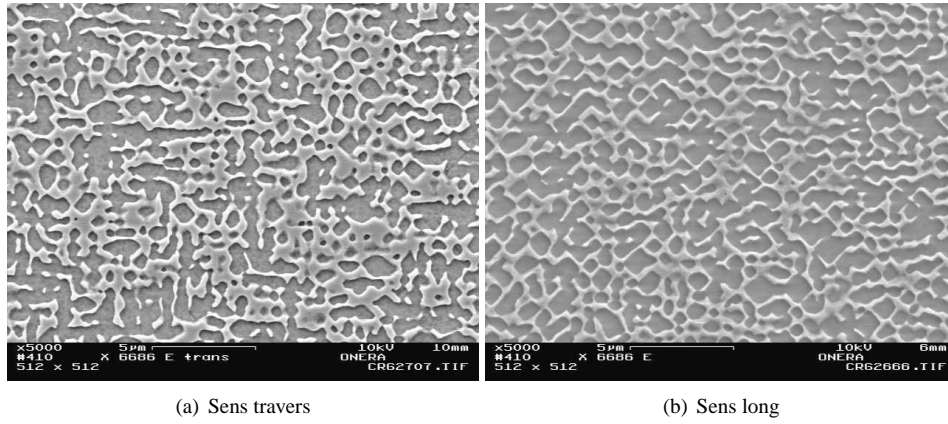


FIG. 4.28. Micrographies de l'AM1 après un vieillissement cyclique à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ à 1050°C suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ (essai 14).

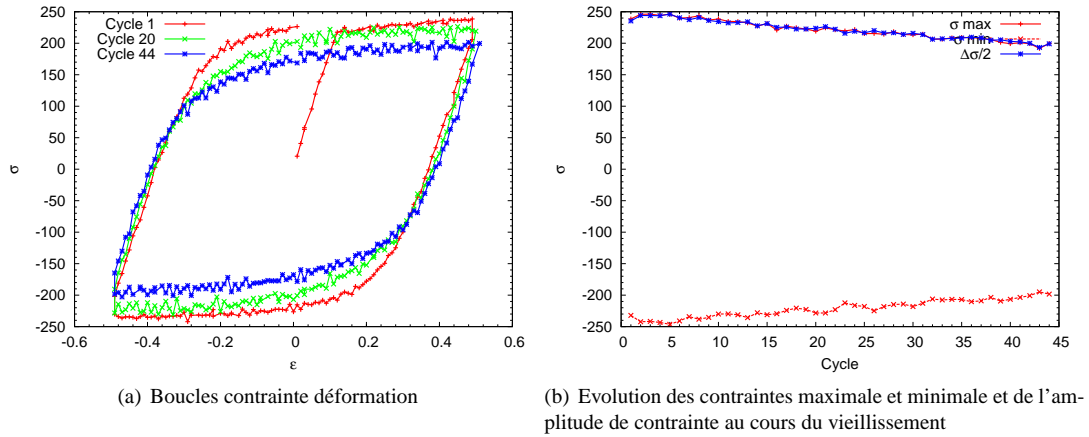


FIG. 4.29. Vieillissement cyclique à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ à 1050°C pendant 24h suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$ (essai 20).

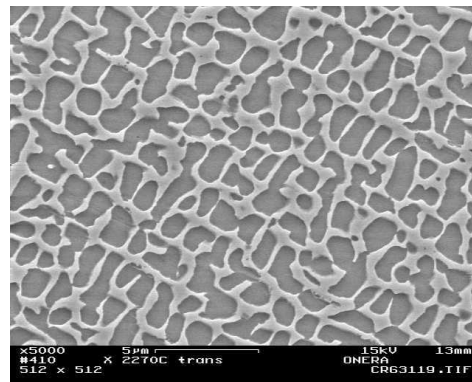


FIG. 4.30. Micrographie sens travers effectuée à l'issue de l'essai 20 (vieillissement cyclique suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$).

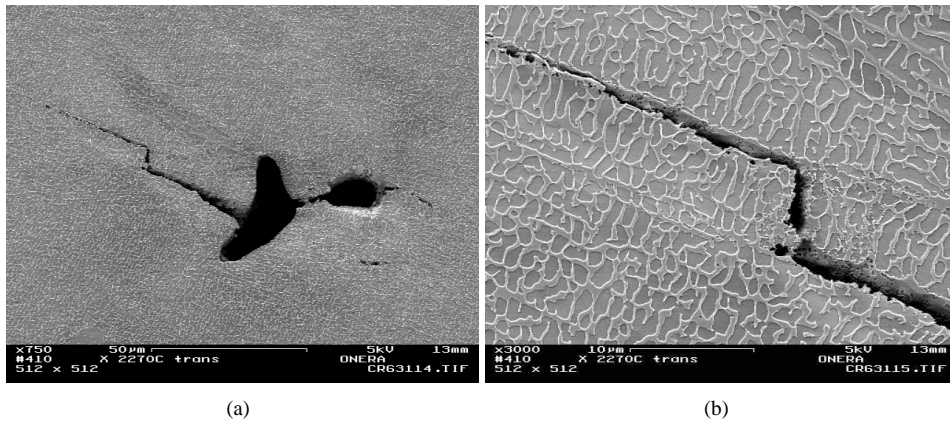


FIG. 4.31. Micrographie sens travers réalisée à l'issue de l'essai 20 montrant la propagation d'une micro fissure suivant l'orientation de la microstructure.

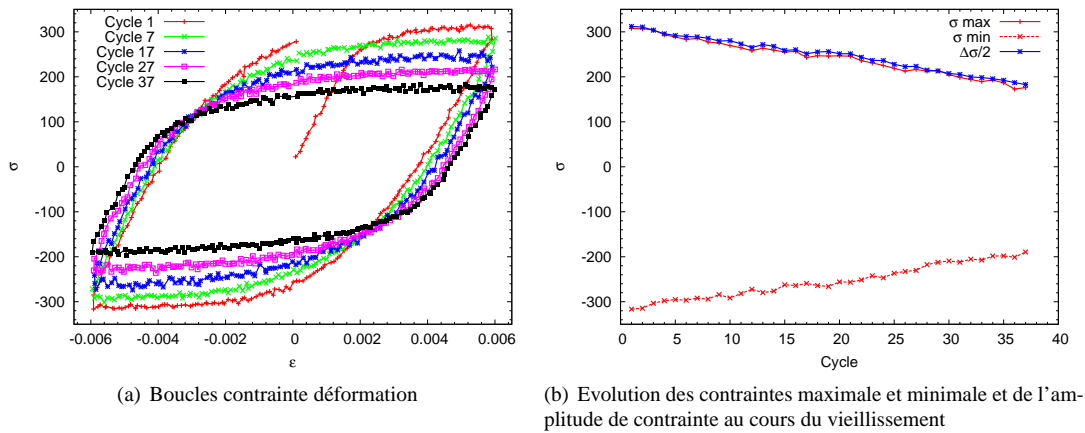


FIG. 4.32. Vieillessement cyclique à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ à 1050°C pendant 24h suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ (essai 19).

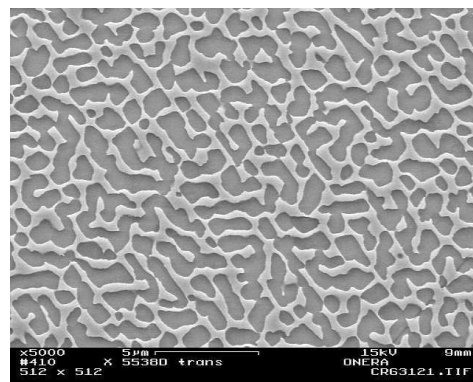


FIG. 4.33. Micrographie sens travers effectuée à l'issue de l'essai 19 (vieillessement cyclique suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$).

4.5 Influence du vieillissement sur le comportement mécanique

Cette partie décrit les résultats des essais mécaniques réalisés après les vieillissements. Nous nous intéressons dans un premier temps aux essais effectués suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$. Pour plus de clarté, le dépouillement des essais suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ est présenté en annexe H.

4.5.1 Influence d'un vieillissement à 1050°C, 150 MPa

La figure 4.34 présente l'influence d'un vieillissement en fluage traction ou compression de 150 MPa à 1050°C sur le comportement mécanique à 950°C. Les résultats des essais 07 (fluage traction) et 08 (fluage compression) sont comparés à l'essai de référence (essai 06) réalisé sur le matériau non vieilli. Les conclusions suivantes peuvent être tirées de ces essais :

- La mise en radeaux induit un adoucissement du comportement mécanique. D'après la figure 4.34(b), on l'évalue à environ 150 MPa ;
- On note une influence négligeable de l'orientation des radeaux sur le comportement mécanique. Les radeaux de type N, obtenus en fluage traction, plastifient plus vite que les radeaux de type P obtenus en fluage compression. Ce phénomène peut s'observer lors du passage en compression et sur les cycles 2 et 3. En revanche, lorsque l'écroutissage est saturé, la contrainte exhibée par la microstructure de type P est légèrement plus faible ;
- La mise en radeaux semble avoir une faible influence sur la viscosité. Ce point est difficile à juger d'après la première traction étant données les difficultés de mise au point de l'essai 06. En revanche, les parties en traction des cycles 2 et 3 nous permettent de conclure quant à la très faible influence sur la viscosité. Le tableau 4.2 relève les contraintes des portions à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et en fin de relaxation. La différence entre la contrainte sur les portions 10^{-5} s^{-1} et 10^{-3} s^{-1} mesure la différence de contrainte visqueuse entre ces deux vitesses de déformation. Cette différence est égale à 285 MPa pour le matériau non vieilli (essai 06) contre 250 MPa pour le matériau vieilli (essais 07 et 08). On peut donc conclure que l'effet principal de la mise en radeaux sur le comportement à 950°C semble porter sur l'écroutissage ;
- La mise en radeaux a néanmoins une influence sur la relaxation et en particulier sur la contrainte obtenue asymptotiquement. En effet, la contrainte se stabilise à environ 80 MPa pour le matériau vieilli en traction et en compression, alors que cette contrainte vaut environ 200 MPa pour le matériau non vieilli.

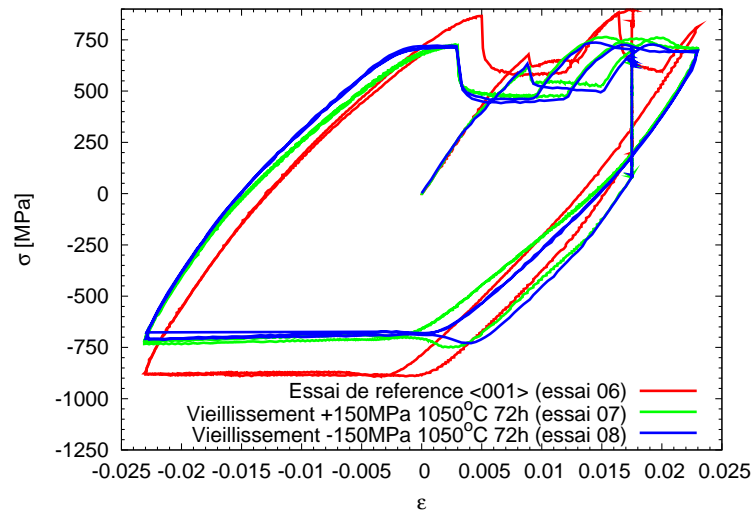
Les résultats obtenus dans ce travail sont en accord avec ceux d'Espié [Espié 96] présentés au paragraphe 4.2.3.

L'adoucissement induit par la mise en radeaux peut s'interpréter en terme de contrainte d'Orowan. Comme nous l'avons vu, la mise en radeaux entraîne une augmentation de la largeur des couloirs de matrice. La contrainte d'Orowan indique que la cisssion résolue critique est proportionnelle à l'inverse de la distance entre obstacles. Un élargissement des couloirs de matrice induit donc une diminution de la cisssion critique et un adoucissement du comportement du matériau.

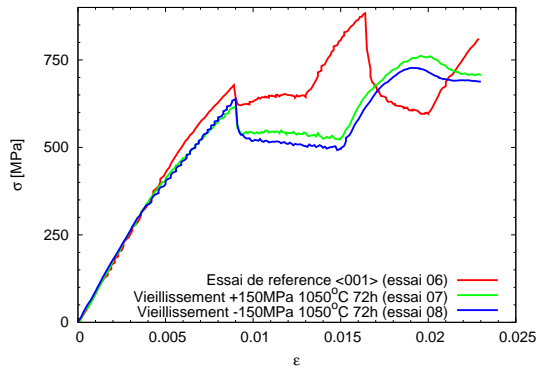
Contrainte [MPa]	Essai 06 (référence)	Essai 07 (radeaux N)	Essais 08 (radeaux P)	Différence essai 06 moins essai 07
Traction 10^{-5} s^{-1}	575	475	460	100
Traction 10^{-3} s^{-1}	860	720	720	140
Relaxation	190	80	80	110

TAB. 4.2. Influence d'un vieillissement en fluage traction et compression sous 150 MPa à 1050°C sur le comportement mécanique à 950°C. Contraintes stabilisées relevées au cours des cycles 2 et 3 pour les portions à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et en fin de relaxation.

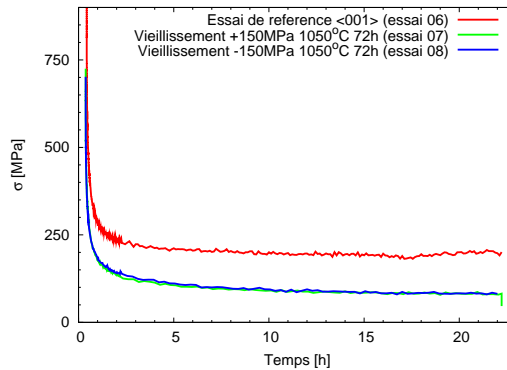
Dans un deuxième temps, l'influence sur le comportement à 1050°C du même vieillissement est étudiée au travers de la comparaison des essais 15 et 16. Comme cela a été souligné précédemment, l'essai 16 de



(a) Essais complets



(b) Première traction



(c) Relaxation

FIG. 4.34. Influence d'un vieillissement en fluage traction et compression de 150 MPa à 1050°C 150MPa sur le comportement mécanique à 950°C (essais 07 et 08).

référence à 1050°C subit lui-même une évolution de la microstructure. La figure 4.35 présente les résultats des essais 15 et 16. Le tableau 4.3 propose une comparaison quantitative entre les résultats pour ces deux essais. Les remarques suivantes peuvent être formulées :

- La mise en radeaux a une influence sur le comportement à faible vitesse de déformation. Ainsi pour les portions à $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, on relève un adoucissement d'environ 60 MPa entre le matériau non vieilli et le matériau vieilli. Cette différence se retrouve également lors de la relaxation.
- L'influence sur le comportement à $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ est plus difficile à interpréter. Lors de la première traction, à faible déformation, il a été relevé un adoucissement d'environ 50 MPa entre les essais 16 et 15. A plus forte déformation imposée, cette différence est de l'ordre de 10 MPa.

Par conséquent, la mise en radeaux a une influence sur la viscosité à 1050°C. Cette influence sur la viscosité ne se manifeste pas à faible déformation.

	Contrainte [MPa]	Essai 16 (référence)	Essai 15 (radeaux N)	Différence essai 16 moins essai 15
Cycle 1	Traction 10^{-3} s^{-1} à $\varepsilon = 0.7\%$	390	340	50
	Traction 10^{-5} s^{-1}	325	265	60
	Traction 10^{-3} s^{-1} à $\varepsilon = 1.75\%$	545	535	10
	Compression 10^{-3} s^{-1}	-535	-520	15
Cycle 2	Traction 10^{-3} s^{-1} à $\varepsilon = 0$	455	430	25
	Traction 10^{-5} s^{-1}	300	225	75
	Traction 10^{-3} s^{-1} à $\varepsilon = 1.75\%$	545	535	10
	Relaxation	120	75	45
	Compression 10^{-3} s^{-1}	-520	-515	5
Cycle 3	Traction 10^{-3} s^{-1} à $\varepsilon = 0$	485	475	10
	Traction 10^{-5} s^{-1}	280	225	55
	Traction 10^{-3} s^{-1} à $\varepsilon = 1.75\%$	540	545	5
	Compression 10^{-3} s^{-1}	-520	-515	5

TAB. 4.3. Contraintes relevées au cours des essais 15 et 16.

4.5.2 Influence de la contrainte de fluage

L'influence de la contrainte de fluage sur le comportement mécanique est étudiée au travers des essais 06, essai de référence, 07, vieilli sous 150 MPa à 1050°C et 17, vieilli sous 200 MPa à la même température. Les résultats de ces essais sont présentés par la figure 4.36. Cette figure montre une influence notable de la contrainte de fluage. La comparaison entre l'essai 07 et l'essai 17 montre un adoucissement plus prononcé pour l'essai 17, aussi bien sur les portions à une vitesse de déformation de 10^{-5} s^{-1} que sur les portions à 10^{-3} s^{-1} . En revanche, la contrainte de fluage n'a pas d'influence sur la relaxation et la contrainte atteinte en fin de relaxation (c.f. figure 4.36(c)).

Cette influence de la contrainte de fluage est peut-être due au fait que la déformation plastique mise en jeu au cours de l'essai 17 est relativement importante. On peut se demander si l'on a pas atteint le stade de fluage accéléré. En effet, on observe une augmentation de la vitesse de fluage à partir de 10h de fluage. Cette hypothèse est supportée par les mesures de cinétique de mise en radeaux effectuées au cours de cet essai. La figure 4.26(a) montre une différence de comportement significative après 4h et après 14h de fluage.

4.5.3 Influence de la température de fluage

La température de fluage a une influence sur la première traction durant laquelle on relève un adoucissement plus marqué du matériau vieilli à 950°C sous 300 MPa que lorsqu'il a été vieilli à 1050°C sous 150 MPa (figure 4.37). Cette différence s'estompe dès le passage en compression. Il est délicat de comparer les deux vieillissements dans la mesure où la déformation plastique mise en jeu durant le vieillissement à

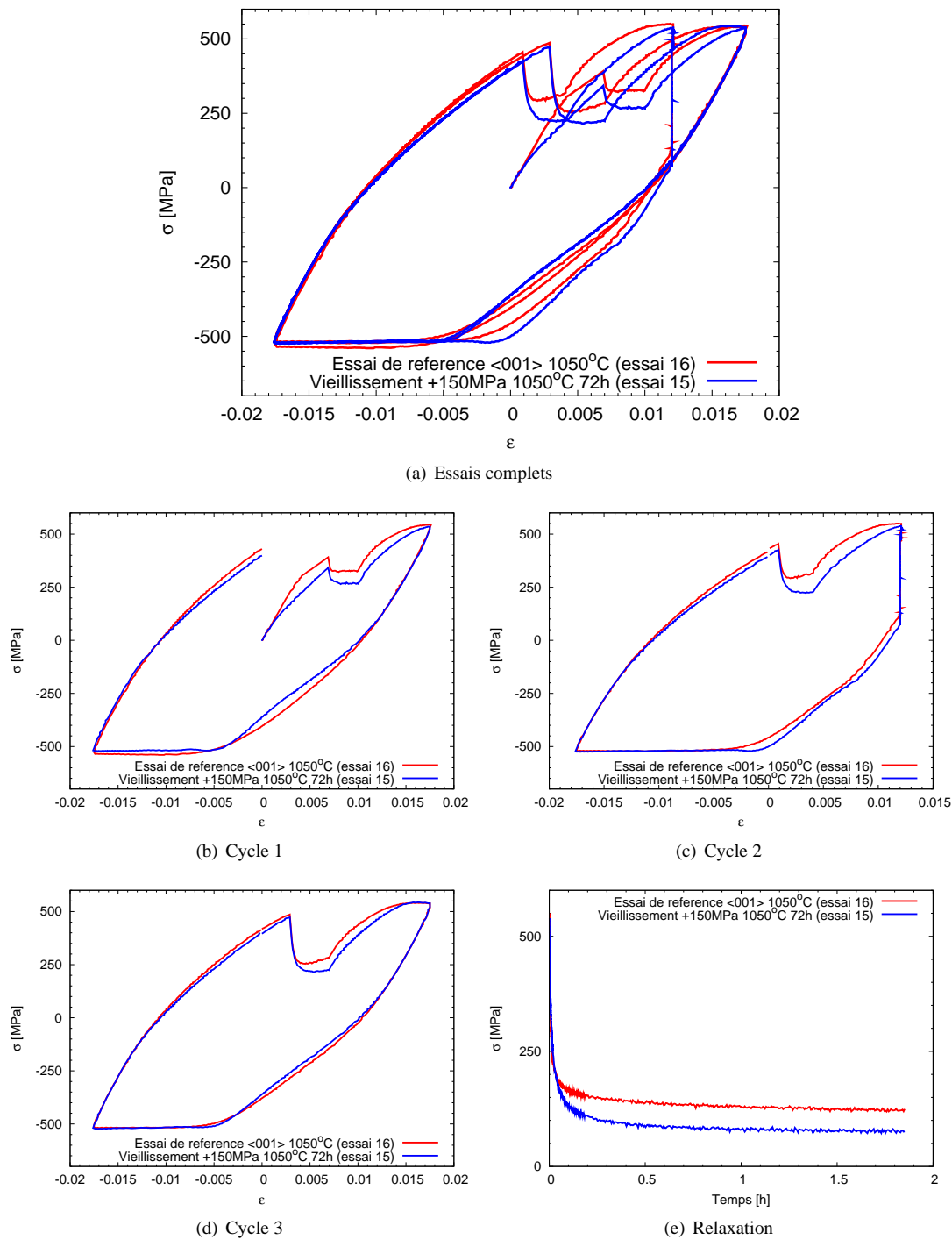


FIG. 4.35. Influence d'un vieillissement en fluage traction sous 150 MPa à 1050°C sur le comportement à 1050°C (essais 15 et 16).

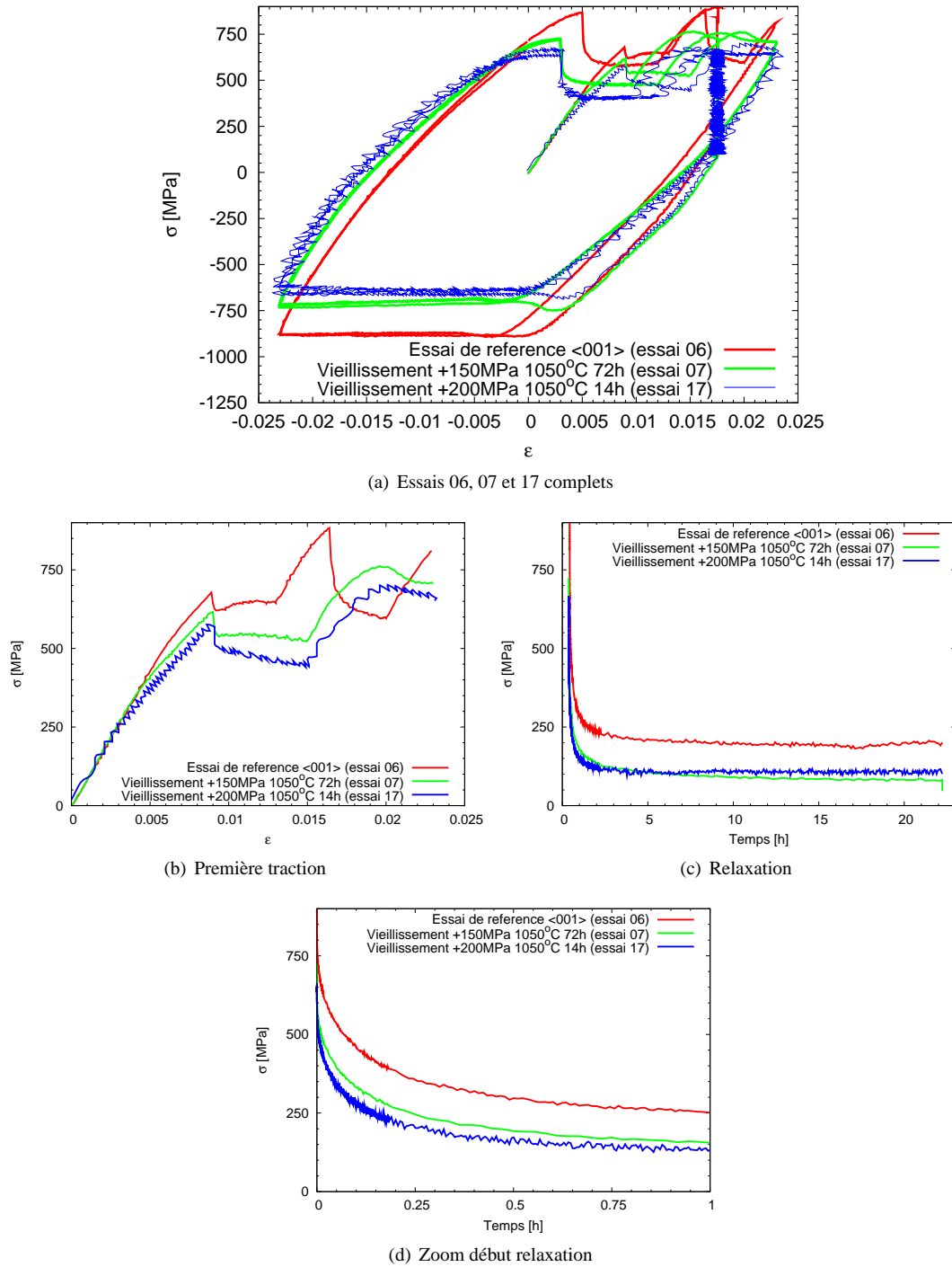
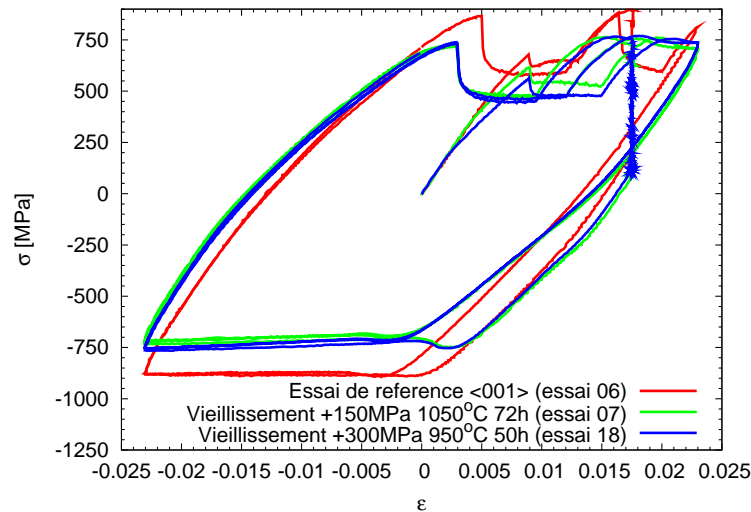
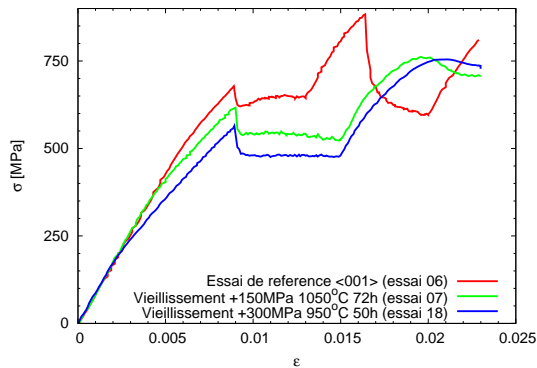


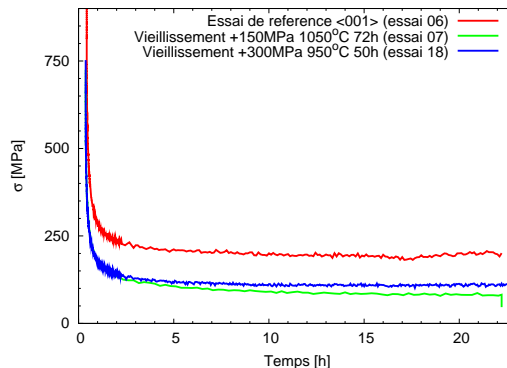
FIG. 4.36. Influence de la contrainte de fluage à 1050°C sur le comportement mécanique à 950°C. Les vieillissements sous 150 MPa (essai 07) et sous 200 MPa (essai 17) à 1050°C sont comparés à l'essai 06 de référence.



(a) Essais 06, 07 et 18 complets



(b) Première traction



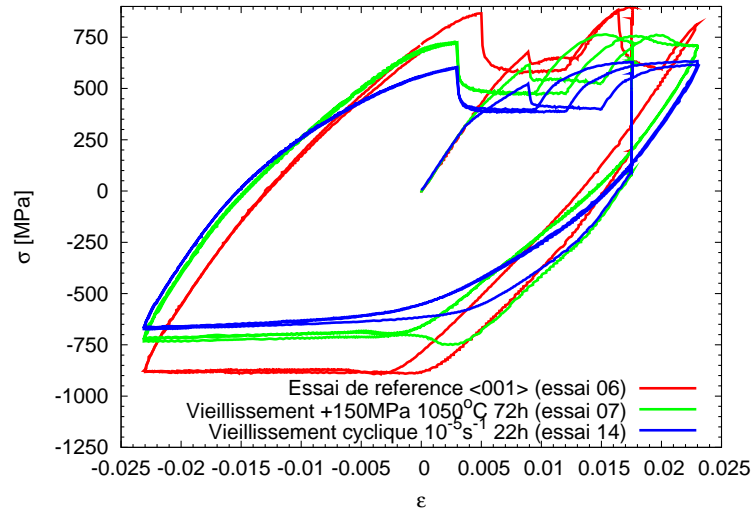
(c) Relaxation

FIG. 4.37. Influence de la température de fluage sur le comportement mécanique à 950°C. Les vieillissements à 950°C sous 300 MPa (essai 18) et à 1050°C sous 150 MPa (essai 07) sont comparés à l'essai de référence (essai 06).

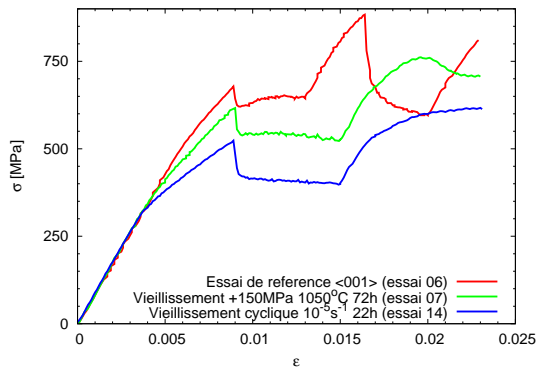
950°C est plus importante que pour le vieillissement à 1050°C. C'est d'ailleurs sans doute ce qui explique la différence entre l'influence des deux vieillissements lors de la première traction.

4.5.4 Influence d'un vieillissement cyclique

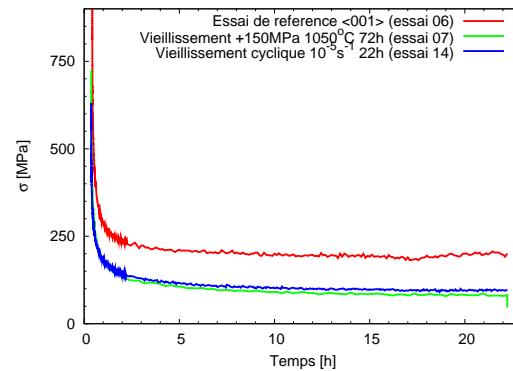
Un vieillissement cyclique à $\dot{\epsilon}=10^{-5} \text{ s}^{-1}$ entraîne un adoucissement plus prononcé qu'un vieillissement en fluage (figure 4.38). On peut interpréter cet adoucissement en considérant les microstructures obtenues en vieillissement cyclique. Comme nous l'avons vu, un vieillissement cyclique lent génère une microstructure orientée à 45° par rapport aux directions cubiques. La largeur de couloir effective vue par les dislocations des systèmes octaédriques est donc augmentée par rapport au cas du fluage. En revanche, la figure 4.38(c) montre que le mode de vieillissement n'influence pas la relaxation.



(a) Essais 06, 07 et 14 complets



(b) Première traction



(c) Relaxation

FIG. 4.38. Influence d'un vieillissement cyclique à 1050°C sur le comportement mécanique à 950°C. Les vieillissements sous chargement cyclique (essai 14) et sous chargement de fluage (essai 07) à 1050°C sont comparés à l'essai 06 de référence.

4.6 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à l'étude expérimentale de la mise en radeaux et de son influence sur le comportement mécanique. Nous avons vu que la mise en radeaux ou coalescence orientée s'observe dans les superalliages monocristallins sous chargement mécanique à haute température. Les essais effectués dans le cadre de cette thèse ont mis en jeu différents types de vieillissements, en fluage mais également en fatigue, suivant plusieurs orientations cristallographiques et à différentes températures (1050°C et 950°C). Les vieillissements en fluage conduisent à des précipités suivant des plans de type $\{001\}$. Suivant le sens de chargement et l'orientation cristallographique de l'échantillon, tel ou tel type de précipités est favorisé. En revanche, les vieillissements en fatigue mènent à une coalescence orientée à 45° de l'axe de chargement si celui-ci est suivant la direction $\langle 001 \rangle$.

De manière générale la mise en radeaux conduit à un adoucissement du comportement. Elle influe sur l'écrouissage et sur la viscosité de manière simultanée. Pour le comportement à 950°C, l'effet sur l'écrouissage semble plus prononcé que sur la viscosité. Par contre, à 1050°C, l'effet sur la viscosité est plus important. Un adoucissement est également observé pour les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ comme le montrent les résultats présentés à l'annexe H.

Nous attribuons l'adoucissement observé à l'augmentation de la largeur des couloirs de matrice. Cette augmentation a notamment été calculée par analyse d'image dans [Diologent 02, Epishin 09]. L'adoucissement du comportement des microstructure issues de fatigue est plus prononcé. Ce résultat peut être expliqué par l'augmentation de la largeur des couloirs vue par les dislocations lorsque la microstructure est orientée à 45°.

Chapitre 5

Modélisation de la coalescence orientée

Sommaire

4.1	Introduction	80
4.2	Etude bibliographique de la mise en radeaux	80
4.2.1	Illustration du phénomène	80
4.2.2	Influence de la plasticité	83
4.2.3	Influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique	85
4.2.4	Conclusion de l'étude bibliographique	89
4.3	Description des essais	89
4.3.1	Matrice d'essais sur matériau vieilli	92
4.3.2	Essais de comportement complexes	93
4.4	Vieillissements et observation des microstructures vieilles	94
4.4.1	Vieillissements en fluage	94
4.4.2	Vieillissements sous chargement cyclique	102
4.5	Influence du vieillissement sur le comportement mécanique	106
4.5.1	Influence d'un vieillissement à 1050°C, 150 MPa	106
4.5.2	Influence de la contrainte de fluage	108
4.5.3	Influence de la température de fluage	108
4.5.4	Influence d'un vieillissement cyclique	111
4.6	Conclusion	113

5.1 Introduction

Le chapitre précédent a décrit expérimentalement le phénomène de mise en radeaux dans les superalliages et son influence sur le comportement mécanique du matériau. Nous avons vu que des chargements mécaniques à haute température conduisent à une coalescence orientée des précipités. Ce chapitre aborde la modélisation de ce phénomène.

Le premier modèle de mise en radeaux est dû à Tien et Copley [Tien 71]. Il est basé sur une minimisation de l'énergie totale du système. Les calculs sont développés dans le cadre de la théorie des interactions élastiques d'Eshelby avec pour hypothèse une élasticité isotrope et en négligeant l'interaction entre précipités. Pineau [Pineau 76] a développé un modèle similaire, permettant également de prévoir les morphologies de coalescence en fluage à haute température. Ces modèles ont été affinés par la suite. Le modèle de Miyazaki [Miyazaki 79] par exemple prend en compte l'anisotropie élastique des superalliages. Plus récemment des modèles prenant en compte la plasticité dans la matrice ont été développés [Socrate 92, Arrel 94, Ratel 06, Wu 09].

Les modèles cités jusqu'ici sont tous basés sur le même principe : les auteurs calculent les énergies liées à différentes morphologies, cubes, radeaux P ou N, et cherchent la configuration qui minimise l'énergie du système sous tel ou tel chargement. Ces modèles ont permis de mettre en évidence l'influence des constantes élastiques, du désaccord paramétrique et du chargement sur les morphologies de coalescence. Cependant, la façon dont les interfaces γ/γ' migrent n'est pas décrite.

D'autres modèles plus complets permettent de simuler l'évolution de la microstructure. Le modèle proposé par Véron [Véron 95, Véron 96] en est un exemple. L'évolution de la largeur des couloirs de matrice est modélisée. Plus précisément, la largeur de chaque couloir est calculée à partir du flux de matière dû à la diffusion et à la plasticité. Des modèles de type champs de phases ont également fait leurs preuves dans la modélisation des évolutions morphologiques dans les superalliages, que ce soit l'obtention de microstructures cuboïdales [Wang 98, Vaithyanathan 02, Wang 08], la mise en radeaux [Li 97, Boussinot 07, Gururajan 07] ou le vieillissement de microstructures bimodales issues de trempe [Boussinot 09]. Les modèles champs de phases sont en effet bien adaptés à l'étude des transformations de phases dans les superalliages base nickel car il se placent à l'échelle mésoscopique et intègrent un certain nombre de phénomènes physiques tels que la chimie du matériau, l'énergie d'interface entre les deux phases et les interactions élastiques induites par un désaccord paramétrique.

Cependant, comme nous l'avons souligné au chapitre précédent, l'activité plastique dans les couloirs de matrice semble jouer un rôle important dans le phénomène de mise en radeaux. C'est pourquoi, nous proposons dans ce chapitre l'introduction de la plasticité dans un modèle champs de phases, au travers d'un modèle de comportement viscoplastique phénoménologique [Gaubert 08, Gaubert 09].

Ce chapitre est organisé de la façon suivante. Nous présentons dans un premier temps le modèle champs de phases élastique développé par Boussinot durant sa thèse [Boussinot 07]. Nous étudions l'obtention de la microstructure cuboïdale caractéristique des superalliages à l'aide de ce modèle. Puis nous proposons un couplage entre ce modèle champs de phases et un modèle de comportement viscoplastique. Le modèle couplé est utilisé pour étudier la mise en radeaux sous différentes conditions de chargement. Le modèle couplé présenté dans ce chapitre ainsi qu'une partie des résultats ont fait l'objet de publications [Gaubert 08, Gaubert 09].

5.2 Modélisation par la théorie des champs de phases

La transformation de phase donnant lieu à une microstructure γ/γ' est une transformation solide-solide avec diffusion. Dans notre étude, nous utilisons un système binaire Ni-Al pour modéliser l'évolution microstructurale dans les superalliages. La description d'un alliage industriel tel que l'AM1 nécessiterait en principe de tenir compte des nombreux éléments d'alliages en présence. Nous faisons l'hypothèse que, par rapport au système modèle Ni-Al, les éléments d'alliage ne modifient pas qualitativement les mécanismes

physiques responsables de l'évolution microstructurale que nous souhaitons décrire. Ainsi nous modélisons l'alliage industriel AM1 pour un système binaire effectif, similaire à Ni-Al, mais pour lequel les quantités physiques sont celles de l'AM1 (énergie d'interface, misfit, etc.)

Le modèle champs de phases consiste à décrire la microstructure du matériau à l'échelle mésoscopique à l'aide de champs continus. L'évolution de ces champs est régie par des forces motrices d'origine chimique et élastique. Nous tenons à signaler que le traitement de l'élasticité inhomogène que nous utiliserons ici a été développé par Boussinot pendant sa thèse [Boussinot 07].

5.2.1 Description de la microstructure γ/γ'

La première étape de la modélisation par champs de phases consiste à choisir les champs continus représentatifs de la microstructure. Les deux phases diffèrent en terme de concentration en Al (espèce minoritaire), la phase γ étant de type NiAl et la phase γ' de type Ni₃Al. Le premier champ à considérer pour la modélisation champs de phases est donc $c(\underline{r}, t)$, défini comme la concentration atomique en aluminium. De plus, la phase γ est désordonnée sur un réseau CFC tandis que la phase γ' s'ordonne en structure $L1_2$ sur le même réseau CFC. Lors de la mise en ordre $\gamma \rightarrow \gamma'$, l'invariance par les translations des vecteurs de l'étoile $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ est perdue, ce qui implique l'existence de 4 variants de translation de la phase γ' , qui, à l'échelle macroscopique sont équivalents. L'état d'ordre de la phase γ' doit être décrit dans le cas d'alliages à forte fraction volumique, comme c'est le cas de l'AM1, car il joue un rôle important dans le régime de coalescence des précipités.

La théorie des ondes de concentration est classiquement utilisée pour décrire l'état d'ordre [Khachatryan 83]. Dans ce formalisme, la probabilité de présence des atomes d'aluminium en tout point \underline{R} du réseau sous-jacent s'écrit :

$$p_{\underline{R}} = c + \sum_{\underline{q} \neq 0} \eta_{\underline{q}} e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}} \quad (5.1)$$

où c est la concentration moyenne en atomes d'aluminium. Pour décrire une phase ordonnée, la fonction $p_{\underline{R}}$ doit être périodique. Dans le cas de la structure $L1_2$, la probabilité de présence s'écrit à l'aide des vecteurs de l'étoile $(1, 0, 0)$. Ainsi :

$$p_{\underline{R}} = c + \eta_1 e^{i\underline{q}_1 \cdot \underline{R}} + \eta_2 e^{i\underline{q}_2 \cdot \underline{R}} + \eta_3 e^{i\underline{q}_3 \cdot \underline{R}} \quad (5.2)$$

avec $\underline{q}_1 = \frac{2\pi}{a}[100]$, $\underline{q}_2 = \frac{2\pi}{a}[010]$, $\underline{q}_3 = \frac{2\pi}{a}[001]$ et a le paramètre de la maille élémentaire.

La phase désordonnée γ est définie par $\underline{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \eta_3) = 0$ car les sites du réseau CFC sont équivalents et la probabilité de trouver un atome d'aluminium est la concentration c de la phase.

Pour une phase ordonnée, $\underline{\eta} \neq 0$. Les composantes de ce vecteur sont appelées paramètres d'ordre à longue distance. La maille CFC élémentaire peut se décomposer en quatre sous-réseaux cubiques simples d'origine $(0, 0, 0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ et $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. La concentration de chacun de ces sous-réseaux s'exprime donc en fonction de $\underline{\eta}$ d'après 5.2. A une translation $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ ou $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, les vecteurs $\underline{\eta} = \eta[1\bar{1}\bar{1}]$, $\underline{\eta} = \eta[\bar{1}1\bar{1}]$ et $\underline{\eta} = \eta[\bar{1}\bar{1}1]$ décrivent la même structure que $\underline{\eta} = \eta[111]$. Ces paramètres d'ordre définissent donc les 4 variants de la phase γ' .

La théorie des ondes de concentration décrite ici à l'échelle atomique est étendue à l'échelle mésoscopique pour la description de microstructures hétérogènes dans le cadre d'un modèle champs de phases. L'idée de base d'une méthode champs de phases est d'identifier des grandeurs mésoscopiques (ou paramètres d'ordre) qui permettent d'identifier localement la présence d'une phase et sa nature sans avoir recours à l'échelle atomique. Dans le cas présent, où nous supposons que la microstructure est exclusivement constituée d'une répartition des deux phases γ et γ' , ce point de vue conduit nécessairement à identifier la concentration c et les amplitudes η_1, η_2, η_3 , comme étant les paramètres d'ordre pertinents. Plus précisément, la microstructure sera représentée, à l'échelle mésoscopique, par des variations continues des champs de concentration $c(\underline{r})$ et de paramètres d'ordre à longue distance $\eta_i(\underline{r})$.

5.2.2 Cinétique

La modélisation par champs de phases consiste à se munir d'une fonctionnelle d'énergie libre mésoscopique F faisant le lien entre la microstructure, i.e. les champs $c(\mathbf{r}, t)$ et $\eta_i(\mathbf{r}, t)$, et son énergie libre totale. La fonctionnelle d'énergie libre prend en compte l'énergie libre des phases homogènes, les énergies de surfaces entre les différentes phases ainsi que l'énergie élastique. L'évolution temporelle de chacun des 4 champs décrivant la microstructure est, dans ce type de modèles, gouvernée par la force motrice correspondante définie comme la dérivée fonctionnelle de l'énergie libre totale par rapport au champ considéré. En supposant que l'évolution du champ est linéairement proportionnelle à la force motrice, on obtient les équations d'Allen-Cahn pour les champs de paramètres d'ordre et de Cahn-Hilliard pour la concentration qui est un champ conservé (sa moyenne spatiale est constante dans le temps) :

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_i} \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta c} \quad (5.4)$$

le coefficient cinétique L dans 5.3 et la mobilité M dans 5.4 étant supposés constants.

Les champs $c(\mathbf{r})$ et $\eta_i(\mathbf{r})$ ont été définis ci-dessus comme représentant les variations lentes des amplitudes des ondes qui composent les occupations de sites à l'échelle atomique. Bien que séduisant, ce point de vue reste très imprécis car il n'est pas assorti d'une méthode permettant de faire le lien quantitatif entre l'échelle atomique et l'échelle mésoscopique. La méthode la plus naturelle pour formaliser ce lien consiste en fait à définir les champs $c(\mathbf{r})$ et $\eta_i(\mathbf{r})$ au point \mathbf{r} par des moyennes arithmétiques sur des cellules de taille finie indicées par le vecteur \mathbf{r} : c'est la méthode du coarse-graining. En d'autres termes, un changement d'échelle doit être réalisé pour définir les champs continus. L'ingrédient de base est alors une énergie libre mésoscopique F qui incorpore les fluctuations d'échelle inférieure à la taille du changement d'échelle. L'obtention de F par un changement d'échelle depuis un modèle microscopique n'est possible que dans des cas modèles [Bronchart 06]. Pour l'étude de microstructures plus complexes, l'énergie libre est obtenue par une approche phénoménologique (approche de Ginzburg-Landau).

Afin de rendre compte des fluctuations de plus grande taille que le changement d'échelle, il est usuel d'introduire un terme de bruit de Langevin dans le membre de droite des équations 5.3 et 5.4. Ce bruit doit vérifier le théorème de fluctuation-dissipation de façon à assurer une description correcte des fluctuations à l'équilibre. Un bruit gaussien, dont l'expression dans les cas non-conservé et conservé est donnée par 5.5 et 5.6 respectivement, est classiquement utilisé en champs de phases.

$$\langle \xi_\eta(\mathbf{r}, t) \xi_\eta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T L \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (5.5)$$

$$\langle \xi_c(\mathbf{r}, t) \xi_c(\mathbf{r}', t') \rangle = -2k_B T M \nabla^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (5.6)$$

avec k_B la constante de Boltzmann et T la température en kelvin.

5.2.3 Fonctionnelle d'énergie libre de Ginzburg-Landau

Développement de Landau homogène

Comme nous venons de le voir, le système biphasé γ/γ' peut être décrit par quatre variables : le champ de concentration et trois champs de paramètres d'ordre à longue distance. Cette partie décrit la construction de la fonctionnelle d'énergie libre $f_{homo}(c, \{\eta_i\})$ d'une microstructure homogène. La théorie de Landau consiste à approximer cette fonctionnelle par un développement polynomial en puissance des paramètres d'ordre par rapport à l'état de plus grande symétrie. L'analyse des symétries perdues lors de la mise en ordre permet d'éliminer les termes du développement non nécessaires. En effet, la densité d'énergie libre doit être invariante pour toutes les opérations de symétrie de la phase désordonnée. Dans le cas présent, elle doit donc être invariante par permutation des axes du cube, ce qui revient à permuter les paramètres d'ordre, et translation selon les vecteurs $\vec{T}_1 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $\vec{T}_2 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $\vec{T}_3 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$. En revenant à la formulation

en ondes de concentration, on en déduit que ces translations correspondent à inverser le signe de deux des trois paramètres d'ordre. La densité d'énergie libre a donc la forme suivante :

$$f_{homo}(c, \{\eta_i\}) = f_\gamma(c) + A_2 \sum_{i=1,3} \eta_i^2 + A_3 \eta_1 \eta_2 \eta_3 + A_4 \left(\sum_{i=1,3} \eta_i^2 \right)^2 + A'_4 \sum_{i=1,3} \eta_i^4 + \dots \quad (5.7)$$

où les coefficients A_2 , A_3 , A_4 , etc. dépendent a priori de la concentration. Pour simplifier, ils sont pris constants ou linéaires en c . Une forme parabolique pour l'énergie libre de la phase désordonnée f_γ est retenue. Enfin, le développement de Landau est arrêté au plus bas ordre permettant une description correcte de la transition $fcc \rightarrow fcc + L1_2$, qui est ici l'ordre 4 en paramètres d'ordre :

$$f_{homo}(c, \{\eta_i\}) = \Delta f \left[\frac{1}{2}(c - c_\gamma)^2 + \frac{\mathcal{B}}{6}(c_2 - c) \sum_{i=1,3} \eta_i^2 - \frac{\mathcal{C}}{3} \eta_1 \eta_2 \eta_3 + \frac{\mathcal{D}}{12} \sum_{i=1,3} \eta_i^4 \right] \quad (5.8)$$

Dans 5.8, Δf représente l'échelle d'énergie du modèle et c_2 est une concentration arbitraire choisie entre les concentrations d'équilibre c_γ et $c_{\gamma'}$ des phases en présence. \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{D} sont des constantes dépendant de c_2 , c_γ , $c_{\gamma'}$ et de la valeur des paramètres d'ordre à l'équilibre η_0 .

Les expressions des constantes \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{D} sont obtenues en écrivant l'équilibre thermodynamique des deux phases qui stipule l'égalité des potentiels chimiques à l'équilibre :

$$\frac{\partial f_\gamma}{\partial c}(c_\gamma) = \frac{\partial f_{\gamma'}}{\partial c}(c_{\gamma'}) \quad (5.9)$$

La phase γ est caractérisée par des paramètres d'ordre nuls, conduisant à l'expression suivante de la densité d'énergie libre de cette phase :

$$f_\gamma(c) = \frac{\Delta f}{2} (c - c_\gamma)^2 \quad (5.10)$$

Notons au passage que le coefficient Δf doit être choisi strictement positif pour assurer la stabilité de la phase γ .

La densité d'énergie libre de la phase ordonnée est obtenue en remplaçant les paramètres d'ordre par leur valeur d'équilibre :

$$F_{\gamma'}(c) = \min_{\eta_0} f_{homo}(c, \eta_0, \eta_0, \eta_0) \quad (5.11)$$

La recherche des extrema conduit à l'expression de la norme des paramètres d'ordre η_{eq} en fonction de la concentration. Ce calcul, décrit en détail dans [Boussinot 07], conduit à la relation suivante :

$$\eta_{eq}(c) = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{D}} \left[1 + \sqrt{1 - \frac{4\mathcal{B}\mathcal{D}}{\mathcal{C}^2} (c_2 - c)} \right] \quad (5.12)$$

dans le cas où :

$$c > c_2 - \frac{\mathcal{C}^2}{4\mathcal{B}\mathcal{D}} \quad (5.13)$$

ce qui fixe le domaine d'existence de la phase γ' .

Nous devons maintenant choisir la valeur des coefficients \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{D} . Par soucis de simplicité, nous supposons une tangente commune de pente nulle. La combinaison des équations 5.9 et 5.12 conduit aux expressions suivantes pour les constantes \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{D} en fonction de deux paramètres libres Δf et c_2 :

$$\begin{cases} \mathcal{B} = \frac{2}{\eta_0^2} (c_{\gamma'} - c_\gamma) \\ \mathcal{C} = \frac{6}{\eta_0^3} (c_{\gamma'} - c_\gamma) (c_2 - c_\gamma) \\ \mathcal{D} = \frac{2}{\eta_0^4} (c_{\gamma'} - c_\gamma) (c_{\gamma'} + 2c_2 - 3c_\gamma) \end{cases} \quad (5.14)$$

avec :

$$\eta_0 = \frac{\eta_{eq}(c_{\gamma'})}{\sqrt{3}} \quad (5.15)$$

Energie libre de Ginzburg-Landau

Dans le cas d'une microstructure hétérogène, il faut prendre en compte le coût énergétique d'une interface entre les phases en présence. L'énergie libre est classiquement approximée par une fonctionnelle Ginzburg-Landau :

$$F_{GL} = \int_V \left[f_{homog}(c, \{\eta_i\}) + \frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{\beta}{2} |\nabla \eta_i|^2 \right] dV \quad (5.16)$$

où les termes de gradient ont été choisis isotropes, ce qui conduit à des énergies chimiques d'interface isotropes.

5.2.4 Traitement de l'élasticité

L'énergie élastique d'une microstructure composée d'inclusions cohérentes immergées dans une matrice s'écrit :

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_V \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}^{el} dV \quad (5.17)$$

Dans le cas d'une transformation de phase cohérente, la déformation élastique $\underline{\varepsilon}^{el}$ est reliée à la déformation totale $\underline{\varepsilon}$

$$\underline{\varepsilon}^{el}(\underline{r}) = \underline{\varepsilon}(\underline{r}) - \underline{\varepsilon}^0(\underline{r}) \quad (5.18)$$

où $\underline{\varepsilon}^0(\underline{r})$ représente la déformation hors contrainte. Dans l'hypothèse où les paramètres de maille des phases sont linéairement proportionnels à la concentration (loi de Vegard), la déformation hors contrainte s'écrit :

$$\underline{\varepsilon}^0(\underline{r}) = \underline{\varepsilon}^T \Delta c(\underline{r}) \quad (5.19)$$

avec $\Delta c(\underline{r}) = c(\underline{r}) - \bar{c}$, \bar{c} étant la concentration moyenne. Le tenseur $\underline{\varepsilon}^T$ associé à la transformation de phase $\gamma \rightarrow \gamma'$ est diagonal ($\varepsilon_{ij}^T = \varepsilon^T \delta_{ij}$) et ses composantes sont données par

$$\varepsilon^T = \frac{\delta}{c_{\gamma'} - c_{\gamma}} \quad (5.20)$$

où δ est le désaccord paramétrique, défini par :

$$\delta = 2 \frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma'} + a_{\gamma}} \quad (5.21)$$

L'énergie élastique implique une force motrice sur la diffusion qu'il faut évaluer. Lors d'une transformation de phase diffusive comme c'est le cas dans les superalliages base nickel, l'équilibre élastique est beaucoup plus rapide que le temps caractéristique de diffusion. Il est par conséquent possible de considérer, pour l'étude d'évolutions microstructurales, que l'équilibre mécanique est réalisé à tout instant. Les tenseurs de déformation et de contrainte sont donnés par les équations d'équilibre mécanique :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \underline{\sigma} = 0 \\ \underline{\bar{\sigma}} = \underline{\sigma}^a \text{ dans le cas d'une contrainte appliquée ou } \underline{\bar{\varepsilon}} = \underline{\varepsilon}^a \text{ dans le cas d'une déformation appliquée} \end{cases} \quad (5.22)$$

où $\underline{\bar{\sigma}}$ et $\underline{\bar{\varepsilon}}$ représentent respectivement les tenseurs de contrainte et de déformation moyennes.

Nous considérons un milieu périodique. Le tenseur de déformation est la somme d'une contribution moyenne $\bar{\underline{\varepsilon}}$ et d'une contribution périodique $\delta\underline{\varepsilon}(\mathbf{r})$ (telle que $\langle \delta\underline{\varepsilon} \rangle = 0$). Dans le cadre des petites perturbations, le champ de déplacement hétérogène $\underline{\mathbf{u}}$ est relié à la partie périodique du tenseur de déformation :

$$\delta\underline{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \underline{\mathbf{u}} + (\nabla \underline{\mathbf{u}})^T) \quad (5.23)$$

La loi de Hooke relie le tenseur de contrainte au tenseur de déformation élastique par l'intermédiaire du tenseur des raideurs $\underline{\underline{\lambda}}$: $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\lambda}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{el}$. Dans le cas des superalliages, les propriétés élastiques des phases γ et γ' sont différentes. Le tenseur des raideurs au point \mathbf{r} dépend donc de la microstructure en ce point. Dans le cadre d'une approche en champ, nous faisons donc dépendre $\underline{\underline{\lambda}}$ de la valeur locale du champ :

$$\underline{\underline{\lambda}}(c(\mathbf{r})) = \bar{\underline{\underline{\lambda}}} + \underline{\underline{\lambda}}' \Delta c(\mathbf{r}) \quad (5.24)$$

Le tenseur des raideurs moyen $\bar{\underline{\underline{\lambda}}}$ et la contribution hétérogène $\underline{\underline{\lambda}}'$ sont donnés par :

$$\begin{cases} \bar{\underline{\underline{\lambda}}} = \tau_\gamma \underline{\underline{\lambda}}^\gamma + \tau_{\gamma'} \underline{\underline{\lambda}}^{\gamma'} \\ \underline{\underline{\lambda}}' = \frac{\underline{\underline{\lambda}}^{\gamma'} - \underline{\underline{\lambda}}^\gamma}{c_{\gamma'} - c_\gamma} \end{cases}$$

où $\underline{\underline{\lambda}}^\gamma$ et $\underline{\underline{\lambda}}^{\gamma'}$ sont les tenseurs de raideurs des phases γ and γ' à l'équilibre, et où $\tau_\gamma = (c_{\gamma'} - \bar{c}) / (c_{\gamma'} - c_\gamma)$ et $\tau_{\gamma'} = 1 - \tau_\gamma$ sont respectivement les taux de phase des phases γ et γ' à l'équilibre incohérent.

La combinaison des équations 5.19 et 5.24 permet d'obtenir l'expression suivante pour le tenseur de contrainte moyen :

$$\bar{\underline{\underline{\sigma}}} = \bar{\underline{\underline{\lambda}}} : \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}} + \underline{\underline{\lambda}}' : [\langle \Delta c(\mathbf{r}) \delta\underline{\varepsilon}(\mathbf{r}) \rangle - \langle \Delta c(\mathbf{r}) \underline{\underline{\varepsilon}}^0(\mathbf{r}) \rangle] \quad (5.25)$$

Cette équation permet d'écrire la condition aux limites en contrainte imposée dans 5.22 comme une condition sur la déformation moyenne :

$$\bar{\underline{\underline{\varepsilon}}} = \bar{\underline{\underline{S}}} : [\underline{\underline{\lambda}}' : (\langle \Delta c(\mathbf{r}) \underline{\underline{\varepsilon}}^0(\mathbf{r}) \rangle - \langle \Delta c(\mathbf{r}) \delta\underline{\varepsilon}(\mathbf{r}) \rangle) + \underline{\underline{\sigma}}^a] \quad (5.26)$$

où $\bar{\underline{\underline{S}}} = \bar{\underline{\underline{\lambda}}}^{-1}$ est le tenseur des souplesses. Dans le cas d'une déformation imposée, on a directement $\bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}$ égal à $\underline{\underline{\varepsilon}}^a$.

Nous avons également implementé des conditions aux limites mixtes afin de pouvoir simuler des essais de traction :

$$\begin{cases} \bar{\varepsilon}_{11} = \varepsilon_{11}^a \\ \bar{\sigma}_{ij} = 0 \text{ pour } (i, j) \text{ différent de } (1,1) \end{cases} \quad (5.27)$$

L'équation d'équilibre mécanique de 5.22 est exprimée à l'aide du champ de déplacement moyen :

$$\bar{\lambda}_{ijkl} \frac{\partial^2}{\partial r_j \partial r_l} u_k = - \frac{\partial}{\partial r_j} [\{\bar{\lambda}_{ijkl} + \lambda'_{ijkl} \Delta c(\mathbf{r})\} [\bar{\varepsilon}_{kl} - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})] + \{\lambda'_{ijkl} \Delta c(\mathbf{r})\} \delta \varepsilon_{kl}(\mathbf{r})] \quad (5.28)$$

En introduisant un nouveau tenseur symétrique $\underline{\underline{\mathbf{h}}}$ et un nouveau vecteur $\underline{\underline{\mathbf{f}}}$ définis par

$$\underline{\underline{\mathbf{h}}}(\mathbf{r}) = \{\bar{\underline{\underline{\lambda}}} + \underline{\underline{\lambda}}' \Delta c(\mathbf{r})\} : [\bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\mathbf{r}) - \underline{\underline{\varepsilon}}^0(\mathbf{r})] + \{\underline{\underline{\lambda}}' \Delta c(\mathbf{r})\} : \delta \underline{\underline{\varepsilon}}(\mathbf{r}) \quad (5.29)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{f}}}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{h}}}(\mathbf{r}) \quad (5.30)$$

Dans l'espace de Fourier, l'équation d'équilibre mécanique 5.28 devient :

$$\underline{\underline{\mathbf{u}}}(\mathbf{q}) = \bar{\underline{\underline{G}}}(\mathbf{q}) \cdot \underline{\underline{\mathbf{f}}}(\mathbf{q}) \quad (5.31)$$

où $\bar{\underline{\underline{G}}}$ est le tenseur de Green associé au tenseur de raideurs moyen :

$$\bar{G}_{ij}^{-1}(\mathbf{q}) = \bar{\lambda}_{ijkl} q_k q_l \quad (5.32)$$

Le système d'équations 5.26 et 5.31 est équivalent au système d'équations de l'équilibre mécanique 5.22.

Dans le cas de l'élasticité homogène (i.e. $\underline{\lambda}' = 0$), $\underline{f}(\underline{r})$ ne dépend pas du déplacement hétérogène $\underline{u}(\underline{r})$ et (5.31) est la solution analytique pour le champ de déplacement. En injectant l'expression de $\underline{u}(\underline{q})$ et de $\underline{\varepsilon}$ dans l'énergie élastique 5.17, on aboutit à une expression analytique pour l'énergie élastique [Khachatryan 83] :

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_{\underline{q}}^* \frac{d\underline{q}}{(2\pi)^3} B(\underline{q}) |c(\underline{q})|^2 \quad (5.33)$$

où

$$\int_{\underline{q}}^* = \int_{\underline{q} \neq 0} \quad (5.34)$$

$$B(\underline{q}) = \underline{\sigma}^0(\underline{q}) : [\underline{\varepsilon}^0(\underline{q})]^* - \underline{q} \cdot \underline{\sigma}^0(\underline{q}) \cdot \underline{G}(\underline{q}) \cdot [\underline{\sigma}^0(\underline{q})]^* \cdot \underline{q} \quad (5.34)$$

$$\underline{\sigma}^0(\underline{q}) = \underline{\lambda} : \underline{\varepsilon}^0(\underline{q}) \quad (5.35)$$

Dans le cas de l'élasticité inhomogène, (5.31) est seulement une équation différentielle car \underline{u} et ses dérivées apparaissent des deux côtés de l'équation. Cependant, la différence de constantes élastiques entre les phases γ et γ' joue un rôle important lors d'évolutions microstructurales sous chargement dans les superalliages. L'équilibre mécanique est donc résolu itérativement à l'aide d'un algorithme de point fixe décrit au paragraphe 5.3.2.

5.3 Implémentation numérique

Cette section aborde la résolution numérique du modèle champs de phases, en décrivant successivement les schémas d'intégration des équations d'Allen-Cahn et Cahn-Hilliard et l'algorithme de point fixe permettant la résolution de l'équilibre mécanique.

5.3.1 Equations cinétiques

L'énergie libre totale F du système s'écrit :

$$F = \int_V \left[f_{hom}o(c, \{\eta_i\}) + \frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{\beta}{2} |\nabla \eta_i|^2 \right] dV + E_{el} \quad (5.36)$$

Les équations de Cahn-Hilliard et Allen-Cahn s'écrivent alors respectivement :

$$\frac{\partial c}{\partial t}(\underline{r}, t) = M \nabla^2 \left[\frac{\partial f_{hom}o}{\partial c}(\underline{r}, t) - \lambda \nabla^2 c(\underline{r}, t) + \frac{\delta E_{el}}{\delta c(\underline{r}, t)} \right] \quad (5.37)$$

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t}(\underline{r}, t) = -L \left[\frac{\partial f_{hom}o}{\partial \eta_i}(\underline{r}, t) - \beta \nabla^2 \eta_i(\underline{r}, t) \right] \quad (5.38)$$

Ces équations sont résolues dans l'espace de Fourier, ce qui présente deux intérêts principaux. L'aspect local du laplacien revient à une simple multiplication par $-\underline{q}^2$. Enfin, la résolution en Fourier permet l'utilisation de schémas d'intégration semi-implicites très efficaces tels que celui présenté dans [Chen 98]. Cet algorithme numérique est brièvement résumé ici.

Nous considérons dans un premier temps l'équation d'Allen-Cahn, qui, dans l'espace de Fourier, s'écrit :

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t}(\underline{q}, t) = -L \left[\left\{ \frac{\partial f_{hom}o}{\partial \eta_i}(\underline{r}, t) \right\}_{\underline{q}} + \beta \underline{q}^2 \eta_i(\underline{q}, t) \right] \quad (5.39)$$

A l'ordre 1, sa discrétisation en temps conduit à l'équation 5.40 :

$$\frac{\eta_i(\underline{\mathbf{q}}, t + \Delta t) - \eta_i(\underline{\mathbf{q}}, t)}{\Delta t} = -L \left[\left\{ \frac{\partial f_{hom}}{\partial \eta_i}(\underline{\mathbf{r}}, t) \right\}_{\underline{\mathbf{q}}} + \beta \underline{\mathbf{q}}^2 \eta_i(\underline{\mathbf{q}}, t + \Delta t) \right] \quad (5.40)$$

Le terme linéaire en η_i dans la force motrice est évalué au temps $t + \Delta t$, d'où le caractère semi-implicite de ce schéma. L'équation à résoudre s'écrit donc :

$$\eta_i(\underline{\mathbf{q}}, t + \Delta t) = \frac{\eta_i(\underline{\mathbf{q}}, t) - L\Delta t \left\{ \frac{\partial f_{hom}}{\partial \eta_i}(\underline{\mathbf{r}}, t) \right\}_{\underline{\mathbf{q}}}}{1 + L\Delta t \beta \underline{\mathbf{q}}^2} \quad (5.41)$$

Quant à l'équation de Cahn-Hilliard, elle s'écrit dans l'espace de Fourier :

$$\frac{\partial c}{\partial t}(\underline{\mathbf{q}}, t) = -M \underline{\mathbf{q}}^2 \left[\left\{ \frac{\partial f_{hom}}{\partial c}(\underline{\mathbf{r}}, t) \right\}_{\underline{\mathbf{q}}} + \lambda \underline{\mathbf{q}}^2 c(\underline{\mathbf{q}}, t) + \left\{ \frac{\delta E_{el}}{\delta c(\underline{\mathbf{r}}, t)} \right\}_{\underline{\mathbf{q}}} \right] \quad (5.42)$$

La contribution élastique, dans le cas de l'élasticité inhomogène, n'a pas d'expression analytique. Elle peut cependant être séparée en une partie homogène et une partie inhomogène. La partie homogène 7.18, linéaire en concentration, est évaluée au temps $t + \Delta t$. La contribution de la partie inhomogène de l'élasticité s'écrit alors :

$$\left\{ \frac{\delta E_{el}}{\delta c(\underline{\mathbf{r}}, t)} \right\}_{\underline{\mathbf{q}}} - B(\underline{\mathbf{q}})c(\underline{\mathbf{q}}, t) \quad (5.43)$$

et est traitée explicitement. Par conséquent, l'équation à résoudre s'écrit :

$$c(\underline{\mathbf{q}}, t + \Delta t) = \frac{c(\underline{\mathbf{q}}, t) - M \underline{\mathbf{q}}^2 \Delta t \left[\left\{ \frac{\partial f_{hom}}{\partial c}(\underline{\mathbf{r}}, t) \right\}_{\underline{\mathbf{q}}} + \left\{ \frac{\delta E_{el}}{\delta c(\underline{\mathbf{r}}, t)} \right\}_{\underline{\mathbf{q}}} - B(\underline{\mathbf{q}})c(\underline{\mathbf{q}}, t) \right]}{1 + M \underline{\mathbf{q}}^2 \Delta t (\lambda \underline{\mathbf{q}}^2 + B(\underline{\mathbf{q}}))} \quad (5.44)$$

5.3.2 Algorithme de résolution de l'équilibre élastique

Ce paragraphe décrit l'algorithme de point fixe utilisé pour la résolution des équations de l'équilibre mécanique 5.22. Il est similaire à ceux décrits dans [Moulinec 94, Hu 01b, Gururajan 07]. Certains des algorithmes décrits dans ces publications sont basés sur les déformations [Moulinec 94, Hu 01b] et d'autres sur les déplacements [Gururajan 07].

Le système à résoudre est constitué des équations 5.31 et 5.26. Connaissant $\underline{\mathbf{u}}^{(n)}(\underline{\mathbf{q}})$ et $\bar{\underline{\epsilon}}^{(n)}$ à l'itération (n) , on peut calculer le tenseur de déformation hétérogène, tout d'abord dans l'espace de Fourier $\delta \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{\mathbf{q}})$, puis dans l'espace réel $\delta \underline{\underline{\epsilon}}(\underline{\mathbf{r}})$. L'équation (5.29) permet de calculer $\underline{\mathbf{h}}(\underline{\mathbf{r}})$. En se plaçant dans l'espace de Fourier, nous obtenons $\underline{\mathbf{h}}(\underline{\mathbf{q}})$ et calculons $\underline{\mathbf{f}}(\underline{\mathbf{q}})$ grâce à (5.30). Finalement, $\underline{\mathbf{u}}^{(n+1)}(\underline{\mathbf{q}})$ et $\bar{\underline{\epsilon}}^{(n+1)}$ sont déduits de 5.31 et 5.26.

On itère l'algorithme de point fixe jusqu'à atteindre la convergence. Le test de convergence utilisé est :

$$\begin{aligned} \max_{\underline{\mathbf{q}}} \left| \underline{\mathbf{u}}^{(n+1)}(\underline{\mathbf{q}}) - \underline{\mathbf{u}}^{(n)}(\underline{\mathbf{q}}) \right| &< v d \epsilon^T \\ \sum_{i,j} \left| \bar{\underline{\epsilon}}_{i,j}^{(n+1)} - \bar{\underline{\epsilon}}_{i,j}^{(n)} \right| &< v \epsilon^T \end{aligned}$$

où d est le pas de grille et v le critère de convergence, fixé à 10^{-5} .

Pour le premier pas de temps de la simulation ($t = 0$), $\underline{\mathbf{u}}^{(0)}(\underline{\mathbf{q}})$ et $\bar{\underline{\epsilon}}^{(0)}$ sont initialisés avec les solutions analytiques de l'élasticité homogène. Par la suite ($t > 0$), la première itération de l'algorithme de résolution de l'équilibre mécanique est initialisée à partir des solutions du pas de temps précédent. L'annexe E présente

une étude bibliographique des constantes élastiques des phases γ et γ' montrant que les superalliages base Ni présentent une faible inhomogénéité élastique. En conséquence, l'algorithme de point fixe converge en un nombre réduit d'itérations. Typiquement, 3 itérations sont nécessaires pour les premiers pas de temps, et seulement une itération après.

5.3.3 Discrétisation de l'espace

Introduction des termes d'hétérogénéité Le paragraphe 5.3.1 a montré la discrétisation temporelle des équations champs de phases. Nous abordons ici leur discrétisation spatiale. Nous travaillons sur une grille régulière définie par un pas de grille d . Le modèle d'énergie libre "chimique", décrit par l'équation 5.16, écrit sur la grille et adimensionné, devient :

$$\tilde{F} = \frac{F}{\Delta f d^3} = \sum_{\mathbf{r}} \left[\tilde{f}_{\text{homo}}(c, \{\eta_i\}) + \frac{\tilde{\lambda}}{2} |\tilde{\nabla} c|^2 + \frac{\tilde{\beta}}{2} \sum_i |\tilde{\nabla} \eta_i|^2 \right] \quad (5.45)$$

où :

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\text{homo}} &= \frac{f_{\text{homo}}}{\Delta f} \\ \tilde{\lambda} &= \frac{\lambda}{\Delta f d^2} \\ \tilde{\beta} &= \frac{\beta}{\Delta f d^2} \\ \tilde{\nabla} &= d \nabla \end{aligned} \quad (5.46)$$

Les grandeurs $\tilde{\lambda}$ et $\tilde{\beta}$ sont à calibrer de façon à obtenir des interfaces suffisamment diffuses à l'échelle du pas de grille. Classiquement, l'interface doit s'étaler sur au moins 3 pas de grille. L'énergie adimensionnée d'une interface entre les phases γ et γ' est égale à :

$$\tilde{\sigma} = \sum_{\mathbf{r}} \left\{ \left(\tilde{f}(c^{eq}(\mathbf{r}), \eta_i^{eq}(\mathbf{r})) - \tilde{f}_{\text{min}}(\bar{c}) \right) + \frac{\tilde{\lambda}}{2} |\tilde{\nabla} c^{eq}(\mathbf{r})|^2 + \frac{\tilde{\beta}}{2} \sum_{i=1}^3 |\tilde{\nabla} \eta_i^{eq}(\mathbf{r})|^2 \right\} \quad (5.47)$$

où \tilde{f}_{min} est l'énergie de référence correspondant à l'énergie libre associée à la tangente commune de f_γ et $f_{\gamma'}$, nulle dans notre cas. Pour une interface plane et lorsque l'interface est suffisamment diffuse, les profils d'équilibre sont tels qu'il existe une égalité entre les contributions homogène et hétérogène à cette énergie :

$$\sum_{\mathbf{r}} \tilde{f}(c^{eq}(\mathbf{r}), \eta_i^{eq}(\mathbf{r})) = \sum_{\mathbf{r}} \left\{ \frac{\tilde{\lambda}}{2} |\tilde{\nabla} c^{eq}(\mathbf{r})|^2 + \frac{\tilde{\beta}}{2} \sum_{i=1}^3 |\tilde{\nabla} \eta_i^{eq}(\mathbf{r})|^2 \right\} \quad (5.48)$$

Comme dans [Boussinot 07], nous utilisons cette propriété pour estimer l'ordre de grandeur des coefficients $\tilde{\lambda}$ et $\tilde{\beta}$. En supposant que la contribution énergétique des termes de gradient est du même ordre de grandeur pour la concentration et les paramètres d'ordre, il obtient les ordres de grandeur suivants :

$$\tilde{\lambda} = \tilde{f}_{\text{col}} \left(\frac{\xi}{\delta c} \right)^2 \quad (5.49)$$

$$\tilde{\beta} = \frac{1}{3} \tilde{f}_{\text{col}} \left(\frac{\xi}{\delta \eta} \right)^2 \quad (5.50)$$

où ξ est la largeur de l'interface en unité d , \tilde{f}_{col} est la valeur du maximum de la densité d'énergie libre adimensionnée le long du profil de l'interface, $\delta c = c_{\gamma'} - c_\gamma$ et $\delta \eta = 1$.

L'énergie d'interface expérimentale σ est reliée à l'énergie d'interface sans dimension $\tilde{\sigma}$ par :

$$\sigma = \tilde{\sigma} d \Delta f \quad (5.51)$$

Cette relation est utilisée pour calculer Δf :

$$\Delta f = \frac{\sigma}{\tilde{\sigma}d} \quad (5.52)$$

Δf décroît donc quand on augmente le pas de grille.

Contrôle des concentrations de l'équilibre cohérent

La compétition entre énergie élastique et énergie d'origine chimique est gérée par le rapport sans dimension :

$$\chi = \frac{C_{44}(\varepsilon^T)^2}{\Delta f} = C_{44}\varepsilon^T \frac{\tilde{\sigma}d}{\sigma} \quad (5.53)$$

Il est important de noter qu'une augmentation du pas de grille d entraîne une augmentation du rapport χ . Nous savons par ailleurs que l'élasticité modifie les concentrations d'équilibre dans le sens de leur rapprochement. Cela va également être le cas dans du modèle adopté ici. Dans [Boussinot 07], une étude montre que cette influence de l'élasticité sur l'équilibre du système tend à être relativement importante lorsque l'on augmente le pas de grille. Il faut bien garder à l'esprit que, dans notre modèle, les courbures de la fonctionnelle d'énergie libre homogène ne sont pas représentatives de la physique du système. Boussinot a donc développé une méthode rendant les concentrations de l'équilibre cohérent indépendantes du pas de grille. Les concentrations de l'équilibre cohérent sont obtenues pour une configuration dans laquelle l'énergie élastique est minimale, c'est-à-dire une microstructure composée de plaquettes infinies. Une façon de s'affranchir de l'influence du pas de grille sur l'équilibre cohérent consiste donc à retrancher de l'énergie totale du système l'énergie élastique de la configuration en plaquettes. Dans le cas de l'élasticité homogène, cette énergie est donnée par :

$$\frac{B_{min}}{2} \int_{\vec{q}}^* \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} |c(\vec{q})|^2 \quad (5.54)$$

où B_{min} correspond au minimum de la fonction $B(\vec{q})$ définie par l'équation 7.19. La densité d'énergie libre homogène du système f'_{homo} devient :

$$f'_{homo} = f_{homo} - \frac{B_{min}}{2} (c - \bar{c})^2 \quad (5.55)$$

Cette modification revient en fait à décaler les concentrations de l'équilibre incohérent. Boussinot a montré que ce décalage du diagramme de phases cohérent permet de conserver des concentrations de l'équilibre cohérent constantes quel que soit le pas de grille utilisé. Notons que cette correction est exacte pour des constantes élastiques homogènes sur le système mais qu'elle n'est qu'approchée dans le cas de l'élasticité inhomogène qui nous intéresse ici. Par conséquent, nous observerons tout de même de légères fluctuations des concentrations de l'équilibre cohérent suivant le pas de grille utilisé.

Notons que, pour fixer les valeurs des concentrations de l'équilibre cohérent, nous allons supposer que celles-ci sont proches des concentrations de l'équilibre incohérent. Bien que ces concentrations soient en principe différentes, l'écart est probablement très faible et sa prise en compte va au-delà du modèle présenté ici [Ardell 00].

5.4 Simulations avec le modèle champs de phases élastique

5.4.1 Calibration des grandeurs physiques du modèle

Cette partie détaille le choix des valeurs numériques des paramètres physiques entrant dans le modèle champs de phases.

Fonctionnelle d'énergie libre homogène Les concentrations des phases γ et γ' en coexistence incohérente sont déterminées à partir du diagramme de phases incohérent (figure 5.1), obtenu par simulation ou expérimentalement [Ardell 00, Wang 07]. Il peut être approximé par les fonctions suivantes, dans

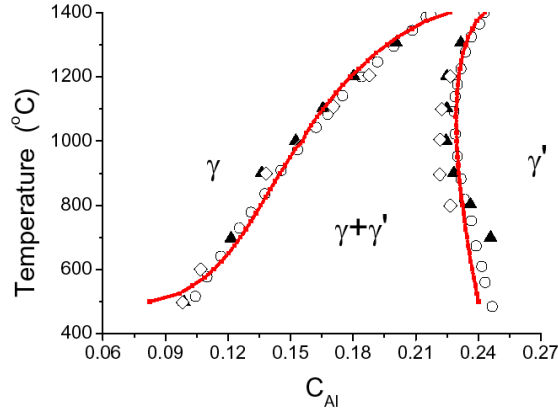


FIG. 5.1. Diagramme de phases du système Ni-Al d'après [Wang 07]

lesquelles T est la température en K :

$$c_{\gamma} = 1 \cdot 10^{-4}T + 0.0277 \quad (5.56)$$

$$c_{\gamma'} = -2.5 \cdot 10^{-5}T + 0.2613 \quad (5.57)$$

Ces expressions conduisent à $c_{\gamma} = 0.15$ et $c_{\gamma'} = 0.231$ à 950°C . Les superalliages ont un taux de phase γ' élevé, autour de 68% pour l'AM1. Une concentration moyenne de l'ordre de 0.2 sera utilisée par la suite.

De plus, il faut fixer la concentration c_2 entrant dans la fonctionnelle d'énergie libre homogène. D'après 5.13, la fonctionnelle d'énergie libre de la phase désordonnée est stable si $c < c_2$. Puisque notre objectif n'est pas d'étudier les premiers instants de l'évolution microstructurale, nous choisissons une valeur de c_2 inférieure aux concentrations moyennes utilisées pour nos simulations, soit $c_2 = 0.18$. Ce choix garantit une apparition rapide de la phase γ' dans nos simulations. Enfin, le paramètre d'ordre d'équilibre η_0 est choisi égal à 1.

La figure 5.2 montre les lignes de niveaux de la fonctionnelle pour $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3$.

Energie élastique Les quantités nécessaires pour calculer l'énergie élastique sont le désaccord paramétrique et les constantes élastiques de chacune des phases. L'annexe E propose une identification des constantes élastiques des phases γ et γ' .

Quant au misfit, cette grandeur est relativement malaisée à déterminer expérimentalement, et ce pour différentes raisons. Le premier problème est lié au fait que l'on ne dispose la plupart du temps des phases que lorsqu'elles sont en présence dans le superalliage. Il faut alors bien distinguer le désaccord paramétrique dit "non-contraint" δ , qui caractérise l'écart de paramètres de mailles des deux phases considérées séparément du misfit "sous contrainte" δ_c , qui est lui mesuré lorsque les deux phases sont en présence. Dans le cas de l'alliage biphasé, une partie du désaccord paramétrique est relaxée élastiquement, ce qui entraîne des différences entre ces deux valeurs. Dans les simulations champs de phases, nous avons besoin de la valeur non-contrainte.

Une étude bibliographique a donc été réalisée afin d'en déterminer une valeur pour l'AM1 aux températures d'environ 1000°C . Nous nous sommes tout d'abord intéressés aux moyens d'estimer la différence entre misfit contraint et non-contraint. La première technique consiste à séparer les deux phases [Nathal 85]. Il est possible d'effectuer une attaque chimique ou électrolytique d'une des deux phases. La

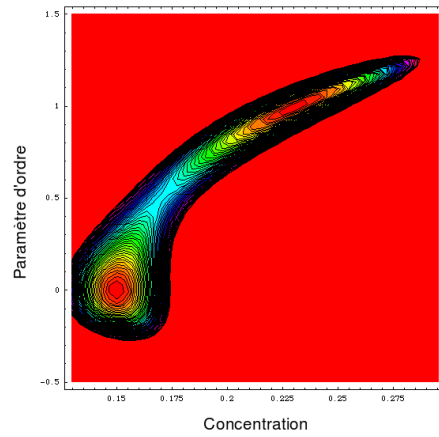


FIG. 5.2. Lignes de niveaux de la fonctionnelle pour $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3$. Les zones rouges représentent les faibles énergies libres et l'énergie libre augmente en allant vers le bleu. Les zones rouges sans lignes de niveaux sont une saturation du code de couleur par des valeurs élevées de l'énergie libre.

phase restante se trouve alors à l'état de poudre et on peut mesurer son paramètre de maille. Cette approche est utilisée pour la détermination de a_γ . Cependant, n'ayant pas la valeur correspondante de a_γ à disposition, il est difficile d'en tirer des résultats pertinents. D'autres auteurs ont déterminé la densité de dislocations aux interfaces γ/γ' , cette densité étant proportionnelle au désaccord paramétrique si celui-ci est entièrement relaxé plastiquement. Enfin, des calculs analytiques ou des simulations par éléments finis permettent de calculer la déformation élastique due au misfit [Ganghoffer 91, Feng 96]. Grâce à de tels calculs, en admettant la valeur du misfit sous contrainte connue, la formule permet d'accéder au misfit non-contraint.

Différentes techniques d'imagerie permettent d'accéder à des grandeurs liées à la cristallographie telles que les paramètres de maille. Pour les superalliages, la diffraction des rayons X [Biermann 95, Diologent 02] et la CEBD [Lahrman 98, Völkl 98] sont utilisées. Cependant, étant donnée la faible différence de paramètre de maille entre les deux phases, Royer et al. [Royer 98] montrent que pour l'AM1 en dessous de 1200°C, il est difficile de distinguer deux pics de diffraction. Au dessus de cette température, ils observent de nombreuses dislocations, ce qui les conduit à une valeur de misfit libre. Enfin, la dernière difficulté est liée aux ségragations chimiques dans les superalliages. De nombreux auteurs [Caron 99, Schulze 00] montrent que le misfit est plus fort dans les dendrites que dans les interdendrites. Une mesure par diffraction X permet de remonter à une valeur moyenne du misfit, qui n'est finalement représentative d'aucune zone du matériau.

D'après les résultats de [Royer 98], nous nous sommes donc fixés une plage de valeurs admissibles pour le désaccord paramétrique comprise entre -0.1% et -0.2% pour des températures autour de 1000°C.

Paramétrage des interfaces Deux types de valeurs sont des données d'entrée de nos simulations : une valeur physique de l'énergie d'interface entre γ et γ' et des valeurs numériques qui sont les préfacteurs des termes de gradient λ et β .

Une détermination précise de l'énergie d'interface entre les phases γ et γ' est difficile à atteindre expérimentalement. Les valeurs d'énergies d'interfaces sont généralement déduites d'expériences de mûrissement en utilisant des lois de type LSW. De plus, des énergies très faibles sont obtenues. Par exemple, une valeur de 4 mJ.m^{-2} a récemment été publiée pour un alliage binaire Ni-Al à 700°C [Ardell 05]. Une alternative consiste à réaliser des simulations à l'échelle atomique et diverses tentatives ont été effectuées pour calculer l'énergie d'interface γ/γ' . Cependant, comme les énergies mises en jeu sont très faibles, un potentiel très précis est nécessaire pour prédire une valeur d'énergie d'interface fiable. De plus, une attention spéciale doit être portée à la définition d'une énergie d'interface entre deux phases ne possédant pas le

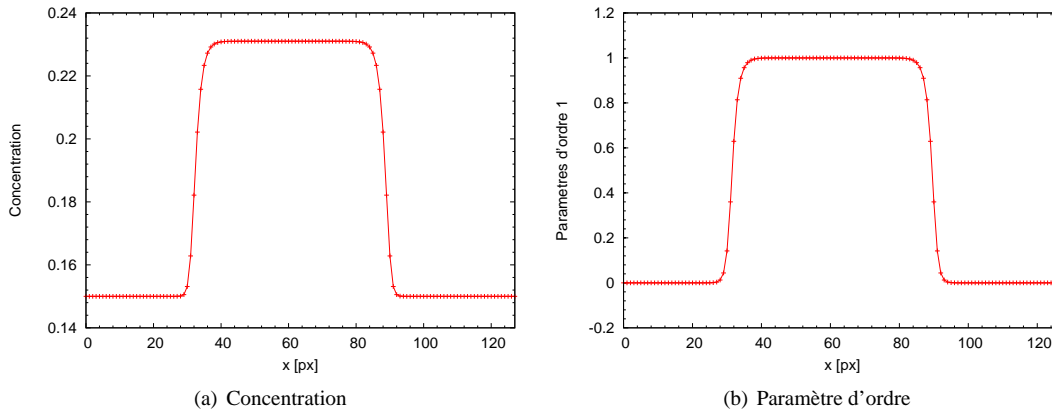


FIG. 5.3. Profils de concentration et de paramètre d'ordre simulés en 1D afin de valider le choix des valeurs numériques des paramètres λ et β .

même paramètre de maille [Boussinot 09].

Dans le cas présent, nous avons besoin de l'énergie d'interface pour l'AM1 autour de 1000°C. Nous avons choisi de calibrer ce paramètre sur la taille critique ℓ_{3D} à partir de laquelle les précipités sphériques se transforment en précipités cuboïdaux. Cette taille peut être mesurée sur des micrographies. D'après les micrographies dans [Diologent 02], nous avons trouvé une valeur d'environ 50 nm pour ℓ_{3D} . Cette taille caractéristique peut également être évaluée analytiquement en comparant l'énergie d'une sphère de γ' isolée dans une matrice γ et l'énergie élastique d'un cube isolé de même volume. Un calcul approché décrit dans [Khachatryan 83] et repris dans [Boussinot 07] donne :

$$\ell_{3D} = \frac{C_{11}C_{44}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})}{(C_{11} + 2C_{12})^2|\Delta|} \left(0.0601 + 0.0429 \frac{\Delta}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \right)^{-1} \frac{\sigma}{C_{44}\epsilon^{02}} \quad (5.58)$$

avec $\Delta = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$ et σ l'énergie d'interface γ/γ' . Pour un misfit de -0.1% , cette formule donne, pour les constantes élastiques proposées, $\sigma \approx 0.6 \text{ mJ.m}^{-2}$.

Pour des simulations 2D, la microstructure est invariante par translation suivant l'axe z . La transition morphologique sphère-cube devient une transition cercle-carré. Cette transition est caractérisée par ℓ_{2D} . La formule analytique est donnée dans [Boussinot 07] et donne pour les constantes élastiques retenues dans ce travail :

$$\frac{\ell_{2D}}{\ell_{3D}} \approx 0.125 \quad (5.59)$$

Par conséquent, dans nos simulations 2D nous utiliserons une énergie d'interface $\sigma_{2D} = 5 \text{ mJ.m}^{-2}$.

Dans le paragraphe 5.3.3, une estimation des coefficients $\tilde{\lambda}$ et $\tilde{\beta}$ a été proposée. Leurs valeurs sont affinées par la simulation d'une interface γ/γ' en 1D. Les valeurs retenues sont $\lambda = 0.21$ et $\beta = 0.000975$. La figure 5.3 montre que ces valeurs conduisent à des interfaces suffisamment diffuses à l'échelle du pas de grille.

Coefficient de diffusion La linéarisation de (5.4) autour de c_γ permet d'obtenir une relation entre M et le coefficient d'interdiffusion :

$$M = \frac{D(c_\gamma)}{\Delta f} \quad (5.60)$$

où $D(c_\gamma) = D_0 \exp(-\Delta U/kT)$ est le coefficient d'interdiffusion. Les valeurs numériques pour D_0 et ΔU sont prises dans [Fujiwara 99] ($D_0 = 1.4510^{-4} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, $\Delta U = 2.8 \text{ eV}$). Le paramètre de relaxation L dans (5.3) est pris égal à Md^2 .

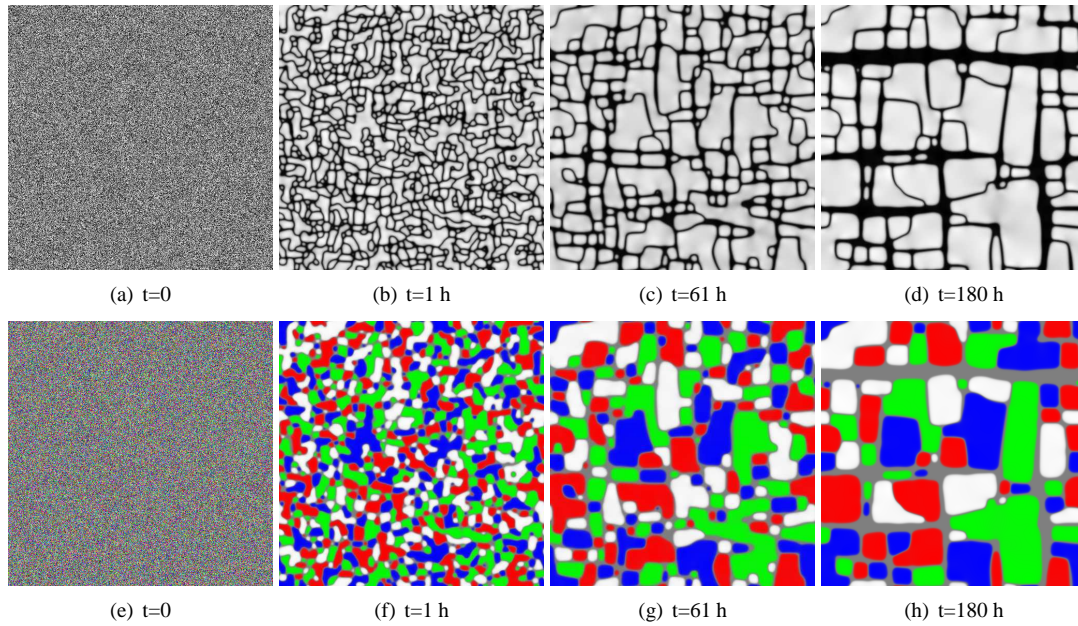


FIG. 5.4. Génération de la microstructure cuboïdale γ/γ' . Les images de la ligne supérieure représentent le champ de concentration, les images de la ligne inférieure représentent les champs de paramètres d'ordre. La simulation fait $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$.

5.4.2 Génération de la microstructure cuboïdale en 2D

Le but de ce chapitre est d'étudier la mise en radeaux des précipités initialement cuboïdaux. Dans cette section, nous présentons les résultats du modèle champs de phases conduisant à la microstructure cuboïdale qui sera utilisée ultérieurement comme configuration initiale pour les simulations sous chargement mécanique. La génération de la microstructure cuboïdale a déjà été traitée dans la littérature. La majeure partie des publications traitent ce problème en élasticité homogène [Wang 98, Zhu 04, Wang 08]. Certains travaux ont toutefois été réalisés dans des situations où les propriétés élastiques des deux phases sont très différentes [Hu 01b, Zhu 01]. Dans les superalliages, les constantes élastiques des phases γ et γ' ne diffèrent que d'environ 10% comme nous l'avons vu dans l'annexe E. L'influence de l'inhomogénéité des constantes élastiques devrait donc être relativement faible si le chargement extérieur est nul.

Une grille régulière de 512×512 points est utilisée pour générer la microstructure γ/γ' à partir d'un état désordonné sous des conditions de bords libres. Le désaccord paramétrique étant relaxé élastiquement à 950°C , la génération de la microstructure est réalisée en élasticité. On choisit un misfit de -0.1% . La figure 5.4 présente l'évolution microstructurale. La fraction volumique d'équilibre vaut 72% . Les images 5.4(a)-(d) représentent le champ de concentration local dans un dégradé de gris. Les images 5.4(e)-(h) représentent les champs de paramètres d'ordre suivant un schéma de couleurs qui fait apparaître les quatre variants de translation de la phase γ' et la phase γ dans des couleurs différentes. L'évolution microstructurale débute avec la formation de nombreux domaines γ' dont la forme n'est pas bien définie. Pendant le recuit, la taille moyenne des précipités augmente et leurs formes évoluent de telle sorte qu'après 180 h on obtienne la microstructure caractéristique des superalliages composée de cubes de γ' alignés avec les directions cubiques. Dans cette microstructure, la phase γ' est toujours entourée par la phase γ ce qui est en accord avec le fait que l'énergie de paroi d'antiphase dans la phase γ' est supérieure à deux fois l'énergie d'interface γ/γ' [Kikuchi 79, Le Bouar 03].

La figure 5.5 montre un zoom de la microstructure après 61 h de recuit. Cette image contient de gros précipités cuboïdaux et de plus petits qui ont une forme plus sphérique. Cette observation peut être utilisée pour estimer la taille critique ℓ_{2D} définie au paragraphe 5.4.1. Le précipité 1, dont la taille est de $82 \times 55\ \text{nm}$, est clairement cuboïdal tandis que le précipité 2, dont le diamètre est de $35\ \text{nm}$, est presque sphérique. Par

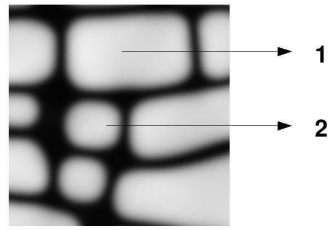


FIG. 5.5. Zoom sur la figure 5.4(c), taille 170 nm x 170 nm.

conséquent la taille critique de transition sphère cube est d'environ 50 nm comme c'est le cas pour l'AM1.

La figure 5.4(d) montre une dispersion importante sur la taille des précipités comparée aux micrographies expérimentales. Comme montré dans [Hu 01b, Zhu 01], une dispersion moins importante peut être obtenue quand l'inhomogénéité élastique est très forte. D'après les simulations de [Hu 01b, Zhu 01], les constantes élastiques des précipités doivent être deux fois plus importantes que celles de la matrice pour retrouver une microstructure similaire à celle de l'AM1. Une telle inhomogénéité élastique est en désaccord avec toutes les mesures expérimentales.

5.5 Modélisation phénoménologique de la plasticité

L'étude bibliographique de la mise en radeaux dans les superalliages a mis en évidence le rôle joué par les dislocations en relaxant une partie des contraintes de cohérence. La question qui se pose alors est : comment introduire l'activité plastique dans une modélisation champs de phases ?

Une première approche consiste à introduire les dislocations [Leonard 98, Hu 01a] et leur dynamique [Rodney 01, Wang 01, Rodney 03, Zhou 07a] dans un modèle champs de phases. Les dislocations sont alors représentées par leur déformation libre et évoluent individuellement dans le champ élastique qu'elles génèrent. Cependant, la simulation à l'échelle mésoscopique des interactions mutuelles entre dislocations des 12 systèmes octaédriques et l'évolution de la microstructure γ/γ' est très lourde. En effet, dans cette approche de la plasticité en champs de phases, la taille du coeur des dislocations vaut plusieurs pas de grilles. La taille du coeur est essentielle pour décrire les interactions entre dislocations à courte distance. Par conséquent, un pas de grille subnanométrique est nécessaire pour reproduire des dislocations avec une taille de coeur réaliste. Cette limite empêche la réalisation de simulations à l'échelle du micron. Notons que cette méthode a néanmoins récemment été utilisée [Zhou 07a] et a montré que la déformation plastique joue un rôle majeur dans la mise en radeaux. C'est pourquoi l'introduction de l'activité plastique au travers d'un tenseur de déformation plastique mésoscopique s'avère intéressante. Une première version de cette approche a été proposée dans [Boussinot 07] où une décroissance du désaccord paramétrique a été introduite pour rendre compte des conséquences de l'activité plastique. Cet approche, quoique très simpliste, a néanmoins permis de simuler la désorientation des radeaux après de très longs temps de fluage, comme observé dans les expériences. Une autre version de cette approche a été proposée dans [Zhou 08]. Dans cet article, un tenseur de déformation plastique, lié aux distances entre dislocations observées dans les superalliages en fluage, est introduit dans un modèle champs de phases mais en supposant une activité plastique égale dans tous les couloirs de matrice.

L'objet de cette partie est donc de développer un modèle champs de phases avec plasticité plus physique mais permettant la réalisation de simulations à l'échelle mésoscopique. L'utilisation d'un modèle de viscoplasticité phénoménologique, tel que celui de Cailletaud présenté au chapitre 1, est la méthode qui a été naturellement suivie ici. Des modèles similaires ont été proposés dans la littérature. Notons les travaux de Ubachs [Ubachs 05] qui a étudié le comportement mécanique de soudures étain-plomb en présence d'évolutions microstructurales, même si dans ce modèle champs de phases la plasticité n'influence pas l'évolution de la microstructure. Des modèles champs de phases couplés à l'activité plastique ont été pro-

posés très récemment [Uehara 07, Guo 08] et appliqués respectivement à la croissance de grains et à la précipitation d'hydrures de zirconium.

Cette section aborde le couplage entre le modèle champs de phases décrit précédemment et la plasticité traitée à l'aide du modèle cristallin, ainsi que son implémentation numérique dans le code champs de phases du LEM. Ce modèle est ensuite appliqué à la simulation d'évolutions microstructurales sous chargement dans l'AM1.

5.5.1 Retour sur la théorie des champs de phases - couplage avec la viscoplasticité

Au début de ce chapitre nous avons construit les équations cinétiques de manière phénoménologique en supposant une relation linéaire entre la variation temporelle du champ et la force motrice associée. La distinction entre champs non-conservés et conservés permet d'aboutir aux équations d'Allen-Cahn et de Cahn-Hilliard. Néanmoins, Gurtin [Gurtin 96] a proposé une autre construction de ces équations à partir d'une approche thermodynamique similaire à celle classiquement utilisée en mécanique. Dans le cadre de ce travail couplant évolution microstructurale et plasticité, il nous semble intéressant de se pencher sur cette théorie.

Approche de Gurtin

L'état du matériau dépend des variables suivantes :

- Le champ de concentration c et son gradient ∇c ;
- Le potentiel chimique μ et de son gradient $\nabla \mu$;
- Les champs de paramètres d'ordre à longue distance η_k et leurs gradients $\nabla \eta_k$;
- Le champ de déformation élastique ε^e ;
- Les variables internes V_k parmi lesquelles les variables liées à l'état d'écrouissage du matériau.

Equations d'équilibre Gurtin [Gurtin 96] suppose l'existence de microforces qui traduisent le travail des champs (concentration, paramètres d'ordre). Il existe donc un vecteur microcontrainte $\underline{\xi}$, ainsi que des microforces associées, π et γ , représentant respectivement les microforces internes et externes. Dans le cas présent, on suppose qu'il y a deux équilibres de microforces liés à la concentration et à l'état d'ordre. Ces équilibres sont donnés par :

$$\nabla \cdot \underline{\xi}_c + \pi_c + \gamma_c = 0 \quad (5.61)$$

$$\nabla \cdot \underline{\xi}_{\eta_k} + \pi_{\eta_k} + \gamma_{\eta_k} = 0 \quad (5.62)$$

A l'équilibre des microforces, il faut bien sûr ajouter les équations d'équilibre classiques, c'est-à-dire l'équation de conservation de la matière :

$$\left(\int_V \dot{c} dV \right) + \int_{\partial V} \underline{h} \cdot \underline{n} dS = 0 \quad (5.63)$$

pour chaque volume de contrôle V , avec \underline{h} le flux de matière à travers dS (on suppose qu'il n'y a pas d'apport de matière de l'extérieur), ce qui s'écrit de manière locale :

$$\dot{c} = -\nabla \cdot \underline{h} \quad (5.64)$$

ainsi que l'équation d'équilibre macroscopique (en supposant qu'il n'y a pas de forces volumiques) :

$$\nabla \cdot \underline{\sigma} = 0 \quad (5.65)$$

Second principe La puissance des efforts extérieurs s'écrit :

$$\begin{aligned}
 P_{ext} = & \int_{\partial V} (\underline{\xi}_c \cdot \underline{n}) \dot{c} \, dS + \int_V \gamma_c \dot{c} \, dV + \int_{\partial V} (\underline{\xi}_{\eta_k} \cdot \underline{n}) \dot{\eta}_k \, dS + \int_V \gamma_{\eta_k} \dot{\eta}_k \, dV \\
 & - \int_{\partial V} \underline{\mu} \underline{h} \cdot \underline{n} \, dS + \int_{\partial V} (\underline{\sigma} \cdot \underline{n}) : \underline{\dot{\xi}} \, dS
 \end{aligned} \quad (5.66)$$

Le second principe de la thermodynamique $\int_{\partial V} \dot{f} \, dV \leq P_{ext}$ donne :

$$\int_V \dot{f} \, dV \leq \int_V \left(\nabla \cdot (\underline{\xi}_c \dot{c}) + \gamma_c \dot{c} + \nabla \cdot (\underline{\xi}_{\eta_k} \dot{\eta}_k) + \gamma_{\eta_k} \dot{\eta}_k - \nabla \cdot (\underline{\mu} \underline{h}) + \nabla \cdot (\underline{\sigma} : \underline{\dot{\xi}}) \right) dV \quad (5.67)$$

où f est la densité d'énergie libre. Sa dérivée par rapport au temps s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \dot{f}(c, \nabla c, \eta_k, \nabla \eta_k, \mu, \nabla \mu, \underline{\xi}^e, V_k) = & \frac{\partial f}{\partial c} \dot{c} + \frac{\partial f}{\partial \nabla c} \cdot \nabla \dot{c} + \frac{\partial f}{\partial \eta_k} \dot{\eta}_k + \frac{\partial f}{\partial \nabla \eta_k} \cdot \nabla \dot{\eta}_k + \\
 & \frac{\partial f}{\partial \mu} \dot{\mu} + \frac{\partial f}{\partial \nabla \mu} \cdot \nabla \dot{\mu} + \frac{\partial f}{\partial \underline{\xi}^e} : \underline{\dot{\xi}}^e + \frac{\partial f}{\partial V_k} \dot{V}_k
 \end{aligned} \quad (5.68)$$

En utilisant le second principe et les équations d'équilibre des microforces :

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{\partial f}{\partial c} + \pi_c - \mu \right) \dot{c} \leq 0 \\
 & \left(-\frac{\partial f}{\partial \nabla c} - \underline{\xi}_c \right) \cdot \nabla \dot{c} \leq 0 \\
 & \left(-\frac{\partial f}{\partial \eta_k} - \pi_{\eta_k} \right) \dot{\eta}_k \leq 0 \\
 & \left(-\frac{\partial f}{\partial \nabla \eta_k} - \underline{\xi}_{\eta_k} \right) \cdot \nabla \dot{\eta}_k \leq 0 \\
 & \frac{\partial f}{\partial \mu} \dot{\mu} \leq 0 \\
 & \frac{\partial f}{\partial \nabla \mu} \cdot (\nabla \dot{\mu}) \leq 0 \\
 & \underline{h} \cdot (\nabla \dot{\mu}) \leq 0 \\
 & \left(-\frac{\partial f}{\partial \underline{\xi}^e} + \underline{\sigma} \right) : \underline{\dot{\xi}}^e \leq 0 \\
 & \underline{\sigma} : \underline{\dot{\xi}}^p \leq 0 \\
 & \frac{\partial f}{\partial V_k} \dot{V}_k \leq 0
 \end{aligned} \quad (5.69)$$

On suppose que $\frac{\partial f}{\partial \mu} = 0$ et $\frac{\partial f}{\partial \nabla \mu} = 0$. Les équations ci-dessus nous permettent d'écrire un certain nombre d'équations d'état, correspondant aux effets réversibles :

$$\begin{aligned}
 \underline{\xi}_c &= \frac{\partial f}{\partial \nabla c} \\
 \underline{\xi}_{\eta_k} &= \frac{\partial f}{\partial \nabla \eta_k} \\
 \underline{\sigma} &= -\frac{\partial f}{\partial \underline{\xi}^e} \\
 A_k &= \frac{\partial f}{\partial V_k}
 \end{aligned} \quad (5.70)$$

Potentiel de dissipation Afin de décrire complètement le comportement du matériau, on suppose l'existence d'un potentiel de dissipation tel que :

$$\begin{aligned} -\left(\frac{\partial f}{\partial \eta_k} + \pi_{\eta_k}\right) &= \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\eta}_k} \\ -\underline{h} &= \frac{\partial \varphi}{\partial \nabla \mu} \\ \underline{\sigma} &= \frac{\partial \varphi}{\partial \underline{\varepsilon}^p} \\ -A_k &= \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{V}_k} \end{aligned} \quad (5.71)$$

On suppose que le potentiel de dissipation s'écrit :

$$\varphi = \frac{1}{2} L_k \dot{\eta}_k^2 + \frac{1}{2} M (\nabla \mu)^2 + \varphi^{vp}(\nabla \mu, (\nabla \mu), \eta_k, \dot{\eta}_k, V_k, \dot{V}_k) \quad (5.72)$$

Pour déterminer les équations différentielles régissant le système, nous nous donnons une densité d'énergie libre de la forme :

$$f(c, \eta_k, \varepsilon^e, V_k) = f_{hom0}(c, \eta_k) + \frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2 + \sum_k \frac{\beta}{2} |\nabla \eta_k|^2 + e_{el}(S) + f_{vp}(S) \quad (5.73)$$

où S représente l'ensemble des variables.

Equation d'Allen-Cahn généralisée En supposant $\gamma_{\eta_k} = 0$, on a :

$$\frac{\partial f}{\partial \eta_k} + \frac{\partial f}{\partial \nabla \eta_k} - L_k \dot{\eta}_k - \frac{\partial \varphi^{vp}}{\partial \dot{\eta}_k} = 0 \quad (5.74)$$

soit dans le cas le plus général :

$$\dot{\eta}_k + \frac{\partial \varphi^{vp}}{\partial \dot{\eta}_k} = \frac{1}{L_k} \left(\frac{\partial f_{hom0}}{\partial \eta_k} + \beta_k \Delta \eta_k + \frac{\partial(e_{el} + f_{vp})}{\partial \eta_k} + \frac{\partial(e_{el} + f_{vp})}{\partial \nabla \eta_k} \right) \quad (5.75)$$

Equation de Cahn-Hilliard généralisée De même, on suppose que $\gamma_c = 0$:

$$\mu + \frac{\partial \varphi^{vp}}{\partial \dot{\eta}_k} = \frac{\partial f}{\partial c} + \frac{\partial f}{\partial \nabla c} = \frac{\partial f_{hom0}}{\partial c} + \lambda \Delta c + \frac{\partial(e_{el} + f_{vp})}{\partial c} + \frac{\partial(e_{el} + f_{vp})}{\partial \nabla c} \quad (5.76)$$

et en utilisant l'équation de conservation de la matière :

$$\begin{aligned} \dot{c} = -\nabla \cdot \underline{h} &= -M \Delta \mu = M \Delta \left(\frac{\partial f_{hom0}}{\partial c} + \lambda \Delta c + \frac{\partial(e_{el} + f_{vp})}{\partial c} + \frac{\partial(e_{el} + f_{vp})}{\partial \nabla c} \right) \\ &\quad + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \varphi^{vp}}{\partial \nabla \mu} \right) \end{aligned} \quad (5.77)$$

Lorsque e_{el} et e_{vp} ne dépendent pas de c , de η_k , ni de leurs gradients et que le potentiel de dissipation viscoplastique φ^{vp} ne dépend ni de $\dot{\eta}_k$ ni de $\nabla \mu$, on retrouve les équations d'Allen-Cahn et Cahn-Hilliard.

Couplage champs de phases et viscoplasticité

La première version du modèle champs de phases couplé à un modèle viscoplastique a été réalisée durant ce travail en utilisant un modèle de plasticité isotrope [Gaubert 08] (voir annexe I). En dehors de

l'anisotropie de la plasticité, ce modèle couplé contient déjà les ingrédients essentiels permettant l'étude en champs de phases de l'évolution microstructurale des superalliages. Ce premier modèle a permis de valider la démarche d'utilisation de la plasticité à l'échelle du champs de phases.

Ici, nous adoptons une loi de comportement de type viscoplasticité cristalline pour chacune des phases. Ce modèle a été décrit au paragraphe 2.2.1. Les variables internes liées à l'écroissage sont donc les variables d'écroissage isotropes et cinématiques pour chaque système de glissement, p^s et α^s respectivement. On a donc une densité d'énergie libre liée à l'état d'écroissage du matériau, qui s'écrit dans le cas le plus général en introduisant un couplage sur les variables isotropes :

$$f_{vp} = \frac{1}{2} \sum_s c^s (\alpha^s)^2 + \frac{1}{2} \sum_r \sum_s H^{rs} p^r p^s \quad (5.78)$$

Les variables duales sont liées aux variables p^s et α^s par les lois d'état :

$$x^s = \frac{\partial f_{vp}}{\partial \alpha^s} = c^s \alpha^s \quad (5.79)$$

$$r^s = \frac{\partial f_{vp}}{\partial p^s} = bQ \sum_r H^{sr} p^r \quad (5.80)$$

Nous avons vu que l'écroissage isotrope peut être négligé dans le cas des superalliages. L'équation (5.81) se réduit alors à :

$$f_{vp} = \frac{1}{2} \sum_s c^s (\alpha^s)^2 \quad (5.81)$$

Dans le modèle champs de phases couplé, l'état du matériau est donc décrit par quatre types de champs : le champ de concentration $c(\mathbf{r})$, les champs de paramètres d'ordre $\eta_k(\mathbf{r})$, le champ de déformation $\underline{\varepsilon}(\mathbf{r})$ et les variables internes d'écroissage cinématique $\alpha^s(\mathbf{r})$. L'énergie totale du système est donnée par :

$$F = F_{GL} + E_{el} + F_{vp} \quad (5.82)$$

Nous devons à présent décrire la dépendance de chacun des termes de l'équation 5.82 dans le but de dériver les forces motrices. La fonctionnelle $F_{GL}(c, \eta_i)$ est toujours donnée par 5.16. Le terme d'énergie élastique dépend maintenant de $c(\mathbf{r})$, $\underline{\varepsilon}(\mathbf{r})$ et de $\underline{\varepsilon}^p(\mathbf{r})$:

$$E_{el}(c, \{\alpha^s\}, \underline{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \int_V (\underline{\varepsilon} - \underline{\varepsilon}^0 - \underline{\varepsilon}^p) : \underline{\lambda} : (\underline{\varepsilon} - \underline{\varepsilon}^0 - \underline{\varepsilon}^p) dV \quad (5.83)$$

L'énergie libre liée à l'écroissage $F_{vp}(c, \{\alpha^s\})$ est l'intégrale sur l'échantillon de 5.81. Cette énergie libre dépend des variables internes d'écroissage cinématique $\alpha^s(\mathbf{r})$ mais également de la concentration. En effet, nous avons vu au chapitre 3 que les comportements mécaniques des phases γ et γ' sont très différents. Cette inhomogénéité de comportement est traduite en champs de phases en rendant $F_{vp}(c, \{\alpha^s\})$ dépendant de la concentration.

Paramètres viscoplastiques en champs de phases Nous avons choisi de faire dépendre les paramètres matériau du modèle viscoplastique dépendant de la concentration de manière tout à fait similaire à ce qui est fait pour les constantes élastiques. Cependant nous avons utilisé ici une interpolation de type tanh afin d'éviter des problèmes de divergence numérique. X désignant l'un des paramètres viscoplastiques, sa dépendance en concentration s'écrit :

$$X(\mathbf{r}) = \bar{X} + X' \tanh \left(\theta \frac{c(\mathbf{r}) - \bar{c}}{c_{\gamma'} - c_{\gamma}} \right) \quad (5.84)$$

avec

$$\begin{cases} \bar{X} = \frac{X_{\gamma} + X_{\gamma'}}{2} \\ X' = \frac{X_{\gamma} - X_{\gamma'}}{2} \end{cases} \quad (5.85)$$

θ contrôle l'évolution du paramètre X dans l'interface γ/γ' . La valeur $\theta = -5$ a été choisie de façon à assurer $X(c_\gamma) = X_\gamma$ et $X(c_{\gamma'}) = X_{\gamma'}$ avec une précision de 2%.

Une approche différente peut-être adoptée pour le traitement de l'inhomogénéité de l'activité plastique. Les variables internes d'érouissage elles-mêmes peuvent être homogénéisées dans l'interface plutôt que les paramètres matériau [Uehara 07]. Dans sa thèse, Ammar a étudié différents schémas d'homogénéisation. Néanmoins, on sait que la largeur des interfaces en champs de phases est bien plus importante que leur largeur physique. Par conséquent, la déformation plastique dans l'interface n'a pas de sens physique clair. C'est pourquoi aucune de ces méthodes ne nous semble plus justifiée qu'une autre.

Au chapitre 2, nous avons identifié des paramètres matériau viscoplastiques pour les deux phases γ et γ' . En fluage et pour des sollicitations modérées à haute température, il est possible de considérer que la phase γ' se déforme uniquement de façon élastique. La façon la plus simple de réaliser cette condition dans le cadre de notre modèle couplé est de fixer un seuil de plasticité très important pour la phase γ' . Une valeur $r_{0,\gamma'}=1000$ MPa permet d'assurer que le comportement de cette phase reste élastique. Les autres paramètres viscoplastiques (n, k, c^s, d^s) de la phase γ' sont pris égaux à ceux de la phase γ . Dans ce cadre, le seul paramètre nécessitant une interpolation suivant le schéma (5.84) est le seuil $r_0^s(\underline{r})$ des systèmes octaédriques et cubiques.

Equations cinétiques Nous reprenons les équations d'Allen-Cahn et de Cahn-Hilliard généralisées dérivées précédemment. Par ailleurs, un certain nombre d'hypothèses a été fait :

- L'énergie élastique et l'énergie libre liée à l'érouissage ne dépendent pas des champs de paramètres d'ordre ni de leurs gradients. Par conséquent, les équations d'évolution des champs de paramètres d'ordre sont toujours données par 5.3 ;
- Le choix des paramètres matériau expliqué au paragraphe précédent implique que la force motrice due à l'érouissage $\frac{\delta F_{vp}}{\delta c}$ disparaît. De plus nous n'avons pas considéré de dépendance de e_{el} et f_{vp} au gradient de concentration ni de dépendance de ϕ_{vp} au gradient de potentiel chimique.

L'équation de Cahn-Hilliard s'écrit :

$$\dot{c} = M\Delta \left(\frac{\partial f_{homo}}{\partial c} + \lambda\Delta c + \frac{\partial e_{el}}{\partial c} \right) \quad (5.86)$$

La force motrice d'origine élastique est obtenue en dérivant l'énergie élastique par rapport au champ de concentration en supposant que l'équilibre mécanique est atteint

$$\frac{\delta e_{el}}{\delta c} = \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}}^{el} : \underline{\underline{\lambda}}' : \underline{\underline{\varepsilon}}^{el} - \underline{\underline{\varepsilon}}^T : \left[\underline{\underline{\lambda}} + \underline{\underline{\lambda}}' \Delta c \right] : \underline{\underline{\varepsilon}}^{el} \quad (5.87)$$

avec $\underline{\underline{\varepsilon}}^{el} = \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} + \delta \underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^T \Delta c - \underline{\underline{\varepsilon}}^p$. Par conséquent, dans le modèle construit ici, le couplage entre l'évolution microstructurale et la plasticité intervient au travers de l'énergie élastique.

5.5.2 Implémentation numérique

La procédure utilisée pour la résolution numérique du modèle couplé est résumée par la figure 5.6. A chaque pas de temps l'équilibre mécanique est résolu en supposant que le tenseur de déformation libre $\underline{\underline{\varepsilon}}^0(\underline{r})$ et le tenseur de déformation plastique sont constants. La résolution de l'équilibre mécanique est effectuée suivant la procédure expliquée au paragraphe 5.3.2, mais en remplaçant $\underline{\underline{\varepsilon}}^0(\underline{r})$ par $\underline{\underline{\varepsilon}}^0(\underline{r}) + \underline{\underline{\varepsilon}}^p(\underline{r})$. A la fin de la résolution de l'équilibre mécanique, nous avons les valeurs actualisées des tenseurs de déformation et de contrainte.

La deuxième étape de la procédure consiste à résoudre les équations viscoplastiques. Pour ce faire, nous calculons la cission résolue pour chaque système de glissement en utilisant le tenseur de contrainte calculé

précédemment. Les variables internes $\alpha^s(\underline{r})$ ainsi que le tenseur de déformation plastique sont calculés à l'aide d'un schéma d'intégration de type Euler.

Enfin, la dernière étape de la procédure consiste à calculer l'évolution des champs de concentration et de paramètres d'ordre à l'aide du schéma semi-implicite présenté au paragraphe 5.3.1.

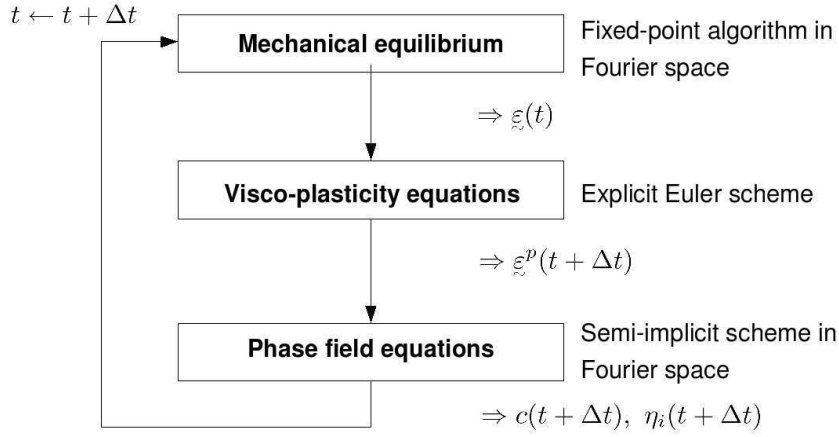


FIG. 5.6. Schéma de la procédure utilisée pour la résolution du modèle champs de phases élasto-viscoplastique.

5.5.3 Diagramme de phases semi-cohérent

Avant toute simulation numérique avec le modèle couplé, nous avons souhaité étudier l'influence d'une déformation plastique sur le diagramme de phases cohérent. Nous avons vu au paragraphe 5.3.3 comment contrôler les concentrations d'équilibre cohérent dans les simulations champs de phases. Le but est de poursuivre les calculs effectués dans la thèse de Boussinot [Boussinot 07] sur le diagramme de phases cohérent en y ajoutant la contribution d'une déformation plastique. L'élasticité est supposée homogène ; on note E le module d'Young et ν le coefficient de Poisson. On note ε^T la déformation hors contrainte, qui est diagonale dans notre cas :

$$\varepsilon^0(\underline{r}) = \varepsilon^T (c_2 - c_1) \quad (5.88)$$

La concentration moyenne s'écrit $\bar{c} = zc_1 + (1 - z)c_2$, c_1 et c_2 étant les concentrations des phases à l'équilibre et z la fraction de phase 1. ε^T est relié au désaccord paramétrique par l'équation 5.20.

On considère une déformation plastique homogène dans la phase 1 et nulle dans la phase 2. De plus, le tenseur de déformation plastique s'écrit :

$$\xi^P = \begin{bmatrix} 2\varepsilon^P & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon^P & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon^P \end{bmatrix} \quad (5.89)$$

Dans le cas envisagé, l'énergie élastique dépend de la microstructure considérée. On suppose que le système est constitué d'une microstructure périodique en plaquettes normales à l'axe x . Une fonction de forme $\theta(\underline{r})$ décrit la microstructure. θ vaut 1 dans la phase 1 et 0 dans la phase 2. Dans ce cas l'énergie élastique s'écrit, avec les notation introduite au paragraphe 5.2.4 :

$$\begin{aligned} E_{el} &= \frac{1}{2} \int^* \frac{d\underline{q}_x}{2\pi} B(1, 0, 0) |\theta(\underline{q})|^2 \\ &= \frac{1}{2} B(1, 0, 0) z(1 - z) \end{aligned} \quad (5.90)$$

Le terme $B(1, 0, 0)$ vaut

$$B(1, 0, 0) = \frac{2}{C_{11}}(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12}) (\varepsilon^T(c_2 - c_1) - \varepsilon^p)^2 \quad (5.91)$$

L'énergie élastique du système s'écrit alors :

$$E_{el} = \frac{E}{1 - \nu} (\varepsilon^T(c_2 - c_1) - \varepsilon^p)^2 \quad (5.92)$$

où $\mathcal{A} = \frac{1}{2} \frac{E}{1 - \nu}$.

L'énergie libre totale est la somme de l'énergie d'origine chimique est de l'énergie élastique donnée par :

$$\mathcal{E} = zF_1(c_1) + (1 - z)F_2(c_2) + E_{el} \quad (5.93)$$

A l'équilibre thermodynamique, on a :

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial c_1} = 0 \quad (5.94)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial c_2} = 0 \quad (5.95)$$

Calculons ces deux quantités. Pour cela nous avons besoin des dérivées de z par rapport à c_1 et c_2 qui sont obtenues en dérivant $\bar{c} = zc_1 + (1 - z)c_2$:

$$dz = -\frac{z}{c_1 - c_2} dc_1 - \frac{1 - z}{c_1 - c_2} dc_2 \quad (5.96)$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial c_1} = & zF'_1(c_1) - 2\mathcal{A}z(1 - z)(c_2 - c_1)\varepsilon^{T^2} + 2\mathcal{A}z(1 - z)\varepsilon^T\varepsilon^p - \frac{z}{c_1 - c_2} [F_1(c_1) - F_2(c_2)] \\ & + \mathcal{A}(c_2 - c_1)^2(1 - 2z)\varepsilon^{T^2} - 2\mathcal{A}(c_2 - c_1)(1 - 2z)\varepsilon^T\varepsilon^p + \mathcal{A}(1 - 2z)\varepsilon^{p^2} = 0 \end{aligned} \quad (5.97)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial c_2} = & (1 - z)F'_2(c_2) + 2\mathcal{A}z(1 - z)(c_2 - c_1)\varepsilon^{T^2} - 2\mathcal{A}z(1 - z)\varepsilon^T\varepsilon^p - \frac{1 - z}{c_1 - c_2} [F_1(c_1) - F_2(c_2)] \\ & + \mathcal{A}(c_2 - c_1)^2(1 - 2z)\varepsilon^{T^2} - \mathcal{A}(c_2 - c_1)(1 - 2z)\varepsilon^T\varepsilon^p + \mathcal{A}(c_2 - c_1)^2(1 - 2z)\varepsilon^{p^2} = 0 \end{aligned} \quad (5.98)$$

On se place dans une zone biphasée du diagramme de phase, donc z et $1 - z$ sont non nuls et on peut diviser 5.97 et 5.98 par z et $1 - z$ respectivement :

$$F'_1(c_1) - \frac{F_1(c_1) - F_2(c_2)}{c_1 - c_2} - \mathcal{A}(c_2 - c_1)\varepsilon^{T^2} + 2\mathcal{A}z\varepsilon^T\varepsilon^p + \mathcal{A}(1 - 2z)\frac{\varepsilon^{p^2}}{c_2 - c_1} = 0 \quad (5.99)$$

$$F'_2(c_2) - \frac{F_1(c_1) - F_2(c_2)}{c_1 - c_2} + \mathcal{A}(c_2 - c_1)\varepsilon^{T^2} - 2\mathcal{A}(1 - 2z)\varepsilon^T\varepsilon^p + \mathcal{A}(1 - 2z)\frac{\varepsilon^{p^2}}{c_2 - c_1} = 0 \quad (5.100)$$

La combinaison de (5.99) et (5.100) donne :

$$F'_1(c_1) + 2\mathcal{A}c_1\varepsilon^{T^2} + 2\mathcal{A}\varepsilon^T\varepsilon^p(1 - z) = F'_2(c_2) + 2\mathcal{A}c_2\varepsilon^{T^2} \quad (5.101)$$

L'équilibre est donc donné par les équations (5.99) et (5.101). Par conséquent, l'équilibre dépend de la concentration moyenne \bar{c} au travers de z .

On cherche les concentrations d'équilibre pour de petites variations autour des concentrations de l'équilibre incohérent :

$$\begin{aligned} c_1 &= c_1^0 + \Delta c_1 \\ c_2 &= c_2^0 + \Delta c_2 \end{aligned} \quad (5.102)$$

où c_1^0 et c_2^0 désignent les concentrations de l'équilibre incohérent. Ces concentrations vérifient :

$$\frac{F_1(c_1^0) - F_2(c_2^0)}{c_1^0 - c_2^0} = F_1'(c_1^0) = F_2'(c_2^0) \quad (5.103)$$

Au premier ordre, on a :

$$\begin{aligned} \frac{F_1(c_1) - F_2(c_2)}{c_1 - c_2} &= \frac{F_1(c_1^0) - F_2(c_2^0)}{c_1^0 - c_2^0} \left(1 + \frac{\Delta c_2 - \Delta c_1}{c_1^0 - c_2^0}\right) \left(1 - \frac{\Delta c_2 - \Delta c_1}{c_1^0 - c_2^0}\right) \\ &= \frac{F_1(c_1^0) - F_2(c_2^0)}{c_1^0 - c_2^0} \end{aligned} \quad (5.104)$$

et

$$z = \frac{c_2 - \bar{c}}{c_2 - c_1} = z_0 + \frac{z_0 \Delta c_1 + (1 - z_0) \Delta c_2}{c_2^0 - c_1^0} \quad (5.105)$$

où z_0 est le taux de phase à l'équilibre incohérent. Ces deux équations nous permettent d'exprimer les équation d'équilibre (5.99) et (5.101) :

$$\begin{aligned} \Delta c_1 \left[F_1''(c_1^0) + \mathcal{A} \varepsilon^{T^2} + \mathcal{A} \frac{(1 - z_0) \varepsilon^{p^2}}{(c_2^0 - c_1^0)^2} + 2\mathcal{A} \varepsilon^T \varepsilon^p \right] + \Delta c_2 \left[-\mathcal{A} \varepsilon^{T^2} \mathcal{A} - \frac{(1 - 4z_0) \varepsilon^{p^2}}{(c_2^0 - c_1^0)^2} - 2\mathcal{A} \varepsilon^T \varepsilon^p \frac{1 - z_0}{c_1^0 - c_2^0} \right] \\ + \mathcal{A} (c_1^0 - c_2^0) \varepsilon^{T^2} + 2\mathcal{A} \varepsilon^T \varepsilon^p z_0 + \mathcal{A} \varepsilon^{p^2} \frac{1 - 2z_0}{c_2^0 - c_1^0} = 0 \end{aligned} \quad (5.106)$$

$$\begin{aligned} \Delta c_1 \left[F_1''(c_1^0) + 2\mathcal{A} \varepsilon^{T^2} - 2\mathcal{A} \varepsilon^T \varepsilon^p \frac{z_0}{c_1^0 - c_2^0} \right] - \Delta c_2 \left[F_2''(c_2^0) 2\mathcal{A} \varepsilon^{T^2} - 2\mathcal{A} \varepsilon^T \varepsilon^p \frac{1 - z_0}{c_1^0 - c_2^0} \right] \\ + 2\mathcal{A} (c_1^0 - c_2^0) \varepsilon^{T^2} + 2\mathcal{A} \varepsilon^T \varepsilon^p = 0 \end{aligned} \quad (5.107)$$

On pose

$$\nu^p = \frac{\varepsilon^p}{\varepsilon^T (c_2^0 - c_1^0)} \quad (5.108)$$

et

$$\tilde{F}_i'' = \frac{F_i''}{\mathcal{A} \varepsilon^{T^2}} \quad (5.109)$$

Les équations d'équilibre deviennent :

$$\begin{aligned} \Delta c_1 \left[\tilde{F}_1''(c_1^0) + (1 - z^0) \nu^{p^2} - 2\nu^p z_0 \right] + \Delta c_2 \left[\tilde{F}_2''(c_2^0) - (3 - 4z_0) \nu^{p^2} + 2(1 - z_0) \nu^p \right] \\ + (c_1^0 - c_2^0) \left[1 - z_0 \nu^p - (1 - 2z_0) \nu^{p^2} \right] = 0 \end{aligned} \quad (5.110)$$

$$\Delta c_1 \left[\tilde{F}_1'' + 2 - 2z_0 \nu^p \right] - \Delta c_2 \left[\tilde{F}_2'' - 2(1 - z_0) \nu^p \right] + 2(c_1^0 - c_2^0) (1 - \nu^p) = 0 \quad (5.111)$$

On obtient donc un système de deux équations linéaires en Δc_1 et Δc_2 .

Nous avons cherché à le résoudre dans un cas simple. On considère que la courbure d'énergie libre de la phase 2 tend vers l'infini. On a donc $\Delta c_2 = 0$ d'après (5.111). Dans ce cas, la solution est égale à :

$$\Delta c_1 = (c_2^0 - c_1^0) \frac{1 - z_0 \nu^p - (1 - 2z_0) \nu^{p^2}}{\tilde{F}_1'' + 1 - 2z_0 \nu^p + (1 - z_0) \nu^{p^2}} \quad (5.112)$$

Lorsque ε^p est nul, on retrouve le cas du diagramme de phases cohérent traité dans [Boussinot 07] :

$$\Delta c_1 = \frac{c_2^0 - c_1^0}{\tilde{F}_1'' + 1} \quad (5.113)$$

Lorsque $\nu^p = 1$, la plasticité compense exactement la contribution élastique et Δc_1 est nul. On retrouve le cas de l'équilibre incohérent. Au delà de cette valeur la plasticité tend à écarter les concentrations d'équilibre comme le montre la figure 5.7.

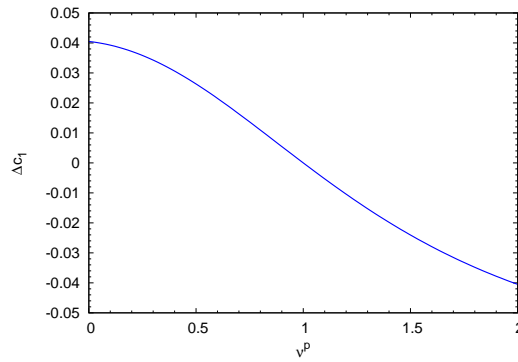


FIG. 5.7. Evolution de Δc_1 en fonction de ν^p dans le cas où la courbure d'énergie libre de la phase 2 tend vers l'infini. Les valeurs numériques utilisées pour ce calcul sont les suivantes : $c_1 = 0.15$, $c_2 = 0.23$, $\bar{c} = 0.2$ et $\tilde{F}_1'' = 1$.

Ce calcul analytique permet de comprendre l'influence d'une déformation plastique sur les concentrations d'équilibre des deux phases. Contrairement à l'élasticité, au-delà d'une certaine valeur, la plasticité a tendance à écarter les concentrations d'équilibre. Dans un premier temps nous continuons d'utiliser le contrôle des concentrations d'équilibre cohérent décrit au paragraphe 5.3.3 même si le calcul qui a été effectué semble montrer que cette méthode n'est pas pertinente quand la déformation plastique est importante. Pour des travaux ultérieurs, il serait préférable d'adapter la méthode de contrôle des concentrations d'équilibre mise au point dans [Boussinot 07] au modèle élasto-viscoplastique.

5.6 Simulation de la mise en radeaux

5.6.1 Comportement viscoplastique de la phase γ

Au chapitre 3 de ce mémoire nous avons proposé une identification du comportement de chacune des phases dans l'AM1 à 950°C. Cette identification a été réalisée à l'aide de résultats macroscopiques sous chargements monotones et cycliques pour des vitesses de sollicitation comprises entre 10^{-5} s^{-1} et 10^{-3} s^{-1} . Dans ce chapitre nous considérons principalement des chargements de fluage. Par conséquent, nous pouvons faire l'hypothèse que les précipités sont élastiques. Les coefficients matériau de la phase γ sont donnés dans le tableau 5.1. Dans ces premières simulations, seuls les systèmes octaédriques sont pris en compte.

Nous avons vu que cette identification n'est valable que pour une microstructure donnée qui correspond à la microstructure cuboïdale de l'AM1 pour des canaux de matrice de largeur 100 nm. Les effets d'échelle existants en plasticité (Orowan) impliquent que, pour des canaux de matrice plus larges, la contrainte prédite est surestimée par rapport à l'expérience. En champs de phases nous traitons des microstructures qui évoluent et de ce fait le comportement de la phase γ évolue. En particulier, la largeur des couloirs de matrice augmente pendant un essai de fluage [Diologent 02]. L'adoucissement induit peut être estimé grâce à l'équation d'Orowan qui indique que la cisssion résolue critique est proportionnelle à l'inverse de la largeur des couloirs. Les mesures expérimentales de [Diologent 02] montrent que la largeur des couloirs est multipliée par un facteur 3. D'après l'équation d'Orowan, on déduit que la cisssion résolue critique est divisée par un facteur 3.

L'adoucissement lié à l'élargissement des couloirs de matrice ne peut pas être directement introduit dans le modèle champs de phases actuel car aucune échelle de longueur n'apparaît dans les équations de comportement viscoplastique. Un deuxième jeu de paramètres matériau pour la phase γ est proposé afin de prendre en compte l'adoucissement de son comportement pendant un essai de fluage. Ce jeu de paramètres est appelé dans la suite evp2. Le seuil de plasticité r_0 et le module d'écrouissage cinématique c sont divisés

Coefficient	r_0^s (MPa)	n	k (MPa.s ^{1/n})	c^s (MPa)	d^s
Systèmes octaédriques	12	5	750	$7 \cdot 10^4$	2500

TAB. 5.1. Paramètres matériau de la phase γ identifiés à 950°C dans le cas de la microstructure en radeaux (couloirs de matrice 3 fois plus larges que dans la microstructure en cubes initiale).

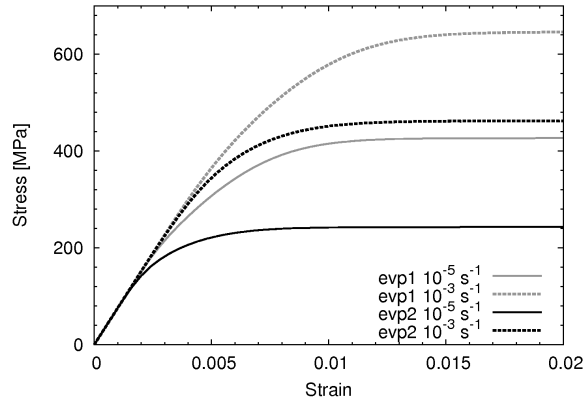


FIG. 5.8. Comparaison du comportement de la phase γ avec les jeux de paramètres evp1 et evp2. Les courbes contrainte déformation sont tracées pour deux vitesses de déformation, 10^{-5} s^{-1} et 10^{-3} s^{-1} .

par un facteur 3 sans modification des paramètres de viscosité (voir tableau 5.1). La comparaison entre le comportement de la phase γ simulé avec chacun des deux jeux de paramètres est montrée par la figure 5.8.

Les deux jeux de coefficients matériau peuvent être vus comme deux cas limites de simulations sous chargement de fluage. Le jeu evp1 déterminé au chapitre 3 est adapté à la simulation du début de fluage tant que la microstructure n'a pas trop évolué. Le jeu evp2 représente le comportement de la matrice lorsque la microstructure en radeaux est établie.

5.6.2 Résultats numériques

L'évolution microstructurale pendant un chargement de fluage à 950°C sous 300 MPa est simulée à l'aide des modèles champs de phases élastique et élasto-viscoplastique. Les simulations sont en 2D sur une grille régulière de 512 x 512 points. La condition initiale est la microstructure cuboïdale générée au paragraphe 5.4.2 obtenue après 180 h de recuit.

L'évolution microstructurale est présentée par la figure 5.9, l'axe de traction étant horizontal. Les images de la ligne supérieure représentent les résultats de la simulation avec le modèle élastique. Les images de la ligne du milieu et de la ligne inférieure sont les résultats des simulations à l'aide du modèle élasto-viscoplastique avec les jeux de paramètres evp1 et evp2 respectivement. Les radeaux sont orientés perpendiculairement à l'axe de traction, en accord avec les observations expérimentales. La comparaison des prédictions des modèles élastique et élasto-viscoplastique montre que la plasticité influence à la fois l'évolution de la microstructure et sa cinétique. La cission résolue critique étant plus basse pour le jeu de paramètres evp2, l'activité plastique est moins importante pour le jeu de paramètres evp1 que pour le jeu evp2. Ceci explique pourquoi la microstructure obtenue avec le jeu de paramètres evp1 diffère peu de la prédiction obtenue avec le modèle champs de phases élastique.

La plasticité influence la forme globale des radeaux. Les radeaux obtenus en élasticité sont rectilignes et bien alignés par rapport aux directions cubiques tandis que les radeaux obtenus en élasto-viscoplasticité avec les coefficients evp2 sont plus irréguliers et montrent une forme ondulée. Comme le montrent les flèches

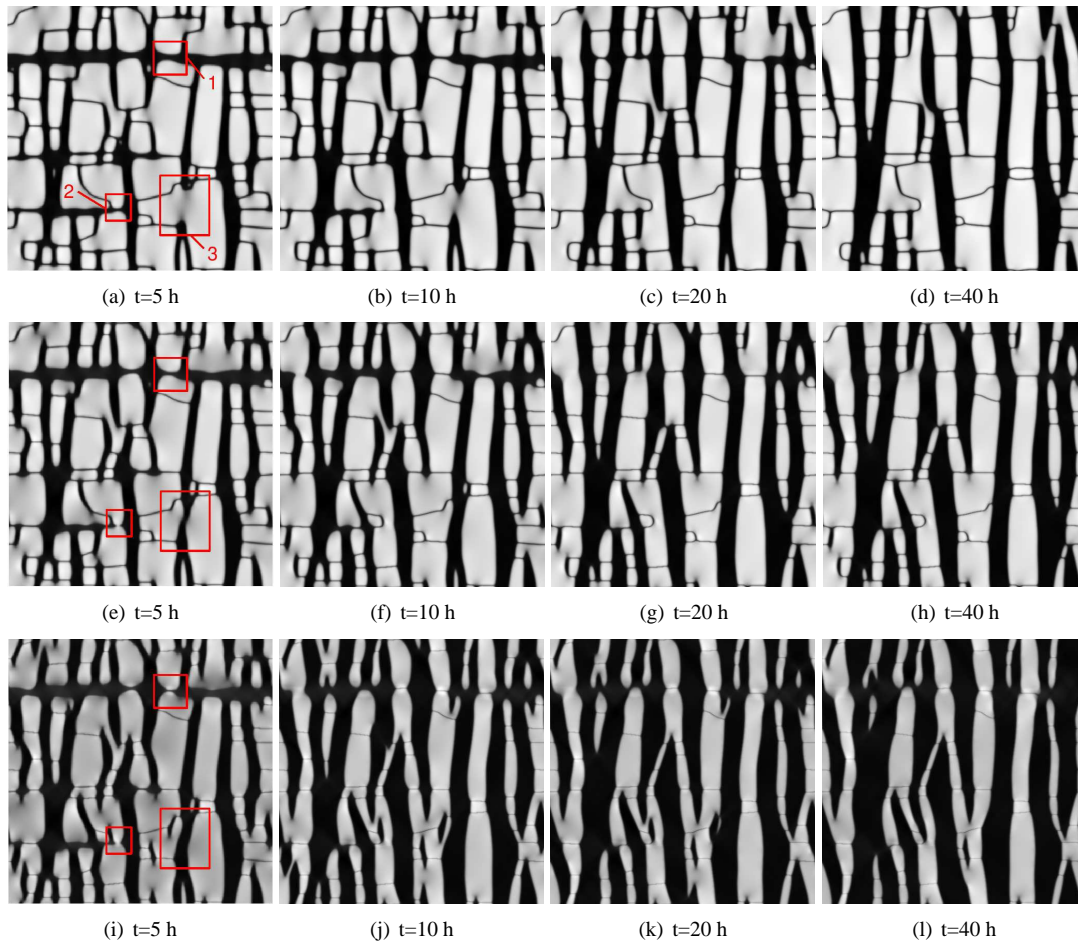


FIG. 5.9. Simulation de la mise en radeaux. (a-d) Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élastique. (e-h) Evolution microstructurale simulée avec le modèle élasto-viscoplastique et le jeu de paramètres evp1. (i-l) Evolution microstructurale avec le modèle élasto-viscoplastique et le jeu de paramètres evp2.

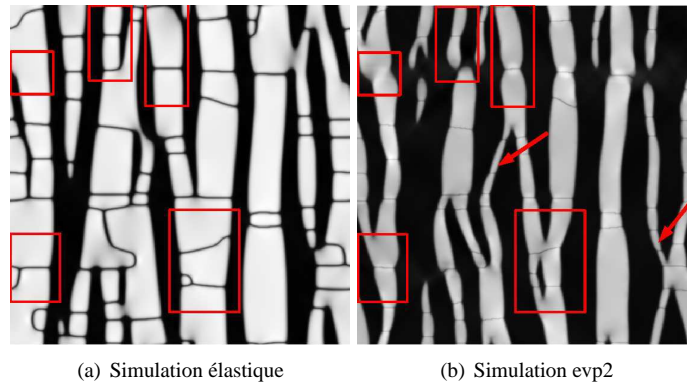


FIG. 5.10. Microstructure en radeaux obtenue avec le modèle élastique et élasto-viscoplastique d'après les figures 5.9(d) et (l) respectivement, montrant l'influence de la plasticité sur la forme des radeaux.

sur la figure 5.10, en présence d'une activité plastique importante, la direction des radeaux peut dévier substantiellement des directions cubiques. A l'intérieur des radeaux, la forme des précipités γ' est également clairement modifiée par la présence de l'activité plastique comme montré par les régions rectangulaires mises en évidence sur la figure 5.10

Une autre différence entre résultats élastique et élasto-viscoplastique concerne l'évolution de la fraction volumique de phase γ' . Dans la microstructure cuboïdale initiale, elle est proche de 0.72. Sous chargement de fluage, elle diminue avec les deux modèles. Elle vaut 0.62 après la mise en radeaux élastique, 0.53 avec les coefficients evp1 et 0.33 avec les coefficients evp2. Cette tendance est en accord avec les observations expérimentales sur l'alliage CMSX-4 [Serin 04]. Cependant, d'un point de vue quantitatif, la diminution du taux de phase est trop importante dans nos simulations élasto-viscoplastiques. En effet, expérimentalement, la diminution n'est que d'environ 10%. Les variations de taux de phase sont dues à des modifications des concentrations des phases γ et γ' entre les concentrations initiales de l'équilibre cohérent et les concentrations dans la microstructure en radeaux dans laquelle les contraintes de cohérence sont partiellement relaxées. Dans le modèle champs de phases, une évolution plus faible peut être obtenue en augmentant les courbures de la densité d'énergie libre homogène autour des minima correspondants aux phases γ et γ' . Une autre solution peut consister à adapter le contrôle des concentrations d'équilibre proposé dans [Boussinot 07] au cas élasto-viscoplastique comme mentionné au paragraphe 5.5.3.

La microstructure en radeaux est constituée de domaines γ' alignés perpendiculairement à l'axe de traction. Sous chargement de fluage, nos simulations prévoient qu'à l'intérieur des radeaux les domaines γ' se rapprochent les uns des autres. Cet effet est plus prononcé quand la plasticité est prise en compte. On observe, dans la majorité des cas, que les domaines γ' voisins sont en relation d'antiphase les uns par rapport aux autres. Par conséquent ils ne vont jamais coalescer pour former un seul domaine. Ce ne semble pas être le cas sur les micrographies expérimentales où les zones allongées de γ' semblent constituées d'un seul bloc. Dans les expériences, deux domaines γ' initialement en antiphase peuvent coalescer en présence de plasticité [Chen 04]. En effet, quand une dislocation de matrice, dont le vecteur de Burger \underline{b} est du type $1/2[110]$, traverse un couloir délimité par deux domaines γ' , la position relative des domaines est décalée d'un vecteur \underline{b} . Par conséquent, la relation d'antiphase entre deux domaines γ' change et peut disparaître conduisant à une possible coalescence des domaines. En champs de phases, ce phénomène pourrait être pris en compte en introduisant un couplage entre la plasticité et les champs de paramètres d'ordre.

Une autre conséquence de la plasticité est l'accélération des évolutions microstructurales conduisant à la microstructure en radeaux. Ce point est illustré sur les figures 5.9(a),(e) et (i) sur lesquelles des zones caractéristiques sont mises en évidence. La zone 1 montre deux domaines γ' en relation d'antiphase qui se rapprochent l'un de l'autre. Ils sont encore loin l'un de l'autre après 5 h dans la simulation élastique tandis qu'ils sont déjà en contact dans la simulation élasto-viscoplastique avec le jeu de paramètres evp2. Dans la zone 2, les deux domaines sont de même variant et coalescent pour former un radeau. Après 5 h de fluage, les domaines sont toujours bien séparés dans la simulation élastique alors qu'ils ont déjà coalescé dans la

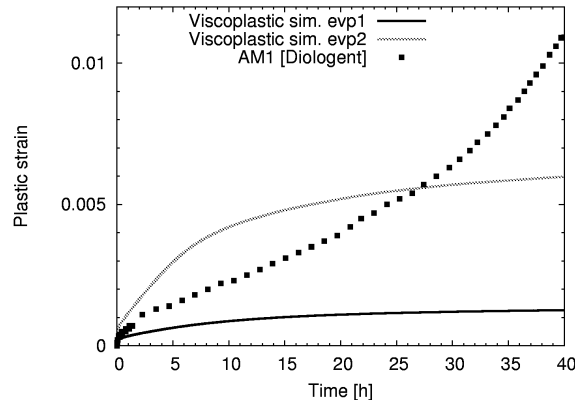


FIG. 5.11. Evolution de la déformation plastique simulée avec le modèle champs de phases élasto-viscoplastique et comparaison avec les données expérimentales de [Diologent 02].

simulation élasto-viscoplastique evp2. Enfin, la mise en radeaux procède non seulement par coalescence orientée des précipités mais également par séparation en deux domaines d'un précipité γ' menant à la formation de couloirs de matrice γ . Ce type d'évolution morphologique peut être observé dans la zone 3. Pour conclure, nos simulations prévoient que la plasticité augmente significativement la cinétique de mise en radeaux. Des tendances similaires sont rapportées dans [Zhou 08].

L'évolution de la déformation plastique en fonction du temps de fluage est tracée sur la figure 5.11 et comparée à des mesures expérimentales sur l'AM1. La courbe de fluage montrant le moins de déformation plastique correspond à la simulation evp1. Comme expliqué au paragraphe 5.6.1, le jeu de paramètres evp1 est censé reproduire le comportement de la phase γ au début du fluage et sous-estimer son comportement pendant le fluage secondaire. Comme le montre la figure 5.11, cette simulation est en bon accord avec les résultats expérimentaux au tout début du fluage. La courbe montrant le plus de déformation plastique sur la figure 5.11 est le résultat de la simulation evp2 pour laquelle les paramètres matériau de la phase γ ont été adaptés pour prendre en compte l'élargissement des couloirs de matrice. Comme prévu, cette simulation surestime la déformation plastique au début du fluage. Elle la surestime également au cours du fluage secondaire. La différence entre courbe expérimentale et courbe simulée avec le jeu de paramètres evp2 est aussi le résultat de la diminution de fraction volumique de phase γ' . Ce résultat illustre les difficultés d'identification des paramètres matériau évoqués au paragraphe 5.6.1. La situation est relativement complexe car la microstructure évolue. Il est difficile de découpler la déformation plastique résultant de l'écroutissement et la viscosité des canaux de matrice qui s'élargissent de celle due à l'évolution de la microstructure et à la diminution du taux de phase γ' . Pour ce qui est de la viscosité, nous rappelons que les paramètres matériau ont été identifiés sur des essais monotones et cycliques effectués à des vitesses de déformation comprises entre 10^{-5} s^{-1} et 10^{-3} s^{-1} . En fluage dans les conditions étudiées, la vitesse de déformation est approximativement de 5.10^{-8} s^{-1} en fluage secondaire [Diologent 02]. Cette vitesse de déformation implique l'existence de mécanismes de restauration de l'écroutissement comme modélisés dans [Svoboda 97]. Dans le cadre du modèle de comportement viscoplastique utilisé ici, un modèle de viscosité de type sinus hyperbolique et un terme de restauration statique sont classiquement utilisés pour améliorer la réponse en fluage (voir chapitre 2). De tels mécanismes de restauration ne sont pas utilisés ici.

De plus, après 25 h de fluage, la courbe expérimentale montre une augmentation importante de la vitesse de déformation plastique. D'après Diologent [Diologent 02], elle est liée au cisaillement des précipités par les dislocations. L'activité plastique de la phase γ' serait à prendre en compte dans le modèle pour rendre compte de cette augmentation.

Une meilleure compréhension de l'évolution microstructurale passe par l'analyse des champs de déformation et de contrainte. Le champ de contrainte σ_{11} , le champ de déformation ε_{11} et le champ de déformation plastique ε_{11}^p sont présentés par les figures 5.12, 5.13 et 5.14. Ces figures montrent clairement que les comportements des couloirs horizontaux et verticaux sont différents. La plasticité est concentrée

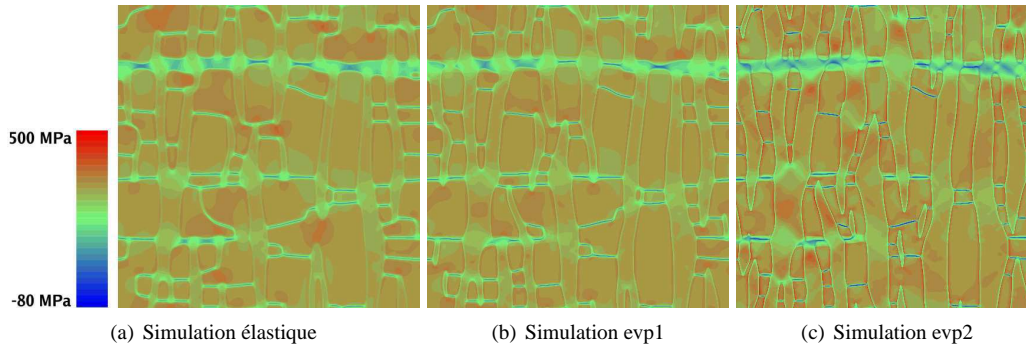


FIG. 5.12. Champs de contrainte σ_{11} à $t=10$ h simulés avec le modèle élastique et le modèle élasto-viscoplastique.

dans les couloirs perpendiculaires à l'axe de traction comme reporté dans la littérature (voir par exemple [Pollock 94]).

Dans les couloirs horizontaux, la déformation ε_{11} est pratiquement égale à celle dans les précipités voisins de telle sorte que ces canaux sont à peine visibles sur la figure 5.13. Ce point est observé pour le résultat de la simulation élastique mais également pour les résultats élasto-viscoplastiques. Ce comportement est analogue à celui d'une fine plaquette, le fin couloir de matrice représentant une fine inclusion entourée de matrice γ' . Comme montré dans [Khachaturyan 83], l'état d'équilibre de ce problème est réalisé quand la déformation totale est homogène sur l'échantillon et égale à la déformation qu'aurait la matrice en l'absence d'inclusion. Ce comportement, obtenu dans le cadre de l'élasticité, explique le comportement mécanique des couloirs horizontaux de matrice dans la simulation élastique (figure 5.13(a)). De plus, comme on peut le voir sur la figure 5.14, la déformation plastique est négligeable dans les couloirs horizontaux. Par conséquent, l'analogie avec le problème d'une inclusion sous forme de plaquettes reste valide pour analyser le comportement des couloirs horizontaux dans les simulations élasto-viscoplastiques.

Les couloirs horizontaux ont un comportement différent. Comme le montre la figure 5.13, la déformation ε_{11} est localisée dans ces couloirs. Ce point est vrai pour la simulation élastique (figure 5.13(a)) car les précipités sont plus durs que la matrice. Cependant, la localisation est beaucoup plus prononcée dans les simulations élasto-viscoplastiques du fait de la plasticité présente dans les couloirs de matrice. En comparant les figures 5.13 et 5.14, on peut conclure que, après 10 h de fluage, la valeur de la déformation ε_{11} est principalement d'origine élastique dans la simulation evp1 alors qu'elle est principalement d'origine plastique dans la simulation evp2.

La déformation plastique à l'intérieur des couloirs verticaux de matrice n'est pas homogène. Comme on peut le voir sur la figure 5.14(b), la déformation plastique ε_{11}^p montre des maxima le long des directions à 45° des directions cubiques. Ces directions correspondent aux directions pour lesquelles le facteur de Schmid est maximum, donc pour lesquelles la cission résolue due à la contrainte appliquée est maximale. Une conséquence de cette anisotropie de l'activité plastique est de permettre la formation de radeaux avec une orientation différente des orientations cubiques.

5.6.3 Discussion

Nous avons construit un modèle champs de phases élasto-viscoplastique pour simuler la mise en radeaux dans les superalliages monocristallins. Les simulations ont montré que la plasticité a une influence sur la forme des radeaux et la cinétique de mise en radeaux. Les résultats obtenus sont en bon accord avec l'expérience. Cependant nous avons mis en évidence un certain nombre de problèmes dans nos simulations. Tout d'abord, la microstructure en cubes générée avec le modèle élastique est relativement différente de la microstructure de l'AM1 pour deux raisons. Les précipités dans l'AM1 sont plus carrés que dans la simulation et leur taille semble moins dispersée.

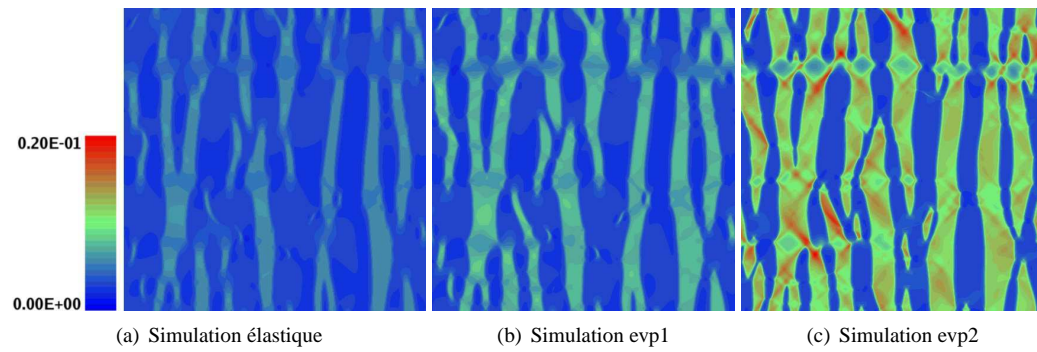


FIG. 5.13. Champs de déformation ε_{11} à $t=10h$ simulés avec le modèle élastique et le modèle élasto-viscoplastique.

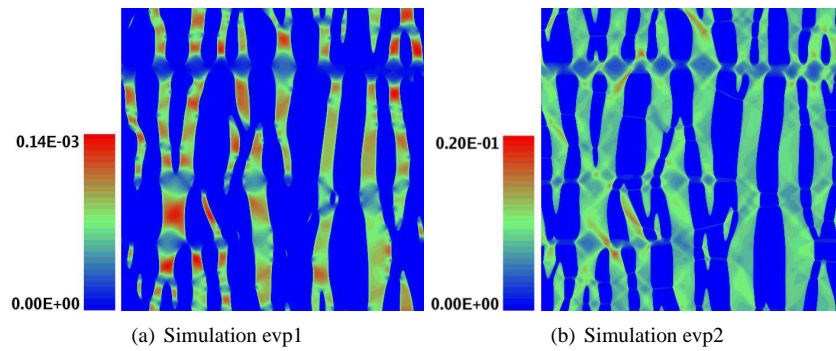


FIG. 5.14. Champs de déformation plastique ε_{11}^p à $t=10h$ simulés avec le modèle élasto-viscoplastique.

Concernant la simulation de la mise en radeaux, nous avons mis en évidence un problème de taux de phase dans nos simulations. Celui-ci varie trop fortement pendant la simulation. Cette variation importante peut être due à l'utilisation du contrôle des concentrations de l'équilibre cohérent proposé par Boussinot [Boussinot 07]. Le fait d'enlever à la densité d'énergie libre homogène l'énergie élastique d'une plaquette a pour conséquence d'écarter les concentrations d'équilibre incohérent. Ainsi, quand la plasticité est faible et que l'élasticité domine, les concentrations d'équilibre sont les concentrations incohérentes expérimentales. En revanche, nous avons vu sur le calcul analytique du diagramme de phases semi-cohérent que la plasticité a tendance à écarter les concentrations d'équilibre lorsqu'elle est importante. Ceci explique que les concentrations dans chacune des phases ainsi que le taux de phase varient beaucoup. L'idéal serait de proposer un contrôle des concentrations d'équilibre en présence de plasticité. Ce n'est pas si simple à réaliser. En effet, il faut proposer une correction évolutive, fonction de la quantité de déformation plastique, qui écarte les concentrations de l'équilibre incohérent lorsque la plasticité est faible et qui les resserre lorsqu'elle est plus importante. Une autre possibilité consiste à choisir une fonctionnelle d'énergie libre homogène dont la courbure près des minima est plus importante. Cela permettrait de limiter les variations des concentrations d'équilibre. Dans la suite du chapitre, nous proposons de ne pas décaler le diagramme de phases incohérent. Nous risquons d'observer une variation des concentrations d'équilibre en début de simulation lorsque la déformation plastique est encore faible.

Enfin, à 950°C, le cisaillement des précipités intervient relativement tôt au cours du fluage (moins de 50 h d'après [Diologent 02]). A une température plus élevée, par exemple 1050°C, ce problème ne se pose plus. Puisque notre modèle champs de phases ne permet pas le cisaillement des précipités γ' , il semble plus adapté à la simulation de l'évolution microstructurale à cette température plutôt qu'à 950°C. Il est important d'ajouter que l'influence de la température est très difficile à prendre en compte quantitativement dans une modélisation champs de phases. Les coefficients de diffusion notamment ne sont pas forcément bien connus, même pour un alliage binaire.

Dans la suite du chapitre nous avons tenté de remédier à ces problèmes. Le paragraphe 5.7.1 propose une analyse des facteurs pouvant expliquer les différences entre les microstructures en cubes simulées et expérimentales. Les paragraphes 5.7.2 et 5.7.3 montrent des résultats d'évolution microstructurale sous chargement mécanique à 1050°C.

5.7 Vers des simulations champs de phases plus quantitatives ?

5.7.1 Génération de la microstructure cuboïdale

Première simulation

Nous reprenons ici les simulations élastiques conduisant à la microstructure cuboïdale. Nous rappelons que ces simulations sont effectuées à contrainte macroscopique nulle avec le modèle élastique. La simulation de référence est réalisée en prenant un misfit égal à -0.2% . Quant au coefficient χ , nous l'avons fixé à 0.1, ce qui conduit à un pas de grille de 11.8 nm. La figure 5.15 montre l'évolution de la microstructure.

Nous avons comparé la microstructure obtenue par simulation à la microstructure de l'AM1. Cette comparaison est présentée par la figure 5.16. On constate que la forme des précipités est beaucoup plus régulière expérimentalement et que la dispersion de la taille des précipités semble plus faible. Afin de confirmer cette constatation nous avons mené une étude quantitative de la taille et de la forme des précipités obtenus par simulation.

L'analyse de la taille des précipités est effectuée de la façon suivante. L'image du champ de concentration est binarisée. Une fonction permet alors de repérer les précipités. Deux mesures de leur tailles ont été choisies. La première mesure l_1 est égale à la racine cubique du volume des précipités. En 2D, cette mesure est égale à la racine carré de la surface des précipités. La deuxième mesure l_2 est égale à la distance

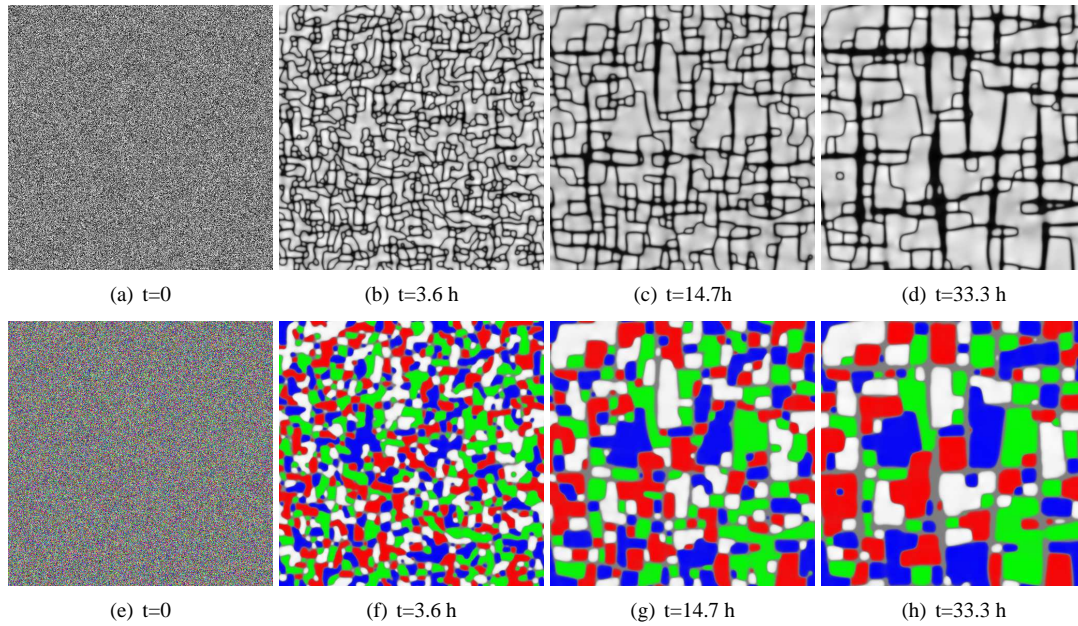


FIG. 5.15. Simulation de formation de la microstructure cuboïdale à partir du désordre. Les dimensions de la simulation sont de $6 \mu\text{m} \times 6 \mu\text{m}$. Les images (a) à (d) représentent le champ de concentration entre $t=0$ et $t=33.3 \text{ h}$. Les images (e) à (h) représentent les champs de paramètres d'ordre aux mêmes temps. Le code de couleur fait apparaître en gris la matrice et chacune des couleurs représente un variant de la phase γ' .

moenne suivant l'axe x ou y au barycentre du précipité :

$$l_{2x} = \sqrt{\int_V (x - x_B)^2 dV} \quad (5.114)$$

où x_B désigne l'abscisse du barycentre. Nous avons de plus calculé le facteur de forme des précipités défini comme le rapport entre l_{2x} et l_{2y} .

La figure 5.17 présente l'évolution de la moyenne de l_1 ainsi que de l'écart type en fonction du temps. On trouve une cinétique en $t^{0.35}$. On constate sur la figure 5.17 que l'évolution de l_1^3 est à peu près linéaire en fonction du temps. La théorie LSW n'est pas applicable car elle ignore l'élasticité mais dans [Thornton 04] un modèle est développé selon lequel l'évolution en $t^{1/3}$ persiste si les précipités sont cuboïdaux.

La figure 5.18 présente une analyse statistique des tailles des précipités ainsi que du facteur de forme. La valeur moyenne de la taille des précipités, quelle que soit la mesure utilisée, est d'environ 450 nm. Le facteur de forme moyen est approximativement de 1. Ces chiffres sont conformes aux valeurs expérimentales [Diologent 02]. Cependant nous constatons une forte dispersion sur ces valeurs. Nous pouvons comparer nos distributions de précipités à celles trouvées dans [Thornton 04]. Les auteurs montrent que, lorsque l'élasticité devient importante, la distribution de tailles devient moins abrupte aux grandes tailles, en accord qualitatif avec nos résultats. Ainsi, la figure 5.18 montre que la taille des précipités varie entre 50 et 1800 nm. De même le facteur de forme varie entre 0.2 et 2.6.

Pour comparer expérience et simulation, il faudrait effectuer le même dépouillement sur les micrographies expérimentales. Mais nous voyons déjà sur la figure 5.16 que la principale différence entre les microstructures expérimentales et simulées concerne la forme de précipités, que l'on peut par exemple caractériser par le nombre de côtés des polygones de γ' . Sur l'image expérimentale, ils en ont tous quatre alors que l'image tirée de la simulation montre une grande proportion de précipités avec plus de quatre côtés.

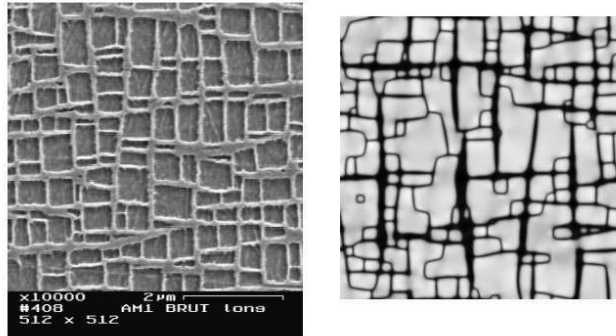


FIG. 5.16. Comparaison de la microstructure obtenue par simulation et de la microstructure de l'AM1 à la même échelle.

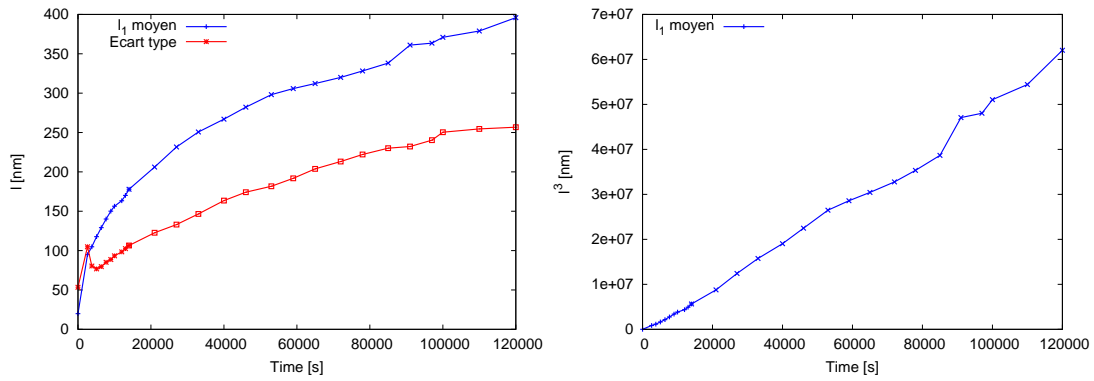


FIG. 5.17. Evolution de la moyenne de l_1 et de l'écart type en fonction du temps.

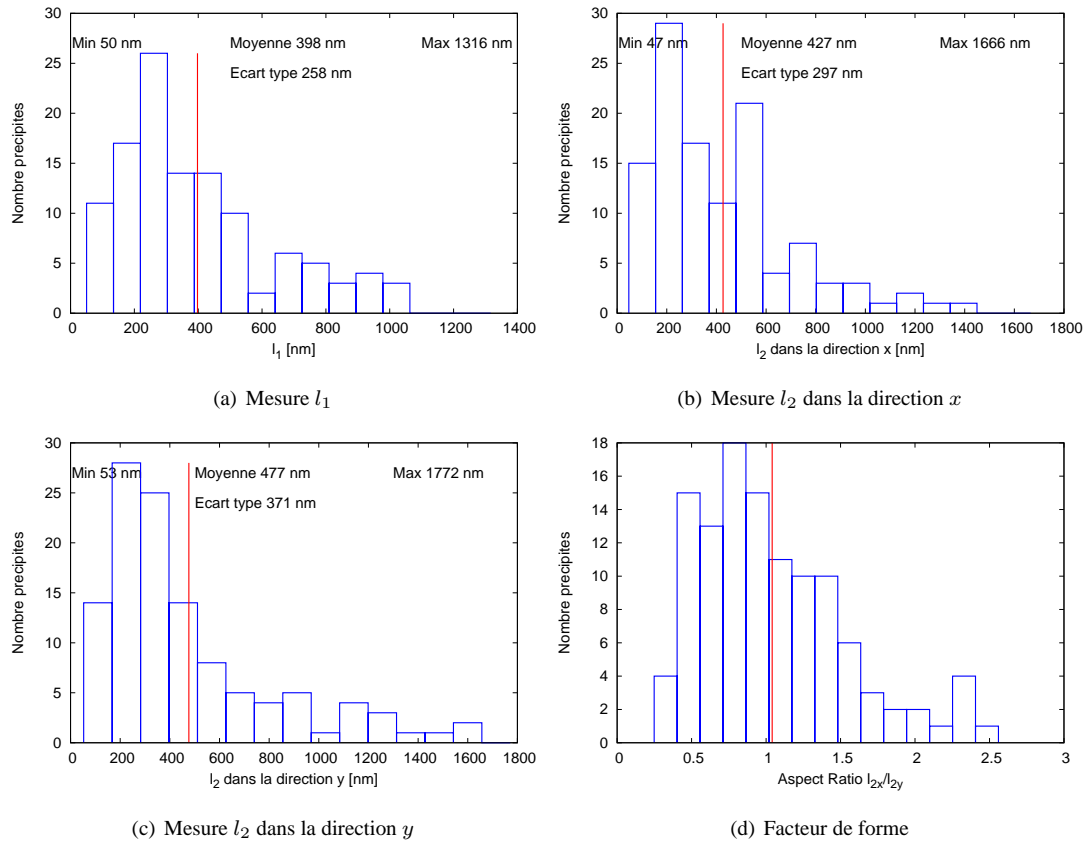


FIG. 5.18. Statistiques de tailles des précipités à l'issue de la simulation de formation de la microstructure cuboïdale.

Pourquoi ces différences ? Malgré nos efforts pour calibrer les simulations par champs de phases sur les caractéristiques de l'AMI, nous observons une différence importante entre les microstructures expérimentales et les microstructures obtenues par simulation en termes de dispersion sur les tailles des précipités. Nous avons tenté d'aller plus loin en recensant des explications possibles des différences observées. Selon nous, trois facteurs sont à considérer. D'une part les incertitudes sur les paramètres des simulations champs de phases et d'autre part des erreurs d'ordre numérique peuvent influencer sur les résultats. Enfin, certaines hypothèses utilisées pour construire le modèle, notamment le fait de considérer un alliage binaire pour modéliser un alliage industriel de composition beaucoup plus complexe, peut également jouer un rôle sur les résultats obtenus.

Nous avons recensé les incertitudes d'ordre physique suivantes pouvant avoir une influence sur la morphologie des précipités :

- Incertitude sur les constantes élastiques des deux phases. D'une part, l'étude bibliographique que nous avons menée sur les constantes élastiques dans les deux phases semble montrer une inhomogénéité sur les propriétés élastiques de l'ordre de 15% entre γ et γ' et, d'autre part, [Hu 01b] montre que, pour obtenir des populations de précipités semblables à l'expérience, il faut une inhomogénéité très forte. Cependant, les simulations dans [Hu 01b] ne prennent pas en compte les différents variants de la phase γ' . C'est pourquoi il nous semble intéressant d'étudier ce point ;
- Les traitements thermiques subis par le matériau sont plus complexes que ce que l'on a simulé jusqu'ici. Il subit notamment un traitement d'homogénéisation à 1200°C avant un revenu à 850°C. Ce passage à 1200°C a-t-il une influence sur la microstructure finale ?
- Le traitement de l'énergie d'interface. Tout d'abord, l'énergie d'interface peut être anisotrope. Une énergie d'interface anisotrope conduit à des précipités plus carrés. Ensuite, le poids relatif des coefficients λ et β peut avoir un rôle important lorsque les couloirs sont fins. Jusqu'à présent, par manque d'informations, nous avons choisi de déterminer λ/β pour que les termes hétérogènes $\lambda|\nabla c|^2$ et $\beta|\nabla \eta|^2$ contribuent de manière similaire à l'énergie d'interface. Une possibilité pour estimer λ/β serait d'utiliser l'énergie de paroi d'antiphase (APB) dans la phase γ' pure. Plus précisément, il est bien établi que, dans le système Ni-Al, l'énergie d'APB conservative est très significativement supérieure à l'énergie d'interface γ/γ' (les ordres de grandeurs de ces énergies de surface sont respectivement de 100 mJ.m⁻² et 10 mJ.m⁻²). On peut raisonnablement supposer qu'il en est de même dans les superalliages industriels. Il peut donc être important d'intégrer cette information dans notre modélisation en identifiant en conséquence les coefficients λ et β . Une autre idée, si les gradients de paramètres d'ordre sont forts, est de continuer le développement de la partie hétérogène et d'ajouter le terme $|\eta|^4$.

Bien d'autres paramètres physiques entrent dans nos simulations mais nous pensons qu'ils n'ont pas d'influence sur le régime de coalescence des précipités. Il s'agit notamment de la fonctionnelle d'énergie libre. C'est également le cas du misfit et de l'énergie d'interface qui vont uniquement modifier les échelles de temps et d'espace des simulations.

Nous avons envisagé deux types d'erreurs d'ordre numérique, la première liée à la finesse de la discrétisation et la seconde liée au caractère 2D de nos simulations. Deux questions se posent alors :

- Quelle est l'influence du pas de grille sur la coalescence des précipités ?
- Obtient-on les mêmes statistiques de populations de précipités pour des simulations 2D et 3D ?

La première question conduit à l'analyse suivante. La croissance de la taille moyenne des précipités s'accompagne d'événements de coagulation. Ces événements sont très dépendants de la morphologie des interfaces, en particulier de leur épaisseur, car celle-ci contrôle le recouvrement des champs de diffusion entre précipités proches voisins. C'est précisément là que notre modélisation est la plus approximative, car les interfaces que l'on reproduit sont beaucoup plus larges qu'observé expérimentalement. Cette largeur excessive est une conséquence de la valeur nanométrique du pas de grille. Dans la mesure où la durée des événements de coagulation est contrôlée par le recouvrement des champs de diffusion, les propriétés intrinsèques des phénomènes de coagulation sont mal reproduits. Néanmoins, le temps caractéristique des événements de coagulation étant très inférieur au temps caractéristique de la croissance¹, il est peu probable que l'évolution macroscopique de la microstructure soit très sensible à la valeur du pas de grille. L'analyse du second point évoqué ci-dessus (statistique de la taille des précipités en 3D) nécessiterait des simulations 3D très coûteuses en moyens informatiques. Celles-ci n'ont pas été entreprises ici.

¹La coagulation et la croissance sont deux phénomènes contrôlés par diffusion. Leurs temps caractéristiques sont donc reliés aux

Les points suivants sont étudiés dans la suite dans cette section. Premièrement, nous discutons le fait que les simulations sont effectuées sur un alliage binaire. De même nous discutons sur la pertinence de prendre une énergie d'interface isotrope. Puis nous présentons des simulations permettant de quantifier le rôle de l'inhomogénéité des constantes élastiques ainsi que celui d'un revenu à 1200°C. Enfin, en étudiant l'influence de la discrétisation sur la coalescence des précipités, nous avons rencontré un problème numérique. Nous avons observé des sauts sur les contraintes normales aux interfaces γ/γ' . Ce point est également détaillé.

Influence des éléments d'alliage

Comme précisé au premier chapitre, les superalliages utilisés industriellement présentent de nombreux éléments d'alliage. Nos simulations sont effectuées sur l'alliage binaire Ni-Al. On peut donc légitimement se poser la question du rôle des autres éléments d'alliage sur la microstructure. Pour répondre à cette question, il faudrait ajouter d'autres éléments d'alliages dans nos simulations. Des modèles champs phases modélisant des alliages ternaires ont été proposés récemment [Wang 08, Kitashima 08]. La prise en compte d'éléments d'alliage supplémentaires ne pose pas de problème de principe mais soulève des questions d'identification. En effet, cela ajoute au modèle de nombreux paramètres qui sont difficiles à ajuster puisque, par exemple, l'influence des différents éléments d'alliage sur les énergies d'interface et les coefficients de diffusion n'est en général pas connue.

Par contre nous pouvons comparer nos simulations à des résultats expérimentaux sur un alliage binaire Ni-Al à forte fraction de précipités. La figure 5.19 est issue de [Chellman 74]. Elle semble montrer des tailles de précipités relativement homogènes. Chellman et Ardell annoncent également que la coalescence des précipités entraîne la formation de quelques gros précipités. La forme des précipités dans Ni-Al est très régulière puisque, en coupe, ils ont presque toujours quatre côtés. Donc, a priori, ce ne sont pas les autres éléments d'alliage entrant dans la composition de l'AM1 qui influencent la forme des précipités. Bien évidemment, il faudrait plus de résultats expérimentaux sur le système Ni-Al pour confirmer ce point.

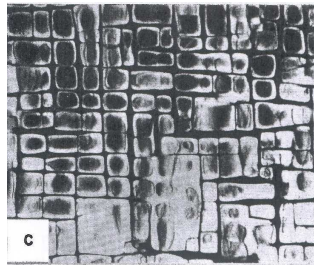


FIG. 5.19. Image expérimentale d'après d'un alliage binaire Ni-Al à forte fraction volumique de précipités. L'image fait $2.6 \times 2.1 \mu\text{m}$. D'après [Chellman 74].

Isotropie de l'énergie d'interface

Dans nos simulations, nous avons considéré que l'énergie d'interface est isotrope. Dans un modèle champs de phases, il est possible d'utiliser des termes de gradient anisotropes, ce qui permet de reproduire l'anisotropie des énergies d'interface. Une anisotropie cubique de l'énergie d'interface permettrait d'obtenir dans les simulations des précipités de forme plus cuboïdale. La pertinence d'une telle démarche peut être évaluée en regardant des précipités γ' tout petits. En effet, plus la taille l est petite, plus l'énergie d'interface (proportionnelle à l^2) est importante vis-à-vis de l'énergie élastique (proportionnelle à l^3). Ainsi, si la

longueurs caractéristiques associées à ces phénomènes : la largeur des interfaces ξ et la taille moyenne des précipités l , respectivement. Dans le régime de croissance, ξ est très inférieur à l . Par conséquent, le temps caractéristique des phénomènes de coagulation est très inférieur au temps caractéristique de la croissance.

	Phase γ	Phase γ'	Inhomogénéité
C_{11} [GPa]	177	197	11%
C_{12} [GPa]	130	135	3.8%
C_{44} [GPa]	90	95	5.4%
Anisotropie $\frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$	3.83	3.06	22%

TAB. 5.2. Constantes élastiques des phases γ et γ' utilisées pour quantifier l'influence de l'anisotropie de la phase γ sur la microstructure.

forme des gros précipités est la conséquence de l'anisotropie élastique, la forme des petits précipités est principalement le reflet de l'anisotropie interfaciale. Malheureusement, à notre connaissance, aucune analyse microstructurale de petits précipités (inférieurs à quelques dizaines de nm) n'a à ce jour été entreprise dans l'AM1. Nous ne pouvons donc pas conclure sur ce point.

Influence de l'inhomogénéité des constantes élastiques

Dans [Hu 01b] est proposée une étude paramétrique de la morphologie des précipités en fonction de l'inhomogénéité des propriétés élastiques des deux phases. Les auteurs mettent notamment en évidence le rôle de la différence d'anisotropie élastique et d'inhomogénéité des modules de cisaillement sur la microstructure. Ces simulations ont été menées avec un modèle champs de phases qui ne prend pas en compte l'existence de différents variants pour les précipités. C'est pourquoi il nous a semblé intéressant d'effectuer quelques simulations afin de quantifier l'influence de l'inhomogénéité élastique sur les microstructures γ/γ' . Nous avons néanmoins souhaité conserver des propriétés élastiques comparables pour les deux phases, étant donné que l'étude bibliographique réalisée sur les constantes élastiques a montré que leur inhomogénéité est relativement faible dans les superalliages.

Nous avons effectué une simulation avec les caractéristiques élastiques des deux phases données par le tableau 5.2. Nous avons joué sur l'anisotropie de la phase γ . Le jeu de coefficients retenu conduit à une différence de 22% sur le coefficient d'anisotropie entre les deux phases, contre 10% avec les paramètres identifiés dans l'annexe E. Les modules de cisaillement C_{44} sont pris constants par rapport au jeu de paramètres initial.

La figure 5.20 montre l'évolution de la microstructure avec le jeu de paramètres du tableau 5.2. La comparaison des figures 5.20(c) et (d) montre que l'augmentation de l'anisotropie de la phase γ entraîne une microstructure dont les couloirs de matrice sont mieux dessinés et plus longs. Les cercles rouges de la figure 5.20(d) mettent en évidence des zones où l'on a coalescence des précipités avec le jeu de coefficients élastiques initial et non coalescence avec le jeu du tableau 5.2. L'absence de coalescence de ces précipités limite en partie la formation de certains précipités "biscornus". Cependant, la microstructure obtenue par cette simulation est encore bien différente de la microstructure de l'AM1.

Simulation d'un traitement thermique

Nous simulons un maintien à 1200°C avant le revenu à 950°C. Les paramètres de la simulation à 1200°C sont les suivants :

- paramètres de la fonctionnelle $c_\gamma = 0.175$, $c_\gamma = 0.25$, $c_b = 0.19$;
- misfit $\delta = -0.3\%$ en accord avec les mesures de [Royer 98] ;
- $\chi = 0.1$;
- les constantes élastiques des phases γ et γ' sont données par le tableau 5.3 ;
- on suppose, faute de données expérimentales, que l'énergie d'interface a la même valeur à 1200°C qu'à 950°C.

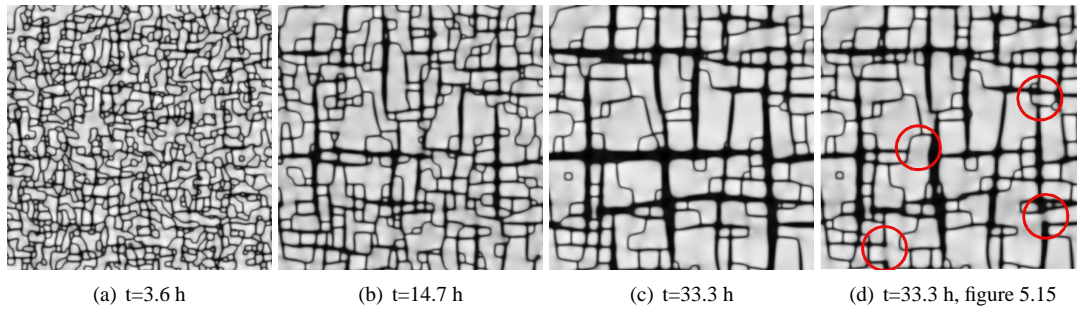


FIG. 5.20. Influence de l'anisotropie de la phase γ sur la formation de la microstructure en cubes. Les constantes élastiques utilisées pour cette simulation sont données par le tableau 5.2. La microstructure finale obtenue avec les propriétés élastiques identifiées dans l'annexe E est ajoutée pour faciliter la comparaison (image (d)).

	Phase γ	Phase γ'
C_{11} [GPa]	167.9	159.7
C_{12} [GPa]	126.5	111.7
C_{44} [GPa]	76.3	84.1
$E_{\langle 001 \rangle}$ [GPa]	59.2	67.8
$\nu_{\langle 001 \rangle}$ [GPa]	0.43	0.41
Anisotropie $\frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$	3.68	3.50

TAB. 5.3. Constantes élastiques des phases γ et γ' à 1200°C. Ces valeurs sont obtenues à partir de l'interpolation proposée en annexe E.

L'influence de la température intervient évidemment sur la valeur du coefficient de diffusion. Il est calculé à l'aide de l'équation donnée au paragraphe 5.4.1. Nous avons choisi de garder le paramètre χ constant. Le pas de grille est donc modifié. Cependant, les paramètres choisis pour la température de 1200°C conduisent à un pas de grille de 10 nm, relativement proche de celui que l'on a à 950°C.

La figure 5.21 montre l'évolution microstructurale à partir du désordre à 1200°C. La fraction volumique de précipités à l'équilibre est de l'ordre de 0.4. On constate la formation de précipités relativement allongés conformément aux expériences effectuées par Ardell [Chellman 74] et à d'autres simulations champs de phases [Wang 98].

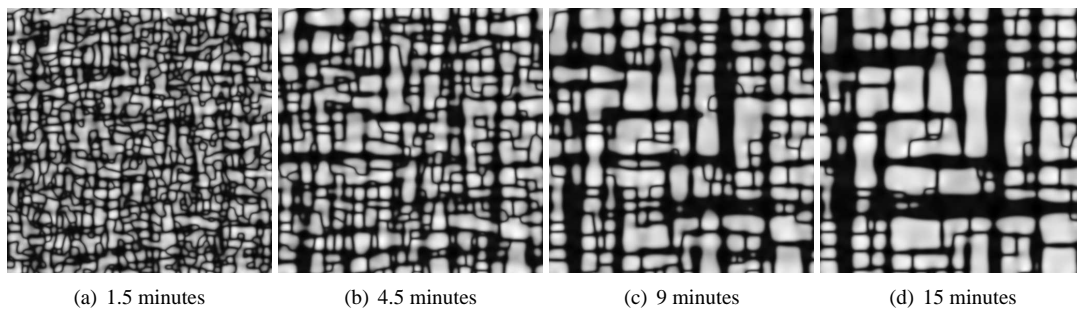


FIG. 5.21. Génération de la microstructure cuboïdale à 1200°C.

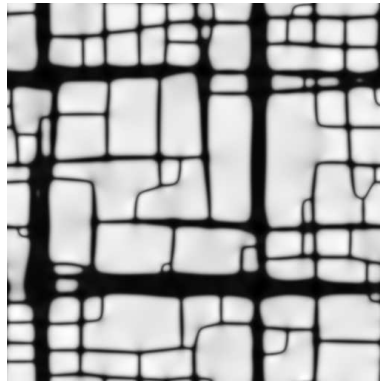


FIG. 5.22. Microstructure cuboïdale obtenue par un revenu de 15 minutes à 1200°C puis vieillie 1.5h à 950°C.

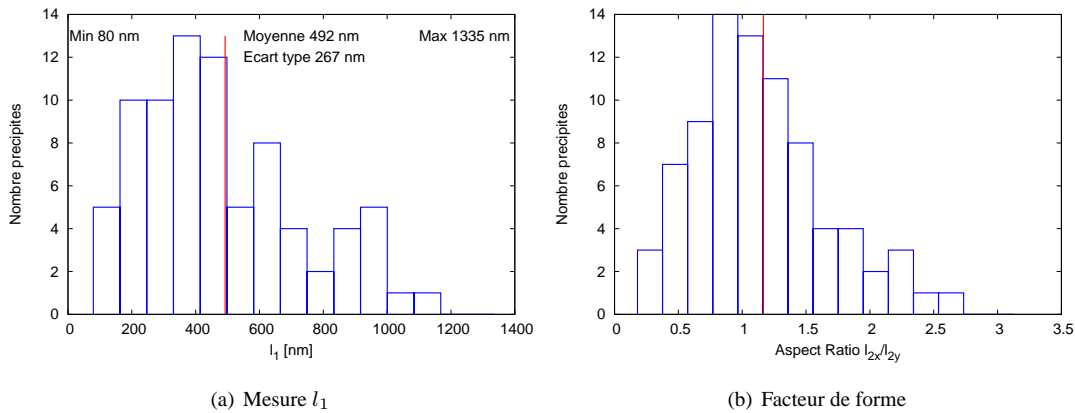


FIG. 5.23. Statistiques de tailles de précipités à l'issue de la simulation d'un maintien de 15 minutes à 1200°C puis de 1.5 heures à 950°C.

La microstructure générée à 1200°C sert ensuite de configuration initiale à un maintien à 950°C. La figure 5.22 présente le résultat de ces deux revenus. On constate que les cubes sont beaucoup plus carrés qu'à l'issue d'un maintien de 33.3 heures à 950°C. Cela est probablement dû au fait que nous avons pris un désaccord paramétrique plus important à 1200°C qu'à 950°C.

Un recuit préliminaire à 1200°C a également des conséquences claires sur la forme des précipités. En effet, sur la figure 5.22, la majorité des précipités a une forme polygonale à quatre côtés alors que ce n'était pas le cas de la figure 5.15. La forme des précipités de la figure 5.22 est donc en meilleur accord avec la microstructure de l'AM1. La figure 5.23 montre que la taille moyenne des précipités est plus importante qu'à l'issue de la première simulation. De plus, la dispersion de taille, évaluée par l'écart type divisé par la taille moyenne, est sensiblement plus faible après un recuit initial à 1200°C (0.54 contre 0.78 pour un recuit unique à 950°C).

Problèmes numériques sur le vecteur traction aux interfaces γ/γ'

La figure 5.24 montre les profils de concentration et de contrainte obtenus lors de la simulation d'un vieillissement à 1200°C présentée au paragraphe précédent. On constate l'existence de sauts de contrainte d'environ plus ou moins 20 MPa comme le montre la figure 5.24(c). Ces sauts sont non physiques. Ils résultent de la méthode numérique utilisée pour discrétiser les équations d'évolution. C'est ce que nous résumons ci-dessous.

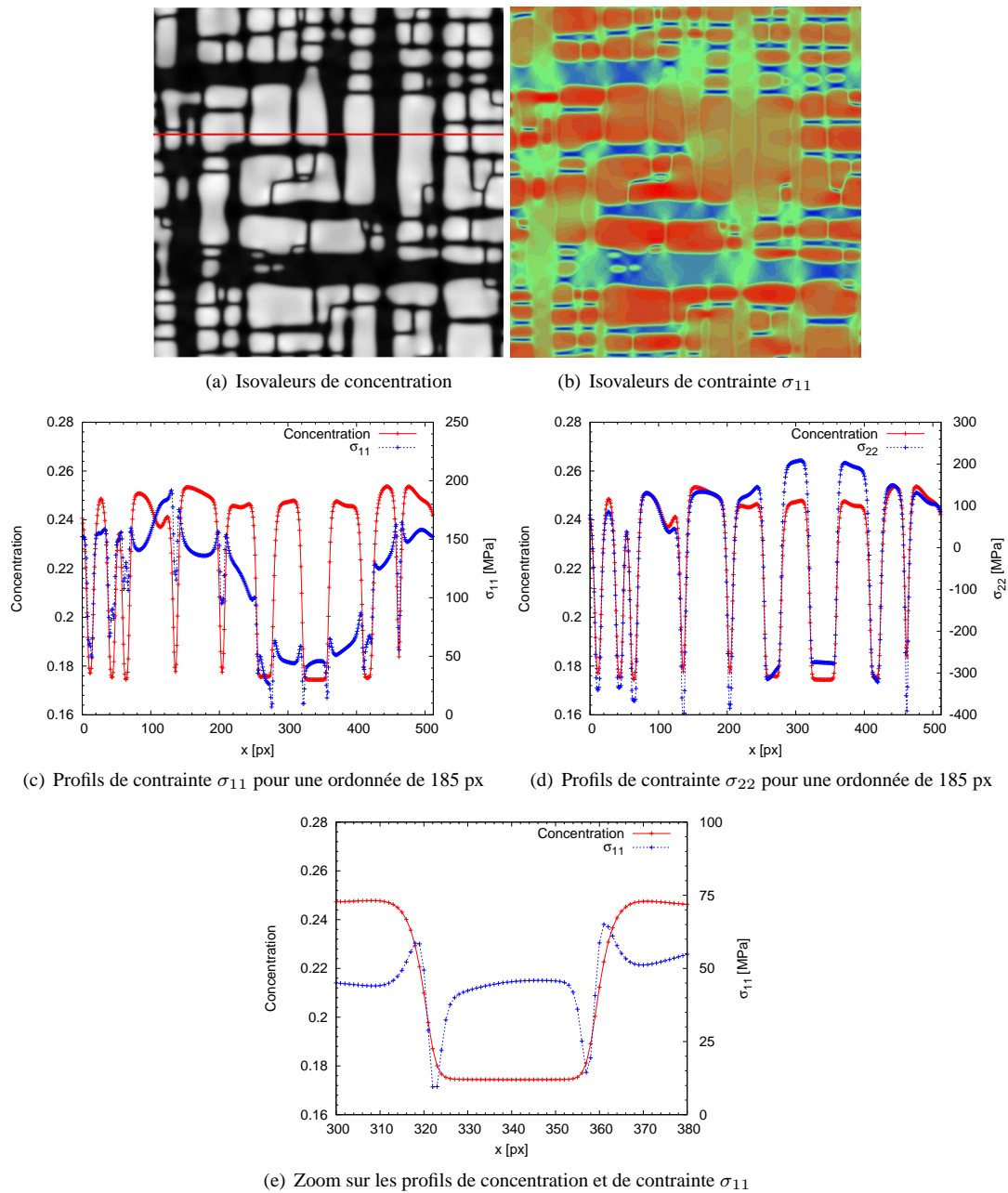


FIG. 5.24. Isovaleurs et profils de concentration et de contrainte pour la simulation d'un vieillissement à 1200°C.

Les équations différentielles de Cahn-Hilliard (pour l'évolution du champ de concentration) et d'Allen-Cahn (pour les champs de paramètres d'ordre) doivent être traduites en schémas numériques. Pour des raisons d'efficacité algorithmique, ces équations sont intégrées dans le réseau réciproque. Deux stratégies sont alors possibles. La première méthode consiste à appliquer des transformées de Fourier sur les équations d'évolution initiales, puis à introduire une coupure q_{max} sur les valeurs de l'onde dans le réseau réciproque. La seconde méthode consiste à permuter ces deux opérations : on discrétise d'abord les équations différentielles sur une grille de pas d , puis on applique des transformées de Fourier, discrètes cette fois-ci, sur les équations aux différences finies. Ces deux méthodes sont équivalentes si, dans la méthode 1, la coupure q_{max} tend vers l'infini et si, dans la méthode 2, le pas de grille tend vers zéro.

Bien entendu, dans les simulations numériques, q_{max} et d sont finis et reliés l'un à l'autre par $q_{max} = \pi/d$. Les deux méthodes sont alors numériquement différentes. Par exemple, l'opérateur différentiel $\frac{\partial}{\partial x}$ sera représenté, dans l'espace de Fourier, par le multiplicateur iq_x dans la méthode 1, et par le multiplicateur $i \sin q_x$ dans la méthode 2. Les différences numériques entre les deux méthodes sont donc essentiellement portées par les ondes dont le vecteur d'onde est comparable à $q_{max} = \pi/d$, c'est-à-dire dont les longueurs d'onde sont comparables à $2d$. Globalement, la différence entre les deux méthodes sera donc d'autant plus faible que les interfaces (qui représentent les plus petites inhomogénéités présentes dans la microstructure) sont larges vis-à-vis du pas de grille. Ce dernier critère est précisément celui que l'on s'astreint à respecter afin que la grille de calcul n'interfère pas avec l'évolution microstructurale. En conclusion, puisque le paramétrage est choisi de manière à avoir des interfaces diffuses, on peut choisir indifféremment la méthode 1 ou 2 pour représenter les opérateurs différentiels dans l'espace de Fourier. Pour des raisons de cohérence numérique, il est préférable de n'utiliser qu'une seule des deux méthodes.

Il s'avère que les calculs présentés ci-dessus ont été effectués en utilisant simultanément les deux méthodes. Plus précisément, les opérateurs différentiels dans le terme de Ginzburg et dans l'équation d'évolution du champ de concentration (Cahn-Hilliard) ont été traités selon la méthode 2. Par contre, dans la méthode de point fixe utilisée pour résoudre les équations de l'équilibre mécanique (voir équation 5.28), l'inverse de la transformée de Fourier de la fonction de Green a été calculée selon la méthode 1 (voir équation 5.32, où l'on définit la transformée de Fourier qui apparaît dans le membre de gauche de l'équation 5.28), tandis que la transformée de Fourier de l'opérateur différentiel qui intervient dans le membre de droite de l'équation 5.28 a été calculée selon la méthode 2. Cette incohérence est très probablement à l'origine des sauts de contrainte observés à la traversée des interfaces. Cependant, pour les raisons évoquées ci-dessus (longueurs d'onde concernées et temps caractéristique des événements de coagulation très inférieur au temps caractéristique de croissance), les conséquences numériques de cette incohérence ne devraient pas être préjudiciables au niveau de l'évolution microstructurale globale.

Afin de vérifier cette analyse, nous avons entrepris les comparaisons suivantes. Nous avons simulé la coagulation de deux précipités sous chargement de fluage en élasticité et avec le modèle élasto-viscoplastique. Dans les deux cas, nous avons comparé les résultats entre les deux situations suivantes : calculer toutes les transformées de Fourier des opérateurs différentiels par la méthode 1 (cas A) ou calculer la transformée de Fourier de la fonction de Green selon la méthode 1 et les transformées de Fourier des autres opérateurs différentiels selon la méthode 2 (cas B). Le cas B correspond à la procédure qui a été suivie dans les simulations présentées dans ce mémoire.

Le chargement appliqué est de 150 MPa suivant l'axe y (axe vertical). La simulation porte sur une grille de 64×32 points. La figure 5.25 compare l'évolution microstructurale, obtenue avec le modèle élastique, de deux précipités carrés dans les cas A et B définis ci-dessus. On constate que la coagulation des précipités intervient légèrement plus tôt dans le cas B. En revanche, la procédure A ou B choisie n'a pas d'influence sur la forme du précipité obtenu en fin de simulation. La même comparaison a été menée avec le modèle élasto-viscoplastique dans les mêmes conditions de chargement (voir figure 5.26). Dans ce cas, on n'observe pas de différence entre le calcul mené suivant la procédure A et le calcul mené suivant la procédure B. Ces simulations confirment donc l'analyse ci-dessus. Les sauts de contrainte observés dans nos simulations sont sans conséquence majeure sur l'évolution microstructurale globale. Nous avons tracé un profil du champ de contrainte σ_{11} obtenu avec le modèle élastique (voir figure ??). Cette figure montre que l'on obtient pas de sauts de contrainte en utilisant la méthode 1 pour le calcul de toutes les transformées de Fourier des opérateurs différentiels.

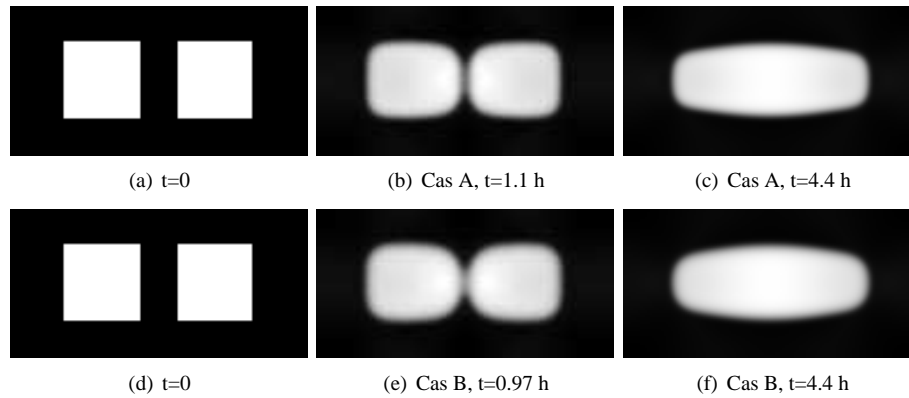


FIG. 5.25. Comparaison de l'évolution microstructurale de deux précipités carrés de même variant sous chargement de fluage de 150 MPa avec le modèle élastique dans le cas A (toutes les transformées de Fourier des opérateurs différentiels sont calculées selon la méthode 1) et dans le cas B (la transformée de Fourier de la fonction de Green est calculée selon la méthode 1 et les transformées de Fourier des autres opérateurs différentiels selon la méthode 2).

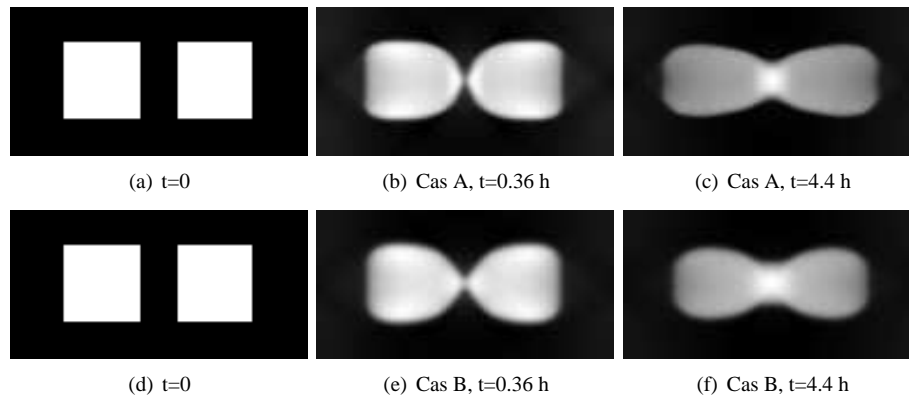


FIG. 5.26. Comparaison de l'évolution microstructurale de deux précipités carrés de même variant sous chargement de fluage de 150 MPa avec le modèle élasto-viscoplastique dans le cas A (toutes les transformées de Fourier des opérateurs différentiels sont calculées selon la méthode 1) et dans le cas B (la transformée de Fourier de la fonction de Green est calculée selon la méthode 1 et les transformées de Fourier des autres opérateurs différentiels selon la méthode 2).

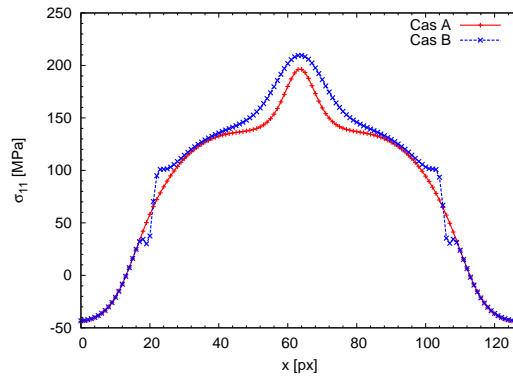


FIG. 5.27. Profil du champ de contrainte σ au milieu de la boîte à $t=1.1$ h obtenu avec le modèle élastique dans les cas A (toutes les transformées de Fourier des opérateurs différentiels sont calculés selon la méthode 1) et B (la transformée de Fourier de la fonction de Green est calculée selon la méthode 1 et les transformées de Fourier des autres opérateurs différentiels selon la méthode 2).

Conclusion

Cette partie a eu pour objectif de simuler l'obtention de la microstructure cuboïdale des superalliages. Une attention particulière a été portée au choix des paramètres physiques entrant dans le modèle champs de phases. Malgré cela nous avons mis en évidence le fait que les formes de précipités obtenus par simulation sont très différentes et les tailles semblent beaucoup plus dispersées que celles que l'on peut observer dans les superalliages industriels. Les mêmes types de microstructures ont été obtenus par d'autres auteurs [Vaithyanathan 02]. Nous avons discuté l'influence d'un certain nombre de points :

- l'influence des éléments d'alliage ;
- l'isotropie de l'énergie d'interface ;
- l'influence de l'inhomogénéité des constantes élastiques ;
- l'influence d'un revenu à 1200°C.

Nous avons vu qu'un revenu à 1200°C permet d'obtenir une microstructure plus proche de la microstructure expérimentale. Il est donc important de reproduire, dans les simulations, la même histoire thermique que celle suivie expérimentalement afin d'améliorer le réalisme physique de la modélisation. Il sera notamment nécessaire, pour la même raison, d'effectuer des simulations 3D.

Nous avons rencontré un problème d'ordre numérique majeur dans nos simulations. La contrainte normale présente des sauts aux interfaces γ/γ' . Comme nous l'avons expliqué plus haut, ces sauts sont la conséquence d'une utilisation simultanée de deux méthodes différentes (méthode 1 et 2) pour calculer les transformées de Fourier des opérateurs différentiels dans la résolution de l'équilibre mécanique. Comme l'ont montré les tests présentés ci-dessus, ces artefacts n'ont pas de conséquences sur l'évolution microstructurale globale.

5.7.2 Etude des évolutions microstructurales sous chargement mécanique en 2D

Nous reprenons ici les simulations sous chargement mécanique à 2D. Cette section présente les simulations numériques menées à partir de la microstructure en cubes générée au paragraphe 5.7.1 (figure 5.22). C'est la microstructure obtenue après un recuit à 1200°C puis à 950°C qui sert de configuration initiale aux simulations présentées dans cette partie. Les simulations sont réalisées en 2D. Par rapport aux simulations du paragraphe 5.6, plusieurs paramètres sont modifiés. La température d'étude est 1050°C. Nous avons cependant choisi de prendre le même coefficient de diffusion et la même valeur de l'énergie d'interface à 1050°C qu'à 950°C. Nous avons également choisi de prendre le misfit égal à -0.2% . De plus, comme signalé précédemment, la correction de l'énergie libre homogène pour contrôler les concentrations d'équilibre n'est plus appliquée dans les simulations élasto-viscoplastiques. L'objectif est d'analyser le réalisme physique

Coefficient	r_0	k	n	c	d
	MPa	MPa.s ^{1/n}		MPa	
Systèmes octaédriques	12	500	4.3	6700	500
Systèmes cubiques	17	500	4.3	170000	20000

TAB. 5.4. Coefficients octaédriques de la phase γ identifiés à 1050°C correspondant au comportement dans la microstructure en radeaux (evp2).

des simulations avec les améliorations proposées.

Entre une température de 950°C et une température de 1050°C, le comportement viscoplastique de la phase γ change. L'annexe F propose une identification des paramètres matériau à 1050°C. Tout comme pour les simulations de mise en radeaux présentées précédemment (section 5.6), nous avons considéré un deuxième jeu de paramètres correspondant au comportement de la phase γ lorsque la microstructure est en radeaux. Ces coefficients sont présentés dans le tableau 5.4. C'est ce jeu de paramètres qui est utilisé par la suite pour simuler l'évolution microstructurale sous chargement mécanique. Enfin les constantes élastiques à 1050°C sont données dans l'annexe E.

Fluage suivant la direction $\langle 100 \rangle$

Nous avons simulé la mise en radeaux en fluage suivant la direction $\langle 001 \rangle$ sous un chargement de 150 MPa à 1050°C. Les résultats de la simulation élastique (figure 5.28) sont comparés aux résultats de la simulation élasto-viscoplastique (figure 5.29).

Nous retrouvons ici les mêmes différences entre simulations élastiques et élasto-viscoplastiques qu'au paragraphe 5.6.2. La plasticité affecte la forme des radeaux et la cinétique de coalescence orientée. La différence de cinétique de mise en radeaux entre simulation élastique et simulation élasto-viscoplastique est plus importante ici qu'au paragraphe 5.6.2. Sur les images 5.28(b) et 5.29(c), un rectangle rouge met en évidence une zone dans laquelle la coalescence orientée est effective après 5.44 h de fluage dans la simulation élasto-viscoplastique. Après 9.15 h de fluage simulé avec le modèle élastique, la coalescence des précipités n'a pas encore eu lieu.

La plasticité affecte également la forme des précipités. En effet sur la figure 5.29(c), dans la zone entourée de rouge, nous observons que les précipités sont orientés suivant une direction différente des directions cubiques. Comme nous l'avons vu au paragraphe 5.6.2, c'est la plasticité qui permet une telle désorientation.

Une différence par rapport au paragraphe 5.6.2 concerne le taux de phase obtenu avec la simulation élasto-viscoplastique. Dans la simulation présentée ici, le taux de phase γ' augmente au début de la simulation de fluage. Il vaut 0.72 initialement contre 0.76 après 1.83 h de fluage. Par la suite, il reste à peu près constant. Cette augmentation est probablement due au fait que nous n'avons pas utilisé la correction de la densité d'énergie libre homogène décrite au paragraphe 5.3.3. Lorsque la plasticité est faible, les concentrations d'équilibre se rapprochent. Cette évolution des concentrations d'équilibre est très probablement à l'origine de l'augmentation de taux de phase observée.

Fatigue suivant la direction $\langle 100 \rangle$

Nous avons simulé l'effet d'un chargement de fatigue alterné sur la microstructure de l'AM1. Le chargement appliqué est de $\pm 0.9\%$. La figure 5.30 présente les résultats de la simulation élastique et de la simulation élasto-viscoplastique après 15 cycles. Les deux microstructures obtenues sont très différentes. En élasticité, la microstructure évolue peu. Les précipités coalescent mais les directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 010 \rangle$ restent les orientations privilégiées de la microstructure. Dans le cas de la simulation élasto-viscoplastique,

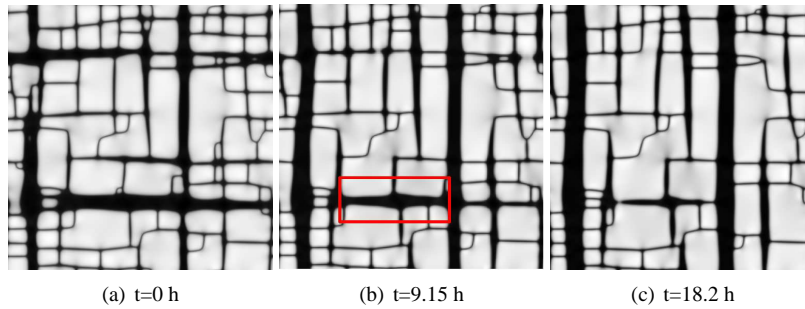


FIG. 5.28. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élastique dans le cas du fluage traction suivant $\langle 100 \rangle$. La taille de la simulation est de $6 \mu\text{m} \times 6 \mu\text{m}$.

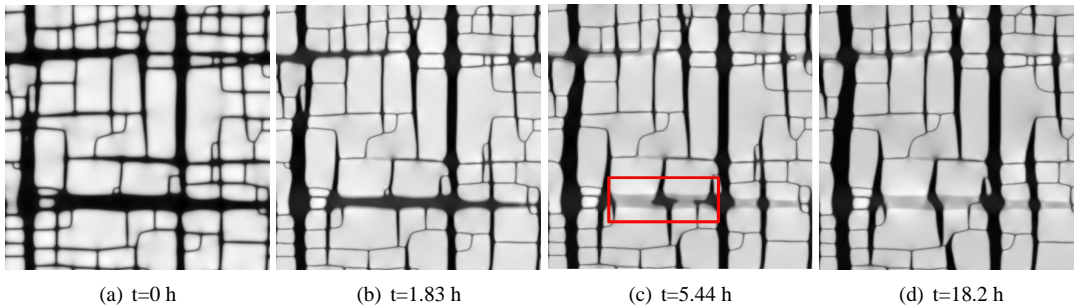


FIG. 5.29. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élasto-viscoplastique dans le cas du fluage traction suivant $\langle 100 \rangle$. La taille de la simulation est de $6 \mu\text{m} \times 6 \mu\text{m}$.

on assiste à une désorientation de la microstructure. La microstructure tend à s'orienter à environ 45° des axes cubiques. La simulation prenant en compte la plasticité permet donc de reproduire qualitativement les résultats obtenus au chapitre 4, ce que ne permet pas le modèle élastique.

La figure 5.31 montre le champ de déformation plastique après 15.5 h de fatigue. On constate que la déformation plastique est localisée à 45° par rapport aux directions cubiques. C'est donc la déformation plastique qui explique l'évolution de la microstructure.

Il est également intéressant de comparer la réponse macroscopique délivrée par le modèle élasto-viscoplastique et les résultats expérimentaux. La figure 5.32 montre que la simulation surestime la contrainte. Cela est probablement dû au fait que l'on a négligé la déformation plastique dans les précipités. Cette hypothèse n'est sûrement plus valable en fatigue. La simulation montre un adoucissement cyclique, tout comme l'essai 14 présenté au chapitre 4. L'amplitude de cet adoucissement est cependant plus faible que celui observé expérimentalement. L'adoucissement est d'environ 50 MPa dans la simulation contre environ 100 MPa expérimentalement. L'adoucissement observé dans les simulations est probablement dû à des variations du taux de phase au cours du cyclage. En effet, aucune échelle de longueur n'est présente explicitement dans le modèle de viscoplasticité utilisé ici. Les coefficients viscoplastiques identifiés pour la phase γ contiennent implicitement une taille caractéristique puisqu'ils ont été identifiés pour une microstructure donnée. Lorsque la microstructure évolue, le comportement de la phase γ évolue. Il sera donc important de modifier la modélisation viscoplastique et d'y introduire une échelle de longueur.

A notre connaissance, il s'agit des premières simulations de l'influence d'un chargement cyclique sur l'évolution microstructurale dans les superalliages base nickel est étudiée en champs de phases. Le modèle élasto-viscoplastique donne des résultats encourageants. Nous montrons également que la prise en compte de la plasticité est nécessaire pour reproduire l'évolution microstructurale observée au chapitre 4.

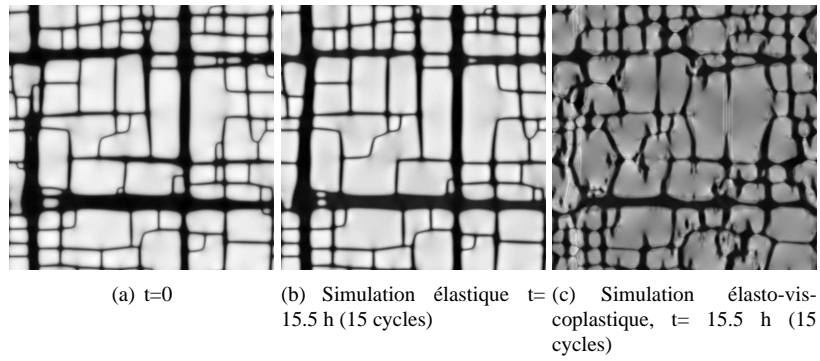


FIG. 5.30. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élastique (a) et élasto-viscoplastique (b) dans le cas d'un chargement de fatigue alterné suivant $\langle 100 \rangle$. La taille de la simulation est de $6 \mu\text{m} \times 6 \mu\text{m}$.

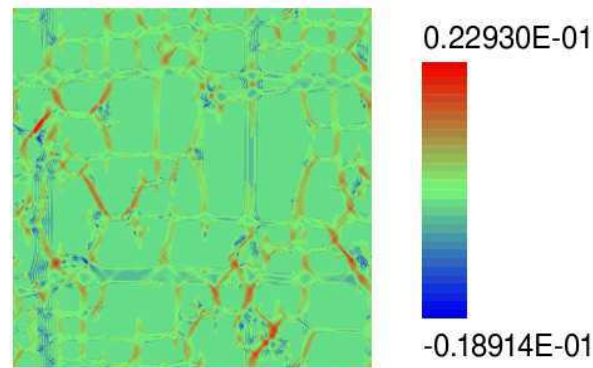


FIG. 5.31. Déformation plastique ε_{11}^p après 15.5 h de fatigue à 1050°C .

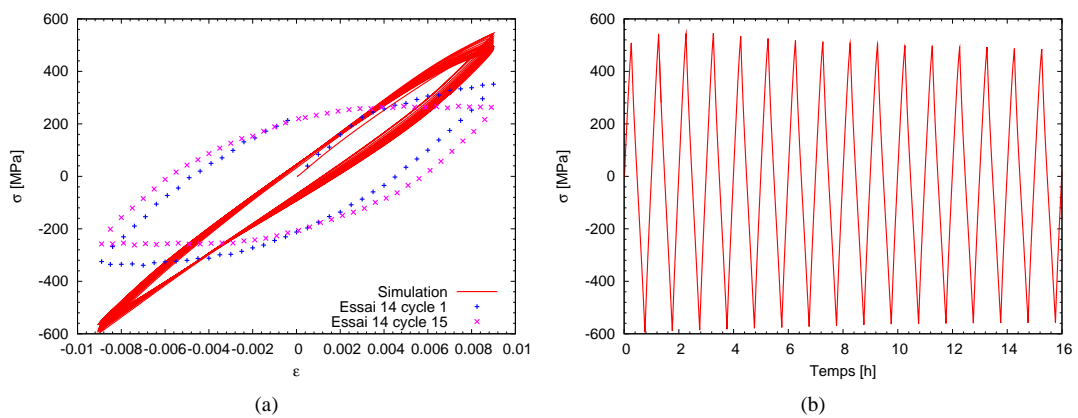


FIG. 5.32. Cycles contrainte déformation simulés avec le modèle champs de phases élasto-viscoplastique.

5.7.3 Etude des évolutions microstructurales sous chargement mécanique en 3D

Les microstructures γ/γ' expérimentales sont 3D alors que jusqu'à présent nous n'avons réalisé que des simulations à 2D, i.e. invariantes par translation selon une direction cubique. Dans ce paragraphe, nous présentons des résultats de simulation en 3D. La réalisation de simulations en 3D permet d'appliquer des chargements suivant des directions cristallographiques différentes de $\langle 001 \rangle$, impossibles à réaliser en 2D. Cependant, les simulation 3D étant coûteuses en temps calcul nous avons dû nous limiter à effectuer des simulations sur une microstructure modèle contenant un seul précipité γ' .

L'évolution de la microstructure durant des chargements de fluage est simulée sur une cellule élémentaire périodique avec le modèle champs de phases élastique et le modèle élasto-viscoplastique. Les simulations sont réalisées en 3D sur une grille de 64 points de côté. Comme précédemment, ces simulations sont réalisées à 1050°C sous un chargement de 150 MPa. Nous étudions les évolutions microstructurales en fluage suivant les orientations $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$.

Fluage suivant la direction $\langle 100 \rangle$

Chargement de fluage traction L'évolution microstructurale pendant un chargement de fluage traction suivant $\langle 001 \rangle$ simulée avec le modèle champs de phases élastique est présentée par la figure 5.33. Le résultat de la simulation élasto-viscoplastique est présenté par la figure 5.34. Dans les deux cas l'axe de traction est horizontal. On observe que la microstructure, initialement sous forme de cubes, évolue de façon à former des radeaux perpendiculaires à l'axe de traction conformément aux observations microstructurales réalisées au chapitre 4.

Tout comme pour les simulations réalisées en 2D, la comparaison des figures 5.33 et 5.34 montre que la plasticité dans les canaux de matrice affecte à la fois la cinétique de mise en radeaux et la forme des précipités lorsque la microstructure en radeaux est bien établie. La figure 5.33 montre que la mise en radeaux est effective après 1.75 h en élasticité alors qu'il faut seulement 0.61 h avec la plasticité. La mise en radeaux est donc environ 3 fois plus rapide lorsque l'activité plastique dans les couloirs de matrice est prise en compte. Cependant, pour obtenir des résultats plus quantitatifs, il faudrait étudier l'influence de taille des interfaces par rapport à la taille des couloirs de matrice.

La plasticité affecte également la forme des radeaux comme on peut le voir sur la figure 5.35. Les radeaux obtenus en élasticité sont très rectilignes. Ceux obtenus par la simulation élasto-viscoplastique ont une forme moins rectangulaire.

La figure 5.36 présente le champ de déformation plastique issu de la simulation élasto-viscoplastique. A $t=0.44$ h, le champ de déformation plastique est inhomogène. La déformation plastique se concentre dans les couloirs de matrice verticaux. Elle est quasi nulle dans les couloirs horizontaux, sauf aux extrémités de ces couloirs. Dans ces zones on observe une déformation plastique intermédiaire qui s'explique par un glissement plastique incliné à 45° par rapport à l'axe de traction. L'activité plastique dans ces zones modifie l'évolution microstructurale ultérieure et explique la forme incurvée des précipités. Après la coalescence, la forme des radeaux est alors moins rectiligne que dans le cas élastique. La forme incurvée des radeaux semble se résorber lentement avec le temps mais persiste toujours après 8.9 h.

Chargement de fluage compression Ce paragraphe étudie les microstructures obtenues en fluage compression suivant $\langle 001 \rangle$. La figure 5.37 présente les résultats obtenus avec le modèle élastique et la figure 5.38 ceux obtenus avec le modèle élasto-viscoplastique. Pour ce chargement on obtient une microstructure sous forme d'aiguilles parallèles à la direction du chargement comme le montre la figure 5.39. Tout comme pour le fluage traction, on observe une cinétique de coalescence plus rapide lorsque la plasticité dans les couloirs de matrice est prise en compte.

La coalescence est effective après 0.61 h pour la simulation élasto-viscoplastique. C'est le même temps qu'en fluage traction. Dans [Zhou 07a], un modèle champs de phase couplé à de la dynamique des dislo-

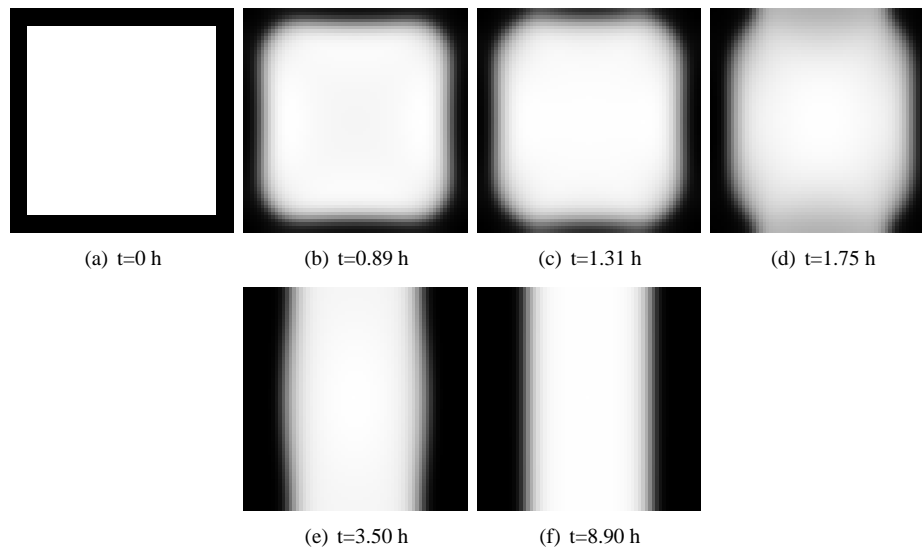


FIG. 5.33. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élastique dans le cas du fluage traction suivant $\langle 100 \rangle$. Les images représentent des coupes en $z=32$ px pour différents temps de fluage. La taille de la simulation de 526 nm x 526 nm x 526 nm.

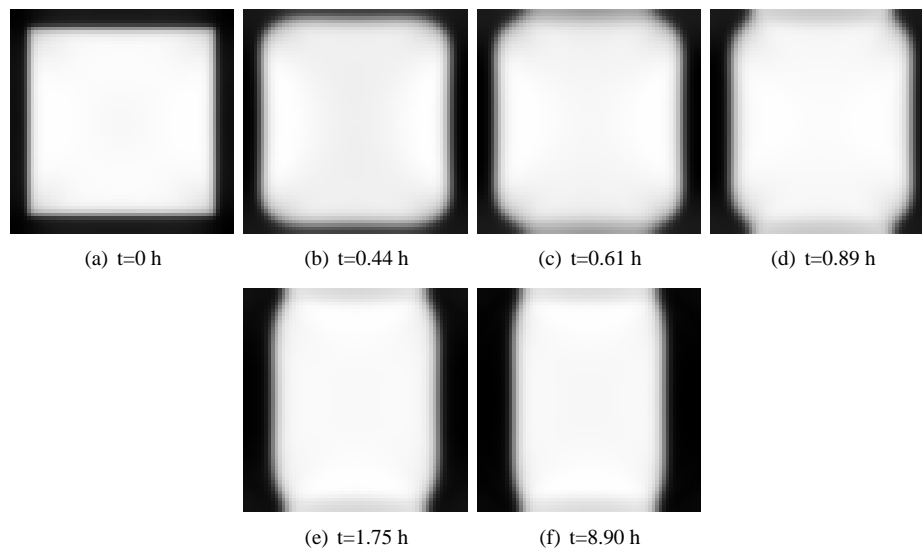


FIG. 5.34. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élasto-viscoplastique dans le cas du fluage traction suivant $\langle 100 \rangle$. Les images représentent des coupes en $z=32$ px pour différents temps de fluage. La taille de la simulation de 526 nm x 526 nm x 526 nm.

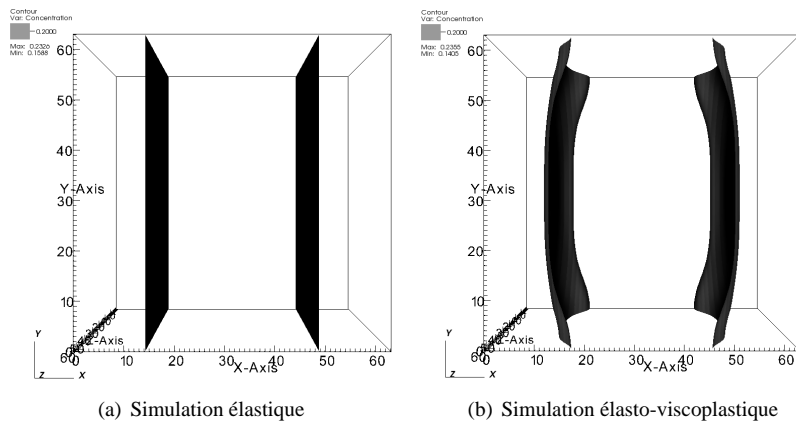


FIG. 5.35. Visualisation en 3D des microstructures obtenues avec le modèle élastique (a) et le modèle élasto-viscoplastique (b) après 8.9 h de fluage traction suivant $\langle 100 \rangle$.

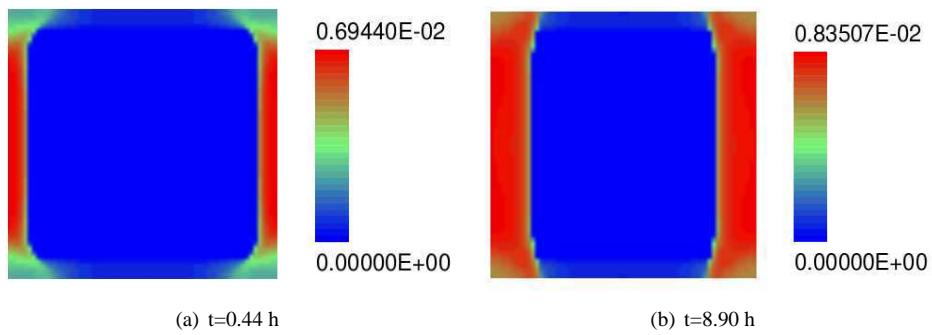


FIG. 5.36. Champ de déformation plastique ε_{11}^p en fluage traction suivant $\langle 001 \rangle$. Les images représentent des coupes en $z=32$ px.

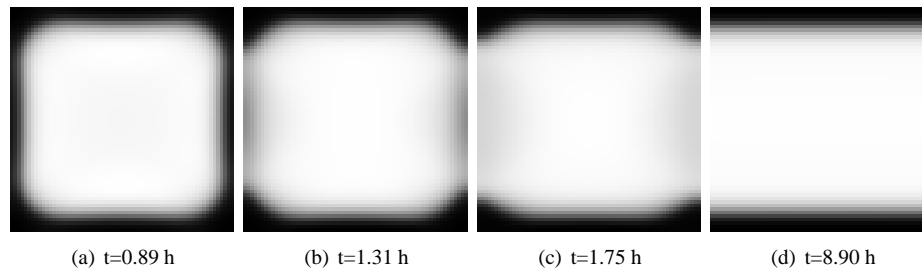


FIG. 5.37. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élastique dans le cas du fluage compression suivant $\langle 100 \rangle$. Les images représentent des coupes en $z=32$ px pour différents temps de fluage. La taille de la simulation est de 526 nm x 526 nm x 526 nm.

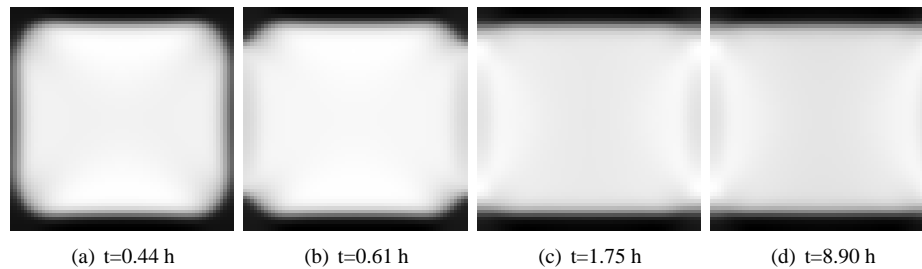


FIG. 5.38. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élasto-viscoplastique dans le cas du fluage compression suivant $\langle 100 \rangle$. Les images représentent des coupes en $z=32$ px pour différents temps de fluage. La taille de la simulation est de 526 nm x 526 nm x 526 nm.

cations est utilisé pour comparer coalescence orientée en fluage traction et en fluage compression. Dans cet article, le misfit est positif ce qui conduit à une mise en radeaux de type P en traction et de type N en compression. Les auteurs relèvent une différence sur la cinétique de la coalescence orientée entre traction et compression. La mise en radeaux est effective après 7.2 h de fluage pour la microstructure de type P et 10.7 h pour la microstructure de type N. Nous n'avons pas retrouvé cette différence dans nos simulations. Cependant, la fraction volumique de précipités est plus faible dans [Zhou 07a], ce qui peut expliquer les différences avec nos simulations.

Fluage suivant la direction $\langle 110 \rangle$

Le chargement appliqué est de la forme :

$$\boldsymbol{\sigma}^a = \frac{\sigma^a}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.115)$$

La simulation champs de phases élastique, figure 5.40, montre que l'on obtient une coalescence de la microstructure suivant l'axe z . La coupe suivant le plan $z=32$ px montre que la section des précipités, au début rectangulaire, s'arrondit.

Le lien entre la sollicitation et le type de mise en radeaux observé peut être compris en utilisant une approximation de type champ moyen décrite en détail dans [Boussinot 07]. Cette approximation est valable dans le cas de petites différences de constantes élastiques entre les deux phases comme c'est le cas dans les superalliages base nickel. L'approximation champ moyen consiste à utiliser la valeur moyenne de la fonction de Green. On peut, dans le cadre de cette approximation, considérer un tenseur de déformation

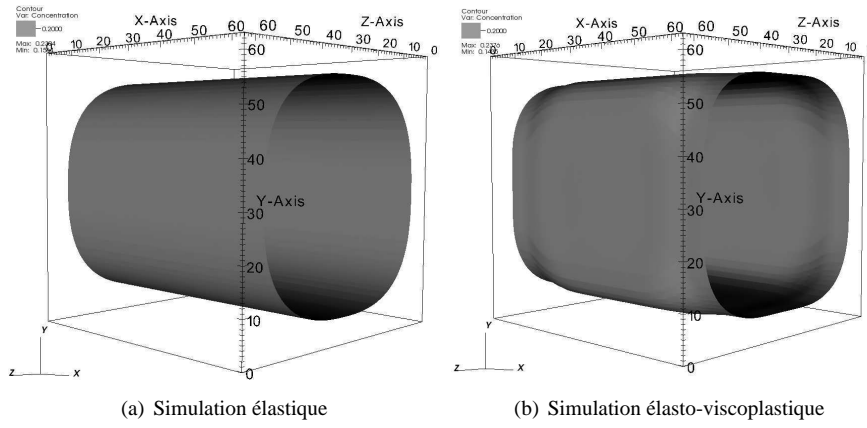


FIG. 5.39. Visualisation en 3D des microstructures obtenues avec le modèle élastique (a) et le modèle élasto-viscoplastique (b) après 8.9h de fluage en compression suivant (100).

propre effectif défini par :

$$\varepsilon_{ij}^* = \varepsilon_{ij}^T - \bar{S}_{ijkl} \lambda'_{klmn} [\bar{\varepsilon}_{mn} - \varepsilon_{mn}^T (c_{\gamma'} + c_{\gamma} - 2\bar{c})] \quad (5.116)$$

De plus, lorsqu'on applique une contrainte, on a :

$$\bar{\varepsilon}_{ij} \approx \bar{S}_{ijkl} \sigma_{kl}^a \quad (5.117)$$

avec \bar{S} le tenseur des souplesses. Cette approximation n'est valable que si :

$$\sigma^a \gg \Delta\lambda \frac{\delta a}{a} \quad (5.118)$$

où $\Delta\lambda$ représente l'inhomogénéité élastique et $\delta a/a$ le misfit. Dans notre cas, la différence de constantes élastiques est de l'ordre de 10 GPa et le misfit de l'ordre de 10^{-3} . La condition 5.118 nécessite $\sigma^a \gg 10$ MPa, ce qui est le cas ici.

Nous avons calculé le tenseur effectif avec $\bar{c} = 0.2$, $\bar{C}_{11} = 185$ GPa, $\bar{C}_{12} = 131$ GPa, $\bar{C}_{44} = 88$ GPa, $C'_{11} = 6$ GPa, $C'_{12} = -57$ GPa, $C'_{44} = 79$ GPa, $\sigma^a = 150$ MPa et $\varepsilon^T = -0.0247$:

$$\varepsilon^* = \begin{bmatrix} -0.024952 & -0.000767 & 0 \\ -0.000767 & -0.024952 & 0 \\ 0 & 0 & -0.024928 \end{bmatrix} \quad (5.119)$$

Les composantes ε_{12}^* et ε_{21}^* sont négligeables devant les composantes ε_{11}^* , ε_{22}^* et ε_{33}^* , ce qui conduit à :

$$\varepsilon^* \approx \begin{bmatrix} -0.024952 & 0 & 0 \\ 0 & -0.024952 & 0 \\ 0 & 0 & -0.024928 \end{bmatrix} \quad (5.120)$$

Un calcul du minimum d'énergie élastique effectué avec ce tenseur effectif (voir paragraphe 7.4.1) montre que les directions qui minimisent l'énergie élastique sont $\underline{n} = (1, 0, 0)$ et $\underline{n} = (0, 1, 0)$. Ce calcul prévoit donc l'obtention d'aiguilles normales à la direction z . La simulation champs de phases élastique est en accord avec ce résultat.

La simulation viscoplastique donne un résultat différent comme le montre la figure 5.41. On a toujours une coalescence suivant l'axe z des précipités mais leur section est différente du calcul élastique. Elle est rectangulaire au début (après 0.89 h). Cela signifie que les directions [100] et [010] sont équivalentes énergétiquement dans ce cas. Pour des temps de fluage plus longs, on observe que la direction [110] est équivalente énergétiquement aux directions [100] et [010].

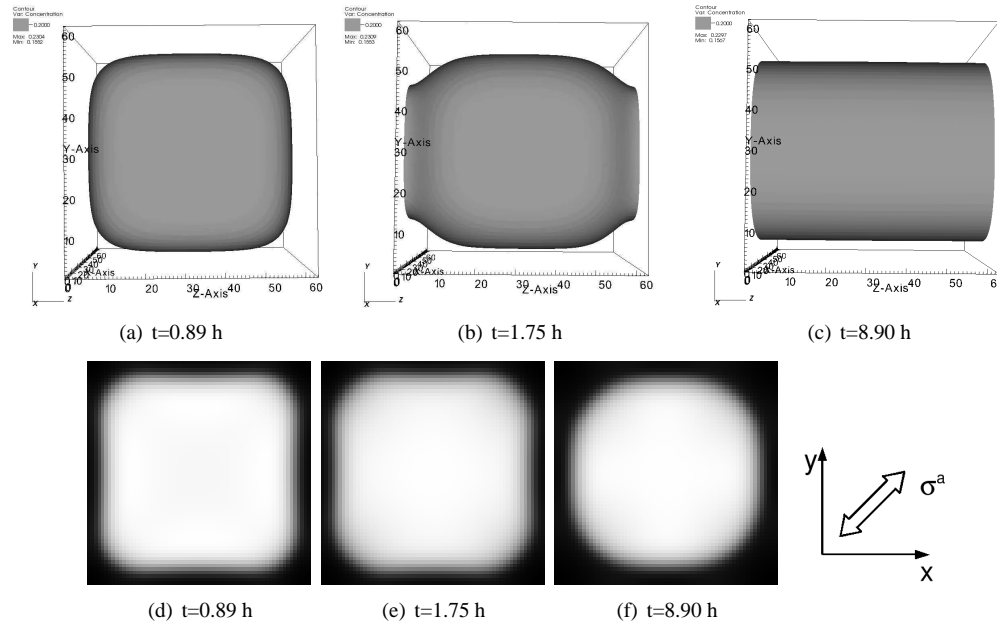


FIG. 5.40. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élastique dans le cas du fluage traction suivant $\langle 110 \rangle$. Les images de la ligne supérieure représentent la microstructure en 3D. Les images de la ligne inférieure sont des coupes suivant le plan $z=32$ px. La taille de la simulation est de $526 \text{ nm} \times 526 \text{ nm} \times 526 \text{ nm}$.

Ces résultats sont cohérents avec les observations expérimentales. La figure 5.42 montre la microstructure obtenue après fluage le long de $\langle 011 \rangle$. On constate l'existence de trois familles de plaquettes. Celles-ci sont mises en évidence en rouge sur la micrographie. On observe des plaquettes de normale $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$. Cette observation a également été faite par Ayrault [Ayrault 89] (voir figure 5.42(b)).

L'observation de plaquettes normales à l'orientation $[110]$ est expliquée au chapitre 7. Nous y proposons un modèle basé sur une minimisation de l'énergie élastique en présence de déformation plastique. Ce modèle permet de montrer que pour une déformation plastique suffisamment importante, l'orientation qui minimise l'énergie élastique est la direction $[110]$.

Fluage suivant la direction $\langle 111 \rangle$

Le chargement appliqué est de la forme :

$$\boldsymbol{\sigma}^a = \frac{\sigma^a}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.121)$$

La figure 5.43 présente le résultat de la simulation élastique pour ce chargement. Cette figure montre que la coalescence des précipités s'effectue suivant les axes $[100]$, $[010]$ et $[001]$. En revanche, sur le résultat de la simulation élasto-viscoplastique (figure 5.44), on n'observe pas de coalescence des précipités. Ces résultats sont cohérents avec les observations faites au chapitre 4. Les microstructures obtenues expérimentalement montrent une microstructure "isotrope" dans le sens où aucune des faces de type $\{001\}$ n'est privilégiée par rapport aux autres.

Comme au paragraphe précédent, nous avons calculé le tenseur propre effectif pour expliquer la micro-

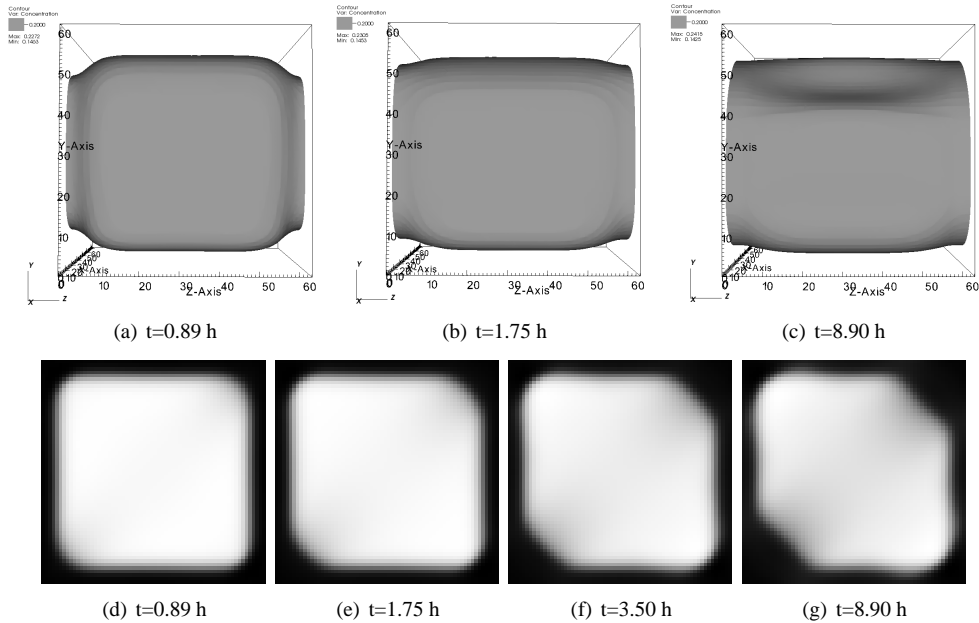


FIG. 5.41. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élasto-viscoplastique dans le cas du fluage traction suivant $\langle 110 \rangle$. Les images de la ligne supérieure représentent la microstructure en 3D. Les images de la ligne inférieure sont des coupes suivant le plan $z=32$ px. La taille de la simulation est de $526 \text{ nm} \times 526 \text{ nm} \times 526 \text{ nm}$.

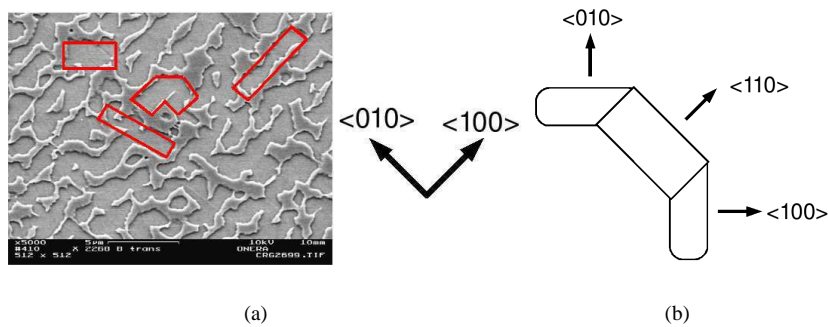


FIG. 5.42. (a) Microstructure obtenue expérimentalement en fluage suivant $\langle 110 \rangle$. (b) Schéma explicatif de la morphologie des plaquettes observées après fluage le long de $\langle 110 \rangle$ (d'après [Ayrault 89]).

structure obtenue lors de la simulation champs de phases élastique :

$$\varepsilon^* = \begin{bmatrix} -0.024303 & -0.00051010 & -0.00051010 \\ -0.00051010 & -0.024303 & -0.00051010 \\ -0.00051010 & -0.00051010 & -0.024303 \end{bmatrix} \quad (5.122)$$

Les composantes non diagonales sont négligeables par rapport aux composantes diagonales :

$$\varepsilon^* \approx \begin{bmatrix} -0.024303 & 0 & 0 \\ 0 & -0.024303 & 0 \\ 0 & 0 & -0.024303 \end{bmatrix} \quad (5.123)$$

Au premier ordre, le tenseur effectif est donc diagonal. Les calculs dans [Khachaturyan 83] montrent que dans ce cas les trois directions cubiques sont énergétiquement équivalentes. C'est pourquoi on obtient une coalescence suivant les trois directions cubiques dans le cas élastique. Dans le cas élasto-viscoplastique, pour des faibles déformations plastiques, le modèle du chapitre 7 prévoit également que les trois directions cubiques sont équivalentes. C'est ce que nous retrouvons en champs de phases puisque le précipité cubique le reste après un chargement de fluage suivant $\langle 111 \rangle$.

La différence entre la simulation élastique et la simulation élasto-viscoplastique est que dans le premier cas on a coalescence suivant les direction $[100]$, $[010]$ et $[001]$ alors que dans le second cas le précipité reste cubique. En présence de plasticité les faces des précipités sont très plates et la courbure des interfaces au niveau des arêtes est plus importante que dans le cas élastique. L'analyse du tenseur de déformation plastique montre que les composantes les plus élevées sont ε_{12}^p , ε_{13}^p et ε_{23}^p . La valeur de ε_{12}^p dans la phase γ est présentée par la figure 5.45. On remarque que l'activité plastique est uniforme dans toute la longueur des couloirs et est plus importante dans les zones communes à plusieurs couloirs. Une compréhension plus fine de l'influence de la plasticité dans le cas de la traction suivant $\langle 111 \rangle$ nécessiterait d'effectuer de nouvelles simulations. En effet, il serait intéressant d'effectuer des calculs en utilisant au départ un précipité moins symétrique, c'est-à-dire pas tout à fait cubique, afin de tester si le comportement très symétrique que nous observons, et qui est imposé par la symétrie de la configuration, persiste dans ce cas. Ensuite, il serait également intéressant d'effectuer de nouveaux calculs en réduisant le taux de phase de la phase γ' afin d'observer plus facilement les changements morphologiques ayant lieu avant la coalescence.

5.8 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à la modélisation de la coalescence orientée avec la méthode des champs de phases. Nous avons construit un modèle champs de phases qui prend en compte la plasticité dans les couloirs de matrice. Nous avons utilisé un modèle de comportement phénoménologique cristallin pour décrire la plasticité de la phase γ . Le modèle a été utilisé pour simuler l'évolution microstructurale pendant des chargements de fluage et de fatigue suivant différentes orientations cristallographiques. Les résultats du modèle sont en accord avec les observations expérimentales. De plus, la comparaison avec les simulations élastiques a montré que dans certains cas la prise en compte de la plasticité est nécessaire pour reproduire correctement les évolutions microstructurales. C'est notamment le cas pour un chargement de fatigue alternée suivant $\langle 001 \rangle$ où l'on observe une microstructure orientée à 45° des axes cubiques. C'est également le cas en fluage suivant la direction $[011]$ où le modèle élasto-viscoplastique prévoit l'apparition de plaquettes orientées normalement à l'orientation $]110[$ en plus des plaquettes normales à $[100]$ et $[010]$. La plasticité influe également sur la forme des radeaux. De manière générale, ils sont moins rectilignes lorsque l'activité plastique est prise en compte. Enfin, la plasticité joue un rôle sur la cinétique de mise en radeaux. Celle-ci est plus rapide en présence de déformation plastique. Les perspectives de l'approche couplée champs de phases et viscoplasticité sont discutées dans la conclusion générale de la thèse.

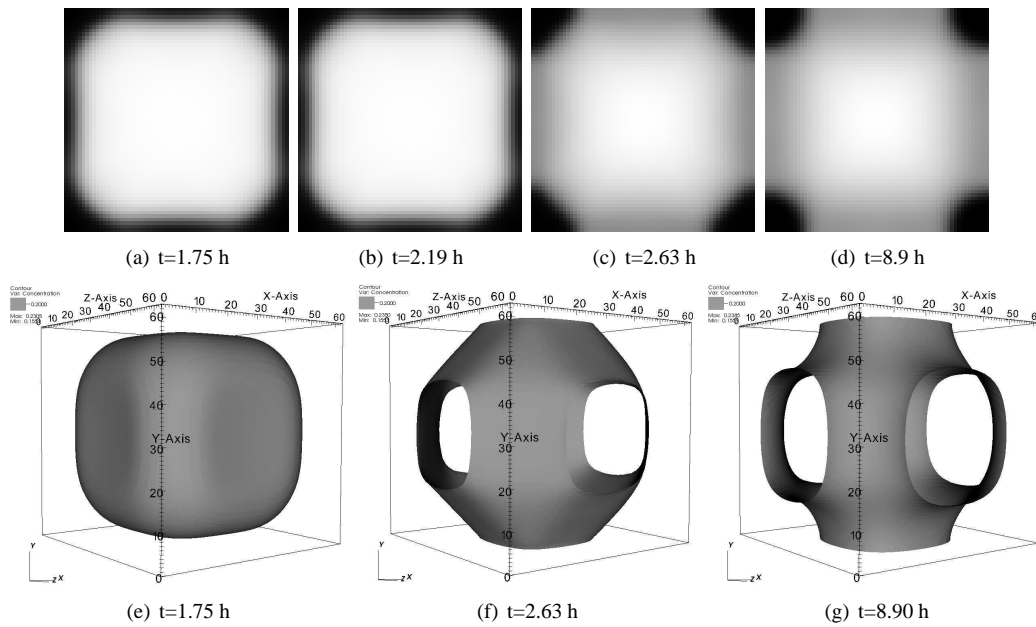


FIG. 5.43. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élastique dans le cas du fluage traction suivant $\langle 111 \rangle$. Les images de la ligne supérieure représentent la microstructure en 3D. Les images de la ligne inférieure sont des coupes suivant le plan $z=32$ px. La taille de la simulation de $526 \text{ nm} \times 526 \text{ nm} \times 526 \text{ nm}$.

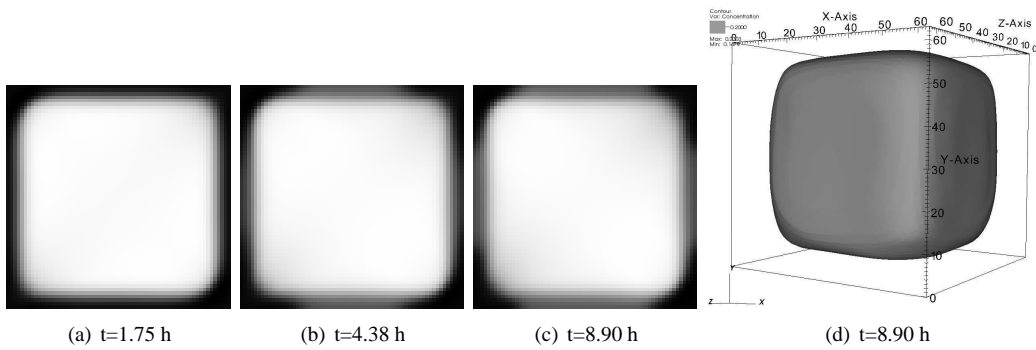


FIG. 5.44. Evolution microstructurale simulée avec le modèle champs de phases élasto-viscoplastique dans le cas du fluage traction suivant $\langle 111 \rangle$. Les images (a), (b), (c) sont des coupes suivant le plan $z=32$ px. L'image (d) représente la microstructure en 3D. La taille de la simulation de $526 \text{ nm} \times 526 \text{ nm} \times 526 \text{ nm}$.

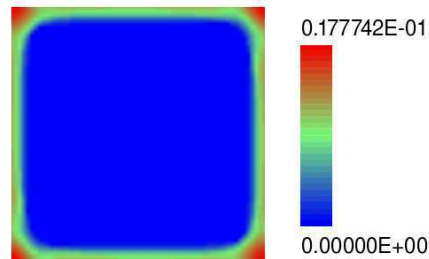


FIG. 5.45. Champ de déformation plastique ε_{12}^p dans le plan $z=32$ px après 8.9 h de fluage suivant $\langle 111 \rangle$.

Chapitre 6

Size effects in generalized continuum crystal plasticity

Sommaire

5.1	Introduction	116
5.2	Modélisation par la théorie des champs de phases	116
5.2.1	Description de la microstructure γ/γ'	117
5.2.2	Cinétique	118
5.2.3	Fonctionnelle d'énergie libre de Ginzburg-Landau	118
5.2.4	Traitement de l'élasticité	120
5.3	Implémentation numérique	122
5.3.1	Equations cinétiques	122
5.3.2	Algorithme de résolution de l'équilibre élastique	123
5.3.3	Discretisation de l'espace	124
5.4	Simulations avec le modèle champs de phases élastique	125
5.4.1	Calibration des grandeurs physiques du modèle	125
5.4.2	Génération de la microstructure cuboïdale en 2D	128
5.5	Modélisation phénoménologique de la plasticité	130
5.5.1	Retour sur la théorie des champs de phases - couplage avec la viscoplasticité	131
5.5.2	Implémentation numérique	135
5.5.3	Diagramme de phases semi-cohérent	135
5.6	Simulation de la mise en radeaux	139
5.6.1	Comportement viscoplastique de la phase γ	139
5.6.2	Résultats numériques	140
5.6.3	Discussion	144
5.7	Vers des simulations champs de phases plus quantitatives ?	145
5.7.1	Génération de la microstructure cuboïdale	145
5.7.2	Etude des évolutions microstructurales sous chargement mécanique en 2D	156
5.7.3	Etude des évolutions microstructurales sous chargement mécanique en 3D	160
5.8	Conclusion	168

Nous avons vu au chapitre 3 que des simulations à l'échelle de la microstructure menées dans le cadre de la mécanique des milieux continus classique ne permet pas de rendre compte d'effets d'échelle (largeur des couloirs de matrice, etc.). C'est pourquoi nous nous sommes tournés vers la mécanique des milieux continus généralisés. Deux modèles sont utilisés, le modèle Cosserat et le modèle *microcurl* qui par rapport au modèle de Cosserat prend en compte le rotationnel de la déformation élastique dans le calcul du tenseur densité de dislocation de Nye. Ce chapitre propose une étude analytique des effets d'échelle délivrés par les deux modèles dans le cas d'une microstructure laminée constituée de deux phases. Il présente également quelques simulations menées sur des microstructures γ/γ' sous différentes conditions de chargement.

Ce travail a été réalisé en coopération avec le Centre des Matériaux. Dans un premier temps, j'ai développé l'approche analytique originale présentée aux paragraphes 2.2 et 2.3. J'ai pu montrer aussi les limites de l'approche par les milieux de Cosserat. En coopération avec N. Cordero du Centre des Matériaux, ce modèle a ensuite été généralisé par le biais du modèle dit *microcurl*, présenté au paragraphe 2.4. Nous avons comparé les deux approches au paragraphe 2.5. Enfin, nous discutons les mérites de ces modèles pour décrire les effets d'échelles dans les superalliages à base de nickel, au moins de manière qualitative, au paragraphe 2.6. Je clos ce chapitre par des simulations par éléments finis d'une microstructure 2D plus proche des γ/γ' , en cisaillement et traction. J'ai enfin mis en évidence clairement certaines limitations des approches proposées. Le texte de ce chapitre fait l'objet d'un manuscrit soumis pour publication.

6.1 Introduction

Classical crystal plasticity theory incorporates internal variables associated with scalar dislocations densities in order to describe the hardening behavior of single and polycrystals [McDowell 08]. The modelling of size effects observed in crystalline solids, e.g. grain or precipitate size effects, requires, at least, the introduction of the effect of the dislocation density tensor as introduced by [Nye 53]. Since the dislocation density tensor is related to the rotational part of the gradient of plastic deformation, the partial differential equations to solve generally are of higher order than in classical mechanics. That is why it is usually necessary to resort to the mechanics of generalized continua in order to formulate properly models that incorporate extra-hardening effect associated with the dislocation density tensor. The generalized crystal plasticity models developed in the past 40 years can be classified into two main groups of theories :

- Strain gradient plasticity models involving the rotational part of plastic deformation or its full gradient [Aifantis 84, Aifantis 87, Steinmann 96, Fleck 97, Gurtin 02, Lele 08],
- Generalized continuum theories with additional degrees of freedom accounting for rotation or full deformation of a triad of crystal directors and the effect of their gradients on hardening : Cosserat models [Kröner 63, Forest 00, Clayton 06], micromorphic theory in [Eringen 70, Bammann 01].

Most of these phenomenological theories have been shown to capture size effects at least in a qualitative way. However, clear demonstrations that they can reproduce the scaling laws expected in precipitate hardening or grain size effect, namely Orowan and Hall–Petch laws, remain seldom.

The extra-hardening effects predicted by generalized continuum crystal plasticity models can be summarized by three main characteristics, illustrated by the schematic curves of figure 6.1 representing the macroscopic stress response, e.g. the yield stress, as a function of the characteristic size l of the microstructure (grain or precipitate size, etc.). A hardening effect is usually obtained when the characteristic size of the microstructure decreases. For large sizes, the asymptotic behavior corresponds to the size-independent response of conventional crystal plasticity models. In contrast, for small sizes, depending on the model considered, a bounded or unbounded asymptotic behaviour can be obtained. The Cosserat crystal plasticity model in [Forest 00] for instance delivers an asymptotic saturated extra-hardening $\Delta\sigma$. In the intermediate region around a characteristic length l_c , a size-dependence response is observed characterized by a scaling law l^n . The objective of this work is to derive explicitly the characteristics $\Delta\Sigma$, l_c and n for models representative of the two mentioned classes of material models.

An analytic description of the size-dependent behavior is possible only in some special simplified geometrical situations. The case of the shearing of a single crystal layer under single (or double) slip was treated for strain gradient plasticity models in [Shu 01, Bittencourt 03, Hunter 08]. Single slip in a two-

phase laminate microstructure was considered in [Sedláček 00, Forest 03b, Forest 08] where the plastic slip distribution was compared for the continuous dislocation line tension model, considered as a reference, and Cosserat and strain gradient plasticity models, including Aifantis model [Aifantis 87]. This simple situation is considered again in the present work in order to derive explicit expressions of the overall extra-hardening, the characteristic size l_c and the scaling law, which had not been done in the previous references.

In the crystal plasticity theory at small deformation, the gradient of the velocity field can be decomposed into elastic and plastic deformation rates :

$$\dot{\underline{H}} = \dot{\underline{u}} \otimes \nabla = \dot{\underline{H}}^e + \dot{\underline{H}}^p \quad (6.1)$$

where

$$\dot{\underline{H}}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \underline{l}^{\alpha} \otimes \underline{n}^{\alpha} \quad (6.2)$$

with, \underline{u} the displacement field, α the number of slip systems, γ the amount of slip, \underline{l} the slip direction and \underline{n} the normal to the slip plane. The elastic deformation \underline{H}^e bridges the gap between compatible total deformation \underline{H} and incompatible plastic deformation \underline{H}^p . Applying the curl operator to a compatible field yields zero so that :

$$\text{curl } \dot{\underline{H}} = 0 = \text{curl } \dot{\underline{H}}^e + \text{curl } \dot{\underline{H}}^p \quad (6.3)$$

The incompatibility of plastic deformation is therefore fully characterized by its curl part called dislocation density tensor $\underline{\Gamma}$ [Nye 53, Steinmann 96, Forest 97, Acharya 00, Cermelli 01, Svendsen 02] defined here as :

$$\underline{\Gamma} = -\text{curl } \underline{H}^p = \text{curl } \underline{H}^e \quad (6.4)$$

The tensors \underline{H} , \underline{H}^e , \underline{H}^p , generally non-symmetric, can be decomposed into their symmetric and skew-symmetric parts :

$$\underline{H} = \underline{\varepsilon} + \underline{\omega}, \quad \underline{H}^e = \underline{\varepsilon}^e + \underline{\omega}^e, \quad \underline{H}^p = \underline{\varepsilon}^p + \underline{\omega}^p \quad (6.5)$$

Then (6.3) becomes :

$$0 = \text{curl } \underline{\varepsilon}^e + \text{curl } \underline{\omega}^e + \text{curl } \underline{H}^p \quad (6.6)$$

Neglecting the curl part of elastic strain $\underline{\varepsilon}^e$ leads to the following approximation of the dislocation density tensor derived by Nye :

$$\underline{\Gamma} \simeq \text{curl } \underline{\omega}^e \quad (6.7)$$

Nye's formula sets a linear relationship between this approximation of the dislocation density tensor and lattice curvature. The Cosserat crystal plasticity theory developed in [Forest 97] incorporates the effect of lattice curvature on crystal hardening behavior. It requires three additional degrees of freedom associated with the lattice rotation $\underline{\omega}^e$. In contrast, the theories [Gurtin 02, Svendsen 02] include the full curl of plastic deformation, which requires in general nine additional degrees of freedom associated with the generally non-symmetric plastic deformation tensor \underline{H}^p . We will call “*curlH^p*” this class of models.

A consequence of neglecting the curl of elastic strain tensor in the Cosserat model is that Cosserat effects can arise even in the elastic regime as soon as gradient of “elastic” rotation exists. Indeed, $\text{curl } \underline{\omega}^e \neq 0$ as soon as $\text{curl } \underline{\varepsilon}^e \neq 0$. In contrast, in the *curlH^p* theory, strain gradient effects arise only when plastic deformation has occurred. As it will be shown in this paper, this leads to different behavior at the interface between an elastic phase and a plastic phase.

This paper is organized as follows. Strain / stress fields and the back-stress in a laminate microstructure submitted to simple shear are derived for the Cosserat model in section 6.2 and for a “*curlH^p*” model in section 6.3. It will be shown that an indeterminacy arises in the resolution of the considered boundary value problem based on the latter approach, due to the presence of a purely elastic layer. A regularization method is proposed in section 6.4 by introducing a model, called *microcurl*, that falls in the class of generalized continua with additional degrees of freedom and makes it possible to unambiguously solve the two-phase simple shear problem. The comparison of the size effects predicted by the Cosserat and *microcurl* models is drawn in section 6.5. In section 6.6, we discuss how our results could be used for an identification of strain gradient plasticity parameters from experimentally observed size effects, like precipitate size effects in two-phase single crystal nickel based superalloys following the work initiated in [Busso 00, Forest 00, Tinga 08]. The solution is finally extended to the case of symmetric double slip. Very similar size effects are evidenced, opening the route to further multislip generalizations of the models.

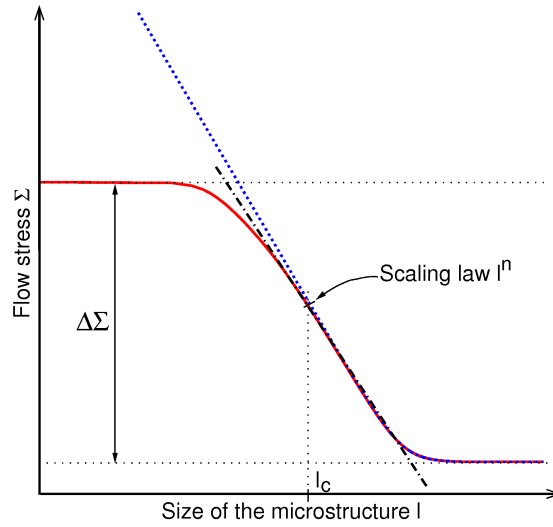


FIG. 6.1. Description of two different profiles of the macroscopic flow stress that can be obtained with the different groups of models.

Notations

First-rank, second-rank and fourth-rank tensors are respectively denoted by $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{A}}$ and $\underline{\underline{\underline{A}}}$. The superscripts $\underline{\underline{A}}^s$ and $\underline{\underline{A}}^a$ will respectively denote the symmetric and skew-symmetric parts of the considered tensor. Both intrinsic and index notations are given at some places for clarity.

The intrinsic definition of the curl operator applied to a tensor T of any rank in any coordinate system q^i is

$$\text{curl } T = \frac{\partial T}{\partial q^i} \times \underline{e}^i \quad (6.8)$$

where \times denotes the vector product. In a Cartesian frame and for a tensor of rank 2, this gives :

$$\text{curl } \underline{\underline{A}} = \frac{\partial \underline{\underline{A}}}{\partial x_l} \times \underline{e}_l = A_{ik,l} \underline{e}_i \otimes (\underline{e}_k \times \underline{e}_l) = \epsilon_{jkl} A_{ik,l} \underline{e}_i \otimes \underline{e}_j \quad (6.9)$$

where ϵ_{ijk} is the permutation tensor. Hence

$$(\text{curl } \underline{\underline{A}})_{ij} = \epsilon_{jkl} A_{ik,l} \quad (6.10)$$

Note that the definition of the curl operator chosen in [Cermelli 01] is the *opposite and transpose* of (6.10).

Finally, brackets $\langle \rangle$ are used to compute average values over a unit cell V :

$$\langle - \rangle = \frac{1}{V} \int_V - dV \quad (6.11)$$

6.2 Cosserat modelling of simple shear in a two-phase laminate

Simple shear of a two-phase laminate was considered first in [Sedláček 00] and then explored in more details in [Forest 03b, Forest 08] from the point of view of the continuum theory of dislocations, on the one hand, and for Cosserat and strain gradient continuum plasticity models, on the second hand. Analytic solutions of the boundary value problem were derived for the stress, strain and plastic slip profiles in the

microstructure. According to the Cosserat model in [Forest 08], a back-stress intrinsically arises when writing the Schmid law from the skew symmetric contribution of the stress and orientation tensors. After recalling the main features of the Cosserat approach, the objective of this section is to derive the main characteristics of the size effect, i.e. maximum stress amplitude, characteristic size of transition zone and scaling law exponent, that were not obtained in the previous references.

6.2.1 The Cosserat model

The Cosserat continuum is described by a displacement field \underline{u} and an independent microrotation field, represented by its axial vector $\underline{\phi}$. Two deformation measures are then defined :

$$\underline{\underline{e}} = \underline{u} \otimes \nabla + \underline{\underline{\epsilon}} \cdot \underline{\phi}, \quad e_{ij} = u_{i,j} + \epsilon_{ijk} \phi_k \quad (6.12)$$

$$\underline{\underline{\kappa}} = \underline{\phi} \otimes \nabla, \quad \kappa_{ij} = \phi_{i,j} \quad (6.13)$$

where $\underline{\underline{e}}$ represents the relative deformation tensor and $\underline{\underline{\kappa}}$ the curvature tensor.

The stress tensors associated with the previous deformation and curvature are the force stress tensor $\underline{\underline{\sigma}}$ and the couple stress tensor $\underline{\underline{m}}$. They have to fulfil the balance of momentum and balance of moment of momentum equations :

$$\text{div } \underline{\underline{\sigma}} = 0, \quad \sigma_{ij,k} = 0 \quad (6.14)$$

$$\text{div } \underline{\underline{m}} + 2 \underline{\underline{\underline{\sigma}}} = 0, \quad m_{ij,j} - \epsilon_{ijk} \sigma_{jk} = 0 \quad (6.15)$$

Volume forces and couples are not considered for simplicity. In (6.15), $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}$ is the axial vector associated with the skew-symmetric part of the stress tensor :

$$\underline{\underline{\underline{\sigma}}} = -\frac{1}{2} \underline{\underline{\epsilon}} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (6.16)$$

Moreover, boundary conditions for the traction and couple stress vectors read :

$$\underline{t} = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}, \quad t_i = \sigma_{ij} n_j \quad (6.17)$$

$$\underline{m} = \underline{\underline{m}} \cdot \underline{n}, \quad m_i = m_{ij} n_j \quad (6.18)$$

where \underline{n} is the unit normal vector to the boundary.

The deformation is decomposed into its elastic and plastic parts :

$$\underline{\underline{e}} = \underline{\underline{e}}^e + \underline{\underline{e}}^p \quad (6.19)$$

Plastic deformation is due to slip processes

$$\underline{\underline{e}}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \underline{l}^{\alpha} \otimes \underline{n}^{\alpha} \quad (6.20)$$

The constitutive equations for isotropic Cosserat elasticity read

$$\underline{\underline{\sigma}} = \lambda(\text{tr} \underline{\underline{e}}^e) \underline{\underline{1}} + 2\mu \underline{\underline{e}}^e + 2\mu_c \underline{\underline{e}}^{ea} \quad (6.21)$$

$$\underline{\underline{m}} = \alpha(\text{tr} \underline{\underline{\kappa}}) \underline{\underline{1}} + 2\beta \underline{\underline{\kappa}}^s + 2\gamma \underline{\underline{\kappa}}^a \quad (6.22)$$

where λ and μ are the classical Lamé constants, and μ_c , α , β and γ are four additional elastic constants. In a 2D situation, as it is the case in this work, the α constant is not relevant and we choose $\beta = \gamma$ for simplicity. The size effects exhibited by the solutions of boundary value problems involving such a model are related to an intrinsic length, typically defined as

$$l_{\omega} = \sqrt{\frac{\beta}{\mu}} \quad (6.23)$$

In the present contribution the constraint $\mu/\mu_c \ll 1$ is enforced. This condition means that the Cosserat microrotation is close to the lattice rotation and

$$\underline{\underline{\kappa}} \approx \text{curl } \omega^e \quad (6.24)$$

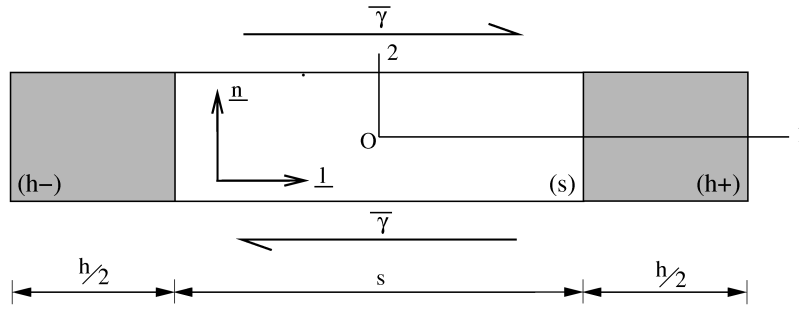


FIG. 6.2. Single slip in a two-phase periodic microstructure under simple shear; the grey phase (h) displays a purely linear elastic behavior whereas the white elastic-plastic phase (s) is characterized by a single slip system $(\underline{n}, \underline{l})$.

It follows that the curvature tensor of the Cosserat theory is an approximation for the dislocation density tensor.

The Schmid criterion is used as the yield criterion; the critical resolved shear stress τ_c is taken constant for the analytic developments of this work (thus no strain-hardening is considered). The generalized resolved shear stress for the slip system α , defined by its slip plane normal vector \underline{n}^α and its slip direction vector \underline{l}^α is computed as

$$\tau^\alpha = \underline{\sigma} : \underline{P}^\alpha = \underline{\sigma}^s : \underline{P}^{\alpha s} + \underline{\sigma}^a : \underline{P}^{\alpha a} = \tau_{sym}^\alpha - x^\alpha \quad (6.25)$$

where $\underline{P}^\alpha = \underline{l}^\alpha \otimes \underline{n}^\alpha$ is the orientation tensor. The first contribution in the generalized resolved shear stress is the classical resolved shear stress τ_{sym}^α . The second contribution is a back-stress x^α which is related to the divergence of couple stress tensor using (6.15) :

$$x^s = -\frac{1}{2}(\text{div } \underline{m}) \cdot (\underline{l}^s \times \underline{n}^s) \quad (6.26)$$

The slip system is activated when the resolved shear stress reaches the threshold τ_c so that the yield criterion reads

$$|\tau^\alpha| = |\tau_{sym}^\alpha - x^\alpha| \leq \tau_c \quad (6.27)$$

It has been shown in [Forest 08] that this back-stress component leads to linear kinematic hardening in single slip under shear.

6.2.2 Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear

We consider a two-phase periodic microstructure under simple shear as studied in [Forest 03b, Forest 08]. This microstructure, described in figure 6.2, is composed of a hard purely elastic phase (h) and a soft elastic-plastic single crystal phase (s). One single slip system is considered in the soft phase (s), with slip direction normal to the interface plane (h)/(s). This periodic unit cell is subjected to mean simple glide $\bar{\gamma}$ in the crystal slip direction of phase (s). We look for a displacement and micro-rotation fields of the form

$$u_1 = \bar{\gamma} x_2, \quad u_2(x_1) = u(x_1), \quad u_3 = 0 \quad (6.28)$$

$$\phi_1 = \phi_2 = 0, \quad \phi_3 = \phi(x_1) \quad (6.29)$$

Consequently, the Cosserat deformation and curvature tensors become

$$\underline{\epsilon} = \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} + \phi(x_1) & 0 \\ u_{,1} - \phi(x_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{\kappa} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \phi_{,1} & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.30)$$

The solution for $\underline{\phi}$ in the elastic phase (h) can be found in [Forest 03b]. The micro-rotation exhibits an hyperbolic profile, given by

$$\phi^{(h+)} = a^h \cosh\left(\omega^h \left(x_1 - \frac{s+h}{2}\right)\right) + d^h \quad \text{for } s/2 < x < (s+h)/2 \quad (6.31)$$

$$\phi^{(h-)} = a^h \cosh\left(\omega^h \left(x_1 + \frac{s+h}{2}\right)\right) + d^h \quad \text{for } -(s+h)/2 < x < -s/2 \quad (6.32)$$

with

$$\omega^{h2} = \frac{2\mu^h \mu_c^h}{\beta^h (\mu^h + \mu_c^h)} \quad (6.33)$$

and a^h and d^h two integration constants. We also have for the deformation tensor

$$e_{21}^{(h+)} = -\frac{\mu^h - \mu_c^h}{\mu^h + \mu_c^h} \phi^{h+} + \bar{\gamma} + d^h \frac{2\mu^h}{\mu^h + \mu_c^h} \quad (6.34)$$

$$e_{21}^{(h-)} = -\frac{\mu^h - \mu_c^h}{\mu^h + \mu_c^h} \phi^{h-} + \bar{\gamma} + d^h \frac{2\mu^h}{\mu^h + \mu_c^h} \quad (6.35)$$

In the plastic phase, the solution is derived here for the yield criterion (6.27). We compute successively

$$\underline{\underline{e}}^p = \gamma \underline{\underline{l}} \otimes \underline{\underline{n}} = \begin{bmatrix} 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \underline{\underline{e}}^e = \begin{bmatrix} 0 & e_{12}^e & 0 \\ e_{21}^e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.36)$$

which imply two non-zero components for the stress tensor

$$\sigma_{12} = \mu^s (e_{12}^e + e_{21}^e) + \mu_c^s (e_{12}^e - e_{21}^e) \quad (6.37)$$

$$\sigma_{21} = \mu^s (e_{12}^e + e_{21}^e) + \mu_c^s (e_{21}^e - e_{12}^e) \quad (6.38)$$

and one non-zero component for the couple-stress tensor

$$m_{31} = 2\beta^s \kappa_{31} \quad (6.39)$$

The balance equations give

$$\sigma_{21,1} = 0 \quad (6.40)$$

$$m_{31,1} - (\sigma_{12} - \sigma_{21}) = 0 \quad (6.41)$$

The resolved shear stress is given by

$$\tau = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{P}} = \sigma_{12} \quad (6.42)$$

Combining (6.40), (6.41), (6.42) and the yield condition (6.27), we end up with the following equation for the micro-rotation axial vector in the (s) phase

$$\phi_{,11}^s = 0 \quad (6.43)$$

The integration of (6.43) leads to a parabolic profile for ϕ^s

$$\phi^s = a^s x_1^2 + d^s \quad (6.44)$$

a^s and d^s being two integration constants.

Determination of the four integration constants a^s , d^s , a^h , d^h is performed after taking interface and periodicity conditions into account :

– Continuity of ϕ for $x_1 = s/2$:

$$a^s \frac{s^2}{4} + d^s = a^h \cosh\left(\omega^h \frac{h}{2}\right) + d^h \quad (6.45)$$

– Continuity of m_{31} for $x_1 = s/2$:

$$\beta^s a^s s = -\beta^h a^h \omega^h \sinh\left(\omega^h \frac{h}{2}\right) \quad (6.46)$$

– Continuity of σ_{21} for $x_1 = s/2$: in the (s) phase,

$$\sigma_{21} = m_{31,1} + \sigma_{12} \quad (6.47)$$

which implies

$$\sigma_{21} = 4\beta^s a^s + \tau_c \quad (6.48)$$

In the (h) phase, it reads

$$\sigma_{21} = \mu^h(\bar{\gamma} + \phi + e_{21}) + \mu_c^h(\bar{\gamma} + \phi - e_{21}) = 2\mu^h(\bar{\gamma} + d^h) \quad (6.49)$$

Combining the two previous equations, we obtain

$$4\beta^s a^s + \tau_c = 2\mu^h(\bar{\gamma} + d^h) \quad (6.50)$$

– Periodicity of u_2 : We use the property $\langle e_{21} \rangle = \langle u_{,1} - \phi \rangle = \langle \phi \rangle$.

In the (h) phase we have :

$$e_{21} = \frac{2\mu_c^h}{\mu^h + \mu_c^h} a^h \cosh\left(\omega^h \left(x_1 - \frac{s+h}{2}\right)\right) + \bar{\gamma} + 2d^h \quad (6.51)$$

In the (s) phase :

$$e_{21} = e_{21}^e = \frac{\tau_c}{2\mu} + \frac{\beta^s a^s (\mu^s + \mu_c^s)}{\mu^s \mu_c^s} \quad (6.52)$$

which give the following relation between the integration constants

$$s \left(\frac{\tau_c}{2\mu} - \frac{\beta^s a^s (\mu^s + \mu_c^s)}{\mu^s \mu_c^s} + d^s \right) + a^s \frac{s^3}{12} + \frac{4\mu_c^h a^h}{\mu^h + \mu_c^h} \sinh\left(\omega^h \frac{h}{2}\right) + h(2d^h + \bar{\gamma}) = 0 \quad (6.53)$$

These equations can be solved analytically. The a^s constants reads

$$a^s = \frac{\bar{\gamma} - \frac{\tau_c}{2\mu^h} \left(f_s + 2(1-f_s) + f_s \frac{\mu^h}{\mu^s} \right)}{-\frac{f_s^3}{6} l^2 - \beta_s \frac{f_s^2}{\beta^h \omega^h} l \coth\left(\omega^h \frac{l(1-f_s)}{2}\right) - \beta^s \left(f_s \frac{\mu^s + \mu_c^s}{\mu^s \mu_c^s} + \frac{4}{\mu^h} \right)} \quad (6.54)$$

In (K.11), f_s represents the fraction of phase (s), $f_s = s/l$. The remaining constants can be determined as functions of a^s :

$$a^h = \frac{-s\beta^s a^s}{\beta^h \omega^h \sinh\left(\omega^h \frac{h}{2}\right)} \quad (6.55)$$

$$d^h = -\frac{4\beta^s a^s - \tau_c}{2\mu^h} - \bar{\gamma} \quad (6.56)$$

$$d^s = -\frac{4\beta^s a^s - \tau_c}{2\mu^h} - \bar{\gamma} - \frac{s\beta^s a^s}{\beta^h \omega^h} \coth\left(\omega^h \frac{h}{2}\right) - a^s \frac{s^2}{4} \quad (6.57)$$

Figure 6.3 illustrates the micro-rotation profile in the two-phase laminate for a fraction of phase (s) equal to 0.3, for three sets of material parameters. The first one is clearly showing the continuity of this variable at the interface while the two others, introducing a mismatch between the two phases, show sharper profiles at the interfaces. The first set of values for material parameters has been chosen in order to clearly show the parabolic profile in the soft phase and the hyperbolic one in the hard phase.

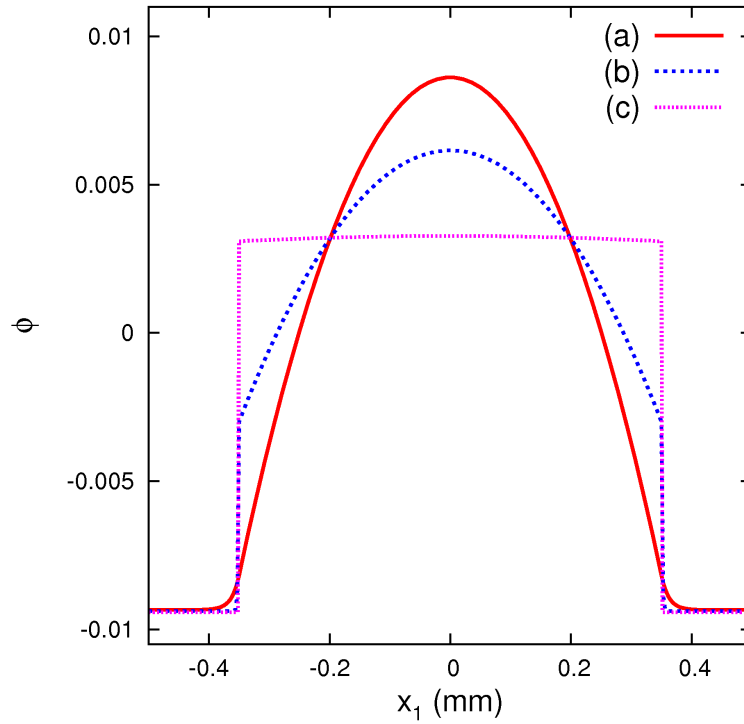


FIG. 6.3. Profiles of lattice rotation ϕ in the two-phase microstructure with the Cosserat model. (a) With a set of material parameters giving clearly visible parabolic and hyperbolic profiles ($\mu = 35000$ MPa, $\mu_c^h = \mu_c^s = 10^6$ MPa, $\beta^h = \beta^s = 10$ MPa.mm² and $\tau_c = 40$ MPa). (b) With a mismatch between the moduli of the two phases $\beta^h = 0.1$ MPa and $\beta^s = 10$ MPa and (c) $\beta^h = 10^{-5}$ MPa and $\beta^s = 10$ leading to sharper profiles at the interfaces.

6.3 Strain gradient plasticity : The “ $curlH^p$ ” model

We consider now a strain gradient plasticity theory including the full curl of plastic deformation tensor $\dot{\underline{H}}^p$. This approach, called here the “ $curlH^p$ ” model, was proposed by [Gurtin 02] and applied to a constrained layer problem and a composite problem in [Bittencourt 03]. The balance and constitutive equations are first recalled and recast into the notations used throughout this work. Then the model is applied for crystal plasticity under single slip ; a specific form of the back–stress arising from this application is given. As it was done with the Cosserat model, the “ $curlH^p$ ” model is finally applied to the two–phase microstructure.

6.3.1 Balance equations

Following [Gurtin 02] we consider a continuum whose power density of internal forces takes the form :

$$p^{(i)} = \underline{\sigma} : \dot{\underline{H}} + \underline{s} : \dot{\underline{H}}^p + \underline{M} : \text{curl } \dot{\underline{H}}^p \quad (6.58)$$

For objectivity reasons, the stress tensor $\underline{\sigma}$ is symmetric whereas the micro–stress tensor \underline{s} and the double–stress tensor \underline{M} are generally not symmetric. The total power of internal forces in a domain V with boundary ∂V is

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(i)} &= \int_V \left(\underline{\sigma} : \dot{\underline{H}} + \underline{s} : \dot{\underline{H}}^p + \underline{M} : \text{curl } \dot{\underline{H}}^p \right) dV \\ &= \int_V \left((\sigma_{ij} \dot{u}_i)_{,j} + (M_{ij} \epsilon_{jkl} \dot{H}_{ik}^p)_{,l} \right) dV + \int_V \left(-\sigma_{ij,j} \dot{u}_i + s_{ij} \dot{H}_{ij}^p - \epsilon_{jkl} M_{ij,l} \dot{H}_{ik}^p \right) dV \\ &= - \int_V \left(\sigma_{ij,j} \dot{u}_i - (\epsilon_{kjl} M_{ik,l} - s_{ij}) \dot{H}_{ij}^p \right) dV + \int_{\partial V} \left(\sigma_{ij} n_j \dot{u}_i + \int_{\partial V} \epsilon_{jkl} M_{ij} n_l \dot{H}_{ik}^p \right) dS \end{aligned} \quad (6.59)$$

The power densities of contact forces are taken as

$$p^{(c)} = \underline{t} \cdot \underline{\dot{u}} + \underline{m} : \dot{\underline{H}}^p, \quad (6.60)$$

where \underline{t} , \underline{m} respectively are surface simple and double tractions. Volume forces are not written for simplicity. The method of virtual power can be used to derive the field equations governing the continuum, based on virtual motions $\underline{\dot{u}}$ and $\dot{\underline{H}}^p$:

$$\text{div } \underline{\sigma} = 0, \quad \sigma_{ij,j} = 0 \quad (6.61)$$

$$\text{curl } \underline{M} + \underline{s} = 0, \quad \epsilon_{jkl} M_{ik,l} + s_{ij} = 0 \quad (6.62)$$

for all regular points of V . Furthermore the following boundary conditions on ∂V are derived :

$$\underline{t} = \underline{\sigma} \cdot \underline{n}, \quad t_i = \sigma_{ij} n_j \quad (6.63)$$

$$\underline{m} = \underline{M} \cdot \underline{\epsilon} \cdot \underline{n}, \quad m_{ij} = M_{ik} \epsilon_{kjl} n_l \quad (6.64)$$

6.3.2 Energy and entropy principles ; Constitutive equations

Under isothermal conditions, the energy balance in its local form states that :

$$\rho \dot{e} = p^{(i)} \quad (6.65)$$

where e is the internal energy density function and ρ mass density. The entropy principle is formulated as :

$$\rho(\dot{e} - \dot{\psi}) \geq 0 \quad (6.66)$$

where ψ is the Helmholtz free energy function. The free energy is taken as a function $\psi(\underline{\xi}^e, \text{curl } \underline{H}^p, \alpha)$ of elastic strain, dislocation density tensor and possible internal hardening variables α . As a result, the Clausius–Duhem inequality becomes :

$$\left(\underline{\sigma} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\xi}^e} \right) : \dot{\underline{\xi}}^e + \left(\underline{M} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \text{curl } \underline{H}^p} \right) : \text{curl } \dot{\underline{H}}^p + (\underline{\sigma} + \underline{s}) : \dot{\underline{H}}^p - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} \dot{\alpha} \geq 0 \quad (6.67)$$

We make the constitutive assumption that the two first contributions are non dissipative :

$$\underline{\sigma} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\xi}^e}, \quad \underline{M} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \text{curl } \underline{H}^p} \quad (6.68)$$

The following dissipation rate remains :

$$D = (\underline{\sigma} + \underline{s}) : \dot{\underline{H}}^p - R \dot{\alpha} \geq 0 \quad (6.69)$$

where $R = \rho \partial \psi / \partial \alpha$ is the thermodynamic force associated with the internal variable. The existence of a dissipation potential $\Omega(\underline{\sigma} + \underline{s}, R)$ is postulated such that

$$\dot{\underline{H}}^p = \frac{\partial \Omega}{\partial (\underline{\sigma} + \underline{s})}, \quad \dot{\alpha} = -\frac{\partial \Omega}{\partial R} \quad (6.70)$$

6.3.3 Application to single slip

For crystal plasticity under single slip conditions, plastic deformation is given by :

$$\dot{\underline{H}}^p = \gamma \underline{P} = \dot{\gamma} \underline{l} \otimes \underline{n} \quad (6.71)$$

where $\underline{P} = \underline{l} \otimes \underline{n}$ is the orientation tensor, \underline{l} is the slip direction and \underline{n} the normal to the slip plane. The dissipation rate becomes :

$$(\tau + \underline{l} \cdot \underline{s} \cdot \underline{n}) \dot{\gamma} - R \dot{\alpha} \geq 0 \quad (6.72)$$

where $\tau = \underline{l} \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{n}$ is the resolved shear stress. In the absence of hardening variable α for simplicity, we are lead to adopt the following generalized Schmid law (for positive $\dot{\gamma}$) :

$$|\tau - x| = \tau_c, \quad \text{with} \quad x = -\underline{l} \cdot \underline{s} \cdot \underline{n} \quad (6.73)$$

meaning that plastic flow occurs when the effective resolved shear stress $|\tau - x|$ reaches the critical resolved shear stress τ_c . A kinematic hardening component x naturally arises in the formulation for which a more specific form is given in the following.

The curl of plastic deformation then is :

$$\text{curl } \underline{H}^p = \underline{l} \otimes (\underline{n} \times \nabla \gamma) \quad (6.74)$$

In the two–dimensional case, it gives :

$$[\text{curl } \underline{H}^p] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \gamma_{,2} n_1 n_2 - \gamma_{,1} n_2^2 \\ 0 & 0 & -\gamma_{,2} n_1^2 + \gamma_{,1} n_1 n_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.75)$$

In the particular case $\underline{l} = \underline{e}_1$, $\underline{n} = \underline{e}_2$, the only non–vanishing component of the dislocation density tensor is

$$(\text{curl } \underline{H}^p)_{13} = -\gamma_{,1} \quad (6.76)$$

Let us consider at this stage the simple model :

$$\rho \psi(\underline{\xi}^e, \text{curl } \underline{H}^p) = \frac{1}{2} \underline{\xi}^e : \underline{\Lambda} : \underline{\xi}^e + \frac{1}{2} A (\text{curl } \underline{H}^p) : (\text{curl } \underline{H}^p) \quad (6.77)$$

so that

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Lambda}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e, \quad \underline{\underline{M}} = A \operatorname{curl} \underline{\underline{H}}^p \quad (6.78)$$

where $\underline{\underline{\Lambda}}$ is the four-rank tensor of elastic moduli, taken isotropic in the following applications, and A a higher order modulus. According to the balance equation (6.62), it follows that

$$\underline{\underline{s}} = -\operatorname{curl} \underline{\underline{M}} = -\operatorname{curl} \operatorname{curl} \underline{\underline{H}}^p \quad (6.79)$$

For single slip, the double curl of plastic deformation is

$$\operatorname{curl} \operatorname{curl} \underline{\underline{H}}^p = \underline{\underline{l}} \otimes ((\underline{\underline{n}} \times \gamma_{,ij} \underline{\underline{e}}_i) \times \underline{\underline{e}}_j) \quad (6.80)$$

In the particular case $\underline{\underline{l}} = \underline{\underline{e}}_1$, $\underline{\underline{n}} = \underline{\underline{e}}_2$, we get :

$$\operatorname{curl} \operatorname{curl} \underline{\underline{H}}^p = \gamma_{,12} \underline{\underline{e}}_1 \otimes \underline{\underline{e}}_1 - \gamma_{,11} \underline{\underline{e}}_1 \otimes \underline{\underline{e}}_2 \quad (6.81)$$

so that the back-stress takes the form :

$$x = A(\operatorname{curl} \operatorname{curl} \underline{\underline{H}}^p) : (\underline{\underline{l}} \otimes \underline{\underline{n}}) = -\gamma_{,11} \quad (6.82)$$

6.3.4 Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear

We consider the same two-phase periodic microstructure under simple shear described in figure 6.2 as we did in section 6.2.2. We now apply the previously described continuum “*curlH^p*” plasticity theory to this case, the main unknowns being the component of displacement u_2 and the component of plastic deformation H_{12}^p :

$$u_1 = \bar{\gamma}x_2, \quad u_2(x_1) = u(x_1), \quad u_3 = 0, \quad H_{12}^p(x_1) \quad (6.83)$$

where

$$\underline{\underline{H}}^p = \gamma \underline{\underline{l}} \otimes \underline{\underline{n}} = \gamma \underline{\underline{e}}_1 \otimes \underline{\underline{e}}_2 \quad (6.84)$$

We compute successively :

$$[\underline{\underline{H}}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} & 0 \\ u_{,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\underline{H}}^p] = \begin{bmatrix} 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\underline{H}}^e] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} - \gamma & 0 \\ u_{,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.85)$$

$$[\operatorname{curl} \underline{\underline{H}}^p] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\gamma_{,1} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.86)$$

The resulting stress tensors are

$$[\underline{\underline{\sigma}}] = \mu \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} - \gamma + u_{,1} & 0 \\ \bar{\gamma} - \gamma + u_{,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\underline{M}}] = A \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\gamma_{,1} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.87)$$

$$[\operatorname{curl} \underline{\underline{M}}] = A \begin{bmatrix} 0 & -\gamma_{,11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.88)$$

The balance equations (6.61) and (6.62) imply that

$$\sigma_{12,1} = 0 \quad \Longrightarrow \quad -\gamma_{,1} + u_{,11} = 0 \quad (6.89)$$

$$s_{12} = -(\operatorname{curl} \underline{\underline{M}})_{12} \quad \Longrightarrow \quad s_{12} = A\gamma_{,11} \quad (6.90)$$

meaning that the shear stress component σ_{12} is constant. The Schmid law is written as

$$\tau - x = \sigma_{12} - x = \tau_c \quad \text{with} \quad x = A(\operatorname{curl} \operatorname{curl} \underline{\underline{H}}^p)_{12} = -A\gamma_{,11} \quad (6.91)$$

The shear stress σ_{12} being constant, the back–stress also turns out to be constant :

$$x_{,1} = \gamma_{,111} = 0 \quad (6.92)$$

The slip profile is therefore parabolic in the plastic phase. In the elastic zone, all the variables $H_{12}^p, M_{13}, \gamma, x$ vanish.

We now enforce continuity requirements at the interface between both phases for the plastic slip, in addition to the continuity of displacement and simple traction vector. The continuity of plastic slip at $x_1 = \pm s/2$ reads :

$$H_{12}^p = \gamma = 0 \quad (6.93)$$

We have now to consider the condition of transmission of the double traction tensor (6.64) at the interface

$$m_{12} = M_{13}\epsilon_{321}n_1 = -M_{13} = A\gamma_{,1} \quad (6.94)$$

i.e., continuity of the double stress component M_{13} . In the elastic phase, the couple stress component M_{13} is not defined since no plastic deformation takes place. If we impose that $M_{13} = m_{12} = 0$ at the interface, it will imply that the first derivative $\gamma_{,1}$ also vanishes. This latter condition requires that the full parabolic function γ should also vanish, so that no plastic strain could develop in the plastic zone. In fact, according to such a plastic strain gradient model, higher order stresses remain indeterminate at the interface between an elastic and a plastic phase. Apparently no alternative condition can help us fully identifying the plastic field. As a result the entire profile remains indeterminate.

This indeterminacy prompts us to introduce, in the next section, a regularized model which is closely related to the “*curlHP*” model but delivers a complete solution of the elastic/plastic laminate boundary value problem. On the other hand, it must be noted that a complete solution can be worked out with the “*curlHP*” model when both phases are elastic–plastic without any indeterminacy (see appendix J).

6.4 Formulation of the *microcurl* model

It has been shown that the “*curlHP*” model cannot be used for the considered elastic–plastic laminate structure. We will now propose an alternative model in order to circumvent the indeterminacy of the considered boundary value problem, thus representing a regularization of the previous model. This model, called here *microcurl*, is based on a micromorphic approach since it falls in the class of generalized continuum models presented in [Forest 09]. The “*curlHP*” model will arise as a special limit case of the present approach. As it was done for the previous models, the theory is first described in terms of balance and constitutive equations. An internal constraint controlling the plastic microdeformation is then introduced. Finally an application to the two–phase laminate is presented.

6.4.1 Balance equations

We introduce a plastic microdeformation variable $\tilde{\chi}^p$ as a second–rank generally non–symmetric tensor. It is distinct from the plastic deformation \tilde{H}^p which is still treated as an internal variable. Then the degrees of freedom of the theory are :

$$DOF = \{\underline{\mathbf{u}}, \tilde{\chi}^p\} \quad (6.95)$$

The components of $\tilde{\chi}^p$ are introduced as independent degrees of freedom. We assume that only the curl part of the gradient of plastic microdeformation plays a role in the power of internal forces ; then in the same way as in (6.58) we have :

$$p^{(i)} = \underline{\boldsymbol{\sigma}} : \dot{\tilde{\mathbf{H}}} + \underline{\boldsymbol{s}} : \dot{\tilde{\chi}}^p + \underline{\boldsymbol{M}} : \text{curl } \dot{\tilde{\chi}}^p \quad (6.96)$$

$$\begin{aligned}
 -\mathcal{P}^{(i)} &= \int_V p^{(i)} dV = \int_V \left(\underline{\boldsymbol{\sigma}} : \dot{\underline{\mathbf{H}}} + \underline{\boldsymbol{s}} : \dot{\underline{\boldsymbol{\chi}}}^p + \underline{\mathbf{M}} : \text{curl } \dot{\underline{\boldsymbol{\chi}}}^p \right) dV \\
 &= \int_V \left((\sigma_{ij} \dot{u}_i)_{,j} + (M_{ij} \epsilon_{jkl} \dot{\chi}_{ik}^p)_{,l} \right) dV + \int_V \left(-\sigma_{ij,j} \dot{u}_i + s_{ij} \dot{\chi}_{ij}^p - \epsilon_{jkl} M_{ij,l} \dot{\chi}_{ik}^p \right) dV \\
 &= - \int_V \sigma_{ij,j} \dot{u}_i dV - \int_V (\epsilon_{kjl} M_{ik,l} - s_{ij}) \dot{\chi}_{ij}^p dV + \int_{\partial V} \sigma_{ij} n_j \dot{u}_i dS + \int_{\partial V} \epsilon_{jkl} M_{ij} n_l \dot{\chi}_{ik}^p dS
 \end{aligned} \tag{6.97}$$

The method of virtual power is used to derive the generalized balance of momentum equations :

$$\text{div } \underline{\boldsymbol{\sigma}} = 0, \quad \text{curl } \underline{\mathbf{M}} + \underline{\boldsymbol{s}} = 0 \tag{6.98}$$

in the absence of volume forces for simplicity. The boundary conditions read :

$$\underline{\boldsymbol{t}} = \underline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}}, \quad \underline{\boldsymbol{m}} = \underline{\mathbf{M}} \cdot \underline{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} \tag{6.99}$$

where $\underline{\boldsymbol{t}}$ and $\underline{\boldsymbol{m}}$ are the simple and double tractions at the boundary.

6.4.2 Constitutive equations

The free energy function is assumed to have the following arguments :

$$\psi \left(\underline{\boldsymbol{\epsilon}}^e, \quad \underline{\boldsymbol{e}}^p := \underline{\mathbf{H}}^p - \underline{\boldsymbol{\chi}}^p, \quad \underline{\boldsymbol{\Gamma}}_\chi := \text{curl } \underline{\boldsymbol{\chi}}^p \right) \tag{6.100}$$

where $\underline{\boldsymbol{e}}^p$ is the relative plastic strain measuring the difference between plastic deformation and the plastic microvariable.

The reduced entropy inequality reads :

$$\left(\underline{\boldsymbol{\sigma}} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\boldsymbol{\epsilon}}^e} \right) : \dot{\underline{\boldsymbol{\epsilon}}}^e - \left(\underline{\boldsymbol{s}} + \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\boldsymbol{e}}^p} \right) : \dot{\underline{\boldsymbol{e}}}^p + \left(\underline{\mathbf{M}} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\boldsymbol{\Gamma}}_\chi} \right) : \dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}}_\chi + (\underline{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\boldsymbol{s}}) : \dot{\underline{\mathbf{H}}}^p \geq 0 \tag{6.101}$$

The following state laws are adopted :

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\boldsymbol{\epsilon}}^e}, \quad \underline{\boldsymbol{s}} = -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\boldsymbol{e}}^p}, \quad \underline{\mathbf{M}} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{\boldsymbol{\Gamma}}_\chi} \tag{6.102}$$

so that the residual intrinsic dissipation rate becomes :

$$D = (\underline{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\boldsymbol{s}}) : \dot{\underline{\mathbf{H}}}^p \geq 0 \tag{6.103}$$

Linear relationships are chosen at a first stage :

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}} = \underline{\boldsymbol{\Lambda}} : \underline{\boldsymbol{\epsilon}}^e, \quad \underline{\boldsymbol{s}} = -H_\chi \underline{\boldsymbol{e}}^p, \quad \underline{\mathbf{M}} = A \underline{\boldsymbol{\Gamma}}_\chi \tag{6.104}$$

where H_χ and A are generalized moduli. The size effects exhibited by the solutions of boundary value problems involving such a model are related to an intrinsic length, typically defined as

$$l_\omega = \sqrt{\frac{A}{H_\chi}} \tag{6.105}$$

The flow rule can be derived from a viscoplastic potential $\Omega(\underline{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\boldsymbol{s}})$, which is a function of the effective stress $\underline{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\boldsymbol{s}}$ that intervenes in the dissipation rate (6.103) :

$$\dot{\underline{\mathbf{H}}}^p = \frac{\partial \Omega}{\partial (\underline{\boldsymbol{\sigma}} + \underline{\boldsymbol{s}})} \tag{6.106}$$

For crystal plasticity,

$$\dot{\underline{\mathbf{H}}}^p = \dot{\gamma} \underline{\mathbf{l}} \otimes \underline{\mathbf{n}} \quad (6.107)$$

The dissipation takes the form :

$$D = (\tau + \underline{\mathbf{s}} : (\underline{\mathbf{l}} \otimes \underline{\mathbf{n}})) \dot{\gamma} \geq 0 \quad (6.108)$$

The generalized Schmid criterion then is

$$|\tau + \underline{\mathbf{s}} : (\underline{\mathbf{l}} \otimes \underline{\mathbf{n}})| = \tau_c \quad (6.109)$$

where τ_c is the critical resolved shear stress. Accordingly, a back-stress component naturally arises in the yield function, in the same way as in the Cosserat and “*curl H^p*” models.

6.4.3 Internal constraint

The modulus H_χ introduces a coupling between macro and microvariables. A high value of the coupling modulus H_χ constrains the plastic microdeformation to be as close as possible to the macroscopic plastic deformation $\underline{\mathbf{H}}^p$. At the limit, the penalty factor H_χ becomes a Lagrange multiplier to enforce the constraint :

$$\underline{\underline{\chi}}^p \equiv \underline{\underline{\mathbf{H}}}^p \quad (6.110)$$

In that case, the power of internal forces (6.96) coincides with (6.58). As a result, the *microcurl* model degenerates into the curl $\underline{\mathbf{H}}^p$ theory of section (6.3). The micromorphic model can therefore be seen as a regularization of the curl $\underline{\mathbf{H}}^p$ theory which displays some indeterminacy at the interface of elastic and elastic-plastic zones. Another way of solving the indeterminacy problem is to track the limit of the elastic domain and to enforce an *a priori* condition of vanishing double traction [Liebe 03] on this surface. With such conditions however, it has been shown that the considered laminate boundary value problem does not admit any non trivial solution.

6.4.4 Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear

Contrary to the curl $\underline{\mathbf{H}}^p$ theory, plastic microdeformation can develop even in the absence of macroscopic plastic strain. In particular, double stresses that may arise in a plastic phase can be transmitted to an elastic phase through the interface.

Let us consider the two-phase microstructure under simple shear of the section 6.3 and perform the same analysis using the *microcurl* model.

We take into account one slip system whose slip direction is along the axis 1, i.e. the shear direction. The resolution of the boundary value problem follows. The unknown of the problems are one component of the displacement and two components of the plastic microdeformation :

$$u_1 = \bar{\gamma} x_2, \quad u_2(x_1), \quad u_3 = 0, \quad \chi_{12}^p(x_1), \quad \chi_{21}^p(x_1) \quad (6.111)$$

$$[\underline{\underline{\mathbf{H}}}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} & 0 \\ u_{,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\underline{\mathbf{H}}}^p] = \begin{bmatrix} 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\underline{\mathbf{H}}}^e] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} - \gamma & 0 \\ u_{2,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.112)$$

$$[\underline{\underline{\chi}}^p] = \begin{bmatrix} 0 & \chi_{12}^p(x_1) & 0 \\ \chi_{21}^p(x_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\text{curl } \underline{\underline{\chi}}^p] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\chi_{12,1}^p \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.113)$$

The resulting stress tensors are

$$[\underline{\underline{\sigma}}] = \mu \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} - \gamma + u_{2,1} & 0 \\ \bar{\gamma} - \gamma + u_{2,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\underline{\mathbf{s}}}] = -H_\chi \begin{bmatrix} 0 & \gamma - \chi_{12}^p & 0 \\ -\chi_{21}^p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.114)$$

$$[\mathbf{M}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -A\chi_{12,1}^p \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\text{curl } \mathbf{M}] = \begin{bmatrix} 0 & -A\chi_{12,11}^p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.115)$$

The balance equation $\mathfrak{s} = -\text{curl } \mathbf{M}$ gives :

$$\chi_{21}^p = 0, \quad H_\chi(\gamma - \chi_{12}^p) = -A\chi_{12,11}^p \quad (6.116)$$

The plasticity criterion stipulates :

$$\sigma_{12} + s_{12} = \sigma_{12} + A\chi_{12,11}^p = \tau_c \quad (6.117)$$

The force stress balance equation requires that σ_{12} be constant. It follows that :

$$\chi_{12,111}^p = 0 \quad (6.118)$$

and the plastic microdeformation profile in the the soft phase, is therefore parabolic :

$$\chi_{12}^{ps} = a^s x_1^2 + c \quad (6.119)$$

where symmetry conditions have already been taken into account ($\chi_{12}^{ps}(-s/2) = \chi_{12}^{ps}(s/2)$) and a^s and c are constants to be determined. The plastic slip can be computed from (6.116).

In the elastic domain, the balance equation (6.116) is still valid with vanishing plastic slip so that the profile of plastic microdeformation is hyperbolic :

$$\chi_{12}^{ph} = a^h \cosh\left(\omega\left(x_1 - \frac{s+h}{2}\right)\right), \quad \text{with } \omega = \sqrt{\frac{H_\chi^h}{A^h}} \quad (6.120)$$

for $s/2 \leq x_1 \leq s/2 + h$. Symmetry conditions have already been taken into account ($\chi_{12}^{ph}(s/2) = \chi_{12}^{ph}(s/2 + h)$).

The identification of the coefficients a^h, a^s, c is possible by means of the interface and periodicity conditions :

- Continuity of χ_{12}^p at $x_1 = s/2$:

$$a^s \left(\frac{s}{2}\right)^2 + c = a^h \cosh\frac{\omega h}{2} \quad (6.121)$$

The periodicity condition for χ_{12}^p at $x_1 = -s/2$ and $x_1 = s/2 + h$ leads to the same equation.

- Continuity of the double traction $m_{12} = -M_{13}$ at $x_1 = s/2$, according to (6.99) :

$$M_{13}^h = -A^h \chi_{12,1}^{ph} = -a^h A^h \omega \sinh\left(x_1 - \frac{s+h}{2}\right) = M_{13}^s = -A^s \chi_{12,1}^{ps} = -2a^s A^s x_1 \quad (6.122)$$

so that,

$$2A^s a^s \frac{s}{2} = -A^h a^h \omega \sinh\frac{\omega h}{2} \quad (6.123)$$

The periodicity condition for M_{13} at $x_1 = -s/2$ and $x_1 = s/2 + h$ leads to the same equation.

- The plasticity condition in the soft phase provides the value of the constant stress component :

$$\sigma_{12} = \tau_c - 2A^s a^s \quad (6.124)$$

- Consequence of periodicity of displacement component u_2 . We start from

$$\sigma_{12} = \mu(\bar{\gamma} - \gamma + u_{2,1}) \implies u_{2,1}^s = \frac{\sigma_{12}}{\mu} + \gamma - \bar{\gamma} \quad (6.125)$$

so that

$$u_{2,1}^s = \frac{\sigma_{12}}{\mu} - \bar{\gamma} + a^s x_1^2 + c - \frac{2A^s a^s}{H_\chi^s} \quad (6.126)$$

in the plastic phase. In the elastic phase, we have :

$$u_{2,1}^h = \frac{\sigma_{12}}{\mu} - \bar{\gamma} \quad (6.127)$$

We compute the average :

$$\int_{-s/2}^{s/2+h} u_{2,1} dx_1 = 0 \quad (6.128)$$

which vanishes for periodicity reasons and gives :

$$\left(\frac{\sigma_{12}}{\mu} - \bar{\gamma} \right) (s+h) + \left(c - \frac{2A^s a^s}{H_\chi^s} \right) s + \frac{2}{3} a^s \left(\frac{s}{2} \right)^3 = 0 \quad (6.129)$$

The resolution gives the following relations :

$$a^s = (s+h) \left(\bar{\gamma} - \frac{\tau_c}{\mu} \right) \left(-\frac{2A^s}{\mu} (s+h) - \left(\left(\frac{s}{2} \right)^2 + \frac{sA^s}{\omega A^h} \coth \frac{\omega h}{2} \right) s - \frac{2A^s s}{H_\chi^s} + \frac{2}{3} \left(\frac{s}{2} \right)^3 \right)^{-1} \quad (6.130)$$

$$a^h = -\frac{1}{\sinh \frac{\omega h}{2}} \frac{sA^s}{\omega A^h} a^s \quad (6.131)$$

$$c = -\left(\left(\frac{s}{2} \right)^2 + \frac{sA^s}{\omega A^h} \coth \frac{\omega h}{2} \right) a^s \quad (6.132)$$

The corresponding profiles of plastic microdeformation are illustrated in figure 6.4 for a set of material parameters for which the parabolic and hyperbolic profiles are clearly visible and for two sets of material parameters introducing a mismatch between the two phases. In the latter cases the microvariable χ^p decreases rapidly in the elastic phase, while still continuous at the interface. When $A^s = A^h$, the slope of the plastic microdeformation is continuous at the interface, which can be seen in figure 6.4(a). In all of these cases the coupling modulus is high enough for the plastic microdeformation to almost coincide with plastic slip in the soft phase.

6.5 Overall size effects predicted by the models

Based on the non-homogeneous distribution of mechanical variables in a two-phase laminate undergoing simple shear as determined in subsections 6.2.2 and 6.4.4 for the Cosserat and the *microcurl* models, we now study more precisely the macroscopic response of the laminate and the macroscopic size effects as predicted by the two models. Due to the similarity of the models, their responses are analysed in parallel. Differences however exist and will be pointed out. This section is organized as follows. First, the macroscopic stress strain curve is calculated for the laminate material. The overall hardening moduli are also determined. The second subsection analyses the predicted size effects. For simplicity, we assume here that the shear moduli of the two phases are equal : $\mu_s = \mu_h = \mu$.

6.5.1 Macroscopic stress-strain curve and kinematic hardening modulus

Deriving the overall properties of a periodic generalized medium requires the development of specific homogenization tools. Such methods were designed in [Forest 01] for heterogeneous Cosserat media and were extended to micromorphic media. The effective material is regarded here as a classical Cauchy material endowed with effective elastic-plastic properties. We derive the expression of the macroscopic Cauchy stress tensor component Σ_{12} defined as the mean value of stress component σ_{12} over the unit cell :

$$\Sigma_{12} = \langle \sigma_{12} \rangle = \frac{1}{l} \int_{-\frac{s+h}{2}}^{\frac{s+h}{2}} \sigma_{12} dx_1 \quad (6.133)$$

where $l = s+h$ is the microstructure unit cell size. Note that for the Cosserat model the stress tensor is non symmetric, but, for the considered boundary value problem, we have $\langle \sigma_{12} \rangle = \langle \sigma_{21} \rangle = \Sigma_{12}$.

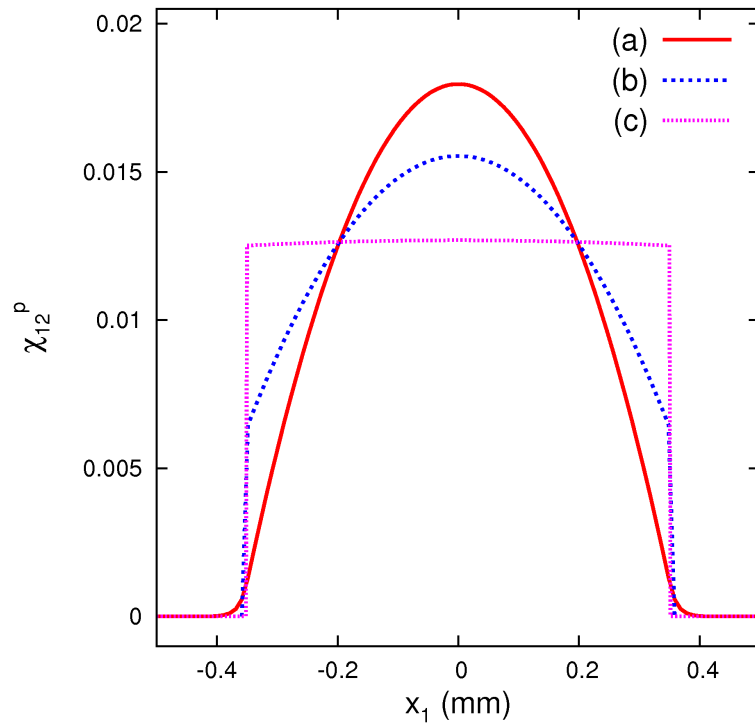


FIG. 6.4. Profiles of plastic microdeformation χ_{12}^p in the two-phase microstructure with the *microcurl* model. (a) With a set of material parameters giving clearly visible parabolic and hyperbolic profiles ($\mu = 35000$ MPa, $H_\chi^h = H_\chi^s = 133829$ MPa, $A^h = A^s = 20$ MPa.mm² and $\tau_c = 40$ MPa). (b) With a mismatch between the moduli of the two phases $A^h = 0.2$ MPa and $A^s = 20$ MPa and (c) $A^h = 2 \cdot 10^{-5}$ MPa and $A^s = 20$ leading to sharper profiles at the interfaces.

Expressions for the local stress σ_{12} were derived in sections 6.2.2 and 6.4.4, that depend on the coefficients a^s , d^s , a^h , d^h . The following form can be adopted for a^s which is valid for both Cosserat and *microcurl* models :

$$a^s = \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}l^2 + \mathcal{C}l \coth\left(\omega \frac{l(1-f_s)}{2}\right) + \mathcal{D}} \quad (6.134)$$

Table 6.1 gives the \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} , \mathcal{D} coefficients entering (6.134) for both models. As a consequence, an equivalence can be found between Cosserat and *microcurl* material parameters, which is valid for the considered boundary value problem :

$$A \equiv 2\beta \quad (6.135)$$

$$H_\chi \equiv 4 \frac{\mu\mu_c}{\mu + \mu_c} \quad (6.136)$$

However, identification of μ_c for a given value of H_χ is not always possible because of the non linear relation (6.136) that allows only H_χ values smaller than

$$\lim_{\mu_c \rightarrow \infty} 4 \frac{\mu\mu_c}{\mu + \mu_c} = 4\mu \quad (6.137)$$

In the following, calculations are made for the *microcurl* model and the corresponding expressions for the Cosserat model can be obtained using the previous equivalence relations.

The macroscopic stress Σ_{12} is computed as a function of the applied shear $\bar{\gamma}$ and mean plastic slip $\langle \gamma \rangle$:

$$\Sigma_{12} = \frac{1}{s+h} \int_{-(s+h)/2}^{(s+h)/2} \sigma_{12} dx_1 = \tau_c - 2A^s a^s = \mu(\bar{\gamma} - \langle \gamma \rangle) \quad (6.138)$$

where (6.124) has been taken into account. The mean plastic slip is computed from (6.116) as follows :

$$\langle \gamma \rangle = \left\langle \chi_{12}^p - \frac{A^s}{H_\chi^s} \chi_{12,11}^p \right\rangle \quad (6.139)$$

$$= \frac{1}{l} \int_{-s/2}^{s/2} \left[a^s \left(x_1^2 - \frac{2A^s}{H_\chi^s} \right) + c \right] dx_1 \quad (6.140)$$

$$= \frac{1}{l} \left[a^s \frac{s^3}{12} + s \left(c - \frac{2A^s}{H_\chi^s} \right) \right] \quad (6.141)$$

Accordingly, alternative expressions of a^s as a function of mean plastic strain are obtained

$$a^s = \frac{\mathcal{A}'}{\mathcal{B}'l^2 + \mathcal{C}'l \coth\left(\omega \frac{l(1-f_s)}{2}\right) + \mathcal{D}'} \quad (6.142)$$

where coefficients \mathcal{A}' , \mathcal{B}' , \mathcal{C}' , \mathcal{D}' are given in table 6.2 for both *microcurl* and Cosserat models.

The macroscopic stress–strain curve is drawn in figure 6.5 from the previous analytical results, for a microstructure size $l = s + h = 10^{-4}$ mm, and material parameters from table 6.3. The obtained response clearly exhibits pure linear kinematic hardening, in contrast to the curve obtained with classical crystal plasticity theory that does not incorporate the higher order back–stress component.

The expression of the kinematic hardening modulus H can be obtained using (6.138) and (6.142) :

$$H = \frac{2A^s}{\mathcal{B}'l^2 + \mathcal{C}'l \coth\left(\omega \frac{l(1-f_s)}{2}\right) + \mathcal{D}'} \quad (6.143)$$

This expression clearly shows that the hardening modulus is size–dependent for both Cosserat and *microcurl* models. At the limit of vanishingly small microstructure size l for fixed intrinsic lengths of the generalized

Model		Cosserat	Microcurl
$a^s(\bar{\gamma})$	\mathcal{A}	$\frac{\tau_c - \bar{\gamma}}{\mu}$	$\frac{\tau_c - \bar{\gamma}}{\mu}$
	\mathcal{B}	$\frac{f_s^3}{\mu}$	$\frac{f_s^3}{\mu}$
	\mathcal{C}	$\frac{6}{f_s^2 \beta_s}$	$\frac{6}{f_s^2 A^s}$
	\mathcal{D}	$\beta_h \omega_h \left(f_s \frac{\mu + \mu_c}{\mu \mu_c} + \frac{4}{\mu} \right)$	$A^h \omega \left(\frac{2f_s}{H_\chi^s} + \frac{2}{\mu} \right)$

TAB. 6.1. Coefficients entering the expression (6.134) of the integration constant a^s as a function of the applied shear $\bar{\gamma}$ for both Cosserat and *microcurl* models.

Model		Cosserat	Microcurl
$a^s s(\langle \gamma \rangle)$	\mathcal{A}'	$-\langle \gamma \rangle$	$-\langle \gamma \rangle$
	\mathcal{B}'	$\frac{f_s^3}{\mu}$	$\frac{f_s^3}{\mu}$
	\mathcal{C}'	$\frac{6}{f_s^2 \beta_s}$	$\frac{6}{f_s^2 A^s}$
	\mathcal{D}'	$\beta_h \omega_h \left(f_s \frac{\mu + \mu_c}{\mu \mu_c} + \frac{4}{\mu} \right)$	$A^h \omega \left(\frac{2f_s}{H_\chi^s} + \frac{2}{\mu} \right)$

TAB. 6.2. Coefficients entering the expression of the integration constant a^s as a function of the mean plastic deformation (6.142) for both Cosserat and *microcurl* models.

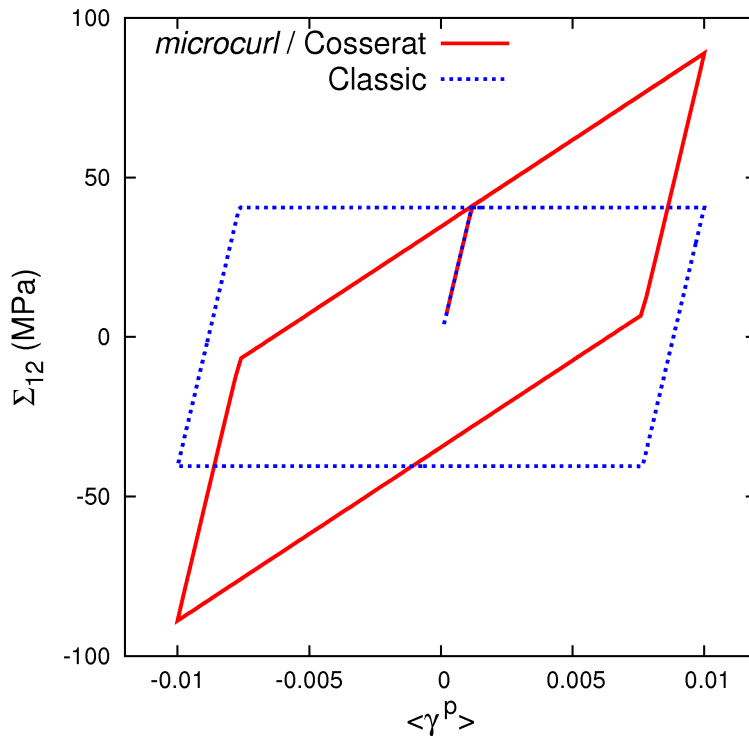


FIG. 6.5. Macroscopic stress–strain curves : illustration of the kinematic hardening produced by the *microcurl* and Cosserat models in comparison with conventional crystal plasticity theory for $l = 10^{-3}$ mm. The considered material parameters are given in table 6.3.

Coefficient			Cosserat	Microcurl	Cosserat	Microcurl
	μ [MPa]	τ_c [MPa]	μ_c [MPa]	H_χ [MPa]	β [MPa.mm ²]	A [MPa.mm ²]
Phase (s)	35000	40	10 ⁶	133829	10 ⁻²	2.10 ⁻²
Phase (h)	35000	-	10 ⁶	133829	10 ⁻⁵	2.10 ⁻⁵

TAB. 6.3. Set of material parameters fulfilling the equivalence conditions (6.135) and (6.136) between the *microcurl* model and the Cosserat model. The intrinsic length scales, defined as $\sqrt{A/H_\chi}$ or $\sqrt{\beta/\mu}$, induced by these parameters are of the order of 10 nm for the elastic phase (h) and 500 nm for the plastic phase (s).

continua and fixed soft phase volume fraction f_s , the following value of the hardening modulus is obtained :

$$\lim_{l \rightarrow 0} H = \frac{1 - f_s}{\frac{f_s^2}{H_\chi^h} + \frac{f_s(1 - f_s)}{H_\chi^s}} \quad (6.144)$$

In the specific case where $H_\chi^h = H_\chi^s = H_\chi$, this limit becomes

$$\lim_{l \rightarrow 0} H = \frac{1 - f_s}{f_s} H_\chi \quad (6.145)$$

for the *microcurl model*, and

$$\lim_{l \rightarrow 0} H = \frac{1 - f_s}{f_s} \frac{4\mu\mu_c}{\mu + \mu_c} \quad (6.146)$$

for the Cosserat model. The expressions (6.145) and (6.146) reveal a major difference between the two models. In the *microcurl model*, the limit hardening modulus depends only on the parameter H_χ whereas in the Cosserat model it depends on both the classical shear modulus μ and the Cosserat coupling modulus μ_c . Moreover, taking into account the condition $\mu \ll \mu_c$ chosen for the Cosserat continuum, we find that the limit hardening modulus saturates in the Cosserat model at

$$\lim_{l \rightarrow 0} H = \frac{1 - f_s}{f_s} 4\mu \quad (6.147)$$

In contrast, the kinematic hardening modulus in the *microcurl model* linearly increases with the coupling modulus H_χ .

The existence of such a back-stress contribution of the dislocation density tensor was anticipated by [Steinmann 96], derived from statistical mechanical arguments by [Groma 03] and simulated for a two-phase microstructure in [Forest 08]. However, the previous analytical expressions of the hardening modulus were not derived in the latter reference.

6.5.2 Size-dependent macroscopic flow stress

The previous results make it possible to study the dependence of the flow stress at $\langle \gamma \rangle = 0.002$ as a function of the microstructure size $l = s + h$ for a given volume fraction f_s of the soft phase. The overall flow stress is obtained by setting $\langle \gamma \rangle = 0.002$ in equation (6.138). Figure 6.6 presents the evolution of the flow stress as a function of l in a log-log diagram for the numerical values of material parameters from table 6.3 and for different values of the coupling modulus $H_\chi^h = H_\chi^s = H_\chi$. All other material parameters are kept fixed. In particular the intrinsic lengths associated with the moduli A^s and A^h (resp. β^s, β^h) are taken independent of l .

For finite values of the coupling modulus, the curves exhibit a typical *tanh*-shape with a saturation for large values of l ($l > 10^{-2}$ mm for the chosen parameters) and for small values of l ($l < 10^{-6}$ mm for the chosen parameters). Between these two asymptotic regimes, there is a transition domain for which significant size dependence is observed. This zone is situated between approximately $l = 10^{-5}$ mm and $l = 10^{-3}$ mm for the chosen parameters. The asymptotic values, the width of the transition zone, and the scaling law in the transition regime are directly related to the material parameters of the Cosserat and *microcurl* models. These main characteristics of the *tanh*-curves are analysed in the two following subsections.

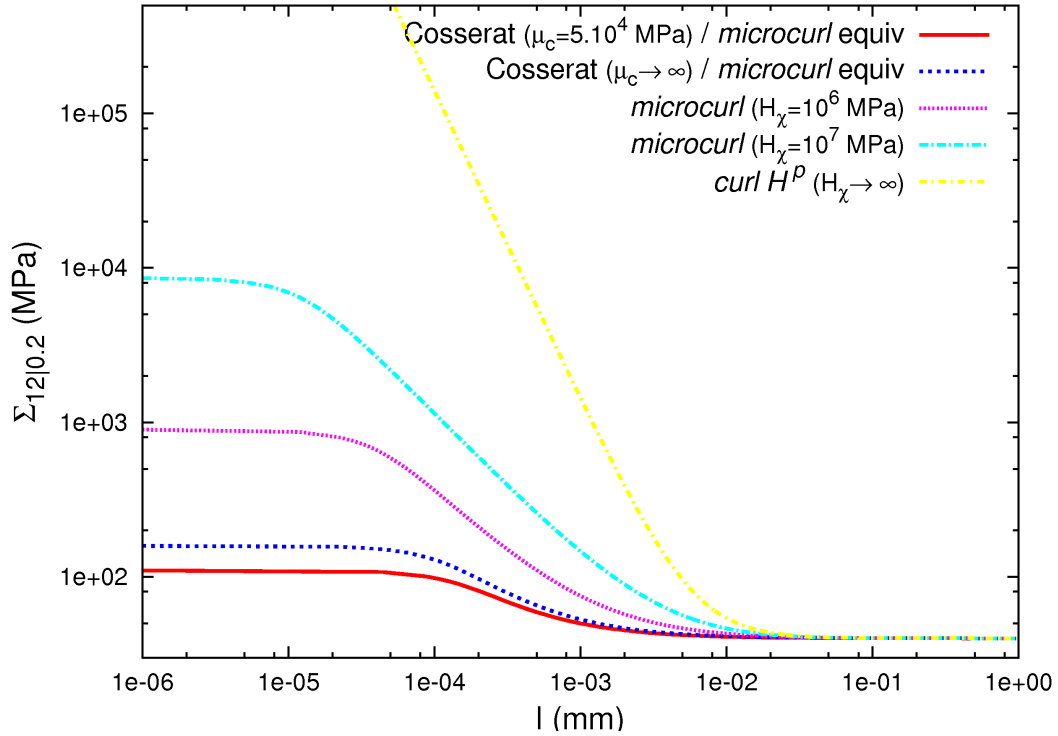


FIG. 6.6. Evolution of the macroscopic flow stress at 0.2% of plastic strain $\Sigma_{12|0.2}$ as a function of the size of the microstructure l . This evolution is plotted for different coupling moduli H_χ and μ_c of the Cosserat and *microcurl* models respectively. The two lower curves are obtained for values of the coupling moduli lying in the range of equivalence between both models (i.e. fulfilling the equivalence condition (6.136)); the dotted curve, obtained with $\mu_c = \infty$, shows the upper limit reached for the Cosserat model. The curves above are obtained for higher values of the coupling modulus H_χ . The other material parameters considered for each phase are given in table 6.3, they fulfill the other equivalence condition (6.135) between the two models.

Asymptotic regimes and maximal size effect predicted by the models

When the size of the elastic–plastic phase becomes large compared to the the intrinsic material length scale introduced in the model, strain gradients are small and the kinematic hardening contribution to stress vanishes. In that case the models reduce to classical crystal plasticity theory. The macroscopic stress at 0.2% plastic strain then tends towards the critical resolved shear stress :

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \Sigma_{12|0.2} = \tau_c \quad (6.148)$$

In contrast, for small microstructure sizes l compared to the intrinsic material length scale l_ω , the strain gradient effects dominate. The maximum size effect generated by the *microcurl* model is obtained for sizes lower than a critical value that depends on the material parameters. For smaller and smaller microstructures, the stress at a given mean plastic strain $\langle \gamma \rangle$ saturates at the value

$$\lim_{l \rightarrow 0} \Sigma_{12}(\langle \gamma \rangle) = \tau_c + \frac{1 - f_s}{f_s} \frac{H_\chi^h H_\chi^s \langle \gamma \rangle}{H_\chi^h (1 - f_s) + H_\chi^s f_s} \quad (6.149)$$

If the two coupling moduli are taken equal, $H_\chi = H_\chi^s = H_\chi^h$, this limit becomes :

$$\lim_{l \rightarrow 0} \Sigma_{12}(\langle \gamma \rangle) = \tau_c + \frac{1 - f_s}{f_s} H_\chi \langle \gamma \rangle \quad (6.150)$$

As a result, there exists a maximal extra–stress $\Delta \Sigma$ induced by strain gradient effects according to the *microcurl* model :

$$\Delta \Sigma = \lim_{l \rightarrow 0} \Sigma_{12}(\langle \gamma \rangle) - \tau_c = \frac{1 - f_s}{f_s} H_\chi \langle \gamma \rangle \quad (6.151)$$

The maximum extra–macroscopic stress reachable by the model depends on the volume fraction f_s , the mean plastic slip $\langle \gamma \rangle$ and the coupling modulus H_χ . Note that, for fixed volume fraction and plastic strain,

$$\lim_{H_\chi \rightarrow \infty} \left(\lim_{l \rightarrow 0} \Sigma_{12} \right) = \infty \quad (6.152)$$

A similar expression for the maximal extra–stress produced by the Cosserat model can be obtained

$$\Delta \Sigma = \frac{1 - f_s}{f_s} \frac{4\mu\mu_c}{\mu + \mu_c} \langle \gamma^p \rangle \quad (6.153)$$

which tends to :

$$\Delta \Sigma^\infty = \frac{1 - f_s}{f_s} 4\mu \langle \gamma^p \rangle \quad (6.154)$$

when μ_c goes to infinity. This expression clearly shows that the maximal size effect predicted by the Cosserat model is bounded, in contrast to the *microcurl* model. Consequently, as noted in the previous subsection about the hardening modulus, the Cosserat and *microcurl* models behave differently in the small size region. The Cosserat maximal size effect is intrinsically limited by the elastic properties for a given fraction of phase (s) whereas in the *microcurl* model the maximal size effect is entirely controlled by the H_χ coefficient.

This different behavior is illustrated by figure 6.7 where the extra–stress at 0.2% plastic strain is plotted as a function of the coupling modulus for the Cosserat and *microcurl* models. As it was shown in section 6.5.1 and in figure 6.6, the considered models are equivalent for sufficiently small values of the coupling modulus, according to the equivalence (6.136).

Transition zone and scaling law

The transition domain that connects the previous asymptotic regimes in the evolution of the overall yield stress with the microstructure size can be characterized by two main quantities : the location $l = l_c$ of the inflexion point and the tangent behavior at that point that we call here the scaling law. These quantities are

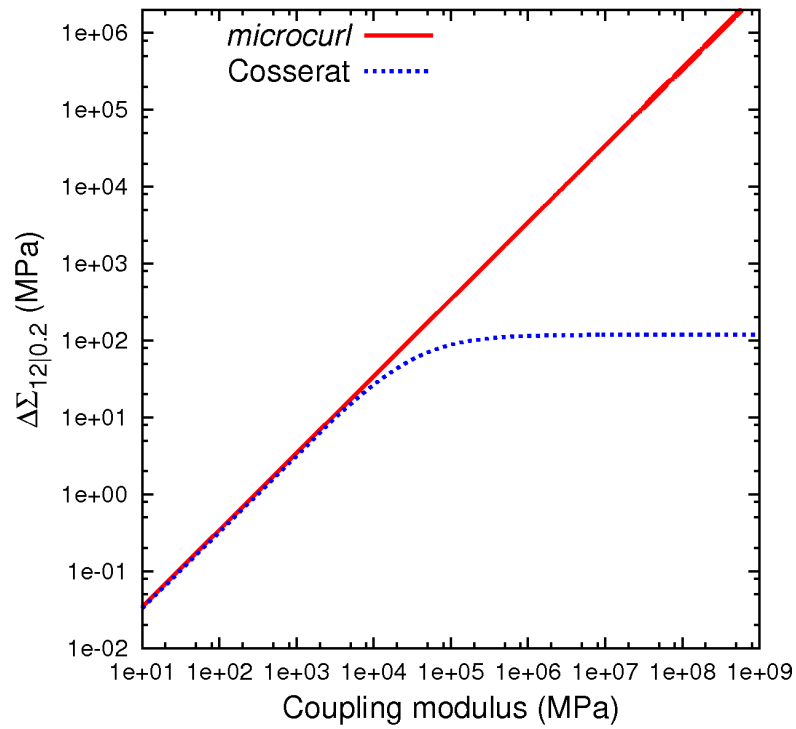


FIG. 6.7. Evolution of the macroscopic yield stress $\Delta\Sigma_{12|0.2}$ at 0.2% plastic strain as a function of the coupling modulus, for the Cosserat and *microcurl* models. The abscissa corresponds to H_χ for the *microcurl* model and to $4\mu_c$ for the Cosserat model (first order Taylor approximation of (6.136) for μ_c near zero). The material parameters considered for each phase are given in table 6.3.

determined here in the log–log diagram like in figure 6.6. Consequently, l_c is defined by the vanishing of the second derivative of $\log \Sigma_{0.2}$ as a function of $\log l$. Moreover, the scaling law is defined by the first derivative of $\log \Sigma_{0.2}(\log l)$ at $l = l_c$. The scaling law is of the form l^n , n to be determined. The values l_c and n are determined numerically. For the material parameters given in table 6.3, we have $l_c \approx 2.24 \cdot 10^{-5}$ mm and the slope at this point is approximately equal to $n = -0.46$.

We present here a numerical analysis of the evolution of l_c as a function of material parameters. For a fixed modulus $A^s = 10^{-1}$ MPa.mm², the microstructure size dependence of the flow stress is plotted for different values of A^h in figure 6.8(a). The other parameters are taken equal to their value in table 6.3. These curves show that the transition zone is translated towards smaller microstructure sizes when A^h is decreased. Similar results hold for the $\beta^{h,s}$ values in the Cosserat model. For a fixed modulus $A^h = 10^{-1}$ MPa.mm², the microstructure size dependence of the flow stress is plotted for different values of A^s in figure 6.8(b). The translation of the transition zone is still observed but to a lesser extent.

From these curves, the characteristic length l_c and the scaling law n can be determined and plotted as functions of A^h , A^s . This is done in figure 6.9. The characteristic length l_c is an increasing function of $A^{s,h}$ which saturates at large values of $A^{s,h}$. For the chosen parameters, the scaling power law remains close to $n = -0.5$.

The location of the inflection point turns out to be mainly controlled by the moduli of the hard phase (h) while the scaling law is affected by the ratio between the moduli of the hard phase and the soft phase.

The characteristic length and scaling power also depend on the value of the coupling modulus. Figure 6.10 shows that the coupling modulus has a major effect on the scaling law for both models. In contrast, they have a limited effect on the size–dependent region location since they are generally taken around an equivalent value of 10^6 MPa. It turns out that, for the chosen material parameters, the Cosserat model provides power law values that saturate close to $n = -0.5$ in the highly constrained case. In contrast, the asymptotic power law for the *microcurl* model is close to $n = -2$. Indeed, when the coupling modulus H_χ tends to infinity, we can derive a simplified expression for a^s . In (6.142), the \mathcal{C}' and \mathcal{D}' coefficients tend to zero and the coth tends to 1. We end up to the following expression for the flow stress in that specific case :

$$\lim_{H_\chi \rightarrow \infty} \Sigma_{12} = \tau_c + \frac{12A^s \langle \gamma \rangle}{f_s^3 l^2} \quad (6.155)$$

This expression indicates a $n = -2$ scaling law. Figure 6.11 presents the effect of the volume fraction f_s on the scaling law for the constrained Cosserat and *microcurl* models. According to the *microcurl* model f_s has no effect on the asymptotic power law $n = -2$. For the Cosserat model the effect of volume fraction is strong and dominates when the coupling modulus μ_c is high. The range of reachable scaling laws lies between 0 and -1 . The -1 scaling law is obtained when the fraction of soft phase tends to 0. In other words, when the microstructure is mainly constituted by hard obstacles. In this case, the Cosserat model deliver an Orowan type scaling law. An approximation of the flow stress can be derived when f_s tends to 0. In the transition zone we can approximate the coth term in (6.142) by 1. Consequently,

$$\lim_{f_s \rightarrow 0} \Sigma_{12} = \tau_c + \beta^s \frac{\mathcal{A}'}{\mathcal{C}'l + \mathcal{D}'} \quad (6.156)$$

This expression can be simplified considering that μ_c goes to ∞ :

$$\lim_{f_s \rightarrow 0} \Sigma_{12} = \tau_c + \frac{\langle \gamma \rangle}{\frac{f_s^2 l}{\sqrt{2} l_\omega} + \frac{f_s}{4\mu}} \quad (6.157)$$

where l_ω is the characteristic length of the (h) phase defined by (6.23). Equation (6.157) demonstrates the $n = -1$ scaling law delivered by the Cosserat model when f_s tends to 0.

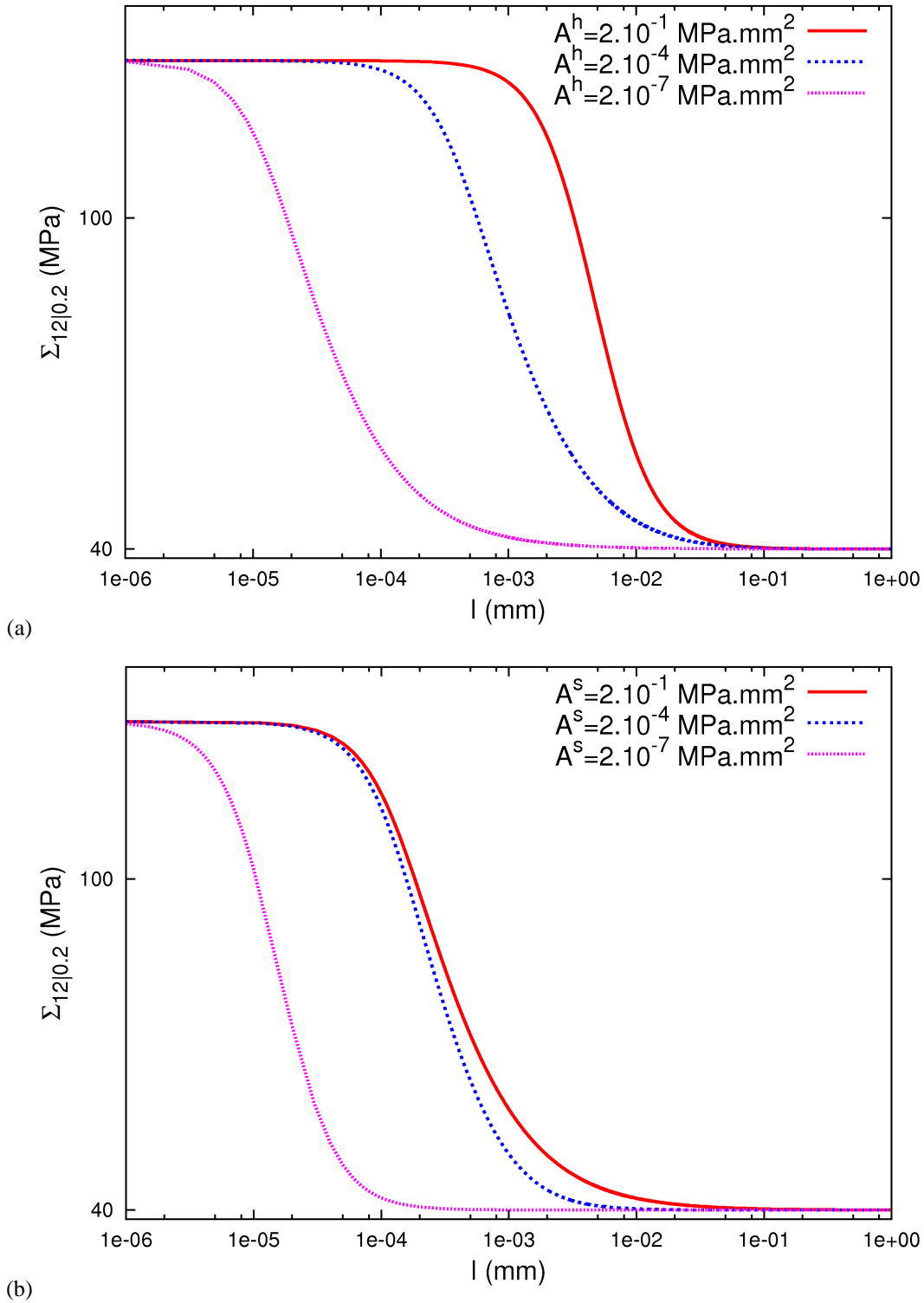


FIG. 6.8. Effect of the moduli A^h , A^s on the evolution of the macroscopic flow stress at 0.2% plastic strain $\Sigma_{12|0.2}$. This evolution is plotted as a function of the size of the microstructure l for : (a) different values of A^h (or β^h) for fixed value $A^s = 10^{-1}$ MPa.mm²; (b) different values of A^s (or β^s) for fixed value $A^h = 10^{-1}$ MPa.mm². The other material parameters are given in table 6.3.

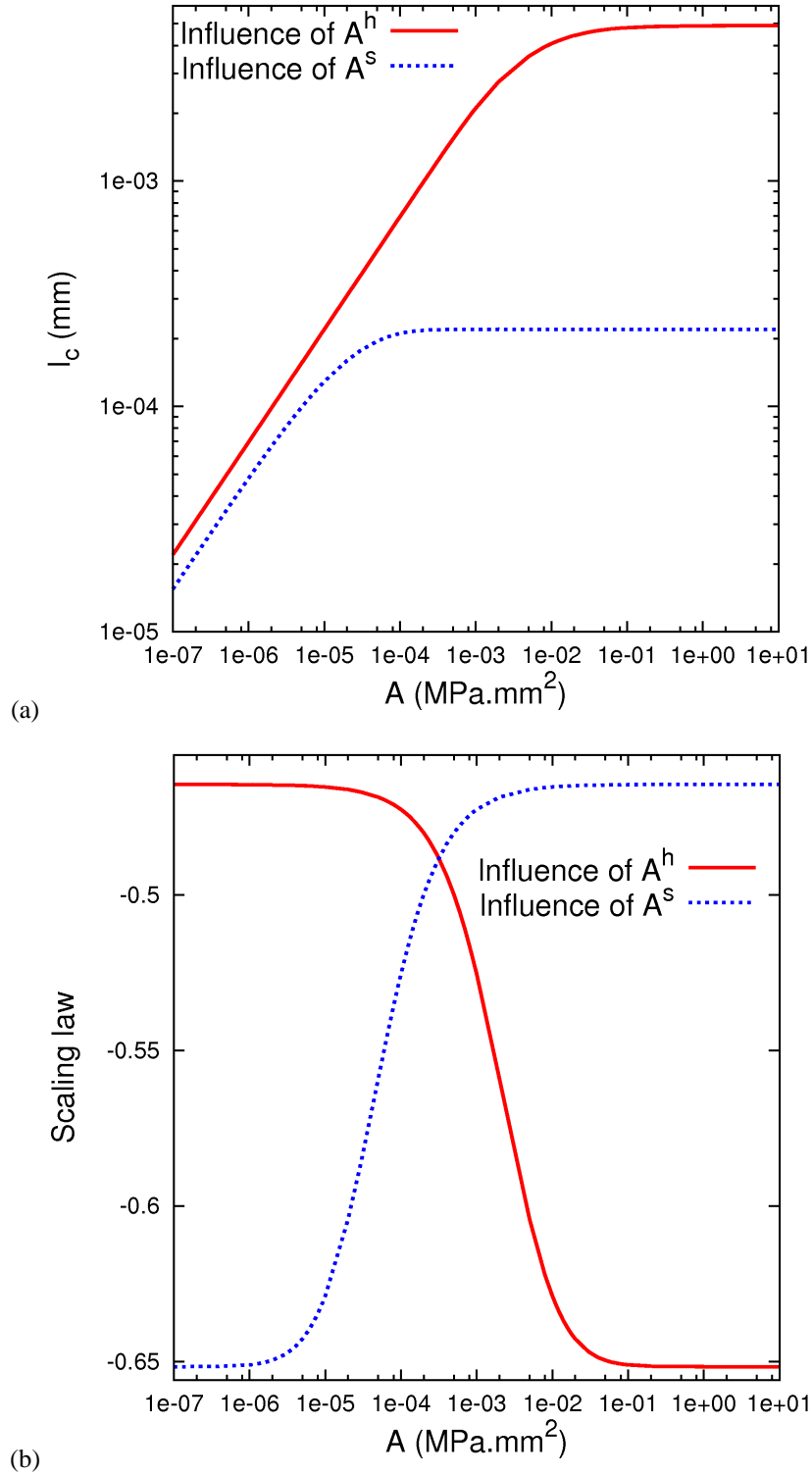


FIG. 6.9. Effect of the moduli A^h , A^s , β^h and β^s on : (a) the location l_c of the size-dependent region, (b) the scaling power law n . These evolutions are plotted as functions of one higher order modulus while the other one is fixed.

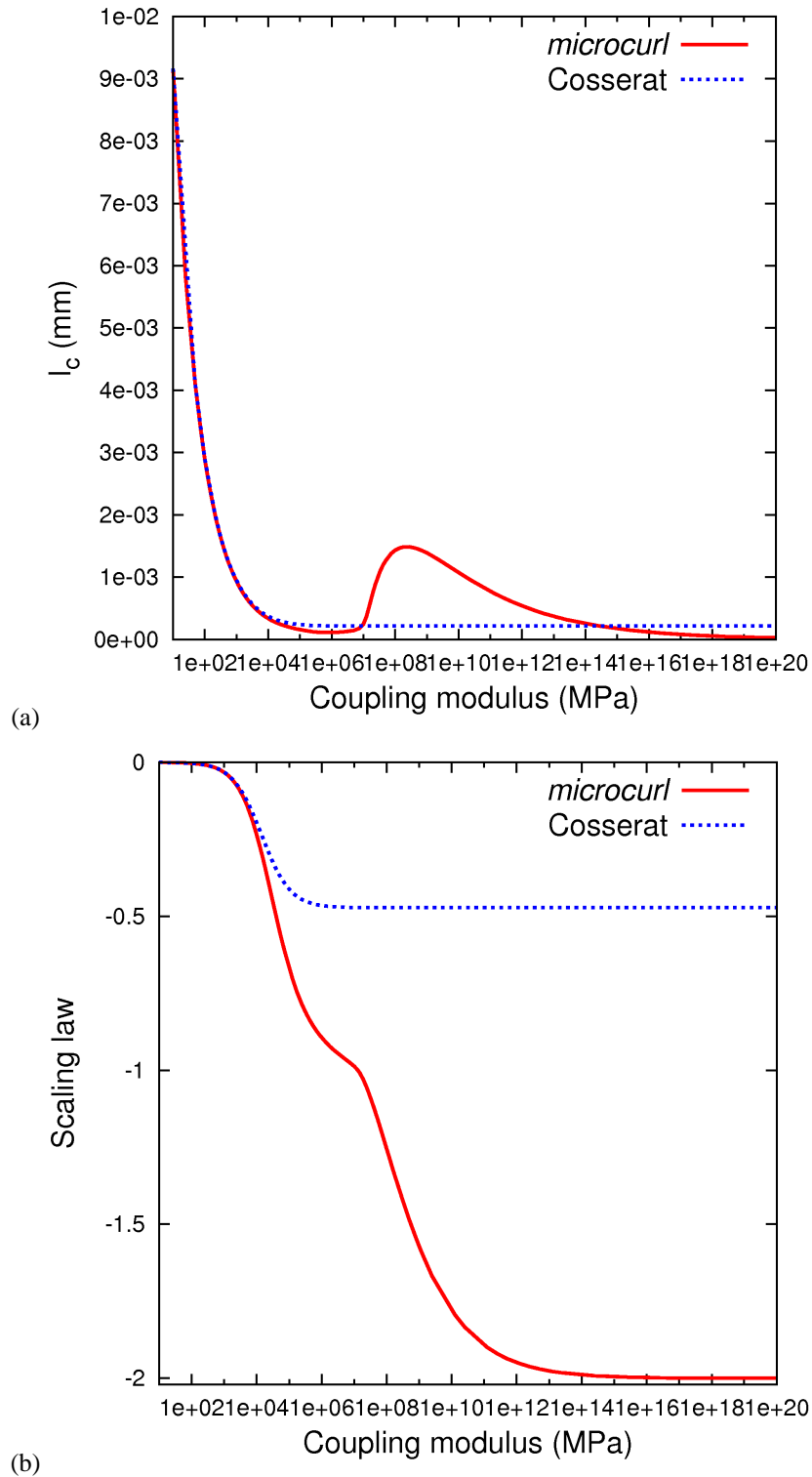


FIG. 6.10. Effect of the coupling moduli on : (a) the location l_c the size-dependence zone and (b) the scaling power law n . The abscissa corresponds to H_χ for the *microcurl* model and to $4\mu_c$ for the Cosserat model (first order Taylor approximation of (6.136) for μ_c near zero).

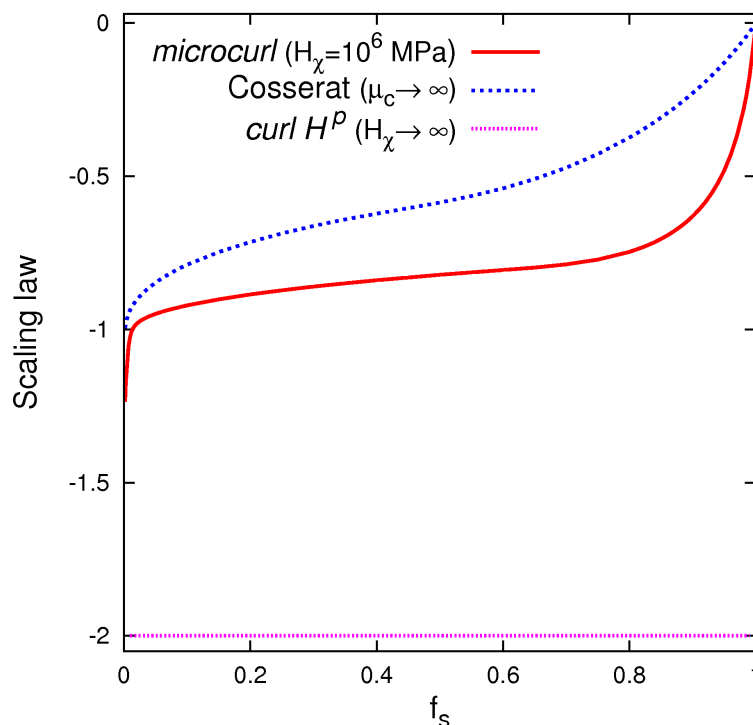


FIG. 6.11. Effect of the volume fraction f_s on the scaling law reachable by each model (obtained for high values of the coupling moduli).

6.6 Discussion

6.6.1 Identification of material parameters

The main features of the scaling behavior of Cosserat, micromorphic and strain gradient plasticity models have been quantitatively described in the special case of a two-phase laminate microstructure. Explicit formula or numerical estimates of the extra-hardening associated with plastic strain gradients, asymptotic behavior and scaling laws have been provided in this specific case. The parametric study has shown that a large range of size effects can be explored depending on the values of material parameters introduced by the higher order theories. The previous analyses therefore set guidelines for the identification of such material parameters to describe specific size effects. The targeted phenomena are precipitate hardening, on the one hand, and grain size effects, on the other hand. This will require generalization of the previous laminate microstructure, probably based on intensive computational analysis. However, simple analytical situations like the one studied in this work can help estimating the order of magnitude of such parameters, as proposed for example in [Hunter 08].

Depending on the amplitude and the range of observed size effects, the Cosserat and *microcurl* theories are candidate models for modeling the size-dependent response of elastic-(visco)plastic crystalline solids. The Cosserat has the advantage that it requires the introduction of 3 additional degrees of freedom in contrast to the 9 of the micromorphic approach. However, it has been shown that the Cosserat crystal plasticity model may not be sufficient to account for large amplitude extra-hardening over a broad range of length scales.

The existence of transition domain with scalable size-dependent behavior, as illustrated in figure 6.10, is of great interest since it can be calibrated with respect to experimental results that are available for a limited range of length scales. The existence of a saturated asymptotic regime below the experimentally

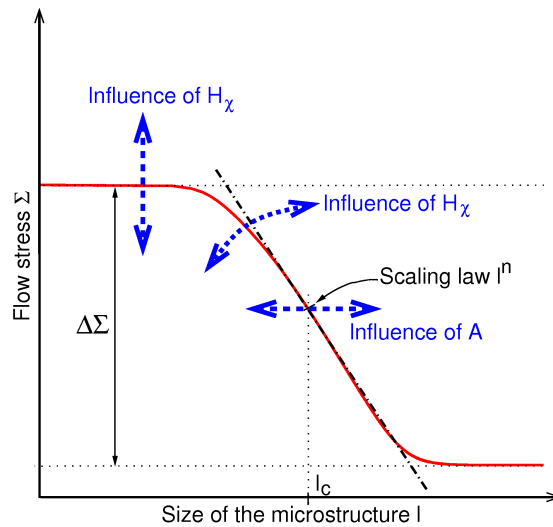


FIG. 6.12. Influence of each material parameters on the size effect predicted by the considered model.

investigated length scales, i.e., below l_c , can be seen as the limit of the continuum approach. That is why predictive extrapolations of the generalized continuum model should not be expected.

For the transmission of higher order tractions at the interface between elastic and elastic-plastic phases, it has been necessary to endow both phases with higher order moduli like A^s and A^s . The absence of such transmission rules leads to an indeterminacy in the strict strain gradient plasticity theory. These higher order moduli can be seen as representing intrinsically non local effects that work at different length scales. Non local elasticity effects are expected at very low length scales of the order of 10 nm. In contrast, non local microplasticity effects, associated with a sufficient number of dislocations for a continuum crystal plasticity theory to apply, occur at scales ranging typically from 0.3 μm to 10 μm in f.c.c. metals. This explains the selected values of material parameters for the examples provided in the previous sections (see table 6.3).

As a formal exercise and with a view to setting guidelines for the identification of a more realistic model in the future, we propose in this section to identify the parameters $A^{h,s}$, H_χ etc., of the *microcurl* (and Cosserat) models from experimental results for a material which shares some common features with the ideal laminate microstructures. Such experimental results are available for the precipitate size effect in single crystal nickel base superalloys [Duhl 87]. the microstructure consists of a quasi-periodic distribution of cuboidal γ' precipitates coherently embedded in the γ matrix. In a certain range of temperature and strain, the precipitates can be regarded as elastic whereas the matrix displays a complex elastic-viscoplastic behavior. The narrow channels of γ phase are reminiscent of the ideal laminate microstructure studied in this work.

The precipitate size effect in such a quasi-periodic microstructure has been modeled by means of periodic homogenization based on a cubic unit cell, and using generalized continuum models by [Busso 00, Forest 00] and more recently by [Tinga 08]. In the two first references, the size effect is entirely carried by the strain gradient approach, whereas the strain gradient plasticity model is used in the latter reference, in addition to an explicit Orowan law introduced in the constitutive model. In the context of the simple laminate model considered here, we will try to identify the higher order material parameters so as to describe the experimental precipitate hardening effect without including Orowan's law in the model. This formal identification aims at discriminating the ability of Cosserat and *microcurl* models to account for significant amplitude of extra-hardening. The identification remains indicative since we consider only single slip, which is not the case in the real superalloy. The slip geometry is also different from the reality, even though the soft phase of the laminate model mimics a γ -channel. In addition to that, we will convert size effects observed in tension to the corresponding τ/γ shear behaviour for the purpose of calibration. Figure 6.13 shows that the *microcurl* model is able to simulate an Orowan-like scaling law. Moreover,

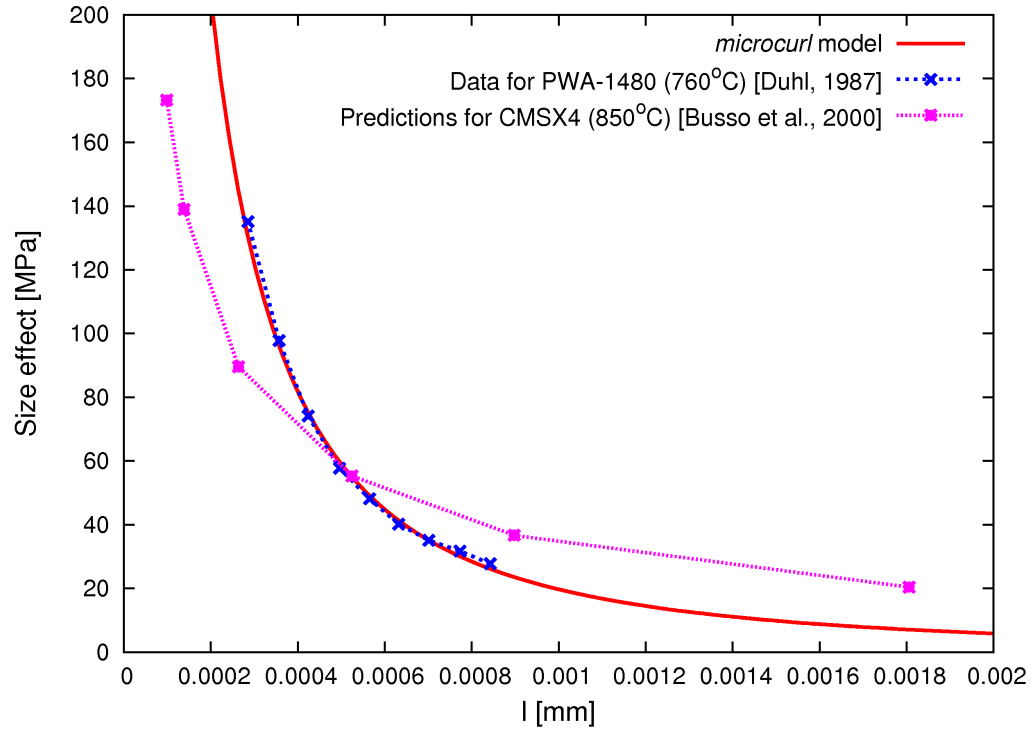


FIG. 6.13. Comparison between experimental data obtained with a two-phase material (γ matrix phase elastic-viscoplastic and γ' precipitates which can be considered elastic) from [Sims 87], the prediction of the model in [Busso 00] and the proposed identification for the *microcurl* model. The size-effect is plotted as a function of the precipitate size. Volume fraction of precipitates $f_h = 68\%$, critical resolved shear stress of the matrix phase $\tau_c = 59$ MPa, $\mu = 100000$ MPa, $H_\chi^h = H_\chi^s = 7.10^5$ MPa, $A^h = 3.5.10^{-6}$ MPa and $A^s = 4.10^{-5}$ MPa. This figure shows that the *microcurl* model is able to simulate an Orowan-like scaling law ($l_c \approx 200nm$ and $n \approx -1$).

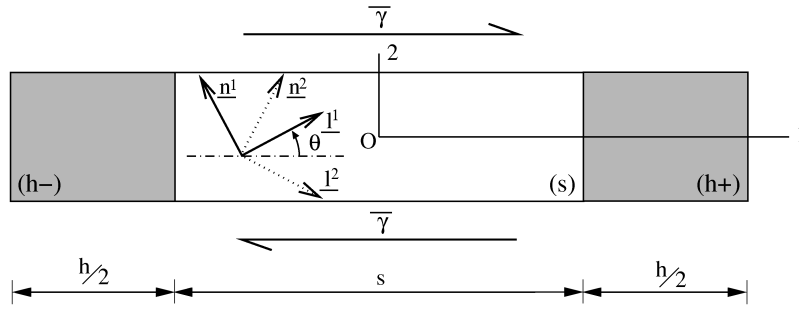


FIG. 6.14. Double slip in a two-phase periodic laminate microstructure under simple shear.

the characteristic length identified, $l_c = 200nm$, is approximately the matrix channels width in Ni-base superalloys.

6.6.2 Extension to double slip

The Cosserat and *microcurl* models have essential common features with the statistical model of dislocations developed for single slip by [Groma 03] and compared to discrete dislocation dynamics simulations in [Yefimov 04]. The strain gradient plasticity model used in the two latter references has been extended for multiple slip situations according to purely phenomenological arguments in [Yefimov 05]. In the same way, the Cosserat and *microcurl* models possess a straightforward phenomenological generalization for multiple slip, without introducing any additional ingredients nor parameters, but without warranty that it is consistent with the actual multislip behavior of crystals. This formulation is illustrated for symmetric double slip in the laminate microstructure under shear loading conditions. Two slip systems, symmetric with respect to direction 1 and inclined at an angle $\pm\theta$ with respect to direction 1 are taken into account in the soft phase (s), as shown in figure 6.14. The main unknowns remain the same as in section 6.4.4, equation (6.111). Following the same procedure as in the case of single slip, we have :

$$[\underline{\tilde{H}}] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} & 0 \\ u_{2,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\tilde{H}}^p] = \begin{bmatrix} 0 & H_{12}^p & 0 \\ H_{21}^p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\tilde{H}}^e] = \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} - H_{12}^p & 0 \\ u_{2,1} - H_{21}^p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.158)$$

As the two slip systems are symmetric, the associated plastic slips are equal $\gamma^1 = \gamma^2 = \gamma$. Then the non-zero components of the plastic deformation are :

$$H_{12}^p = 2\gamma \cos^2 \theta, \quad H_{21}^p = -2\gamma \sin^2 \theta \quad (6.159)$$

The plastic microdeformation tensor takes the same form as in section 6.4.4. However, in contrast to what we obtained in the case of single slip, we expect the component χ_{21}^p of the plastic microdeformation not to vanish. The matrix expressions (6.113) are still valid in the double slip context. In particular, there is still one single non-zero component in the curl of plastic microdeformation. The resulting stress tensors are :

$$[\underline{\tilde{\sigma}}] = \mu \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} - H_{12}^p - H_{21}^p + u_{2,1} & 0 \\ \bar{\gamma} - H_{12}^p - H_{21}^p + u_{2,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.160)$$

$$[\underline{\tilde{s}}] = -H_\chi \begin{bmatrix} 0 & H_{12}^p - \chi_{12}^p & 0 \\ H_{21}^p - \chi_{21}^p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.161)$$

$$[\underline{\tilde{M}}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -A\chi_{12,1}^p \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [\text{curl } \underline{\tilde{M}}] = \begin{bmatrix} 0 & -A\chi_{12,11}^p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.162)$$

As a consequence, the double stress has only one non-vanishing component related to χ_{12}^p as in the case of single slip. Therefore the balance equation $\tilde{\mathbf{s}} = -\text{curl } \tilde{\mathbf{M}}$ gives :

$$\begin{cases} -H_\chi (H_{12}^p - \chi_{12}^p) = A\chi_{12,11}^p \\ H_{21}^p - \chi_{21}^p = 0 \end{cases} \quad (6.163)$$

It turns out that the component χ_{21}^p does not contribute to the dislocation density tensor. It is bound to coincide with the plastic deformation H_{21}^p , according to the second balance equation. This will result in the fact that no contribution of the component χ_{21}^p will appear in the back-stress, as it is shown by the plasticity criterion $|\tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \tilde{\mathbf{P}}^\alpha + \tilde{\mathbf{s}} : \tilde{\mathbf{P}}^\alpha| = \tau_c$:

$$|\sigma_{12} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + s_{12} \cos^2 \theta| = |\sigma_{12} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + A\chi_{12,11}^p \cos^2 \theta| = \tau_c \quad (6.164)$$

In the same way as in the case of single slip, the profile of χ_{12}^p is parabolic in the plastic phase. It is computed as in (6.119) which involves integration constants that can be identified as in section 6.4.4 based on interface conditions. The plastic slip is also parabolic :

$$\gamma = \frac{1}{2 \cos^2 \theta} \left(\chi_{12}^{ps} - \frac{A^s}{H_\chi^s} \chi_{12,11}^{ps} \right) \quad (6.165)$$

Since we have $\chi_{21}^{ps} = -2\gamma \sin^2 \theta$, the profile of χ_{21}^p is parabolic in the plastic phase as well.

In the elastic phase the balance equations (6.163) are still valid with vanishing plastic slip. Then we have :

$$\begin{cases} \chi_{12}^{ph} = \frac{A^h}{H_\chi^h} \chi_{12,11}^p \\ \chi_{21}^{ph} = 0 \end{cases} \quad (6.166)$$

Therefore the component χ_{12}^p has a hyperbolic profile in the hard phase and can be computed as in (6.120) ; finally its profile over the whole structure is similar to what we show in the case of single slip. On the other hand, the component χ_{21}^p vanishes in the elastic domain and it turns out that it cannot be continuous at the interface as soon as $\gamma \neq 0$. Accordingly, the *microcurl* model only ensures the continuity of the component χ_{12}^p which contributes to the dislocation density tensor. The complete analytical solution considering χ_{21}^p discontinuous at the interface between the two phases has been computed. The expression of the integration constants as functions of $\bar{\gamma}$ is given by

$$a^s = \frac{\frac{\tau_c}{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta} - \bar{\gamma}}{(1 - \tan^2 \theta) \left[\frac{l^2 f_s^3}{6} + \frac{l f_s^2 A^s \coth(\frac{\omega h}{2})}{A^h \omega} + \frac{2 f_s A^s}{H_\chi^s} + \frac{2 f_s A^s}{\mu(1 - \tan^2 \theta)^2} \right]} \quad (6.167)$$

$$a^h = -\frac{a^s A^s s}{A^h \omega \sinh(\frac{\omega h}{2})} \quad (6.168)$$

$$c = -a^s \left[\frac{s^2}{4} + \frac{A^s s \coth(\frac{\omega h}{2})}{A^h \omega} \right] \quad (6.169)$$

Figure 6.15 illustrates the continuity of χ_{12}^p and the discontinuity of χ_{21}^p at the interface. The problem of interface conditions in strain gradient plasticity has already been pointed out, for example in [Aifantis 05, Gurtin 05]. In these works, jumps conditions at interfaces are discussed. Here, no jump condition is imposed on χ_{21}^p at the interface. In order to illustrate size effects obtained in double symmetric slip, the integration constant a^s has been computed as a function of $\langle H_{12}^p \rangle$. It turns out that we find the same expression than in single slip. a^s is therefore still given by (6.142). It is also interesting to note that the Cosserat model give a similar expression for a^s as a function of $\langle e_{12}^p \rangle$. The complete Cosserat solution in double slip is given in appendix K. The macroscopic stress Σ_{12} can be expressed by

$$\Sigma_{12} = \frac{\tau_c}{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta} - \frac{2A^s a^s}{1 - \tan^2 \theta} \quad (6.170)$$

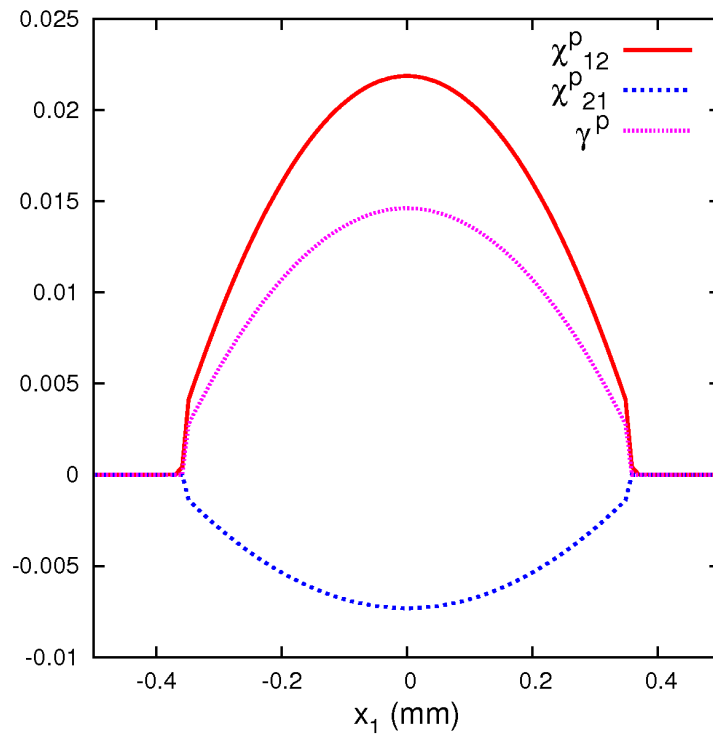


FIG. 6.15. Profiles of plastic microdeformations χ_{12}^p and χ_{21}^p and of the plastic slip γ^p in the two-phase microstructure with the *microcurl* model. The material parameters used in this case are : $\mu = 35000$ MPa, $H_\chi^h = H_\chi^s = 133829$ MPa, $A^h = 2$. MPa.mm², $A^s = 20$ MPa.mm² and $\tau_c = 40$ MPa. This figure shows that in the case of double slip, χ_{12}^p is continuous while χ_{21}^p is discontinuous at the interface.

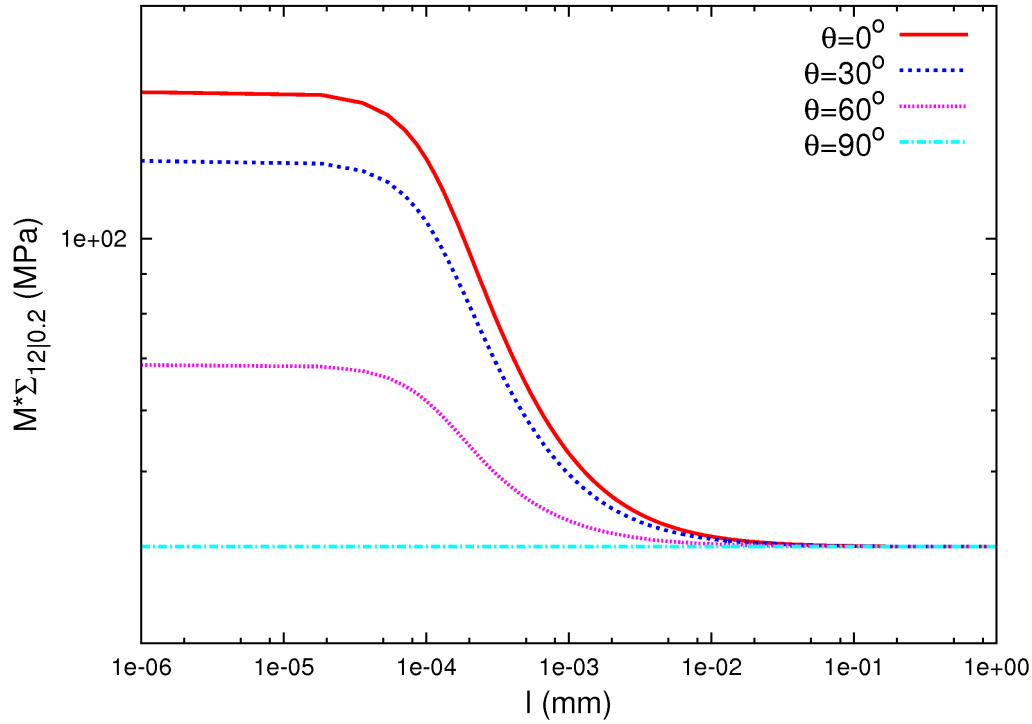


FIG. 6.16. Evolution of the macroscopic flow stress $\Sigma_{12|0.2}$ times the Schmid factor $M = \cos(\theta)^2 - \sin(\theta)^2$ at $\langle H_{12}^p \rangle = 0.2\%$ as a function of θ . The material parameters considered for each phase are given in table 6.3.

Figure 6.16 presents size effects in double symmetric slip for various angles θ between 0° and 90° . The case θ equal to 45° does not activate plasticity. The specific case θ equal to 90° shows no hardening effects. Indeed, in that situation, the curl operator does not regularize χ_{12}^p . In order to sum up the influence of θ on size effects, the maximal size effect predicted by the models is computed. For large microstructures sizes compared to the characteristic length, the macroscopic stress writes :

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \Sigma_{12} = \frac{\tau_c}{\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha} \quad (6.171)$$

In the other hand, for small microstructures sizes

$$\lim_{l \rightarrow 0} \Sigma_{12} = \frac{\tau_c}{\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha} + \frac{1 - f_s}{f_s} \frac{1}{1 - \tan^2 \theta} H_\chi \langle \gamma \rangle \quad (6.172)$$

Consequently, the maximal size effect reads

$$\Delta \Sigma = \frac{1 - f_s}{f_s} \frac{1}{1 - \tan^2 \theta} H_\chi \langle \gamma \rangle \quad (6.173)$$

The maximal size effect as a function of θ predicted by the models is presented by the figure 6.17.

6.6.3 Application to γ/γ' microstructures

This section presents simulations on γ/γ' microstructure performed with the Cosserat model. Simulations are performed in 2D. Two types of loading have been studied, the behavior under shear and tensile loading.

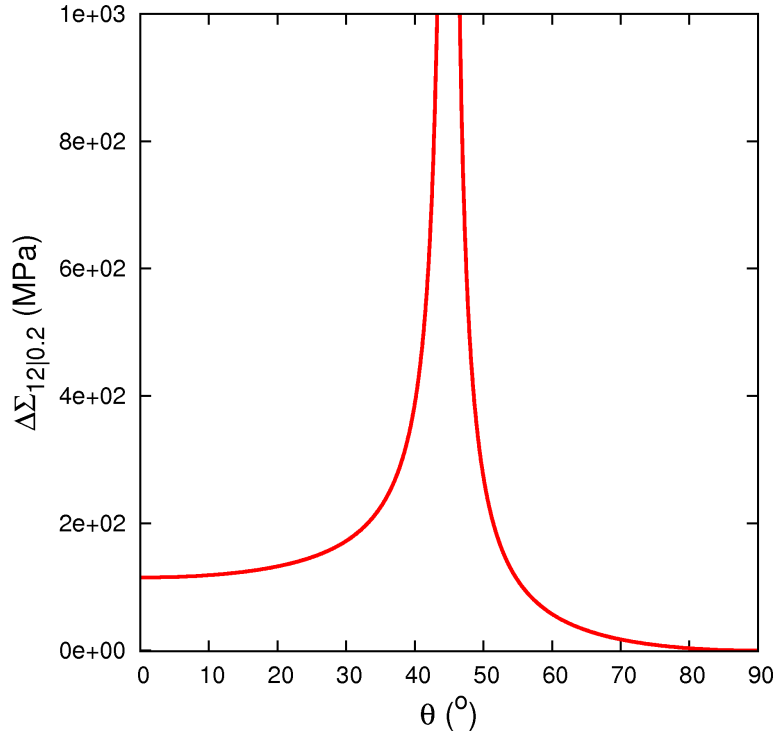


FIG. 6.17. Evolution of the macroscopic yield stress $\Delta\Sigma_{12|0.2}$ as a function of θ . The material parameters considered for each phase are given in table 6.3.

Coefficient	μ [MPa]	τ_c [MPa]	μ_c [MPa]	β [MPa.mm ²]
Phase (s)	100000	59	10^6	$2 \cdot 10^{-5}$
Phase (h)	100000	-	10^6	$1.75 \cdot 10^{-6}$

TAB. 6.4. Set of material parameters employed in γ/γ' simulations.

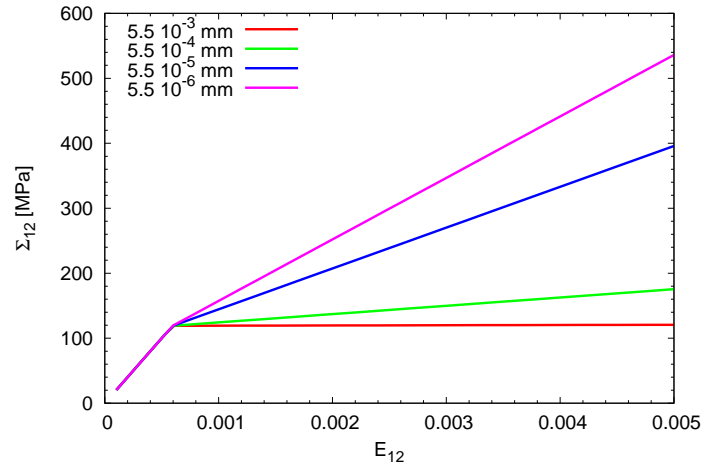
γ/γ' under shear loading

We have simulated the behaviour of a γ/γ' microstructure in the double slip case. The angle θ is chosen equal to 30° . The Cosserat parameters have been identified to obtain a characteristic length of 200 nm. This value of the characteristic length has been identified with the *microcurl* model to fit experimental data from [Duhl 87]. The coupling modulus is taken very high. The table 6.4 gives the value of the chosen material parameters.

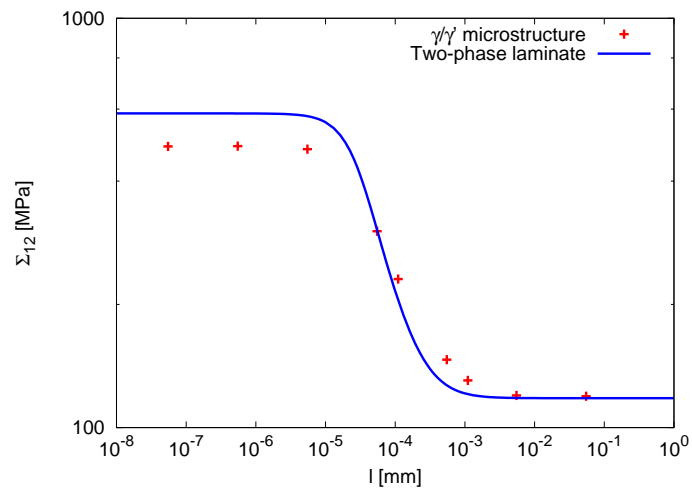
Figure 6.18 shows the results of the γ/γ' simulations. Figure 6.18(a) compares the macroscopic behaviour for various sizes of the microstructure. We can see that the simulations deliver a linear kinematic hardening for γ/γ' microstructure as for the two-phase laminate.

Figure 6.18(b) shows the size effect predicted by the simulations on the yield strength. The γ/γ' case is compared with the two-phase laminate one. Accordingly, the actual cuboidal geometry provides results close to those of the previous analytical approach. Difference between the two cases can be observed. First, the asymptotic value of Σ_{12} for small sizes of the microstructure is smaller in the γ/γ' case. More over, the scaling law in the transition zone seems to be smaller too.

Figure 6.19 shows isovalues of plastic slip γ^1 for three sizes of the microstructure. For small sizes, a localization of plastic slip is observed.

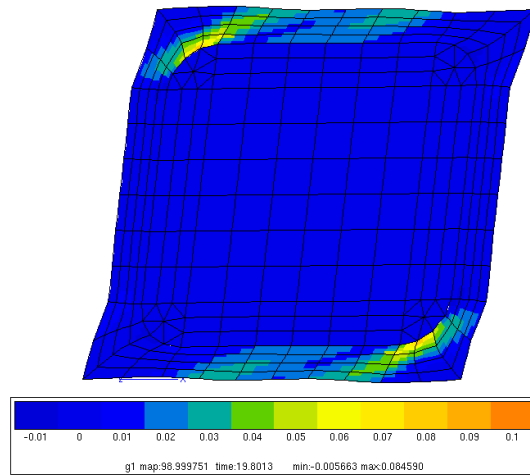


(a)

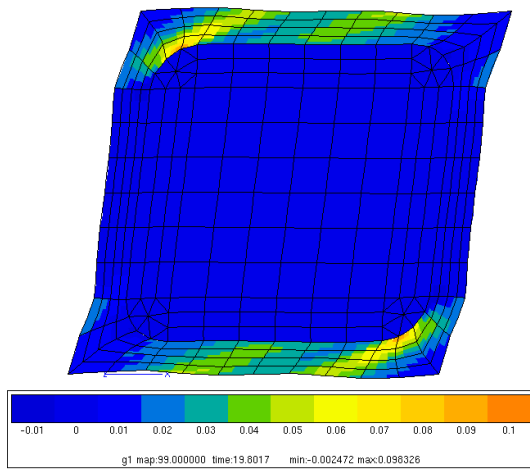


(b)

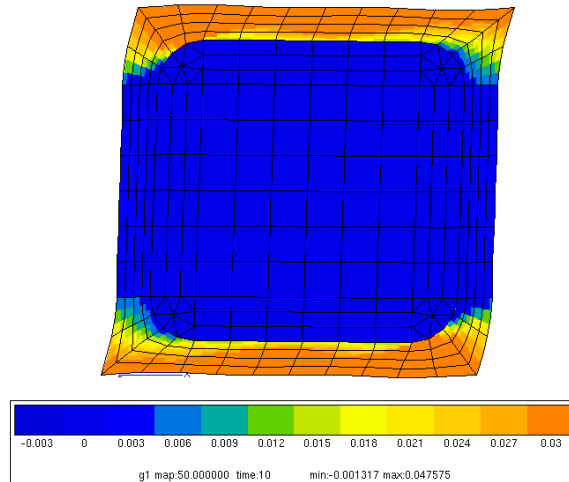
FIG. 6.18. Results of the γ/γ' simulations performed with the Cosserat model. (a) Macroscopic stress–strain curves for different sizes of the microstructure. (b) Resulting size effect compared with the size effect predicted for the two–phase laminate for the same material parameters.



(a) Microstructure size $5.5 \cdot 10^{-7}$ mm



(b) Microstructure size $5.5 \cdot 10^{-5}$ mm



(c) Microstructure size $5.5 \cdot 10^{-4}$ mm

FIG. 6.19. Isovalues of plastic slip γ_1 obtained with the Cosserat model for various sizes of the microstructure. A factor 10 is applied on the deformed mesh.

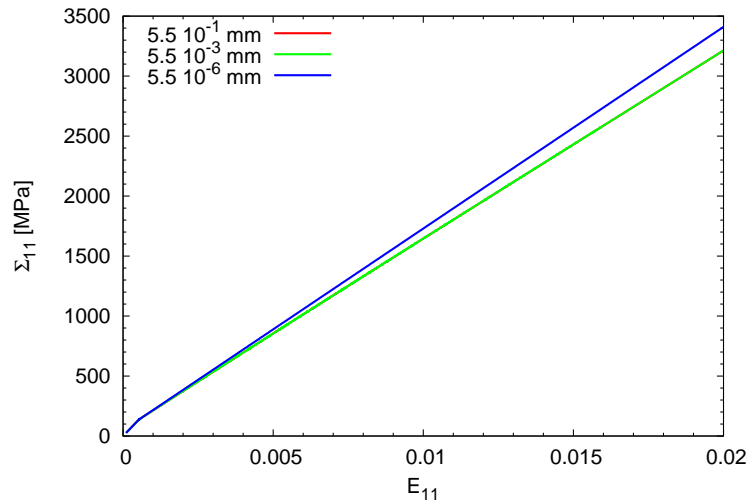


FIG. 6.20. Tensile behaviour of γ/γ' microstructures simulated with the Cosserat model.

γ/γ' under tensile loading

Similar simulations have been performed under tensile loading. Figure 6.21 shows the resulting mechanical behaviour for different sizes of the microstructure. A very small size effect is predicted in this case. It can be observed on figure 6.21 that the microrotation is localized near the corners of the precipitates. It explains the small size effect observed. These simulations show that the Cosserat model is not able to deliver size effects for γ/γ' microstructures under tensile loading. This is due to the fact that in tension the lattice curvature almost vanishes in the channels, except in the corners. This is in contrast to shear loading that involves significant lattice rotation and curvature.

6.7 Conclusions

The main results obtained in this work are the following :

1. A micromorphic crystal plasticity model, called *microcurl*, has been proposed to regularize the response of a strain gradient plasticity model in the presence of an elastic phase. The “*curlH^p*” model is retrieved when the coupling modulus H_χ that arises in the *microcurl* model, becomes a Lagrange multiplier. The corresponding internal constraint states that the plastic microdeformation $\underline{\chi}^p$ coincides with conventional plastic deformation \underline{H}^p .
2. A complete solution of stress, strain and plastic slip distributions could be worked out for a two-phase laminate microstructure where the elastic and elastic-plastic phases obey to the Cosserat or *microcurl* model. In contrast, an indeterminacy remains with the “*curlH^p*” model because of the question of transmission of higher order tractions from the plastic to the elastic phase.
3. Cosserat and *microcurl* solutions coincide within a certain range of values of material parameters.
4. The size effect in terms of extra-hardening amplitude, predicted by the Cosserat model is bounded. In contrast, this amplitude is linearly related to the coupling modulus H_χ in the *microcurl* model. Accordingly the *microcurl* model can accommodate any observed amplitude of extra-hardening.
5. The location l_c of the size dependent domain of the models has been determined and can be calibrated to comply with experimental results either observed in the nano or micron scales. This characteristic is mainly controlled by the parameter A^s and A^h .
6. Power law exponents for the scaling rules were determined that range from $n = 0$ to $n = -2$. It therefore contains the ideal Orowan and Hall-Petch exponents. The higher order parameters A and

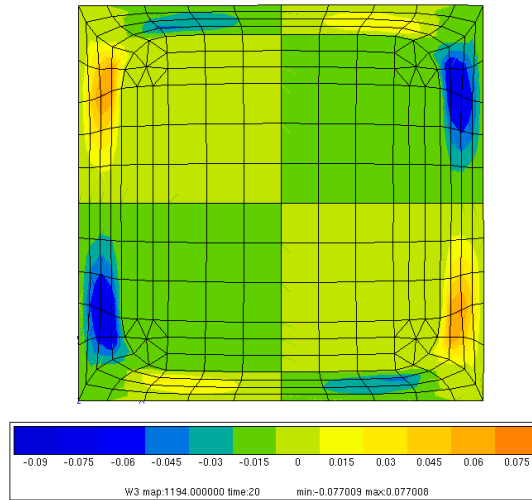


FIG. 6.21. Isovalues of micro-rotation ϕ_3 . A factor 10 is applied to the deformed mesh.

H_χ can be calibrated to obey to experimental scaling laws in a given domain of length scales. More specifically, the *microcurl* model can produce scaling laws between 0 and -2 . The Cosserat model produces scaling laws from 0 to -1 depending on the volume fraction of the soft phase.

7. The formulation of the three considered models is such that a back-stress component arises in the soft phase and macroscopically results in linear kinematic hardening. The corresponding kinematic hardening modulus was explicitly derived, as a function of higher order material parameters, volume fraction of soft phase, and microstructure size. It is bounded in the case of the Cosserat model, whereas it is linearly related to H_χ according to the *microcurl* model.
8. The models are applicable to multislip conditions. The analysis in the case of symmetric double slip has shown a similar size-dependent behaviour as in single slip, and the existence of possible discontinuity of some plastic microdeformation component.

The proposed models should now be applied to more realistic cases, for example to predict size effects in Ni-base superalloys or size effects in polycrystals, based on large scale finite element simulations, as initiated in [Forest 00]. The fact that the Cosserat extra-hardening stress was found to be bounded, irrespective of the value of higher order moduli, may explain the systematic underestimation of grain size effect predicted for aggregates of Cosserat crystals in [Forest 00, Zeghadi 05b]. It is expected that predicted size-effects will be more pronounced for the *microcurl* model than with the Cosserat model.

The linear kinematic hardening predicted by the models in the laminate microstructure is quite ideal and unrealistic. A dependence of the linear kinematic hardening on total dislocation density was evidenced in [Groma 03, Forest 08]. More generally, the constitutive framework should be extended to include non linear kinematic hardening.

From the numerical point of view, the Cosserat model has the advantage that it requires only three additional degrees of freedom compared to the 9 generally required in the “*curlHP*” and *microcurl* models. Models involving the slips γ^α themselves or the dislocation densities as additional degrees of freedom, like in [Bayley 06], are even more expensive since the number of degrees of freedom increases proportionally to the number of slip systems. The possible discontinuity of some components of the plastic microdeformation makes the finite element implementation of the *microcurl* model quite intricate.

Under single slip conditions, the presented models have a sound physical basis as shown by comparison with statistical dislocation theoretical results and also simple line tension dislocation models in [Forest 08]. In contrast, the application of the models to multislip conditions is possible in a purely phenomenological way, by identification of material parameters from experimental data, or from comparison with dislocation

dynamics simulations. This remains to be done with a view to evidencing the limitations of the approach.

Interface conditions have played a major rôle in the present work. Simple continuity requirements were considered. However, enriched interface conditions and constitutive equations at grain boundaries as proposed in [Aifantis 05, Gurtin 08], could be more realistic. They could even be identified from atomistic simulations [McDowell 08].

The extension to tensile loading condition shows that the strain gradient approaches based on the dislocation density tensor are not able to capture the corresponding size effects in the γ/γ' microstructure. They can be used for polycrystals but also deliver limited size effects [Zeghadi 05a]. New frameworks must be developed in the future based on other statistical of dislocation distribution than the dislocation density tensor or different sets of additional degrees of freedom.

Chapitre 7

Modélisation à l'échelle macroscopique de l'influence des évolutions microstructurales sur le comportement mécanique de l'AM1

Sommaire

6.1	Introduction	172
6.2	Cosserat modelling of simple shear in a two-phase laminate	174
6.2.1	The Cosserat model	175
6.2.2	Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear	176
6.3	Strain gradient plasticity : The “<i>curlHP</i>” model	180
6.3.1	Balance equations	180
6.3.2	Energy and entropy principles ; Constitutive equations	180
6.3.3	Application to single slip	181
6.3.4	Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear	182
6.4	Formulation of the <i>microcurl</i> model	183
6.4.1	Balance equations	183
6.4.2	Constitutive equations	184
6.4.3	Internal constraint	185
6.4.4	Application to a two-phase periodic microstructure under simple shear	185
6.5	Overall size effects predicted by the models	187
6.5.1	Macroscopic stress-strain curve and kinematic hardening modulus	187
6.5.2	Size-dependent macroscopic flow stress	191
6.6	Discussion	199
6.6.1	Identification of material parameters	199
6.6.2	Extension to double slip	202
6.6.3	Application to γ/γ' microstructures	205
6.7	Conclusions	209

7.1 Introduction

Ce dernier chapitre aborde la modélisation, dans le cadre d'un modèle de comportement macroscopique, des effets de la mise en radeaux sur le comportement mécanique. Le chapitre 4 a été consacré à l'étude expérimentale du phénomène. Nous avons vu que la coalescence orientée des précipités conduit à un adoucissement du comportement de l'AM1. L'objectif de ce chapitre est de modéliser cet adoucissement.

Par ailleurs, nous avons constaté qu'un vieillissement en fatigue alternée suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ conduit à une microstructure orientée à 45° par rapport à la direction du chargement. Les simulations menées avec le modèle champs de phases élasto-viscoplastique construit au chapitre 5 permettent de retrouver ce résultat. Nous proposons ici un second modèle basé sur une minimisation de l'énergie élastique en présence de déformations plastiques permettant de comprendre l'orientation prise par la microstructure sous différentes conditions de chargements.

Ce chapitre est divisé en trois parties. Dans un premier temps nous effectuons une étude bibliographique des modèles proposés récemment pour traduire les effets de la mise en radeaux sur le comportement mécanique. Sur la base de l'étude bibliographique et des résultats obtenus au cours des chapitres 5 et 6, nous proposons dans un deuxième temps une extension du modèle de comportement actuel qui prenne en compte les effets de la mise en radeaux. Ce modèle est identifié à 950°C et 1050°C grâce aux données expérimentales acquises au chapitre 4. Nous verrons que ce modèle est capable de rendre compte de l'effet de vieillissement en fluage sous différentes orientations cristallographiques. En revanche il sous-estime l'adoucissement observé en fatigue alternée, notamment pour l'orientation $\langle 001 \rangle$. C'est pourquoi nous proposons un modèle de prévision de l'orientation de la microstructure suivant le chargement effectué. Ce modèle est présenté dans un troisième temps.

7.2 Comment modéliser l'influence d'un vieillissement sur le comportement mécanique ?

De façon générale, la prise en compte d'un vieillissement dans un modèle macroscopique commence par l'ajout de variables internes décrivant l'état du matériau [Lemaître 85]. Ces nouvelles variables internes sont couplées aux autres variables observables et internes. Le chargement mécanique, la température, l'état d'érouissage du matériau sont responsables du vieillissement. Mais, le vieillissement influence également la réponse mécanique du matériau.

Les questions à résoudre dans le cas présent sont donc au nombre de trois :

- Quelles sont les variables microstructurales pertinentes ?
- Comment évoluent-elles avec le temps, en fonction de la température, du chargement et de l'état mécanique du matériau ?
- Comment la mise en radeaux influence-t-elle le comportement mécanique de l'AM1 ?

Cette section propose une revue bibliographique des modèles proposés dans la littérature pour décrire l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique.

Nous avons recensé deux approches pour traiter ce problème, une première que l'on pourrait qualifier de macroscopique [Fedelich 08, Tinga 09] et une seconde plutôt micro-mécanique [Svoboda 96]. La première voie est purement phénoménologique, dans la lignée des modèles de comportement exposés au chapitre 2. Le choix des variables internes décrivant le vieillissement ainsi que leurs lois d'évolution sont largement calibrés sur des résultats expérimentaux. En revanche, la seconde se place à l'échelle des phases et décrit la mise en radeaux en terme de diffusion. Les paragraphes suivants décrivent ces modèles.

7.2.1 Approche micro-mécanique

On a assisté ces dernières années au développement de modèles micro-mécaniques pour décrire le comportement des superalliages monocristallins [Forest 96, Svoboda 96, Fedelich 02, Ma 08, Tinga 08]. Ces modèles sont tous basés sur le même principe. Ils prennent en compte le caractère biphasé des monocristaux de superalliages et utilisent des règles d'homogénéisation pour accéder aux variables macroscopiques.

Parmi ces modèles, le modèle de Svoboda [Svoboda 96, Svoboda 97, Svoboda 98, Svoboda 00] est dédié au fluage et à la mise en radeaux. Les auteurs considèrent une cellule élémentaire γ/γ' et distinguent trois zones, le précipité, les couloirs de matrice horizontaux et les couloirs de matrice verticaux. La variation de largeur des couloirs horizontaux Δ est considérée comme variable interne. Si G désigne l'énergie libre, la variation de Δ est reliée à G par :

$$-\frac{dG}{d\Delta} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\dot{\Delta}} \quad (7.1)$$

où R est le taux de dissipation de l'énergie libre dû à la diffusion. Pour calculer l'énergie élastique en fonction de Δ , les contraintes sont supposées homogènes dans chacune des zones. Les équations d'équilibre mécanique et un modèle de comportement permettent de déterminer les champs de contrainte et de déformation dans chaque zone. De plus, une relation entre R et Δ permet de trouver la loi d'évolution de Δ .

L'influence de la mise en radeaux sur le comportement en fluage apparaît au travers du seuil de plasticité. Les auteurs ont choisi la contrainte d'Orowan comme seuil de plasticité [Svoboda 98].

Ce modèle est relativement proche du modèle de mise en radeaux proposé par Véron [Véron 95]. Cependant, la modélisation proposée par cet auteur ne rend pas compte de l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique.

7.2.2 Approche macroscopique

Plusieurs modèles ont été proposés récemment pour décrire la mise en radeaux et son influence dans le cadre de modèles de comportement macroscopiques phénoménologiques [Fedelich 04, Fedelich 08, Tinga 09]. Ces auteurs se sont principalement intéressés au cas d'évolutions microstructurales sous chargement de fluage suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$. Fedelich et Tinga [Fedelich 08, Tinga 09] distinguent deux phénomènes physiques responsables d'évolutions microstructurales :

- La coalescence isotrope des précipités, dont la force motrice est la réduction de l'énergie d'interface ;
- La mise en radeaux, qui elle est anisotrope et activée par le chargement extérieur.

Cette distinction est supportée par de nombreuses données expérimentales [Epishin 09].

Modèle de Fedelich D'après Fedelich [Fedelich 08], la coalescence isotrope des précipités induit seulement une modification de l'échelle de la microstructure sans modification de l'état des contraintes internes dans le matériau. Ce phénomène est décrit par la variable λ_{001} correspondant à la périodicité de la microstructure. L'évolution de la largeur des couloirs due à la coalescence des précipités w_{cube} s'exprime alors en fonction de λ_{001} :

$$w_{cube}(t) = \frac{\lambda_{001}(t)}{\lambda_{001}^0} w_{cube}^0 \quad (7.2)$$

où w_{cube}^0 et λ_{001}^0 sont respectivement la largeur initiale des couloirs de matrice et la périodicité de la microstructure initiale.

A l'opposé, la mise en radeaux modifie la microstructure par un élargissement de certains canaux de matrice au profit de la disparition des autres. La largeur des couloirs de matrice perpendiculaires à la contrainte w_{raft} dans la microstructure en radeaux est également fonction de la périodicité :

$$w_{raft}(t) = \frac{\lambda_{001}(t)}{\lambda_{001}^0} w_{raft}^0 \quad (7.3)$$

avec w_{raft}^0 la largeur des couloirs de la microstructure en radeaux initiale, i.e. correspondant à la périodicité λ_{001}^0 . Noter que cette expression est établie en supposant que la fraction volumique de précipités ne varie pas lors de la mise en radeaux. Fedelich [Fedelich 08] définit la variable ξ comme le degré de mise en radeaux de la microstructure :

$$\xi(t) = \frac{w(t) - w_{cube}(t)}{w_{raft}(t) - w_{cube}(t)} \quad (7.4)$$

Deux variables internes sont donc ajoutées pour décrire la mise en radeaux dans le modèle de Fedelich [Fedelich 08], λ_{001} et ξ décrivant respectivement la coalescence isotrope des précipités et le degré de mise en radeaux de la microstructure. Les lois d'évolution suivantes pour ces variables sont proposées. Concernant la coalescence isotrope, elle est supposée indépendante de l'état de contrainte/déformation du matériau. Une loi en racine du temps est proposée :

$$\lambda_{001}(t) = \lambda_{001}^0 \sqrt{1 + \beta t} \quad (7.5)$$

Dans le modèle de Fedelich, l'évolution de la variable interne ξ est couplée au comportement mécanique par l'intermédiaire du paramètre c^o d'écrouissage cinématique :

$$c^o(\xi) = c_0^o(1 - c_1^o \xi) \quad (7.6)$$

La force motrice de mise en radeaux s'écrit donc :

$$X = -\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = \frac{1}{2} c_0^o c_1^o \boldsymbol{\alpha}^o : \boldsymbol{\alpha}^o \quad (7.7)$$

Fedelich postule une loi d'évolution de la variable interne ξ en puissance de X :

$$\dot{\xi} = (1 - \xi) f_{raft} X^n \quad (7.8)$$

avec f_{raft} et n deux paramètres du modèle. Le modèle présenté ici est une extension du modèle proposé par Fedelich [Fedelich 04, Fedelich 08] que nous avons présenté au chapitre 2. Dans ce modèle le seuil de plasticité est décrit par une contrainte d'Orowan. Par conséquent, la mise en radeaux affecte le comportement mécanique par le biais du seuil de plasticité et du module d'écrouissage cinématique.

Modèle proposé par Tinga Ce modèle se situe à cheval entre un modèle macroscopique et un modèle de type micro-mécanique car il est basé sur une "homogénéisation par parties" similaire à celle proposée dans [Fedelich 99, Fedelich 02], mais les lois d'évolution des grandeurs microstructurales sont purement phénoménologiques. Le modèle proposé dans [Tinga 09] est basé sur les mêmes considérations physiques, à savoir qu'il distingue également coalescence isotrope et mise en radeaux. La loi d'évolution de la largeur des couloirs de matrice due à la mise en radeaux est basée sur le modèle proposé dans [Epishin 09] :

$$\dot{h} = A \exp\left(-\frac{Q - \sigma U(T)}{RT}\right) \quad (7.9)$$

avec $U(T) = U_T(T - T_0)^n$. Dans ce modèle, T est la température en kelvin, T_0 étant la température en dessous de laquelle la mise en radeaux n'est plus observée. A , Q , U_T , n sont des paramètres. Tinga propose une formulation plus générale de ce modèle en introduisant trois largeurs de couloirs L_1 , L_2 et L_3 correspondant aux directions x , y et z . L'évolution de ces largeurs est reliée à la contrainte de Von Mises σ_{VM} et aux composantes diagonales du déviateur des contraintes σ_{ii}^d par la relation phénoménologique :

$$\dot{L}_i = -\frac{3}{2} L_i \left(\frac{\sigma_{ii}^d}{\sigma_{VM} + \varepsilon} \right) \frac{A}{L} \exp\left(-\frac{Q - \sigma_{VM} U(T)}{RT}\right) \quad (7.10)$$

Tout comme dans le modèle précédent, ce modèle prend en compte l'augmentation de la taille de la cellule γ/γ' élémentaire due à la coalescence isotrope des précipités en postulant la loi suivante pour l'évolution de λ_{001} :

$$\dot{\lambda}_{001} = f_c A \exp\left(-\frac{Q - \sigma_{VM} U(T)}{RT}\right) \quad (7.11)$$

L'utilisation d'une homogénéisation par parties permet de distinguer plusieurs effets de la mise en radeaux sur le comportement. En effet, l'évolution microstructurale affecte la largeur des couloirs de matrice, donc le seuil de plasticité par l'intermédiaire d'une contrainte d'Orowan. Elle affecte également la montée aux interfaces prise en compte par l'intermédiaire de la plasticité dans la phase γ' .

Nous avons présenté des modèles qui permettent de modéliser la mise en radeaux et de rendre compte de son influence sur le comportement mécanique. En conclusion de cette étude bibliographique, nous pouvons dire que l'approche micro-mécanique semble très intéressante car elle traduit les forces motrices de la mise en radeaux à savoir la différence d'énergie entre couloirs horizontaux et couloirs verticaux. Cependant, dans le cadre de cette thèse, nous avons retenu une approche macroscopique dans la lignée des modèles de Fedelich et Tinga. La section suivante propose l'identification d'un modèle macroscopique rendant compte de l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique à partir des essais présentés au chapitre 4. Nous en verrons ensuite les limites.

7.3 Modèle macroscopique

7.3.1 Equations du modèle

Hypothèses On suppose que la mise en radeaux affecte uniquement l'écroutissage du matériau au travers d'un élargissement des couloirs de matrice. L'effet sur la viscosité mis en évidence sur le comportement à 1050°C au chapitre 4 est négligé. Nous nous basons sur le modèle proposé par Fedelich dans le cadre du projet européen SOCRAX [Fedelich 04]. Cela signifie que nous négligeons la coalescence isotrope des précipités. Cette hypothèse est possible car contrairement aux données expérimentales dans [Fedelich 08], les temps de fluage considérés dans ce travail sont relativement courts.

A nos yeux, le problème de savoir si la mise en radeaux affecte le seuil ou l'écroutissage cinématique reste entier. Dans le premier modèle proposé par Fedelich [Fedelich 04], la mise en radeaux affecte uniquement le seuil de plasticité. Dans le modèle de Fedelich présenté ci-dessus [Fedelich 08], l'élargissement des canaux de matrice perpendiculaires à l'axe de chargement affecte également le module d'écroutissage cinématique. Plus généralement, cette problématique se ramène à la question de la modélisation des effets d'échelle en plasticité abordée au chapitre 6 de ce mémoire. Dans ce chapitre nous avons vu que les modèles de milieux continus généralisés conduisent à un écroutissage cinématique linéaire dont le module dépend de la taille de la microstructure.

Nous nous sommes posés la question de savoir s'il fallait faire porter l'effet de la mise en radeaux sur l'écroutissage cinématique uniquement ou sur le seuil également. La figure 7.1 compare, au travers du modèle de comportement, ces deux hypothèses sur les résultats du comportement après mise en radeaux en fluage à 950°C et 1050°C. L'amplitude de l'adoucissement considéré est la même dans les deux cas. La différence est relativement faible. Mais les simulations sont plus proches des résultats expérimentaux si la mise en radeaux affecte simultanément le seuil de plasticité et le module d'écroutissage cinématique comme le montre la figure 7.1.

Equations du modèle On suppose donc que le seuil de plasticité et le module d'écroutissage sont inversement proportionnels à la largeur des couloirs de matrice w :

$$r_0 = \frac{\alpha G b}{w} \quad (7.12)$$

$$c = \frac{\beta G b}{w} \quad (7.13)$$

où G est le module de cisaillement et b la norme du vecteur de Burgers.

On considère ξ le degré de mise en radeaux comme variable interne du modèle. Cette seule variable interne suffit car nous avons vu que la mise en radeaux à 1050°C et à 950°C conduisent au même com-

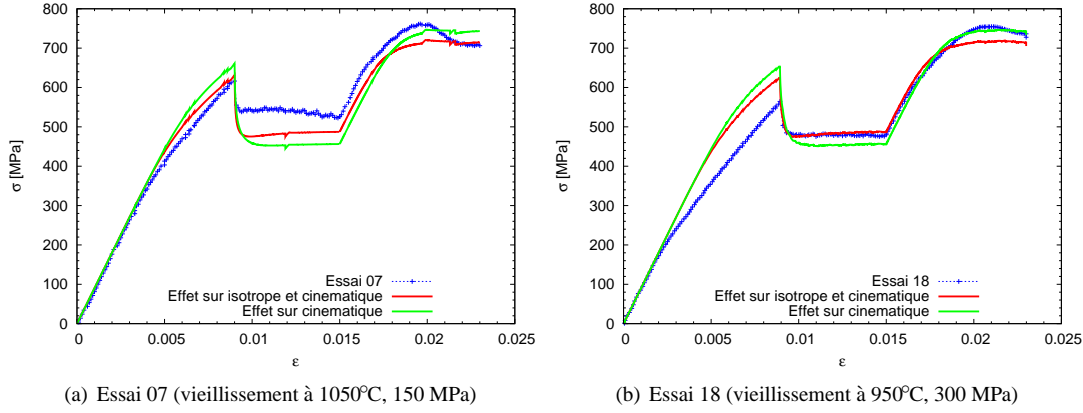


FIG. 7.1. Comparaison sur deux essais du comportement dans le cas où la mise en radeaux affecte uniquement le module d'écroutissage cinématique ou simultanément le module et le seuil de plasticité.

portement macroscopique. De plus, nous avons vu que l'orientation des radeaux, N ou P, a une influence négligeable sur le comportement mécanique.

La variable interne ξ varie entre 0 et 1. La largeur des couloirs de matrice est fonction de ξ . Elle varie entre w_0 et w_∞ :

$$w = w_0 + (w_\infty - w_0)\xi \quad (7.14)$$

Tout comme Fedelich, nous supposons que la force motrice sur la mise en radeaux est une fonction de l'état d'écroutissage du matériau :

$$\dot{\xi} = A(1 - \xi)|\underline{X}|^\eta \quad (7.15)$$

où $\underline{X} = \sum_s x^s \underline{m}^s$ désigne le tenseur d'écroutissage cinématique et $|\underline{X}|$ sa norme. Pour un chargement monotone, l'intégration de 7.15 conduit à une cinétique d'évolution exponentielle :

$$\xi = 1 - \exp(-A|\underline{X}|^\eta t) \quad (7.16)$$

Ce modèle a été implémenté en langage Zebfront qui est le méta-langage spécialisé dans le code Z-set pour l'écriture de lois de comportement. L'intégration temporelle du modèle est effectuée grâce à une méthode explicite de Runge-Kutta du deuxième ordre.

7.3.2 Identification de l'adoucissement généré par la mise en radeaux

Au chapitre 2 de ce mémoire, nous avons identifié un modèle de comportement prenant en compte implicitement l'effet de la mise en radeaux sur le comportement sous faibles vitesses de sollicitation. En effet, les paramètres du modèle de viscosité identifiés ont été calibrés de façon à simuler correctement le comportement de l'AM1 en fluage et en relaxation de longue durée. Ce modèle ne permet pas de rendre compte de l'effet de la mise en radeaux sur le comportement monotone ou cyclique pour des vitesses de sollicitation plus rapides, typiquement entre 10^{-5} et 10^{-3} s^{-1} . Le modèle décrit dans le présent chapitre rend compte explicitement de l'effet de la mise en radeaux. Nous repartons donc du modèle de comportement actuel recalé (voir paragraphe 2.4.1) pour l'identification de l'influence de la mise en radeaux. Néanmoins nous choisissons un modèle de viscosité de type sinus hyperbolique. Les coefficients k et $\dot{\epsilon}_0$ sont calibrés de manière à ce que le modèle de viscosité en sinus hyperbolique délivre la même contrainte visqueuse que la loi de Norton du modèle actuel recalé sur la plage de vitesses 10^{-5} - 10^{-3} s^{-1} . Ces paramètres sont donnés dans le tableau 7.1.

Nous choisissons $w_0=100 \text{ nm}$ conformément à [Diologent 02] pour l'AM1. De plus nous prenons $b=0.254 \text{ nm}$ [Diologent 02]. Les valeurs des coefficients α et β sont calculées de façon à retrouver le seuil

Température	Systèmes	G MPa	α MPa	β MPa	d	M MPa	m	k MPa	$\dot{\epsilon}_0$ s^{-1}
950°C	octaédriques	93000	0.2924	910	1960	800	8	25.60	$9.46 \cdot 10^{-7}$
	cubiques		0.127	383	1131	800	8	20.35	$9.49 \cdot 10^{-7}$
1050°C	octaédriques	88000	0.2013	665	2126	800	6	12.15	$1.76 \cdot 10^{-6}$
	cubiques		0.179	418	1414	800	6	8.8	$1.83 \cdot 10^{-6}$

TAB. 7.1. Coefficients d'érouissage et de viscosité du modèle de comportement.

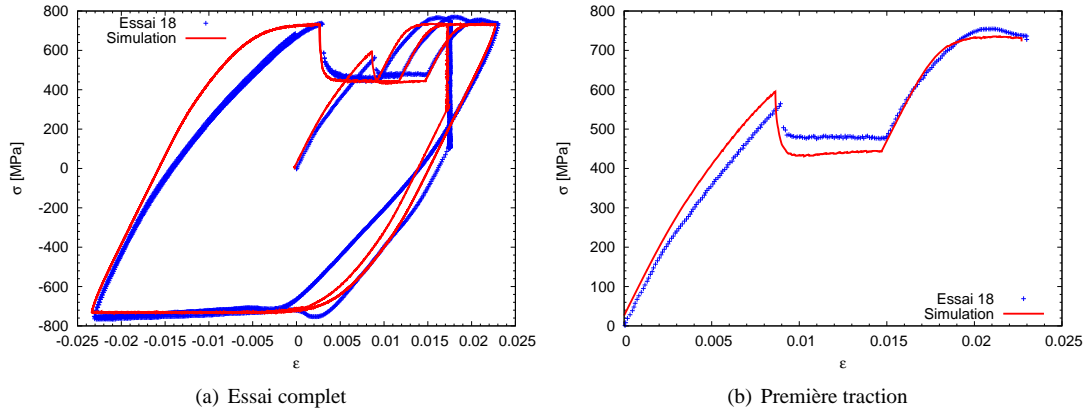


FIG. 7.2. Simulation de l'essai 18 (vieillessement en fluage à 950°C, 300 MPa).

de plasticité et le module d'érouissage cinématique du modèle de comportement actuel. Il ne s'agit pas à proprement parler de paramètres à identifier.

Deux types de paramètres sont réellement à identifier. Le premier est le paramètre w_∞ qui caractérise l'adoucissement lié à la mise en radeaux. Ce paramètre est identifié sur l'essai 18 et sur l'essai 07. Les autres paramètres sont A et η qui contrôlent la cinétique de mise en radeaux. Ils sont identifiés à 950°C et 1050°C aux paragraphes suivants.

D'après les essais 18 et 07, pour lesquels un vieillissement en fluage suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ est effectué à 950°C et 1050°C respectivement, nous fixons le paramètre w_∞ à 135 nm. Les figures 7.2 et 7.3 montrent que cette valeur permet de rendre compte correctement de l'adoucissement généré par la mise en radeaux sur les portions à $10^{-5} s^{-1}$ et $10^{-3} s^{-1}$. En revanche, le modèle surestime la contrainte en relaxation aux deux températures considérées.

7.3.3 Identification de la cinétique de mise en radeaux

Le second type de paramètres correspond à la cinétique de mise en radeaux. Il comprend les paramètres A et η . Ces paramètres sont identifiés sur des essais de fluage. A 950°C, nous disposons du suivi de la mise en radeaux effectué sur l'essai 18. Nous ajoutons un terme de restauration statique de l'érouissage de manière à mieux décrire ces essais de fluage. Pour cette température, les paramètres $A=10^{-7} s^{-1}$ et $\eta = 1$ permettent une bonne description de ces essais comme le montre la figure 7.4.

A 1050°C, les paramètres A et η sont également calibrés sur des essais de fluage à la fois obtenus dans ce travail et dans celui de [Ayrault 89]. La figure 7.5 montre un bon accord entre données expérimentales et simulations. Les valeurs de A et η sont respectivement de $10^{-6} s^{-1}$ et 1.

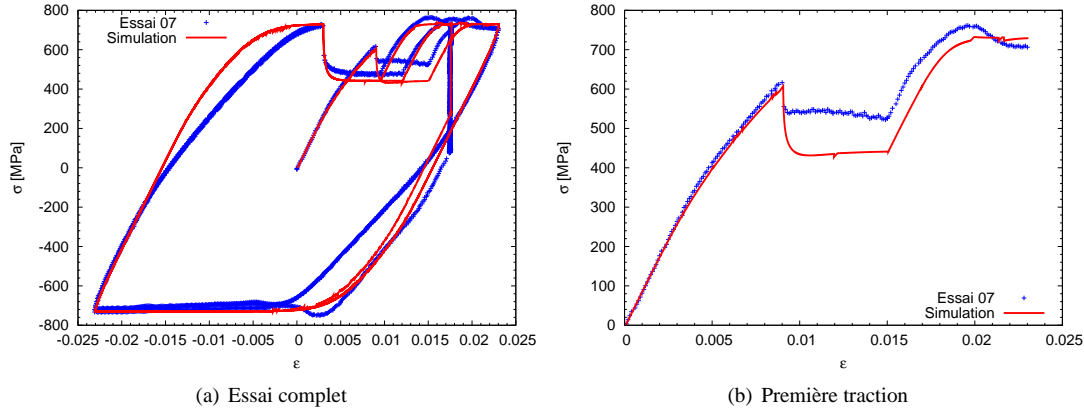


FIG. 7.3. Simulation de l'essai 07 (vieillessement en fluage à 1050°C, 150 MPa).

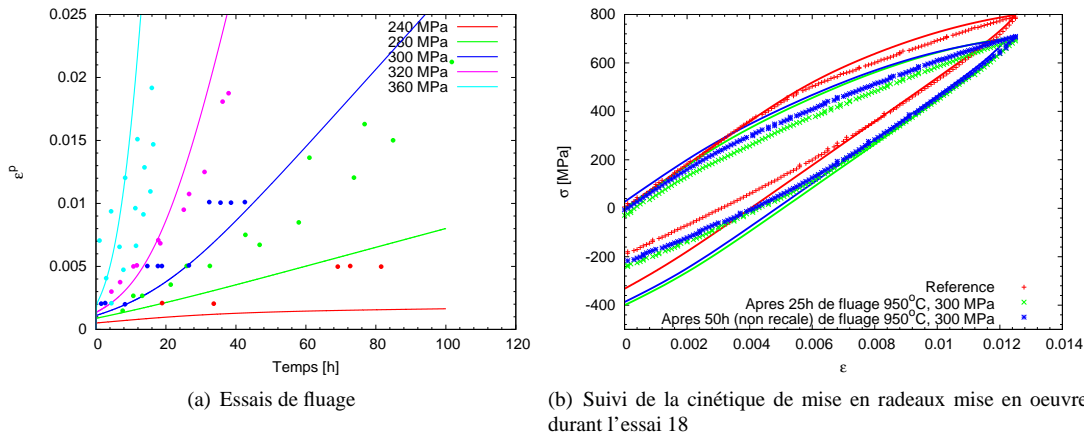


FIG. 7.4. Identification des paramètres du modèle contrôlant la cinétique de mise en radeaux à 950°C. Les données en fluage sont issues de [de Bussac 93].

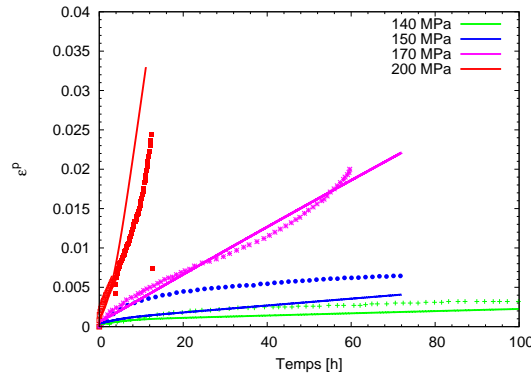


FIG. 7.5. Identification des paramètres du modèle contrôlant la cinétique de mise en radeaux à 1050°C. Les données expérimentales en fluage sous 140 et 170 MPa sont issues de [Ayrault 89].

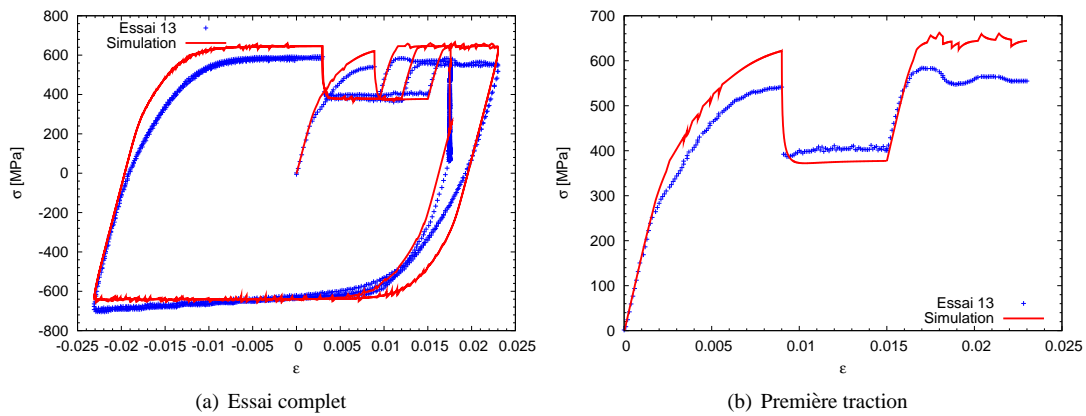


FIG. 7.6. Simulation de l'essai 13 (vieillessement en fluage à 1050°C, 150 MPa suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$).

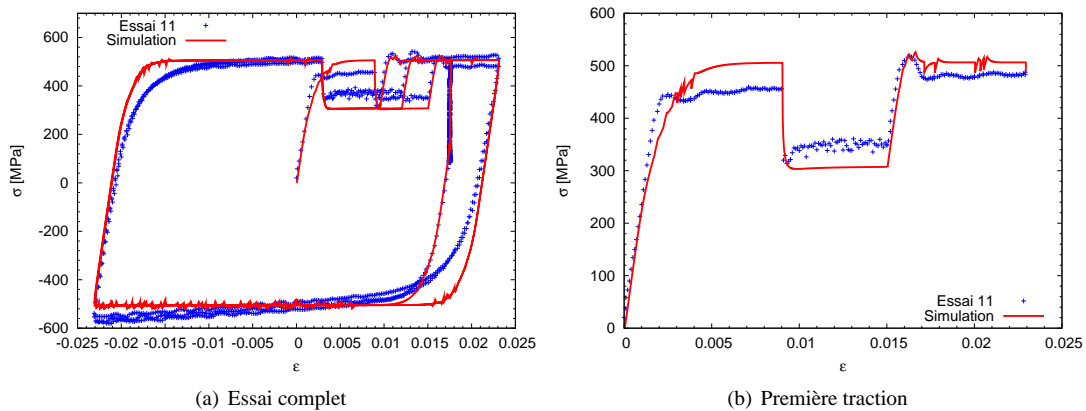


FIG. 7.7. Simulation de l'essai 11 (vieillessement en fluage à 1050°C, 150 MPa suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$).

7.3.4 Simulation des essais suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$

Le modèle tel qu'il a été identifié aux paragraphes précédents est validé par la simulation du comportement mécanique après fluage suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Les figures 7.6 et 7.7 montrent que le modèle proposé permet une bonne description des effets de la coalescence orientée pour ces deux autres orientations.

7.3.5 Limites du modèle

De part les hypothèses que nous avons faites, un certain nombre d'effets de la mise en radeaux ne sont pas correctement pris en compte dans le modèle. Premièrement, comme nous l'avons souligné, nous avons négligé l'influence de la coalescence orientée sur la viscosité. L'essai 17 est donc mal décrit par le modèle. Comme le montre la figure 7.8 les portions à 10^{-5} s^{-1} sont bien décrites par le modèle. En revanche celui-ci sous-estime la contrainte pour les portions rapides.

La seconde limitation du modèle proposé concerne le fait que l'orientation des radeaux n'est pas prise en compte. Cela implique que l'on ne reproduit pas la différence de déformation plastique entre fluage traction et fluage compression mise en évidence au chapitre 4. Cela implique également une mauvaise description de l'influence d'un vieillissement cyclique suivant $\langle 001 \rangle$. En effet, comme le montre la figure 7.9, le modèle

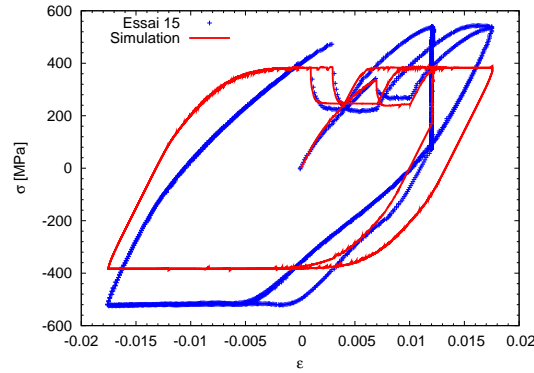


FIG. 7.8. Simulation de l'essai 15 (vieillessement en fluage traction suivant $\langle 001 \rangle$ à 1050°C, 150 MPa puis essai mécanique à 1050°C).

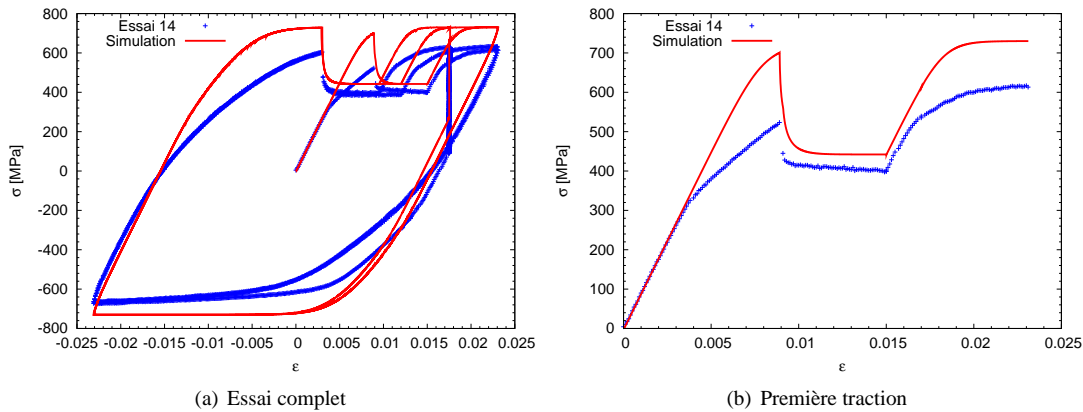


FIG. 7.9. Simulation de l'essai 14 (vieillessement cyclique suivant $\langle 001 \rangle$ à 1050°C).

sous-estime l'adoucissement provoqué par un tel vieillissement. Comme nous l'avons vu au chapitre 4, un vieillissement cyclique lent suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ génère une microstructure orientée à 45° par rapport aux axes cubiques. Il est possible d'interpréter ce résultat en terme de contrainte d'Orowan. La largeur effective des couloirs de matrice est plus importante pour une microstructure en radeaux à 45° que pour une microstructure issue d'un vieillissement en fluage.

La figure 7.10 présente les simulations des vieillissements cycliques suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Elle met en évidence le fait que le modèle sous-estime également l'adoucissement généré par un vieillissement cyclique suivant $\langle 011 \rangle$. En revanche, comme nous l'avons vu au chapitre 4, pour l'orientation $\langle 111 \rangle$, le mode de vieillissement influence peu l'adoucissement généré. C'est pourquoi le modèle décrit correctement l'essai 19 vieilli sous chargement cyclique suivant cette orientation particulière.

Enfin, nous avons simulé l'essai 06, essai de référence à 950°C. Le modèle prévoit de la mise en radeaux au cours de la relaxation. Par conséquent, comme le montre la figure 7.11, on observe un adoucissement du comportement entre le premier cycle et le cycle après relaxation. L'essai ne montre pas d'adoucissement, ce qui laisse supposer qu'il n'y a pas eu mise en radeaux au cours de cet essai. Ce point a été confirmé par les micrographies effectuées après l'essai. Elles ne montrent qu'un début d'accolement des précipités. Ce résultat laisse donc penser qu'il faudrait améliorer la force motrice de mise en radeaux dans notre modèle.

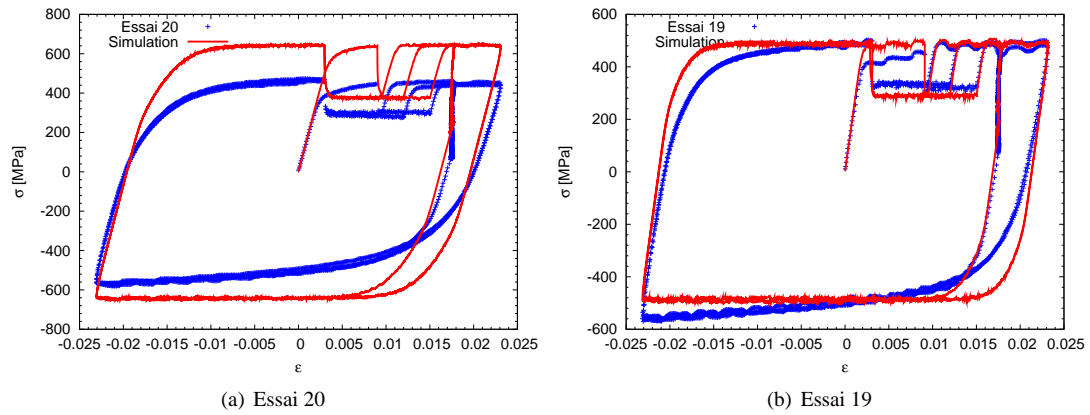


FIG. 7.10. Simulation des essais 20 (vieillesse cyclique suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$) et 19 (vieillesse cyclique suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$).

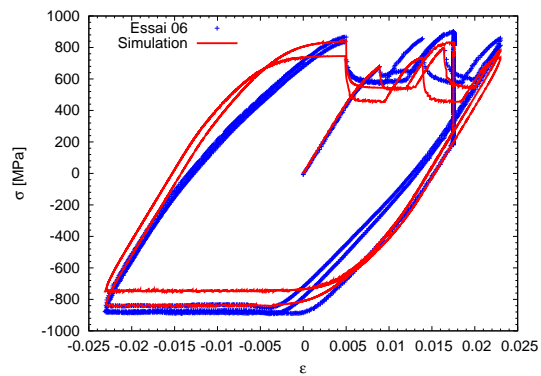


FIG. 7.11. Simulation de l'essai 06 (essai de référence à 950°C suivant $\langle 001 \rangle$).

7.4 Vers une modélisation de l'évolution de l'orientation de la microstructure

L'objectif de cette partie est de modéliser l'influence d'une déformation plastique sur l'orientation des précipités. La modélisation que nous proposons ici a pour but la prévision de l'orientation des radeaux par une minimisation de l'énergie élastique (pas de cinétique). La différence de constantes élastiques entre les deux phases est négligée. La plasticité est prise en compte par un tenseur de déformation plastique dont la symétrie dépend de l'axe de sollicitation via les systèmes de glissement activés. Sous les hypothèses précédentes, l'énergie d'une microstructure en radeaux peut être évaluée en fonction de l'orientation des radeaux en utilisant la théorie micro-mécanique de Khachaturyan [Khachaturyan 83].

Différents cas de chargements sont étudiés, des chargements de traction et de compression suivant $\langle 001 \rangle$ bien sûr, mais aussi suivant d'autres orientations telles que les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Les prévisions obtenues par cette modélisation et les microstructures de monocristaux de superalliages sollicités à haute température sont comparées.

7.4.1 Modélisation

Cette section aborde la modélisation envisagée de l'énergie élastique. Nous reprenons le formalisme proposé par Khachaturyan [Khachaturyan 83] et utilisé par exemple en champs de phases. Nous nous plaçons dans les hypothèses suivantes :

- La microstructure est périodique ;
- Les propriétés élastiques sont homogènes sur la microstructure, caractérisées par le tenseur $\underline{\underline{\lambda}}$;
- La matrice a un comportement plastique caractérisé par une loi de comportement de type cristalline [Méric 91]. Nous considérons uniquement les systèmes de glissement octaédriques. De plus, la déformation plastique est supposée confinée dans les couloirs de phase γ et homogène dans l'espace. La déformation plastique n'est bien sûr pas spatialement homogène lors des premiers instants de l'évolution microstructurale si les canaux de phase γ ne sont pas équivalents vis-à-vis de l'axe de traction. Cependant, quand la microstructure est transformée en radeaux (situation que nous considérons ici), cette hypothèse se trouve vérifiée.

L'énergie élastique d'une microstructure soumise à une contrainte extérieure $\underline{\underline{\sigma}}^{ext}$ s'écrit :

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_{dV} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{el} dV - V \underline{\underline{\sigma}}^{ext} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle \quad (7.17)$$

où $\underline{\underline{\sigma}}$ désigne le tenseur des contraintes, $\underline{\underline{\varepsilon}}^{el}$ celui des déformations élastiques et $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle$ le tenseur de déformation moyen.

Nous considérons la fonction de forme $\theta(\underline{\underline{r}})$ caractérisant la microstructure au point $\underline{\underline{r}}$. $\theta = 1$ dans la phase γ et $\theta = 0$ dans la phase γ' . D'après la théorie de Khachaturyan [Khachaturyan 83], et en se plaçant dans l'espace de Fourier :

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_{\underline{\underline{q}}}^* \frac{d\underline{\underline{q}}^3}{(2\pi)^3} B(\underline{\underline{n}}) |\theta(\underline{\underline{q}})|^2 - V \underline{\underline{\sigma}}^{ext} \langle \underline{\underline{\varepsilon}}_{ij}^0 \rangle - \frac{V}{2} \sigma_{ij}^{ext} S_{ijkl} \sigma_{kl}^{ext} \quad (7.18)$$

où $\int_{\underline{\underline{q}}}^* = \int_{\underline{\underline{q}} \neq 0}$ représente la valeur principale de l'intégrale et

$$B(\underline{\underline{n}}) = \underline{\underline{\sigma}}^0 : [\underline{\underline{\varepsilon}}^0]^* - \underline{\underline{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^0 \cdot \underline{\underline{G}}(\underline{\underline{n}}) \cdot [\underline{\underline{\sigma}}^0]^* \cdot \underline{\underline{n}} \quad (7.19)$$

Dans (7.19), $\underline{\underline{G}}(\underline{\underline{n}})$ est le tenseur de Green, dépendant de l'orientation et des propriétés élastiques. Le tenseur $\underline{\underline{\varepsilon}}^0$ représente le tenseur de déformation hors contrainte. On a alors :

$$\underline{\underline{\sigma}}^0 = \underline{\underline{\lambda}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^0 \quad (7.20)$$

C_{11}	C_{12}	C_{44}	δ
GPa	GPa	GPa	
197	144	90	-0.002

TAB. 7.2. Données numériques pour les simulations de prévision de l'orientation de la microstructure.

Dans un modèle élastique, la déformation hors contrainte peut s'écrire :

$$\varepsilon_{ij}^0 = \varepsilon_{ij}^T = \frac{a_{\gamma} - a_{\gamma'}}{a_{\gamma'}} \delta_{ij} \quad (7.21)$$

Dans (7.18), puisque $B(\underline{n})$ ne dépend que de l'orientation du vecteur \underline{n} , le minimum d'énergie élastique 7.18 est réalisé pour une microstructure en plaquettes avec une normale donnée par le minimum de $B(\underline{n})$. Par conséquent, l'orientation de la microstructure correspond aux minima de $B(\underline{n})$.

La base du modèle développé ici est de supposer que l'évolution microstructurale répond à l'activité plastique de manière à minimiser l'énergie élastique. La présence de déformation plastique dans la matrice modifie le tenseur de déformation hors contrainte. On suppose que le tenseur de déformation plastique peut s'écrire sous la forme :

$$\underline{\varepsilon}^p(\underline{r}) = \underline{\varepsilon}_0^p \theta(\underline{r}) \quad (7.22)$$

On définit alors le tenseur de déformation hors contrainte effectif comme la somme des contributions du désaccord paramétrique et de la déformation plastique $\underline{\varepsilon}^p$:

$$\underline{\varepsilon}^* = \underline{\varepsilon}^T + \underline{\varepsilon}_0^p \quad (7.23)$$

Le tenseur $\underline{\varepsilon}^0(\underline{r})$ s'écrit alors :

$$\underline{\varepsilon}^0(\underline{r}) = \underline{\varepsilon}^* \theta(\underline{r}) \quad (7.24)$$

et l'énergie élastique du matériau est donnée par 7.19.

Pour un ensemble de plaquettes fines perpendiculaires à une direction \underline{n}_1 alors $\theta(\underline{q})^2$ est négligeable partout sauf dans la direction \underline{n}_1 . Par conséquent :

$$E_{el} \approx \frac{1}{2} B(\underline{n}_1) V - V \sigma_{ij}^{ext} \langle \underline{\varepsilon}_{ij}^* \rangle - \frac{V}{2} \sigma_{ij}^{ext} S_{ijkl} \sigma_{kl}^{ext} \quad (7.25)$$

Dans 7.25, seul le terme en $B(\underline{n}_1)$ dépend de l'orientation. L'orientation des radeaux qui minimise l'énergie élastique stockée est donc donnée par la minimisation de $B(\underline{n})$.

Dans la suite nous étudions l'influence de la plasticité sur le minimum d'énergie élastique. Dans [Khachatryan 83] est proposée une détermination analytique du minimum de $B(\underline{n})$ en fonction du tenseur de déformation hors contrainte dans le cas où celui-ci est tétragonal. La prise en compte de la déformation plastique dans le cas de chargements suivant des orientations cristallographiques différentes des orientations cubiques conduit à des tenseurs de déformation hors contrainte non nécessairement tétragonaux. L'étude proposée ici est donc numérique. La normale à l'orientation des plaquettes en coordonnées sphériques est définie par :

$$\underline{n} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta) \quad (7.26)$$

(7.19) est calculée pour ϕ et θ compris entre 0 et π et nous en cherchons le minimum.

Dans un premier temps, le cas élastique (i.e. $\underline{\varepsilon}^p=0$) est revu. Les sections suivantes traitent successivement les cas de déformations plastiques dans la matrice dues à des chargements suivant $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ puis $\langle 111 \rangle$. Toutes les simulations ont été menées à partir des valeurs numériques du tableau 7.2. Les résultats sont présentés sous formes de figures de pôle (projection stéréographique). La dernière section discute les résultats obtenus.

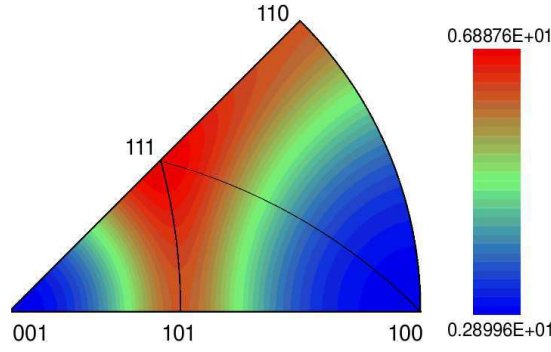


FIG. 7.12. Energie élastique $\frac{1}{2}B(\underline{n})$ en unité $C_{44}\varepsilon^T$ en fonction de l'orientation cristallographique dans le cas élastique.

7.4.2 Cas élastique

Avant de nous intéresser à l'étude de chargements plus ou moins complexes, regardons brièvement l'énergie élastique de la microstructure sans déformation plastique. Le tenseur de déformation hors contrainte est donc diagonal. C'est un cas particulier du cas analytique traité dans [Khachaturyan 83]. On s'attend à obtenir les minima d'énergie élastique suivant les directions cubiques $\langle 001 \rangle$ car nous considérons une anisotropie élastique négative [Khachaturyan 83]. C'est ce que montre la figure 7.12, sur laquelle on peut constater que les orientations $[001]$ et $[100]$ sont équivalentes. Par symétrie, l'orientation $[010]$ est également un minimum d'énergie élastique.

7.4.3 Chargements suivant l'orientation $[001]$

Il s'agit du cas le plus étudié dans la littérature. Les cas de chargements de traction et de compression sont étudiés successivement.

Traction suivant $[001]$

Pour un chargement de traction suivant l'orientation $[001]$, la loi de Schmid prévoit l'activation de 8 systèmes de glissement avec un facteur de Schmid de $1/\sqrt{6}$. Le modèle de comportement cristallin prévoit un tenseur de déformation plastique de la forme :

$$\underline{\varepsilon}^p = \frac{8}{\sqrt{6}}\gamma \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (7.27)$$

où γ est le glissement sur les systèmes de glissement activés. Posons $\frac{8}{\sqrt{6}}\gamma = \varepsilon_0^p$; le tenseur de déformation hors contrainte s'écrit donc :

$$\underline{\varepsilon}^* = \begin{bmatrix} \varepsilon^T - \frac{\varepsilon_0^p}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^T - \frac{\varepsilon_0^p}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon^T + \varepsilon_0^p \end{bmatrix} \quad (7.28)$$

La figure 7.13 montre l'évolution des angles ϕ_0 et θ_0 correspondant au minimum d'énergie élastique en fonction de la déformation plastique. La figure 7.14 présente l'énergie élastique en fonction de l'orientation de la microstructure.

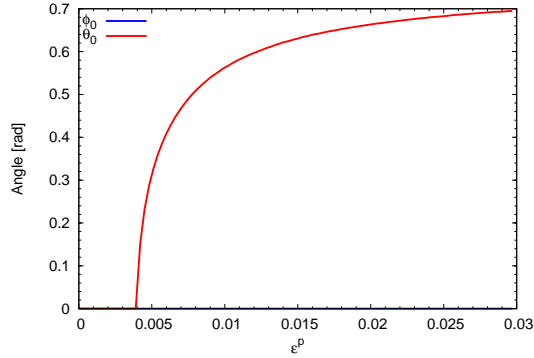


FIG. 7.13. Evolution des angles ϕ_0 et θ_0 en fonction de la déformation plastique pour un chargement de traction suivant [001].

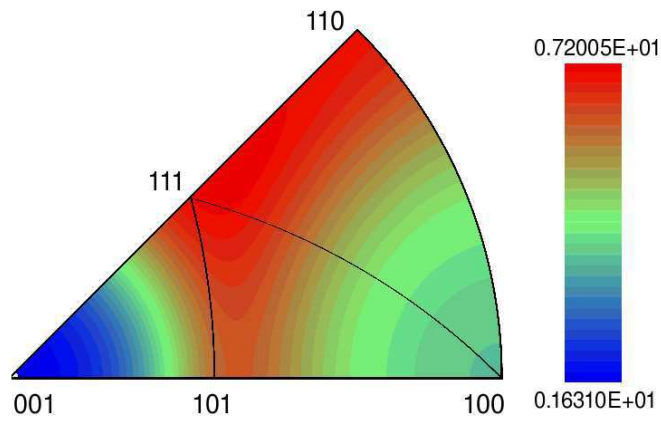
Pour de faibles déformations plastiques, les angles θ_0 et ϕ_0 sont égaux à 0 comme le montre la figure 7.13. La microstructure est donc constituée de plaquettes normales à l'orientation [001]. Comme le montre la figure 7.14(a), les trois directions cubiques ne sont plus équivalentes dès que la déformation plastique est non nulle. Ce résultat est en accord avec les microstructures observées en fluage traction suivant l'orientation [001] [Tien 71, Fredholm 87, Ayrault 89]. En effet, dans ce cas, nous avons observé des radeaux perpendiculaires à la direction du chargement.

Pour une déformation plastique plus importante, à partir de ε_0^p égal à 0.004, l'angle θ_0 augmente. La direction de plus faible énergie élastique varie ainsi progressivement de [001] à [101], ou [011] par symétrie. Conformément à l'étude analytique des minima d'énergie élastique dans le cas d'un tenseur de déformation hors contrainte tétragonal [Khachaturyan 83], le changement de régime coïncide avec le changement de signe des composantes 11 et 22, soit $\varepsilon_0^p = 2\varepsilon^T$. Des résultats de prédictions de l'orientation de la microstructure équivalents ont été trouvés avec un formalisme similaire dans [Tanaka 08]. D'après les auteurs, l'évolution des directions qui minimisent l'énergie élastique pour des déformations plastiques importantes explique la désorientation des radeaux durant le stade de fluage tertiaire.

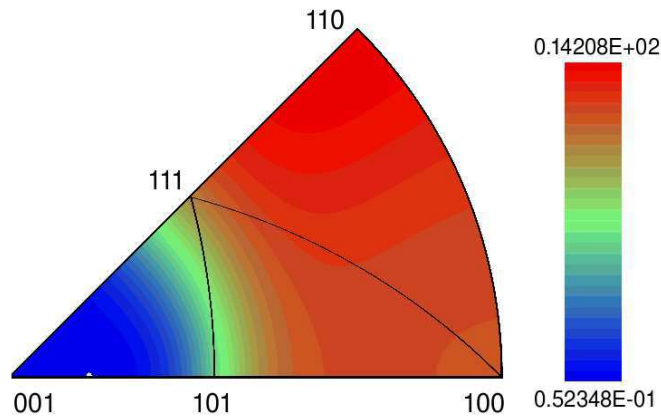
Notons que l'évolution de l'angle θ_0 après le changement de régime est très rapide, ce qui est compatible avec une déstabilisation brutale des radeaux. Cependant, le seuil critique de déformation plastique pour lequel on observe une déstabilisation des radeaux prédit par le modèle est beaucoup plus faible que celui observé expérimentalement. En effet, en fluage traction suivant $\langle 001 \rangle$, la déstabilisation des radeaux intervient à la fin du stade de fluage secondaire, soit pour une déformation plastique de l'ordre de 2%. Notre modèle prévoit un changement de régime pour une déformation plastique égale à 2 fois la déformation hors contrainte due au misfit. Il y a donc un facteur 10 entre la valeur expérimentale et la valeur prévue par le modèle. Cet écart peut provenir du fait que la diffusion nécessaire pour passer d'une orientation des radeaux à une autre n'est pas prise en compte dans le modèle. De plus, même avant la déstabilisation des radeaux observée pendant le fluage tertiaire, les radeaux ne sont pas parfaitement alignés par rapport aux directions cubiques. Ces légères désorientations peuvent être expliquées par l'activité plastique d'après notre modèle.

Compression suivant [001]

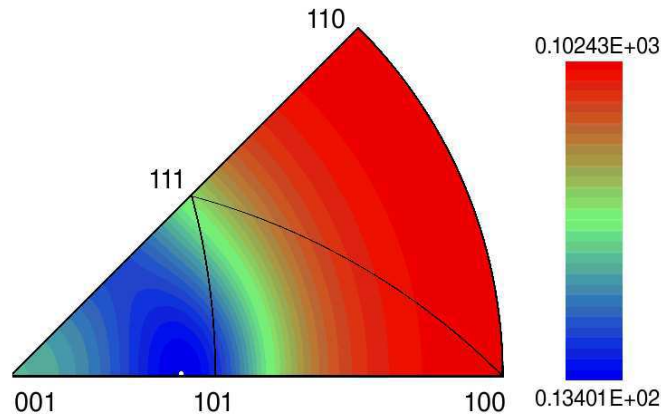
Étudions maintenant le cas de la compression. La déformation hors contrainte effective est toujours donnée par (7.28), mais cette fois ε_0^p est négatif. On obtient également deux régimes comme on peut le voir sur la figure 7.15. Le premier régime correspond aux faibles déformations plastiques. Durant ce régime, les directions de plus faible énergie élastique sont [100], et par symétrie [010], comme le montre la figure 7.16(a). La microstructure qui minimise l'énergie élastique est donc constituée de plaquettes normales aux directions x ou y ou bien d'aiguilles allongées dans la direction z .



(a) Déformation plastique $\varepsilon^p = 0.001$



(b) Déformation plastique $\varepsilon^p = 0.005$



(c) Déformation plastique $\varepsilon^p = 0.02$

FIG. 7.14. Projection stéréographique de l'énergie élastique $\frac{1}{2}B(\mathbf{n})$ suivant le pôle [001] pour un chargement de traction suivant [001]. Trois valeurs de déformation plastique sont considérées : $\varepsilon^p = 0.001, 0.005$ et 0.02 . Les valeurs d'énergie élastique indiquées sont en unité $C_{44}\varepsilon^T{}^2$. Le point blanc correspond à la position de l'orientation optimale.

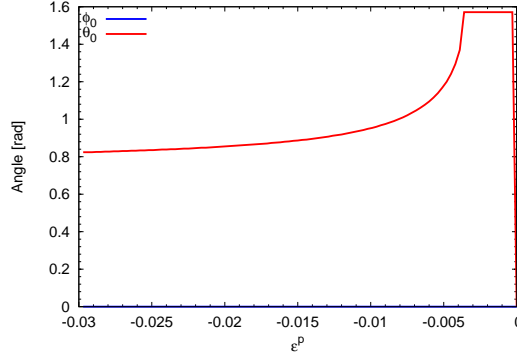


FIG. 7.15. Evolution des angles ϕ_0 et θ_0 en fonction de la déformation hors contrainte pour un chargement de compression suivant [001].

Pour des déformations plastiques plus importantes, ϕ_0 reste nul mais θ_0 varie de $\frac{\pi}{2}$ à $\frac{\pi}{4}$ environ. La microstructure passe donc progressivement de plaquettes normales à [100] ou [010] à des plaquettes normales à [101] ou [011] lorsque la déformation plastique augmente.

Le changement de régime s'effectue pour $\frac{\varepsilon_{11}^*}{\varepsilon_{33}^*} \approx -2.5$. On retrouve les résultats analytiques de [Khachaturyan 83]. En effet, quand ε_0^p est faible, $t_1 = \frac{\varepsilon_{11}^*}{\varepsilon_{33}^*}$ varie entre 1 et ∞ , t_1 tendant vers ∞ quand ε_0^p s'approche de ε^T . Le dénominateur de t_1 s'annule pour $\varepsilon_0^p = \varepsilon^T$ puis t_1 passe négatif tendant vers $-\infty$. D'après [Khachaturyan 83], le changement de régime s'effectue alors pour :

$$t_1 = -\frac{c_{11} + c_{12}}{c_{12}} \approx -2.37 \quad (7.29)$$

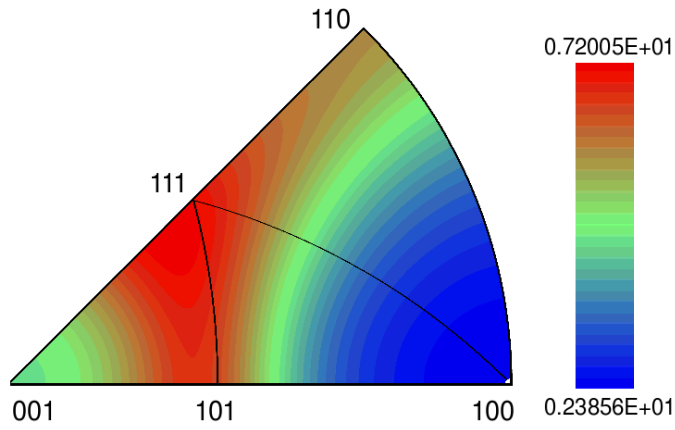
soit pour une déformation plastique $\varepsilon_0^p \approx 1.87\varepsilon^T$. La valeur critique de changement de régime est donc légèrement plus faible en compression qu'en traction.

Les prédictions de ce modèle concernant l'orientation de la microstructure en compression pour les faibles déformations plastiques sont en accord avec les résultats expérimentaux en fluage compression obtenus dans ce travail (cf. chapitre 4) et dans [Tien 71]. En effet, ces travaux montrent la formation d'aiguilles parallèles à la contrainte, ce qui est compatible avec l'analyse présentée ici. Enfin, il est intéressant de noter que, pour de fortes déformations plastiques, les chargements de traction et de compression suivant [001] conduisent tous deux à la formation de plaquettes normales aux directions [101] et [011]. Ce résultat n'est pas étonnant si l'on observe la forme du tenseur de déformation hors contrainte effectif. En effet, si la déformation plastique est suffisamment importante, la déformation hors contrainte devient négligeable et on obtient un tenseur de déformation hors contrainte effectif identique dans les deux cas (traction et compression) au signe près.

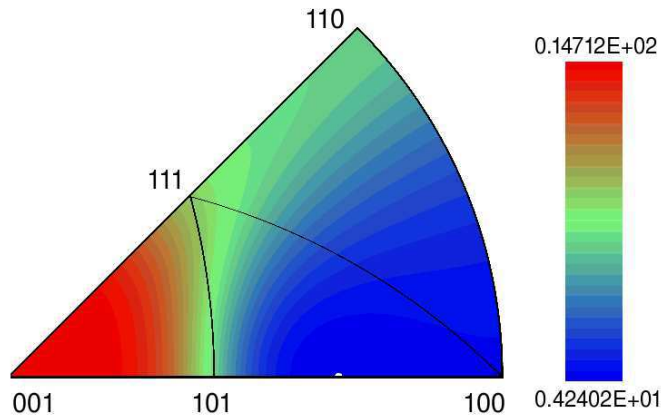
7.4.4 Chargements suivant l'orientation [011]

Dans ce cas, l'activation des systèmes de glissement octaédriques conduit au tenseur de déformation plastique suivant :

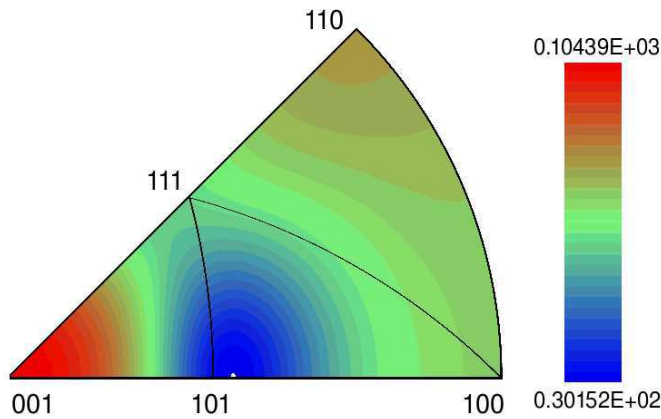
$$\varepsilon^p = \begin{bmatrix} -\varepsilon_0^p & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\varepsilon_0^p}{2} & \frac{\varepsilon_0^p}{2} \\ 0 & \frac{\varepsilon_0^p}{2} & \frac{\varepsilon_0^p}{2} \end{bmatrix} \quad (7.30)$$



(a) Déformation plastique $\varepsilon^p = 0.001$



(b) Déformation plastique $\varepsilon^p = 0.005$



(c) Déformation plastique $\varepsilon^p = 0.02$

FIG. 7.16. Projection stéréographique de l'énergie élastique $\frac{1}{2}B(\mathbf{n})$ suivant le pôle [001] pour un chargement de compression suivant [001]. Trois valeurs de déformation plastique sont considérées : $\varepsilon^p = -0.001, -0.005$ et -0.02 . Les valeurs d'énergie élastique indiquées sont en unité $C_{44}\varepsilon^T{}^2$. Le point blanc correspond à la position de l'orientation optimale.

où on a posé $\varepsilon_0^p = \frac{4}{\sqrt{6}}\gamma$. Pour les systèmes de glissement activés dans ce cas, on peut se référer au tableau 3.3. Le tenseur de déformation hors contrainte s'écrit donc :

$$\underline{\varepsilon}^* = \begin{bmatrix} \varepsilon^T - \varepsilon_0^p & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^T + \frac{\varepsilon_0^p}{2} & \frac{\varepsilon_0^p}{2} \\ 0 & \frac{\varepsilon_0^p}{2} & \varepsilon^T + \frac{\varepsilon_0^p}{2} \end{bmatrix} \quad (7.31)$$

Comme précédemment, nous considérons successivement le cas de la traction puis de la compression.

Traction suivant [011]

La figure 7.17 montre l'existence de trois régimes. Le premier régime correspond à de faibles déformations plastiques. Dans ce cas, la figure 7.17(a) montre que le minimum d'énergie élastique se situe pour des plaquettes de normale proche des directions [001] ou [010]. Le deuxième régime se situe entre $\varepsilon_0^p = 0.001$ et $\varepsilon_0^p = 0.005$. Dans ce régime, les deux minima d'énergie élastique sont proches de l'orientation [011]. Enfin, à partir de $\varepsilon_0^p = 0.005$ on passe à un minimum proche de [111] et un autre proche de $[\bar{1}11]$.

Ces résultats sont en accord avec les microstructures observées à l'issue d'essais de fluage traction suivant [011]. [Ayrault 89] notamment met en évidence l'existence de trois systèmes de plaquettes sous de telles conditions de fluage, deux familles de normales [001] et [010] et une troisième famille de normale [011] qui est en fait la combinaison des deux précédentes. Nos micrographies ont montré les mêmes résultats. Nous retrouvons qualitativement les résultats expérimentaux.

Compression suivant [011]

On retrouve en compression suivant [011] trois régimes tout comme en traction (voir figure 7.18). Pour les faibles déformations plastiques, la direction qui minimise l'énergie élastique est la direction [100]. La déformation plastique augmentant, le modèle prévoit une orientation de normale de type $[1\alpha\alpha]$ avec α compris entre 0 et 1. Par conséquent, pour les fortes déformations plastiques, le minimum d'énergie élastique se trouve proche de l'orientation [111].

7.4.5 Chargements suivant l'orientation [111]

Dans ce cas, le modèle de comportement cristallin prévoit un tenseur de déformation plastique de la forme :

$$\underline{\varepsilon}_0^p = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_0^p & \varepsilon_0^p \\ \varepsilon_0^p & 0 & \varepsilon_0^p \\ \varepsilon_0^p & \varepsilon_0^p & 0 \end{bmatrix} \quad (7.32)$$

Pour cette orientation, la forme du tenseur de déformation plastique est la même que l'on considère les systèmes octaédriques ou les systèmes cubiques. Le tenseur de déformation hors contrainte s'écrit donc :

$$\underline{\varepsilon}^* = \begin{bmatrix} \varepsilon^T & \varepsilon_0^p & \varepsilon_0^p \\ \varepsilon_0^p & \varepsilon^T & \varepsilon_0^p \\ \varepsilon_0^p & \varepsilon_0^p & \varepsilon^T \end{bmatrix} \quad (7.33)$$

La figure 7.19 montre l'énergie élastique pour deux valeurs de déformation plastique. Pour une faible déformation plastique, les directions qui minimisent $B(\underline{n})$ sont proches des directions cubiques. Quand on augmente la déformation plastique, les orientations optimales se déplacent vers la direction [111]. Il en résulte une vaste plage d'orientations énergétiquement proches. Dans ce cas, on ne s'attend pas à voir apparaître de forte anisotropie dans la microstructure. Un comportement similaire est observé en compression mais les directions qui minimisent $B(\underline{n})$ tendent cette fois à s'éloigner de la direction de traction.

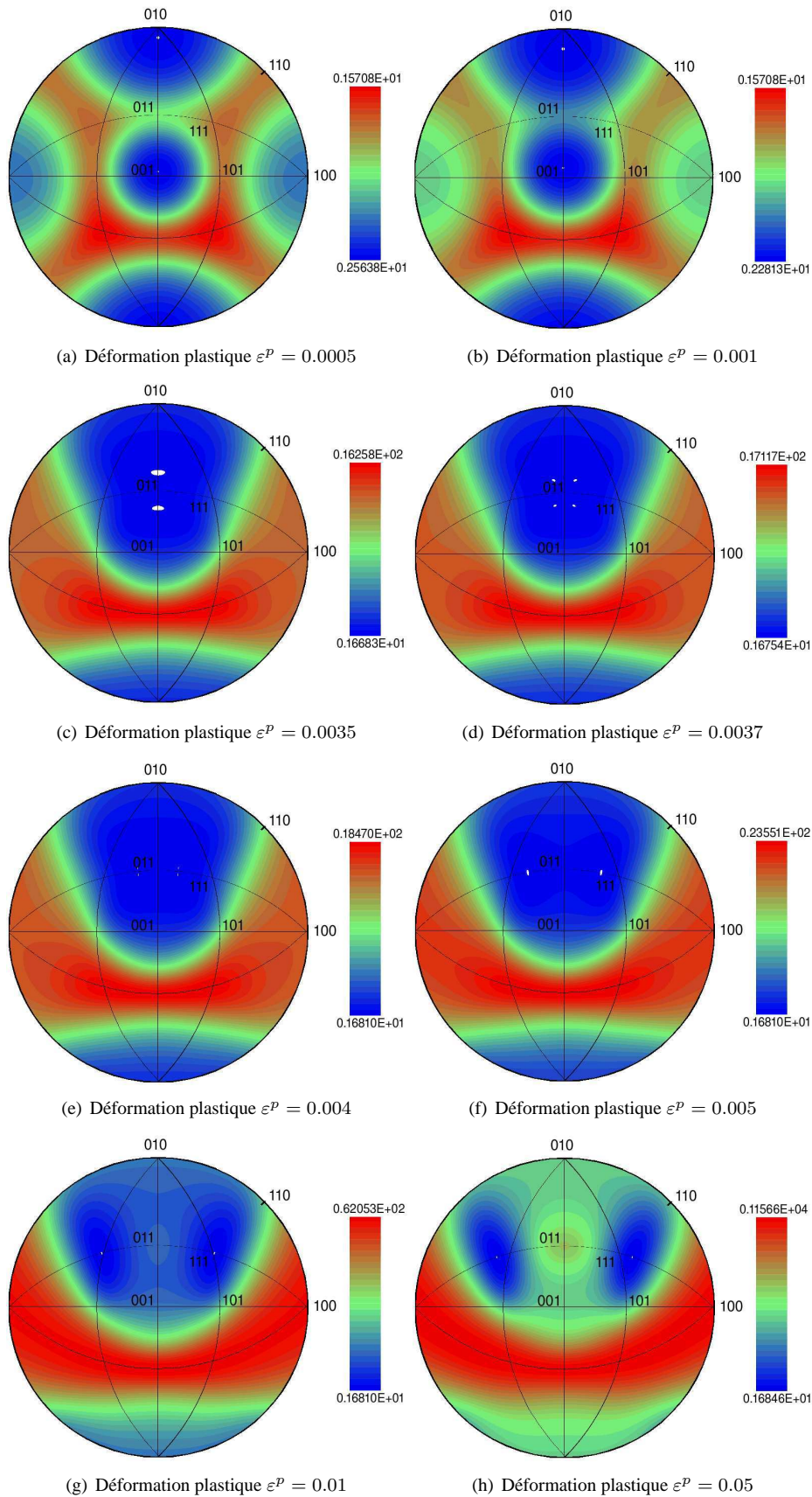


FIG. 7.17. Projection stéréographique de l'énergie élastique suivant le pôle [001] pour un chargement de traction suivant [011]. Les valeurs d'énergie élastique indiquées sont en unité $C_{44}\varepsilon^2$.

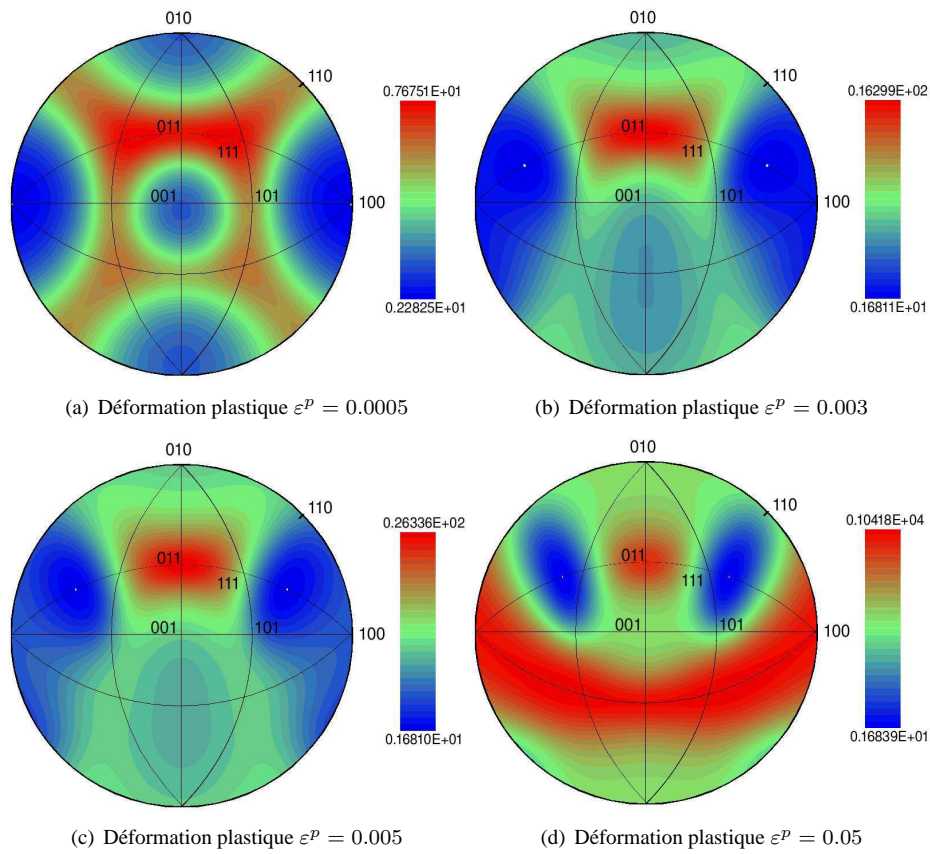


FIG. 7.18. Projection stéréographique de l'énergie élastique suivant le pôle [001] pour un chargement de compression suivant [011]. Les valeurs d'énergie élastique indiquées sont en unité $C_{44}\varepsilon^T{}^2$.

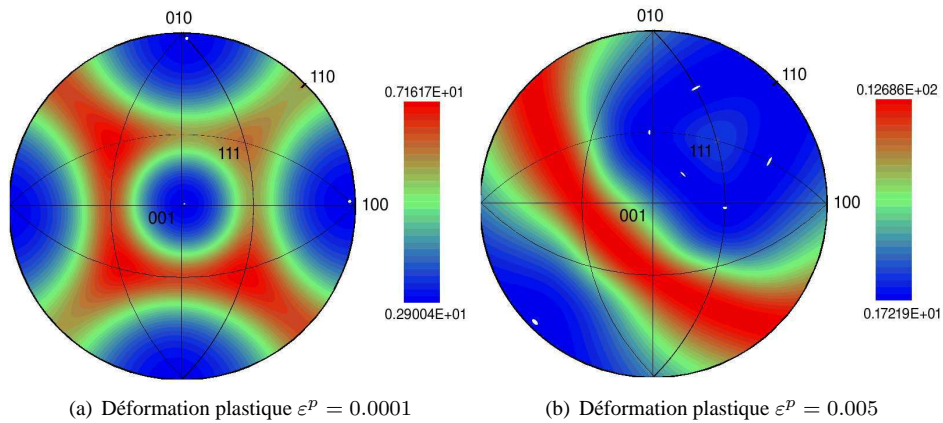


FIG. 7.19. Projection stéréographique de l'énergie élastique suivant le pôle [001] pour un chargement de traction suivant [011]. Les valeurs d'énergie élastique indiquées sont en unité $C_{44}\varepsilon^T{}^2$.

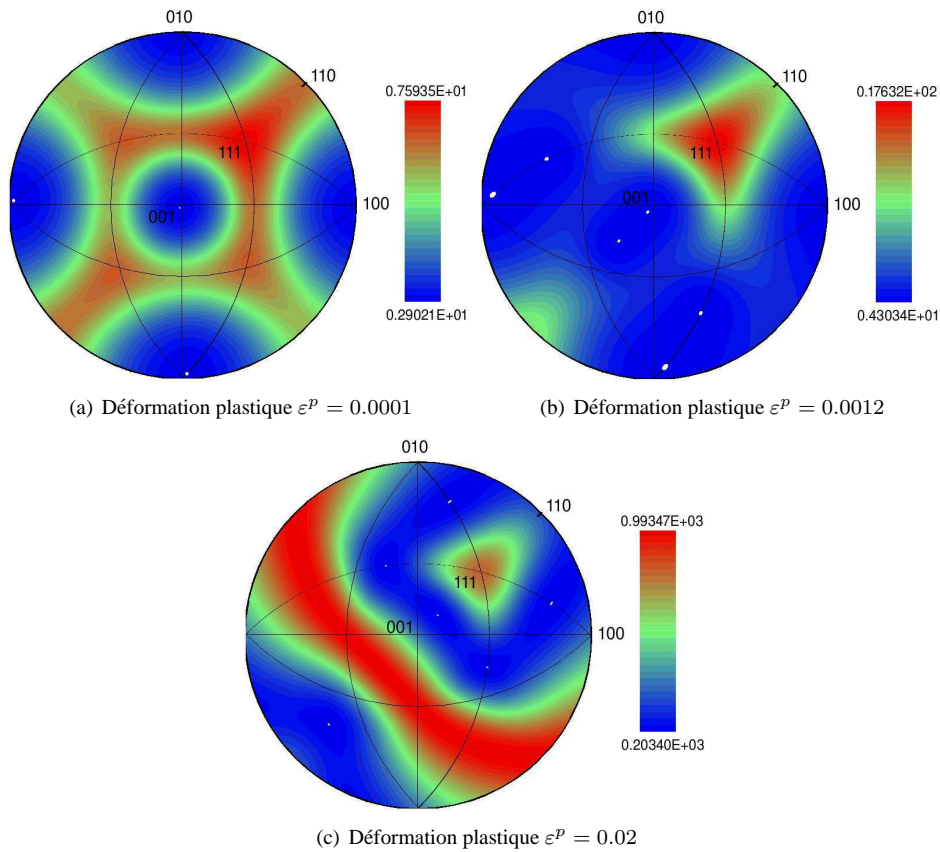


FIG. 7.20. Projection stéréographique de l'énergie élastique suivant le pôle [001] pour un chargement de compression suivant [111]. Les valeurs d'énergie élastique indiquées sont en unité $C_{44}\varepsilon^T{}^2$.

7.4.6 Discussion

Nous avons étudié à l'aide d'un modèle simple l'orientation que prend la microstructure sous des chargements de traction et de compression suivant différentes orientations cristallographiques. Ce modèle est basé sur une minimisation de l'énergie élastique en présence de déformations plastiques. Il montre que l'activité plastique modifie les orientations qui minimisent l'énergie élastique.

Pour de faibles déformations plastiques, notre modèle permet, pour chaque chargement et orientation étudiés, de retrouver les résultats expérimentaux en fluage à haute température. Il permet également de prévoir l'orientation de la microstructure pour des valeurs de déformation plastique plus importantes. Ainsi, en traction et en compression suivant [001], nous trouvons avec ce modèle que la microstructure s'oriente à environ 45° par rapport à l'axe de chargement. Ce résultat permet d'expliquer la désorientation des radeaux en fluage tertiaire. Il permet également de comprendre l'obtention de radeaux orientés à 45° en fatigue alternée. En effet un chargement de fatigue met en jeu d'importantes déformations plastiques en traction et en compression. Notre modèle prévoit dans les deux cas une microstructure orientée à 45° par rapport à l'axe de sollicitation. Enfin, il permet d'interpréter les résultats expérimentaux rapportés dans [Touratier 09]. Dans cet article, les auteurs montrent qu'ils obtiennent, dans des zones de fortes déformations et quel que soit le signe de la contrainte, une coalescence à 45° .

Pour les orientations [011] et [111], les dépouillements sont plus difficiles à effectuer. Pour la direction [011], on obtient un déplacement des minima d'énergie élastique vers la direction [011] puis vers la direction [111]. Nous retrouvons des plaquettes orientées suivant [011] dans les micrographies réalisées à l'issue d'un essai de fluage. L'orientation de la microstructure suivant la direction [011] a également été obtenue par simulation champs de phases au chapitre 5. En revanche, les micrographies réalisées à l'issue des vieillissements cycliques suivant cette orientation ne permettent pas de mesurer des angles précis. Pour l'orientation [001], la microstructure observée après un vieillissement en fatigue alternée tranche avec les microstructures de fluage. Ce n'est pas le cas des autres orientations étudiées. Pour [111], la modélisation est compatible avec une microstructure relativement isotrope.

Il pourrait être intéressant de réaliser les mêmes essais que dans [Touratier 09] mais pour les orientations [011] et [111] afin de valider les résultats du modèle proposé ici. Les essais proposés dans [Touratier 09] mettent en jeu de fortes déformations ce qui pourrait permettre de distinguer les différents modes d'orientation des précipités mis en évidence par notre modèle.

7.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons proposé deux modèles. Le premier modèle développé traduit de façon macroscopique l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique. Il s'agit d'une extension du modèle de Cailletaud. Nous avons vu que la prise en compte de l'élargissement des couloirs de matrice généré pendant la mise en radeaux permet de simuler le comportement mécanique de l'AM1 après mise en radeaux en fluage suivant les orientations $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Néanmoins, de part les hypothèses simples retenues pour ce modèle, un certain nombre de phénomènes ne sont pas pris en compte. Nous avons négligé l'influence de la mise en radeaux sur la viscosité. Ce phénomène a été mis en évidence à 1050°C . De plus nous avons négligé l'influence de l'orientation des radeaux et, de ce fait, l'adoucissement généré par un vieillissement cyclique est sous-estimé.

C'est pourquoi nous avons proposé un second modèle qui permet de prévoir l'orientation de la microstructure suivant la direction du chargement. Il est basé sur une minimisation de l'énergie élastique en présence de déformation plastique. Nous avons vu que cette approche permet de retrouver les résultats expérimentaux en fluage. Il prévoit également une orientation de la microstructure à 45° pour une déformation plastique importante suivant $\langle 001 \rangle$. Ce modèle demanderait à être validé suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ par des essais similaires à ceux proposés dans [Touratier 09] pour l'orientation $\langle 001 \rangle$. De plus, ce modèle n'est que qualitatif dans le sens où les valeurs de déformations plastiques pour lesquelles telle ou telle orientation de la microstructure est observée ne sont que qualitatives.

Ce second modèle pourrait servir de base à une modélisation de l'orientation de la microstructure dans le cadre d'un modèle de comportement macroscopique. En effet, il montre que la prise en compte de la nature biphasée de l'alliage dans le calcul de l'énergie élastique permet de prévoir l'orientation de la microstructure.

Conclusion générale et perspectives

Synthèse

Dans ce mémoire de thèse, nous avons étudié le comportement mécanique du superalliage base nickel monocristallin AM1. Nous nous sommes focalisés sur l'influence d'évolutions microstructurales survenant à haute température sous chargement mécanique, classiquement connues sous le nom de mise en radeaux ou coalescence orientée. Ce phénomène et ses conséquences sur le comportement mécanique à haute température ont été étudiés d'un point de vue expérimental, et, en parallèle grâce à des simulations numériques à l'échelle mésoscopique.

Dans un premier temps nous nous sommes intéressés au comportement mécanique du matériau non-vieilli (chapitre 2). Les modèles de comportement macroscopiques utilisés pour la simulation du comportement des superalliages ont été présentés. Sur la base d'essais sur le matériau non-vieilli couvrant tout le domaine de vitesses de sollicitation 10^{-9} - 10^{-1} s $^{-1}$ à 950°C, nous avons montré que le modèle de comportement utilisé à l'Onera [Méric 91] ne permet pas une description suffisante des phénomènes de viscosité. Les essais ont mis en évidence une saturation de la contrainte visqueuse à haute vitesse et une importante relaxation de la contrainte sous maintien à déformation constante. Nous avons proposé l'utilisation d'un modèle de viscosité de type sinus hyperbolique combiné à une diminution importante du seuil de plasticité afin d'améliorer la description du comportement sous les vitesses de sollicitation considérées.

Le comportement du superalliage a également été étudié à l'échelle mésoscopique grâce à des simulations par éléments finis (chapitre 3). Les paramètres matériau d'un modèle de comportement cristallin ont été calibrés pour chacune des deux phases composant le superalliage afin de retrouver la réponse macroscopique de l'alliage biphasé. Nous avons vu que le comportement des phases massives est très différent de celui qu'elles ont dans le matériau biphasé. Cette approche permet de reproduire le comportement de l'AM1 sous différentes conditions de chargement (traction et torsion suivant différentes orientations cristallographiques) mais sans rendre d'effet d'échelle de la microstructure.

Le chapitre 4 a été consacré à l'étude expérimentale du phénomène de mise en radeaux. L'étude bibliographique a mis en évidence les forces motrices sur la coalescence orientée ainsi que ses conséquences sur le comportement mécanique des superalliages. Nous avons étudié diverses conditions de vieillissement : en fluage sous différentes températures, contraintes et orientations cristallographiques mais aussi sous chargement cyclique alterné lent. Les essais de comportement réalisés à la suite de ces vieillissements ont montré que la coalescence orientée conduit à un adoucissement du comportement mécanique de l'AM1. L'effet principal porte sur l'écroutissage. Nous avons également observé un effet sur la viscosité à 1050°C.

La mise en radeaux a été modélisée à l'échelle mésoscopique à l'aide de la méthode des champs de phases au chapitre 5. Nous avons construit un modèle champs de phases élasto-viscoplastique dans lequel l'activité plastique dans les couloirs de matrice est prise en compte de manière phénoménologique par l'intermédiaire d'un modèle de comportement de type Cailletaud. Les simulations réalisées avec ce modèle ont été comparées aux résultats d'un modèle champs de phases élastique et aux résultats expérimentaux du chapitre 4. Elles montrent qu'en fluage la plasticité influe sur la cinétique de mise en radeaux et sur la forme des précipités. De plus, avec le modèle élasto-viscoplastique, nous avons retrouvé une coalescence orientée

à 45° par rapport à la direction du chargement dans le cas d'un chargement cyclique lent.

Suite aux résultats du chapitre 3 sur la modélisation du comportement de l'AM1 par des simulations à l'échelle de la microstructure, nous avons étudié au chapitre 6 les effets d'échelle prévus par des modèles de mécanique des milieux continus généralisés. Deux modèles ont été considérés, le modèle de Cosserat et le modèle *microcurl* qui, par rapport au modèle de Cosserat, prend en compte le rotationnel de la déformation élastique dans le calcul du tenseur de Nye. Les deux modèles prévoient un écrouissage cinématique linéaire dépendant de la taille de la microstructure. Une étude analytique approfondie a été réalisée sur une microstructure constituée d'une succession périodique d'une phase élastique et d'une phase élasto-plastique. Elle montre que l'on obtient des effets d'échelle en loi puissance l^n avec n compris entre 0 et -2. Les simulations menées sur des microstructure γ/γ' ont montré que l'effet d'échelle obtenu en traction est très faible. Ce résultat est dû au fait qu'en traction, la microrotation est faible et localisée vers les coins du précipité.

Enfin, le septième et dernier chapitre propose une extension du modèle de comportement de Cailletaud qui prend en compte les effets de la mise en radeaux sur le comportement mécanique. Ce modèle permet de rendre compte de l'adoucissement engendré par la mise en radeaux en fluage. En revanche, de part les hypothèses simplistes considérées pour la construction de ce modèle, il sous-estime l'adoucissement observé après mise en radeaux sous chargement cyclique lent. Un second modèle est proposé. Il est basé sur une minimisation de l'énergie élastique en présence de déformation plastique. Il permet de prévoir l'orientation de la microstructure suivant la direction du chargement. Ce modèle permet de retrouver les résultats obtenus en fluage. Il permet également d'expliquer la déstabilisation des radeaux en fluage tertiaire et l'obtention d'une microstructure orientée à 45° sous chargement cyclique.

Perspectives

Ce travail embrasse un panorama multi-échelles du comportement des superalliages à base de nickel. Il ouvre de nombreuses perspectives notamment de connection entre les différentes échelles d'étude.

Modélisation macroscopique du comportement

Comme nous l'avons souligné, le modèle de comportement macroscopique proposé pour la prise en compte de l'influence de la coalescence orientée possède un certain nombre de limites. Nous disposons d'une base de données expérimentales relativement complète sur l'influence de la mise en radeaux sur le comportement mécanique. Nous avons mis en évidence une influence de la mise en radeaux sur la viscosité à 1050°C. Celle-ci est négligeable à 950°C. Ce résultat mériterait d'être confirmé par des essais complémentaires. De plus, une étude fine des mécanismes de déformation plastique à cette température serait nécessaire pour comprendre ce résultat.

Une deuxième limitation du modèle de comportement proposé concerne l'orientation des précipités. Les essais ont montré que, pour les orientations $\langle 001 \rangle$ et $\langle 011 \rangle$, un chargement cyclique alterné lent modifie l'orientation de la microstructure. Il semblerait que cette évolution de l'orientation explique le comportement adouci du matériau dans ce cas. Il faudrait donc pouvoir intégrer au modèle de comportement macroscopique l'évolution de l'orientation de la microstructure. Enfin, la coalescence isotrope des précipités proposée dans [Fedelich 08] devra être prise en compte pour de longs temps de maintien.

Champs de Phases

Les résultats obtenus lors de ce travail en utilisant un couplage entre une méthode de champs de phases et un modèle de plasticité continu ont démontré l'intérêt de cette démarche dans les superalliages. Toutefois, certains points restent encore à améliorer. Notamment, il faudrait pouvoir contrôler les concentrations d'équilibre en présence de plasticité. Une adaptation de la méthode de contrôle des concentrations de

l'équilibre cohérent proposée dans [Boussinot 07] ou une augmentation de la courbure de l'énergie libre près des minima est prévue à court terme. Enfin, comme l'ont montré nos simulations, l'existence de plusieurs variants de la phase γ' implique que les précipités ne coalescent pas vraiment. Il reste de fines bandes de matrice entre les précipités de variants différents. Les observations expérimentales, principalement réalisées au MEB, tendent à montrer que les précipités γ' peuvent coalescer même s'ils sont en relation d'antiphase. Ce comportement résulterait de l'activité plastique agissant dans les couloirs de phase γ . Un couplage entre paramètres d'ordre et plasticité serait nécessaire pour prendre en compte ce phénomène dans les simulations champs de phases.

Une des faiblesses du modèle champs de phases actuel est que le comportement viscoplastique de la phase γ à l'intérieur d'un couloir ne change pas quand la largeur du couloir évolue. La prise en compte de ce phénomène nécessite de coupler la méthode champs de phases avec un modèle de comportement viscoplastique contenant une échelle de longueur. Pour pouvoir rendre compte d'effets d'échelle, il faudrait utiliser les modèles de mécanique des milieux continus généralisés étudiés au chapitre 6. Dans nos simulations champs de phases, nous avons utilisé un modèle correspondant au comportement de la phase γ en radeaux. Un couplage entre champs de phases et mécanique des milieux continus généralisés serait nécessaire pour prendre en compte l'influence des effets d'échelle sur l'évolution de la microstructure.

Le modèle pourrait ensuite être exploité pour prévoir les évolutions microstructurales suivant différents cas de chargement. La réalisation de simulations en 3D est envisagée, d'une part avec le modèle élastique pour générer des microstructures cuboïdales et d'autre part avec le modèle élasto-viscoplastique pour l'étude des évolutions microstructurales sous chargement mécanique. Il faudrait réaliser des simulations sur des temps très longs pour voir si ce modèle permet d'obtenir une destabilisation des radeaux à la fin du stade de fluage secondaire. Le modèle de l'orientation de la microstructure en fonction de la déformation plastique construit au chapitre 7 semble indiquer que nous avons tous les ingrédients pour pouvoir observer une destabilisation des radeaux dans les simulations champs de phases. Les microstructures générées par la méthode des champs de phases pourraient également servir de base à des simulations par éléments finis du comportement.

L'utilisation de la méthode des champs de phases pour l'étude de l'évolution microstructurale dans les superalliages va être poursuivie à l'Onera (DMSM et LEM) dans le cadre de deux thèses. La première vise à comprendre l'effet d'incursions à haute température sur le comportement et l'endommagement des superalliages monocristallins. La deuxième thèse s'attachera à réaliser le couplage entre la méthode de champs de phases et un modèle de mécanique des milieux continus généralisés.

Mécanique des milieux continus généralisés

Concernant l'étude des effets d'échelle par la mécanique des milieux continus généralisés, nous proposons les perspectives suivantes. Les deux modèles étudiés conduisent à un écrouissage cinématique linéaire. La modélisation devra être étendue pour permettre l'obtention d'un écrouissage cinématique non-linéaire.

Les simulations réalisées sur une microstructure γ/γ' en traction n'ont montré qu'un très faible effet d'échelle. Il faudrait prendre en compte le fait que la microstructure réelle est moins régulière que celle utilisée pour les simulations. Nous pourrions également étudier l'influence d'une faible désorientation sur l'effet d'échelle. Suivant les résultats sur des microstructure plus réalistes, nous pourrions être amenés à devoir considérer le gradient complet de la déformation plastique comme variable interne. Cette modélisation pose des problèmes d'interprétation physique de la partie non-rotationnelle du gradient. En effet, la partie rotationnelle du gradient est interprétée comme le tenseur densité de dislocations de Nye. Que signifie la partie non-rotationnelle ? Enfin, il serait très intéressant de comparer les modèles de milieux continus généralisés à des simulations de dynamique des dislocations. Les modèles étudiés dans cette thèse prévoient un écrouissage cinématique dépendant de la taille de la microstructure. Est-ce la cas en dynamique des dislocation ou y a-t-il un effet sur l'écrouissage isotrope également ?

Annexe A

Techniques expérimentales

Cette annexe décrit les moyens expérimentaux utilisés pour la réalisation des essais effectués au cours de ce travail. Nous rappelons que ces essais ont été effectués par P. Paulmier. Le premier paragraphe décrit les éprouvettes utilisées pour les essais de comportement. Quant au second paragraphe, il est dédié à la description du dispositif expérimental.

A.1 Eprouvettes

Les éprouvettes ont été usinées à partir de barreaux cylindriques de diamètre 20 mm d'AM1 fournis par Snecma. La figure A.1 montre la géométrie des éprouvettes testées. La partie utile a les caractéristiques suivantes :

- longueur de 14 mm ;
- diamètre de 8 mm.

Le tableau A.1 regroupe les caractéristiques des 20 éprouvettes testées. Pour les éprouvettes orientées suivant $\langle 001 \rangle$, il s'agit d'AM1 bas soufre. En revanche, les éprouvettes orientées suivant $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ sont en AM1 "standard". De plus, pour ces dernières, Snecma n'a pas pu nous fournir l'orientation cristallographique précise. C'est pourquoi, des Laue ont été réalisés afin d'accéder à cette information.

A.2 Dispositif expérimental

Les caractéristiques principales de l'installation et son schéma de fonctionnement sont indiqués sur la figure A.2. La machine de traction-compression est de type électro-hydraulique asservie. L'effort agissant sur l'éprouvette est obtenu par l'intermédiaire d'un vérin hydraulique asservi à paliers hydrostatiques Schenck de ± 4000 daN. La course maximale du vérin est de ± 10 mm et la fréquence de la sollicitation peut atteindre 100 Hz.

La partie asservissement de la machine (PID), associée à une servo-valve de court-circuit, permet des mises en route pratiquement sans à coup (charges < 20 daN). La sollicitation peut être asservie soit en force, soit en déplacement du vérin, soit en déformation par l'intermédiaire d'une jauge ou d'un extensomètre.

Pour la transmission des efforts à l'éprouvette, le système d'amarrage par bridage, mis au point au laboratoire par le passé, permet un montage-démontage pratique et rapide des éprouvettes, et assure l'absence de jeu au passage traction-compression, une bonne linéarité de l'ensemble et un centrage satisfaisant de l'éprouvette et des efforts appliqués.

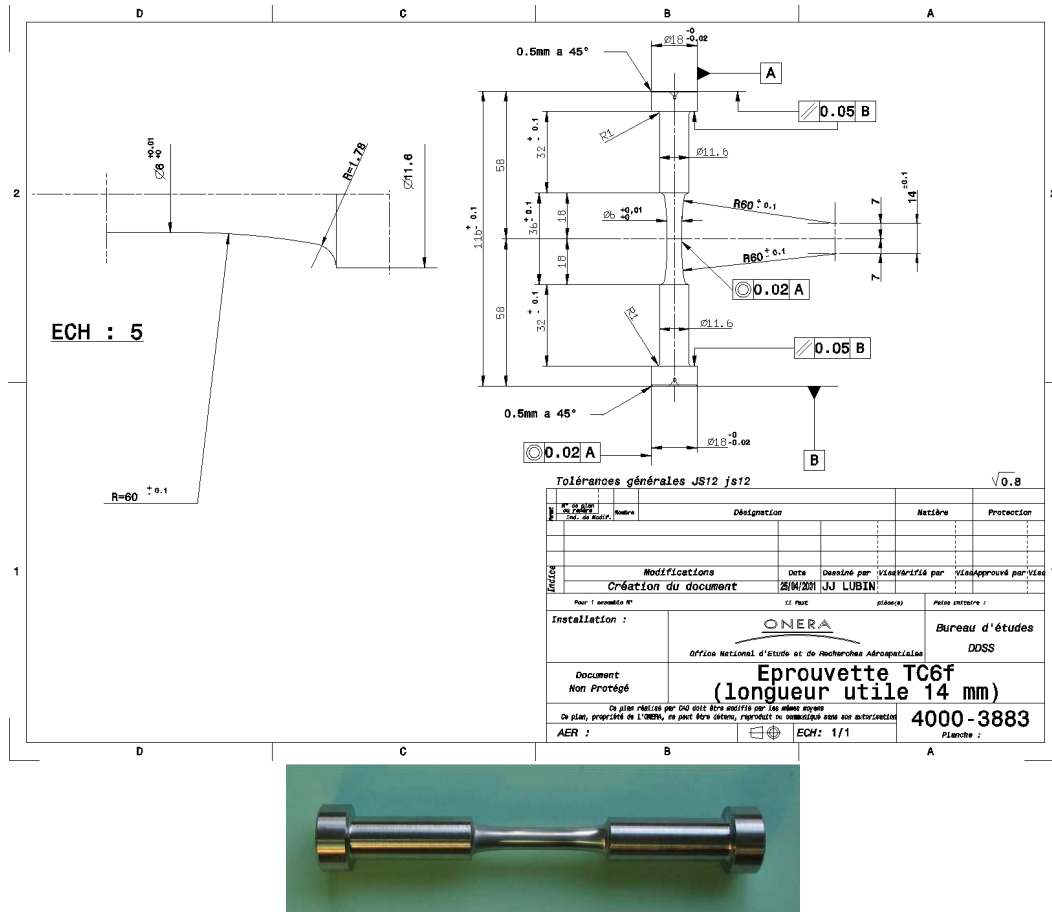
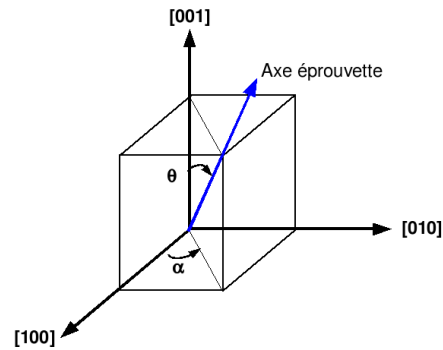


FIG. A.1. Géométrie des éprouvettes.

Eprouvette	Orientation principale	θ [°]	α [°]
X6684-A		3.16	18.20
X6684-B		1.22	75.76
X6684-C		4.04	32.84
X6684-D		2.35	26.91
X6684-E		3.83	44.55
X6684-F		1.58	41.52
X6685-A	$\langle 001 \rangle$	7.46	38.61
X6685-B		2.34	27.23
X6686-A		2.84	12.58
X6686-C		2.04	21.86
X6686-D		7.11	15.16
X6686-E		0.69	1.15
X6686-F		2.25	14.81
X6686-H		1.64	13.81
X2267-A			
X2267-B	$\langle 011 \rangle$		
X2270-C			
X5537-B			
X5537-D	$\langle 111 \rangle$		
X5538-D			



TAB. A.1. Orientation des éprouvettes testées au cours de ce travail. Les angles θ et α sont définis par la figure de droite.

Le chauffage de l'éprouvette est assuré par un système à induction moyenne fréquence qui permet un accès facile à l'éprouvette et une grande dynamique de chauffe. Le chauffage s'obtient par un effet Joule en surface (effet de peau), la distance de pénétration pouvant cependant être ajustée par un choix adéquat de la fréquence ; le coeur de l'éprouvette est alors chauffé par conduction. La difficulté principale est la conception de l'inducteur qui permettra une répartition homogène de la température sur la partie utile de l'éprouvette. La régulation dans le temps est obtenue par un asservissement de type PID au travers d'une mesure effectuée par un thermocouple soudé sur l'éprouvette. Une circulation d'eau à débit constant dans les têtes d'amarrage permet le refroidissement des liaisons avec la machine.

Les efforts qui résultent des sollicitations sur l'éprouvette sont mesurés par un dynamomètre placé en série avec celle-ci. Pour avoir accès à la déformation longitudinale, un extensomètre est placé sur la partie utile de l'éprouvette. Un capteur inductif, placé entre les têtes d'amarrage, donne une mesure fine du déplacement total de l'éprouvette tandis qu'un autre capteur machine, inductif aussi, donne une mesure plus grossière du déplacement du piston.

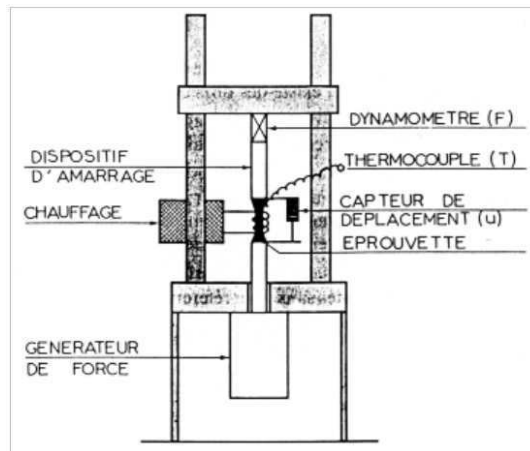
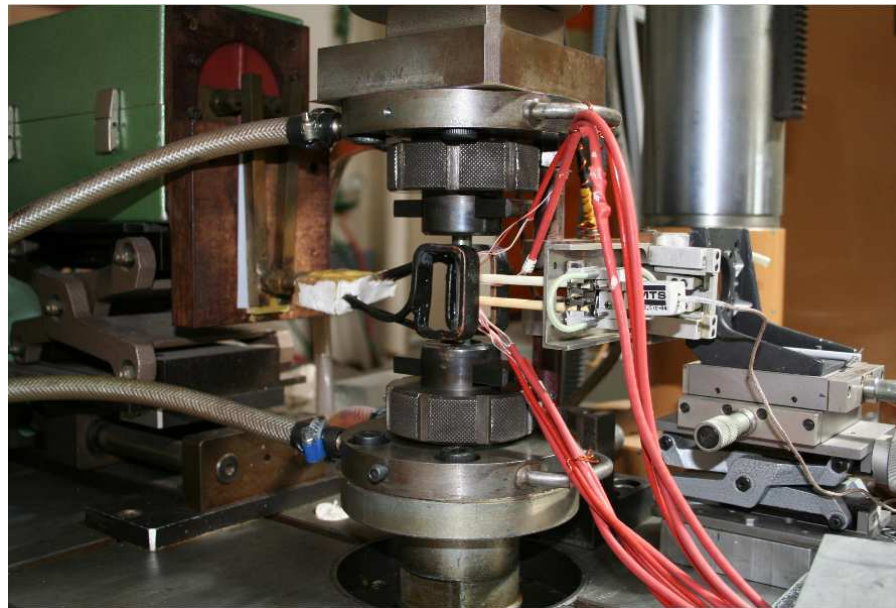


FIG. A.2. Schéma du dispositif expérimental.



(a) Vue générale du dispositif expérimental montrant la machine d'essai et le système de pilotage et d'acquisition.



(b) Vue rapprochée sur l'éprouvette montrant le système de chauffage, l'extensomètre et les thermocouples soudés à l'éprouvette.

FIG. A.3. Dispositif expérimental.

Annexe B

Compléments sur le comportement de l'AM1 sous chargement cyclique répété

Cette annexe a pour but de comprendre un peu mieux ce qu'il se passe en fatigue répétée. L'essai 02 ainsi que les données expérimentales dans [Brien 95, Brien 96, Brien 01a] ont mis en évidence un défaut du modèle de comportement actuel. Il ne permet pas de rendre compte de l'existence d'une contrainte moyenne non nulle sous chargement cyclique répété. Dans la première partie de cette annexe est proposé un calcul analytique mettant en évidence l'existence de contraintes internes dans l'AM1 dues à la nature composite du matériau. Ce sont ces contraintes internes qui sont responsables de la contrainte moyenne observée sous chargement cyclique répété. Ce calcul suggère par conséquent qu'il faut prendre en compte la microstructure du matériau pour une bonne description du comportement mécanique. Dans la deuxième partie, nous montrons que des calculs par éléments finis à l'échelle des phases permettent de reproduire quantitativement les valeurs de contrainte moyenne de l'essai 02 et de [Brien 01a].

B.1 Mise en évidence des contraintes de compatibilité dans l'AM1

Une approche rhéologique du comportement de l'AM1 est utilisée pour mener à bien le calcul. La cellule élémentaire périodique γ/γ' est divisée en 3 zones dans lesquelles les contraintes et les déformations sont supposées constantes (figure B.1). Les déformations dans le précipité sont notées ε_{pr} . Nous négligeons l'effet de Poisson. Dans chaque zone de matrice i , les déformations et contraintes sont ε_i et σ_i . Le comportement de la matrice est supposé élasto-plastique avec σ_0 la limite d'élasticité et H le module d'écrouissage.

Nous nous plaçons à contrainte macroscopique imposée σ_a . Les équations de compatibilité donnent :

$$L\sigma_a = a\sigma_1 + (L - a)\sigma_2 \quad (\text{B.1})$$

$$\varepsilon_{pr} = \frac{\sigma_1}{E} = \varepsilon_2 = \frac{\sigma_2}{E} + \frac{\sigma_2 - \sigma_0}{H} \quad (\text{B.2})$$

La résolution de ce système conduit aux contraintes suivantes :

$$\sigma_2 = \frac{\sigma_a + \frac{E}{H} \frac{a}{L} \sigma_0}{1 + \frac{E}{H} \frac{a}{L}} \quad (\text{B.3})$$

$$\sigma_1 = \left(1 + \frac{E}{H}\right) \frac{\sigma_a + \frac{E}{H} \frac{a}{L} \sigma_0}{1 + \frac{E}{H} \frac{a}{L}} - \sigma_0 \frac{E}{H} \quad (\text{B.4})$$

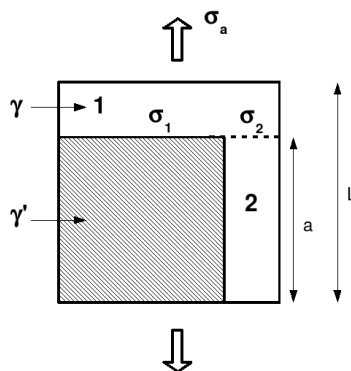


FIG. B.1. Modèle rhéologique de l'AM1.

Application numérique Les contraintes dans chacune des zones sont évaluées numériquement avec le jeu de paramètres suivant :

- $l = 450 \text{ nm}$, $h = 100 \text{ nm}$;
- $E = 90000 \text{ MPa}$, $R_0 = 170 \text{ MPa}$, $H = 160000 \text{ MPa}$;
- $\sigma_a = 500 \text{ MPa}$.

Ces valeurs sont représentatives de l'AM1 à 950°C. Le calcul numérique donne $\sigma_1 = 628 \text{ MPa}$ et $\sigma_2 = 463 \text{ MPa}$. Le calcul présenté ici montre donc qualitativement l'importance des contraintes internes dans l'AM1.

B.2 Simulations de chargements cycliques non symétriques par éléments finis sur la cellule élémentaire γ/γ'

Pour aller plus loin, nous avons effectué des simulations par éléments finis sur une cellule élémentaire γ/γ' . Les paramètres matériaux des phases γ et γ' utilisés ici sont ceux identifiés au chapitre 2. Nous avons simulé deux cas de chargements. Le premier cas correspond au chargement appliqué lors de l'essai 02. Ce chargement est relativement faible et conduit à une contrainte moyenne d'environ 50 MPa. Nous avons également souhaité simuler le comportement du matériau sous un chargement plus important.

B.2.1 Simulation de l'essai 02

Le résultat de la simulation par calcul sur la cellule élémentaire γ/γ' de l'essai 02 est présenté par la figure B.2. Cette simulation met en évidence une contrainte moyenne non nulle de l'ordre de 100 MPa. Néanmoins celle-ci est plus importante que celle obtenue lors de l'essai. De plus, la contrainte moyenne obtenue par simulation semble être stabilisée après 140 cycles, tout comme dans l'essai 02. On peut donc conclure que la simulation est qualitativement en accord avec l'expérience.

L'étude des champs locaux confirme les hypothèses du calcul analytique de la section précédente. En effet, on constate que le précipité reste élastique. On constate également que les contraintes sont relativement uniformes dans chaque type de couloir.

B.2.2 Simulation d'un essai à plus grande amplitude de déformation

Un essai de [Brien 01a] à $\Delta\varepsilon = 0.016$ a également été simulé afin d'étudier la réponse de la simulation éléments finis dans le cas d'une déformation imposée relativement importante. Le calcul de microstructure

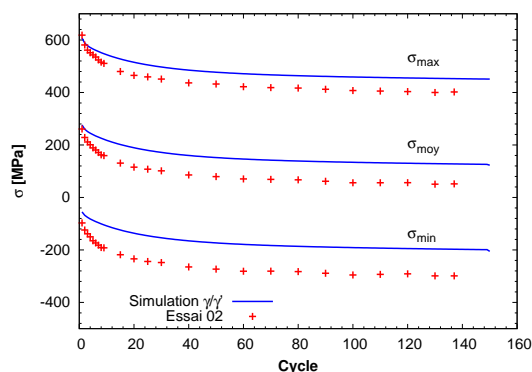
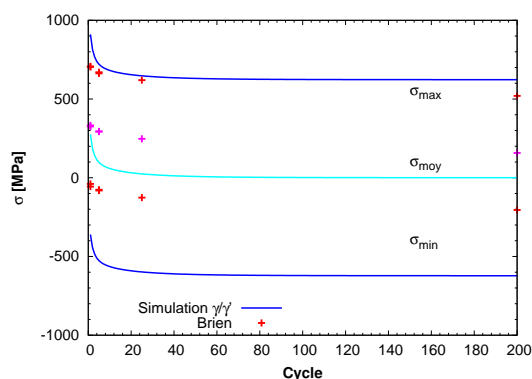


FIG. B.2. Simulation de l'essai 02.

FIG. B.3. Simulation d'un essai de [Brien 01a] à $\Delta\varepsilon = 0.016$ en $R_\varepsilon = 0+$.

prévoit une relaxation de la contrainte moyenne à zéro après environ 20 cycles comme le montre la figure B.3. Au contraire le résultat de l'essai indique, après 200 cycles, une contrainte moyenne d'environ 150 MPa. On constate que la contrainte minimale est, en valeur absolue, sur-estimée par la simulation.

La simulation est donc en désaccord avec les données expérimentales de [Brien 01a]. Une explication peut venir du fait que le matériau s'est endommagé durant cet essai. La figure B.4 présente des données expérimentales en fatigue issues de [Brien 95] et [Le Biavant 01]. On constate que pour une amplitude de déformation de $\Delta\varepsilon = 0.016$ comme appliqué au calcul, l'endommagement après 200 cycles est plus que probable. Cela peut expliquer la contrainte moyenne relevée dans l'essai de [Brien 95]. Pour être sûr, il faudrait avoir les boucles contrainte déformation, ce que nous n'avons pas.

L'analyse des champs de contrainte à l'échelle de la microstructure obtenus au cours de la simulation permet de comprendre la différence entre la réponse de la simulation sous faible déformation imposée et sous forte déformation imposée. Lorsque le chargement est important, les précipités ne sont plus élastiques. L'ensemble du matériau simulé a donc un comportement cinématique non-linéaire ce qui conduit à une relaxation à zéro de la contrainte moyenne.

B.3 Conclusions

Cette annexe a mis en évidence l'existence de contraintes internes importantes dans le matériau sous faible chargement imposé. Celles-ci induisent une contrainte moyenne non nulle sous chargement cyclique

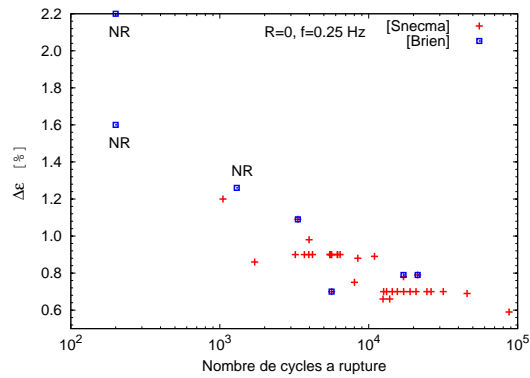


FIG. B.4. Nombre de cycles à rupture en fonction de l'amplitude de déformation imposée (NR = non rompu).

répété de faible amplitude. Des modélisations prenant en compte la nature composite du matériau, qu'elles soient analytiques ou par des éléments finis, permettent de rendre compte de ces contraintes internes.

Se pose alors la question de la modélisation, en terme de modèle macroscopique, de la non-relaxation de la contrainte moyenne à 0 pour des chargements cycliques répétés de faible amplitude. Chaboche et Jung [Chaboche 97] ont développé un modèle d'écrouissage cinématique à seuil dans ce but. La superposition de plusieurs termes d'écrouissage cinématiques non-linéaires de ce type permet alors de modéliser la non-relaxation de la contrainte moyenne à zéro. Ce type de modèles a été mis en oeuvre dans le cadre du PRD DDV froid pour la modélisation du comportement des matériaux pour disque (INCO 718, Ta6V et N18).

Dans le cas des superalliages monocristallins tel que l'AM1, une autre voie de modélisation peut être envisagée. Comme nous l'avons montré dans cette annexe, la prise en compte de la microstructure permet de rendre compte de la non relaxation à zéro de la contrainte moyenne sous chargement cyclique répété de faible amplitude. Des modèles tels que celui de Fedelich [Fedelich 02, Tinga 08, Svoboda 96, Svoboda 00], prenant explicitement en compte la nature biphasée de l'alliage, doivent en théorie être capables de rendre compte de ce phénomène.

Annexe C

Dépouillement de l'essai 09 suite

Pour cet essai, les vitesses de sollicitation nous ont obligé à travailler en déplacement imposé. La détermination de la déformation demande donc un traitement des données. Nous décrivons ici la méthode employée.

C.1 Calcul de la déformation à partir du déplacement

Soit $\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p$. Nous avons les relations suivantes :

$$L_T = \frac{F}{R} + L_p \quad (\text{C.1})$$

$$\varepsilon^p = \frac{L_p}{L^*} \quad (\text{C.2})$$

où :

- F est la force appliquée à l'éprouvette ;
- L_T est le déplacement total mesuré entre les têtes de l'éprouvette ;
- L_p est le déplacement plastique mesuré entre les têtes de l'éprouvette ;
- L^* est la longueur utile de l'éprouvette définie par $\varepsilon^p = \frac{L_p}{L^*}$;
- R est la raideur de l'ensemble machine-éprouvette. On a $R = ES$ avec E le module d'Young du matériau et S la section utile de l'éprouvette.

La combinaison de ces équations donne :

$$\varepsilon = \left[F \left(\frac{L^*}{ES} - \frac{1}{R} + L_T \right) \right] \frac{1}{L^*} \quad (\text{C.3})$$

Il s'agit donc de déterminer les deux constantes R et L^* . La première résulte d'une mesure directe de la raideur machine-éprouvette à l'aide du diagramme (F, L_T) . L^* dépend a priori de la géométrie de l'éprouvette et du matériau, de la répartition de la température. Sa valeur est déterminée à partir des essais 09a et 09b à faible fréquence pour lesquels nous disposons d'une mesure extensométrique. Cette valeur est par la suite supposée constante lorsque l'on augmente la fréquence, ce qui nous permet d'accéder à la valeur de la déformation. La figure C.1 montre la comparaison des boucles contrainte-déformation obtenues par mesure de ε et par calcul avec la méthode explicitée.

C.2 Détermination de l'amplitude de déformation plastique

Pour le dépouillement des essais nous avons également besoin de connaître l'amplitude de déformation plastique $\Delta\varepsilon^p$. Cette question est loin d'être triviale et nous avons recensé plusieurs méthodes pour accéder

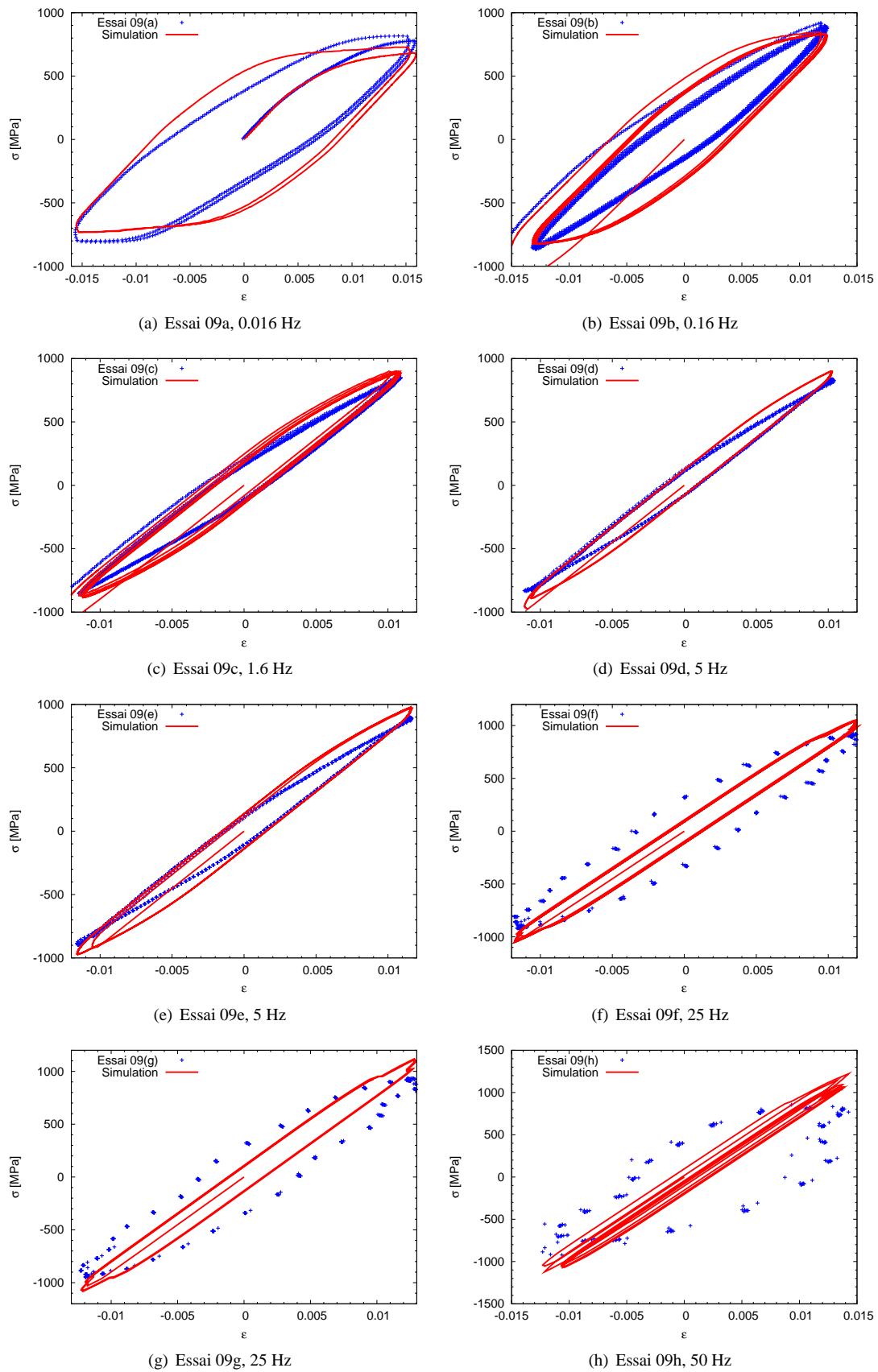


FIG. C.1. Essai 09 suite, comparaison des boucles contrainte/déformation expérimentales et simulées.

à cette valeur :

- une détermination "graphique" sur la boucle stabilisée ;
- une détermination en utilisant le module d'Young initial du matériau (mesuré sur la première traction) ;
- on sait que le module d'Young observé expérimentalement au cours du cycle lors du passage en compression peut être différent du module initial. On peut donc envisager d'utiliser plutôt cette valeur, plus pertinente a priori pour déterminer $\Delta\varepsilon^p$.

Pour les faibles fréquences les méthodes ont été comparées. Il en ressort que le calcul de la déformation plastique à partir du module initial donne des résultats satisfaisants. C'est donc cette méthode qui sera employée pour les plus hautes fréquences pour lesquelles le déphasage engendré par la chaîne d'asservissement et de mesure empêche une détermination directe de l'amplitude de déformation plastique sur la courbe (essais 09f, 09g et 09h). Pour ces essais, il faut bien voir que la contrainte est mesurée à un temps différent de la déformation. Une méthode simple pour tenir compte de ce déphasage consiste à considérer un point affecté de la déformation et la contrainte maximale obtenue au cours du cycle.

Annexe D

Compatibilité de nos essais avec la base de données expérimentales

L'objet de cette annexe est de recouper nos données avec la base expérimentale réalisée dans les années 90 ([de Bussac 92]). En effet l'AM1 a évolué depuis la campagne d'identification de la loi de comportement de l'AM1. C'est maintenant l'AM1 bas soufre ¹ qui est utilisé par Snecma dans le but d'améliorer l'adhérence de la barrière thermique. Cette modification de la composition du matériau n'est cependant pas censée entraîner de modification du comportement mécanique.

Une caractéristique importante de la base d'identification du modèle est qu'elle contient très peu de données monotones, contrairement aux essais réalisés dans le cadre d'EGISTHE. Le nombre d'éprouvettes disponibles étant limité, nous avons choisi de ne pas effectuer d'essais de recouplement. Une estimation de la dispersion matériau s'avère donc délicate, d'autant plus que les comparaisons calculs/expériences présentées au chapitre 1 ont montré des différences importantes en traction monotone à 950°C. Un autre facteur à prendre en compte concerne le fait que les essais complémentaires réalisés dans le cadre de ce travail sont relativement complexes avec notamment l'introduction de changements de vitesses. Cette annexe a donc pour but de répondre aux questions suivantes :

- Les nouvelles données expérimentales sont-elles en accord avec la base d'identification ? Est-il possible d'estimer la dispersion matériau ?
- Les changements de vitesses effectués dans nos essais sont-ils fiables pour identifier des paramètres de viscosité ?
- Etant donné les mauvais résultats montrés par les simulations de nos essais, l'hypothèse selon laquelle l'érouissage isotrope est négligeable dans l'AM1 est-elle valide ?

Les températures 950°C, 1050°C et 1100°C sont étudiées successivement.

D.1 Comportement à 950°C

Orientation $\langle 001 \rangle$ La figure D.1(a) compare les courbes d'érouissage cyclique issues de la thèse d'Hanriot [Hanriot 93] à nos essais monotones (essai 05 à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et essai 09 à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$). Nous avons également reporté la courbe monotone à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ issue de [Espié 96]. En ce qui concerne le comportement à 10^{-5} s^{-1} , les points cycliques et monotones sont quasiment confondus. Nous observons des différences plus prononcées à 10^{-3} s^{-1} pour les faibles chargements, autour de $\Delta\epsilon^p/2 = 0.0015$, pour lesquels les points cycliques sont en dessous des points monotones. De plus, pour cette vitesse de sollicitation, nous observons des différences significatives entre notre courbe monotone et celle issue de [Espié 96] qui présente une "bosse". Rappelons que dans [Levkovitch 06], un adoucissement cyclique dépendant de

¹Snecma nous a fourni de l'AM1 bas soufre pour l'orientation $\langle 001 \rangle$ et de l'AM1 standard pour les autres orientations

la vitesse de sollicitation a été mis en évidence en traction monotone à haute vitesse par une "bosse" similaire à celle de la courbe d'Espie et modélisé via un écrouissage isotrope placé au dénominateur de la loi d'écoulement. Il est possible que les différences constatées ici entre essais monotones et cycliques soient dues au même phénomène que celui dégagé par Levkovitch.

La figure D.1(b) analyse nos essais avec changements de vitesse au cours de la charge. La charge de l'essai 05, servant de référence à la vitesse $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, est comparée aux portions à plus basse vitesse de l'essai 06. Une différence notable est visible en contrainte pour des déformations d'environ 1%. A plus forte déformation, elle tend à se réduire du fait de la diminution de contrainte présentée par les essais à double vitesse de sollicitation. Concernant une sollicitation à 10^{-3} s^{-1} , nous pouvons comparer la vitesse basse de l'essai 03, la vitesse haute de l'essai 06 et l'essai 09, qui sert de référence. Ces remarques sont à nuancer pour l'essai 03 qui montre lui un bon accord avec la référence. L'essai 06 est quant à lui plus difficile à dépouiller car les portions à 10^{-3} s^{-1} ont été trop courtes pour obtenir une contrainte stabilisée (cf. chapitre 2). Il est cependant possible d'en tirer les mêmes conclusions que précédemment concernant la vitesse 10^{-5} s^{-1} . Ces comparaisons effectuées jusqu'ici tendent donc à montrer que l'écrouissage à faible déformation est affecté par les changements de vitesse. Ce point pourra être vérifié sur les essais aux autres orientations et températures.

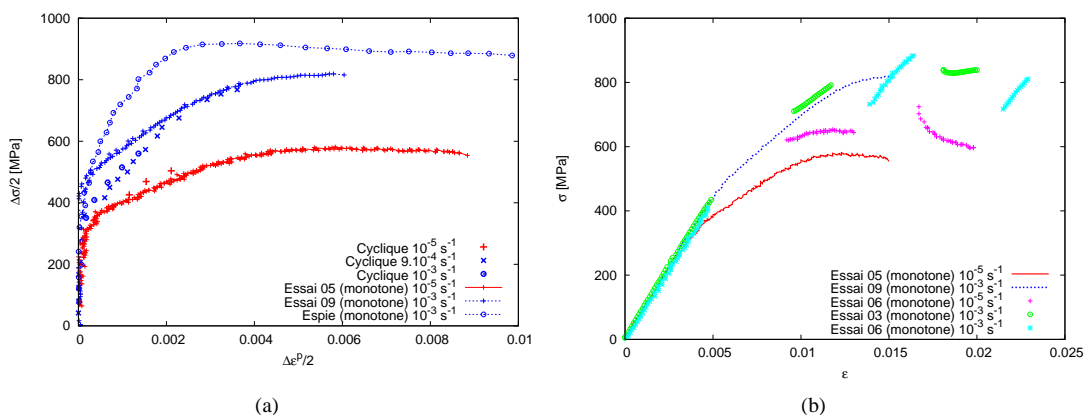


FIG. D.1. (a) Comparaison des comportements monotone et cyclique de l'AM1 à 950°C suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ (b) Effet de changements de vitesse pendant la charge sur le comportement monotone.

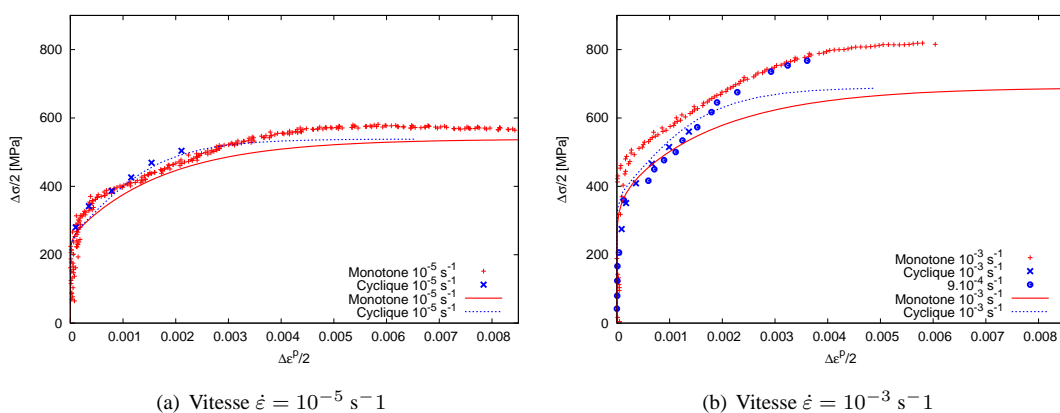


FIG. D.2. Comparaison expérience/simulation à 950°C suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$ à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

Enfin, la figure D.2 montre que le modèle sous-estime la contrainte, surtout pour les niveaux de déformation importants, et les fortes vitesses. Cela explique les différences significatives entre nos essais monotones et les simulations constatées au chapitre 1 et nous laisse penser qu'un réajustement des coefficients du modèle à cette température est nécessaire pour rendre compte du comportement à plus forte déformation plastique.

Orientation $\langle 111 \rangle$ Un travail similaire a été mené pour l'orientation $\langle 111 \rangle$. Cependant nous disposons de beaucoup moins de données pour cette orientation. La figure D.3(a) compare les comportements monotone (issu de l'essai 10) et cyclique (données issues de [de Bussac 92]). Nous avons également reporté la même comparaison effectuée pour une température de 900°C (données de [de Bussac 92]). L'accord entre données expérimentales monotones et cycliques à 950°C est bon, sauf peut être pour l'essai monotone à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. A 900°C, l'accord est également bon pour les déformations plastiques importantes. Dans le régime des faibles $\Delta\epsilon^p/2$, nous retrouvons une "bosse" en traction monotone, comme cela a été mis en évidence dans [Levkovitch 06]. La figure D.4 montre que le modèle reproduit de manière très satisfaisante le comportement du matériau à 950°C suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$.

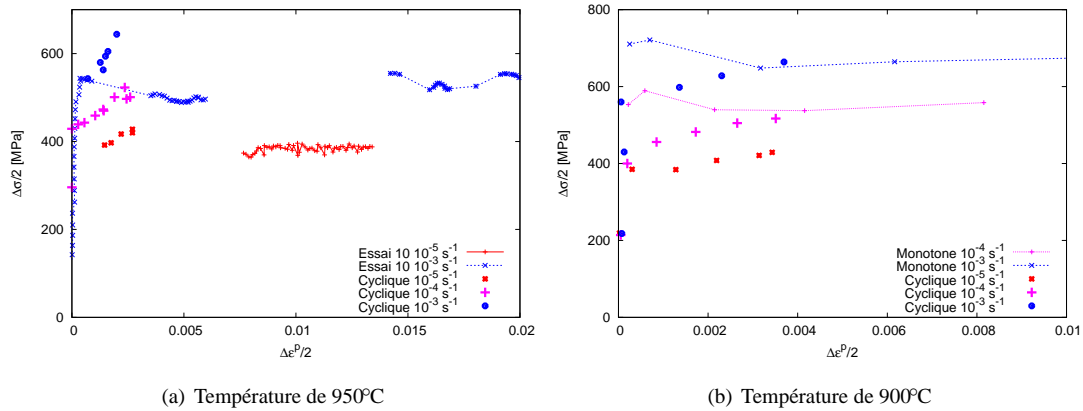


FIG. D.3. Comparaison du comportement monotone et cyclique $\langle 111 \rangle$ de l'AM1 à 950°C et à 900°C.

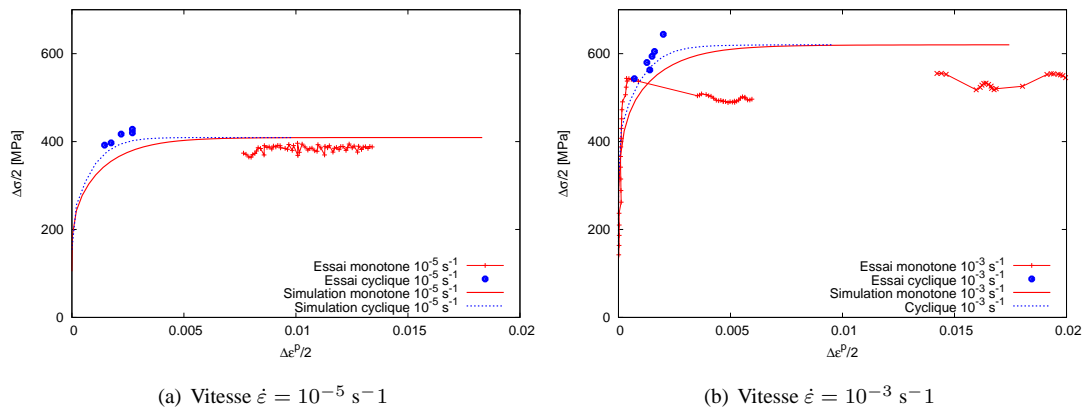


FIG. D.4. Comparaison expérience/simulation à 950°C suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

D.2 Comportement à 1050°C

Pour cette température, nous ne nous sommes intéressés qu'à l'orientation $\langle 001 \rangle$. Globalement l'accord essais monotones/essais cycliques est bon. Un point remarquable concerne la différence entre simulation et courbe expérimentale (en l'occurrence monotone) très marquée pour les fortes déformations plastiques. A la suite de l'augmentation de la vitesse de sollicitation durant l'essai 16, on constate que le matériau recharge fortement, ce qui peut expliquer que l'on atteigne de fortes contraintes. Il est possible que nous n'ayons pas atteint la valeur stabilisée de la contrainte et que celle-ci aurait diminué, de la même manière qu'à 950°C (cf. figure D.1), si l'essai avait été poursuivi. Les conclusions sont donc limitées pour cette température.

L'analyse des essais disponibles à 1100°C, présentée au paragraphe suivant, devrait permettre d'y voir plus clair en ce qui concerne les très hautes températures.

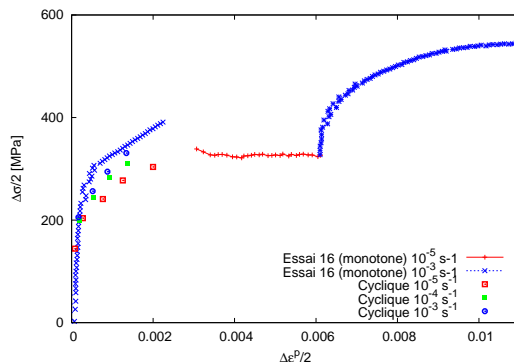


FIG. D.5. Comparaison du comportement monotone et cyclique de l'AM1 à 1050°C.

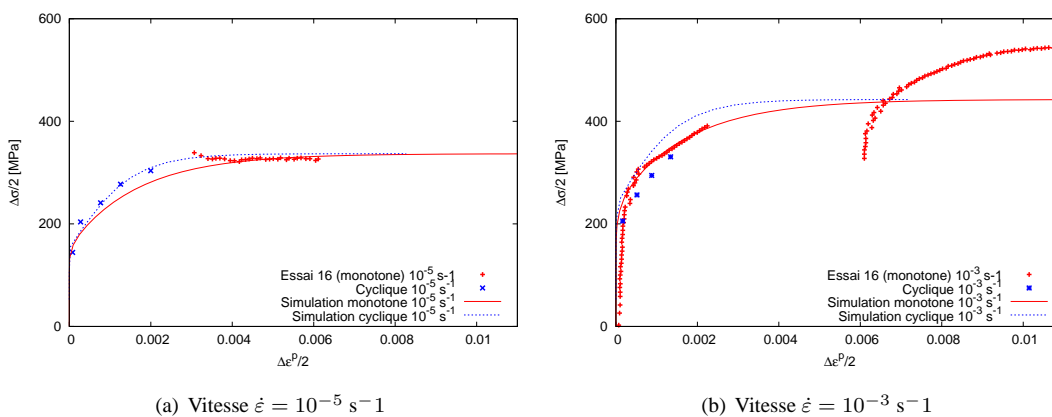


FIG. D.6. Comparaison expérience/simulation à 1050°C à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

D.3 Comportement à 1100°C

A 1100°C, nous disposons de courbes monotones et cycliques à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, 10^{-4} s^{-1} et 10^{-3} s^{-1} issues de [de Bussac 92] et de données monotones issues de l'essai 04. Sur la figure D.7(a) est tracée la comparaison des comportements monotones et cycliques. Elle montre que le comportement cyclique est supérieur au comportement monotone. Ils ont tendance à converger vers la même valeur asymptotique de contrainte pour une vitesse de sollicitation de 10^{-3} s^{-1} . La figure D.7(b) montre quant à elle un bon accord en traction monotone entre notre essai, réalisé à 10^{-3} s^{-1} , et l'essai issu de la base de données d'identification du modèle. Au vue de la figure D.8, l'identification du modèle à cette température réalise un compromis entre données monotones et cycliques.

D.4 Conclusions

L'analyse des données issues de [de Bussac 92], des essais complémentaires et des simulations menées avec le modèle de comportement permet de tirer les conclusions suivantes :

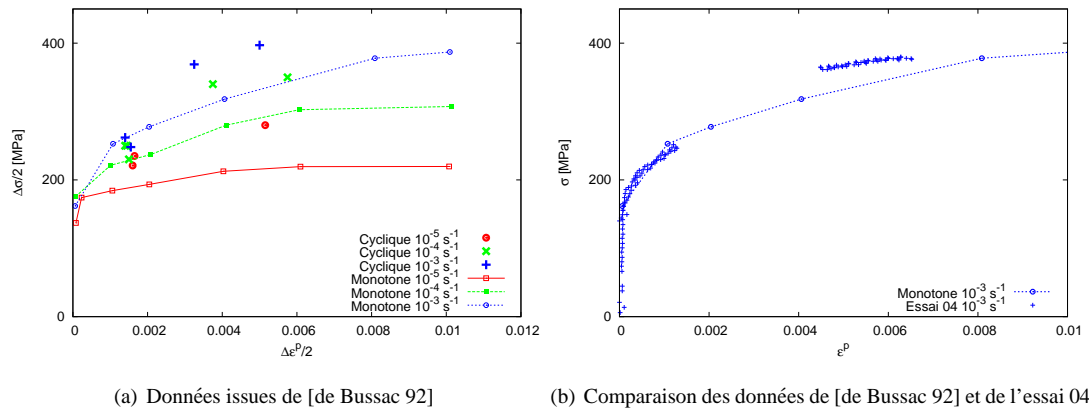
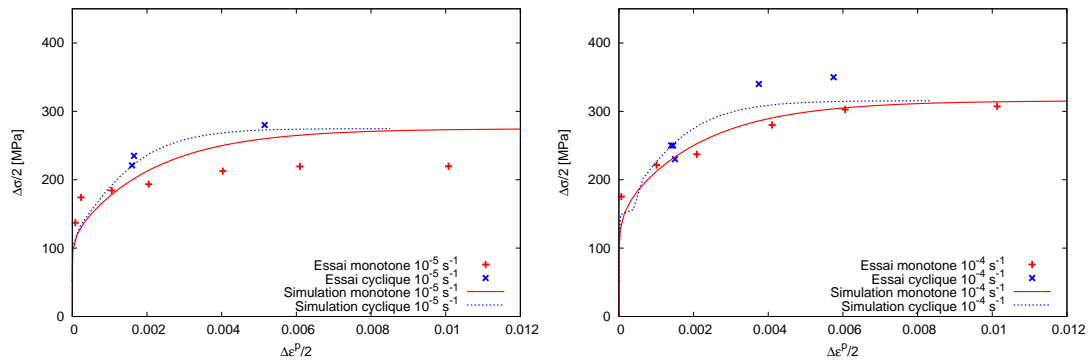


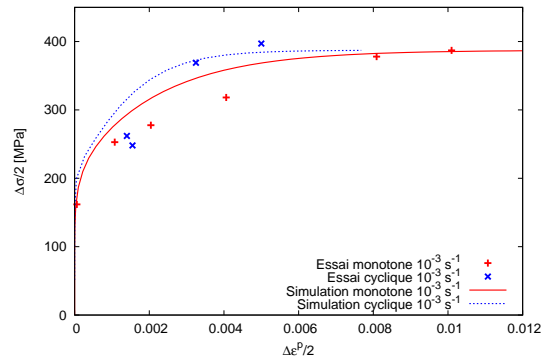
FIG. D.7. Comparaison des comportements monotone et cyclique de l'AM1 à 1100°C.

- La dispersion matériau entre l'AM1 des années 90 et nos lots matière semble faible ;
- Les changements de vitesse semblent induire un écrouissage plus important que celui observé dans les essais sans changement de vitesse. En revanche, ils ne semblent pas affecter la viscosité ;
- Concernant le modèle, nos essais apportent des données supplémentaires qui montrent que son identification est à revoir à 950°C pour les systèmes octaédriques voire peut être aussi à 1050°C et à 1100°C.



(a) Vitesse $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$

(b) Vitesse $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$



(c) Vitesse $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

FIG. D.8. Comparaison expérience/simulation à 1100 °C.

Annexe E

Constantes élastiques des phases γ et γ'

Les phases γ et γ' composant les superalliages sont à symétrie cubique. Trois coefficients d'élasticité caractérisent donc leurs propriétés élastiques. Si la détermination de constantes élastiques pour l'alliage est relativement aisée, elle est plus délicate à réaliser pour les phases qui le composent. La taille caractéristique de la microstructure est très faible. Néanmoins, dans [Göken 99], des mesures par nano-indentation permettent d'accéder à la dureté de précipités dans du CMSX-6. Il faut par conséquent isoler chacune des phases pour effectuer les mesures. La démarche la plus fréquente consiste à synthétiser les phases massives avec une composition la plus proche de celle qu'elle a dans l'alliage.

Différents moyens de mesure permettent d'accéder aux constantes élastiques :

- Mesure par essais mécaniques de traction dans différentes directions ;
- Mesure ultrasonore ;
- Mesure par indentation.

Nous avons recensé les études traitant de ce sujet dans la littérature sur différents monocristaux de superalliages afin d'identifier les propriétés élastiques de la matrice et du composé biphasé. Les constantes de la phase γ' , pour lesquelles très peu de données expérimentales sont disponibles, sont obtenues grâce à des règles des mélanges.

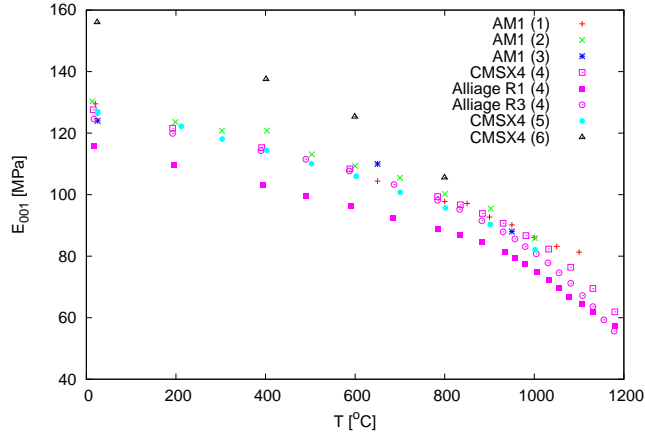
E.1 Etude bibliographique des constantes élastiques de la phase γ et de l'alliage

Un nombre important d'études portent sur les différences de constantes élastiques entre la phase γ et le superalliage. La figure E.1 rassemble ces données en montrant la variation du module d'Young dans la direction $\langle 001 \rangle$ en fonction de la température pour le matériau biphasé et pour la phase γ . Deux remarques peuvent être faites à propos de cette figure. Tout d'abord, à haute température, le module d'Young des phases γ et des superalliages ont des valeurs très proches. De plus, l'écart d'une nuance à l'autre a une influence relativement faible sur le module d'Young.

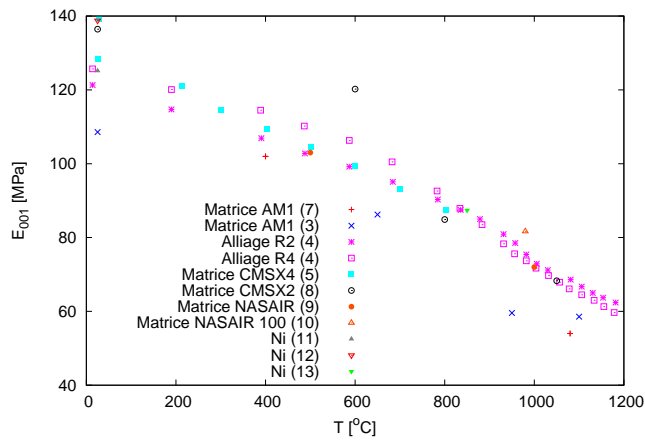
Concernant l'AM1, nous ne disposons que des données issues de [Espié 96] pour la phase γ . Ces données semblent montrer une différence de propriétés élastiques entre la phase γ et le biphasé plus marquée que dans les autres alliages. Etant donné les faibles écarts de composition entre les superalliages, nous avons préféré moyenniser les données recueillies plutôt que d'utiliser les mesures issues de [Espié 96] pour l'identification des constantes d'élasticité de γ . Plus précisément, nous avons choisi d'effectuer une interpolation quadratique au sens des moindres carrés en température sur les souplesses :

$$S_{ij} = a_{0ij} + a_{1ij}T + a_{2ij}T^2 \quad (\text{E.1})$$

où T désigne la température en °C. La figure montre l'interpolation sur S_{11} pour la matrice et le superalliage.



(a) Matériau biphasé

(b) Phase γ FIG. E.1. Module d'Young dans la direction $\langle 001 \rangle$ en fonction de la température pour le matériau biphasé et pour la phase γ (cf. tableau E.1 pour les références).

Référence	Matériau
(1) [de Bussac 92]	AM1
(2) [Mazot 92]	AM1
(3) [Espié 96]	AM1
(4) [Fahrman 99]	CMSX4, alliages Al-Ni-Mo
(5) [Sieborger 01]	CMSX4
(6) [Takagi 04]	CMSX4
(7) [Diologent 02]	AM1
(8) [Ganghoffér 91]	CMSX2
(9) [Gayda 89]	NASAIR 100
(10) [Muller 92]	SRR 99
(11) [Yang 85]	Nickel
(12) [Yasuda 92]	Nickel
(13) [Pollock 94]	Nickel

TAB. E.1. Références des études des propriétés élastiques des monocristaux de superalliages et de leurs phases constitutives.

Le tableau E.2 résume les interpolations en température obtenues.

Souplesse [MPa^{-1}]	Coefficient a_2	Coefficient a_1	Coefficient a_0
S_{11}^γ	$7.4934 \cdot 10^{-9}$	$-1.5048 \cdot 10^{-6}$	$7.8847 \cdot 10^{-3}$
S_{12}^γ	$-3.4411 \cdot 10^{-9}$	$7.2997 \cdot 10^{-7}$	$-3.1668 \cdot 10^{-3}$
S_{44}^γ	$3.3804 \cdot 10^{-9}$	$5.6832 \cdot 10^{-7}$	$7.5503 \cdot 10^{-3}$
$S_{11}^{\gamma/\gamma'}$	$8.4573 \cdot 10^{-9}$	$-4.3356 \cdot 10^{-6}$	$8.4361 \cdot 10^{-3}$
$S_{12}^{\gamma/\gamma'}$	$-3.8906 \cdot 10^{-9}$	$2.0378 \cdot 10^{-6}$	$-3.3360 \cdot 10^{-3}$
$S_{44}^{\gamma/\gamma'}$	$1.3345 \cdot 10^{-9}$	$1.5280 \cdot 10^{-6}$	$7.8693 \cdot 10^{-3}$

TAB. E.2. Paramètres d'interpolation des souplesses de l'AM1 et de la phase γ déterminés dans ce travail.

Deux températures nous intéressent plus particulièrement. Il s'agit de 950°C et 1050°C , pour lesquelles nous allons déterminer dans la section suivante les propriétés de la phase γ' .

E.2 Constantes élastiques de la phase γ'

Tout comme un certain nombre d'auteurs et par exemple [Fahrman 99], nous utilisons des règles des mélanges pour l'identification des constantes élastiques des précipités. Une association en parallèle de la matrice et de précipités (Voigt) et ou série (Reuss) donne les relations suivantes sur les caractéristiques des phases :

$$M_{AM1}^V = (1 - f_v)M_\gamma + f_v M_{\gamma'} \quad (\text{E.2})$$

$$M_{AM1}^R = \frac{M_\gamma M_{\gamma'}}{(1 - f_v)M_{\gamma'} + f_v M_\gamma} \quad (\text{E.3})$$

où f_v est la fraction volumique de précipités, égale à 68% dans le cas de l'AM1 et M sont les propriétés élastiques des deux phases et du superalliage ($M = 1/S_{11}$, $1/S_{44}$, $-S_{12}/S_{11}$). L'inversion de ces relations nous donne accès à $M_{\gamma'}^R$ et $M_{\gamma'}^V$. La valeur finale choisie pour $M_{\gamma'}$ est obtenue en faisant une moyenne selon la méthode proposée dans [Fahrman 99] des valeurs calculées à partir de la règle en série et de la règle en parallèle.

Cette procédure est effectuée à 950°C et 1050°C et conduit aux modules de rigidité pour la phase γ' donnés dans le tableau E.3.

Température	Module	γ	γ'	AM1
950 °C	C_{11} [GPa]	197.3	197.0	196.2
	C_{12} [GPa]	144.1	134.6	136.9
	C_{44} [GPa]	89.8	94.9	95.0
	$E_{\{001\}}$ [GPa]	75.7	87.7	83.7
	$\nu_{\{001\}}$	0.422	0.406	0.411
	$A = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}}$	3.38	3.04	3.20
1050 °C	C_{11} [GPa]	185.1	185.6	184.7
	C_{12} [GPa]	134.0	129.4	131.2
	C_{44} [GPa]	84.2	90.6	91.4
	$E_{\{001\}}$ [GPa]	75.6	79.3	75.7
	$\nu_{\{001\}}$	0.420	0.411	0.415
	$A = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}}$	3.30	3.22	3.42

TAB. E.3. Modules de rigidité de l'AM1 et de ses phases déterminés dans ce travail.

Annexe F

Comportement visco-plastique des phases isolées à 1050°C

Nous suivons à 1050°C la même procédure d'identification des modèles de comportement visco-plastiques des phases γ et γ' qu'à 950°C. Les paramètres matériau des systèmes octaédriques sont identifiés à partir de simulations du comportement suivant l'orientation [001] ; ceux des systèmes cubiques à partir de simulations suivant l'orientation [111].

F.1 Systèmes octaédriques

Nous commençons par identifier le comportement de la matrice en traction monotone car c'est elle qui régit le comportement du biphasé au début de la charge. Comme cela a été souligné dans l'annexe D, nous disposons de beaucoup moins de données à 1050°C qu'à 950°C. Le comportement de chaque phase dans le matériau biphasé à 1050°C est donc identifié à partir du modèle macroscopique de l'AM1, dont on va vu qu'il donne de bonnes réponses à cette température (voir annexe D). Nous reportons également la courbe de traction issue de l'essai 16 avec les limites que nous avons soulignées dans l'annexe D (le comportement exhibé par le matériau lors de la deuxième portion à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{s}^{-1}$ est discutable). La figure F.1 présente l'identification pour la phase γ puis pour la phase γ' . Cette identification est validée en comparant les courbes simulées et expérimentales du cycle stabilisé en écrouissage cyclique (c.f. figure F.2). Les coefficients matériau pour les systèmes octaédriques sont donnés par le tableau F.1.

Coefficient	r_{0oct} MPa	k_{oct} MPa.s ^{1/n}	n_{oct}	c_{oct} MPa	d_{oct}
γ	35	500	4.3	20000	500
γ'	150	400	4.3	2.10^5	1.10^5

TAB. F.1. Coefficients octaédriques des phases γ et γ' identifiés à 1050°C.

F.2 Systèmes cubiques

Les paramètres des systèmes cubiques des phases γ et γ' sont identifiés à partir de données expérimentales et de simulations menées avec le modèle de comportement macroscopique suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$. La figure F.3 présente l'identification des paramètres des systèmes de glissement cubiques de la phase γ F.3(a), puis de la phase γ' F.3(b). L'identification proposée sous-estime légèrement la contrainte

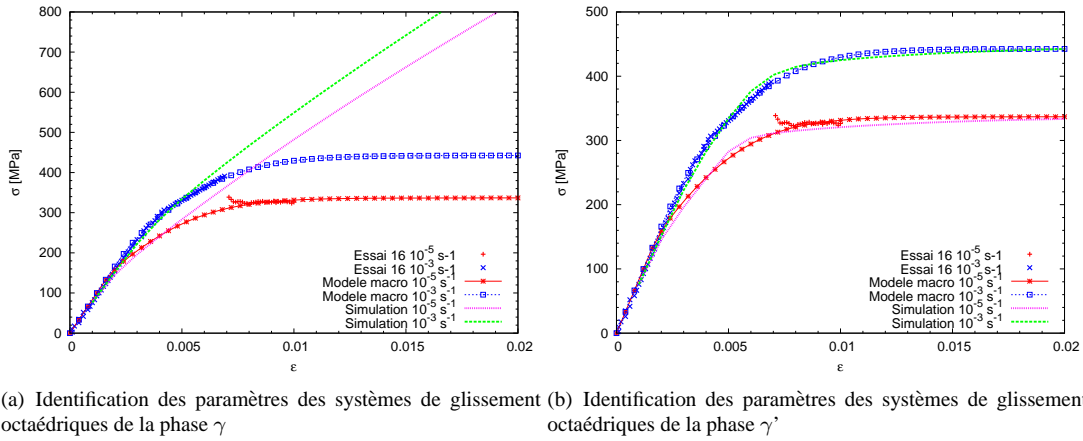


FIG. F.1. Identification des coefficients des systèmes octaédriques à 1050°C de la matrice (a) puis des précipités (b).

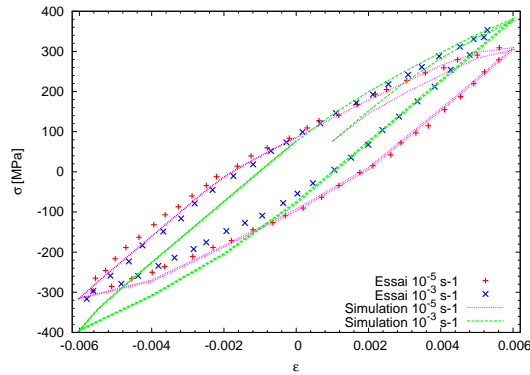


FIG. F.2. Validation de l'identification des paramètres octaédriques à 1050°C en écoulement cyclique.

par rapport à la réponse du modèle de comportement macroscopique. En revanche, nous obtenons un bon accord avec l'expérience dans le cas de chargements cycliques à $\dot{\epsilon} = 10^{-5}\text{s}^{-1}$ et $\dot{\epsilon} = 10^{-3}\text{s}^{-1}$ comme le montre la figure F.5.

F.3 Validation de l'identification

Comme à 950°C, l'identification des paramètres matériau des deux phases est validée en simulant le comportement de l'AM1 suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$. Pour cette orientation, nous disposons du cycle stabilisé en écoulement cyclique à $\dot{\epsilon} = 10^{-2}\text{s}^{-1}$.

Coefficient	r_{0cub} MPa	k_{cub} MPa.s ^{1/n}	n_{cub}	c_{cub} MPa	d_{cub}
γ	50	500	4.3	$5 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^4$
γ'	120	200	4.3	$2 \cdot 10^4$	1000

TAB. F.2. Coefficients cubiques des phases γ et γ' identifiés à 1050°C.

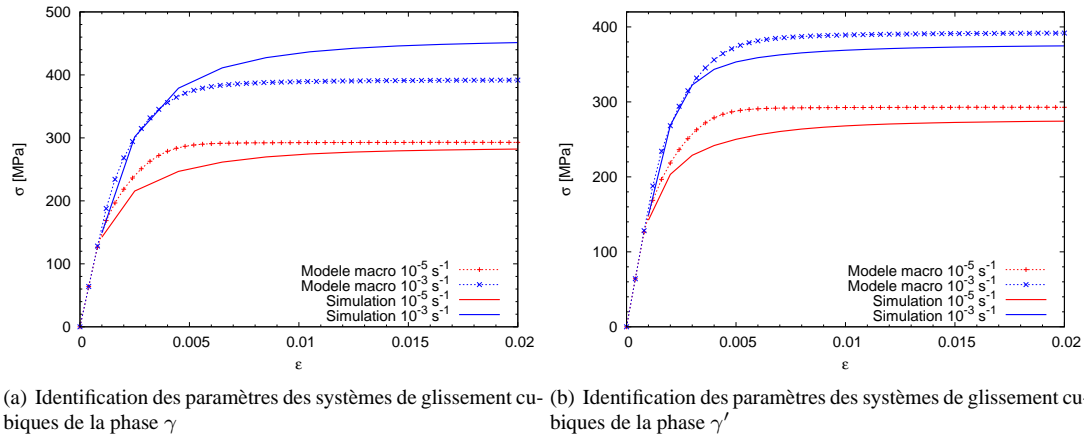


FIG. F.3. Identification des coefficients des systèmes cubiques à 1050°C à partir de courbes simulées avec le modèle de comportement macroscopique en traction monotone.

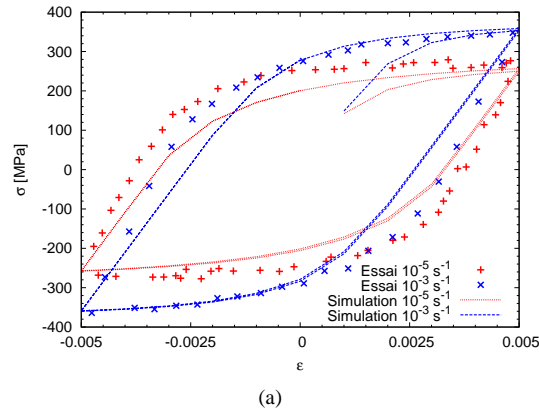


FIG. F.4. Comparaison simulation expérience dans le cas de chargements cycliques suivant $\langle 111 \rangle$ à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{s}^{-1}$ et $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{s}^{-1}$. Les données expérimentales sont issues de [de Bussac 92].

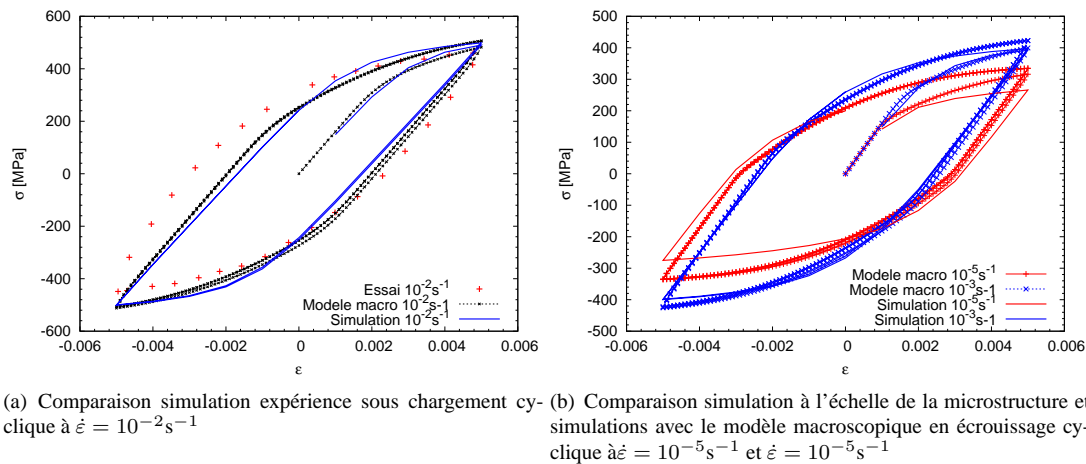


FIG. F.5. Validations de l'identification des paramètres matériau des phases γ et γ' à 1050°C par simulation de chargements suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$. Les données expérimentales sont issues de [de Bussac 92].

Annexe G

Effet d'histoire de la température

Cette annexe décrit des essais de comportement après surchauffe. Ce thème est un peu en marge du sujet de thèse mais nous avons souhaité être capable de quantifier les effets de changements de températures sur le comportement mécanique par rapport aux effets de la mise en radeaux dans les conditions de fonctionnement d'un moteur comme le TP400. C'est pourquoi une éprouvette a été soumise à différentes conditions de surchauffe et testée mécaniquement.

G.1 Etude bibliographique

Nous étudions ici l'effet d'un changement de température sur le comportement mécanique des superalliages. Lorsque le matériau subit une augmentation de température, il voit sa fraction volumique en phase γ' diminuer. Il y a donc diffusion d'éléments γ' -gènes de la peau des précipités vers la matrice. Lors du retour à température, deux cas sont possibles :

- Si cette diminution est relativement faible, le matériau va retrouver sa fraction volumique d'origine par grossissement des précipités ;
- En revanche, dans le cas d'une forte dissolution, de fins précipités de γ' vont germer dans les couloirs de matrice créant une structure bimodale. La figure G.1 montre que la fraction volumique de la phase γ' de superalliage ne varie pas trop jusqu'à une température d'environ 1000°C. Au delà de cette température, elle chute fortement, ce qui implique que l'effet d'une surchauffe apparaît à très haute température, typiquement pour une température de surchauffe supérieure à 1100°C.

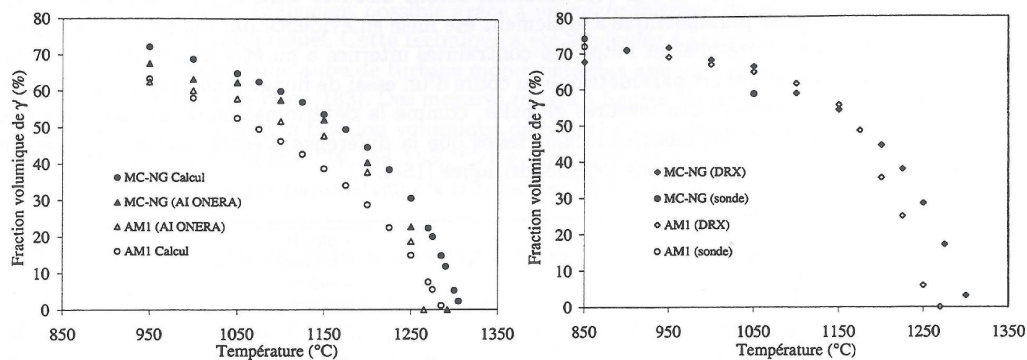


FIG. G.1. Fractions volumiques d'équilibre des phases γ et γ' de l'AM1 et du MCNG obtenues par calculs et par différents moyens expérimentaux d'après [Diologent 02]

[Cormier 06] a étudié en détail les cinétiques de dissolution du superalliage MC2 pour des températures allant de 1100 °C à 1200 °C. Il note un début de coalescence non-orientée pour les temps de maintien les plus longs (30 minutes à 1200 °C par exemple). De nombreux auteurs ont également mesuré la fraction de précipités γ' en fonction de la température (cf. [Diologent 02] pour l'AM1). En revanche, les cinétiques de reprecipitation sont moins bien connues.

Plusieurs auteurs se sont intéressés à l'effet d'une surchauffe sur le comportement mécanique de superalliage. En premier lieu, nous pouvons citer [Cailletaud 79], qui a étudié l'effet d'une augmentation de température sur l'IN100. La figure, issue de ce travail montre un net durcissement à 900°C après un passage à 1000°C, 1050°C ou 1100 °C. Plus récemment, [Espié 96] a étudié le même phénomène sur l'AM1. Il a étudié une microstructure ayant subi un traitement d'homogénéisation à 1300°C, puis un revenu d'une heure à 1200 °C et a comparé cette microstructure brute à une microstructure ayant subi un revenu de 16h à 870°C. Il montre clairement que le premier échantillon possède une structure bimodale. Cependant, les fins précipités ne semblent avoir qu'une très faible influence sur le comportement cyclique à 650°C. Outre la différence de matériaux, la différence de modes de chargement est à souligner : force imposée pour [Cailletaud 79] et déformation imposée pour [Espié 96]. Or, il est connu que les essais à force imposée sont plus sensibles que ceux à déformation imposée. La microstructure des deux matériaux est bien sûr très différente. L'IN100 à froid possède deux tailles de précipités caractéristiques : de gros précipités (de l'ordre de 1 μm) et de plus petits (de 5 à 100 nm). La surchauffe crée alors des précipités hyperfins. [Cailletaud 79] attribue le durcissement du matériau à la présence de ces précipités hyperfins. Suivant la taille des précipités, ils sont soit cisailés dans le cas de petits précipités, ce qui induit un durcissement, soit contournés dans le cas de plus gros précipités.

Dans [Cormier 06], c'est l'effet d'une surchauffe sur le comportement résiduel en fluage du MC2 qui est étudié. Une étude expérimentale a montré que les courbes de fluage après des surchauffes à 1200°C présentent un nouveau régime de fluage primaire ainsi qu'une vitesse de fluage secondaire et une tolérance à l'allongement accrues. Cormier attribue ces variations du comportement aux évolutions microstructurales qui interviennent lors de la re-coalescence de la phase γ' . Nous pouvons noter que les températures mises en jeu dans ce travail, résultant du contexte industriel de la thèse de Cormier (régime d'urgence des moteurs d'hélicoptères), sont relativement élevées par rapport aux températures de fonctionnement de l'AM1.

G.2 Essais de comportement après surchauffe

Compte tenu des données bibliographiques présentées au paragraphe précédent, notre objectif est de tenter de quantifier l'effet d'une montée en température sur le comportement mécanique de l'AM1. La procédure expérimentale est la suivante :

- réalisation d'un essai d'érouissage cyclique à 950°C ;
- montée en température et maintien pendant un certain temps à force nulle ;
- retour à 950°C et réalisation du même essai cyclique qu'avant la surchauffe.

Un exemple de chargement thermique est présenté par la figure G.2. Les essais cycliques sont réalisés en force imposée car le comportement mécanique est plus sensible avec une telle consigne qu'en déplacement imposé. La comparaison des courbes expérimentales avant et après surchauffe permet d'obtenir directement l'effet de la montée en température sur le comportement cyclique.

Trois paramètres nous semblent importants : la température de la surchauffe, le temps de maintien à cette température et le temps écoulé, à 950°C, après la surchauffe avant de réaliser l'essai de comportement. Concernant la vitesse de descente en température, que nous pensons très influente sur le comportement après surchauffe, elle a été prise la plus rapide possible compte tenu des moyens expérimentaux dont nous disposons. Etant données les contraintes en nombre d'éprouvettes que nous avons, une même éprouvette a été utilisée pour cet essai. Nous avons vérifié par un essai de comportement avant chaque surchauffe que les chargements subis par le matériau jusqu'alors ne l'ont pas endommagé. Le tableau G.1 présente la matrice d'essais après surchauffe.

Essai	Température de surchauffe °C	t_{main}	$t_{attente}$	Vitesse de descente en température °C/min
02-04	1100	21min	4.8min	1.15
02-07	1200	32min	4.8min	3.33
02-08	1200	1h20min	3.3min	4.00
02-09	1200	1h20min	19.7min	4.00
02-11	1250			

TAB. G.1. Matrice d'essais après surchauffe

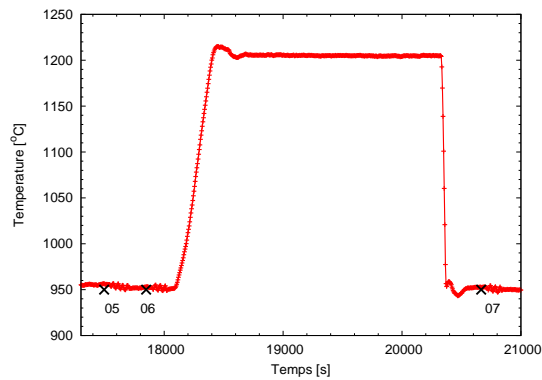


FIG. G.2. Exemple de chargement thermique appliqué, les points matérialisent les essais de comportement mécanique.

Les résultats obtenus montrent globalement une sensibilité limitée du comportement mécanique à la surchauffe comme on peut le voir sur la figure G.2. La surchauffe à 1100°C n'a pas eu d'influence sur le comportement mécanique. A 1200°C, nous observons un léger durcissement. A cette température, deux temps de maintien à très haute température ont été testés. Nous constatons un durcissement très légèrement supérieur pour le temps de maintien le plus long, même s'il est difficile de tirer de véritables conclusions étant donné l'amplitude des variations observées. En revanche, l'essai 02-09 montre clairement que le régime durcissant est transitoire, dans le sens où une attente plus longue entre le retour à 950°C et la réalisation de l'essai mécanique ne modifie pas la réponse du matériau. Enfin, l'essai 02-11, pour lequel la température est de 1250°C, présente un durcissement relativement important.

Une trempe à l'air a été réalisée juste après l'essai 09-11, ce qui a permis de figer la microstructure. Celle-ci a été observée au MEB et est présentée par la figure G.2. Nous avons deux types de précipités en présence. De gros précipités, issus des précipités originaux, mais en nombre très réduits sont visibles. Leur forme est allongée, signe de phénomènes de coalescence orientée. Il faut bien garder à l'esprit que la même éprouvette a servi à réaliser ces essais de comportement après surchauffe. Elle a donc cumulé des maintiens à très haute température et des déformations plastiques. C'est pourquoi, les précipités initiaux sont si dégradés et que l'on observe de la coalescence orientée. Leur taille est de l'ordre du micron. Entre ces gros précipités, une population de petits précipités cuboïdaux, dont les dimensions sont de l'ordre de la centaine de nanomètres, s'est développée. C'est la présence de ces petits précipités qui explique le durcissement observé.

Nous sommes bien conscients que ces quelques essais de comportement après surchauffe sont insuffisants pour tirer des conclusions quantitatives. Quelques observations peuvent néanmoins être faites dans le but de guider des études ultérieures. Concernant la température de surchauffe, nous pensons que pour ce matériau elle doit être de l'ordre de 1250°C pour observer un réel effet durcissant. Ce résultat semble montrer que les problématiques de surchauffe ne concernent pas les applications étudiées dans ce travail (moteurs d'avions, pour lesquels de telles températures ne sont a priori pas atteintes). Ce durcissement est transitoire. Une fois revenu à 950°C, l'équilibre thermodynamique est atteint en une vingtaine de minutes.

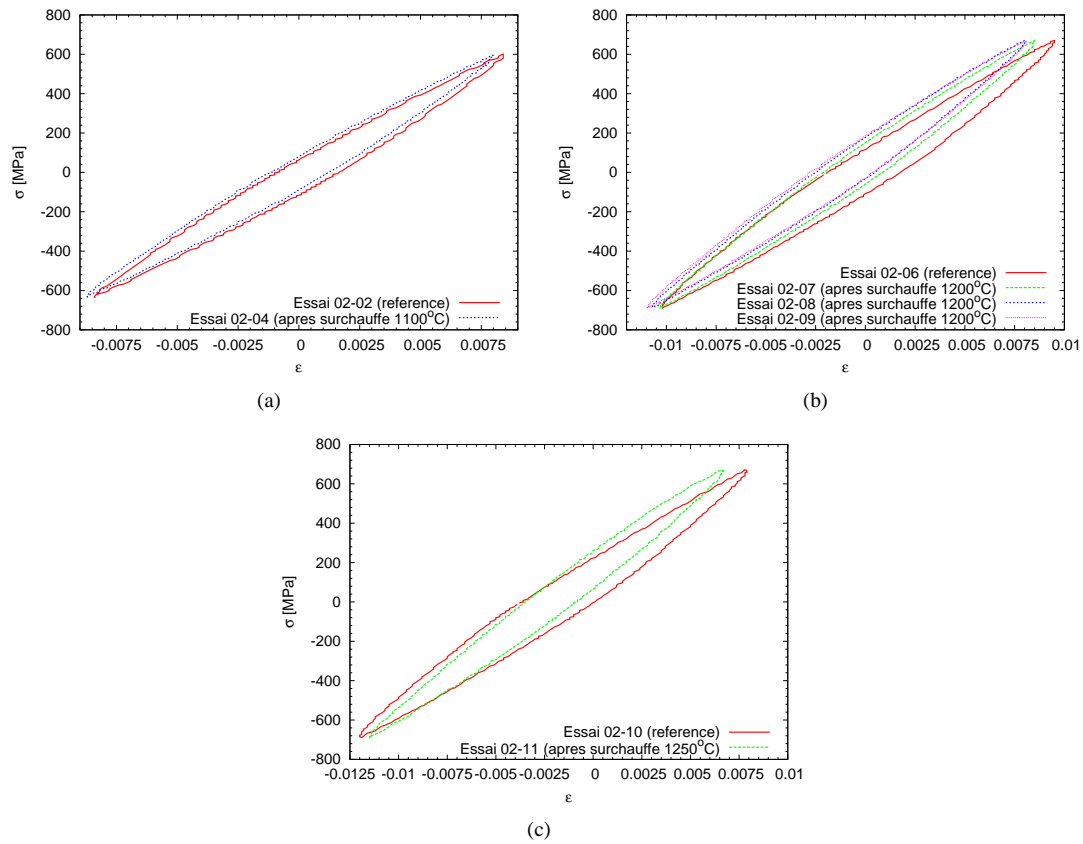


FIG. G.3. Comparaison des boucles stabilisées avant et après surchauffe : (a) surchauffe à 1100°C (b) surchauffe à 1200°C (c) surchauffe à 1250°C.

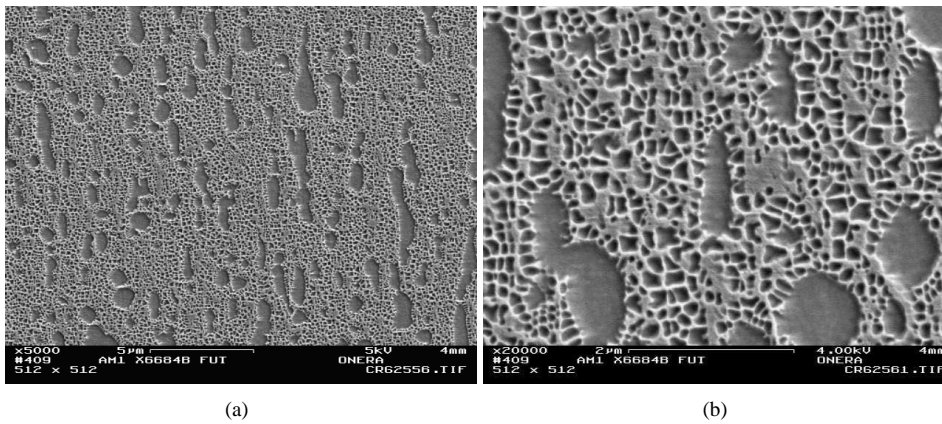


FIG. G.4. Microstructure de l'AM1 après surchauffe à 1250°C

Annexe H

Influence d'un vieillissement sur le comportement mécanique suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$

Cette annexe présente les résultats des essais de comportement réalisés après vieillissement sur les éprouvettes orientées suivant $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Les essais suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ sont dépouillés suivant la même procédure que les essais suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$. Les essais de comportement après vieillissement sont comparés aux essais de référence. Nous commençons par nous intéresser aux vieillissements effectués par fluage puis aux vieillissements cycliques.

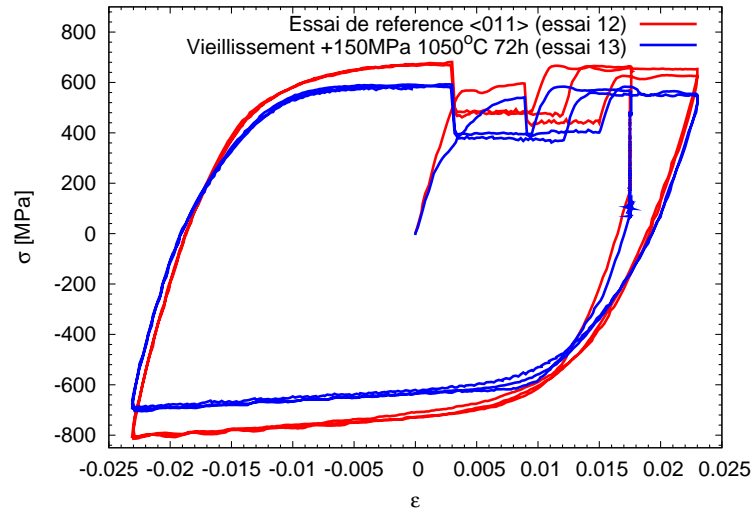
H.1 Influence d'un vieillissement en fluage

De manière générale, la coalescence orientée induit également un adoucissement suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ (figure H.1) et $\langle 111 \rangle$ (figure H.2). Concernant l'orientation $\langle 011 \rangle$, on constate, tout d'abord, que la coalescence orientée modifie le comportement en traction. En effet, l'essai 13 montre plus d'écrouissage que l'essai 12 lors de la première traction à la vitesse de déformation de 10^{-3} s^{-1} . L'adoucissement relevé sur les portions à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ est plus faible que suivant l'orientation $\langle 001 \rangle$. Il est de l'ordre de 50 MPa pour les essais suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$ comme l'indique le tableau H.1 contre environ 100 MPa pour les essais suivant $\langle 001 \rangle$. Enfin, l'adoucissement observé en relaxation est plus important que celui exhibé à $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ ou $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$.

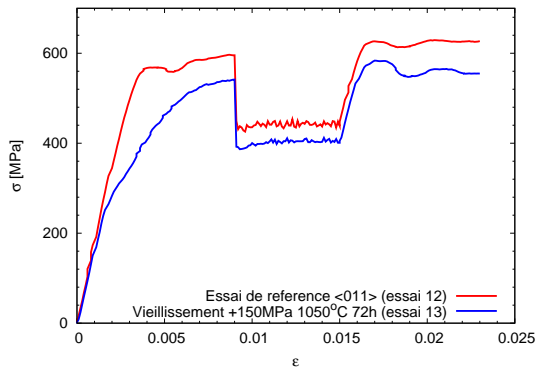
Contrainte [MPa]	Essai 12 (référence)	Essai 13 (radeaux)	Différence essai 12 moins essai 13
Traction 10^{-3} s^{-1} à $\epsilon = 0.9\%$	595	540	45
Traction 10^{-5} s^{-1}	445	400	45
Traction 10^{-3} s^{-1} à $\epsilon = 2.3\%$	625	555	70
Relaxation	175	70	105

TAB. H.1. Influence d'un vieillissement en fluage sous 150 MPa à 1050°C suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$ sur le comportement mécanique à 950°C suivant $\langle 011 \rangle$. Contraintes stabilisées relevées au cours de la première traction sur les portions à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et en fin de relaxation.

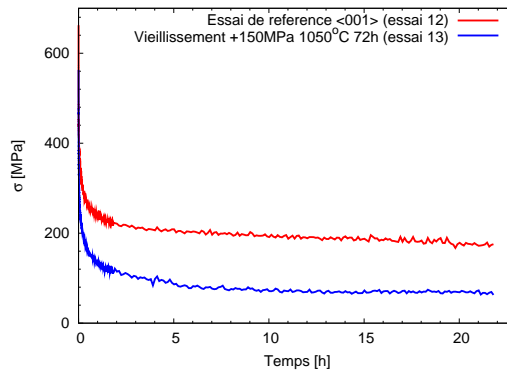
Le comportement du matériau vieilli suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ est tout à fait comparable à celui du matériau non vieilli dans le sens où les essais 10 et 11 montrent tous deux très peu d'écrouissage. L'adou-



(a) Essais 12 et 13 complets



(b) Première traction



(c) Relaxation

FIG. H.1. Influence d'un vieillissement en fluage sous 150 MPa à 1050°C suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$ sur le comportement mécanique à 950°C suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$. L'essai 13 est comparé à l'essai 12 de référence.

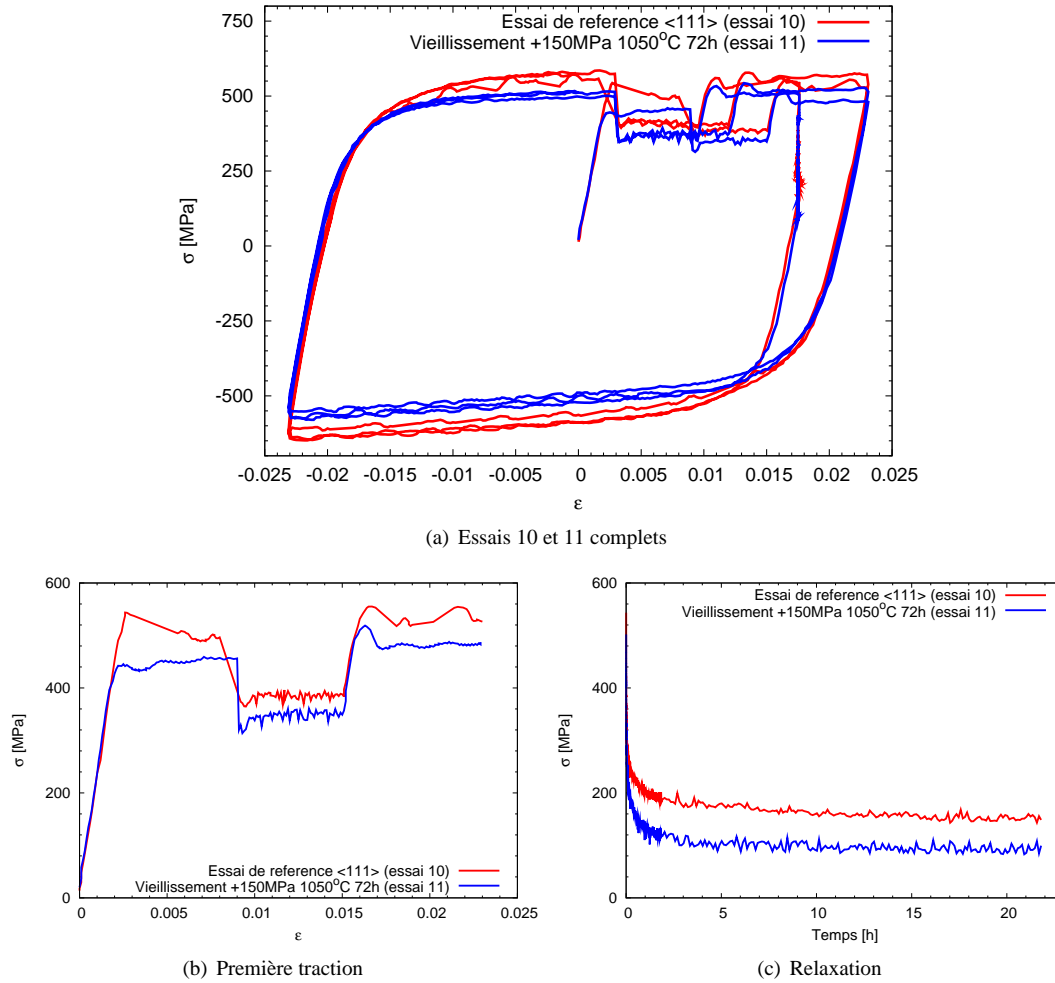


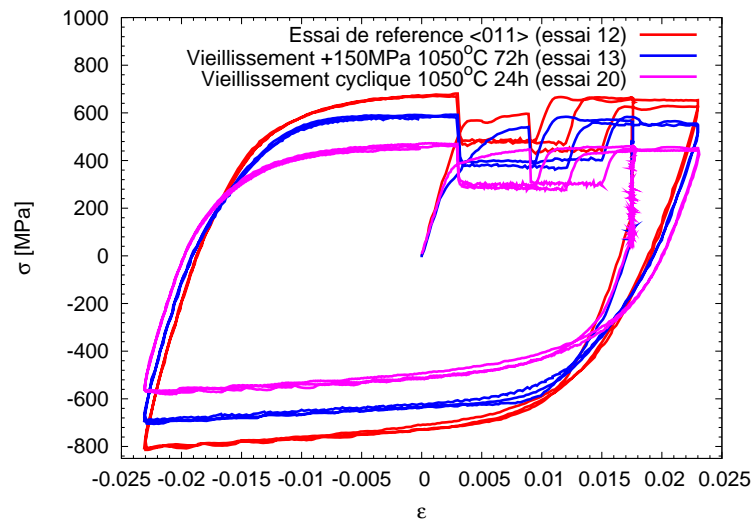
FIG. H.2. Influence d'un vieillissement de fluage sous 150 MPa à 1050°C suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ sur le comportement mécanique à 950°C suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$. L'essai 11 est comparé à l'essai 10 de référence.

cissement observé entre le matériau non vieilli et le matériau vieilli est de l'ordre de 50 MPa.

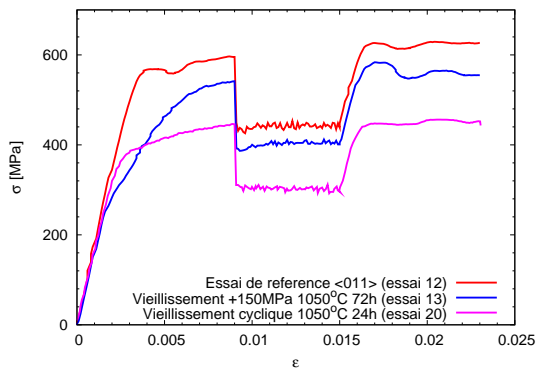
H.2 Influence d'un vieillissement cyclique

La figure H.3 montre l'influence d'un vieillissement cyclique suivant $\langle 011 \rangle$ sur le comportement mécanique suivant cette même orientation. Elle compare l'essai 20 à l'essai 12 de référence et à l'essai 13 décrivant l'influence d'un vieillissement en fluage sur le comportement. Comme pour l'orientation $\langle 001 \rangle$, un vieillissement cyclique suivant $\langle 011 \rangle$ induit un adoucissement plus prononcé qu'un vieillissement en fluage. Il est de l'ordre de 170 MPa. En revanche, le mode de vieillissement n'affecte pas la contrainte obtenue après 24h de relaxation.

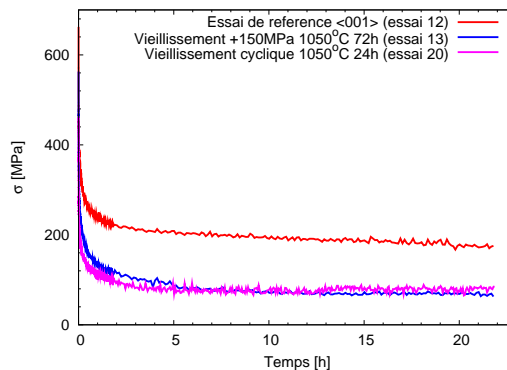
L'influence d'un vieillissement cyclique suivant $\langle 111 \rangle$ est moins marquée que pour les deux autres orientations étudiées comme le montre la figure H.4. Ainsi, on note une diminution de la contrainte d'une dizaine de MPa. La contrainte obtenue en relaxation n'est pas affectée par le mode de vieillissement.



(a) Essais complets

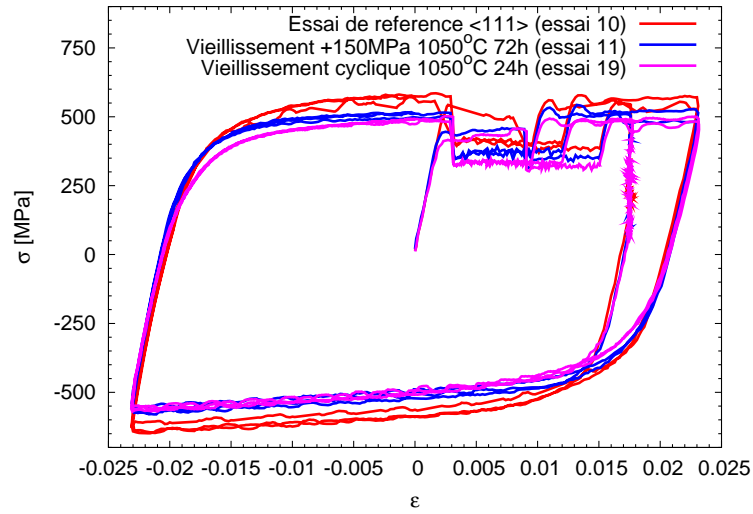


(b) Première traction

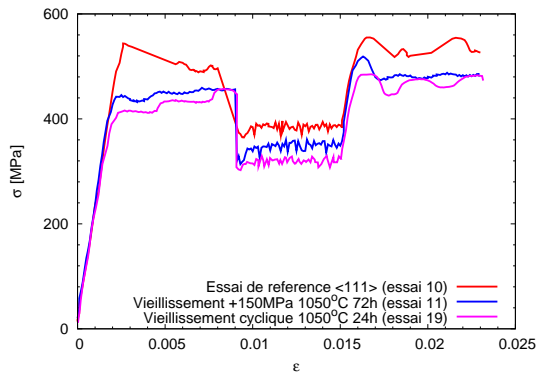


(c) Relaxation

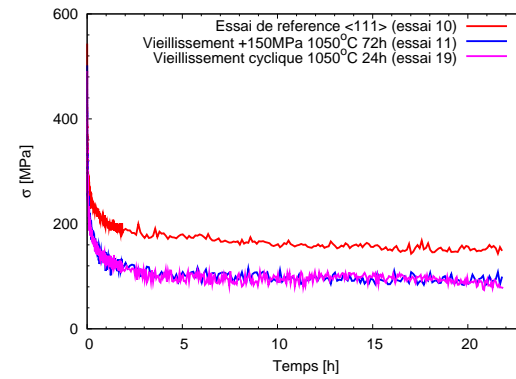
FIG. H.3. Influence d'un vieillissement cyclique à 1050°C suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$ sur le comportement mécanique à 950°C suivant l'orientation $\langle 011 \rangle$. L'essai 20 est comparé à l'essai 12 de référence et à l'essai 13.



(a) Essais complets



(b) Première traction



(c) Relaxation

FIG. H.4. Influence d'un vieillissement cyclique à 1050°C suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ sur le comportement mécanique à 950°C suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$. L'essai 19 est comparé à l'essai 10 de référence et à l'essai 11.

Contrainte [MPa]	Essai 10 (référence)	Essai 11 (radeaux)	Différence essai 10 moins essai 11
Traction 10^{-3} s^{-1} à $\varepsilon = 0.9\%$	500	455	45
Traction 10^{-5} s^{-1}	380	345	35
Traction 10^{-3} s^{-1} à $\varepsilon = 2.3\%$	530	485	45
Relaxation	150	95	55

TAB. H.2. Influence d'un vieillissement en fluage sous 150 MPa à 1050°C suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ sur le comportement mécanique à 950°C suivant $\langle 111 \rangle$. Contraintes stabilisées relevées au cours de la première traction sur les portions à $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et en fin de relaxation.

H.3 Conclusion

Cette annexe a montré qu'un adoucissement du comportement de l'AM1 est observé après coalescence orientée en fluage et en fatigue suivant les orientations $\langle 011 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Pour l'orientation $\langle 011 \rangle$, le comportement de la microstructure issue d'un vieillissement cyclique est inférieur à celui de la microstructure issue d'un vieillissement en fluage. On a constaté sur les micrographies que la microstructure s'oriente à 30° des axes cubiques. Comme pour la direction $\langle 001 \rangle$, cette orientation préférentielle de la microstructure peut expliquer l'adoucissement important observé. En effet, la largeur des couloirs de matrice vue par par les dislocations est dans de cas plus élevée que lorsque la microstructure est orientée suivant les directions cubiques comme c'est le cas en fluage. En revanche, nous ne savons pas pourquoi le comportement de la microstructure issue de fatigue suivant l'orientation $\langle 111 \rangle$ est comparable à celui de la microstructure issue de fluage.

Annexe I

Viscoplastic phase field modelling of rafting in Ni base superalloys

Abstract : The mechanical behaviour of Ni-base superalloys depends largely on the microstructure at mesoscale. Initially, the alloy consists in cuboid precipitates separated by channels of matrix. When such a material is submitted to a creep loading at high temperature (around 1000 °C), we observe a directional coalescence of the γ' precipitates often called rafting. The aim of this study is to propose a Phase Field model to represent in a quantitative way the change in morphology in superalloys. The misfit stresses as well as the anisotropy and inhomogeneity of elastic constants between matrix and precipitates are taken into account. Moreover several authors have pointed out the role of the plastic strain in the matrix which enables relaxation of misfit stresses between the two phases during rafting. Thus plasticity in the γ phase is introduced by the means of a viscoplastic law coupled with the Phase Field model.

Keywords : Phase Field methods, viscoplastic constitutive law, Ni-base superalloys, rafting

I.1 Introduction

Ni-base superalloys are employed to manufacture gas turbine blades because of their excellent mechanical behaviour at high temperature (up to 1100 °C) and under loading. These properties are due to hardening induced by coherently precipitated cubes of γ' phase surrounded by thin channels of γ disordered matrix.

Under creep loading at high temperature, the so-called rafting phenomenon is observed. γ' precipitates coarsen in an anisotropic way to form platelets. From a metallurgical point of view, rafting has been the subject of a great number of studies. It has been reported that rafts orientation is controlled by different parameters such as the sign of the lattice mismatch, the sign of the external loading and the differences in elastic constants between matrix and precipitates. In the mean time, several authors underline that plastic activity plays an important role in this morphological evolution ([?], [Brien 01a]). Experimental studies [Matan 99] have confirmed that without dislocations, rafting is too slow to be observed.

A great number of models has been developed in order to predict rafts orientation, first within a simple elastic frame [Pineau 76] and more recently adding the plastic strain influence [Ratel 06]. However, rafting kinetics prediction is more complex. In this area, Phase Field models (PFM) appear to be a proper way to study such microstructural evolutions in the elastic regime. Many studies [Li 97] have obtained coarsened morphologies under applied load. But there are still open issues : simulated microstructures exhibit straighter rafts than experiments and they can not predict connectivity transition at the beginning of accelerated creep regime. What we propose here is to improve PFM introducing the role of plastic strains on the

microstructure evolution.

The introduction of plastic strains in PFM have already be treated by modelling dislocations dynamics [Rodney 01], [Wang 01], [Rodney 03]. Dislocations are then represented by their plastic eigenstrains and act individually through the elastic field they generate. Large scale simulations taking into account the mutual interactions between all the glide systems and the evolving γ/γ' microstructure is computationnally very intensive. In an other hand, in [Boussinot 07] where the author takes dislocations into account by a phenomenological decrease of misfit eigenstrains, a precipitates disorientation for a long creep time has been obtained. The present contribution aims to improve this method by computing the plastic strain field with a viscoplastic constitutive law. Few attempts have been made in this area. [Ubachs 05] have already applied such a law to compute the stress field in a Phase Field simulation, but without coupling diffusion and mechanical effects. More recently, [Uehara 07] have coupled Continuum Mechanics to PFM to study grain growth.

I.2 Phase field model

PFM consists in describing a microstructure by the means of continuous fields. A γ/γ' structure is characterised by the concentration field $c(\vec{r}, t)$ and three order parameters fields $\eta_i(\vec{r}, t)$. These fields are the local amplitude of the three [100] ordering waves that are needed at mesoscale to represent any inhomogeneous distribution of the four $L1_2$ variants of the γ' phase.

The temporal evolution of the microstructure can be obtained by solving the Cahn-Hilliard equation in the case of the concentration field, and Allen-Cahn equations for non-conserved fields, respectively :

$$\frac{\partial c}{\partial t}(\vec{r}, t) = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta c}; \quad \frac{\partial \eta_i}{\partial t}(\vec{r}, t) = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_i} \quad (\text{I.1})$$

where $F = F_{chim} + E_{el} + F_{vp}$ is the total free energy of the system. The following paragraphs describe the evaluation of the each component of the free energy, respectively the Ginzburg-Landau, the elastic and the viscoplastic energies.

I.2.1 The Ginzburg-Landau free energy

The Ginzburg-Landau free energy should be invariant under the symmetry operations of the disordered fcc lattice. In the present case and to the lowest order, this leads to :

$$\delta F(c, \{\eta_k\}) = \frac{A}{2}(c - c_\gamma)^2 - \frac{B}{2}(c - c_0) \sum_{k=1,3} \frac{\eta_k^2}{3} - \frac{C}{3} \eta_1 \eta_2 \eta_3 + \frac{D}{4} \sum_{k=1,3} \frac{\eta_k^4}{3} \quad (\text{I.2})$$

where, for simplicity, the prefactors of the third and fourth order terms do not depend on concentration c . The constants B, C, D are chosen in such a way that this free energy fonctionnal leads to the experimentally known two-phase regime between γ and γ' phases :

$$B = 2A(c_{\gamma'} - c_\gamma) \quad (\text{I.3})$$

$$C = 6A(c_{\gamma'} - c_\gamma)(c_0 - c_\gamma) \quad (\text{I.4})$$

$$D = 2A(c_{\gamma'} - c_\gamma)(c_{\gamma'} - 3c_\gamma + 2c_0) \quad (\text{I.5})$$

where c_γ and $c_{\gamma'}$ are the limit concentrations of the two-phase regime and c_0 a free parameter. PFM also includes gradient terms which insure smooth interfaces and finite interface energies :

$$\frac{\lambda}{2} |\nabla c|^2; \quad \frac{\beta}{2} \sum_k |\nabla \eta_k|^2 \quad (\text{I.6})$$

I.2.2 Elastic energy

Elastic energy for a coherent microstructure writes :

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_V \lambda_{ijkl}(\vec{r}) (\epsilon_{ij}(\vec{r}) - \epsilon_{ij}^0(\vec{r})) (\epsilon_{kl}(\vec{r}) - \epsilon_{kl}^0(\vec{r})) dV \quad (\text{I.7})$$

where $\lambda_{ijkl}(\vec{r})$ are the elastic constants at point \vec{r} and $\epsilon_{ij}(\vec{r})$ the local strain tensor. $\epsilon_{ij}^0(\vec{r})$ is the stress-free strain which is proportional to the deviation from the average concentration \bar{c} : $\epsilon_{ij}^0(\vec{r}) = \epsilon_{ij}^0(c(\vec{r}) - \bar{c}) = \epsilon_{ij}^0 \Delta c(\vec{r})$ (Vegard's law). Strain and stress fields are obtained solving the equilibrium equations :

$$\sigma_{ij,j} = 0 \text{ for } 1 \leq i, j \leq 3 \quad (\text{I.8})$$

$$\bar{\sigma} = \sigma^a \text{ for applied stress} \quad (\text{I.9})$$

Our model take the inhomogeneity between elastic constant of matrix and precipitates into account. We suppose that elastic constants are linear functions of the concentration field.

$$\lambda_{ijkl}(\vec{r}) = \bar{\lambda}_{ijkl} + \lambda'_{ijkl} \Delta c(\vec{r}) \quad (\text{I.10})$$

with

$$\bar{\lambda}_{ijkl} = \tau_{\gamma'} \lambda_{ijkl}^{\gamma'} + \tau_{\gamma} \lambda_{ijkl}^{\gamma}; \quad \lambda'_{ijkl} = \frac{\lambda_{ijkl}^{\gamma'} - \lambda_{ijkl}^{\gamma}}{c_{\gamma'} - c_{\gamma}} \quad (\text{I.11})$$

$\tau_{\gamma} = (c_{\gamma'} - \bar{c}) / (c_{\gamma'} - c_{\gamma})$ and $\tau_{\gamma'} = (\bar{c} - c_{\gamma}) / (c_{\gamma'} - c_{\gamma})$ are the volume fractions and λ_{ijkl}^{γ} , $\lambda_{ijkl}^{\gamma'}$ the elastic constants of matrix and precipitates, respectively. Numerical values for elastic constants used in this paper are given in table 1. It should be noted that in the inhomogeneous case, the mechanical equilibrium Eq. (I.8), (I.9) cannot be solved analytically as a function of the concentration field. In the following we use an iterative algorithm in the Fourier space.

I.3 Viscoplastic coupling with the PFM

Rafting in superalloys under constant loading is strongly influenced by plastic activity. The resulting effect may be complex, as it depends on various properties, such as the sign of the lattice parameter misfit, the orientation of the channels with respect to the loading, the elastic constants inhomogeneities. As example, with a negative lattice misfit ($a_{\gamma'} < a_{\gamma}$), dislocations will tend to relax (increase) the coherency stresses along the γ/γ' interface perpendicular (parallel) to the tensile loading direction. Therefore, we propose to mix the PFM summarized above with a viscoplastic constitutive model. We suppose that such a model can be applied at mesoscale. In other words, each grid point of our simulation averages plastic strains generated by a large amount of dislocations. The strain tensor is dissociated in an elastic and a plastic part :

$$\epsilon = \epsilon^{el} + \epsilon^p \quad (\text{I.12})$$

I.3.1 Viscoplastic model

We have chosen a model including hardening effects by the means of an isotropic hardening parameter r and a non-linear kinematic hardening parameter α , which add two more state variables to the system. Dual variables R and \mathbf{X} are defined by :

$$R = \rho \frac{\partial F_{vp}}{\partial r}; \quad \mathbf{X} = \rho \frac{\partial F_{vp}}{\partial \alpha} \quad (\text{I.13})$$

	Elastic constants (GPa)			Viscoplastic constants				
	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$R_0(\text{MPa})$	$K(\text{MPa}\cdot\text{s})$	n	$C(\text{MPa})$	D
γ	96	52	82	87	365	5	22484	1776
γ'	162	78	111	1053	300	5	1113	20

TAB. I.1. Material parameters for AM1 superalloy at 950 °C

where ρ is the mass density. The Von Mises yield criterion is used. The temporal evolution of viscoplasticity related variables is given by the following equations :

$$\dot{p} = \left\langle \frac{J_2(\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{X}) - R}{K} \right\rangle^n \quad (\text{I.14})$$

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = \frac{3}{2} \dot{p} \frac{\boldsymbol{\sigma}' - \mathbf{X}'}{J_2(\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{X})} \quad (\text{I.15})$$

$$\dot{\mathbf{X}} = \frac{2}{3} C \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p - D \mathbf{X} \dot{p} \quad (\text{I.16})$$

In the present model, there is no evolution law for the isotropic hardening parameter R which will be considered as a material parameter R_0 , as the other parameters K , n , C , D . In the case of the γ/γ' system, the smooth matrix accomodate the main part of the plastic strain whereas precipitates are very hard. As a consequence, the material parameters are highly inhomogeneous. As for the elastic constants, we introduce a dependance of these parameters with the local concentration. For instance, for the R_0 parameter, we use the following interpolation scheme :

$$R_0(c(\vec{r})) = \bar{R}_0 + R'_0 \tanh\left(\theta \frac{c(\vec{r}) - \bar{c}}{c_{\gamma'} - c_{\gamma}}\right) \quad (\text{I.17})$$

$$\bar{R}_0 = \frac{R_0^{\gamma} + R_0^{\gamma'}}{2}; \quad R'_0 = \frac{R_0^{\gamma} - R_0^{\gamma'}}{2} \quad (\text{I.18})$$

θ is a parameter which controls the variation of $R_0(c(\vec{r}))$ between c_{γ} and $c_{\gamma'}$. It is chosen to induce a smooth variation of the viscoplastic parameters¹. Material parameters of both phases presented in Table I.1 are identified from mechanical tests on AM1 superalloy and on massive γ and optimised with the help of Finite Element simulations.

I.3.2 Viscoplastic coupling with the PFM

The elastic energy now writes :

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_V \lambda_{ijkl}(\vec{r}) (\epsilon_{ij}(\vec{r}) - \epsilon_{ij}^0(\vec{r}) - \epsilon_{ij}^p(\vec{r})) (\epsilon_{kl}(\vec{r}) - \epsilon_{kl}^0(\vec{r}) - \epsilon_{kl}^p(\vec{r})) dV \quad (\text{I.19})$$

which leads us to a new iterative scheme for its numerical computation.

Moreover, the viscoplastic stored energy is described by an additional term in the free energy :

$$F_{vp} = \int_V \left(\frac{1}{3} C(c(\vec{r})) \boldsymbol{\alpha}(\vec{r}) : \boldsymbol{\alpha}(\vec{r}) + R_0(c(\vec{r})) p(\vec{r}) \right) dV \quad (\text{I.20})$$

An consequence of the functional form of F_{vp} is that the viscoplastic stored energy will generate a new driving force in the Cahn-Hilliard kinetics equation. This contribution is here ignored.

¹Viscoplastic material parameters have to be saturated below c_{γ} and above $c_{\gamma'}$ to ensure stability of the numerical integration of the viscoplastic differential equations. It is the reason why a tanh function has to be chosen

I.4 Results

This section presents a simulation of a γ/γ' microstructural evolution performed with our viscoplastic PFM approach and, for comparison, results obtained with a simple elastic modelling. A creep loading of 300 MPa at 950 °C has been applied.

As seen in fig.I.1, for the same computational conditions (material constants, external loading and initial state), for the time evolution investigated here, no rafting phenomenon is observed in the purely elastic modelling, whereas well defined rafts are clearly visible using the elasto-viscoplastic PFM. Note the presence of thin wetting γ strips within the elongated rafts that apparently are not seen in rafted microstructures observed in industrial superalloys, as can be seen in fig.I.1.

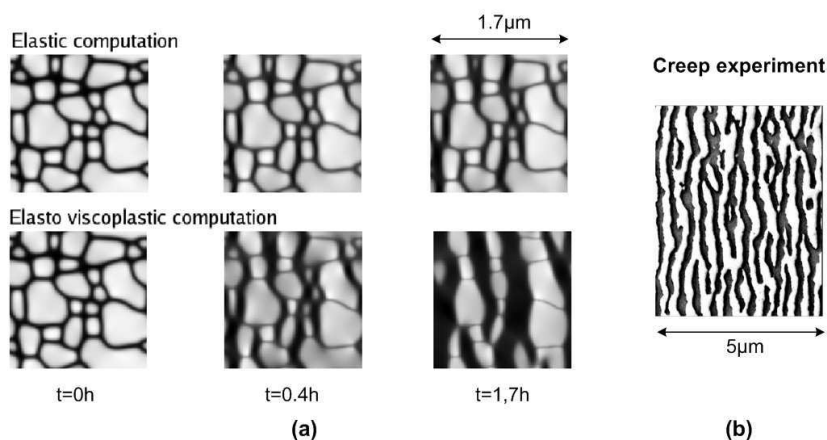


FIG. I.1. Comparison between elastic and elasto-viscoplastic computations of rafting (a), typical experimental rafted microstructure (creep test at 1050 °C and 150MPa) (b)

I.5 Conclusion and perspectives

Coupling Phase Field modelling with a non linear mechanical approach is a very promising way to study the influence of plasticity in directional coarsening. This contribution shows that dislocations play a role in the rafting kinetics as well as in the shape of precipitates. Short term work will consist in adding the contribution of the viscoplastic free energy to the Cahn-Hilliard equation.

Nevertheless, the viscoplastic modelling chosen here could still be improved. First, it does not account for the anisotropy in plastic activity exhibited in both phases. Crystallographic viscoplastic models, written at the slip systems level, should be employed here to describe single crystal anisotropy in mechanical behaviour. Second, even with crystallographic laws, length scale effects should be included in the viscoplastic part of the model. Generalized Continua theories or more physically-based constitutive laws should be employed to obtain proper descriptions of the plastic strain influence on the microstructure evolution.

Annexe J

Strain gradient plasticity solution for a two-phase plastic laminate

A complete solution of the laminate boundary value problem can be worked out for the two-phase periodic microstructure under simple shear for the “*curlHP*” model of section 6.3 when both phases exhibit a plastic behavior. The hard phase now admits a critical resolved shear stress τ_c^h . In both phases, under plastic loading conditions, the plastic slip has a parabolic profile :

$$\gamma^h(x_1) = a^h x_1^2 + b^h x_1 + c^h, \quad \gamma^s(x_1) = a^s x_1^2 + b^s x_1 + c^s \quad (\text{J.1})$$

taken over the interval $[-s/2, s/2+h]$, with six coefficients to be determined from the following conditions :

- Continuity of plastic slip at $x_1 = s/2$ and periodicity of plastic slip at $x_1 = -s/2$ and $x_1 = s/2 + h$:

$$a^s \left(\frac{s}{2}\right)^2 + b^s \frac{s}{2} + c^s = a^h \left(\frac{s}{2}\right)^2 + b^h \frac{s}{2} + c^h \quad (\text{J.2})$$

$$a^s \left(\frac{s}{2}\right)^2 - b^s \frac{s}{2} + c^s = a^h \left(\frac{s}{2} + h\right)^2 + b^h \left(\frac{s}{2} + h\right) + c^h \quad (\text{J.3})$$

- Continuity of double stress component $M_{13} = -A\gamma_{,1}$ at $x_1 = s/2$ and periodicity double stress vector at $x_1 = -s/2$ and $s/2 + h$:

$$A^s(2a^s \frac{s}{2} + b^s) = A^h(2a^h \frac{s}{2} + b^h) \quad (\text{J.4})$$

$$A^s(-2a^s \frac{s}{2} + b^s) = A^h(2a^h(\frac{s}{2} + h) + b^h) \quad (\text{J.5})$$

- Plasticity criterion

$$\sigma_{12} + 2A_s a^s = \tau_c^s \quad (\text{J.6})$$

$$\sigma_{12} + 2A_h a^h = \tau_c^h \quad (\text{J.7})$$

- Symmetry condition at $x_1 = 0$:

$$\gamma_{,1}(0) = 0 \quad (\text{J.8})$$

- Periodicity condition for the perturbation u_2 translated into the following terms; The elastic law provides

$$u_{2,1} = \sigma_{12}/\mu - \bar{\gamma} + \gamma \quad (\text{J.9})$$

The mean value over one unit cell of the l.h.s. necessarily vanishes since u_2 is periodic :

$$\begin{aligned}
(s+h) \langle u_{2,1} \rangle &= (s+h) \langle \sigma_{12}/\mu - \bar{\gamma} + \gamma \rangle \\
&= \int_{-s/2}^{s/2} (\tau_c^s/\mu - 2A^s a^s/\mu - \bar{\gamma} + a^s x_1^2 + c^s) dx_1 \\
&+ \int_{s/2}^{s/2+h} (\tau_c^h/\mu - 2A^h a^h/\mu - \bar{\gamma} + a^h x_1^2 + c^h) dx_1 \\
&= (\tau_c^s/\mu - 2A^s a^s/\mu - \bar{\gamma})(s+h) + s c^s + h c^h + \frac{2a^s}{3} \left(\frac{s}{2}\right)^3 \\
&+ \frac{2a^h}{3} \left(\left(\frac{s}{2}+h\right)^3 - \left(\frac{s}{2}\right)^3\right) + \frac{b^h}{2} \left(\left(\frac{s}{2}+h\right)^2 - \left(\frac{s}{2}\right)^2 + h(s+h)\right)
\end{aligned} \tag{J.10}$$

From (J.8) we get

$$b^s = 0 \tag{J.11}$$

The combination (J.6) - (J.7) provides the relation

$$2(A^s a^s - A^h a^h) = \tau_c^s - \tau_c^h \tag{J.12}$$

From the combination of (J.4) and (J.12), we get

$$b^h = \frac{\tau_c^s - \tau_c^h}{A^h} \frac{s}{2} \tag{J.13}$$

The combination (J.2) - (J.3) yields

$$a^h = \frac{b^h}{s+h} = \frac{\tau_c^s - \tau_c^h}{A^h} \frac{s}{2(s+h)} \tag{J.14}$$

Finally,

$$a^s = \frac{\tau_c^s - \tau_c^h}{A^s} \frac{2s+h}{2(s+h)} \tag{J.15}$$

The equations (J.2) (or (J.3)) and (J.10) provide a system of two equations to eventually obtain c^h and c^s .

Annexe K

Cosserat solution for symmetric double slip

This appendix gives the Cosserat solution for symmetric double slip in the laminate microstructure under shear loading studied in the paragraph 6.6.2 with the *microcurl* model. We consider two slip systems whose direction and normal are given by the following vectors :

$$\underline{l}^1 = \begin{bmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \\ 0 \end{bmatrix}, \underline{n}^1 = \begin{bmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{K.1})$$

$$\underline{l}^2 = \begin{bmatrix} \cos \theta \\ -\sin \theta \\ 0 \end{bmatrix}, \underline{n}^2 = \begin{bmatrix} \sin \theta \\ \cos \theta \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{K.2})$$

This leads to the following plastic deformation tensor

$$\underline{e}^p = \begin{bmatrix} -\cos \theta \sin \theta (\gamma^1 - \gamma^2) & \cos^2 \theta (\gamma^1 + \gamma^2) & 0 \\ -\sin^2 \theta (\gamma^1 + \gamma^2) & \cos \theta \sin \theta (\gamma^1 - \gamma^2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{K.3})$$

As the two slip systems are symmetric, we have $\gamma^1 = \gamma^2 = \gamma$. The plastic deformation tensor has therefore two non-zero components :

$$e_{12}^p = 2\gamma \cos^2 \theta, \quad e_{21}^p = -2\gamma \sin^2 \theta \quad (\text{K.4})$$

Consequently, the elastic déformation tensor reads

$$\underline{e}^e = \begin{bmatrix} 0 & \bar{\gamma} + \phi - e_{12}^p & 0 \\ u_{,1} - \phi - e_{21}^p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{K.5})$$

The resulting stress tensor has two non-zero components

$$\sigma_{12} = \mu_s (e_{12}^e + e_{21}^e) + \mu_{cs} (e_{12}^e - e_{21}^e) \quad (\text{K.6})$$

$$\sigma_{21} = \mu_s (e_{12}^e + e_{21}^e) - \mu_{cs} (e_{12}^e - e_{21}^e) \quad (\text{K.7})$$

The curvature and couple stress tensor have the same expression as in single slip. More over, balance equations give a parabolic profil for the microrotation as in single slip.

The Schmid criterion writes

$$f^1 = f^2 = |\cos^2 \theta \sigma_{12} - \sin^2 \theta \sigma_{21}| - \tau_c = 0 \quad (\text{K.8})$$

Two cases are possible according to the θ angle and the loading :

$$\cos^2 \theta \sigma_{12} - \sin^2 \theta \sigma_{21} = \tau_c \quad (\text{case 1}) \quad (\text{K.9})$$

$$\cos^2 \theta \sigma_{12} - \sin^2 \theta \sigma_{21} = -\tau_c \quad (\text{case 2}) \quad (\text{K.10})$$

The writing of the interface conditions leads to the following expression for ϕ in the (s) phase in the case i :

$$a_s = \frac{\mathcal{A}_i}{\mathcal{B}_i l^2 + \mathcal{C}_i l \coth\left(\omega_h \frac{l(1-f_s)}{2}\right) + \mathcal{D}_i} \quad (\text{K.11})$$

with, in the first case

$$\begin{cases} \mathcal{A}_1 = \bar{\gamma} - \frac{\tau_c}{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta} \left[\frac{1}{\mu^h} + \frac{f_s(1 + \tan^2 \theta)}{2} \left(\frac{1}{\mu^s} - \frac{1}{\mu^h} \right) \right] \\ \mathcal{B}_1 = (1 - \tan^2 \theta) \frac{f_s^3}{6} \\ \mathcal{C}_1 = (1 - \tan^2 \theta) \frac{f_s^2 \beta^s}{\beta^h \omega^h} \\ \mathcal{D}_1 = \frac{4\beta^s \cos^2 \theta}{\mu^h (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} (1 - f_s \tan^2 \theta) + f_s (1 - \tan^2 \theta) \frac{\beta^s}{\mu_c^s} + \frac{f_s \beta^s (1 + \tan^2 \theta)}{\mu^s (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} \end{cases}$$

and in the second case

$$\begin{cases} \mathcal{A}_1 = \bar{\gamma} + \frac{\tau_c}{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta} \left[\frac{1}{\mu^h} + \frac{f_s(1 + \tan^2 \theta)}{2} \left(\frac{1}{\mu^s} - \frac{1}{\mu^h} \right) \right] \\ \mathcal{B}_2 = \mathcal{B}_1 \\ \mathcal{C}_2 = \mathcal{C}_1 \\ \mathcal{D}_2 = \mathcal{D}_1 \end{cases}$$

More over we have the following relations between integration constants in the case 1

$$a_h = -\frac{\beta^s s a_s}{\beta^h \omega_h \sinh\left(\omega_h \frac{h}{2}\right)} \quad (\text{K.12})$$

$$d_{h1} = \frac{\tau_c - 4\beta^s a_s \cos^2 \theta}{2\mu^h (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} - \bar{\gamma} \quad (\text{K.13})$$

$$d_{s1} = -a_s \left[\frac{s^2}{4} + \frac{\beta^s s \coth\left(\omega_h \frac{h}{2}\right)}{\beta^h \omega^h} + \frac{2\beta^s \cos^2 \theta}{\mu^h (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} \right] + \frac{\tau_c}{2\mu^h (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} - \bar{\gamma} \quad (\text{K.14})$$

and in the case 2

$$d_{h2} = \frac{-\tau_c - 4\beta^s a_s \cos^2 \theta}{2\mu^h (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} - \bar{\gamma} \quad (\text{K.15})$$

$$d_{s2} = -a_s \left[\frac{s^2}{4} + \frac{\beta^s s \coth\left(\omega_h \frac{h}{2}\right)}{\beta^h \omega^h} + \frac{2\beta^s \cos^2 \theta}{\mu^h (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} \right] + \frac{-\tau_c}{2\mu^h (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} - \bar{\gamma} \quad (\text{K.16})$$

The expression of a_s as a function of the mean plastic deformation e_{12}^p has also been calculated

$$a_s = \frac{\mathcal{A}'}{\mathcal{B}' l^2 + \mathcal{C}' l \coth\left(\omega_h \frac{l(1-f_s)}{2}\right) + \mathcal{D}'} \quad (\text{K.17})$$

where \mathcal{A}' , \mathcal{B}' , \mathcal{C}' , \mathcal{D}' are given by

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A}' = -\langle e_{12}^p \rangle + \frac{\tau_c}{2(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} \left(\frac{1}{\mu^h} - \frac{1}{\mu^s} \right) \\ \mathcal{B}' = \frac{f_s^3}{6} \\ \mathcal{C}' = \frac{-\beta^s f_s^2}{\beta^h \omega^h} \\ \mathcal{D}' = \beta^s f_s \left(\frac{1}{\mu_c^s} - \frac{1}{\mu^s (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} + \frac{\cos^2 \theta}{2\mu^h (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} \right) \end{array} \right.$$

in the case 1. In the case 2, the coefficient are the same except \mathcal{A}' which writes

$$\mathcal{A}_2 = -\langle e_{12}^p \rangle - \frac{\tau_c}{2(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} \left(\frac{1}{\mu^h} - \frac{1}{\mu^s} \right). \quad (\text{K.18})$$

Bibliographie

- [Acharya 00] A. Acharya & J.L. Bassani. *Lattice incompatibility and a gradient theory of crystal plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 48, pages 1565–1595, 2000.
- [Aifantis 84] E.C. Aifantis. *On the microstructural origin of certain inelastic models*. Journal of Engineering Materials and Technology, vol. 106, pages 326–330, 1984.
- [Aifantis 87] E.C. Aifantis. *The physics of plastic deformation*. International Journal of Plasticity, vol. 3, pages 211–248, 1987.
- [Aifantis 05] K.E. Aifantis & J.R. Willis. *The role of interfaces in enhancing the yield strength of composites and polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 53, no. 5, pages 1047 – 1070, 2005.
- [Ardell 00] A.J. Ardell. *The Ni-Ni₃Al phase diagram : thermodynamic modelling and the requirements of coherent equilibrium*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol. 8, no. 3, pages 277–286, 2000.
- [Ardell 05] A.J. Ardell & V. Ozolins. *Trans-interface diffusion-controlled modelling*. Nature Materials, vol. 4, no. 4, pages 309–316, 2005.
- [Arrel 94] D.J. Arrel & J.L. Vallès. *Interfacial dislocation based criterion for the prediction of rafting behaviour in superalloys*. Scripta Metallurgica et Materialia, vol. 30, pages 149–153, 1994.
- [Ayrault 89] D. Ayrault. *Fluage à haute température de superalliages base nickel monocristallins*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1989.
- [Bammann 01] D.J. Bammann. *A model of crystal plasticity containing a natural length scale*. Materials Science and Engineering A, vol. 309–310, pages 406–410, 2001.
- [Bayley 06] C.J. Bayley, W.A.M. Brekelmans & M.G.D. Geers. *A comparison of dislocation induced back stress formulations in strain gradient crystal plasticity*. International Journal of Solids and Structures, vol. 43, pages 7268–7286, 2006.
- [Benyoucef 94] M. Benyoucef. *Etude par microscopie in-situ des mécanismes de déformation du superalliage MC2*. Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, 1994.
- [Benyoucef 03] M. Benyoucef, A. Coujou, F. Pettinari-Sturmel, S. raujol, B. Boubker & N. clément. *Dynamics of micromechanisms controlling the mechanical behaviour of industrial single crystal superalloys*. Sadhana, vol. 23, pages 129–146, 2003.
- [Besson 01] J. Besson, G. Cailletaud, J.L. Chaboche & S. Forest. *Mécanique non linéaire des matériaux*. 2001.
- [Bettge 99] D. Bettge & W. Osterle. *Cube slip in near-[111] oriented specimens of a single-crystal nickel-base superalloy*. Scripta Materialia, vol. 40, no. 4, pages 389–395, 1999.
- [Biermann 95] H. Biermann, M. Strehler & H. Mughrabi. *High-temperature X-ray measurements of the lattice mismatch of creep-deformed monocrystals of the nickel-base superalloy SR99*. Scripta Metallurgica et Materialia, vol. 32, no. 9, pages 1405–1410, 1995.

- [Biermann 96] H. Biermann, B. Von Grossmann, T. Schneider, H. Feng & H. Mughrabi. *Investigation of the γ/γ' morphology and internal stresses in a monocrystalline turbine blade after service : determination of the local thermal and mechanical loads*. Dans *Superalloys 1996*, pages 201–210, Champion, Pennsylvania ; USA, Sept. 1996.
- [Bittencourt 03] E. Bittencourt, A. Needleman, ME Gurtin & E. Van der Giessen. *A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 51, no. 2, pages 281 – 310, 2003.
- [Bonnand 06] V. Bonnand. *Etude de l'endommagement d'un superalliage monocrystallin en fatigue thermo-mécanique multiaxiale*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2006.
- [Boubidi 00] P. Boubidi. *Caractérisation expérimentale et modélisation numérique de la fatigue à faible nombre de cycles d'un superalliage base Ni monocrystallin sous chargement multiaxial*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2000.
- [Boussinot 07] G. Boussinot. *Etude du vieillissement des superalliages à base nickel par la méthode des Champs de Phase*. Thèse de doctorat, Université Paris VI, 2007.
- [Boussinot 09] G. Boussinot, A. Finel & Y. Le Bouar. *Phase-field modeling of bimodal microstructures in nickel-based superalloys*. *Acta Materialia*, vol. 57, no. 3, pages 921 – 931, 2009.
- [Bouvard 06] J. L. Bouvard. *Modélisation de la propagation de fissure dans les aubes de turbines monocrystallines*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Nov. 2006.
- [Brien 95] V. Brien. *Etude par microscopie électronique en transmission des mécanismes de déformation d'un superalliage à base de nickel en fatigue oligocyclique à haute température*. Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay, 1995.
- [Brien 96] V. Brien, B. Décamps & A.J. Morton. *Microstructural behaviour of a superalloy under repeated or alternate L.C.F. at high temperature*. Dans *Superalloys 1996*, pages 313–318, Champion, Pennsylvania ; USA, Sept. 1996.
- [Brien 01a] V. Brien & B. Décamps. *Low cycle fatigue of a nickel based superalloys at high temperature : deformation microstructures*. *Materials Science and Engineering A*, vol. 316, no. 1-2, pages 18–31, 2001.
- [Brien 01b] V. Brien, L.P. Kubin & B. Décamps. *Low cycle fatigue of a nickel based superalloys at high temperature : simplified micromechanical modelling*. *Philosophical Magazine*, vol. 81, no. 9, pages 2285–2301, 2001.
- [Bronchart 06] Q. Bronchart. *Développement de méthodes de champs de phase quantitatives et application à la précipitation homogène dans les alliages binaires*. Thèse de doctorat, Université de Cergy-Pontoise, 2006.
- [Buffière 95] J.Y. Buffière & M. Ignat. *A dislocation based criterion for the raft formation in nickel-based superalloys single crystals*. *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 43, no. 5, pages 1791–1797, 1995.
- [Busso 00] E. P. Busso, F. T. Meissonier & N. P. O'Dowd. *Gradient-dependent deformation of two-phase single crystal*. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, vol. 48, no. 11, pages 2333–2361, 2000.
- [Cailletaud 79] G. Cailletaud. *Modélisation mécanique d'instabilités microstructurales en viscoplasticité cyclique à température variable*. Thèse de doctorat, Université Paris 6, Oct. 1979.
- [Cailletaud 87] G. Cailletaud. *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1987.
- [Caron 83] P. Caron & T. Khan. *Improvement of creep strength in a nickel-base single-crystal superalloy by heat treatment*. *Mater. Sci. Eng.*, vol. 61, no. 2, pages 173–184, 1983.

- [Caron 99] P. Caron & T. Khan. *Evolution of Ni-based superalloys for single crystal gas turbine blade applications*. Aerospace Science and Technology, vol. 3, no. 8, pages 513 – 523, 1999.
- [Carry 81] C. Carry, C. Houis & J.L. Strudel. *Creep properties of nickel-base superalloy single crystals. I - High-temperature creep (980°C)*. Memoires et Etudes Scientifiques de la Revue de Metallurgie, vol. 78, pages 139–146, 1981.
- [Cermelli 01] P. Cermelli & M.E. Gurtin. *On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 49, pages 1539–1568, 2001.
- [Chaboche 97] J.L. Chaboche & O. Jung. *Application of a kinematic hardening viscoplasticity model with thresholds to the residual stress relaxation*. International Journal of Plasticity, vol. 13, no. 10, pages 785 – 807, 1997.
- [Chaboche 08] J.L. Chaboche. *A review of some plasticity and viscoplasticity constitutive theories*. International Journal of Plasticity, vol. 24, no. 10, pages 1642–1693, 2008.
- [Chellman 74] D.J. Chellman & A.J. Ardell. *The coarsening of γ' precipitates at large volume fractions*. Acta Metallurgica, vol. 22, pages 577–588, 1974.
- [Chen 98] L.Q. Chen & J. Shen. *Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations*. Computer Physics Communications, vol. 108, pages 147–158, 1998.
- [Chen 04] C.Y. Chen & W.M. Stobbs. *Interfacial segregation and influence of antiphase boundaries on rafting in a γ/γ' alloy*. Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 35A, pages 733–740, 2004.
- [Chieragatti 87] R. Chieragatti. *Influence de l'orientation cristallographique sur le comportement en fatigue oligocyclique du MarM200 monocristallin*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1987.
- [Clayton 06] J.D. Clayton, D.L. McDowell & D.J. Bammann. *Modeling dislocations and disclinations with finite micropolar elastoplasticity*. International Journal of Plasticity, vol. 22, pages 210–256, 2006.
- [Clément 96] N. Clément, A. Coujou, M. Jouiad, P. Caron, H.O.K. Kirchner & T. Khan. *Local order and mechanical properties of the γ matrix of nickel-base superalloys*. Dans Superalloys 1996, pages 239–248, Champion, Pennsylvania ; USA, 1996.
- [Clément 06] N. Clément, M. benyoucef, M. Legros, P. Caron & A. Coujou. *In situ deformation at 850°C of standard and rafted microstructures of nickel base superalloys*. Materials Science Forum, vol. 509, pages 57–62, 2006.
- [Cordero 09] N. M. Cordero, A. Gaubert, S. Forest, F. Gallerneau, S. Kruch & E. P. Busso. *Size effects in generalized continuum crystal plasticity for two-phase laminates*. En préparation, 2009.
- [Cormier 06] J. Cormier. *Comportement en fluage anisotherme à haute et très haute température du superalliage monocristallin MC2*. Thèse de doctorat, Université de Poitiers, 2006.
- [de Bussac 92] A. de Bussac & P. Poubanne. *Loi de comportement anisotrope de l'AMI de 20 à 1100°C*. Rapport technique YKOM1/YLEV 60.291, Snecma, 1992.
- [de Bussac 93] A. de Bussac. *Loi de comportement à double viscosité : application à l'AMI $\langle 001 \rangle$ entre 20 et 1150°C*. Rapport technique YKOM1/YLEV 60.318, Snecma, 1993.
- [Demura 07] M. Demura, D. Golberg & T. Hirano. *An athermal deformation model of the yield stress anomaly in Ni_3Al* . Intermetallics, vol. 15, pages 1322–1331, 2007.
- [Devincre 01] B. Devincre, L.P. Kubin, C. Lemarchand & R. Madec. *Mesoscopic simulations of plastic deformation*. Materials Science and Engineering A, vol. 309-310, pages 211 – 219, 2001.
- [Diologent 02] F. Diologent. *Comportement en fluage et en traction de superalliages monocristallins à base de Nickel*. Thèse de doctorat, Université de Paris 11-Orsay, 2002.

- [Dollar 88] M. Dollar & I. M. Bernstein. *The effect of temperature on the deformation structure of single crystal nickel base superalloys*. Dans Superalloys 1988, pages 275–284, Champion, Pennsylvania ; USA, 1988.
- [Draper 89] S. Draper, D. Hull & R. Dreshfield. *Observations of directional gamma prime coarsening during engine operation*. Metallurgical Transactions A-Physical Metallurgy and Materials Science, vol. 20A, pages 683–688, 1989.
- [Duhl 87] D.N. Duhl. *Directionally solidified superalloys*. Wiley-Interscience, John Wiley and Sons, Superalloys II–High Temperature Materials for Aerospace and Industrial Power., pages 189–214, 1987.
- [Engler-Pinto 96] C C Jr Engler-Pinto, C Nosedo, M Y Nazmy & F Rezai-Aria. *Interaction between creep and thermo-mechanical fatigue of CM247LC-DS*. Dans Superalloys 1996, pages 319–325, Champion, Pennsylvania ; USA, 1996.
- [Epishin 09] A. Epishin, T. Link, H. Klingelhöffer, B. Fedelich, U. Brückner & P. Portella. *new technique for characterization of microstructural degradation under creep : Application to the nickel-base superalloy CMSX-4*. materials Science and Engineering A, vol. In Press, Corrected Proof, 2009.
- [Eringen 70] A.C. Eringen & W.D. Claus. *A micromorphic approach to dislocation theory and its relation to several existing theories*. Dans J.A. Simmons, R. de Wit & R. Bullough, éditeurs, Fundamental Aspects of Dislocation Theory, pages 1023–1062. Nat. Bur. Stand. (US) Spec. Publ. 317, II, 1970.
- [Espié 96] L. Espié. *Etude expérimentale et modélisation numérique du comportement de monocristaux de superalliages*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1996.
- [Estevez 97] R. Estevez, G. Hoinard & P. Franciosi. *Hardening anisotropy of $[\gamma]/[\gamma]'$ superalloy single crystals–II. Numerical analysis of heterogeneity effects*. Acta Materialia, vol. 45, no. 4, pages 1567 – 1584, 1997.
- [Fahrman 96] M. Fahrman, E. Fahrman, O. Paris, P. Fratzl & T.M. Pollock. *An experimental study of the role of plasticity in the rafting kinetics of a single crystal Ni-base superalloy*. Dans Superalloys 1996, pages 191–200, Champion, Pennsylvania ; USA, 1996.
- [Fahrman 99] M. Fahrman, W. Hermann, E. Fahrman, A. Boegli, T.M. Pollock & H.G. Sockel. *Determination of matrix and precipitate elastic constants in γ - γ' Ni-base model alloys, and their relevance to rafting*. Materials Science and Engineering : A, vol. 260, no. 1, pages 212–221, 1999.
- [Fedelich 99] B. Fedelich. *A microstructural based constitutive model for the mechanical behavior at high temperatures of nickel-base single crystal superalloys*. Computational Materials Science, vol. 16, pages 248–258, 1999.
- [Fedelich 02] B. Fedelich. *A microstructural model for the monotonic and cyclic mechanical behavior of single crystals of superalloys at high temperatures*. International Journal of Plasticity, vol. 18, pages 1–49, 2002.
- [Fedelich 04] B. Fedelich, R.F. Kubler, E.P. O’Dowd, N. Toullos, N. Voudouris G. ans Marchal, S. Forest & L. rémy. *SOCRAX Report D3.1 - Crystallographic constitutive equations : formulation, calibration and validation of predicted deformation response*. Rapport technique RT 15/07342, Commission Européenne - Onera, 2004.
- [Fedelich 08] B. Fedelich, G. Künecke, A. Epishin, T. Link & P. Portella. *Constitutive modelling of creep degradation due to rafting in single-crystalline Ni-base superalloys*. Materials Science and Engineering : A, vol. In Press, Corrected Proof, 2008.
- [Feng 96] H. Feng, H. Biermann & H. Mughrabi. *Microstructure-based 3D finite element modelling of lattice misfit and long-range internal stresses in creep-deformed nickel-base superalloy single crystals*. Material Science and Engineering A, vol. A214, pages 1–16, 1996.

- [Fleck 97] N.A. Fleck & J.W. Hutchinson. *Strain gradient plasticity*. Adv. Appl. Mech., vol. 33, pages 295–361, 1997.
- [Forest 96] S. Forest. *Modèles mécaniques de la déformation hétérogène des monocristaux*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1996.
- [Forest 97] S. Forest, G. Cailletaud & R. Sievert. *A Cosserat theory for elastoviscoplastic single crystals at finite deformation*. Archives of Mechanics, vol. 49, no. 4, pages 705–736, 1997.
- [Forest 00] S. Forest, F. Barbe & G. Cailletaud. *Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviour of polycrystals and multi-phase materials*. International Journal of Solids and Structures, vol. 37, pages 7105–7126, 2000.
- [Forest 01] S. Forest, F. Pradel & K. Sab. *Asymptotic analysis of heterogeneous Cosserat media*. International Journal of Solids and Structures, vol. 38, pages 4585–4608, 2001.
- [Forest 03a] S. Forest & R. Sedláček. *Plastic slip distribution in two phase laminate microstructures : dislocation-based versus generalized-continuum approaches*. Philosophical Magazine, vol. 83, no. 2, pages 245–276, 2003.
- [Forest 03b] S. Forest & R. Sedláček. *Plastic slip distribution in two-phase laminate microstructures : Dislocation-based vs. generalized-continuum approaches*. Philosophical Magazine A, vol. 83, pages 245–276, 2003.
- [Forest 08] S. Forest. *Some links between Cosserat, strain gradient crystal plasticity and the statistical theory of dislocations*. Philosophical Magazine, vol. 88, pages 3549–3563, 2008.
- [Forest 09] S. Forest. *Micromorphic Approach for Gradient Elasticity, Viscoplasticity, and Damage*. Journal of Engineering Mechanics, vol. 135, pages 117–131, 2009.
- [Fredholm 87] A. Fredholm. *Monocristaux d'alliages base nickel : relation entre composition, microstructure et comportement en fluage à haute température*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Jan. 1987.
- [Frenz 96] H. Frenz, J. Kinder, H. Klingelhöffer & P.D. Portella. *Behaviour of single crystal superalloys under cyclic loading at high temperatures*. Dans Superalloys 1996, pages 305–312, Champion, Pennsylvania ; USA, 1996.
- [Fujiwara 99] K. Fujiwara, M. Watanabe, Z. Horita, N. Nemoto, K. Nouri & T. Simozaki. Dans International Conference on Solid-Solid Transformations, JIMIC-3, 1999.
- [Gabb 89] T. P. Gabb & G. Welsch. *The high temperature deformation in cyclic loading of a single crystal nickel-base superalloy*. Acta metall., vol. 37, pages 1507–1516, 1989.
- [Ganghoffer 91] J.P. Ganghoffer, A. Hazotte, S. Denis & A. Simon. *Finite element calculation of internal mismatch stresses in a single crystal nickel base superalloy*. Scripta Metallurgica et Materialia, vol. 25, pages 2491–2496, 1991.
- [Gaubert 08] A. Gaubert, A. Finel, Y. Le Bouar & G. Boussinot. *Viscoplastic phase field modelling of rafting in Ni-base superalloys*. Dans CMDS11, pages 161–166, Paris ; France, 2008.
- [Gaubert 09] A. Gaubert, Y. Le Bouar & A. Finel. *Coupling phase field and visco-plasticity to study rafting in Ni-base superalloys*. Philosophical Magazine, 2009.
- [Gayda 89] J. Gayda & R.A. MacKay. *Analysis of γ' shape changes in a single crystal Ni-Base superalloy*. Scripta Metallurgica, vol. 23, no. 11, pages 1835 – 1838, 1989.
- [Glatzel 89] U. Glatzel & M. Feller-Kniepmeier. *Calculations of internal stresses in the γ/γ' microstructure of a nickel-base superalloy with a high volume fraction of γ' phase*. Scripta Metallurgica, vol. 23, pages 1839–1844, 1989.
- [Groh 05] S. Groh, B. Devincere, L. P. Kubin, A. Roos, F. Feyel & J.L. Chaboche. *Size effects in metal matrix composites*. Materials Science and Engineering A, vol. 400-401, pages 279 – 282, 2005.
- [Groma 03] I. Groma, F.F. Csikor & M. Zaiser. *Spatial correlations and higher-order gradient terms in a continuum description of dislocation dynamics*. Acta Materialia, vol. 51, pages 1271–1281, 2003.

- [Guo 08] X.H. Guo, S.Q. Shi, Q.M. Zhang & X.Q. Ma. *An elastoplastic phase-field model for the evolution of hydride precipitation in zirconium, Part I : smooth specimens*. Journal of Nuclear Materials, 2008.
- [Gurtin 96] M.E. Gurtin. *Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance*. Physica D, vol. 92, no. 3-4, pages 178–192, 1996.
- [Gurtin 02] M.E. Gurtin. *A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for the geometrically necessary dislocations*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 50, pages 5–32, 2002.
- [Gurtin 05] M.E. Gurtin & A. Needleman. *Boundary conditions in small-deformation single crystal plasticity that account for the Burgers vector*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 53, pages 1–31, 2005.
- [Gurtin 08] M.E. Gurtin & L. Anand. *Nanocrystalline grain boundaries that slip and separate : A gradient theory that accounts for grain-boundary stress and conditions at a triple-junction*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 56, pages 184–199, 2008.
- [Gururajan 07] M.P. Gururajan & T.A. Abinandanan. *Phase field study of precipitates rafting under a uniaxial stress*. Acta Materialia, vol. 55, pages 5012–5026, 2007.
- [Göken 99] M. Göken & M. Kempf. *Microstructural properties of superalloys investigated by nanoindentation in an atomic force microscope*. Acta Metallurgica, vol. 47, no. 3, pages 1043–1052, 1999.
- [Hanriot 93] F. Hanriot. *Comportement du superalliage monocristallin AM1 sous sollicitations cycliques*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1993.
- [Hu 01a] S. Y. Hu & L. Q. Chen. Acta Materialia, vol. 49, page 463, 2001.
- [Hu 01b] S.Y. Hu & L.Q. Chen. *A phase-field model for evolving microstructures with strong elastic inhomogeneity*. Acta Materialia, vol. 49, pages 1879–1890, 2001.
- [Hunter 08] A. Hunter & M. Koslowski. *Direct calculations of material parameters for gradient plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 56, no. 11, pages 3181–3190, 2008.
- [Kamaraj 98] M. Kamaraj, C. Mayr, M. Kolbe & G. Eggeler. *On the influence of stress state on rafting in the single crystal superalloy CMSX-6 under conditions of high temperature and low stress creep*. Scripta Materialia, vol. 39, no. 4, pages 589–594, 1998.
- [Kamaraj 03] M. Kamaraj. *Rafting in single crystal nickel-base superalloys - An overview*. Sadhana, vol. 28, no. 1-2, pages 115–128, 2003.
- [Khachaturyan 83] A.G. Khachaturyan. *Theory of structural transformations in solids*. 1983.
- [Khan 91] T. Khan & P. Caron. *Advanced superalloys for turbine blade and vane applications*. Dans CIM symposium on Advances in gas turbine engine materials, Ottawa (Canada), 1991.
- [Kikuchi 79] R. Kikuchi & J. W. Cahn. *Theory of interphase and antiphase boundaries in f.c.c. alloys*. Acta Metallurgica, vol. 27, page 1337, 1979.
- [Kitashima 08] T. Kitashima, J. Wang & H. Harada. *Phase-field simulation with the CALPHAD method for the microstructure evolution of multi-component Ni-base superalloys*. Intermetallics, vol. 16, no. 2, pages 239 – 245, 2008.
- [Kraft 95] S. Kraft, I. Altenberger & H. Mughrabi. *Directional γ - γ' coarsening in a monocrystalline Nickel-based superalloy during low-cycle thermomechanical fatigue*. Acta metallurgica et materialia, vol. 32, no. 3, pages 411–416, 1995.
- [Kröner 63] E. Kröner. *On the physical reality of torque stresses in continuum mechanics*. Int. J. Engng. Sci., vol. 1, pages 261–278, 1963.
- [Lahrman 98] D.F. Lahrman, R.D. Field, R. Darolia & H.L. Fraser. *Investigation of techniques for measuring lattice mismatch in a rhenium containing nickel base superalloy*. Acta Metall., vol. 36, no. 5, pages 1309 – 1320, 1998.

- [Le Biavant 01] K. Le Biavant. *Identification d'une loi d'endommagement pour l'AMI parois minces revêtu CIA*. Rapport technique YKOM 60675, Snecma, 2001.
- [Le Bouar 03] Y. Le Bouar, A. Loiseau & A. Finel. *Origin of the complex wetting behaviour in Co-Pt alloys*. Physical Review B, vol. 68, page 224203, 2003.
- [Lele 08] SP Lele & L. Anand. *A small-deformation strain-gradient theory for isotropic viscoplastic materials*. Philosophical Magazine, 88, vol. 30, no. 32, pages 3655–3689, 2008.
- [Lemarchand 01] C. Lemarchand, B. Devincere & L. P. Kubin. *Homogenization method for a discrete-continuum simulation of dislocation dynamics*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 49, no. 9, pages 1969 – 1982, 2001.
- [Lemaître 85] J. Lemaître & J.L. Chaboche. *Mécanique des matériaux solides*. 1985.
- [Leonard 98] F. Leonard & R. C. Desai. Phys. Rev. B, vol. 58, no. 8, page 8277, 1998.
- [Levkovitch 06] V. Levkovitch, R. Sievert & B. Svendsen. *Simulation of deformation and lifetime behavior of a FCC single crystal superalloy at high temperature under low-cycle fatigue loading*. International Journal of Fatigue, vol. 28, pages 1791–1802, 2006.
- [Li 97] D.Y. Li & L.Q. Chen. *Computer simulation of morphological evolution and rafting of γ' particles in Ni-based superalloys under applied stresses*. Scripta Materialia, vol. 37, no. 9, pages 1271–1277, 1997.
- [Li 07] S. Li, J. Tao, T. Sugui & H. Zhangqi. *Influence of precipitate morphology on tensile creep of a single crystal nickel-base superalloy*. Materials Science and Engineering A, vol. 454, pages 461–466, 2007.
- [Liebe 03] T. Liebe, A. Menzel & P. Steinmann. *Theory and numerics of geometrically non-linear gradient plasticity*. International Journal of Engineering Science, vol. 41, pages 1603–1629, 2003.
- [Ma 08] A. Ma, D. Dye & R.C. Reed. *A model for creep deformation behaviour of single-crystal superalloy CMSX-4*. Acta Materialia, vol. 56, pages 1657–1670, 2008.
- [MacKay 85] R.A. MacKay & L.J. Ebert. *The development of γ/γ' lamellar structures in a nickel-base superalloy during elevated temperature mechanical testing*. Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 16, no. 11, pages 1969–1982, Nov. 1985.
- [Marchal 06] N. Marchal. *Propagation de fissure en fatigue-fluage à haute température de superalliages monocristallins à base de nickel*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2006.
- [Massaoudi 02] M. Massaoudi. *Contribution à la modélisation du comportement mécanique des matériaux biphasés γ/γ'* . Thèse de doctorat, Université de Toulouse III, 2002.
- [Matan 99] N. Matan, D.C. Cox, C.M.F. Rae & R.C. Reed. *On the kinetics of rafting in CMSX-4 superalloy single crystals*. Acta Materialia, vol. 47, no. 7, pages 2031–2045, May 1999.
- [Mazot 92] P. Mazot & J. Fouquet. *Elastic constants determination of nickel base superalloy from room temperature up to 1100°C by dynamical method*. Mémoires et Etudes Scientifiques de la Revue de Métallurgie, vol. 89, no. 3, pages 165–170, 1992.
- [McDowell 08] D.L. McDowell. *Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials*. Materials Science and Engineering R, vol. 62, pages 67–123, 2008.
- [Méric 91] L. Méric, P. Poubanne & G. Cailletaud. *Single Crystal Modeling for Structural Calculations : Part 1–Model Presentation*. Journal of Engineering Materials and Technology, vol. 113, no. 1, pages 162–170, 1991.
- [Milligan 89] W. W. Milligan & S. D. Antolovich. *The correlation between the temperature dependence of the CRSS and the formation of superlattice-intrinsic stacking faults in the nickel-base superalloy PWA 1480*. Metallurgical Transactions A, vol. 20A, pages 1888–1889, 1989.
- [Miyazaki 79] T. Miyazaki, K. Nakamura & H. Mori. J. Mat. Sci., vol. 14, pages 1827–, 1979.

- [Moulinec 94] H. Moulinec & P. Suquet. *A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites*. Comptes rendus de l'Académie des sciences, vol. 318, no. 11, pages 1417–1423, 1994.
- [Mughrabi 96] H. Mughrabi, S. Kraft & M. Ott. *Specific aspects of isothermal and anisothermal fatigue of the monocrystalline Nickel-base superalloy CMSX6*. Dans Superalloys 1996, pages 335–344, Champion, Pennsylvania ; USA, 1996.
- [Muller 92] L. Muller, U. Glatzel & M. Feller-Kniepmeier. *Modelling thermal misfit stresses in nickel-base superalloys containing high volume fraction of gamma-prime phase*. Acta Metallurgica et Materialia, vol. 40, pages 1321–1327, 1992.
- [Nabarro 96] F. Nabarro. *The thermodynamic driving force for rafting in superalloys*. Acta materialia, vol. 44, no. 8, pages 3189–3198, 1996.
- [Nathal 85] M.V. Nathal, R.A. Mackay & R.G. Garlick. *temperature dependence of γ - γ' lattice mismatch in nickel-base superalloys*. Materials Science and Engineering, vol. 75, pages 195–205, 1985.
- [Nembach 06] E. Nembach. *The high temperature peak of the yield strength of γ' -strengthened superalloys*. Materials Science and Engineering A, vol. 429, pages 277–286, 2006.
- [Nitz 98a] A. Nitz, U. Lagerpusch & E. Nembach. *CRSS anisotropy and tension/compression asymmetry of a commercial superalloy*. Acta Materialia, vol. 46, no. 13, pages 4769–4779, 1998.
- [Nitz 98b] A. Nitz & E. Nembach. *The critical resolved shear stress of a superalloy as a combination of those of its γ matrix and γ' precipitates*. Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 29A, pages 799–807, 1998.
- [Nouailhas 90] D. Nouailhas. *Un modèle de viscoplasticité cyclique pour matériaux anisotropes à symétrie cubique*. Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences - série II, vol. 310, pages 887–890, 1990.
- [Nouailhas 93] D. Nouailhas, D. Pacou, G. Cailletaud, F. Hanriot & L. Rémy. *Experimental study of the anisotropic behaviour of the CMSX2 single crystal superalloy under tension-torsion loadings*. Dans D. Mc Dowell & R. Ellis, éditeurs, Advances in multiaxial fatigue - ASTM STP 1191, pages 244–258, 1993.
- [Nouailhas 95] D. Nouailhas, J. P. Culié, G. Cailletaud & L. Méric. *Finite element analysis of stress-strain behaviour of single crystal tubes*. European Journal of mechanics A/Solids, vol. 14, pages 137–154, 1995.
- [Nouailhas 96] D. Nouailhas & G. Cailletaud. *Finite element analysis of the mechanical behavior of two-phase single-crystal superalloys*. Scripta Materialia, vol. 34, no. 4, pages 565–571, 1996.
- [Nouailhas 97] D. Nouailhas & S. Lhuillier. *On the micro-macro modelling of gamma/gamma prime single crystal behavior*. Computational Materials Science, vol. 9, pages 177–187, 1997.
- [Nye 53] J.F. Nye. *Some geometrical relations in dislocated crystals*. Acta Metall., vol. 1, pages 153–162, 1953.
- [Olschewski 95] J. Olschewski, H. Klingelhoffer, W. Dreyer, D. Nouailhas, J.P. Culié, P. Paulmier, G. Cailletaud & Forest. *Developpement of microstructural based viscoplastic models for an advanced design of single crystal hot section components*. Rapport technique Final Report, BRITE EURAM program BRE2-CT92-0196, 1995.
- [Ott 99] M. Ott & H. Mughrabi. *Dependence of the high-temperature low-cycle fatigue behaviour of the monocrystalline nickel-base superalloys CMSX-4 and CMSX-6 on the γ/γ' -morphology*. Materials Science and Engineering, vol. 272, no. 1, pages 24–30, 1999.
- [Peng 00] Z.F. Peng, Y.Y. Ren, Q.S. Mei, B.Z. Fan, B.Z. Fan, J.C. Zhao, Y.Q. Wang & J.H. Sun. *Directional coarsening of γ' precipitates in typical regions of original dendritic structure of CMSX-2*. Scripta Materialia, vol. 42, pages 1059–1064, 2000.

- [Pessah-Simonetti 92] M. Pessah-Simonetti. *Effets des instabilités structurales sur les propriétés mécaniques du superalliage monocristallin MC2*. Thèse de doctorat, Université Paris Sud, 1992.
- [Pettinari 01] F. Pettinari, M. Prem, G. Krexner, P. Caron, A. Coujou, H.O.K. Kirchner & N. Clément. *Local order in industrial and model [gamma] phases of superalloys*. Acta Materialia, vol. 49, no. 13, pages 2549 – 2556, 2001.
- [Pineau 76] A. Pineau. *Influence of Uniaxial Stress on the Morphology of Coherent Precipitates During Coarsening - Elastic Energy Considerations*. Acta Metall., vol. 24, no. 6, pages 559–564, Jun. 1976.
- [Pollock 94] T.M. Pollock & A.S. Argon. *Directional coarsening in nickel-base single crystals with high volume fractions of coherent precipitates*. Acta Metall. Mater., vol. 42, no. 6, pages 1859–1874, 1994.
- [Poubanne 89] P. Poubanne. *Etude et modélisation du comportement mécanique d'un superalliage monocristallin pour aube de turbine*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris, 1989.
- [Preußner 09] J. Preußner, Y. Rudnik, H. Brehm, R. Völkl & U. Glatzel. *A dislocation density based material model to simulate the anisotropic creep behavior of single-phase and two-phase single crystals*. International Journal of Plasticity, vol. 25, no. 5, pages 973 – 994, 2009.
- [Racine 95] A. Racine. *Instabilités chimiques et morphologiques des précipités γ' lors d'essais de fluage de superalliages monocristallins à base nickel*. Thèse de doctorat, INPL, 1995.
- [Ratel 06] N. Ratel, G. Bruno, P. Bastie & T. Mori. *Plastic strain-induced rafting of γ' precipitates in Ni superalloys : Elasticity analysis*. Acta materialia, vol. 54, no. 19, pages 5087–5093, 2006.
- [Rodney 01] D. Rodney & A. Finel. Dans MRS Symp. Proc., volume 652, page Y4, 2001.
- [Rodney 03] D. Rodney, Le Bouar Y. & A. Finel. *Phase Field methods and dislocations*. Acta materialia, vol. 51, no. 1, pages 17–30, 2003.
- [Royer 93] A. Royer. *Evolutions thermique et mécanique de la microstructure de superalliages monocristallins étudiées par diffusion centrale et diffraction (neutrons, rayons gamma)*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, 1993.
- [Royer 98] A. Royer, P. Bastie & M. Véron. *In situ determination of the γ' phase volume fraction and of relations between lattice parameters and precipitates morphology in Ni-based single crystal superalloy*. Acta Materialia, vol. 46, no. 15, pages 5357–5368, 1998.
- [Royer 01] A. Royer, A. Jacques, P. Bastie & M. Véron. *The evolution of the lattice parameter mismatch of nickel based superalloy : an in situ study during creep deformation*. Materials Science and Engineering, vol. A319, no. 321, pages 800–804, 2001.
- [Sass 96] V. Sass, U. Glatzel & M. Feller-Kniepmeier. *Creep anisotropy in the monocrySTALLINE nickel-base superalloy CMSX-4*. Dans Superalloys 1996, pages 283–290, Champion, Pennsylvania ; USA, 1996.
- [Schulze 00] C. Schulze & M. Feller-Kniepmeier. *Phase compositions and lattice misfit in CMSX-11B partition coefficients in single crystal nickel base superalloys*. Scripta Materialia, vol. 44, pages 731–736, 2000.
- [Sedláček 00] R. Sedláček & S. Forest. *Non-local plasticity at microscale : A dislocation-based model and a Cosserat model*. physica status solidi (b), vol. 221, pages 583–596, 2000.
- [Sengupta 94] A. Sengupta, S. K. Putatunda, L. Bartosiewicz, J. Hangan, P. J. Nailos, M. Peputapeck & F. E. Alberts. *Tensile behavior of a new single crystal nickel-based superalloy CMSX-4 at room and elevated temperatures*. Journal of Materials Engineering and Performance, vol. 3, no. 5, pages 664–672, 1994.

- [Serin 04] K. Serin, G. Göbelini & G. Eggeler. *On the influence of stress state, stress level and temperature on [gamma]-channel widening in the single crystal superalloy CMSX-4*. Mater. Sci. Eng., A, vol. 387-389, pages 133–137, 2004.
- [Shah 84] D. M. Shah & D. N. Duhl. *The Effect of Orientation, Temperature and Gamma Prime Size on the Yield Strength of a Single-Crystal Nickel-Base Superalloy*. Dans Superalloys 1984, pages 105–114, Champion, Pennsylvania ; USA, 1984.
- [Shu 01] J.Y. Shu, N.A. Fleck, E. Van der Giessen & A. Needleman. *Boundary layers in constrained plastic flow : comparison of non local and discrete dislocation plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 49, pages 1361–1395, 2001.
- [Shui 06] Li Shui, Sugui Tian, Tao Jin & Zhuangqi Hu. *Influence of pre-compression on microstructure and creep characteristic of a single crystal nickel-base superalloy*. Materials Science and Engineering A., vol. 418, no. 1-2, pages 229–235, 2006.
- [Sieborger 01] D. Sieborger, H. Knake & U. Glatzel. *Temperature dependence of the elastic moduli of the nickel-base superalloy CMSX-4 and its isolated phases*. Materials Science and Engineering : A, vol. 298, no. 1, pages 26–33, jan. 2001.
- [Sims 87] T.C. Sims, N.S. Stoloff & W.C. Hagel. Superalloys ii. 1987.
- [Socrate 92] S. Socrate & D.M. Parks. *Numerical determination of the elastic driving force for directional coarsening in Ni-superalloys*. Acta metall. mater., vol. 41, no. 7, pages 2185–2209, 1992.
- [Steinmann 96] P. Steinmann. *Views on multiplicative elastoplasticity and the continuum theory of dislocations*. International Journal of Engineering Science, vol. 34, pages 1717–1735, 1996.
- [Svendsen 02] B. Svendsen. *Continuum thermodynamic models for crystal plasticity including the effects of geometrically-necessary dislocations*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 50, pages 1297–1329, 2002.
- [Svoboda 96] J. Svoboda & P. Lukás. *Modelling of kinetics of directional coarsening in Ni-superalloys*. Acta Materialia, vol. 44, no. 6, pages 2557 – 2565, 1996.
- [Svoboda 97] J. Svoboda & P. Lukás. *Modelling of recovery controlled creep in nickel-base superalloy single crystals*. Acta Materialia, vol. 45, no. 1, pages 125 – 135, 1997.
- [Svoboda 98] J. Svoboda & P. P. Lukás. *Model of creep in γ -oriented superalloy single crystals*. Acta Materialia, vol. 46, no. 10, pages 3421 – 3431, 1998.
- [Svoboda 00] J. Svoboda & P. Lukás. *Creep deformation modelling of superalloy single crystals*. Acta Materialia, vol. 48, no. 10, pages 2519 – 2528, 2000.
- [Takagi 04] H. Takagi, M. Fujiwara & K. Kakehi. *Measuring Young's modulus of Ni-based superalloy single crystals at elevated temperatures through microindentation*. Materials Science and Engineering A, vol. 387-389, pages 348 – 351, 2004.
- [Tanaka 08] K. Tanaka, T. Ichitsubo, K. Kishida, H. Inui & E. Matsubara. *Elastic instability condition of the raft structure during creep deformation in nickel-base superalloys*. Acta Materialia, vol. 56, pages 3786–3790, 2008.
- [Thornton 04] K. Thornton, Norio Akaiwa & P. W. Voorhees. *Large-scale simulations of Ostwald ripening in elastically stressed solids. II. Coarsening kinetics and particle size distribution*. Acta Materialia, vol. 52, no. 5, pages 1365 – 1378, 2004.
- [Tien 71] J.K. Tien & S.M. Copley. *The effect of orientation and sense of Applied uniaxial stress on the morphology of coherent gamma prime precipitates in stress annealed nickel-base superalloys crystals*. Metallurgical and Materials Transactions B, vol. 2, no. 1, pages 215–219, 1971.
- [Tinga 08] T. Tinga, W. A ; M. Brekelmans & M. G. D. Geers. *Incorporating strain gradient effects in a multiscale constitutive framework for nickel-base superalloys*. Philosophical Magazine, vol. 88, no. 30-32, pages 3793–3825, 2008.

- [Tinga 09] T. Tinga. *Multiscale modelling of single crystal superalloys for gas turbine blades*. Thèse de doctorat, Technische Universiteit Eindhoven, 2009.
- [Touratier 09] F. Touratier, E. Andrieu, D. Poquillon & B. Viguier. *Rafting microstructure during creep of the MC2 nickel-based superalloy at very high temperature*. *Materials Science and Engineering : A*, vol. 510-511, pages 244 – 249, 2009. 11th International Conference of Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures, CREEP 2008.
- [Ubachs 05] R.L.J.M. Ubachs, P.J.G. Schreurs & M.G.D. Geers. *Phase field dependent viscoplastic behaviour of solder alloys*. *International Journal of Solids and Structures*, vol. 42, pages 2533–2558, 2005.
- [Uhehara 07] T. Uhehara, T. Tsujino & N. Ohno. *Elasto-plastic simulation of stress evolution during grain growth using a phase field model*. *Journal of Crystal Growth*, vol. 300, pages 530–537, 2007.
- [Vaithyanathan 02] V. Vaithyanathan & L. Q. Chen. *Coarsening of ordered intermetallic precipitates with coherency stress*. *Acta Materialia*, vol. 50, no. 16, pages 4061 – 4073, 2002.
- [Vattré 09a] A. Vattré. *Bringing the length : from dislocation dynamics to continuum mechanics. Application to plasticity in single crystal nickel-based superalloys*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009.
- [Vattré 09b] A. Vattré, B. Devincré & A. Roos. *Dislocation dynamics simulations of precipitation hardening in Ni-based superalloys with high γ' volume fraction*. *Intermetallics*, vol. Accepté, 2009.
- [Véron 95] M. Véron. *Etude et modélisation de la coalescence orientée dans les superalliages à base de nickel*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1995.
- [Véron 96] M. Véron, Y. Bréchet & F. Louchet. *Directional coarsening of Ni-based superalloys : Computer simulation at the mesoscopic level*. *Acta Materialia*, vol. 44, no. 9, pages 3633 – 3641, 1996.
- [Véron 97] M Véron & P Bastie. *Strain induced directional coarsening in nickel based superalloys : investigation on kinetics using the small angle neutron scattering (SANS) technique*. *Acta Materialia*, vol. 45, no. 8, pages 3277–3282, 1997.
- [Völkl 98] R. Völkl, U. Glatzel & M. Feller-Kniepmeier. *Measurement of the unconstrained misfit in the nickel-base superalloy CMSX-4 with CEBD*. *Scripta Materialia*, vol. 38, no. 6, pages 893 – 900, 1998.
- [Wang 98] Y. Wang, D. Banerjee, C. C. Su & A. G. Khachaturyan. *Field kinetic model and computer simulation of precipitation of L12 ordered intermetallics from f.c.c. solid solution*. *Acta Materialia*, vol. 46, no. 9, pages 2983 – 3001, 1998.
- [Wang 01] Y.U. Wang, Y.M. Jin, A.M. Cuitiño & A.G. Khachaturyan. *Acta Mater.*, vol. 49, pages 1847–1857, 2001.
- [Wang 07] J.C. Wang, M. Osawa, T. Yokokawa, H. Harada & M. Enomoto. *Modeling the microstructural evolution of Ni-base superalloys by phase field method combined with CALPHAD and CVM*. *Computational Materials Science*, vol. 39, no. 4, pages 871 – 879, 2007.
- [Wang 08] T. Wang, G. Sheng, Z.-K.Liu & L.-Q. Chen. *Coarsening kinetics of $[\gamma]'$ precipitates in the Ni-Al-Mo system*. *Acta Materialia*, vol. 56, no. 19, pages 5544 – 5551, 2008.
- [Wu 09] W.P. Wu, Y.F. Guo, Y.S. Wang, R. Mueller & D. Gross. *Influence of external stress and plastic strain on morphological evolution of precipitates in Ni-based superalloys*. *Computational Materials Science*, vol. In Press, Corrected Proof, pages –, 2009.
- [Yang 85] S.W. Yang. *Elastic constants of a monocrystalline nickel-base superalloy*. *Metalurgical Transactions A*, vol. 16A, pages 661–664, 1985.

- [Yasuda 92] H. Yasuda, T. Takasugi & M. Koiwa. *Elasticity of Ni-based L1₂-type intermetallic compounds*. Acta metall. mater., vol. 2, pages 381–387, 1992.
- [Yefimov 04] S. Yefimov, I. Groma & E. Van der Giessen. *A comparison of a statistical-mechanics based plasticity model with discrete dislocation plasticity calculations*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 52, pages 279–300, 2004.
- [Yefimov 05] S. Yefimov & E. Van der Giessen. *Multiple slip in a strain-gradient plasticity model motivated by a statistical-mechanics description of dislocations*. International Journal of Solids and Structures, vol. 42, pages 3375–3394, 2005.
- [Zeghadi 05a] A.. Zeghadi. *Effet de la morphologie tri-dimensionnelle et de la taille de grain sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Dec. 2005.
- [Zeghadi 05b] A. Zeghadi, S. Forest, A.-F. Gourgues & O. Bouaziz. *Cosserat continuum modelling of grain size effects in metal polycrystals*. Proc. Appl. Math. Mech., vol. 5, pages 79–82, 2005.
- [Zhou 07a] N. Zhou, C. Shen, M.J. Mills & Y. Wang. *Phase field modeling of channel dislocation activity and γ' rafting in single crystal Ni-Al*. Acta Materialia, vol. 55, pages 5369–5381, 2007.
- [Zhou 07b] N. Zhou, C. Shen, M.J. Mills & Y. Wang. *Phase field modeling of channel dislocation activity and γ' rafting in single crystal Ni-Al*. Acta Materialia, vol. 55, pages 5369–5381, 2007.
- [Zhou 08] N. Zhou, C. Shen, M.J. Mills & Y. Wang. *Contributions from elastic inhomogeneity and from plasticity to $[\gamma]'$ rafting in single-crystal Ni-Al*. Acta Materialia, vol. 56, no. 20, pages 6156 – 6173, 2008.
- [Zhu 01] J. Zhu, L. Q. Chen & J. Shen. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 9, no. Morphological evolution during phase separation and coarsening with strong inhomogeneous elasticity, pages 499–511, 2001.
- [Zhu 04] J. Z. Zhu, T. Wang, A. J. Ardell, S. H. Zhou, Z. K. Liu & L. Q. Chen. *Three-dimensional phase-field simulations of coarsening kinetics of $[\gamma]'$ particles in binary Ni-Al alloys*. Acta Mater., vol. 52, no. 9, pages 2837–2845, 2004.

Modélisation des effets de l'évolution microstructurale sur le comportement mécanique du superalliage monocristallin AM1.

Ce travail s'inscrit dans le contexte de la modélisation et de la prévision de la durée de vie des aubes de turbines haute pression des moteurs aéronautiques. Ces pièces sont réalisées en superalliage monocristallin base nickel tel que l'AM1, matériau de l'étude. Dans le cadre de ce travail, nous nous sommes intéressés aux évolutions microstructurales se produisant à haute température sous chargement mécanique connues sous le nom de coalescence orientée des précipités. Ce travail a consisté, dans un premier temps, à étudier le comportement du matériau non-vieilli. Des essais à 950°C ont été réalisés afin d'enrichir la base d'essais existante. Ils ont permis l'identification d'un modèle de viscosité de type sinus hyperbolique sur une large gamme de vitesses de sollicitations. Le comportement initial du matériau a également été étudié à l'échelle mésoscopique (échelle des phases). Un modèle de comportement a été identifié pour chacune des phases afin de reproduire le comportement macroscopique du matériau. Cette étude, effectuée dans le cadre de la viscoplasticité classique a permis de mettre en évidence les limites de cette approche. Notamment, elle ne permet pas de modéliser les effets d'échelle observés en plasticité. Parallèlement, nous nous sommes intéressés au phénomène de coalescence orientée, tant d'un point de vue expérimental que numérique. Des essais mécaniques après vieillissement ont été réalisés. Différentes conditions de vieillissement ont été étudiées, en fluage à différentes températures et contraintes et suivant différentes orientations cristallographiques mais également sous chargement cyclique. Les essais mécaniques ont montré un effet prépondérant de la coalescence orientée sur l'érouissage du matériau, allant dans le sens d'un adoucissement. La coalescence orientée a également été modélisée par la méthode des champs de phases. Nous avons proposé un couplage du modèle champs de phases avec un modèle de comportement de viscoplasticité cristalline afin de prendre en compte l'influence de l'activité plastique dans les couloirs de matrice. Les simulations ont montré une accélération de la cinétique de mise en radeaux due à la plasticité ainsi que des précipités ayant une forme plus réaliste vis-à-vis de l'expérience, notamment en vieillissement sous chargement cyclique lent. La prise en compte des effets de la coalescence orientée passe par la modélisation des effets d'échelle en plasticité. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés aux milieux continus généralisés. Nous avons étudié analytiquement les effets d'échelle produits par un modèle de Cosserat et le modèle *microcurl* dans le cas d'un matériau biphasé en cisaillement. Les deux modèles prévoient un érouissage cinématique linéaire dépendant de la taille de la microstructure. Enfin, les développements précédents et les essais réalisés dans le cadre de ce travail ont permis la construction et l'identification d'un modèle macroscopique étendu qui rend compte des effets de la coalescence orientée sur le comportement mécanique de l'AM1.

Mots-clés : superalliage monocristallin, coalescence orientée, comportement mécanique, champs de phases, mécanique des milieux continus généralisés

Modelling of microstructural evolution influence on mechanical behaviour of single crystal superalloys

The framework of this thesis is the modelling and the lifetime prediction of high pressure aeronautical turbine blades. These parts are realized in nickel base single crystal superalloys. This work is focused on the microstructural evolution arising at high temperatures under mechanical loading known as the directionnal coarsening. In a first time, this work consists in studying the mechanical behaviour of the initial non-aged material. Tests have been performed at 950°C in order to enrich the available data base. They have allowed us to identify a hyperbolic sinus viscosity model over a wide range of strain rates. The initial behaviour has also been studied at the mesoscopic scale. A constitutive model has been identified for both phases in order to reproduce the macroscopic behaviour of the material. This study, performed in the classical viscoplasticity framework, shows the limits of this approach. In particular, it does not allow to model the length scale effects observed in plasticity. In the same time, we have studied the directionnal coarsening phenomenon in both experimental and numeric ways. Mechanical test after ageing have been realized. Various ageing conditions have been tested, in creep at different temperatures and stresses and along different cristallographic orientations but also under cyclic loading. Tests have shown an effect of the directionnal coarsening on the hardening. More precisely, the directionnal coarsening induces a softening of the material behaviour. Directionnal coarsening has also been simulated with the phase field method. We have proposed a coupling between the phase field model and a viscoplastic crystal plasticity model in order to take into account the plasticity in the evolving matrix channels. Simulations have shown an increase in the kinetics of the rafting evolution induced by plasticity and a more realistic morphology of the precipitates

as observed experimentally, in particular under cyclic ageing. In order to understand the influence of the directionnal coarsening on the mechanical behaviour, length scale effects were analyzed in the framework of generalized continuum approaches like the Cosserat and the *microcurl* models. In order to compare the results obtained with both approaches, a two-phase laminate loaded in shear has been studied analytically. Both models deliver a linear kinematic hardening dependant on the size of the microstructure. Finally, the previous developement and the tests performed during this work allow to propose and identify an extended macroscopic model which takes into account the effects of the directionnal coarsening on the machanical behaviour of the AM1 superalloy.

Keywords : single crystal superalloy, directionnal coarsening, mechanical behaviour, phase field, generalized continua