



HAL
open science

Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue

Yoann Guilhem

► **To cite this version:**

Yoann Guilhem. Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue. Mécanique [physics.med-ph]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2011. Français. <NNT : 2011ENMP0108>. <pastel-00732147>

HAL Id: pastel-00732147

<https://pastel.hal.science/pastel-00732147v1>

Submitted on 21 Sep 2012

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

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



HAL Authorization

École doctorale n° 432 : Sciences des Métiers de l'Ingénieur

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des mines de Paris

Spécialité « Mécanique »

présentée et soutenue publiquement par

Yoann GUILHEM

le 9 novembre 2011

Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue

~ ~ ~

Numerical investigation of the local mechanical fields in 316L steel polycrystalline aggregates under fatigue loading

Directeur de thèse : **Georges CAILLETAUD**

Co-encadrement de la thèse : **Stéphanie BASSEVILLE**

Jury

M. José MENDEZ, Professeur, PPrime, ENSMA Poitiers
M. Éric CHARKALUK, Chargé de recherche CNRS HdR, LML, École Centrale de Lille
M. Maxime SAUZAY, Ingénieur-chercheur HdR, SRMA-CEA
Mme Véronique AUBIN, Professeur, LMSSMat, École Centrale de Paris
M. François CURTIT, Docteur, MMC-EDF R&D
M. Siegfried SCHMAUDER, Professeur, IMWF Universität Stuttgart
Mme Stéphanie BASSEVILLE, Maître de Conférences, LISV, Université de Versailles
M. Georges CAILLETAUD, Professeur, Centre des Matériaux, MINES ParisTech
M. Nicolas SAINTIER, Maître de Conférences, LAMEFIP, Université de Bordeaux
M. Jean-Michel STÉPHAN, Ingénieur-chercheur sénior, MMC-EDF R&D

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examinatrice
Examineur
Examineur
Maître de thèse
Directeur de thèse
Invité
Invité

**T
H
È
S
E**

Remerciements

L'ensemble des travaux présentés dans ce manuscrit ont été réalisés conjointement au Centre des Matériaux de MINES ParisTech et au département MMC du site EDF R&D des Renardières. L'aboutissement de ce projet est le fruit de l'intervention de nombreuses personnes, avec une part relative certes, mais tout autant importante dans la finalité. Je tiens donc à adresser mes sincères remerciements à tous ceux qui se sont impliqués dans ce travail.

En premier lieu, je remercie les membres du jury, et notamment José Mendez d'en avoir accepté la présidence. Je remercie Éric Charkaluk et Maxime Sauzay d'avoir assuré les rôles de rapporteurs. Leur lecture approfondie du manuscrit et leurs questions pertinentes ont mené à une discussion intéressante. Je remercie également Véronique Aubin, François Curtit, Nicolas Saintier et Siegfried Schmauder d'avoir examiné mon travail de thèse.

Je tiens à remercier sincèrement mes maître et directeur de thèse, Stéphanie Basseville et Georges Cailletaud, qui m'ont donné l'occasion de travailler au Centre des Matériaux, tout d'abord en stage, puis dans le cadre de ma thèse. Le temps qu'ils ont consacré à ma thèse, malgré des contraintes de temps et de lieu non négligeables, m'a permis de progresser en permanence sur mon travail. Leur expérience et leurs conseils m'ont sans cesse amené à explorer mes résultats en profondeur et avec des points de vue différents. À leurs côtés, j'ai appris énormément sur tout ce qui se rapporte à mon sujet de thèse, mais aussi sur la recherche et l'enseignement en général. Je leur suis très reconnaissant de tout ce qu'ils m'ont apporté au cours de ces années de thèse.

Je souhaite remercier mes responsables industriels, François Curtit et Jean-Michel Stéphan, de m'avoir donné la chance de réaliser ma thèse en partenariat avec EDF. D'une part, ils ont su cadrer l'orientation de mes travaux tout en me laissant une certaine liberté. D'autre part, leur suivi tout au long de la thèse m'a apporté la motivation nécessaire à la finalisation de ce manuscrit. La présence et le soutien moral de Jean-Michel pendant toute la thèse furent précieux pour mener mon travail à son terme. Je remercie Jean-Michel Proix pour ses interventions dans le suivi de thèse, son point de vue extérieur nous a permis d'explorer des axes d'études innovants. Je voudrais également remercier le personnel du département MMC du site des Renardières pour leur accueil chaleureux, bien que mes présences fussent ponctuelles et disséminées dans le temps.

Je tiens à remercier l'ensemble des acteurs du projet ANR AFGRAP et particulièrement Jean-Michel Stéphan pour l'énergie et le temps qu'il a consacrés à sa mise en œuvre. Les rencontres lors des réunions de ce projet ont été très fructueuses sur le plan scientifique et ceci dans une ambiance chaleureuse. Ce fut une source de motivation supplémentaire pour faire avancer mon travail.

Mes remerciements sont également destinés aux stagiaires avec lesquels j'ai travaillé, directement ou indirectement, et qui ont su apporter leur contribution à mon travail : Medhi,

Guillaume, Lucas et Son. Je leur souhaite une bonne continuation dans leurs projets professionnels et scientifiques.

J'adresse mes remerciements au personnel permanent du Centre des Matériaux. Je remercie Catherine, Konaly et Liliane pour leur accueil et leur aide face aux « mystères » et obstacles de l'administration. Merci à Odile d'avoir déniché les articles introuvables et rectifié mes erreurs dans les références bibliographiques. Je remercie aussi Grégory et Olivier pour leur disponibilité et pour avoir su maintenir les clusters en état de fonctionnement même lors des très fortes sollicitations. Je remercie aussi les membres du groupe VAL, qui par leur expérience en calcul et en programmation, m'ont débloqué maintes fois sur mes problèmes avec Zebulon. En particulier, je remercie Djamel pour sa générosité et son entrain permanent à aider les thésards, ainsi que pour toutes nos discussions autour d'un café avant de retourner à la traque aux bugs. Je remercie toute l'équipe de l'atelier et tous les permanents qui œuvrent pour faire vivre le CdM au travers des 12H, tournoi de volley, week-end ski, repas de Noël, barbecues improvisés, etc. C'est aussi grâce à vous que l'on n'oublie pas son passage au CdM.

J'adresse mes remerciements aux stagiaires, mastères, thésards et post-docs du Centre des Matériaux qui font de ce laboratoire un lieu propice à la recherche dans la bonne humeur. Je remercie tous mes collègues de bureau successifs (Filip, Marc, Benoît, Kais, Cyril, Jean-Didier, Xavier, Lingtao, Florine et Flora) grâce à qui l'atmosphère de travail est toujours restée à la fois studieuse et agréable. Pour leur accueil, leurs conseils, leur aide, leur ouverture, leur bonne humeur et surtout pour le temps passé ensemble lors des pots et soirées en tous lieux, je remercie Angélique, Anthony, Bahram, Cédric, Clémence, Delphine, Djamel, Edouard, Fabrice, Florence, Greg, Guilhem, Guillaume, Huaidong, Jianqiang, João, Julie, la grande Julie, Julien, Laurent, Lingtao, Lolo, Matthieu, Nicolas, Nikolay, Nono, Ozgur, Pika, Saber, Steve, Thibault, Thomas et Vlad, en bref, la fine équipe ! Je n'oublierai jamais l'ambiance dans laquelle j'ai vécu ces années de thèse. On peut dire que chaque année fut éprouvante, mais pour des raisons différentes ! Je remercie le lecteur et, s'il est doctorant néophyte, je lui suggère de ne pas trop s'égarer dans cette page (bien qu'elle reste manifestement la page la plus lue de tout manuscrit de thèse), de prendre son courage à deux mains et de poursuivre sa lecture dans le cœur du manuscrit afin d'en savoir plus sur la fatigue des polycristaux, voire de compléter sa bibliographie.

Je tiens à adresser de profonds remerciements à tous mes amis qui ont été, sans forcément en être conscients, un soutien inestimable pendant cette thèse, et même bien avant. Merci à tous ceux qui ont été là pour moi et à ceux qui ont su être compréhensifs quant à mon absence auprès d'eux lors de la fin de thèse. En espérant qu'ils se reconnaîtront, je remercie tout le Crew de Saint-Quentin, les deux autres membres du trépied gagnant, tous mes coéquipiers et le staff des Comètes de Meudon (anciens, actuels et de toujours), le groupe plus ou moins secret de la PAJG (opérant sur tous les terrains : volley, pistes de ski, péniche et autres traquenards), le groupe de pronostiqueurs fous (Chypriote forever !), mon binôme des bancs de la fac à qui je dois encore une montagne de prise de notes, l'association TGC/Noctilien/Shannon, et pour ne pas prendre de risques, tous ceux que j'ai malheureusement oublié ! Un petit supplément est destiné à ceux qui, par bienveillance ou par expérience, ont su s'abstenir de poser la question fatidique « Alors ta thèse, ça avance ? ».

Je remercie Clémentine, qui m'a supporté, dans tous les sens du terme, ce qui n'est pas peu dire, particulièrement pendant la longue période de rédaction du manuscrit. Sa présence et ses encouragements furent un réconfort de taille pour affronter les moments difficiles. Je lui souhaite tout le courage et toute la réussite possible pour la fin de sa thèse.

Enfin, tout ce que j'ai réalisé jusqu'à aujourd'hui ne serait pas sans le soutien immense et inconditionnel de ma famille. Les mots viennent à manquer lorsqu'il s'agit de décrire à quel point vous m'avez épaulé jusqu'à aujourd'hui. Merci de m'avoir prêté main forte depuis le début.

« *Dans le sens de la pente !* »
Red Rocket

Table des matières

Introduction et contexte industriel	1
1 Revue bibliographique	5
1.1 Introduction à la fatigue	5
1.1.1 Bases	6
1.1.2 Historique	6
1.1.3 Différents domaines de fatigue	8
1.1.4 Premiers modèles de prédiction de durée de vie	9
1.1.5 Tolérance au dommage	10
1.1.6 Évolution des fissures de fatigue polycyclique	12
1.2 Fissures courtes	15
1.2.1 Mise en évidence	15
1.2.2 Les monocristaux et polycristaux	16
1.2.3 Observations expérimentales sur l’amorçage et la micropropagation des fissures courtes dans les polycristaux	22
1.3 Modélisation micromécanique	26
1.3.1 Modèles de monocristaux	26
1.3.2 Modèles de polycristaux	30
1.3.3 Dynamique Discrète des Dislocations	33
1.3.4 Calculs d’agrégats	34
1.4 Aciers inoxydables austénitiques	36
1.4.1 Microstructure	37
1.4.2 Comportement macroscopique et effet mémoire	38
1.4.3 État de surface	40
1.5 Critères d’amorçage en fatigue	42
1.6 Résumé	45
2 Modélisation 2D	47
2.1 Mise en place des calculs	47
2.1.1 Modèle de plasticité cristalline et simplification 2D	48
2.1.2 Maillage et conditions aux limites	49
2.1.3 Variables et paramètres étudiés	50
2.1.4 Description des calculs sur les agrégats aléatoires et sur les clusters	51
2.2 Analyse statistique sur les agrégats aléatoires	52
2.2.1 Comportement en surface et à cœur	52
2.2.2 Grain dur/mou, ouvert/fermé	54

2.2.3	Application de critères de fatigue	57
2.3	Étude de l'effet de voisinage dans les clusters	59
2.3.1	Étude des champs locaux	59
2.3.2	Analyse statistique	60
2.3.3	Multiaxialité locale	65
2.4	Compléments sur l'étude 2D	70
2.4.1	Influence de l'orientation d'un grain sur le reste de l'agrégat	70
2.4.2	Calculs sur agrégats 2D bruités	71
2.5	Résumé	73
3	Étude d'un agrégat polycristallin tridimensionnel	77
3.1	Identification des paramètres du modèle sur l'acier 316L	78
3.1.1	Matrice d'élasticité	78
3.1.2	Modèle de comportement monocristallin	78
3.1.3	Modèle de transition d'échelle	81
3.1.4	Méthodologie	82
3.1.5	Résultats	82
3.2	Mise en place des calculs	84
3.2.1	Maillage	84
3.2.2	Conditions aux limites	84
3.2.3	Parallélisation du calcul	85
3.2.4	Paramètres et variables étudiés	86
3.3	Résultats et discussion	88
3.3.1	Effet de la densité du maillage	88
3.3.2	Effet du type de chargement	93
3.3.3	Analyse statistique	102
3.3.4	Analyse dans le triangle standard	106
3.4	Résumé	109
4	Prise en compte de la rugosité de surface	113
4.1	Génération des surface rugueuses et des maillages rugueux	114
4.1.1	Données	114
4.1.2	Caractérisation de la rugosité	114
4.1.3	Application sur les maillages	116
4.2	Résultats et discussion	117
4.2.1	Analyse des champs en surface	117
4.2.2	Analyse dans le volume de l'agrégat	118
4.2.3	Distributions en surface et à cœur	123
4.3	Résumé	126
5	Étude d'un agrégat 3D semi-périodique	127
5.1	Génération d'agrégats semi-périodiques	128
5.1.1	Topologie	128
5.1.2	Maillage	133
5.2	Chargement et conditions aux limites semi-périodiques	134
5.2.1	Formulation du problème périodique	134
5.2.2	Chargement dans le cas semi-périodique	134

5.2.3	Conditions aux limites conservant la périodicité	138
5.3	Mise en place des calculs	140
5.3.1	Maillage	140
5.3.2	Conditions aux limites	140
5.3.3	Parallélisation	140
5.4	Résultats et discussion	141
5.4.1	Champs locaux en surface	141
5.4.2	Distributions globales	141
5.4.3	Influence des paramètres	143
5.4.4	Analyse dans le triangle standard	147
5.5	Résumé	147
6	Conclusions et perspectives	151
6.1	Conclusions	151
6.2	Perspectives	153
Annexes		
A	Notations utilisées dans le manuscrit	157
A.1	Abréviations	157
A.2	Variables et paramètres	158
A.3	Vecteurs, tenseurs, matrices...	159
A.4	Opérateurs	159
A.5	Fonctions	159
B	Orientations et désorientations	161
B.1	Matrice d'orientation d'un cristal	161
B.2	Désorientation	164
B.3	Représentation graphique des orientations	167
B.4	Génération aléatoire d'orientations	169
C	La méthode FETI	173
C.1	Formulation	173
C.2	Modes rigides	174
C.3	Décomposition en sous-domaines	174
D	Outil de transfert de données entre Z-set et MED	177
D.1	Présentation	177
D.2	Transcription du maillage	177
D.3	Documentation	178
Bibliographie		181

Table des figures

1	Ancienne et nouvelle configurations du circuit RRA.	1
2	Chargements et mécanismes conduisant à l'endommagement de la paroi interne des tuyauteries au niveau des zones de mélange, d'après Bompard [1].	2
3	Descriptif de l'essai INTHERPOL	3
1.1	Représentation schématique définissant les paramètres communs d'un chargement de fatigue piloté en contrainte, d'après Krupp [2]. Évolution de la contrainte en fonction du temps (à gauche) et la boucle d'hystérésis correspondante (à droite).	6
1.2	Schématisation du diagramme de Wöhler présentant l'amplitude de contrainte appliquée en fonction du logarithme du nombre de cycles à rupture N_f	7
1.3	Représentation schématique des différents stades de propagation d'une fissure de fatigue, d'après Forsyth [3].	8
1.4	Schématisation des fissures de fatigue en surface selon Miller [4].	9
1.5	Schématisation des différents domaines de la fatigue et mise en évidence de la dispersion aux faibles amplitudes de sollicitation.	10
1.6	Les trois modes de fissuration introduits en mécanique linéaire de la rupture : (I) mode d'ouverture, (II) mode de cisaillement plan et (III) mode de cisaillement antiplan (figure d'après Krupp [2]).	11
1.7	Diagramme représentant la vitesse de propagation de fissure en fonction du facteur d'intensité de contrainte et laissant apparaître trois domaines distincts A, B et C.	12
1.8	Différents stades d'évolution d'une fissure de fatigue HCF explicités par une courbe représentant la longueur de fissure a en fonction du nombre de cycles N . (1) Incubation/amorçage (2) Micropropagation (3) Propagation macroscopique (4) Rupture.	13
1.9	Diagramme de Kitagawa–Takahashi : (a) original [5] et (b) modifié [6].	14
1.10	Diagramme de Wöhler explicitant les nombres de cycles des phases d'amorçage N_i et de propagation N_p pour les fissures de fatigue.	14
1.11	Diagramme de Paris faisant apparaître la propagation spécifique des fissures courtes.	15
1.12	(a) Schématisation de la loi de Schmid. (b) Description schématique des systèmes de glissement octaédriques dans les réseaux de type CFC.	16
1.13	(a) Isovaleurs du facteur de Schmid maximal dans le triangle standard CFC. (b) Courbe schématique présentant l'évolution de la cission résolue τ en fonction de la déformation de cisaillement γ sur un système de glissement dans un réseau de type CFC.	19
1.14	(a,b,c) Différentes structures de dislocations d'un monocristal CFC sous chargement cyclique et (d) courbe cyclique de contrainte–déformation.	20

1.15	Courbe illustrant l'érouissage cyclique de l'acier 316L sous chargement à déformation totale imposée.	21
1.16	Schéma explicitant les angles de twist α et de tilt β , d'après Zhai <i>et al.</i> [7].	24
1.17	Amorçage de fissure à la base d'une extrusion de surface dans un monocristal de cuivre après 60 000 cycles, sous un chargement de $\Delta\varepsilon/2 = 0,2\%$ [8].	25
1.18	Description schématique du concept des dislocations géométriquement nécessaires dans un polycristal, selon Ashby [9], illustré par Déprés [10].	29
1.19	Relief de surface sur un monocristal induit par un chargement de fatigue, calculé par DDD (a) en global (b) en local [11].	34
1.20	Méthodologie mise en place pour effectuer des calculs EF sur une microstructure réelle accompagnée des conditions aux limites expérimentales, d'après Héripré <i>et al.</i> [12].	36
1.21	Distribution des désorientations pour le 316L et pour un matériau non texturé [13].	38
1.22	Structures de dislocations rencontrées suivant l'énergie de fautes d'empilement et le niveau de sollicitation [14].	39
1.23	Courbes d'érouissage monotones (en pointillés) et cycliques (en continu) pour un matériau (a) sans effet mémoire et (b) avec effet mémoire. Les courbes noires correspondent aux essais sans pré-érouissage et les grises avec pré-érouissage [15, 16]. (c) Effet de différents érouissages sur l'acier 316L, d'après Nouailhas <i>et al.</i> [17].	39
1.24	État de surface de l'éprouvette axisymétrique après pré-érouissage à 14 % : (a) vue globale de l'éprouvette, (b) zoom mettant en évidence l'état de surface induit par le pré-érouissage.	40
1.25	Nombres de cycles à rupture N_f obtenus pour des éprouvettes d'acier 304L vierges, pré-érouies et repolies après pré-érouissage, d'après Le Pécheur [18] complété par des essais menés à EDF R&D.	41
2.1	Maillage et conditions aux limites appliquées pour le problème 2D.	50
2.2	Définition de l'unique système de glissement et de l'orientation cristallographique correspondante θ	50
2.3	Définition des angles pour les clusters construits autour des grains (a) fermés et (b) ouverts.	52
2.4	Comportement plastique de différents types de grains en fonction de l'orientation cristallographique et comparaison avec le monocristal ($\Delta\varepsilon/2 = 2\%$). Sont tracés la courbe moyenne lissée et l'écart type autour de la moyenne.	53
2.5	Déformation plastique cumulée en fonction de l'orientation cristallographique pour différents types de grains.	54
2.6	Fonction de distribution cumulée de la déformation plastique cumulée pour différents types de grains.	57
2.7	Valeurs (moyennes par grain) des différents critères de fatigue calculés à l'échelle locale en fonction de l'orientation cristallographique. Plusieurs amplitudes de sollicitations sont présentées.	58
2.8	Cluster C-45-0 : Cartes d'isovaleurs correspondant à différentes réalisations.	61
2.9	Cluster O-45-0 : Cartes d'isovaleurs correspondant à différentes réalisations.	62
2.10	Cluster C-0-45 : Cartes d'isovaleurs correspondant à différentes réalisations.	63
2.11	Cluster O-0-45 : Cartes d'isovaleurs correspondant à différentes réalisations.	64
2.12	Distributions de la déformation plastique cumulée dans le grain central de différents clusters sous chargement de $\Delta\varepsilon/2 = 2\%$	66

2.13	Fonctions de distribution cumulées de la déformation plastique cumulée pour différents clusters, basée sur les valeurs dans le grain central, (a) aux points de Gauss et (b) moyennées par grain.	67
2.14	Multiaxialité σ_{22}/σ_{11} dans le grain central du cluster. À gauche les figures se rapportent aux grains mous, à droite aux grains durs.	68
2.15	Modèle simplifié décrivant les différents états de contraintes sous chargement de traction en direction x_2	69
2.16	Cartes (a) du facteur de Schmid et (b-g) de déformation plastique cumulée pour différentes orientations du grain fermé (entouré en blanc).	70
2.17	Cartes (a) du facteur de Schmid et (b-g) de déformation plastique cumulée pour différentes orientations du grain ouvert (entouré en blanc).	70
2.18	Variation de la déformation plastique cumulée moyenne $\langle p \rangle_g$ dans les grains adjacents en fonction de l'orientation du grain C (fermé) ou O (ouvert).	72
2.19	Exemples de maillages d'agrégat 2D bruités.	73
2.20	Comportement plastique de différents types de grains en fonction de l'orientation cristallographique sur la base de calculs avec maillages bruités.	74
2.21	(a) Distribution des tailles de grain dans l'ensemble des 800 agrégats bruités. (b) Plasticité cumulée en fonction de l'orientation et du volume du grain.	75
3.1	Comparaison entre les courbes numériques issues de l'identification et les courbes expérimentales issues des essais sur le 316L.	83
3.2	Maillage d'agrégat polycristallin de 291 grains : (a) Topologie obtenue à partir d'une répartition de germes réglée. (b) Maillage fin obtenu après bruitage.	84
3.3	Distribution des diamètres de grain dans le maillage bruité.	85
3.4	Maillages de l'agrégat polycristallin 3D de 291 grains avec différentes densités de maillage.	89
3.5	Distributions des variables étudiées avec différentes densités de maillage.	89
3.6	Distributions des variables étudiées (échelle log) avec différentes densités de maillage.	90
3.7	Influence de la densité de maille sur la distribution des variables étudiées.	92
3.8	Valeurs aux points de Gauss des variables étudiées en fonction de la distance au joint de grains d_{GB}	94
3.9	Valeurs aux points de Gauss des variables étudiées en fonction de la distance à la surface libre d_{surf}	95
3.10	Description de l'orientation cristalline en surface libre de l'agrégat.	97
3.11	Isovaleurs de $\sum \gamma_{cum}$ sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.	98
3.12	Isovaleurs de ε_{mises}^p sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.	98
3.13	Isovaleurs de σ_{mises} sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.	98
3.14	Isovaleurs du nombre de systèmes de glissement actifs N_γ sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.	98
3.15	Vues volumiques par transparence des isovaleurs de $\sum \gamma_{cum}$ pour les chargements (a) uniaxial-x, (b) uniaxial-y, (c) biaxial-eq et (d) biaxial.	100
3.16	Schéma illustrant la corrélation entre γ_{surf} (en noir) et la hauteur des marches d'intrusion/extrusion (en gris).	101
3.17	Indicateur d'intensité et d'orientation des PSM sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.	103
3.18	(a) Distribution de l'orientation des PSM $\theta_{PSM/x}$ et (b) valeur moyenne de γ_{surf} en fonction de l'orientation des PSM $\theta_{PSM/x}$	104

3.19	Distributions des variables étudiées sur l'ensemble des 15 calculs pour différents types de grains.	104
3.20	Distributions des variables étudiées pour chacun des 15 calculs pour différents types de grains.	105
3.21	Influence du facteur de Schmid sur les variables étudiées pour différents types de grains.	106
3.22	Influence de la désorientation pondérée $\Delta\theta_w$ sur les variables étudiées pour différents types de grains.	107
3.23	Orientation et intensité des PSM sur l'ensemble des 15 calculs. (a) Distribution de l'orientation des PSM, notée $\theta_{\text{PSM}/x}$. (b) Moyenne et écart type de l'intensité de γ_{surf} en fonction de $\theta_{\text{PSM}/x}$	107
3.24	Valeurs moyennées de $\sum \gamma_{\text{cum}}$ dans le triangle standard.	107
3.25	Valeurs moyennées de $\varepsilon_{\text{mises}}^p$ dans le triangle standard.	108
3.26	Valeurs moyennées de σ_{mises} dans le triangle standard [MPa].	108
3.27	Valeurs moyennées de σ_{33} dans le triangle standard [MPa].	108
3.28	Valeurs moyennées du taux de triaxialité σ_{triax} dans le triangle standard.	108
3.29	Valeurs moyennées du nombre de systèmes actifs N_γ dans le triangle standard.	109
3.30	Configurations des cellules de dislocations correspondant à différentes régions du triangle standard identifiées par Huang <i>et al.</i> [19].	110
4.1	Images et profils de rugosité des états (a) brut et (b) brossé [18].	115
4.2	Étapes de génération des surfaces de rugosité et des maillages à partir d'un profil. 115	
4.3	Schéma d'application d'une surface de rugosité sur un maillage par méthode de déplacement de nœuds.	116
4.4	Maillage grossier et fin d'un profil de rugosité.	117
4.5	Influence du type de rugosité et de l'amplitude moyenne de rugosité.	119
4.6	Influence du type de rugosité sous chargement uniaxial-x, <i>i.e.</i> dans le sens des stries.	120
4.7	Influence du type de rugosité sous chargement biaxial-eq.	121
4.8	Vues en coupe des isovaleurs de $\sum \gamma_{\text{cum}}$ pour une surface lisse et brossée.	122
4.9	Distributions des variables étudiées avec différents types de rugosité de surface.	123
4.10	Distributions des variables étudiées avec différents profondeurs de rugosité de surface (état de surface brossé).	124
4.11	Distributions des variables étudiées sous différents chargements (état de surface brossé).	125
5.1	(a) Réplication du domaine dans toutes les directions. (b) Maillage d'agrégat périodique (d'après Gérard [20]).	129
5.2	Schéma de propagation en trois phases du domaine (a) par translation (périodique) et (b) par symétrie (non périodique).	130
5.3	Schéma décrivant la construction, décomposée en 6 étapes, de la topologie d'un agrégat 2D semi-périodique constitué de 3 grains.	131
5.4	Différentes vues de la topologie semi-périodique générée pour un agrégat de 250 grains.	134
5.5	Schéma simplifié d'un agrégat semi-périodique constitué de 4 grains extrudés.	139
5.6	Isovaleurs des variables étudiées en surface libre de l'agrégat sous chargement uniaxial-y semi-périodique.	142

5.7	Courbes contraintes-déformations macroscopiques obtenues à partir de calculs en 3D classique et semi-périodique.	143
5.8	Distributions en échelle logarithmique des variables étudiées pour différents types de grains, en prenant compte ou non les grains en contact avec les conditions aux limites de type <code>mpc</code>	144
5.9	Distributions en échelle logarithmique des variables étudiées sur l'ensemble des 15 calculs pour différents types de grains.	145
5.10	Influence du facteur de Schmid sur les variables étudiées pour différents types de grains.	146
5.11	Influence de la désorientation pondérée $\Delta\theta_w$ sur les variables étudiées pour différents types de grains.	148
5.12	Valeurs moyennées de $\sum \gamma_{cum}$ dans le triangle standard.	148
5.13	Valeurs moyennées de ε_{mises}^p dans le triangle standard.	149
5.14	Valeurs moyennées de σ_{mises} dans le triangle standard.	149
5.15	Valeurs moyennées de σ_{33} dans le triangle standard.	149
5.16	Valeurs moyennées de σ_{triax} dans le triangle standard.	149
5.17	Valeurs moyennées de N_γ dans le triangle standard.	150
6.1	Procédure de recalage du modèle β_{surf} avec prise en compte de la profondeur d_{surf}	154
B.1	Décomposition de la rotation par angles d'Euler.	162
B.2	Distribution des désorientations calculée par Mackenzie [21] et issue de notre générateur aléatoire d'angles.	167
B.3	Schéma décrivant le processus de projection stéréographique.	168
B.4	Exemples de figures de pôles directes.	169
B.5	Découpage du plan équatorial en triangles stéréographiques standards pour les différents réseaux, d'après Randle [22].	169
B.6	Figures de pôles inverses dans le triangle standard CFC de 10 000 orientations générées par la méthode <code>euler1</code> ($\Phi = \pi X_1$).	170
B.7	Figures de pôles inverses dans le triangle standard CFC de 10 000 orientations générées par la méthode <code>euler2</code> ($\Phi = \arcsin X_1$).	170
B.8	Figures de pôles inverses dans le triangle standard CFC de 10 000 orientations générées par la méthode <code>quaternion</code>	171
C.1	Schémas d'un problème éléments finis (a) classique et (b) avec décomposition de domaines FETI.	174

Liste des tableaux

1.1	Description des systèmes de glissement octaédriques et correspondance entre la numérotation Zebulun et la notation de Schmid & Boas [23].	17
1.2	Facteurs de Schmid de tous les systèmes de glissement octaédriques pour un chargement suivant les orientations caractéristiques des réseaux de types CFC. . .	18
1.3	Analyse microstructurale de l'amorçage et de la propagation des MSC [24]. . . .	23
1.4	Composition chimique (% massique) de plusieurs aciers austénitiques.	37
1.5	Texture l'acier 316L suivant la direction de mesure [13].	37
1.6	Caractéristiques des états de surface étudiés par Le Pécheur [18].	42
2.1	Paramètres matériau.	50
2.2	Données statistiques aux points de Gauss et en moyenne par grain sur la déformation plastique cumulée dans les grains mous et durs pour $\Delta\varepsilon/2 = 2\%$	55
2.3	Données statistiques aux points de Gauss et en moyenne par grain sur la déformation plastique cumulée dans les grains mous et durs pour $\Delta\varepsilon/2 = 0,5\%$	56
2.4	Comparaison des valeurs moyennes et des écarts type de la déformation plastique dans les grains ouverts et fermés.	59
2.5	Données statistiques sur les valeurs de déformation plastique cumulée p aux points Gauss du grain central des différents clusters avec un chargement de $\Delta\varepsilon/2 = 2\%$	65
3.1	Valeurs des coefficients de la matrice d'élasticité cubique pour l'acier 316L, d'après Huntington [25].	78
3.2	Récapitulatif des résultats de plusieurs études numériques visant à déterminer les coefficients de la matrice d'interaction \underline{a} ou \underline{h} pour le réseau CFC.	80
3.3	Matrice d'interaction pour les réseaux cristallins de type CFC [26].	81
3.4	Valeurs choisies pour les coefficients de la matrice d'interaction.	81
3.5	Valeurs des modules d'élasticité isotrope de l'acier.	82
3.6	Valeurs des paramètres issus de l'identification.	83
3.7	Données statistiques sur les valeurs aux points de Gauss des variables étudiées dans l'ensemble de l'agrégat avec différentes densités de maille.	91
3.8	Observations sur la localisation des variables aux joints de grains en tenant compte des paramètres d'orientation et de désorientation.	97
3.9	Structures de localisations identifiées dans les différents chargements. Orientation et type de facettes.	99
3.10	Comparaison des structures de dislocations, densité de dislocations et ε_{mises}^p calculé dans les différentes zones du SST.	109
4.1	Dénomination et caractéristiques des maillages rugueux générés.	117

5.1	Numérotation des domaines répliqués et valeurs des coefficients déterminant leur position dans l'espace dans un cas 2D.	129
5.2	Numérotation des domaines répliqués et valeurs des coefficients déterminant leur position dans l'espace dans un cas 3D.	129
5.3	Mise en données Z-set des groupes de nœuds et des conditions aux limites propres à la formulation périodique.	139
5.4	Comparatif entre les calculs classiques et semi-périodiques.	140
5.5	Évolution de ε_{mises}^p et σ_{mises} en fonction de M_{max} et $\Delta\theta_w$ dans tous les grains des 15 calculs, en modélisation 3D classique et 3D semi-périodique.	147
C.1	Propriétés des solveurs linéaires disponibles en calcul parallèle FETI sous Zebulon.	174
C.2	Temps de calcul pour un problème de 2×10^6 DDL avec différentes méthodes de décomposition en 30 sous-domaines.	175
D.1	Mises en données Z-set pour (a) l'import et (b) l'export de maillages au format MED (nécessite le greffon dédié).	178
D.2	Fichier d'entrée Z-set pour transcrire un maillage et les résultats de calcul du format MED au format Z-set (nécessite le greffon dédié).	179
D.3	Fichier d'entrée Z-set pour transcrire un maillage et les résultats de calcul du format Z-set au format MED (nécessite le greffon dédié).	180

Introduction et contexte industriel

Dans les centrales nucléaires de type REP (Réacteur à Eau Pressurisée), les composants des circuits de refroidissement sont soumis à des sollicitations cycliques qui conduisent à la fatigue des matériaux. Au niveau des zones de mélange, les fluctuations thermiques induisent des déformations cycliques à caractère aléatoire sur la paroi interne de la tuyauterie à des fréquences à la fois élevées et à plage étendue. Le régime turbulent causé par le mélange des fluides chaud et froid entraîne de forts gradients de température à la surface du conduit. L'endommagement des matériaux causé par ce processus peut provoquer l'apparition de fissures et, à terme, d'une fuite.

Un tel phénomène s'est produit dans la centrale de Civaux, le 12 mai 1998. Une fuite de $30 \text{ m}^3/\text{h}$ est apparue dans le circuit RRA (Refroidissement du Réacteur à l'Arrêt). Le circuit RRA a pour fonction, lors de la mise à l'arrêt normal du réacteur, d'évacuer la chaleur du circuit primaire (la puissance résiduelle du combustible), puis de maintenir l'eau du circuit primaire à basse température pendant toute la durée de l'arrêt. En effet, la radioactivité présente dans le cœur du réacteur à l'arrêt produit de l'énergie sous forme de chaleur, en quantité suffisante pour faire fondre le combustible. C'est pourquoi il est impératif de maintenir une température stable dans le réacteur.

Après inspection de la structure, la présence d'une fissure de 18 cm de long a été constatée au niveau du coude situé en aval du té de mélange (figure 1). De plus, un réseau de microfissures (faïençage thermique) a été mis en évidence. La géométrie de la tuyauterie a été modifiée à la suite de cet incident de manière à positionner la zone de mélange dans une région où la tuyauterie principale conserve une forme rectiligne. Bien que la structure ait été modifiée pour éliminer tout risque de fuite, il est primordial d'étudier ce phénomène d'amorçage et de propagation de fissures en fatigue thermomécanique afin de mieux quantifier l'endommagement de la structure.

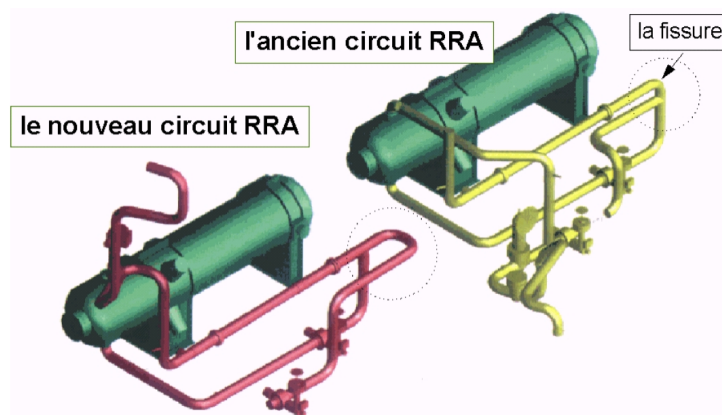


Fig. 1 – Ancienne et nouvelle configurations du circuit RRA.

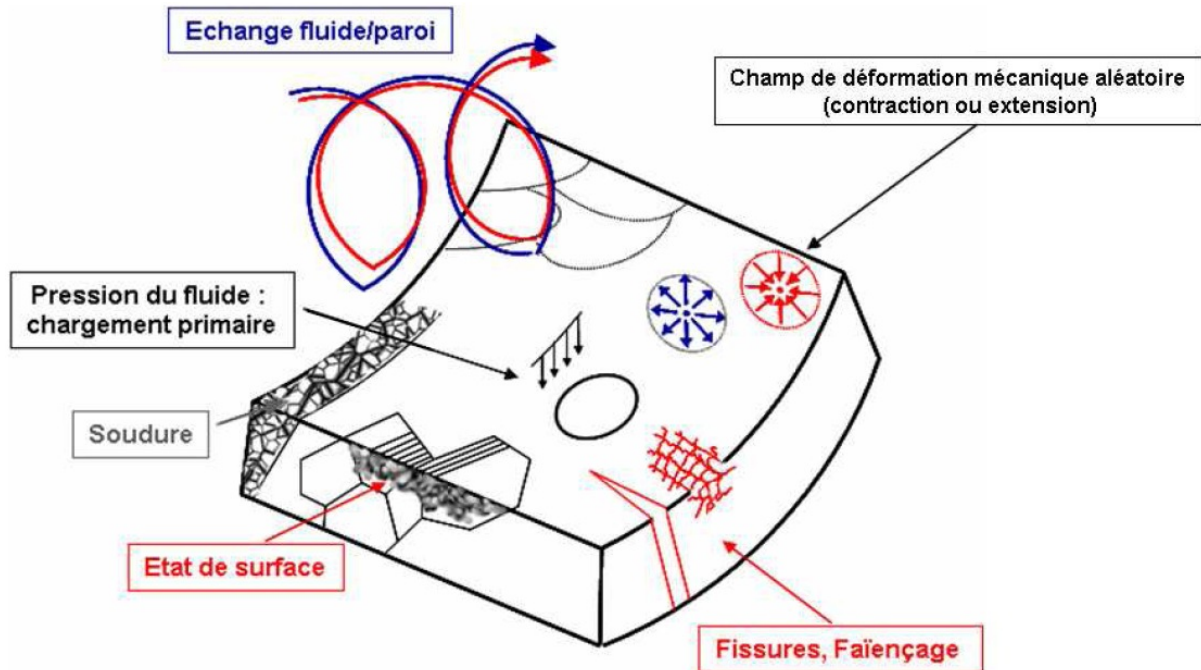


Fig. 2 – Chargements et mécanismes conduisant à l'endommagement de la paroi interne des tuyauteries au niveau des zones de mélange, d'après Bompard [1].

Les fluctuations rapides du chargement résultant sont concentrées en peau interne, du fait de la faible conductivité thermique de l'acier austénitique employé pour cette structure. Les sollicitations thermomécaniques en surface interne sont de nature biaxiale : déformations axiale et circonférentielle. De plus, de par la pression interne appliquée, il s'avère que le chargement considéré est à contrainte moyenne non nulle. Dans le cas du circuit RRA, la contrainte moyenne résultant de cette pression est d'environ 50 MPa. Les déformations cycliques dues aux fluctuations de température restent d'un niveau assez faible. La figure 2 présente les principaux ingrédients conduisant à la complexité du chargement et les paramètres à prendre en compte dans l'analyse [1].

Il est à noter que le procédé de fabrication du composant industriel induit, suivant l'état de surface souhaité (brut, brossé, poli...), des particularités telles qu'une certaine rugosité de surface, la présence de contraintes résiduelles et un écrouissage local. Ces paramètres ont une influence non négligeable sur la durée de vie du composant. Toutefois, celle-ci reste difficilement quantifiable. La plupart des critères de fatigue ne prennent pas directement en compte ce type de paramètres.

L'amorçage est, à l'échelle d'un composant industriel, basé sur les possibilités de détection d'une fissure par un procédé non destructif. Cette méthode de détection se base généralement sur l'identification de fissures dont la taille minimale est de l'ordre du millimètre. En dessous de cette échelle, il est difficile de parvenir à détecter les fissures et de prédire leur vitesse de propagation notamment avec les modèles linéaires élastiques. On parle alors de fissures « courtes ». La particularité de ces fissures réside dans leur forte dépendance vis-à-vis de la microstructure du matériau lors des premiers stades de fissuration. Les sites d'amorçage, le trajet ainsi que la vitesse de propagation de ces fissures sont étroitement liés à la microstructure. Nous reviendrons sur cette notion ultérieurement, dans la section 1.1.

Parmi les essais lancés en collaboration entre EDF, CEA et AREVA, deux ont été réalisés

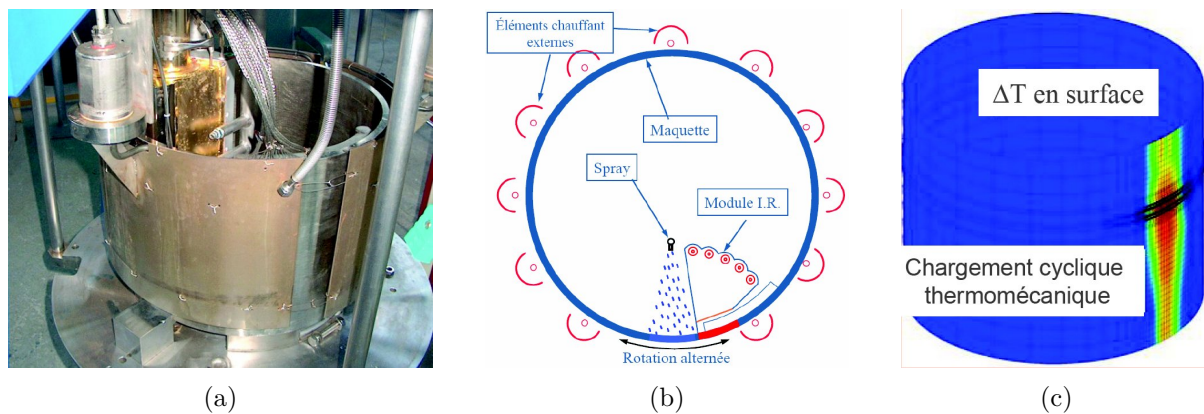


Fig. 3 – Descriptif de l’essai INTHERPOL : (a) Photo de la structure. (b) Schéma de mise en place du chargement. (c) Champ de température résultant.

sur des structures similaires au circuit RRA : FATHER [27] et INTHERPOL [28–30].

L’essai FATHER consiste en un essai de fatigue thermique visant à reproduire de manière quasi identique les conditions propres aux zones de mélange. L’objectif est d’étudier le chargement résultant en mesurant le champ de température puis, par des calculs thermomécaniques, d’en déduire les champs de contraintes et de déformations. Pour cela, une maquette a été réalisée à l’identique du nouveau té du circuit RRA, mais de dimensions inférieures (diamètre de 150 mm au lieu de 400 mm). Les résultats majeurs de cette étude montrent que l’amplitude de déformation obtenue est de l’ordre de 0,15 à 0,3 %.

L’essai INTHERPOL consiste en un essai de fatigue thermique dont le chargement est complètement instrumenté. Une partie de la surface interne du cylindre étant chauffée et refroidie périodiquement par un système de lampes infrarouges et de pulvérisateurs d’eau (cf. figure 3). Le chargement est simplifié par rapport aux conditions réelles mais en reste assez proche. Plusieurs états de surface sont testés et une soudure est introduite dans la structure.

EDF a aussi mis en place avec des partenaires un projet ANR « Matériaux et Procédés » débuté en 2009. Ce dernier s’intitule AFGRAP (Amorçage d’une fissure de Fatigue dans un Grain d’Agrégat polycristallin et Propagation dans les grains adjacents). Il réunit les partenaires industriels et universitaires suivants :

- EDF
- CEA
- AREVA
- ArcelorMittal
- LMSSMat (École Centrale de Paris)
- Centre des Matériaux (MINES ParisTech)
- PPRIME (ENSMA)
- SIMAP (INPG)
- SYMME (Université de Savoie)

L’objectif de ce projet est d’étudier les phénomènes d’amorçage et de micropropagation de fissures de fatigue en alliant les compétences de chaque acteur dans les domaines expérimental

(essais de fatigue, observations MEB¹, MET², EBSD³, AFM⁴, FIB⁵...) et numérique (DDD⁶, calculs EF⁷ d'agrégats polycristallins, couplage EF/DDD). L'étude porte sur le rôle des paramètres microstructuraux (orientation cristalline, forme des grains, voisinage...) vis-à-vis de l'amorçage et du franchissement du premier joint de grains. Le matériau étudié est l'acier austénitique inoxydable 316LN fourni par AREVA. Notre participation au projet ANR AFGRAP consiste à donner des informations sur les influences de paramètres locaux sur l'amorçage à partir de calculs d'agrégats. Il est également prévu de travailler sur les premiers calculs EF d'agrégats couplés à la DDD.

L'endommagement des composants de centrales causé par l'amorçage et la micropropagation des fissures courtes conduit à la formation d'un réseau de fissures. L'évolution de ce mécanisme d'endommagement reste difficile à quantifier tant par les études expérimentales que par les outils numériques actuels. Dans ce cadre, il devient nécessaire de passer à une modélisation à l'échelle mésoscopique, en travaillant sur des agrégats polycristallins pour pouvoir rendre compte des mécanismes de fissuration. Pour mener à bien ce travail, il est proposé d'étudier l'amorçage à travers les premiers grains en surface de la structure selon une approche micromécanique basée sur la plasticité cristalline. L'ensemble de l'étude portera sur l'analyse de résultats de calculs EF d'agrégats en ajoutant un point de vue statistique aux travaux déjà réalisés sur ce sujet.

Le manuscrit se structure en six chapitres. Nous débiterons par une revue bibliographique concernant les bases de la fatigue, les observations expérimentales sur les fissures courtes, les travaux numériques destinés à modéliser le comportement micromécanique des microstructures ainsi que les particularités du comportement des aciers austénitiques. Nous étudierons ensuite dans les deux chapitres principaux l'effet de voisinage au travers d'une étude statistique en deux dimensions, puis en trois dimensions afin d'analyser l'influence des paramètres microstructuraux. Les deux derniers chapitres feront état des travaux en cours et des perspectives ouvertes : introduction de la rugosité de surface et modélisation semi-périodique.

-
1. MEB : Microscope Électronique à Balayage.
 2. MET : Microscope Électronique à transmission.
 3. EBSD : Diffraction d'électrons rétrodiffusés, de l'anglais « Electron Back Scattering Diffraction ».
 4. AFM : Microscope à force atomique, de l'anglais « Atomic Force Microscope ».
 5. FIB : Faisceaux d'ions focalisés, de l'anglais « Focused Ion Beam ».
 6. DDD : Dynamique Discrète des Dislocations.
 7. EF : Éléments Finis.

Chapitre 1

Revue bibliographique

Sommaire

1.1	Introduction à la fatigue	5
1.1.1	Bases	6
1.1.2	Historique	6
1.1.3	Différents domaines de fatigue	8
1.1.4	Premiers modèles de prédiction de durée de vie	9
1.1.5	Tolérance au dommage	10
1.1.6	Évolution des fissures de fatigue polycyclique	12
1.2	Fissures courtes	15
1.2.1	Mise en évidence	15
1.2.2	Les monocristaux et polycristaux	16
1.2.3	Observations expérimentales sur l’amorçage et la micropropagation des fissures courtes dans les polycristaux	22
1.3	Modélisation micromécanique	26
1.3.1	Modèles de monocristaux	26
1.3.2	Modèles de polycristaux	30
1.3.3	Dynamique Discrète des Dislocations	33
1.3.4	Calculs d’agrégats	34
1.4	Aciers inoxydables austénitiques	36
1.4.1	Microstructure	37
1.4.2	Comportement macroscopique et effet mémoire	38
1.4.3	État de surface	40
1.5	Critères d’amorçage en fatigue	42
1.6	Résumé	45

1.1 Introduction à la fatigue

La rupture des pièces mécaniques par fatigue est un phénomène qui suscite, depuis plusieurs décennies, un grand nombre d’études joignant les expertises industrielle et scientifique. Les efforts cycliques, de nature mécanique et/ou thermique, que subit un matériau peuvent mener à sa ruine même si un seul cycle n’entraîne aucun dommage apparent. Nous présentons dans cette section les bases et les généralités propres à la fatigue des métaux. Pour plus de détails, le lecteur est invité à consulter les ouvrages de Pineau [31] et Krupp [2].

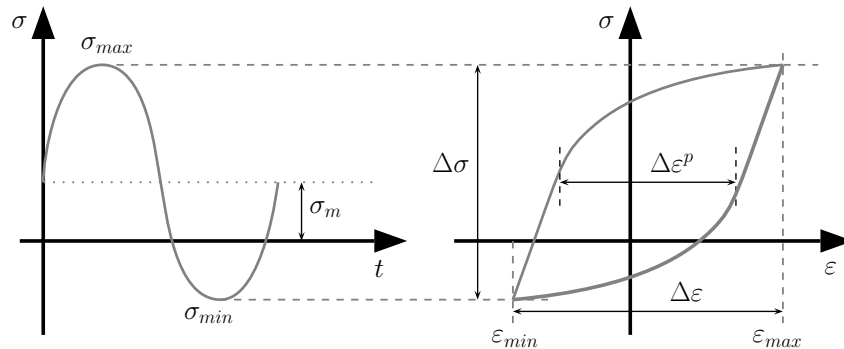


Fig. 1.1 – Représentation schématisant les paramètres communs d'un chargement de fatigue piloté en contrainte, d'après Krupp [2]. Évolution de la contrainte en fonction du temps (à gauche) et la boucle d'hystérésis correspondante (à droite).

1.1.1 Bases

L'étude du phénomène de fatigue fait intervenir plusieurs termes et paramètres généraux que nous définissons ici en nous appuyant sur la figure 1.1 :

- σ_{min} et σ_{max} représentent respectivement les valeurs minimales et maximales de la contrainte atteintes dans un cycle ;
- ε_{min} et ε_{max} représentent respectivement les valeurs minimales et maximales de la déformation atteintes dans un cycle ;
- les amplitudes de contraintes et de déformation sont définies respectivement par $\Delta\sigma/2 = (\sigma_{max} - \sigma_{min})/2$ et $\Delta\varepsilon/2 = (\varepsilon_{max} - \varepsilon_{min})/2$;
- on raisonne aussi parfois en amplitude de déformation plastique $\Delta\varepsilon^p/2 = \Delta\varepsilon/2 - \Delta\sigma/2E$, avec E le module d'Young ;
- de manière analogue, les contraintes et déformations moyennes sont définies respectivement par $\sigma_m = (\sigma_{max} + \sigma_{min})/2$ et $\varepsilon_m = (\varepsilon_{max} + \varepsilon_{min})/2$;
- le rapport de charge $R = \sigma_{min}/\sigma_{max}$.

1.1.2 Historique

Le terme qualifiant le phénomène de « fatigue » a été introduit il y a 150 ans environ par Braithwaite [32] suite aux accidents survenus sur les diligences et les premières machines industrielles telles que les moteurs à vapeur ou les trains. De nombreux cas de rupture d'essieux en métal forgé étaient rencontrés à cette époque. Une nouvelle problématique, conséquence des sollicitations cycliques subies par les pièces mécaniques, venait s'ajouter au travail traditionnel des ingénieurs dimensionnant les structures : la prédiction de durée de vie en fatigue. À l'heure actuelle, elle fait intégralement partie du processus de conception, notamment dans le domaine de l'aéronautique, de l'automobile et du nucléaire.

Parmi les premières études menées sur la prédiction de durée de vie en fatigue, en 1870, Wöhler élabora une campagne de mesures de déformations au cours du trajet d'un train [33]. Il mit en relation les pics de déformation résultant du passage du train sur les aiguillages avec les défaillances. C'est à partir de ces résultats que son successeur Spangenberg établit le célèbre diagramme de Wöhler, également appelé diagramme S-N, qui représente l'amplitude de la contrainte appliquée en fonction du nombre de cycles à rupture N_f (cf. figure 1.2). Ce diagramme a été construit sur la base de l'hypothèse d'un chargement uniaxial simple. Cette hypothèse ne se vérifiant que rarement sur les cas de structures étudiées, il est commun de réduire les tenseurs

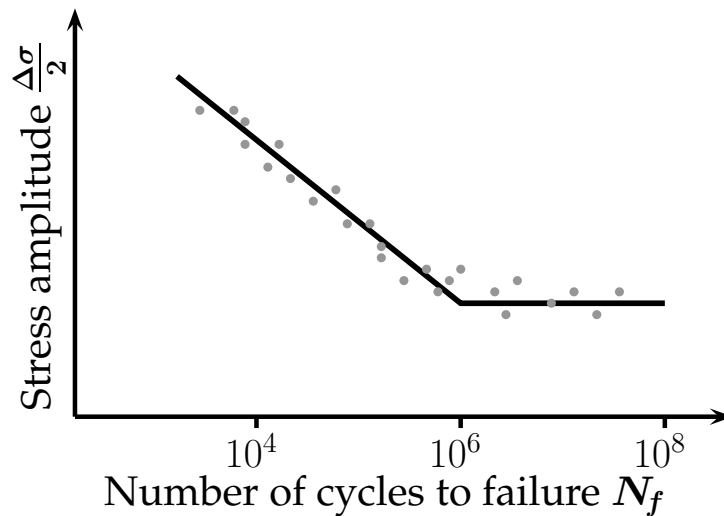


Fig. 1.2 – Schématisation du diagramme de Wöhler présentant l’amplitude de contrainte appliquée en fonction du logarithme du nombre de cycles à rupture N_f .

de contraintes σ et de déformations ε à des grandeurs scalaires équivalentes σ_{eq} et ε_{eq} . Le diagramme dépend du matériau et des paramètres comme la température, l’environnement et du niveau de contrainte moyenne. Il existe une variante de ce diagramme qui consiste à remplacer l’amplitude de la contrainte par l’amplitude de la déformation.

Cependant, en l’absence de moyens d’observation microstructurale, la connaissance du phénomène physique restait à cette époque très limitée. C’est au début du XX^e siècle qu’Ewing et Humfrey effectuèrent les premières observations sur des pièces de métal ayant subi des flexions alternées [34]. Ils mirent en évidence l’apparition de bandes de glissement persistantes (PSB¹) pouvant conduire à la formation de fissures de fatigue.

De manière générale, les fissures de fatigue s’initient à la surface des composants ou des éprouvettes dans le cas d’essais en laboratoire [35]. Forsyth justifie cette observation par une mobilité plus importante des dislocations en surface à laquelle s’ajoutent les effets d’environnement (oxydation) [3, 36]. Il retranscrit les différents stades de propagation d’une fissure de fatigue (cf. figure 1.3) :

- une PSB se forme par glissement simple près de la surface, émerge et crée une extrusion de surface qui absorbe de l’oxygène au cours des cycles ;
- la fissure s’initie par décohésion à la base de la PSB émergente ;
- elle se propage par cisaillement sur un système de glissement (mode II) dans le premier grain en surface, à 45° par rapport à la direction de la contrainte principale. Cela correspond au stade 1 de la propagation des fissures de fatigue ;
- grain après grain, la fissure s’oriente perpendiculairement à la direction de la contrainte principale pour se propager en mode I comme une fissure macroscopique. Cela correspond au stade 2 de la propagation des fissures de fatigue où l’on observe du glissement multiple.

En présence de faïençage thermique, comme c’est le cas dans notre étude, on observe plusieurs microfissures initiées dans les grains en surface. La plupart s’arrêtent, mais une configuration microstructurale particulière peut être favorable à leur propagation et conduire à une rupture.

Forrest et Tate ont mené des essais de fatigue sur un alliage de cuivre. Ils observent eux aussi que les fissures de fatigue s’initient généralement dans les PSB et croissent par cisaillement

1. PSB : Bandes de glissement persistantes, de l’anglais « Persistent Slip Bands ».

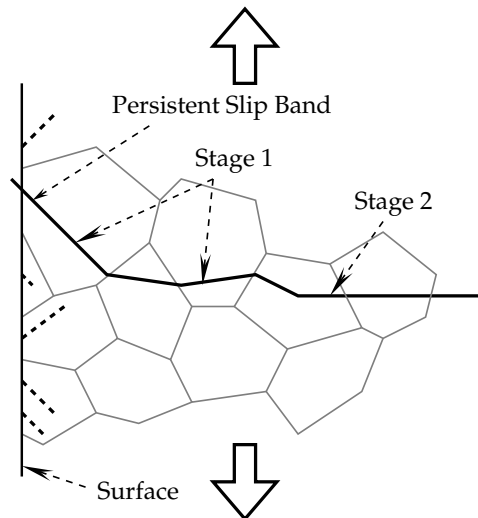


Fig. 1.3 – Représentation schématique des différents stades de propagation d’une fissure de fatigue, d’après Forsyth [3].

vers les joints de grains où leur vitesse de propagation chute fortement. Les joints de grains constitueraient donc une barrière microstructurale pour les fissures de fatigue en ralentissant leur progression. Ils observent également une concentration du glissement en surface des pièces testées qui conduit à un amorçage quasi systématique dans ces zones. Ceci est en partie prouvé par l’allongement de la durée de vie obtenu en procédant à des polissages successifs au cours de l’essai. La rugosité induite par le glissement en surface est donc en partie responsable de l’amorçage en fatigue [37].

Miller [4] a observé différents types de localisation de la déformation plastique en surface. Il distingue deux types de facettes décrites en figure 1.4. Elles correspondent toutes deux aux plans de cisaillement maximum dans le cas d’une traction. Cependant, la facette B conduit à une émergence de la matière et à une direction de propagation orientée vers l’intérieur de la matière. Ce n’est pas le cas de la facette A, qui conduit à une propagation le long de la surface, ce qui est moins nocif. La proportion de facettes A et B varie suivant le type de chargement :

- la torsion pure conduit à des facettes A
- la traction uniaxiale conduit à une proportion équivalente de facettes A et B
- la traction biaxiale conduit à des facettes de type B

1.1.3 Différents domaines de fatigue

La figure 1.5 illustre par une courbe de contrainte en fonction du nombre de cycles les différents régimes de fatigue et donne une idée de la dispersion des résultats pour un même niveau de sollicitation. De manière générale, on distingue plusieurs domaines :

- la fatigue à petit nombre de cycles, appelée également fatigue oligocyclique ou fatigue LCF², qui correspond aux fortes sollicitations cycliques. Dans ce cas, les fissures s’initient rapidement et la rupture de l’éprouvette survient après un petit nombre de cycles ($N_f < 10^4 \sim 10^5$).
- la fatigue à grand nombre de cycles, appelée également fatigue polycyclique ou fatigue HCF³, qui correspond aux faibles niveaux de sollicitations cycliques. Dans ces conditions,

2. LCF : de l’anglais « Low Cycle Fatigue ».

3. HCF : de l’anglais « High Cycle Fatigue ».

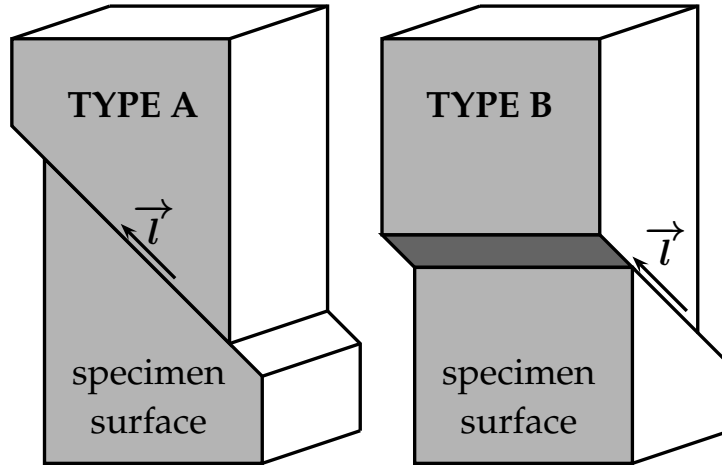


Fig. 1.4 – Schématisation des fissures de fatigue en surface selon Miller [4].

l'amorçage a lieu préférentiellement en surface et la phase d'amorçage représente une plus grande proportion de la durée de vie totale (cf. figure 1.10). La rupture a lieu pour $N_f < 10^6$ à 10^7 . Une importante dispersion des résultats se remarque dans ce domaine. Ceci est principalement dû aux particularités de la microstructure du matériau, entre autres, les configurations d'orientations des grains et la présence d'impuretés. Nous reviendrons sur cet aspect dans la section 1.2.3.

- la fatigue à très grand nombre de cycles (VHCF⁴ ou UHCF⁵), aussi appelée fatigue gigacyclique.

La courbe de Wöhler présente en général une asymptote horizontale qui détermine la limite de fatigue conventionnelle, notée σ_{FL} (cf. figure 1.5). Ce domaine, s'il existe correspond à une endurance illimitée, si bien qu'aucun amorçage ne peut avoir lieu.

On peut par ailleurs noter que de récentes études [38, 39] ont montré des cas de ruptures dans le domaine VHCF pour certains métaux et alliages. Cette fois, les fissures s'initient plutôt à cœur, au niveau des pores ou des inclusions au lieu des PSB en surface. Cela nuance la notion de limite de fatigue conventionnelle σ_{FL} . Selon les travaux de Mughrabi [38], une nouvelle limite de fatigue est définie aux alentours de 10^{10} cycles, qualifiée de « limite de fatigue interne » par opposition à la limite de fatigue conventionnelle que l'on rebaptise « limite de fatigue de surface ». Toutefois, il est important de noter que d'autres études révèlent des cas d'amorçage en surface dans le domaine VHCF, notamment pour des aciers austénitiques [40]. La fréquence élevée des essais (de l'ordre de 20 KHz) est aussi mise en cause, des essais gigacycliques à une fréquence plus basse, ne causant pas d'échauffement excessif, seraient nécessaires, bien que coûteux en temps, pour statuer sur ce sujet.

1.1.4 Premiers modèles de prédiction de durée de vie

Le premier modèle de prédiction de durée de vie des pièces mécaniques en fatigue fut introduit par Basquin en 1910 à l'aide d'une relation logarithmique entre l'amplitude de la contrainte appliquée $\Delta\sigma/2$ et le nombre de cycles à rupture N_f [41] :

$$\frac{\Delta\sigma}{2} = \sigma'_f (2N_f)^b \quad (1.1)$$

4. VHCF : de l'anglais « Very High Cycle Fatigue ».

5. UHCF : de l'anglais « UltraHigh Cycle Fatigue ».

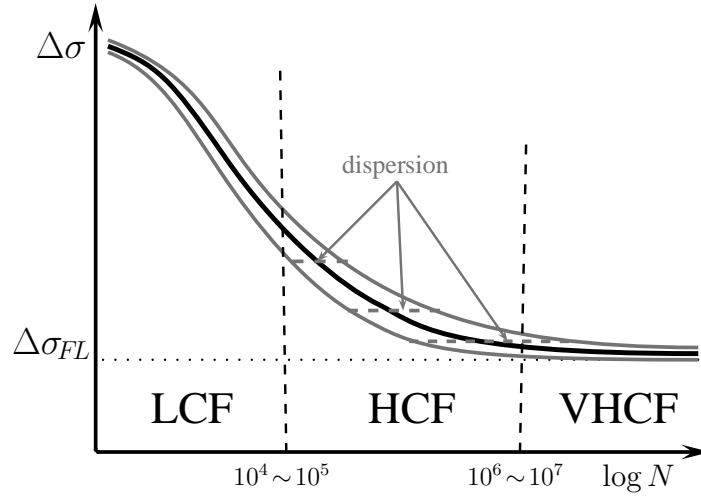


Fig. 1.5 – Schématisation des différents domaines de la fatigue et mise en évidence de la dispersion aux faibles amplitudes de sollicitation.

où σ'_f est la contrainte de rupture statique et b le coefficient de Basquin. Cette loi est plutôt réservée au domaine de la fatigue HCF, mais ne peut rendre compte des effets de contrainte moyenne.

Vers 1950, Manson et Coffin, chacun de leur côté, établirent un autre modèle applicable au domaine de la fatigue LCF, basé sur l'amplitude de déformation plastique $\Delta\varepsilon^p$ [42, 43] :

$$\frac{\Delta\varepsilon^p}{2} = \varepsilon'_f (2N_f)^c \quad (1.2)$$

où ε'_f représente le coefficient de ductilité et c l'exposant de ductilité en fatigue.

Il devient alors possible de couvrir l'intégralité des domaines de durée de vie en combinant les deux équations (1.1) et (1.2) pour obtenir l'équation (1.3) et donc reproduire mathématiquement l'ensemble du diagramme S-N.

$$\frac{\Delta\varepsilon}{2} = \frac{\Delta\sigma}{2E} + \frac{\Delta\varepsilon^p}{2} = \frac{\sigma'_f}{E} (2N_f)^b + \varepsilon'_f (2N_f)^c \quad (1.3)$$

où E est le module d'Young du matériau.

1.1.5 Tolérance au dommage

En 1957, Irwin introduit le coefficient d'intensité de contrainte K qui constitue la base de la Mécanique Linéaire de la Rupture (MLR) [44]. Celle-ci repose sur la définition de trois modes de fissuration, décrits en figure 1.6. Le facteur d'intensité de contrainte en mode I dépend de la géométrie, de la contrainte appliquée σ et de la longueur de fissure a :

$$K = \sigma \sqrt{\pi a} Y \quad (1.4)$$

où Y une fonction géométrique dépendant de la géométrie. Cette approche est basée sur l'hypothèse d'un milieu élastique linéaire isotrope et homogène : la plasticité est supposée restreinte à une zone très limitée en pointe de fissure. Elle donne des résultats cohérents à l'échelle macroscopique, donc pour l'étude des fissures longues (LC⁶).

6. LC : de l'anglais « Long Cracks ».

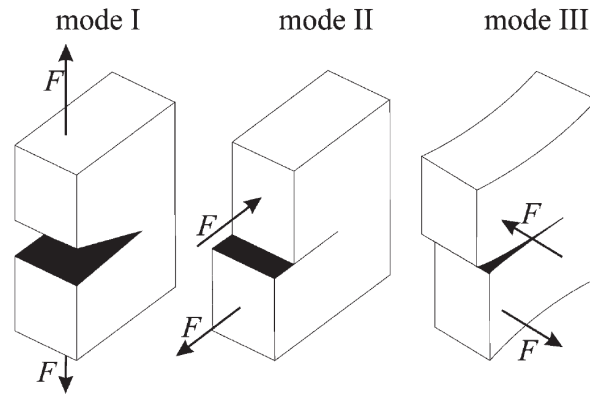


Fig. 1.6 – Les trois modes de fissuration introduits en mécanique linéaire de la rupture : (I) mode d’ouverture, (II) mode de cisaillement plan et (III) mode de cisaillement antiplan (figure d’après Krupp [2]).

En 1961, Paris et Erdogan reprennent le concept d’Irwin pour construire, à partir d’une démarche expérimentale, une relation dictant le taux de propagation des fissures de fatigue en fonction de la variation du facteur d’intensité de contrainte ΔK [45]. Pour construire cette relation, ils ont procédé à des mesures de vitesse de propagation à ΔK décroissant et rapport de charge constant. Ils ont ensuite reporté ces mesures dans un graphique $\log\left(\frac{da}{dN}\right) - \log(\Delta K)$ (cf. figure 1.7). On voit apparaître trois domaines pour lesquels les paramètres microstructuraux, la contrainte moyenne et les facteurs d’environnement influent de manière différente :

- A. En dessous d’une valeur seuil ΔK_{th} , la vitesse de propagation devient nulle. Une forte influence de la microstructure, de la contrainte moyenne et de l’environnement est constatée ici.
 - B. Un régime linéaire est obtenu entre la vitesse de propagation de fissure et ΔK . L’ensemble des paramètres cités précédemment n’ont qu’une très faible influence dans ce domaine.
 - C. À partir d’une valeur critique K_c (ténacité du matériau) la rupture est immédiate. Dans cette zone, on retrouve une forte influence de la microstructure et de la contrainte moyenne.
- C’est dans le domaine B qu’a été établie la « loi de Paris » :

$$\frac{da}{dN} = C \Delta K^n \quad (1.5)$$

où C et n sont des paramètres matériau. À titre d’exemple, pour l’acier, ces coefficients ont des valeurs de l’ordre de $C \sim 10^{-11}$ et $n \sim 4$. Cette équation empirique permet simplement (uniquement deux paramètres matériau), de retranscrire l’évolution de la vitesse de propagation d’une fissure de fatigue. Elle marque un point important dans l’étude de la fatigue et reste une référence dans l’estimation des durées de vie en fatigue. On peut désormais dimensionner une pièce, non seulement en cherchant à éviter l’amorçage de fissures, mais aussi en tolérant la formation de celles-ci, compte-tenu d’une propagation de fissure stable, dont la durée est relativement longue par rapport à la durée de vie prévue pour la pièce. Il s’agit de l’approche de tolérance au dommage. Cependant, nous verrons par la suite que cette loi ne s’applique pas au cas des fissures courtes.

La mécanique linéaire de la rupture n’est valable que pour les fissures longues. En effet, nous verrons dans la suite que les mécanismes gouvernant l’endommagement dans les premiers stades de la fatigue sont liés aux mouvements des dislocations dans la zone plastique en pointe de fissure. Cette zone plastique a une taille qui n’est, dans ce cas, plus négligeable devant la longueur

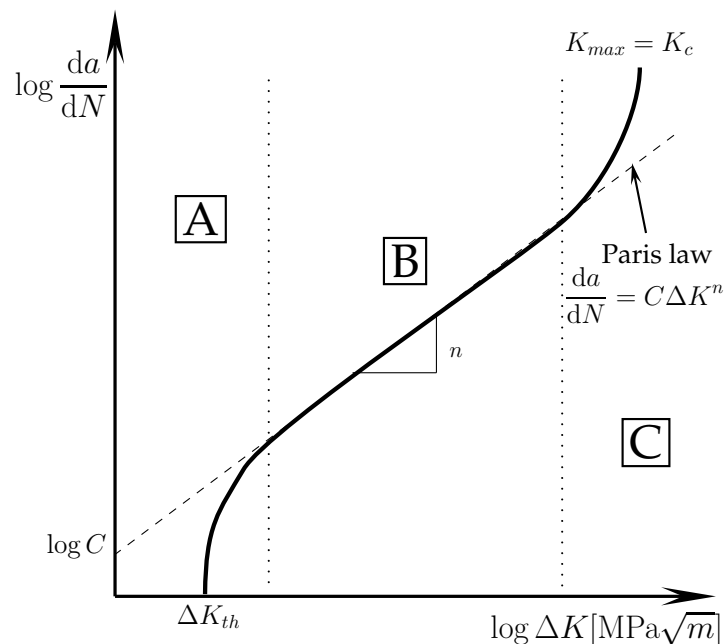


Fig. 1.7 – Diagramme représentant la vitesse de propagation de fissure en fonction du facteur d'intensité de contrainte et laissant apparaître trois domaines distincts A, B et C.

de fissure surtout dans le cas des métaux ductiles. Ceci est incohérent avec les hypothèses de la MLR. De plus, à cette échelle, la longueur des fissures est comparable aux dimensions caractéristiques de la microstructure (taille de grain). On rencontre une forte anisotropie élastique et/ou plastique au niveau local, ce qui perturbe les calculs basés sur la MLR. Pour pallier ce problème, on fait appel dans ce cas à d'autres méthodes comme la Mécanique Élastoplastique de la Rupture (MEPR), qui s'appuie sur l'intégrale de Rice [46]. D'autres approches mettent en jeu l'amplitude du déplacement d'ouverture en pointe de fissure [47], comme l'avait proposé initialement Morris [48].

1.1.6 Évolution des fissures de fatigue polycyclique

La majorité des études du XX^e siècle ont porté sur la fatigue oligocyclique (LCF). Depuis quelques décennies, on s'intéresse de plus en plus au domaine de la fatigue polycyclique (HCF). De manière générale, le scénario conduisant à la ruine de la structure peut être décomposé en plusieurs stades, chacun propre à une échelle :

1. l'amorçage d'une microfissure (un grain) ;
2. la propagation d'une fissure courte (quelques grains) ;
3. la propagation d'une fissure macroscopique ($> 0,5-1$ mm) ;
4. la rupture du composant.

Cette décomposition est schématisée pour le domaine HCF en figure 1.8 en reportant la longueur a de la fissure en fonction du nombre de cycles N . La phase d'amorçage peut se traduire comme une phase « d'incubation » qui prend fin lorsque la microfissure est initiée.

À chacun de ces stades correspond une longueur de fissure et un régime de propagation. Plus précisément, les fissures courtes peuvent se diviser en deux catégories.

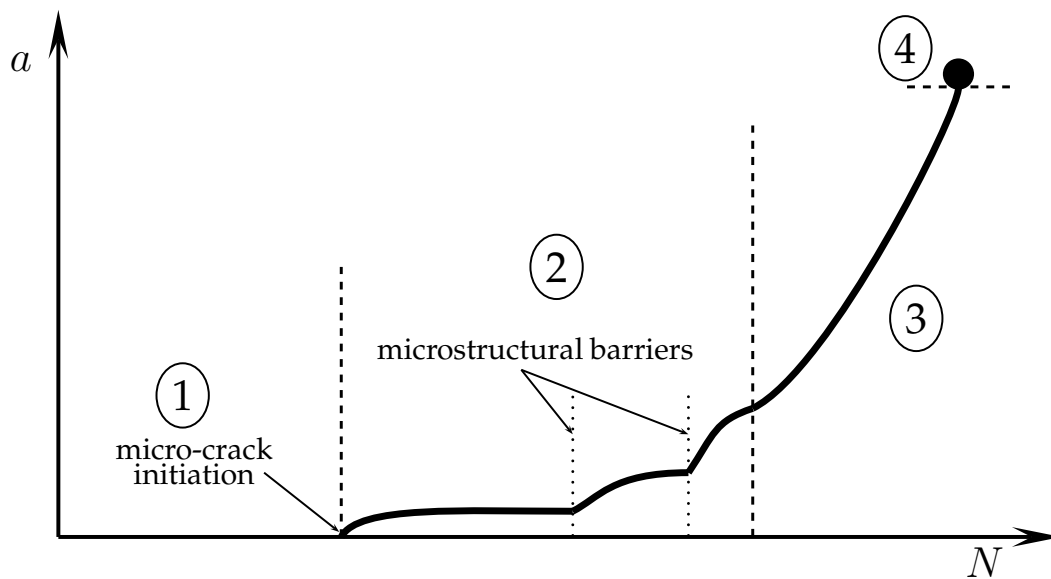


Fig. 1.8 – Différents stades d'évolution d'une fissure de fatigue HCF explicités par une courbe représentant la longueur de fissure a en fonction du nombre de cycles N . (1) Incubation/amorçage (2) Micropropagation (3) Propagation macroscopique (4) Rupture.

1. les fissures microstructurellement courtes (MSC⁷) dont la longueur est inférieure à environ 5 grains. Elles se sont initiées par des mécanismes de déformation locaux. Leur évolution est grandement influencée par la microstructure du matériau et peut présenter des phases d'accélération, de ralentissement voire même d'arrêt, avant éventuellement de se propager à nouveau. En effet, elles se propagent par cisaillement jusqu'aux joints de grains qui constituent des barrières microstructurelles et qui ralentissent la croissance de ces fissures. On utilise des modèles micromécaniques pour prévoir leur évolution.
2. les fissures physiquement courtes (PSC⁸) dont la longueur, de cinq à dix grains, se situe entre 0,2 mm et 0,5 mm dans le cas de l'acier 316L. Cela correspond à la période de transition entre les fissures courtes et les fissures longues. Pour prévoir leur évolution, on utilise par exemple une modélisation de type MEPR.

L'aspect non-propagation des fissures de fatigue a été explicité par Kitagawa et Takahashi en 1976 [5]. En élaborant un diagramme (en figure 1.9a), présentant l'amplitude de la contrainte appliquée en fonction de la longueur de fissure, on voit apparaître les différents régimes de propagation suivant la longueur de fissures. Les fissures courtes nécessitent l'utilisation de modèles micromécaniques ou de type MEPR tandis que les fissures longues se traitent classiquement avec les modèles issus de la MLR. D'après Kitagawa et Takahashi, les fissures de type MSC ne se propagent qu'à partir d'une amplitude de contrainte dépassant le seuil de la limite de fatigue σ_{th} . À partir d'une certaine longueur caractéristique a_0 (généralement de l'ordre de quelques grains), on passe au régime de transition où le seuil de propagation vient se caler petit à petit sur le régime linéaire de la MLR appliqué aux fissures longues ou « industrielles ». Ceci a lieu pour une longueur de fissure $a_2 \approx 10 \times a_0$. Ce diagramme met en avant une limite de fatigue dépendante de la longueur de fissure.

Brown a repris et modifié le diagramme de Kitagawa–Takahashi (en figure 1.9b) et a démontré expérimentalement que les MSC pouvaient s'initier à des amplitudes de contraintes

7. MSC : Fissure microstructurellement courte, de l'anglais « Microstructurally Short Cracks ».

8. PSC : Fissure physiquement courte, de l'anglais « Physically Short Cracks ».

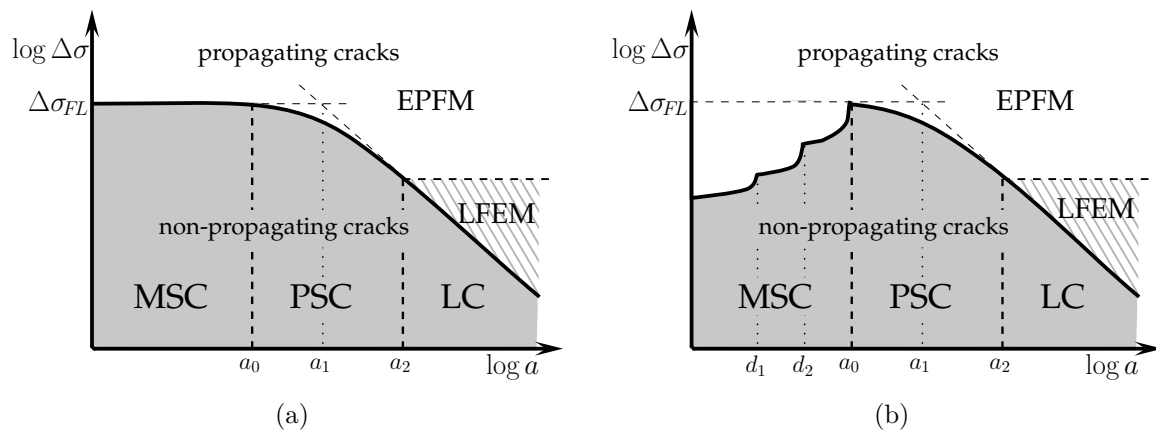


Fig. 1.9 – Diagramme de Kitagawa–Takahashi : (a) original [5] et (b) modifié [6].

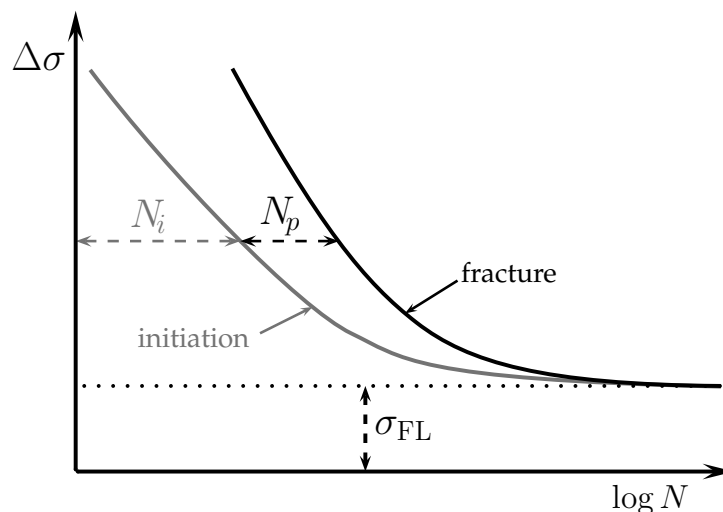


Fig. 1.10 – Diagramme de Wöhler explicitant les nombres de cycles des phases d'amorçage N_i et de propagation N_p pour les fissures de fatigue.

inférieures à la limite de fatigue conventionnelle [6]. Le seuil de propagation des MSC augmente ensuite avec la longueur de la fissure. Ceci se fait par à-coups, au fur et à mesure que la fissure franchit les barrières microstructurales (longueurs d_1 , $d_2\dots$). On retrouve le régime initialement décrit pour $a \sim a_0$.

Dans le cadre de la fatigue HCF, la phase d'amorçage peut représenter jusqu'à 80 % de la durée de vie totale de la pièce (cf. figure 1.10). Le nombre de cycles à rupture N_f se décompose comme suit :

$$N_f = N_i + N_p \quad (1.6)$$

avec N_i et N_p les nombres de cycles respectivement des phases d'amorçage et de propagation.

Dans le cas de notre problématique industrielle, les sollicitations sont faibles (amplitude de déformations cycliques de l'ordre de 0,15 à 0,3 %). On se trouve donc dans le domaine de la fatigue HCF. La phase d'amorçage des fissures courtes, autrement dit la phase de formation des MSC, est prédominante par rapport à la durée de vie du composant.

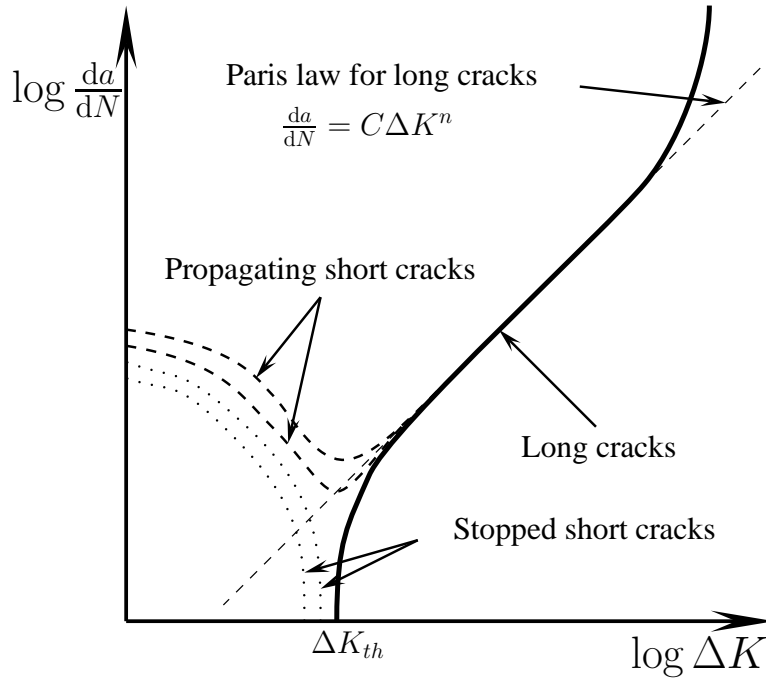


Fig. 1.11 – Diagramme de Paris faisant apparaître la propagation spécifique des fissures courtes.

1.2 Fissures courtes

1.2.1 Mise en évidence

En 1975, Pearson [49] met en évidence les fissures courtes de fatigue dont la longueur est de l'ordre de la dimension caractéristique de la microstructure du matériau. Il s'avère que ces fissures s'amorcent et se propagent pour des valeurs de facteurs d'intensité de contrainte inférieures au seuil K_{th} et à une vitesse supérieure que celle décrite par la MLR pour les fissures longues (cf. figure 1.11). L'aspect conservatif de la loi de Paris (équation (1.5)) est donc remis en cause, du moins concernant les premiers stades de propagation. D'autres travaux ont reporté le même genre d'observation [50]. Il est vrai que dans chaque cas le facteur d'intensité de contraintes est calculé à partir de la valeur du tenseur de contraintes macroscopiques, et ne tient donc pas compte des éventuelles surcharges dues aux redistributions locales (voir la discussion du prochain paragraphe). L'influence de la microstructure sur la propagation (vitesse, trajet, arrêt...) des fissures courtes est aussi mise en exergue. Lankford montre, en réalisant des essais sur des éprouvettes à différentes tailles de grain, que la phase de ralentissement des fissures courtes correspond à une longueur de fissure de l'ordre de la taille de grain [51]. Cette observation rejoint le concept de la loi de Hall–Petch mettant en relation la contrainte d'écoulement σ_y avec la taille de grain d [52].

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \quad (1.7)$$

où σ_0 est la contrainte de friction et k le facteur de Hall–Petch. Cette loi retranscrit l'effet néfaste de la taille de grain sur la résistance du matériau.

L'influence de la microstructure étant mise en jeu dans le problème des fissures courtes, quelques bases sont rappelées sur les matériaux polycristallins dans la section suivante.

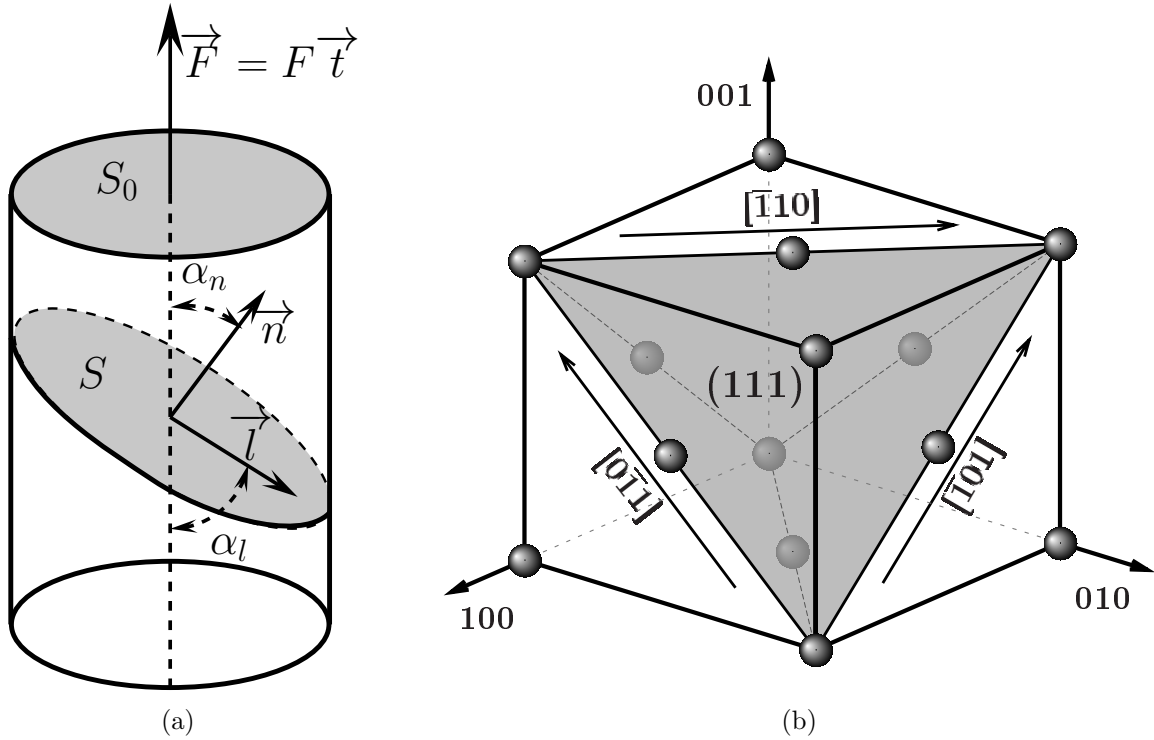


Fig. 1.12 – (a) Schématisation de la loi de Schmid. (b) Description schématique des systèmes de glissement octaédriques dans les réseaux de type CFC.

1.2.2 Les monocristaux et polycristaux

Monocristal

Un monocristal est un matériau homogène (si l'on fait abstraction des impuretés) à comportement anisotrope dans les domaines élastique et plastique. L'assemblage ordonné des atomes forme un réseau cristallin. Plusieurs types de réseau existent, ils dépendent de la composition chimique du cristal. Dans le cas du cuivre ou de la phase austénitique de l'acier, il s'agit du réseau CFC⁹. Les mécanismes de déformation du monocristal dépendent directement de cette structure cristalline.

Les monocristaux se déforment par cisaillement lorsque la cission résolue τ sur un système de glissement atteint la cission résolue critique τ_0 . La cission résolue est définie pour chaque système de glissement par la loi de Schmid, qui fait intervenir les angles α_l et α_n . Ces angles sont définis par la direction de sollicitation \underline{t} , la direction de glissement \underline{l} et la normale au plan de glissement \underline{n} (cf. figure 1.12a).

$$\tau = \frac{F}{S} \cos \alpha_l = \frac{F}{S_0} \cos \alpha_n \times \cos \alpha_l \quad (1.8)$$

$$\tau = M \frac{F}{S_0} = M \sigma_a \quad (1.9)$$

$$M = \frac{\tau}{\sigma_a} \quad (1.10)$$

où F et σ_a sont respectivement la force et la contrainte appliquées, S_0 la surface du spécimen dans le direction de sollicitation, S la surface du plan de glissement et M le facteur de Schmid.

9. CFC : Cubique à Faces Centrées

Plan \underline{n}^s	Direction \underline{l}^s	N° Zebulon	N° Boas
(111)	$[\bar{1}01]$	1	B4
	$[0\bar{1}1]$	2	B2
	$[\bar{1}10]$	3	B5
$(1\bar{1}1)$	$[\bar{1}01]$	4	D4
	$[011]$	5	D1
	$[110]$	6	D6
$(\bar{1}11)$	$[0\bar{1}1]$	7	A2
	$[110]$	8	A6
	$[101]$	9	A3
$(11\bar{1})$	$[\bar{1}10]$	10	C5
	$[101]$	11	C3
	$[011]$	12	C1

Tab. 1.1 – Description des systèmes de glissement octaédriques et correspondance entre la numérotation Zebulon et la notation de Schmid & Boas [23].

Le facteur de Schmid M dépend uniquement de la normale au plan de glissement \underline{n} , de la direction de glissement \underline{l} et de la direction de sollicitation \underline{t} .

$$M = (\underline{t} \cdot \underline{n}) \times (\underline{t} \cdot \underline{l}) = \cos \alpha_n \times \cos \alpha_l \quad (1.11)$$

On différencie parfois le facteur de Schmid macroscopique M du facteur de Schmid local m , calculé à partir du tenseur de contrainte local $\underline{\sigma}$:

$$m = \frac{(\underline{\sigma} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{l}}{\sigma_a} \quad (1.12)$$

avec σ_a représentant la contrainte macroscopique appliquée.

Étant donné que les réseaux cristallins possèdent plusieurs systèmes de glissement, chaque terme $(\tau, \underline{n}, \underline{l}, M, m)$ est défini pour chaque système en ajoutant l'exposant s ($\tau^s, \underline{n}^s, \underline{l}^s, M^s, m^s$). Dans le cas d'un réseau CFC, ce sont les systèmes octaédriques qui entrent en jeu. Il s'agit des plans de type $\{111\}$ et des directions de type $\langle 110 \rangle$. Ces derniers sont listés dans le tableau 1.1 et illustrés en figure 1.12b. Le facteur de Schmid macro maximum M_{max} pour une configuration donnée est souvent déterminant pour caractériser la plasticité dans un cristal. Il peut cependant différer du facteur de Schmid local maximum m_{max} dans les polycristaux, en raison de la redistribution des contraintes locales dues aux grains voisins.

$$M_{max} = \max_s M^s \quad (1.13)$$

$$m_{max} = \max_s m^s \quad (1.14)$$

Le tableau 1.2 présente, en ordre décroissant, les valeurs des facteurs de Schmid sur chaque système de glissement octaédrique pour certaines directions de chargement caractéristiques dans le cas des réseaux cristallins de type CFC. Les orientations de type $[001]$, $[011]$ et $[111]$ conduisent à du glissement multiple alors que les orientations $[213]$, $[519]$ et $[5\ 1\ 11]$ conduisent à du glissement concentré sur un ou deux systèmes. Suivant le niveau de sollicitation et l'orientation du cristal, on peut obtenir l'absence de glissement, du glissement simple, double ou multiple. Les isovaleurs du facteur de Schmid maximal M_{max} dans le triangle standard sont reportées

Orientation													
[001]		[101]		[111]		[102]		[213]		[519]		[5 1 11]	
M^s	s	M^s	s	M^s	s	M^s	s	M^s	s	M^s	s	M^s	s
0.408	8	0.408	9	0.272	9	0.490	9	0.467	9	0.500	9	0.496	9
0.408	7	0.408	8	0.272	8	0.490	1	0.350	8	0.472	1	0.458	1
0.408	6	0.408	3	0.272	6	0.245	8	0.350	1	0.311	5	0.298	8
0.408	5	0.408	1	0.272	5	0.245	7	0.292	5	0.283	2	0.267	5
0.408	3	0.000	7	0.272	12	0.245	5	0.175	6	0.250	8	0.229	3
0.408	2	0.000	6	0.272	11	0.245	3	0.175	3	0.250	7	0.229	2
0.408	12	0.000	5	0.000	7	0.245	2	0.175	2	0.222	12	0.198	7
0.408	10	0.000	4	0.000	4	0.245	12	0.117	7	0.194	4	0.160	12
0.000	9	0.000	2	0.000	3	0.163	4	0.117	4	0.189	3	0.153	4
0.000	4	0.000	12	0.000	2	0.163	11	0.000	12	0.167	11	0.115	6
0.000	11	0.000	11	0.000	10	0.082	6	0.000	11	0.117	6	0.115	11
0.000	1	0.000	10	0.000	1	0.082	10	0.000	10	0.056	10	0.046	10

Tab. 1.2 – Facteurs de Schmid de tous les systèmes de glissement octaédriques pour un chargement suivant les orientations caractéristiques des réseaux de types CFC. Les valeurs en gras représentent les systèmes susceptibles d’être activés ($M^s > 0.2$).

en figure 1.13a, les orientations caractéristiques γ sont aussi indiquées. Le facteur de Schmid maximal ne suffit pas à caractériser la tendance d’un cristal à se déformer plastiquement puisqu’il occulte le nombre de systèmes susceptibles d’être activés, néanmoins il représente souvent un bon indicateur.

L’écoulement plastique dans les monocristaux se fait selon différents régimes de durcissement, comme en témoigne la figure 1.13b qui montre l’évolution de la cission résolue en fonction de la déformation de cisaillement monotone appliquée γ .

- I. Seul un système en question est activé : il s’agit du glissement facile pour lequel le durcissement est limité.
- II. Un second système est activé : par interaction avec le premier, le cristal devient plus résistant au mouvement des dislocations. Le module d’écrouissage reste constant dans cette zone.
- III. Au-delà d’une certaine contrainte ou déformation, l’écrouissage arrive à saturation et le glissement devient multiple. La diminution progressive du taux d’écrouissage est due au phénomène d’annihilation des dislocations par glissement dévié.

Cette courbe peut varier selon les matériaux ainsi que le nombre de régimes identifiés [53]. Ceci est fonction de l’énergie de fautes d’empilement et de la matrice d’interaction, chacune propre au matériau.

Sous chargement cyclique, les monocristaux tendent en général à se durcir au cours des premiers cycles jusqu’à atteindre un cycle stabilisé, à partir duquel la boucle d’hystérésis reste constante. Cet état peut être atteint en un ou quelques cycles. On rencontre parfois des exemples d’adoucissement cyclique. Le cycle stabilisé est caractérisé par l’amplitude de cission à saturation $\Delta\tau_{sat}$. En menant des essais à amplitude de glissement plastique $\Delta\gamma^p$ imposée sur un monocristal orienté pour du glissement simple, on peut représenter l’évolution de $\Delta\tau_{sat}$ en fonction de $\Delta\gamma^p$. Cette courbe est reportée en figure 1.14d pour un cristal CFC non écroui. Elle met en évidence

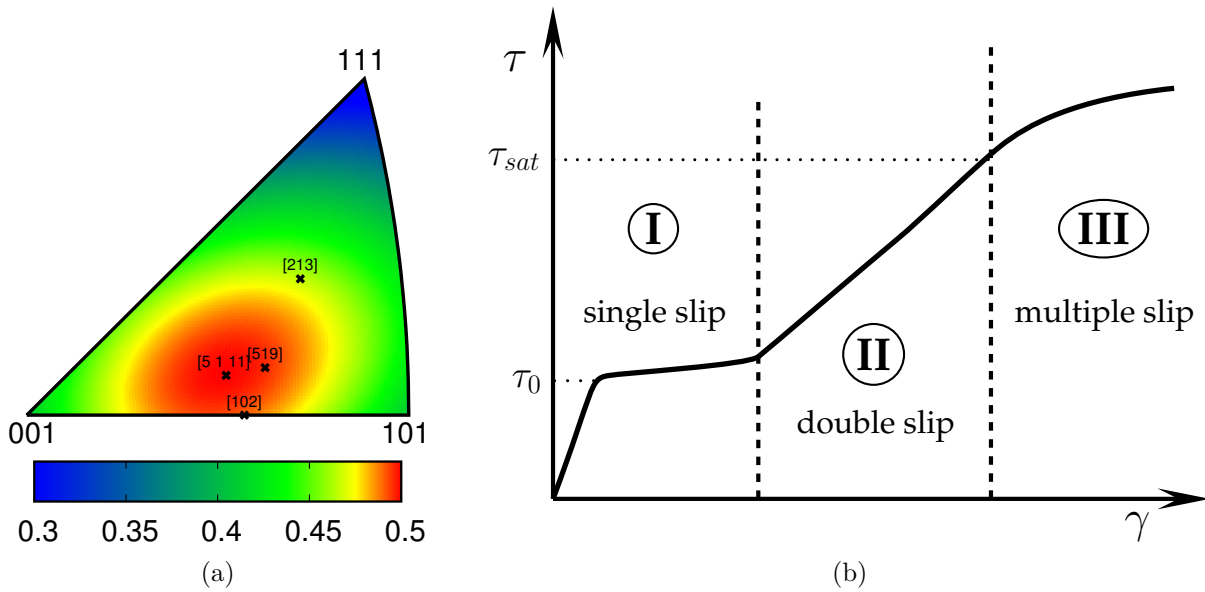


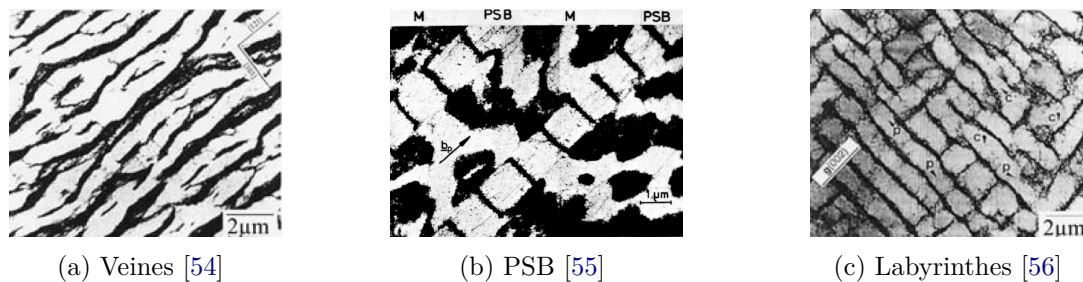
Fig. 1.13 – (a) Isovaleurs du facteur de Schmid maximal dans le triangle standard CFC. (b) Courbe schématique présentant l'évolution de la cission résolue τ en fonction de la déformation de cisaillement γ sur un système de glissement dans un réseau de type CFC.

trois stades de déformation plastique, chacun associé à un type de structure de dislocations mis en évidence par les observations effectuées au Microscope Électronique à Transmission (MET).

- A. À faible amplitude de glissement, les rotations du réseau cristallin n'ont pas lieu et le glissement se concentre sur un plan de glissement. Ceci conduit à la formation de « veines » riches en dislocations séparées par une matrice pauvre en dislocations (cf. figure 1.14a). Plus le volume des veines augmente et plus le cristal durcit jusqu'à atteindre un plateau lorsque les veines représentent 50 % du volume.
- B. La phase de saturation correspond à la formation des bandes de glissement persistantes (PSB), qui par un mécanisme de création et annihilation des dipôles de dislocations, n'engendre pas de durcissement. Les PSB sont des sites de glissement très intense (environ 100 fois plus élevé que les structures en veines), que l'on qualifie de structures en échelles, qui sont séparés par une matrice composée de structures en veines comme illustré en figure 1.14b. Le volume occupé par ces PSB augmente avec l'amplitude de glissement plastique jusqu'à saturation.
- C. Lorsque le glissement plastique dépasse la valeur γ_B^p , la cission résolue à saturation augmente à nouveau sous l'effet du glissement dévié. Il se forme alors des structures en labyrinthes (cf. figure 1.14c) ou en cellules de dislocations. À noter que les structures en labyrinthes peuvent se former plus tôt, avant que la fraction volumique des PSB atteigne 100 %.

Polycristal

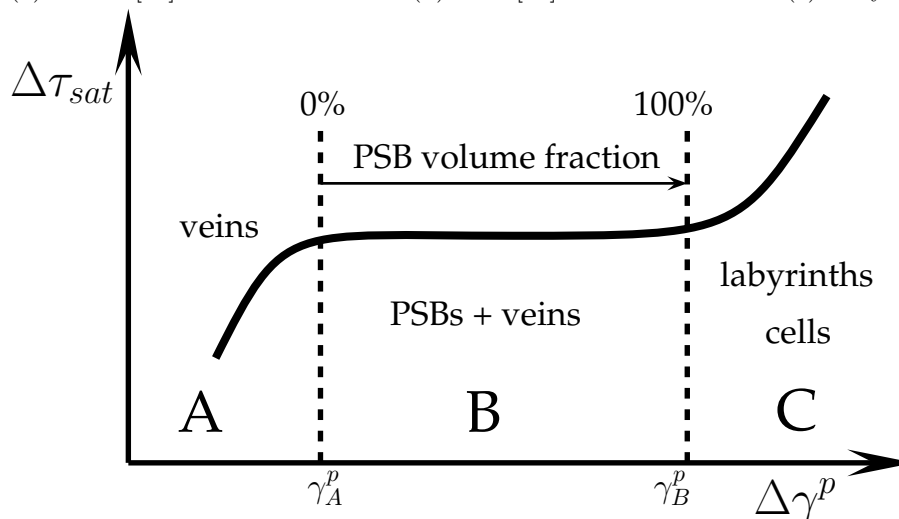
Un polycristal est un matériau hétérogène constitué d'un agrégat de grains. Chaque grain est équivalent à un monocristal caractérisé par la nature de sa phase (par exemple austénite ou ferrite) et l'orientation de son réseau cristallin. Selon les matériaux, les grains peuvent avoir des formes plutôt concaves ou convexes. Ils peuvent aussi parfois présenter un allongement dans des directions privilégiées comme la direction de laminage. C'est le cas de l'acier 316LN étudié dans le projet AFGRAP.



(a) Veines [54]

(b) PSB [55]

(c) Labyrinthes [56]

(d) Amplitude de cisssion résolue à saturation $\Delta\tau_{sat}$ en fonction de l'amplitude de glissement plastique imposée $\Delta\gamma^p$, d'après [57].**Fig. 1.14** – (a,b,c) Différentes structures de dislocations d'un monocristal CFC sous chargement cyclique et (d) courbe cyclique de contrainte–déformation.

Le comportement moyen d'un matériau polycristallin est généralement isotrope mais peut aussi présenter une certaine anisotropie due à sa texture cristalline. Elle-même dépend des phénomènes de cristallisation présents lors du procédé de fabrication et de mise en forme du matériau. On peut accéder à la morphologie de surface des grains constituant un polycristal ainsi que leur orientation par l'intermédiaire de la technique EBSD¹⁰ qui s'appuie sur la diffraction des électrons rétro diffusés. Cette technique reste non destructive tant qu'on se limite à des cartes d'orientation sur la surface du spécimen. Pour accéder à la morphologie volumique, il est possible de réaliser des acquisitions EBSD après des polissages successifs comme l'a fait Le Pécheur sur l'acier 304L [18]. Cependant, cette technique est destructive, coûteuse en temps et nécessite un polissage précis. Les derniers apports de la microtomographie de contraste combinée à la diffraction aux rayons X permettent, pour certains matériaux, d'accéder à la microstructure (morphologie volumique et orientation cristalline). Cette technique a été notamment utilisée par Herbig *et al.* sur des alliages de titane pour étudier la propagation tridimensionnelle des fissures de fatigue [58]. Un nouveau point de vue est maintenant disponible pour aider à la compréhension de ce phénomène.

Le point critique des polycristaux réside aux joints de grains où la composition chimique est quelque peu différente. En effet, lors du procédé d'élaboration ou de la recristallisation, certains composés comme les carbures se fixent aux joints de grains. Ceci n'est qu'un exemple des particularités spécifiques des joints de grains. Ils jouent un rôle important dans nombre de

10. EBSD : Diffraction d'électrons rétrodiffusés, de l'anglais « Electron Back Scattering Diffraction ».

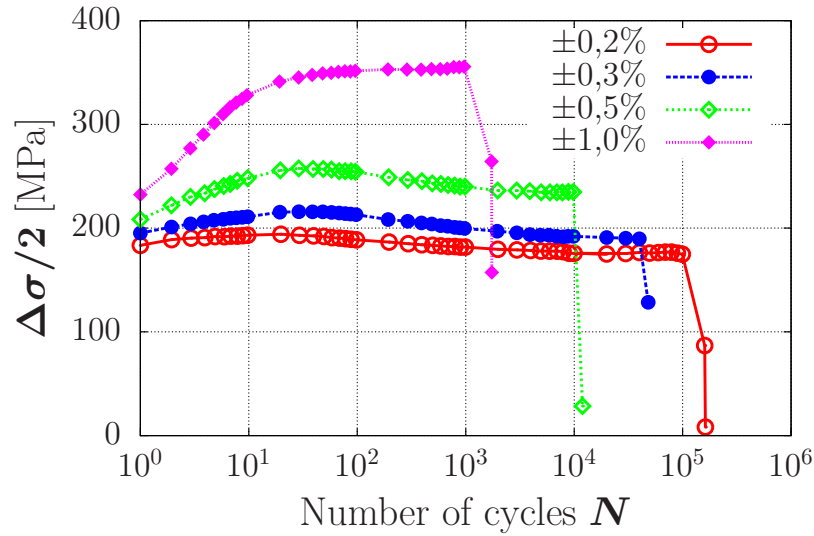


Fig. 1.15 – Courbe illustrant l'érouissage cyclique de l'acier 316L sous chargement à déformation totale imposée.

phénomènes mécaniques et physiques. La désorientation cristalline entre les deux grains d'une part, l'orientation géométrique du joint par rapport à l'axe de sollicitation d'autre part, et enfin par rapport à la surface libre jouent aussi beaucoup dans les phénomènes de localisation, et donc d'amorçage de fissure. Le mouvement des dislocations est bloqué aux joints de grains dès lors que la désorientation entre les grains est assez élevée.

On peut noter, dans le cas de polycristaux purs, la tendance des grains en surface libre à se rapprocher du comportement des monocristaux en présentant essentiellement du glissement simple. Dans le reste du polycristal, le glissement double (ou dévié) apparaît beaucoup plus facilement que dans les monocristaux. Ceci est dû à l'influence des grains voisins qui perturbent le champ de contraintes local par un effet de structure. Les grains étant plus ou moins résistants suivant leur orientation cristallographique, des hétérogénéités se créent dans le champ de déformation, et donc dans le champ de contraintes.

Une autre particularité des polycristaux est le maclage dont nous ne détaillerons pas le mécanisme de formation ici. Une macle correspond à une rotation du réseau cristallin de 60° autour d'un axe de type [111]. Selon les matériaux et les procédés de fabrication, les grains maclés représentent une proportion plus ou moins importante. Les joints de macles sont des sites de glissement facile, ils représentent donc des sites d'amorçage préférentiels.

Sous chargement de fatigue, les polycristaux présentent une boucle d'hystérésis qui se stabilise au cours des cycles. La stabilisation correspond à l'organisation des structures de dislocations dans les grains, notamment des PSB comme indiqué précédemment pour les monocristaux (cf. figure 1.14d). Par exemple, sur la figure 1.15, l'acier inoxydable austénitique 316L durcit au cours des premiers cycles. Il atteint ensuite un plateau au bout d'une centaine de cycles. On remarque que, suivant les amplitudes de sollicitation, le durcissement ne suit pas la même évolution. Les parts de durcissement et d'adoucissement ne sont pas constantes.

1.2.3 Observations expérimentales sur l'amorçage et la micropropagation des fissures courtes dans les polycristaux

Les études expérimentales effectuées sur l'amorçage des fissures de fatigue ont révélé l'influence de plusieurs paramètres à la fois sur les sites d'amorçage et sur la durée de cette phase :

- le niveau de sollicitation ;
- les joints de grains ou de phases (anisotropie élastique et plastique) ;
- l'émergence de PSB en surface ;
- l'environnement ;
- l'état de surface ;
- la présence d'inclusions, de précipités et/ou de pores.

Effet du niveau de sollicitation

Kim et Laird [59, 60], ainsi que Figueroa et Laird [61], ont observé les fissures de fatigue dans des polycristaux de cuivre en condition LCF, sous air. Par mesure de diffraction aux rayons X, ils ont obtenu les orientations cristallines des grains fissurés. Sous l'effet des fortes sollicitations, les fissures sont de type intergranulaire. À moyenne et faible amplitude, les fissures sont en majeure partie transgranulaires, amorcées dans les PSB. Cependant, à moyenne amplitude, des fissures intergranulaires peuvent apparaître à la jonction entre une PSB et le joint de grains. Ce type d'amorçage n'a lieu que sous des conditions de fortes désorientations entre les grains et lorsque l'orientation géométrique du joint de grains vis-à-vis de la direction de sollicitation se rapproche d'une configuration de type A (45°) ou B (90°).

En 1990, Heinz et Neumann ont procédé à des essais de fatigue sous air, à déformation plastique imposée, sur un acier austénitique inoxydable [62]. Ils ont étudié la compétition entre les différents sites d'amorçage (joints de grains, joints de macles, PSB) et ont montré que les joints de macles représentaient les sites critiques surtout en condition HCF. Neumann et Tönnessen ont aussi observé que, dans le cas des métaux CFC, les fissures se forment tous les deux joints de macles, sous l'effet de l'anisotropie élastique [63].

Blochwitz *et al.* [64] ont mesuré les traces de glissement persistantes (PSM¹¹) apparaissant en surface des grains (environ 500) d'un polycristal de nickel. Ils ont ensuite comparé, pour chaque grain, ces valeurs au facteur de Schmid macro M et à l_p , projection du vecteur glissement du système actif \underline{l} sur la normale à la surface $\underline{n}_{\text{surf}}$.

$$l_p = \underline{l} \cdot \underline{n}_{\text{surf}} \quad (1.15)$$

Pour les grains présentant ce type de traces, une bonne corrélation est obtenue entre les systèmes activés et les valeurs importantes de M et l_p des systèmes primaires et secondaires calculés. Cependant, il s'avère que pour les grains n'engendrant pas de traces de glissement, il est difficile de justifier cette absence par des faibles valeurs de M et/ou de l_p .

Dans une autre étude sur l'acier 316L, Blochwitz *et al.* ont mis en évidence la dépendance par rapport à $\Delta\varepsilon^p$ de la localisation des sites d'amorçage et du trajet de propagation [24]. D'après leurs résultats, les fissures s'amorcent dans les PSB à faible amplitude et le long des joints de grains à moyenne et forte amplitude. Ensuite, les fissures se propagent préférentiellement suivant des plans cristallographiques de différents types selon l'amplitude de chargement. Sous des sollicitations de faible amplitude, les fissures suivent des plans de type $\{111\}$ et $\{100\}$, alors qu'à plus forte amplitude il s'agit plutôt des plans de type $\{100\}$ et $\{110\}$. Ceci montre

11. PSM : traces de glissement persistantes, de l'anglais « Persistent Slip Markings ».

$\Delta\varepsilon^p/2$	$2,5 \times 10^{-4}$	5×10^{-4}	1×10^{-3}
Amorçage			
PSB	X		
Joints de macles	X		
Joints de grains		X	X
Propagation (%)			
Trajet intracristallin	57	48	60
Trajet selon les joints de macles	27	28	20
Trajet intercristallin	16	24	20
Propagation selon les plans (%)			
{100}	28	23	16
{110}	8	8	36
{111}	37	10	1
Alternativement {100}/{010}	–	10	6
Alternativement {100}/{110}	2	10	11
Alternativement {110}/{101}	4	17	13
Alternativement {110}/{111}	13	3	–

Tab. 1.3 – Analyse microstructurale de l’amorçage et de la propagation des MSC [24].

encore une fois la diversité des mécanismes de fissuration, suivant le niveau de chargement. En examinant les profils des fissures, il s’avère que plus de la moitié du trajet de fissuration est de type intracristallin (cf. tableau 1.3).

Effet des joints de grains

Blochwitz *et al.* [65] ont étudié l’influence de la désorientation entre les grains (joints de macles inclus) sur la propagation des fissures dans le cadre de la fatigue à grand nombre de cycles. Les essais ont été réalisés sur des polycristaux de Nickel et sur de l’acier 316L. Un paramètre de désorientation $M_{\text{Blochwitz}}$ a été élaboré pour prédire le franchissement des joints de grains. Celui-ci repose à la fois sur la désorientation du réseau cristallin et sur les contraintes au niveau du joint de grains.

$$\underline{\Delta R} = (\underline{l} \times \underline{n})_{G_1} - (\underline{l} \times \underline{n})_{G_2} \quad (1.16)$$

$$\sin^2 \beta = \frac{\sigma_{GB}}{\sigma_0} \quad (1.17)$$

$$M_{\text{Blochwitz}} = \sin^2 \beta \underline{\Delta R} \cdot \underline{e}_t \quad (1.18)$$

où \underline{l} et \underline{n} sont la direction et la normale au plan de glissement du système de glissement primaire, les indices G_1 et G_2 font référence aux grains 1 et 2, σ_{GB} est la composante normale des contraintes au joint de grains, σ_0 la contrainte appliquée et \underline{e}_t le vecteur correspondant à la trace de glissement. Le paramètre $M_{\text{Blochwitz}}$ est en bonne concordance avec les joints de grains fissurés.

Les observations microscopiques ont révélé que les joints de macles représentent une grande proportion des joints endommagés. Ceci avait déjà été montré par Neumann *et al.* [62, 63] qui avaient notamment explicité l’importance des joints de macles dans les phénomènes d’amorçage de fissures courtes dans les métaux de type CFC.

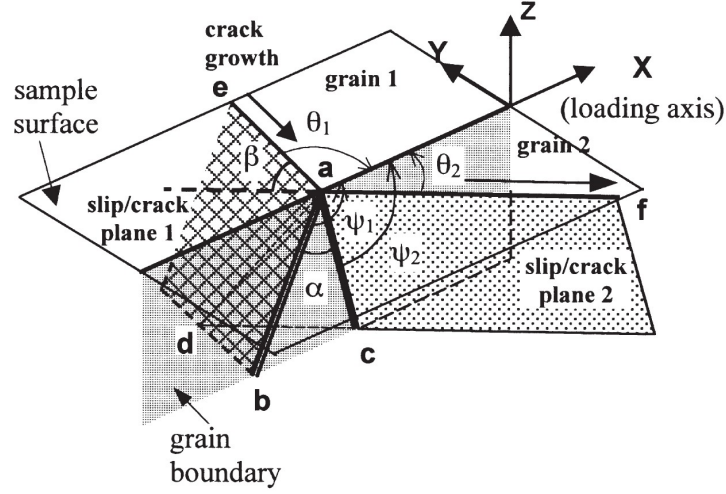


Fig. 1.16 – Schéma explicitant les angles de twist α et de tilt β , d'après Zhai *et al.* [7].

Zhai *et al.* ont aussi étudié le phénomène de ralentissement et de déviation des fissures au niveau des joints de grains [7]. Ils ont proposé un modèle cristallographique de propagation de fissures en stade I au niveau des joints de grains, basé sur l'angle de twist α et l'angle de tilt β (cf. figure 1.16). On préconise cette fois de prédire le franchissement du joint de grains à partir de la désorientation entre les systèmes de glissement favorables au trajet de fissuration plutôt que la désorientation absolue entre les réseaux cristallins des différents grains. Cette fois-ci, l'orientation géométrique du joint de grains est alors prise en compte par l'intermédiaire de l'angle de twist α . Ce dernier a une forte influence sur le franchissement (aisé/rapide ou non) du joint de grains, une valeur moindre favorisant considérablement la propagation au travers de l'obstacle. À partir des normales aux plans du joint de grains \underline{n}_{GB} , à la surface du spécimen \underline{n}_{surf} et des systèmes de glissement favorables des grains 1 et 2, les angles de twist et tilt s'écrivent :

$$\alpha = \arccos((\underline{n}_{GB} \times \underline{n}_1) \cdot (\underline{n}_{GB} \times \underline{n}_2)) = |\psi_1 - \psi_2| \quad (1.19)$$

$$\beta = \arccos((\underline{n}_{surf} \times \underline{n}_1) \cdot (\underline{n}_{surf} \times \underline{n}_2)) = |\theta_1 - \theta_2| \quad (1.20)$$

Pendant, cette étude portant sur les alliages d'aluminium laminés avec des grains en structures colonnaires, les joints de grains étaient considérés perpendiculaires à la surface. En effet, il est difficile d'accéder à la morphologie des joints de grains dans le spécimen. La configuration géométrique des joints de grains n'a donc pas totalement été prise en compte dans cette étude.

Cette approche a été reprise par Proudhon, qui a étudié la propagation de fissures de fatigue dans les alliages d'aluminium [66]. Obtenues à partir de microtomographie, les configurations prises en compte ne correspondaient pas à des cas particuliers mais bien à des cas réels. Il nuance les conclusions de Zhai en combinant le facteur de Schmid avec l'angle de twist α . Une fissure se propagerait sur le système qui possède l'angle α le plus faible et le facteur de Schmid le plus élevé.

Amorçage de fissure dans les PSB

Nous avons vu que l'amorçage des fissures pouvait avoir lieu dans différents sites comme les joints de grains, les joints de macles ou les PSB. Nous développerons ici le phénomène d'amorçage dans les PSB.

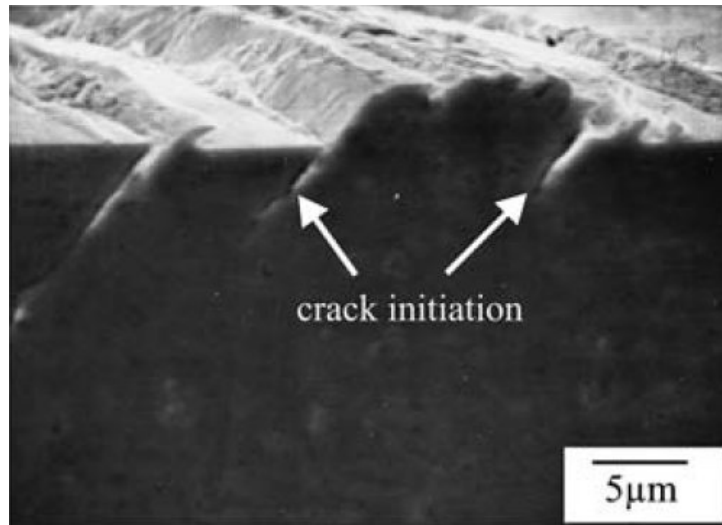


Fig. 1.17 – Amorçage de fissure à la base d’une extrusion de surface dans un monocristal de cuivre après 60 000 cycles, sous un chargement de $\Delta\varepsilon/2 = 0,2\%$ [8].

En 1956, Thompson *et al.* réalisent des essais de fatigue sur des polycristaux de cuivre en procédant à des polissages électrolytiques réguliers [67]. Les observations répétées de PSM à une position identique, même après un retour à une surface polie, montrent que leur origine provient des PSB émergeant à la surface.

Basinski *et al.* ont effectué le même type d’essais cette fois sur des monocristaux de cuivre [68]. Ils ont mesuré, à l’intérieur des PSB, des déformations plastiques 30 fois supérieures à la déformation plastique moyenne, mettant en exergue les effets de localisation de déformation plastique sous chargement de fatigue. De manière analogue aux observations de Thompson, après polissage, les PSM réapparaissent aux mêmes positions. Ce polissage rallonge de manière significative la durée de vie des éprouvettes. Ma et Laird ont observé des amorçages de fissures dans les creux des marches d’intrusion/extrusion (cf. figure 1.17) en surface de monocristaux de cuivre [8]. Avec un chargement de $\Delta\varepsilon/2 = 0,2\%$, ces extrusions peuvent atteindre une hauteur d’environ 1–5 μm après 60 000 cycles.

La formation de ces extrusions en surface a été analysée par Essmann *et al.* à l’aide d’un modèle physique basé sur le mouvement des dislocations [69]. Cette approche met en jeu l’annihilation des dipôles de dislocations au sein des PSB et rend compte qualitativement du mécanisme de déformation plastique en surface du composant.

Les travaux de Polak *et al.* ont porté sur l’analyse du relief de surface résultant d’essais de fatigue sur l’acier 316L [70, 71]. Les extrusions, parallèles aux plans de glissement primaires, croissent rapidement dans les premières centaines de cycles puis, plus lentement, jusqu’à saturation à 20 % de la durée de vie totale. L’analyse combinée par EBSD et AFM a permis de caractériser l’évolution des PSM au cours des essais [72, 73]. Durant les 500 premiers cycles, la hauteur de marche d’extrusion est directement corrélée à la largeur de ces bandes d’extrusion. Ensuite, la largeur se stabilise puis, seule la hauteur augmente, et ce de manière linéaire en fonction du nombre de cycles N . La croissance linéaire de ces extrusions conduit parfois à l’amorçage d’une fissure de type MSC.

Effet de l'environnement

Les résultats d'essais menés par Thompson *et al.* [67] ainsi que Basinski *et al.* [68] ont montré que les polissages à intervalles réguliers rallongent la durée de vie. En effet, le mouvement des dislocations dans les PSB engendre un approvisionnement en oxygène près de la surface. Cette « contamination » peut mener à la décohésion de la PSB avec la matrice et amorcer une fissure. Mendez *et al.* ont renforcé ces observations en procédant à des essais de fatigue sous vide sur des polycristaux de cuivre [74]. La durée de vie sous vide est non seulement beaucoup plus élevée que sous air, mais les fissures ne s'amorcent plus que dans les joints de grains quelle que soit l'amplitude de sollicitation.

Ce type d'expérience a été renouvelé sur le 316L [13, 75], les effets sur la durée de vie ainsi que sur la localisation des sites d'amorçage sont similaires. À une amplitude de déformation plastique $\Delta\varepsilon^p/2 = 2 \times 10^{-3}$, la fraction de fissures initiée dans les PSB est réduite de moitié sous vide. L'oxydation joue donc un rôle important dans l'amorçage de fissure dans les PSB. Une atmosphère plus propice à l'oxydation, telle que dans les circuits de refroidissement contenant de l'eau chargée, est néfaste pour la durée de vie du matériau. Plusieurs études ont été menées sur ce sujet, notamment en effectuant des essais de fatigue dans l'eau ou en reproduisant les conditions d'environnement du milieu primaire [76, 77].

1.3 Modélisation micromécanique

Nous présentons dans cette section une sélection de modèles de plasticité cristalline. D'une part les modèles de monocristaux, utilisés pour les matériaux monocristallins purs ou pour les grains d'un agrégat polycristallin, d'autre part, les modèles polycristallins, sous forme de lois de transition d'échelle entre le monocristal et le matériau polycristallin.

1.3.1 Modèles de monocristaux

Dans la littérature, on trouve deux grandes catégories de modèles visant à retranscrire le comportement des monocristaux :

- les modèles quasi physiques, dont les variables internes sont basées sur les densités de dislocations. Les paramètres matériaux, généralement issus de mesures physiques, apportent un sens physique mais ne permettent pas toujours de couvrir les chargements cycliques ou complexes.
- les modèles phénoménologiques, basés sur des variables internes d'écrouissage. Les paramètres matériaux sont obtenus le plus souvent par identification inverse et présentent une meilleure réponse sous chargements complexes.

L'ensemble de ces modèles repose sur les mêmes bases. Le tenseur de déformation plastique provient de la somme des contributions plastiques sur l'ensemble des systèmes [78], formulé en vitesse :

$$\dot{\tilde{\varepsilon}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \tilde{\mathbf{m}}^s \quad (1.21)$$

où $\dot{\gamma}^s$ est la vitesse de glissement sur le système s et $\tilde{\mathbf{m}}^s$ le tenseur d'orientation du système s . Ce dernier est défini par la normale au plan de glissement $\underline{\mathbf{n}}^s$ et la direction de glissement $\underline{\mathbf{l}}^s$:

$$\tilde{\mathbf{m}}^s = \frac{1}{2} \left((\underline{\mathbf{l}}^s \otimes \underline{\mathbf{n}}^s) + (\underline{\mathbf{n}}^s \otimes \underline{\mathbf{l}}^s) \right) \quad (1.22)$$

La définition de la surface de charge repose sur cission résolue τ^s calculée par l'intermédiaire de la loi de Schmid, à partir du tenseur des contraintes $\underline{\sigma}$, de la normale \underline{n}^s et de la direction de glissement \underline{l}^s sur chaque système s :

$$\tau^s = \underline{\sigma} : \underline{m}^s \quad (1.23)$$

Modèles quasi physiques

Modèle de Tabourot–Tedodosiu [79, 80].

La loi d'écoulement, de type puissance, fait intervenir la cission critique τ_0^s :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^s}{\tau_0^s} \right)^n \quad (1.24)$$

où $\dot{\gamma}_0$ est la vitesse de déformation de référence, constante dépendant de la température et n un paramètre reflétant la sensibilité à la vitesse de déformation.

Pour reproduire le phénomène d'écrouissage, on fait appel à la relation d'Orowan [81] qui lie la cission résolue critique τ_0 à la densité de dislocations ρ :

$$\tau_0 \propto \mu b^2 \sqrt{\rho} \quad (1.25)$$

où μ est le module de cisaillement et b la norme du vecteur de Burgers. Cette formule n'est valable que pour un régime de glissement simple. Une modification a été apportée pour travailler sur une famille de systèmes, et prendre en compte les interactions entre ces derniers par le biais de la matrice \underline{a} :

$$\tau_0^s \propto \mu b \sqrt{\sum_r a_{sr} \rho^r} \quad (1.26)$$

L'évolution de la densité de dislocations sur chaque système est régi par une loi proposée précédemment par Estrin et Mecking [82], qui est composée d'un terme de production de dislocations et d'un terme d'annihilation des dislocations.

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(\frac{\sqrt{\sum_r a_{sr} \rho^r}}{K} - 2y_c \rho^s \right) \quad (1.27)$$

où y_c est la distance moyenne entre les dislocations et K un paramètre matériau.

Ce modèle a donné de bons résultats pour reproduire le comportement des monocristaux de cuivre, mais uniquement en chargement monotone.

Modèle de Déprés [83]

Déprés a repris le modèle de Tabourot–Teodosiu en ajoutant un écrouissage cinématique, ce qui permet son utilisation dans le cas de chargements cycliques [10]. Pour cela, il s'est appuyé sur les résultats issus de ses propres simulations en DDD. Il inclut ici le concept des dislocations géométriquement nécessaires (GND¹²), assurant la compatibilité des déplacements aux joints de grains, introduit en 1970 par Ashby [9]. Elles visent à rétablir les incompatibilités géométriques induites par le glissement près des joints de grains d'un polycristal (cf. figure 1.18). Des dipôles de dislocations aux abords des joints de grains sont alors créés. Cependant, ce type de dislocations peut aussi apparaître dans le cœur du grain à cause des hétérogénéités de déformation plastique.

12. GND : Dislocations géométriquement nécessaires, de l'anglais « Geometrical Necessary Dislocations ».

La loi d'écoulement de ce modèle s'écrit :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left\langle \frac{\tau^s - \tau_d^s}{\tau_i^s} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - \tau_d^s) \quad \text{avec} \quad \langle x \rangle = \begin{cases} x & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (1.28)$$

$$\tau_d^s = \tau_{intra}^s + \tau_{inter}^s \quad (1.29)$$

où τ_i^s représente la force des dipôles de dislocations et τ_d^s la contrainte interne à longue distance. Cette dernière est divisée en contrainte intragranulaire τ_{intra}^s et intergranulaire τ_{inter}^s , qui sont chacune reliées à un type de dislocations :

- τ_{inter}^s est reliée aux dislocations GND assurant la compatibilité des déplacements aux joints de grains par l'intermédiaire de la densité de dislocations ρ_G^s ;
- τ_{intra}^s est reliée aux dislocations récupérables dans un cycle, de densité ρ_g^s . Ces dislocations sont assimilées à des GND situées à l'intérieur du grain pour assurer la compatibilité des déformations plastiques hétérogènes dans le grain ;

Les lois d'évolution des contraintes d'écrouissage sont formulées comme suit :

$$\tau_{inter}^s = \frac{n_{dmax}^{PU}}{k_1} \frac{\mu}{1-\nu} \frac{b^2}{\Delta\gamma^s} \rho_G^s \quad (1.30)$$

$$\tau_{intra}^s = \mu b \lambda^s \rho_g^s \quad (1.31)$$

où k_1 est une constante prenant en compte l'orientation et la forme du grain, n_{dmax}^{PU} est le nombre maximal de dislocations, b la norme du vecteur de Burgers et λ^s la longueur interne du cristal.

La loi d'évolution de la densité de dislocations totale est définie par trois termes de production et un terme d'annihilation r_a^s . Chacun de ces termes est détaillé dans [10] :

$$\rho^s = \rho_G^s + \rho_g^s + \rho_S^s \quad (1.32)$$

$$\dot{\rho}^s = \dot{\rho}_G^s + \dot{\rho}_g^s + \dot{\rho}_S^s - r_a^s \quad (1.33)$$

où ρ_S^s est la densité de dislocations statistiquement stockées et r_a^s est le terme d'annihilation des dislocations.

La force de ce modèle est la bonne compatibilité des résultats en chargement cyclique avec les simulations numériques de DDD, tout en conservant une approche physique.

Modèle CrystalECP [84]

La loi d'écoulement est de type Peirce *et al.* [85], exprimée plus loin (équations (1.36) et (1.37)).

La loi d'évolution de la densité de dislocations ρ^s est définie par :

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(\frac{\sum_{r \neq s} \rho^r}{K} + \frac{1}{D} - g_c \rho^s \right) \quad (1.34)$$

où b est la norme du vecteur de Burgers, D est la taille de grain moyenne, K est un paramètre matériau, g_c est proportionnelle à la distance d'annihilation des dislocations.

La cission résolue critique τ_c^s est reliée à la densité de dislocations par une relation de type Orowan :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_r a_s r \rho^r} \quad (1.35)$$

Ce modèle est lui aussi capable de bonnes prédictions à la fois en monotone et en cyclique. Schwartz *et al.* [84] l'ont enrichi en introduisant les GND pour rendre mieux compte des effets de taille de grains.

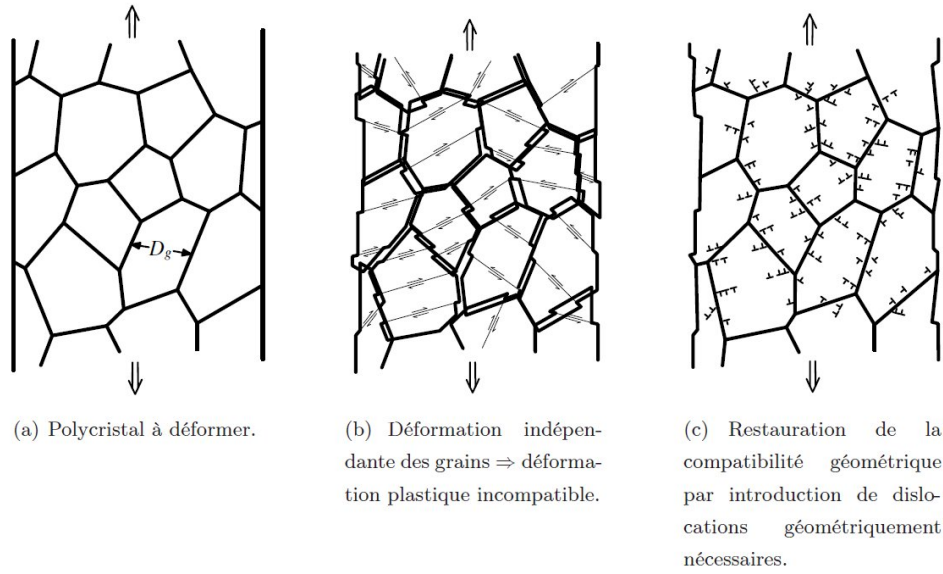


Fig. 1.18 – Description schématique du concept des dislocations géométriquement nécessaires dans un polycristal, selon Ashby [9], illustré par Déprés [10].

Modèles phénoménologiques

Modèle de Peirce [85]

Il s'agit d'un modèle monocristallin dont l'écroutissage est calculé à partir des cissions critiques :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \left\langle \frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right\rangle^n \quad (1.36)$$

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_r h_{sr} |\dot{\gamma}^s| \quad (1.37)$$

$$h_{ss} = h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_{sat} - \tau_0} \right| \quad (1.38)$$

$$\operatorname{sech} = \frac{1}{\cosh} \quad (1.39)$$

$$h_{sr} = qh(\gamma) \quad \text{pour } s \neq r \quad (1.40)$$

où τ^s est la cission résolue, $\dot{\gamma}_0^s$ la vitesse de déformation de référence, τ_c^s le terme d'écroutissage, n l'exposant de viscosité, q la capacité d'écroutissage, h_0 le module d'écroutissage initial, τ_{sat} une cission de saturation, τ_0 la cission critique et \underline{h} la matrice d'interaction rendant compte de l'auto-écroutissage et de l'écroutissage latent entre les différents systèmes.

Ce modèle ne comporte pas d'écroutissage cinématique, son usage est donc restreint aux problèmes à chargements monotones.

Modèle de Méric-Cailletaud [86]

L'expression de la vitesse de glissement plastique de chaque système $\dot{\gamma}^s$ fait intervenir une loi d'écoulement viscoplastique de type Norton avec une contrainte interne. Elle comporte un terme d'écroutissage isotrope r^s et un terme d'écroutissage cinématique x^s . Ce dernier terme rend compte des effets des impuretés rencontrées au sein même du monocristal, *i.e.*

du grain.

$$\dot{\gamma}^s = \text{sign}(\tau^s - x^s) \dot{v}^s \quad (1.41)$$

$$\dot{v}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - \tau_0 - r^s}{K} \right\rangle^n \quad \text{avec} \quad \langle x \rangle = \begin{cases} x & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (1.42)$$

où τ_0 est la cission résolue critique initiale, \dot{v}^s est la vitesse de glissement sur le système s , K et n sont les coefficients matériau de la loi de Norton.

Les lois d'évolution des écrouissages sont de type non linéaire.

$$x^s = c\alpha^s \quad (1.43)$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\alpha^s \dot{v}^s \quad (1.44)$$

$$r^s = bQ \sum_r h_{sr} \rho^r \quad (1.45)$$

$$\dot{\rho}^s = (1 - b\rho^s) \dot{v}^s \quad (1.46)$$

où c/d et d sont la capacité et la vitesse d'écrouissage cinématique, Q et b la capacité et la vitesse d'écrouissage isotrope et \underline{h} les composantes de la matrice d'interaction entre les systèmes de glissement.

Les équations (1.45) et (1.46) peuvent se rassembler en une seule :

$$r^s = Q \sum_s h_{sr} \left(1 - e^{-bv^s}\right) \quad (1.47)$$

La force de ce modèle réside dans son bon rapport qualité/coût de calcul. Il se comporte aussi très bien face à des chargements cycliques et/ou complexes, lorsqu'il est associé aux modèles à champs moyen dans le cadre de modélisations multiéchelles.

1.3.2 Modèles de polycristaux

Les premiers modèles établis pour l'étude des polycristaux sont en réalité des modèles d'homogénéisation ou « modèles à champs moyens ». Ces derniers se basent sur une transition entre les échelles macroscopique et mésoscopique. Dans un calcul d'agrégat par Éléments Finis, un grain est caractérisé uniquement par son orientation cristalline si l'on met de côté les caractéristiques géométriques. On peut donc réunir tous les grains de même orientation (ou d'orientations très proches) en une seule phase i , à laquelle est associée une fraction volumique f_i . Pour cela, il convient de définir à l'échelle macroscopique, la déformation \underline{E} et la contrainte $\underline{\Sigma}$. Ces tenseurs sont obtenus en effectuant une moyenne spatiale des tenseurs locaux respectifs $\underline{\varepsilon}$ et $\underline{\sigma}$.

$$\underline{\Sigma} = \sum_i f_i \underline{\sigma}^i \quad (1.48)$$

$$\underline{E} = \sum_i f_i \underline{\varepsilon}^i \quad (1.49)$$

Un des premiers modèles établis pour les polycristaux est celui de Taylor [87, 88] qui considère le polycristal comme un matériau parfaitement plastique. L'élasticité est négligée. La déformation plastique à l'intérieur des grains est supposée uniforme et égale à la déformation

plastique macroscopique. Les interactions entre les grains sont négligées. Aucune variable cinématique n'est incluse, la matrice d'interaction $\underline{\underline{h}}$ est considérée isotrope ($h_{ij} = 1 \forall i, j$) et les vitesses de glissements $\dot{\gamma}^s$ évoluent linéairement. Le choix des systèmes actifs se fait selon une minimisation de la somme des vitesses de glissement des systèmes actifs dans chaque grain. Lin [89] a étendu ce modèle en incluant la déformation élastique. Cette fois, c'est la déformation totale (élastique + plastique) des grains qui est uniforme et égale à la déformation macroscopique.

Il s'est avéré que ce type de modèle (Taylor–Lin) peut rendre compte de certains des phénomènes propres au comportement sous chargement cyclique tels que l'effet Bauschinger, le glissement simple aux faibles amplitudes [90], le durcissement ou l'adoucissement cyclique voire même l'effet mémoire [91]. Une modélisation polycristalline est donc pertinente pour une étude multiéchelle.

Dans le cas de l'élasticité isotrope, le modèle de Lin s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{\varepsilon}}) \quad (1.50)$$

Le terme de contrainte qu'il introduit est connu pour être trop élevé. C'est le cas également pour le modèle Kröner [92]. Basé sur une approche statistique, ce modèle tente une approche autocohérente en résolvant le problème auxiliaire qui assimile chaque grain à une inclusion ellipsoïdale entourée d'une matrice infinie, dont les propriétés sont celles d'un milieu homogène équivalent (Eshelby [93]). Il considère la déformation plastique comme une déformation libre (« eigenstrain ») si bien que son évolution n'est pas liée à l'incrément de contrainte. Dans le cas de l'élasticité homogène, la différence entre déformation plastique macroscopique $\underline{\underline{E}}^p$ et locale $\underline{\underline{\varepsilon}}^{p,i}$ est la source de contraintes interphases (intergranulaires dans les polycristaux). Pour chaque phase i , la contrainte locale s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{S}}) : (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^{p,i}) \quad (1.51)$$

où $\underline{\underline{S}}$ est le tenseur d'interaction d'Eshelby qui rend compte de la forme des inclusions, $\underline{\underline{C}}$ le tenseur d'élasticité et $\underline{\underline{I}}$ le tenseur identité d'ordre 4. Le modèle apporte donc une accommodation élastique, caractérisée par le tenseur $\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{S}}) :$

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{L}} : (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^{p,i}) \quad (1.52)$$

Ce modèle n'est valable que dans les tous premiers instants de l'écoulement plastique.

Dans le cas d'une inclusion sphérique, l'équation (1.51) se simplifie :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^{p,i}) \quad \text{et} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \quad (1.53)$$

où μ est le module de cisaillement élastique isotrope et ν le coefficient de Poisson.

C'est Hill qui a construit le premier modèle réellement satisfaisant d'accommodation élastoplastique [94]. Il a considéré la règle d'accommodation sous forme incrémentale et introduit localement l'opérateur élastoplastique tangent. À la place de l'équation (1.52) de Kröner, il obtient :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{L}}^* : (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^{p,i}) \quad (1.54)$$

$$\underline{\underline{L}}^* = \underline{\underline{L}}^H : (\underline{\underline{S}}^{-1} - \underline{\underline{I}}) \quad (1.55)$$

$$\underline{\underline{L}}^H = \left\langle \underline{\underline{L}} : (\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{L}}^*)^{-1} : (\underline{\underline{L}}^H + \underline{\underline{L}}^*) \right\rangle \quad (1.56)$$

où $\underline{\underline{L}}^*$ est le tenseur d'accommodation élastoplastique de Hill et $\underline{\underline{L}}^H$ le tenseur uniforme des modules instantanés. Les contraintes résiduelles sont moins élevées que dans le cas précédent, en raison de l'évolution du tenseur $\underline{\underline{L}}^*$ avec la déformation plastique, qui tient compte de la diminution du module plastique.

Le modèle de Hill a été intégré par Berveiller et Zaoui [95] dans le cas simple d'une inclusion sphérique et de l'élasticité homogène isotrope, pour le cas de chargements monotones radiaux. Le modèle s'exprime de façon explicite en fonction du « module plastique sécant » $H_S = \Sigma_{mises}/E_{mises}^p$, avec E_{mises}^p et Σ_{mises} les valeurs équivalentes au sens de von Mises des tenseurs macroscopiques de déformation plastique $\underline{\underline{E}}^p$ et de contraintes $\underline{\underline{\Sigma}}$:

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)\alpha(\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}^{p,i}) \quad (1.57)$$

$$\beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \quad (1.58)$$

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3\mu}{H_S} \quad (1.59)$$

Ce modèle donne de bons résultats en traction monotone, sans avoir à identifier de paramètre propre au modèle. Barbe *et al.* ont également montré qu'une bonne correspondance était obtenue entre la courbe de traction macroscopique issue du modèle BZ et celle issue d'un calcul EF d'agrégat polycristallin [96]. Il est donc souvent utilisé pour donner une première identification des paramètres d'une loi monocristalline à partir d'une courbe de traction.

Le modèle de « la règle en β » est le fruit de plusieurs travaux publiés, à partir de 1987 par Cailletaud [97], puis Pilvin [98, 99] et enfin conjointement [100, 101]. Partant d'une approche phénoménologique, une variable d'accommodation élastoplastique $\underline{\underline{\beta}}^i$ est introduite pour limiter les contraintes intergranulaires au cours de la déformation. Au lieu de faire évoluer le tenseur comme dans le modèle de Hill, on choisit ici d'introduire une variable interphases (ou intergranulaire dans les polycristaux), dont l'évolution obéit à une règle d'Armstrong–Frederick, ce qui limite le niveau de contrainte interne.

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}^i) \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{B}} = \sum_i f_i \underline{\underline{\beta}}^i \quad (1.60)$$

L'équation (1.60) peut être écrite différemment en utilisant un autre paramètre C , dont la valeur est proche de μ :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + C(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}^i) \quad (1.61)$$

La loi d'évolution de la variable d'accommodation $\underline{\underline{\beta}}^i$ a été définie différemment suivant les publications.

Il est d'abord proposé de faire intervenir dans chaque phase i , les vitesses de glissement de chaque système $\dot{\nu}^{s,i}$ [97] :

$$\dot{\underline{\underline{\beta}}}^i = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{p,i} - D \underline{\underline{\beta}}^i \sum_s \dot{\nu}^{s,i} \quad (1.62)$$

où D est un paramètre matériau rendant compte de la microstructure.

Il est aussi possible d'utiliser la valeur équivalente de von Mises de la vitesse de déformation plastique de chaque phase $\underline{\underline{\varepsilon}}_{eq}^{p,i}$ [100, 101] :

$$\dot{\underline{\underline{\beta}}}^i = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{p,i} - D \underline{\underline{\beta}}^i \underline{\underline{\varepsilon}}_{eq}^{p,i} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{\varepsilon}}_{eq}^{p,i} = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{p,i} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{p,i}} \quad (1.63)$$

On peut aussi associer un terme linéaire et non linéaire avec un nouveau coefficient δ [99] :

$$\dot{\tilde{\beta}}^i = \dot{\tilde{\xi}}^{p,i} - D\left(\tilde{\beta}^i - \delta\tilde{\xi}^{p,i}\right)\dot{\tilde{\xi}}_{eq}^{p,i} \quad (1.64)$$

L'avantage de ce modèle réside dans sa capacité à pouvoir reproduire fidèlement la réponse macroscopique des métaux sous une grande diversité de chargements (cyclique, biaxial, torsion...) comme il a été montré dans la littérature [102, 103]. C'est pourquoi on se propose de l'utiliser dans les procédures d'identification. Comme dans tous les modèles à champs, on ne prend pas en compte les effets de voisinage. Chaque phase est définie uniquement par son orientation cristalline et sa fraction volumique. La disposition spatiale des grains est négligée. Cet aspect sera retranscrit dans notre travail par l'intermédiaire des calculs EF d'agrégats.

Plusieurs travaux ont repris le modèle en β pour des applications plus précises. Pilvin a enrichi son modèle afin de prendre en compte l'effet de surface dans les polycristaux [104]. Pour cela, il introduit une nouvelle variable η , rapport de la profondeur du grain sur le diamètre de grain moyen.

$$\tilde{\sigma}^i = \tilde{\Sigma} + C(\eta)(\tilde{\mathcal{B}} - \tilde{\beta}^i) \quad (1.65)$$

$$\dot{\tilde{\beta}}^i = \dot{\tilde{\xi}}^{p,i} - D(\eta)\left(\tilde{\beta}^i - \delta(\eta)\tilde{\xi}^{p,i}\right)\dot{\tilde{\xi}}_{eq}^{p,i} \quad (1.66)$$

Les paramètres C , D et δ deviennent directement fonctions de η , toutes de la forme :

$$F(\eta) = F_0h(\eta) + F_\infty(1 - h(\eta)) \quad (1.67)$$

avec $h(0) = 1$ et $h(\infty) = 0$

Sai *et al.* ont repris le modèle en β pour l'appliquer aux matériaux à solidification dirigée, formés de grains colonnaires [105]. Les coefficients C et D sont transformés en paramètres tensoriels afin de retranscrire l'orientation géométrique des grains, considérés comme des inclusions cylindriques. Par un principe similaire, Herbland a appliqué ce modèle en fatigue pour permettre un calcul accéléré des zones de plasticité en fond d'entaille [106].

1.3.3 Dynamique Discrète des Dislocations

La modélisation de la Dynamique Discrète des Dislocations a été mise en place en France à la fin des années 80, tout d'abord pour des problèmes 2D en chargement monotone. Il a fallu attendre la fin des années 90 pour pouvoir effectuer des simulations sous chargements cycliques. La plupart des travaux de DDD ont abouti à une meilleure connaissance des interactions entre systèmes de glissement [107–109] et à l'enrichissement des modèles de plasticité cristalline [10, 83, 110].

Déprés *et al.* ont utilisé des simulations numériques de DDD en 3D pour reproduire les marches d'extrusions apparaissant en fatigue à la surface des composants [11]. La combinaison du glissement primaire et du glissement dévié conduit à une forte concentration de la déformation plastique irréversible au sein des PSB (cf. figure 1.19). La hauteur des marches simulées est proportionnelle à la racine carrée du nombre de cycles N sous les chargements à rapport de charge $R = -1$. Plus la déformation moyenne augmente, plus l'évolution des marches devient linéaire [111]. L'apparence de ces extrusions est en accord avec les observations des structures de dislocations trouvées dans la littérature. Ces marches peuvent créer à une décohésion à leur base et conduire à l'amorçage de fissure comme l'ont montré Ma *et al.* [8].

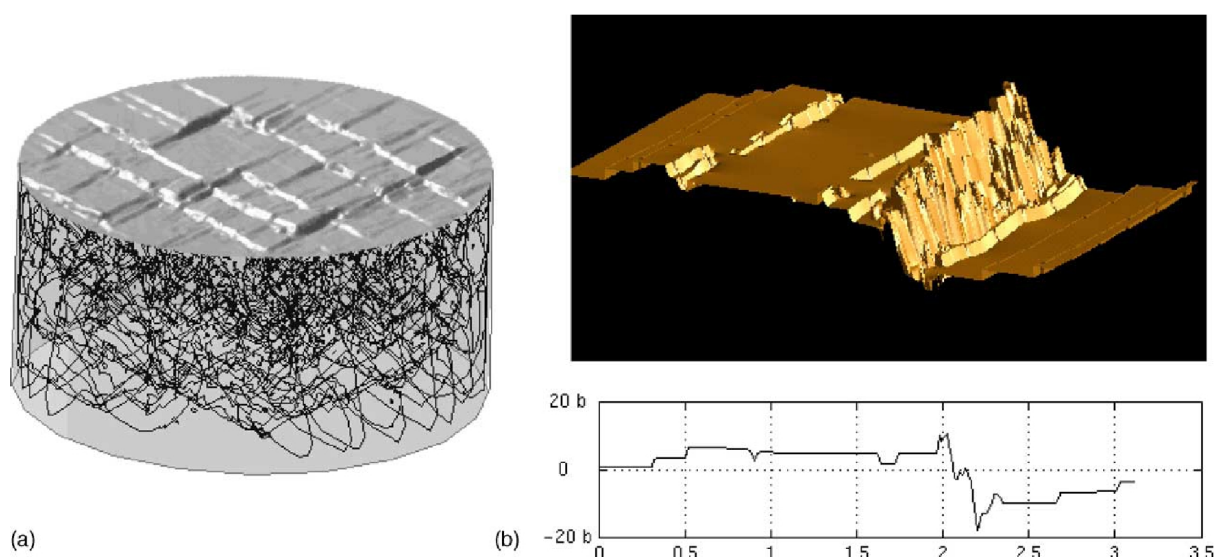


Fig. 1.19 – Relief de surface sur un monocristal induit par un chargement de fatigue, calculé par DDD (a) en global (b) en local [11].

1.3.4 Calculs d'agrégats

Récemment, grâce à l'augmentation de la puissance des ordinateurs, il est devenu possible de modéliser explicitement le rôle de la microstructure dans les calculs EF de fatigue. Barbe *et al.* [96, 112] ont réussi par des calculs d'agrégats polycristallins à retranscrire les observations réalisées par Forrest et Tate [37] concernant la concentration du glissement en surface. En effet, ces calculs ont révélé une plus grande dispersion des résultats dans les grains en surface, d'où la possibilité d'atteindre des valeurs maximales plus élevées que dans le reste de l'agrégat et donc une chance accrue d'observer un amorçage de microfissure en surface.

En partant des 12 systèmes de glissement octaédriques valables pour un réseau cristallin de type CFC, Dafalias [113] propose une simplification du modèle géométrique de plasticité cristalline pour son application en deux dimensions. La projection des systèmes de glissements définis en figure 1.12b et tableau 1.1 sur le plan $(1\bar{1}0)$ conduit à une symétrie. Les systèmes actifs peuvent se réduire à deux systèmes effectifs projetés sur le plan $(1\bar{1}0)$ qui correspond au plan d'étude.

Plusieurs travaux de modélisation sont inspirés de cette simplification pour mener des études en 2D sur l'évolution des microfissures à l'échelle du grain. Tout d'abord, Lin *et al.* [114] ont dressé une étude en appliquant cette simplification sur un modèle micromécanique et ont utilisé ce dernier pour modéliser des bicristaux en surface. La solution du champ de contrainte est obtenue par la solution analytique proposée par Tung *et al.* [115]. Par cette approche, ils ont pu montrer qu'une désorientation forte diminue le taux de propagation d'une fissure transgranulaire et peut conduire à la formation de fissures intergranulaires.

Certains travaux portant sur des simulations numériques ont permis d'apporter nombre d'informations sur les déplacements en pointe de fissure. Ces calculs ont tout d'abord été effectués sur des structures de type monocristal, bicristal [116, 117] et sur des polycristaux [118, 119].

Bennett *et al.* se sont intéressés aux paramètres locaux pouvant déterminer l'amorçage de MSC dans des polycristaux sous différents chargements : traction-compression, cisaillement, traction-compression avec contrainte moyenne, et traction-compression combinées avec du cisaillement. Une modélisation par éléments finis basée sur une loi monocristalline de type Méric-

Cailletaud [86] comprenant deux systèmes de glissement planaires a été utilisée. En partant de critères de fatigue tels que ceux de Dang Van [120] ou Fatemi–Socie [121] mais formulés à l’aide de variables locales, trois paramètres locaux d’amorçage ont été définis. Les résultats des simulations numériques mettent en exergue une forte variabilité de ces paramètres suivant les jeux d’orientations attribués aux grains.

Bennett *et al.* ont aussi examiné le comportement d’une fissure initiée dans un maillage d’agrégat sous chargement de traction et de cisaillement [122]. La déviation du trajet de fissuration a été étudiée en se basant sur différentes configurations d’orientations des grains en surface de manière à favoriser les glissements primaire ou secondaire dans le grain adjacent au grain fissuré. L’évolution des déplacements calculés en pointe de fissure, en ouverture (CTOD¹³) et en cisaillement (CTSD¹⁴) reflète un effet de surface important dans les 2-3 premiers grains ainsi qu’une forte influence de la désorientation entre les grains. Une nette différence avec les résultats de la MLR a été mise en évidence. Une autre de leurs conclusions souligne la nécessité de modéliser un agrégat dans son ensemble plutôt qu’un bicristal qui élimine tous les effets de voisinage. Il s’agira donc de réaliser des calculs sur des agrégats de l’ordre d’une centaine de grains et d’étudier la réponse locale d’un groupe de grains suivant le voisinage.

Simonovski et Cizelj ont mené plusieurs études sur l’acier 316L en se focalisant sur les déplacements en pointe d’une fissure de type MSC maillée explicitement dans le premier grain en surface. Leur modèle de plasticité cristalline est basé sur le modèle présenté par Peirce *et al.* [85], rappelé par les équations (1.36) à (1.40). Les valeurs du CTOD varient d’un facteur 4,4 suivant l’orientation des grains entourant le grain contenant la pointe de fissure [123]. Cet effet tend à s’estomper au fur et à mesure que la fissure avance et franchit les joints de grains. Pour chaque orientation cristallographique, les plans de glissement primaire et secondaire peuvent diriger la propagation de la fissure depuis le joint de grains [124]. Cette propagation est favorisée dans les grains mous, à haut facteur de Schmid. Cependant, l’intégralité de ce travail est effectuée sous des conditions de chargements monotones. Le modèle de comportement utilisé ne permet pas de reproduire le comportement cyclique de l’acier. Ils ont également montré que la taille du grain fissuré influait fortement sur la valeur du CTOD [125].

D’autres travaux ont porté sur le Zirconium et des alliages de titane. Sur des agrégats 2D issus d’acquisitions EBSD, Dunne *et al.* retrouvent les bandes de localisations de glissement observées expérimentalement en surface [126]. Venkatramani *et al.* ainsi que Dunne *et al.* ajoutent les effets de taille de grains dans leurs modélisations, soit en intégrant la loi de Hall–Petch au modèle [127], soit en incorporant les GND [128]. Héripré *et al.* [12] ont procédé à des calculs d’agrégats 2D extrudés, générés à partir d’acquisitions EBSD réalisées sur la surface des éprouvettes sollicitées en traction. Les conditions aux limites expérimentales ont été déterminées par corrélation d’images et implantées dans le calcul EF. Cette méthodologie, présentée en figure 1.20, apporte une modélisation plus fidèle du problème aux limites. Cependant, l’identification par corrélation d’image restreint l’information à la surface, l’influence de la microstructure dans le volume n’est pas retranscrite.

Récemment, les études se tournent vers des modélisations tridimensionnelles qui se prêtent plus à la représentation des mécanismes de plasticité dans les polycristaux. Les maillages peuvent être réglés, les éléments formant une grille, et les orientations affectées à chaque point de Gauss [112]. Cette méthode s’applique facilement pour reproduire un agrégat 3D à partir de coupes EBSD obtenues par polissages successifs [18]. Il est aussi possible de procéder par maillage libre, c’est-à-dire de mailler la microstructure en suivant les joints de grains et de

13. CTOD : Déplacement d’ouverture en pointe de fissure, de l’anglais « Crack Tip Opening Displacement ».

14. CTSD : Déplacement de cisaillement en pointe de fissure, de l’anglais « Crack Tip Sliding Displacement ».

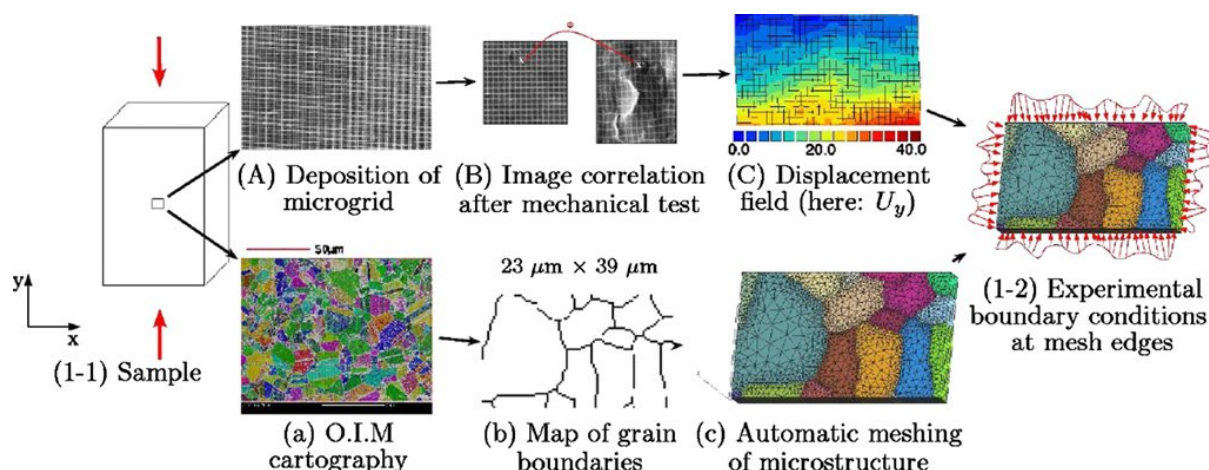


Fig. 1.20 – Méthodologie mise en place pour effectuer des calculs EF sur une microstructure réelle accompagnée des conditions aux limites expérimentales, d'après Hériprié *et al.* [12].

mailler librement l'intérieur des grains [20, 127, 129]. L'orientation des grains est attribuée élément par élément. Cette méthode est appropriée dès lors que l'on génère une microstructure synthétique par décomposition de Voronoï¹⁵. L'inconvénient est de n'obtenir que des grains de forme convexe, ce qui n'est pas forcément le cas de la microstructure du matériau étudié. L'avantage réside dans une meilleure discrétisation des joints de grains en comparaison avec les joints de grains en « escalier » caractéristiques des maillages réglés. Cela n'a pas d'impact significatif sur les résultats si on s'intéresse aux valeurs moyennes par grain, mais les maillages réglés ont l'inconvénient de surévaluer les contraintes locales aux joints de grains [130].

1.4 Aciers inoxydables austénitiques

Les aciers inoxydables austénitiques possèdent de bonnes propriétés mécaniques (forte capacité d'érouissage, ductilité) et ce jusqu'à plus de 600 °C. En outre, ils résistent bien à la corrosion, ce qui justifie leur utilisation dans le domaine de l'énergie nucléaire. La nuance de base de ces aciers contient 17–18 % de chrome, 10–12 % de nickel et 0,01–0,03 % de carbone en moyenne. Nous présentons dans cette section quelques propriétés de ces aciers (en nous basant sur certaines coulées) 304L/INTERPHOL [18], 316L/SPH [13] et 316LN/AFGRAP [131].

L'acier inoxydable austénitique 316L a été développé particulièrement pour l'utilisation en milieu corrosif, comme les circuits de refroidissement des centrales nucléaires. En effet, l'ajout de molybdène augmente les propriétés mécaniques et la résistance à la corrosion par rapport au 304L. Il fait partie des aciers austénitiques de type chrome–nickel–molybdène, sa composition est spécifiée dans le tableau 1.4. Il est constitué en majorité d'une phase austénitique. Quelques bandes de ferrite sont aussi présentes dans les grains mais en densité faible, selon les coulées on observe différentes teneurs :

- 304L : moins de 5 %
- 316L : moins de 1 %
- 316LN : moins de 0,01 % en surface et de 0,1 % à 2 % à cœur (en bandes étirées dans les directions T et L)

15. Décomposition de Voronoï : également appelée partition de Voronoï, diagramme de Voronoï ou pavage de Voronoï. Cela correspond au dual de la triangulation de Delaunay.

	Cr	Ni	C	N	Mn	Si	S	P	Mo	Cu	Co
304L	18,3	10,4	0,014	0,07	1,62	0,34	0,005	0,015	–	0,03	–
316L	17,45	11,9	0,022	0,069	1,69	0,31	0,002	0,023	2,25	0,11	0,19
316LN	17,5	12,5	0,027	0,072	1,7	0,37	0,0002	0,024	2,47	0,01	0,04

Tab. 1.4 – Composition chimique (% massique) de plusieurs aciers austénitiques.

Direction	Proportion [%]			
	{111}	{100}	{110}	autres
Laminage (L)	23	16	6	55
Travers Long (TL)	17,5	20	14	48,5
Travers cours (TC)	6	15	28	51

Tab. 1.5 – Texture l'acier 316L suivant la direction de mesure [13].

1.4.1 Microstructure

Selon les nuances d'acier et les coulées, les caractéristiques microstructurales varient. Tout d'abord, en termes de taille de grain, la valeur moyenne est d'environ 50 μm , avec certaines nuances en fonction des alliages :

- 304L : 50 μm avec un écart type de 25 μm
- 316L : 50 μm (30 μm en tenant compte des grains maclés)
- 316LN : 100 μm (50 μm en tenant compte des grains maclés), avec un écart type de l'ordre de 30 μm

Les grains sont généralement équiaxes, mais présentent une légère élongation (d'environ 20 %) dans le sens du laminage [132].

La coulée d'acier 316L SPH étudiée par M. Mineur [13] présente une texture cristalline dont les principales caractéristiques sont répertoriées dans le tableau 1.5. Ce tableau donne le pourcentage de grains correspondant à différentes familles d'orientations suivant les directions de caractérisation : sens de laminage (L), travers long (TL) et travers court (TC). On regroupe dans une famille de direction nominale $\{hkl\}$, les grains dont la désorientation avec cette direction nominale $\{hkl\}$ est inférieure à 15°. Le procédé de laminage entraîne une répartition différente de la proportion des grains $\{111\}$ et $\{110\}$ entre les directions L et TC. Ceci représente un paramètre intéressant à prendre en compte pour une modélisation fine de la microstructure. Cette observation n'est cependant pas identique pour l'acier 316LN, qui est très peu texturé. Dans le cas d'attribution aléatoire d'orientation cristallographique aux grains, il serait également intéressant de comparer les résultats avec ou sans texture cristalline.

Les aciers de type 316L présentent aussi une forte proportion de macles. En effet, environ 50 % des grains sont maclés pour la coulée étudiée par Mineur [13], 40 % dans le cas de la coulée de 316LN du projet AFGRAP [131]. Cette particularité peut avoir un effet non négligeable sur la durée de vie du matériau car les joints de macles représentent des sites de glissements faciles. L'amorçage de fissures de fatigue y est plus propice, surtout en fatigue HCF [13].

La distribution de désorientation entre les grains diffère nettement de celle d'un matériau parfaitement non texturé calculée par Mackenzie (cf. figure 1.21). La forte concentration des désorientations vers 60° vient des macles qui, comme précisé précédemment, sont massivement présentes dans ce matériau. En excluant les macles, la texture de désorientation se rapproche beaucoup plus d'un matériau non texturé.

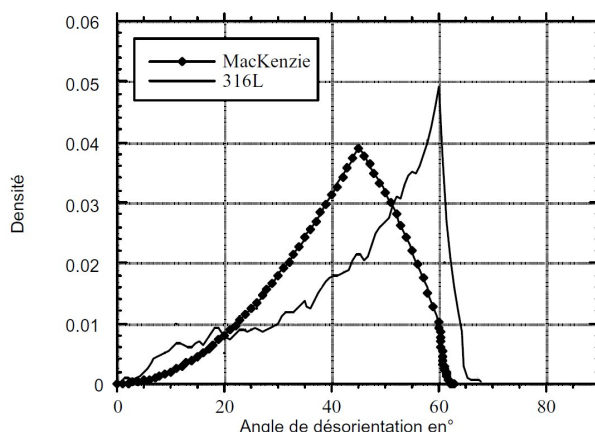


Fig. 1.21 – Distribution des désorientations pour le 316L et pour un matériau non texturé [13].

1.4.2 Comportement macroscopique et effet mémoire

Dans les années 80, de multiples études portant sur le comportement de l'acier 316L sous chargement cyclique et complexe ont été menées [133, 134]. Cet acier a la particularité de présenter un durcissement cyclique et un effet mémoire très importants (cf. figure 1.23c). En effet, la faible énergie de fautes d'empilement (SFE¹⁶) du 316L limite l'apparition du glissement dévié et confère à cet acier un effet mémoire caractéristique.

Pour les matériaux à haute SFE comme l'aluminium, sous de fortes déformations plastiques, le glissement dévié peut survenir et des structures de dislocations de type cellule ou labyrinthe apparaissent (cf. figure 1.22). C'est le cas lors d'un pré-écrouissage qui s'accompagne d'un durcissement du matériau. Si l'on soumet ensuite le matériau à un chargement cyclique, ces cellules se réorganisent puis s'effacent, ce qui occasionne un adoucissement. Le matériau finit par retrouver le même état de durcissement que s'il n'avait pas été pré-écroui (cf. figure 1.23a). Il y a donc absence d'effet mémoire.

Dans le cas des matériaux à faible SFE, le pré-écrouissage forme essentiellement des arrangements planaires et peu de PSB, veines et cellules. Ces structures planaires sont difficiles à réorganiser sous chargement cyclique avec peu de glissement dévié, l'adoucissement résultant est donc limité. Le matériau conserve une histoire du chargement et reste dans un état de durcissement supérieur au cas non écroui (cf. figure 1.23b).

Cailletaud *et al.* [135] ont procédé à des essais à chargements cycliques multiaxiaux complexes (chargement non proportionnels, hors phase, à différents niveaux de déformation successifs...) sur l'acier 316L. Le durcissement du matériau est en partie évanescant. Ils ont mis en évidence une forte augmentation du durcissement et de l'effet mémoire dès lors que le chargement devient non proportionnel. Nouailhas *et al.* [17] ont proposé un modèle de comportement macroscopique capable de rendre compte de l'effet mémoire et l'ont confronté à des résultats d'essais sur l'acier 316L à différents états d'écrouissage (trempé, forgé, laminé...). En se basant sur un modèle de type Chaboche et en instaurant une nouvelle variable interne qui conserve l'histoire du matériau, un effet mémoire est simulé. Une partie de cet effet mémoire, correspondant au maclage, est irréversible. Avec cette modification, on peut reproduire l'évanescence partielle du durcissement résultant de trajets de chargements complexes.

Doquet a effectué des essais cycliques sur l'acier austénitique 304L en présence de différents types de pré-écrouissage (monotone, cyclique, contrainte ou déformation moyenne...) [136].

16. SFE : Énergie de fautes d'empilement de l'anglais « Stacking Fault Energy ».

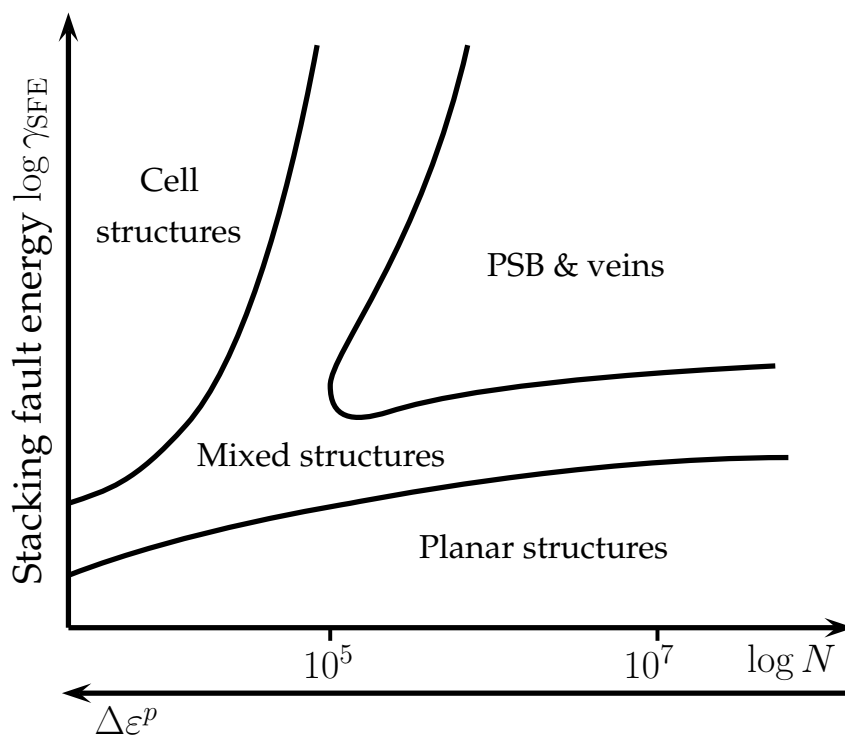


Fig. 1.22 – Structures de dislocations rencontrées suivant l'énergie de fautes d'empilement et le niveau de sollicitation [14].

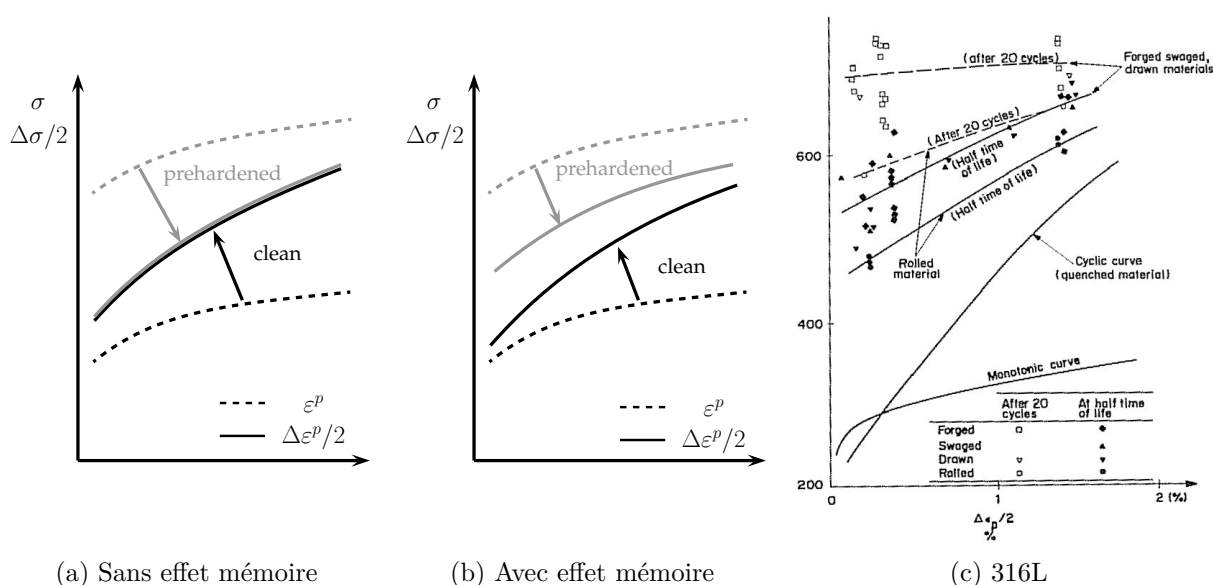


Fig. 1.23 – Courbes d'érouissage monotones (en pointillés) et cycliques (en continu) pour un matériau (a) sans effet mémoire et (b) avec effet mémoire. Les courbes noires correspondent aux essais sans pré-érouissage et les grises avec pré-érouissage [15, 16]. (c) Effet de différents érouissages sur l'acier 316L, d'après Nouailhas *et al.* [17].

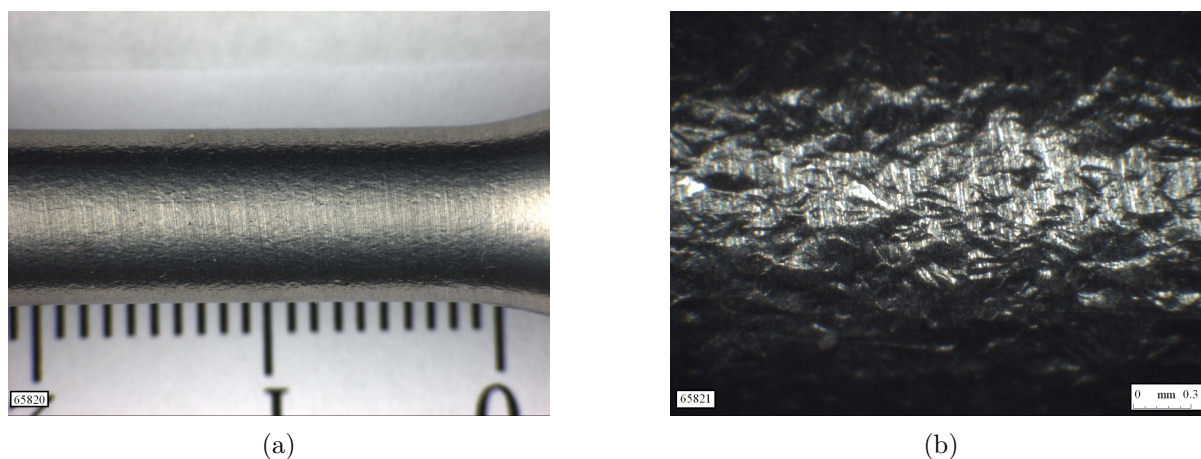


Fig. 1.24 – État de surface de l'éprouvette axisymétrique après pré-écrouissage à 14 % : (a) vue globale de l'éprouvette, (b) zoom mettant en évidence l'état de surface induit par le pré-écrouissage.

Ceux-ci ont révélé une diminution de la durée de vie en fatigue dépendant du type de pré-écrouissage et du niveau de contrainte moyenne. Le Pécheur a aussi étudié expérimentalement l'effet d'un pré-écrouissage sur les résultats en fatigue pour l'acier 304L (coulée CLI) [18]. L'application d'un pré-écrouissage monotone produit un état de surface rugueux qui rend plus vulnérables les éprouvettes. La figure 1.24 rend compte de cet état de surface induit par un pré-écrouissage à 14 % de déformation. Afin de s'astreindre de cette rugosité de surface induite, un polissage est appliqué sur l'éprouvette. Pour cela, une épaisseur de 100 μm est retirée de la surface de l'éprouvette. Des essais cycliques à différentes amplitudes de déformation totale ont été effectués sur trois types d'éprouvettes :

- vierges
- pré-écrouies à 14 % de déformation monotone
- pré-écrouies à 14 % de déformation monotone puis repolies

Les nombres de cycles à rupture en fonction de l'amplitude de déformation totale imposée pour les trois types d'éprouvette sont reportés en figure 1.25. Le pré-écrouissage de 14 % a un effet néfaste à toutes les amplitudes en termes de durée de vie. Cet effet est rattrapé par le polissage mais cela est significatif uniquement à faible amplitude de sollicitation. On peut noter que ces premiers résultats confortent l'idée que l'initiation des MSC au niveau des extrusions est due aux PSB en surface des composants. Néanmoins, ces résultats nécessitent d'être complétés par des essais complémentaires. En effet, la dispersion des résultats rencontrée en fatigue HCF suggère de baser les conclusions sur un échantillon de résultats représentatifs.

1.4.3 État de surface

Un facteur très important dans la durée de vie des pièces mécaniques est l'état de surface, c'est encore plus prononcé en condition HCF. Les singularités géométriques émanant du relief, les contraintes résiduelles, l'état d'écrouissage et même la recristallisation des grains induite par l'usinage entrent en jeu. De manière générale, durcir le matériau en surface permet de limiter l'émergence des PSB en surface, donc de retarder l'amorçage. Mais cela a deux inconvénients : cela peut induire une rugosité de surface, synonyme de localisation de plasticité accrue, et favoriser la propagation des fissures, une fois amorcées sous la couche affectée par le pré-écrouissage.

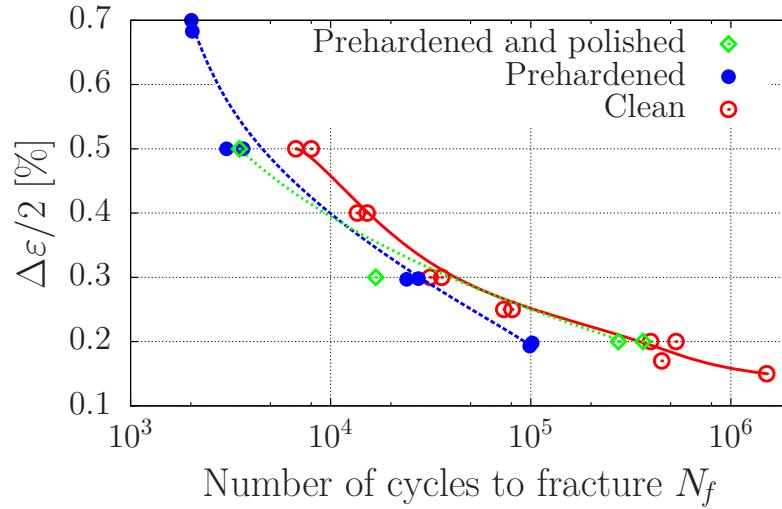


Fig. 1.25 – Nombres de cycles à rupture N_f obtenus pour des éprouvettes d’acier 304L vierges, pré-écrouies et repolies après pré-écrouissage, d’après Le Pécheur [18] complété par des essais menés à EDF R&D.

Il existe toute une littérature pour caractériser un profil de rugosité. Les coefficients R_t , R_m , R_a et R_q sont les principaux. Ils représentent respectivement la rugosité totale, la profondeur moyenne, l’amplitude moyenne et l’écart type des hauteurs. Leur définition est donnée pour un profil discret h_i contenant N points d’une part, et pour un profil continu $y(x)$ de longueur L d’autre part.

$$\left\{ \begin{array}{l} R_t = \max_i(h_i) - \min_i(h_i) = \max_{x \in [0;L]}(y(x)) - \min_{x \in [0;L]}(y(x)) \\ R_m = \frac{1}{N} \sum_i h_i = \frac{1}{L} \int_0^L y \, dx \\ R_a = \frac{1}{N} \sum_i |h_i - R_m| = \frac{1}{L} \int_0^L |y - R_m| \, dx \\ R_q = \frac{1}{N} \sum_i (h_i - R_m)^2 = \frac{1}{L} \int_0^L (y - R_m)^2 \, dx \end{array} \right. \quad (1.68)$$

$\sqrt{R_q}$ représente la courbure moyenne des sommets de aspérités.

Lee *et al.* ont procédé à des essais de fatigue sur l’acier 304L, sous vide, à température ambiante, à une amplitude de $\Delta\epsilon/2 = 2\%$ et avec différentes rugosités de surface [137]. Dans ces conditions, lorsque le facteur R_q est décuplé, le nombre de cycles à l’amorçage est divisé par deux.

Petitjean a étudié expérimentalement l’influence de l’état de surface et a mis en évidence le rôle significatif de la rugosité et de l’écrouissage de surface sur les durées de vie de l’acier 304L en fatigue HCF [138]. Cette influence est accrue dans le cas d’essais à contrainte moyenne positive. Par des tests de microdureté Vickers effectués en surface et à différentes profondeurs, un gradient de dureté a été mis en évidence. Le rapport de dureté entre la surface et le cœur du composant est proche de 2 selon les traitements de surface.

Le Pécheur a étudié deux états de surface :

- brut, correspondant à l’état de surface du RRA et présentant des arrachements de matière ;
- brossé, moins marqué avec des singularités géométriques plus fines.

Profil	Rugosité			Microdureté Vickers	
	R_t	R_a	R_q	Surface	250 μm de profondeur
Brut	61,3 μm	11,1 μm	14,1 μm	300–450 Hv	150–200 Hv
Brossé	14,3 μm	1,88 μm	2,38 μm	300 Hv	100 Hv

Tab. 1.6 – Caractéristiques des états de surface étudiés par Le Pécheur [18].

Pour ces deux états de surface, le gradient de dureté de surface est caractérisé par une valeur 1,5 à 2 fois plus élevée en surface qu'à cœur. La dureté diminue de manière asymptotique jusqu'à 250 μm de profondeur.

Les caractéristiques de rugosité et de dureté de ces deux états de surface sont répertoriées dans le tableau 1.6.

D'autres particularités ont été révélées en surface :

- une taille de grain beaucoup plus petite que la moyenne, avec notamment des grains de martensite ;
- une plus forte proportion de grains maclés ;
- une densité de dislocations plus élevée qu'à cœur.

Des calculs d'agrégats sous chargement biaxial, avec rugosité et/ou gradient d'érouissage, ont été réalisés avec le modèle CrystalECP (cf. section 1.3). Le pré-érouissage, seul sans rugosité de surface, homogénéise la répartition des déformations plastiques. Les contraintes résiduelles de compression en surface rendent aussi le composant plus résistant. Cependant, les contraintes résiduelles s'estompent au cours du cyclage, donc cet avantage ne perdure que pour une courte période. De plus, l'ajout d'une rugosité de surface est plus néfaste car les déformations plastiques sont beaucoup plus localisées au niveau des stries. L'analyse des isovaleurs de déformation plastique équivalente a montré que la localisation due à la rugosité de surface se ressentait à proximité de la surface, sur une profondeur de plusieurs grains.

On note donc qu'il y a une compétition entre la rugosité de surface et le pré-érouissage du matériau. L'influence de chacun de ces aspects varie selon le niveau de chargement.

1.5 Critères d'amorçage en fatigue

Plusieurs critères de fatigue ont été introduits au cours des dernières années, chacun apportant une meilleure estimation de l'amorçage dans des conditions particulières (chargement, nombre de cycles, etc). Selon ces critères, la structure ne s'endommage pas tant que le critère ne dépasse pas le seuil critique.

Dans le domaine de la fatigue HCF, les modèles utilisent deux types de variables, l'un prenant en compte le déviateur, le second la contrainte hydrostatique. C'est l'amplitude du déviateur qui est critique. Initialement calculée comme un double maximum sur tous les instants du cycle pour en déduire les deux points extrêmes, elle est maintenant évaluée par des procédures plus élaborées [139]. On a montré en effet, que dans l'espace de dimension 5 des contraintes déviatoriques, cette procédure permet de trouver le plus grand diamètre mais ne permet pas toujours d'englober l'ensemble du trajet de déformation [140]. Si on utilise l'invariant de von Mises pour caractériser la distance dans l'espace des contraintes, l'amplitude est notée $\Delta J/2$. Dans ces conditions, il devient très simple d'exprimer le critère de Crossland [141], qui est une combinaison linéaire de ΔJ et de la pression hydrostatique maximale sur le cycle, notée P_{max} :

$$\sigma_C = (1 - a) \frac{\Delta J}{2} + a P_{max} \quad (1.69)$$

ou celui de Sines qui fait apparaître de son côté la pression hydrostatique moyenne, notée P_m :

$$\sigma_S = \frac{\Delta J}{2} + aP_m \quad (1.70)$$

Il n'y a pas amorçage tant que les contraintes équivalentes σ_C ou σ_S sont inférieures à la limite de fatigue en traction alternée σ_{FL} .

Au lieu de considérer le critère de von Mises pour évaluer l'effet du déviateur de contrainte, Dang Van a recours au cisaillement dans un plan critique [120]. Il introduit une amplitude de cisaillement en justifiant le modèle par des arguments micromécaniques indiquant que dans les grains qui plastifient, la cission moyenne tend vers zéro en raison des redistributions des contraintes. Dans le cas d'une durée de vie infinie, en dessous d'un certain seuil de chargement, la totalité des grains s'adapte pour suivre un comportement élastique. Si le chargement vient à dépasser ce seuil, certains grains critiques ne pourront pas s'adapter et au bout d'un certain nombre de cycles, ceci conduit à l'amorçage d'une fissure.

$$\sigma_{DV} = \max_{\underline{n}, t} (\tau(t, \underline{n}) + aP(t)) \quad (1.71)$$

où τ est la cission courante du tenseur déviatorique des contraintes locales \underline{s} « recentrées » dans le plan de normale \underline{n} , a un paramètre matériau et P la pression hydrostatique locale.

Papadopoulos a repris le critère de Dang Van en remplaçant la cission locale par une cission calculée au sens de Tresca [142]. Cette nouvelle formulation est plus simple à mettre en œuvre tout en obtenant des résultats plus conservatifs mais moins précis dans le cas de chargement quelconques.

$$\tau = \frac{\sigma_I - \sigma_{III}}{2} \quad (1.72)$$

où σ_I et σ_{III} sont respectivement les plus grande et plus petite valeurs propres du tenseur déviatorique des contraintes locales \underline{s} .

En fatigue oligocyclique, les auteurs ne se restreignent pas au tenseur des contraintes pour construire les variables critiques. La plasticité joue un rôle important, que ce soit le tenseur de déformation plastique ou le glissement plastique selon une direction donnée. Brown et Miller [143] ont repris l'approche de type plan critique pour élaborer un critère défini à partir de l'amplitude de cisaillement maximale $\Delta\gamma_{max}$ et de l'amplitude de déformation normale d'ouverture/fermeture associée $\Delta\varepsilon_n$:

$$\gamma_{BM} = \max_{t_1, t_2} \left(\frac{\Delta\gamma_{max}(t_1, t_2)}{2} S \Delta\varepsilon_n(t_1, t_2) \right) \quad (1.73)$$

où S est un paramètre matériau. $\Delta\gamma_{max}$ et $\Delta\varepsilon_n$ sont calculées sur la base du même vecteur \underline{n} , normal au plan d'amplitude de glissement maximale. ε_n est la déformation normale au plan de normale \underline{n} .

$$\Delta\gamma_{max}(t_1, t_2) = \max_{\underline{n}} (\gamma(\underline{n}, t_1) - \gamma(\underline{n}, t_2)) \quad (1.74)$$

$$\Delta\varepsilon_n(t_1, t_2) = \varepsilon_n(t_1) - \varepsilon_n(t_2) \quad (1.75)$$

Fatemi et Socie [121] proposent un critère qui est lui aussi basé sur l'amplitude de cisaillement maximale $\Delta\gamma_{max}$ au cours du cycle, mais cette fois combinée à la contrainte normale σ_n associée :

$$\gamma_{FS} = \max_{t_1, t_2} \left(\frac{\Delta\gamma_{max}(t_1, t_2)}{2} \left(1 + k \frac{\sigma_n(t)}{\sigma_y} \right) \right) \quad (1.76)$$

où σ_y est la limite d'élasticité du matériau et k un paramètre matériau.

Une autre manière de concevoir un critère de fatigue consiste à relier la quantité d'énergie dissipée au cours de chaque cycle à l'apparition de l'endommagement par fatigue. On suppose que sous un chargement quelconque, le matériau ne peut dissiper qu'une quantité d'énergie limitée.

Au cours d'une déformation mécanique cyclique, l'énergie de déformation W_{cyc} peut se décomposer en plusieurs parties. Tout d'abord en une partie due au trajet de chargement ΔW et une partie due à une valeur moyenne statique W_m . Cette dernière est directement associée à la pression hydrostatique moyenne $W_m = W_m^h$. Ensuite, il est possible de décomposer le terme ΔW en trois parties : la densité d'énergie plastique dissipée ΔW_p^d , la densité d'énergie de distorsion élastique dissipée ΔW_e^d et la densité d'énergie hydrostatique ΔW^h .

$$W_{cyc} = \Delta W + W_m = \Delta W + W_m^h = \Delta W_p^d + \Delta W_e^d + \Delta W^h + W_m^h \quad (1.77)$$

$$\Delta W_p^d = \int_{cycle} \underline{\boldsymbol{\sigma}} : \underline{\dot{\boldsymbol{\xi}}^p} dt \quad (1.78)$$

$$\Delta W_e^d = \int_{cycle} \langle \underline{\boldsymbol{s}} : \underline{\dot{\boldsymbol{e}}_e} \rangle dt \quad (1.79)$$

$$\Delta W^h = \int \langle 3P_r \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{h,r} \rangle dt \quad (1.80)$$

$$W_m^h = \frac{3(1-2\nu)}{2E} P_m^2 \quad (1.81)$$

où $\underline{\dot{\boldsymbol{\xi}}^p}$ est le tenseur des vitesses de déformations plastiques, $\underline{\boldsymbol{s}}$ et $\underline{\boldsymbol{e}}_e$ sont respectivement les tenseurs déviatoriques des contraintes et des déformations élastiques et P_m la pression hydrostatique moyenne, ε_h est la déformation hydrostatique. L'indice r fait référence à la valeur d'une variable \bullet , recentrée sur le cycle, c'est-à-dire qu'on retire la valeur moyenne $\bullet_r = \bullet - \bullet_m$. P_r représente donc la pression hydrostatique recentrée et $\varepsilon_{h,r}$ la déformation hydrostatique recentrée.

Dans le domaine LCF, l'énergie plastique ΔW_p^d est majoritaire à cause des fortes déformations plastiques et peut permettre de statuer sur l'endommagement. L'endommagement dans le domaine HCF peut être caractérisé par l'énergie élastique ΔW_e^d . La combinaison de ces deux variables offre la possibilité de couvrir l'intégralité des domaines de fatigue.

Park et Nelson [144] ont établi leur critère sur une énergie totale équivalente W^* reprenant les deux variables de densités d'énergie présentées précédemment. Afin de rendre compte des effets de contrainte moyenne et de pression hydrostatique, une modification est apportée à ces deux densités d'énergie.

$$W^* = \Delta W_p^* + \Delta W_e^* \quad (1.82)$$

$$\Delta W_p^* = 2^{k_1(TF_s-1)} \Delta W_p^d \quad \text{et} \quad TF_s = \frac{3P_a}{s_{a,eq}} \quad (1.83)$$

$$\Delta W_e^* = 2^{k_2 TF_m} \Delta W_e^d \quad \text{et} \quad TF_m = \frac{3P_m}{s_{a,eq}} \quad (1.84)$$

$$\Delta s_{eq} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2} \Delta \underline{\boldsymbol{s}} : \Delta \underline{\boldsymbol{s}}} \quad (1.85)$$

où k_1 et k_2 sont des paramètres matériaux, P_a l'amplitude de pression hydrostatique, P_m la pression hydrostatique moyenne et $s_{a,eq}$ l'amplitude de contrainte déviatorique équivalente. Cette formulation donne de bons résultats entre 1×10^4 et 2×10^6 cycles pour divers matériaux et pour des chargements complexes.

Un autre critère formulé en énergie a été proposé par le LMS¹⁷ en partant des travaux de Dang Van. Ce critère a été utilisé dans la thèse de S. Amiabile [145]. Son principe est de combiner la densité d'énergie plastique dissipée ΔW_p^d avec la pression hydrostatique maximale P_{max} et s'écrit simplement :

$$W_{LMS} = \Delta W_p^d + \alpha P_{max} \quad (1.86)$$

où α est un paramètre matériau.

Déprés [10] a élaboré un critère d'amorçage à l'échelle du grain, à partir de son modèle de plasticité cristalline, basé sur une valeur seuil de la déformation plastique cumulée en surface $\gamma_{lim(\Delta\varepsilon^p)}^{surf}$:

$$\sqrt{N_i^D} = \frac{\tau_{prim}^{1,28} D_g}{\tau_{dev}} \frac{1}{H_g} \frac{1}{1 + 2 \frac{|\varepsilon^{VM}|}{\Delta\varepsilon^{VM}}} \frac{\gamma_{lim(\Delta\varepsilon^p)}^{surf}}{\Delta\varepsilon^{VM}} \quad (1.87)$$

où D_g et H_g sont respectivement le diamètre et la profondeur du grain, τ_{prim} et τ_{dev} les cissons dans les systèmes de glissement primaire et dévié, $\Delta\varepsilon^{VM}$ l'amplitude de déformation imposée et $\frac{\varepsilon^{VM}}{\Delta\varepsilon^{VM}}$ sa valeur moyenne. Le choix du couple de systèmes primaire/dévié est basé sur le rapport $\frac{\tau_{prim}}{\tau_{dev}}$ le plus faible. Dans le cas de chargement à $R = 0$, l'équation se simplifie :

$$\sqrt{N_i^D} = \frac{\tau_{prim}^{1,28} D_g}{\tau_{dev}} \frac{\gamma_{lim(\Delta\varepsilon^p)}^{surf}}{H_g \Delta\varepsilon^{VM}} \quad (1.88)$$

Ce critère a été appliqué par Osterstock [146] sur un grain en surface parmi 180 calculs d'agrégats polycristallins soumis à des chargements uniaxial et équibiaxial. Les polycristaux étudiés étaient composés de grains à base hexagonale extrudée, ce qui restreint le champ de l'étude à certaines configurations de joints de grains. Les résultats de l'application de ce critère montrent que l'équibiaxialité du chargement augmente de 30 % le nombre de grains fissurés. Ceci n'a toutefois pas fait l'objet d'une validation expérimentale.

Une grande partie de ces critères a été répertoriée, documentée et testée récemment par Curtit sur l'acier 304L en fatigue multiaxiale [147]. Selon Curtit *et al.*, le critère de Fatemi-Socie et les critères en énergie permettent une bonne prédiction, l'avantage étant donné aux critères en énergie pour leur faible coût en calcul.

1.6 Résumé

Nous avons vu que le phénomène de fatigue en zone de mélange pouvait conduire à la formation de fissures en peau interne de la tuyauterie. Étant donné l'amplitude des sollicitations cycliques, nous nous plaçons dans le domaine de la fatigue à grand nombre de cycles pour lequel la phase d'amorçage et de micropropagation des fissures courtes représente la majeure partie de la durée de vie de la pièce avant rupture.

Nous avons vu que la compréhension de ce phénomène a été possible par des études numériques au niveau macroscopique et des observations aux échelles plus fines. La dépendance du comportement des fissures de type MSC vis-à-vis de la microstructure a également été souligné par les apports de la littérature. Ceci a été abordé par des études numériques à l'échelle du monocristal (DDD) mais sans prendre en compte le voisinage du grain. L'objectif est d'enrichir

17. LMS : Laboratoire de Mécanique des Solides, École Polytechnique.

ces travaux par une approche à une échelle intermédiaire, l'échelle mésoscopique. Les études basées sur des calculs d'agrégats souffrent soit d'un manque de point de vue statistique, soit d'une modélisation limitée à deux dimensions.

Nos travaux se concentreront donc sur l'influence des paramètres de la microstructure (orientation, désorientation, forme des grains) sur la localisation de la déformation plastique locale et à terme, sur l'amorçage des MSC. Cela implique de modéliser les interactions entre grains, l'outil actuel le plus approprié est la modélisation Éléments Finis. Pour mettre en lumière cet aspect, nous procéderons à des séries de calculs EF d'agrégats polycristallins couplés à un modèle de plasticité cristalline pour obtenir les champs locaux de contrainte-déformation. La multitude des configurations microstructurales implique aussi de donner un point de vue statistique sur le problème, c'est pourquoi des séries de calculs intensives seront lancées pour couvrir une large étendue de configurations.

D'après les conclusions de la littérature, l'amorçage des MSC a lieu préférentiellement en surface. L'intégralité de nos calculs portera donc sur la surface du composant. Dans cette configuration, la surface libre joue un rôle important dans la réponse micromécanique des grains.

Chapitre 2

Modélisation 2D : mise en évidence de l'effet de « cluster »

Sommaire

2.1	Mise en place des calculs	47
2.1.1	Modèle de plasticité cristalline et simplification 2D	48
2.1.2	Maillage et conditions aux limites	49
2.1.3	Variables et paramètres étudiés	50
2.1.4	Description des calculs sur les agrégats aléatoires et sur les clusters	51
2.2	Analyse statistique sur les agrégats aléatoires	52
2.2.1	Comportement en surface et à cœur	52
2.2.2	Grain dur/mou, ouvert/fermé	54
2.2.3	Application de critères de fatigue	57
2.3	Étude de l'effet de voisinage dans les clusters	59
2.3.1	Étude des champs locaux	59
2.3.2	Analyse statistique	60
2.3.3	Multiaxialité locale	65
2.4	Compléments sur l'étude 2D	70
2.4.1	Influence de l'orientation d'un grain sur le reste de l'agrégat	70
2.4.2	Calculs sur agrégats 2D bruités	71
2.5	Résumé	73

Nous étudions dans ce chapitre l'effet de cluster présent dans les polycristaux au travers d'une étude statistique sur un modèle numérique bidimensionnel simplifié. Un cluster est un groupe de grains adjacents ayant des propriétés (orientation, forme, taille) particulières. Les conclusions sont essentiellement qualitatives et visent à donner des tendances générales communes aux matériaux polycristallins.

L'idée est de mettre en avant l'effet de voisinage, l'influence des grains voisins sur un grain en particulier. Ceci est reflété par des calculs d'agrégats en deux dimensions comportant d'une part des grains orientés de manière totalement aléatoire, d'autre part des clusters en surface libre. Les travaux décrits dans ce chapitre ont fait l'objet d'une publication [148].

2.1 Mise en place des calculs

Les calculs d'agrégats sont basés sur l'anisotropie élastique et plastique des grains. Ceci est retranscrit par une matrice d'élasticité anisotrope et un modèle monocristallin.

2.1.1 Modèle de plasticité cristalline et simplification 2D

Sauzay a montré l'importance d'une représentation anisotrope du comportement élastique des grains dans un modèle de plasticité cristalline [149]. Afin de décrire au mieux le comportement d'un réseau cristallin de type CFC, la matrice d'élasticité $\underset{\approx}{\mathcal{C}}$ choisie est cubique. Elle est définie par trois coefficients (C_{1111} , C_{1122} et C_{1212}).

$$\underset{\approx}{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1111} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1122} & C_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

Dans ce chapitre, l'étude se restreint à un espace bidimensionnel. Le problème éléments finis est formulé en déformations planes généralisées. Le modèle de plasticité cristalline est simplifié pour ne travailler que sur un unique système de glissement, de plan \underline{n} et de direction \underline{l} .

$$\underline{n} = (100) \quad \text{et} \quad \underline{l} = [010] \quad (2.2)$$

Bien que cette modélisation s'éloigne des modèles cristallins classiques, Zouhal *et al.* ont montré que le nombre de systèmes de glissement actifs dans les polycristaux tendait vers 1 au bout de quelques cycles [90]. Il a aussi été montré qu'en fatigue, l'activation du glissement en surface n'apparaissait que sur un seul système pendant la phase d'amorçage [150].

Nous utilisons le modèle de plasticité cristalline de Méric-Cailletaud [86], décrit dans la section 1.3 dont la formulation sur un système de glissement se simplifie comme suit :

$$\tau = \underline{\sigma} : \underline{m} \quad (2.3)$$

$$\underline{m} = \frac{1}{2} \left((\underline{l} \otimes \underline{n}) + (\underline{n} \otimes \underline{l}) \right) \quad (2.4)$$

où \underline{m} représente le tenseur d'orientation du système de glissement.

La loi d'écoulement s'écrit :

$$\dot{\underline{\epsilon}}^p = \gamma \underline{m} \quad (2.5)$$

$$\dot{\gamma} = \text{sign}(\tau - x) \dot{v} \quad (2.6)$$

$$\dot{v} = \left\langle \frac{|\tau - x| - \tau_0 - r}{K} \right\rangle^n \quad \text{avec} \quad \langle \bullet \rangle = \begin{cases} \bullet & \text{si } \bullet \geq 0 \\ 0 & \text{si } \bullet < 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

où γ est le glissement plastique, τ_0 est la cission résolue critique, \dot{v} est la vitesse de glissement du système, K et n sont les coefficients matériau de la loi de Norton.

Les lois d'évolution des écrouissages sont de type non linéaire.

$$x = c\alpha \quad (2.8)$$

$$\dot{\alpha} = \dot{\gamma} - d\alpha\dot{v} \quad (2.9)$$

$$r = bQ\rho \quad (2.10)$$

$$\dot{\rho} = (1 - b\rho)\dot{v} \quad (2.11)$$

où c et d sont la capacité et la vitesse d'érouissage cinématique, Q et b la capacité et la vitesse d'érouissage isotrope. Les deux dernières équations peuvent se rassembler en une seule :

$$r = Q(1 - e^{-bv}) \quad (2.12)$$

En tenant compte du système d'axes explicité en figure 2.2, l'orientation cristallographique est fixée par un seul angle de rotation θ autour de \underline{e}_3 . Les vecteurs \underline{l} et \underline{n} restent dans le plan d'étude. L'intervalle de rotation est, du fait de la symétrie, réduit à $[0^\circ; 90^\circ]$. Les grains sont appelés « mous » lorsque $\theta = 45^\circ$ (cission résolue maximale) et « durs » lorsque $\theta = 0^\circ$ ou $\theta = 90^\circ$ (cission résolue nulle).

2.1.2 Maillage et conditions aux limites

Le maillage utilisé dans cette étude comporte 71 grains de forme hexagonale (cf. figure 2.1). Il est composé de 10 561 nœuds et 5 178 éléments quadratiques comme le recommandent Barbe *et al.* pour les calculs d'agrégats [112]. À nombre de nœuds égal, un maillage quadratique permet de mieux reproduire les hétérogénéités et la localisation de la déformation plastique qu'un maillage linéaire. En outre, nous avons choisi de conserver une taille et une forme homogène pour tous les grains de façon à éviter les effets indésirés que pourraient avoir ces paramètres sur notre analyse.

Différents types de grains sont alors considérés :

- les grains situés à cœur du maillage ;
- les grains sur lesquels s'appliquent aux conditions limites ;
- les grains en surface libre.

De plus les grains en surface se divisent en deux catégories, les grains « ouverts » et les grains « fermés ». Cette appellation fait référence au contour du grain, lorsqu'il s'agit d'un hexagone complet, le contour est fermé (cf. figure 2.1). Si au contraire, le grain est coupé par la limite correspondant à la surface et n'est plus qu'un demi-hexagone, le contour est ouvert. Nous étudierons les différences entre ces deux types de grains de surface.

Des conditions aux limites de type symétrie, définies en déplacement, sont appliquées sur les limites droite ($u_1 = 0$) et inférieure ($u_2 = 0$) de l'agrégat (cf. figure 2.1). Le chargement cyclique, piloté en déplacement, est imposé sur la limite supérieure de l'agrégat pour une durée de 10 cycles. Le bord gauche du maillage, correspondant à la surface du composant, est laissé libre. Plusieurs amplitudes de chargement sont étudiées :

$$\Delta\varepsilon/2 = \begin{cases} 2 \% \\ 1 \% \\ 0,5 \% \\ 0,2 \% \end{cases}$$

L'étude est focalisée sur deux niveaux de chargement, l'un élevé ($\Delta\varepsilon/2 = 2 \%$) et un autre plus faible ($\Delta\varepsilon/2 = 0,5 \%$).

Les paramètres matériau utilisés sont reportés dans le tableau 2.1. Les coefficients de la matrice d'élasticité cubique sont ceux de la phase cristalline de type austénite caractérisée par Huntington [25]. Il ne s'agit pas de paramètres identifiés directement sur un alliage 316L, mais ils permettent de reproduire le comportement des aciers austénitiques. L'étude élaborée dans ce chapitre ne cadre pas un matériau particulier, mais les matériaux polycristallins en général.

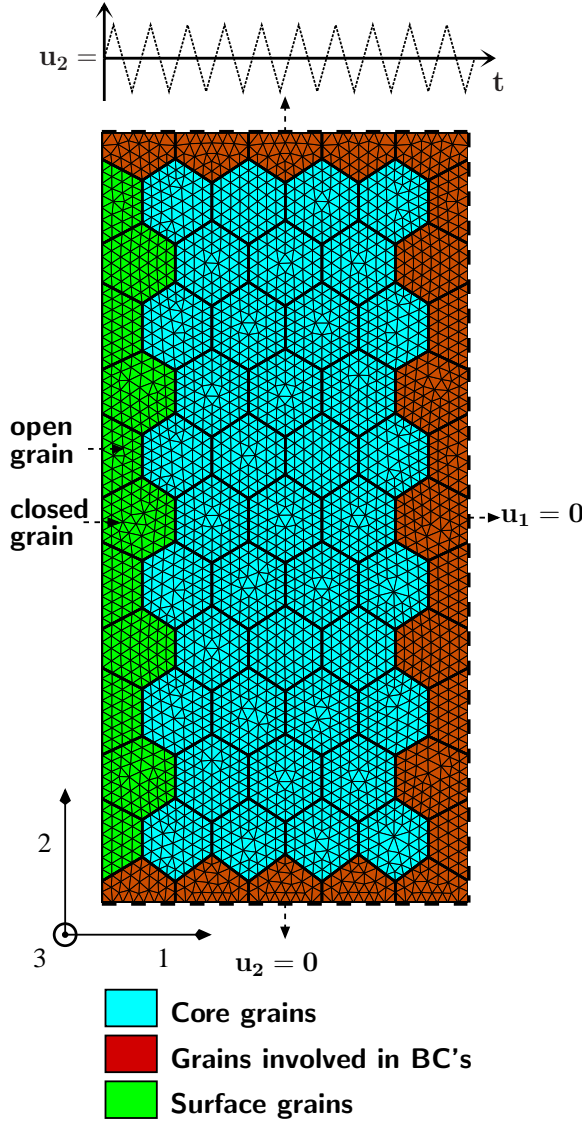


Fig. 2.1 – Maillage et conditions aux limites appliquées pour le problème 2D.

Coefficients élastiques $C_{1111} = 197$ GPa $C_{1122} = 125$ GPa $C_{1212} = 122$ GPa
Loi d'écoulement $K = 10$ MPa.s ⁻ⁿ $n = 10$
Écrouissage isotrope $\tau_0 = 40$ MPa $Q = 10$ MPa $b = 20$
Écrouissage cinématique $c = 15\,000$ MPa $d = 500$
Critères de fatigue $k_{DV} = 0,2$ $k_{SF} = 1$ $\sigma_y = \tau_0 = 40$ MPa

Tab. 2.1 – Paramètres matériau.

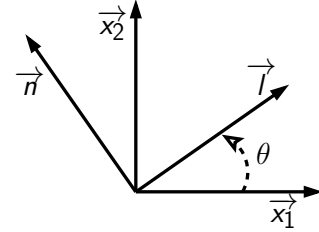


Fig. 2.2 – Définition de l'unique système de glissement et de l'orientation cristallographique correspondante θ .

2.1.3 Variables et paramètres étudiés

Les paramètres étudiés sont les effets de l'orientation cristallographique θ , la localisation du grain dans l'agrégat et sa forme (ouvert ou fermé).

Les variables reflétant l'activité de glissement sont la déformation plastique cumulée p et sa moyenne par grain $\langle p \rangle_g$. L'analyse des résultats est concentrée sur ces valeurs.

$$p = \int_{t_0}^t \dot{v} dt \quad (2.13)$$

$$\langle p \rangle_g = \frac{1}{V} \int_V p dV \quad (2.14)$$

En plus de la déformation plastique cumulée p , deux critères de fatigue basés sur les données locales et dépendant de l'activité des systèmes de glissement sont introduits. Ces critères

consistent en une reformulation à l'échelle mésoscopique des critères de Dang Van [120] et de Fatemi–Socie [121], tous deux déjà présentés en section 1.5.

- a. Le critère de Dang Van modifié reprend le critère multiaxial original (cf. section 1.5) en remplaçant le plan critique (à la base quelconque) par le plan de glissement cristallographique.

$$\sigma_{DV} = \max_s \left(\max_t \left(\tau_r^s(t) + k_{DV} P(t) \right) \right) \quad (2.15)$$

$$\tau_r^s(t) = \tau^s(t) - \frac{1}{2} \left(\max_t \left(\tau^s(t) \right) + \min_t \left(\tau^s(t) \right) \right) \quad (2.16)$$

où P est la pression hydrostatique, τ_r^s la cission résolue recentrée sur le système s et k_{DV} un paramètre matériau.

- b. Le critère de Fatemi–Socie modifié se base cette fois sur la contrainte normale maximale calculée sur les plans de glissement.

$$\gamma_{SF} = \max_s \left(\frac{\Delta\gamma^s}{2} \left(1 + k_{SF} \max_t \frac{\sigma_n^s(t)}{\sigma_y} \right) \right) \quad (2.17)$$

où $\Delta\gamma^s$ est l'amplitude crête à crête du glissement sur le système s , σ_n^s est la contrainte normale au plan de glissement du système s , σ_y est la valeur initiale de la cission résolue critique (*i.e.* τ_0) et k_{SF} un paramètre matériau.

De cette façon, nous étudierons à l'échelle du grain, un critère purement basé sur les déformations, un second basé sur les contraintes et un dernier critère mixte.

2.1.4 Description des calculs sur les agrégats aléatoires et sur les clusters

Agrégats aléatoires

Dans un premier temps, les simulations sont lancées sur des agrégats composés de grains orientés de façon totalement aléatoire. Ceci servira à mettre en lumière les différences de comportement suivant la localisation des grains et à introduire l'effet de voisinage. 800 calculs sont lancés au cours de cette phase pour chaque niveau de chargement.

Clusters

Dans une seconde étape, nous nous focalisons sur l'effet de cluster. Les clusters étudiés, ainsi que leur dénomination, sont définis par trois paramètres (cf. figure 2.3) :

- le type du grain central du cluster T : ouvert (O comme « open » en anglais) ou fermé (C comme « closed » en anglais)
- l'orientation du grain central : θ_1
- l'orientation des grains de la couronne entourant le grain central : θ_2 (R si aléatoire)

La dénomination utilisée est la suivante : T- θ_1 - θ_2 .

Un cluster centré sur un grain fermé orienté à $\theta_1 = 0^\circ$, entouré de grains orientés à $\theta_2 = 45^\circ$ est donc un cluster C-0-45.

Nous nous restreindrons à l'étude de clusters de type « grain mou entouré de grains durs » (et inversement), ainsi que des grains durs (ou mous) entourés de grains orientés aléatoirement. Pour chaque type de cluster, nous étudierons les configurations centrées sur un grain ouvert et sur un grain fermé. 100 calculs seront lancés pour chaque cluster et par niveau de chargement, soit au total 800 calculs par niveau de chargement. Au final, l'étude sur le cluster portera sur :

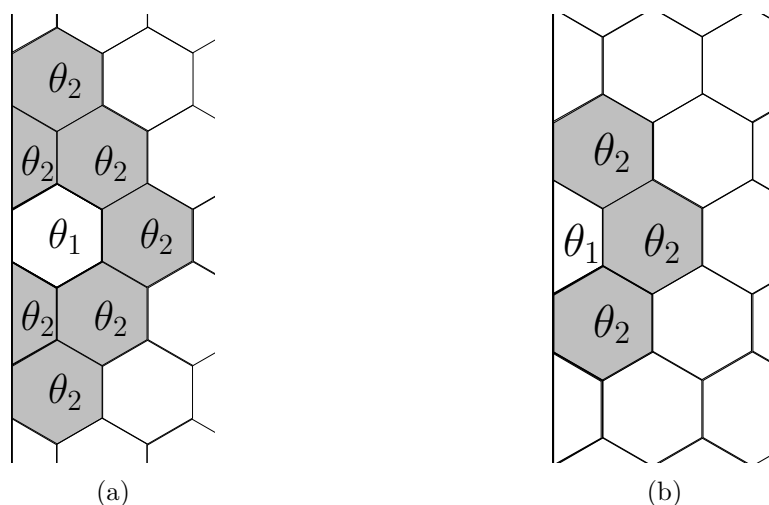


Fig. 2.3 – Définition des angles pour les clusters construits autour des grains (a) fermés et (b) ouverts.

- C-0-45 × 100
- O-0-45 × 100
- C-45-0 × 100
- O-45-0 × 100
- C-0-R × 100
- O-0-R × 100
- C-45-R × 100
- O-45-R × 100

2.2 Analyse statistique sur les agrégats aléatoires

2.2.1 Comportement en surface et à cœur

Une première analyse statistique est conduite sur la réponse globale de chaque type de grain en fonction de l'orientation cristallographique sous un chargement correspondant à une déformation de $\Delta\varepsilon/2 = 2\%$. En figure 2.4, l'ensemble des moyennes par grain de la déformation plastique cumulée p au bout de 10 cycles est reporté en fonction de l'orientation θ . Plus précisément, on reporte d'une part les valeurs moyennées par intervalle d'orientation, d'autre part, l'écart type par intervalle, représenté par un espace solide autour de la valeur moyenne. Cela permet de visualiser la dispersion des valeurs autour de la valeur moyenne, toujours en fonction de l'orientation. Pour plus de lisibilité, les graphes sont tracés séparément en figure 2.4 et regroupés sur la figure 2.5 pour une comparaison directe des valeurs moyennes par type de grain.

Pour chacune des courbes, on compare les résultats à la référence obtenue sur un monocristal pour une même déformation plastique moyenne. L'écart entre les courbes relatives à chaque type de grain et la courbe du monocristal reflète l'effet de voisinage. Plus la courbe est « aplatie », plus les grains environnants influent sur le comportement du grain en question en déviant les directions de sollicitation locales par rapport au chargement global. En effet, on remarque en figure 2.4a que, dans le cas général, *i.e.* pour tous les grains de l'agrégat, les grains durs (θ proche de 0° ou 90°) plastifient de manière non négligeable, près d'un tiers de la valeur maximale

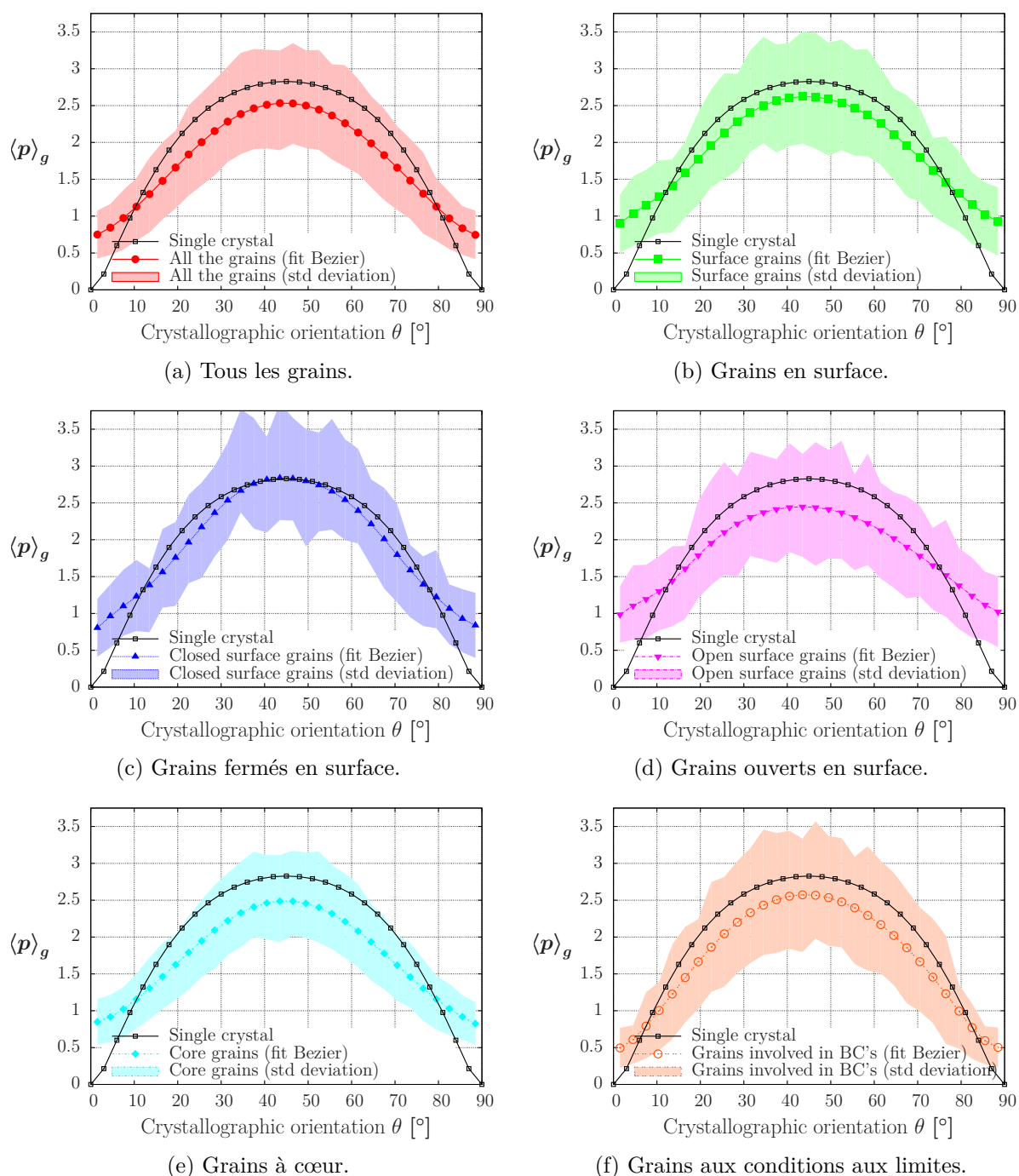


Fig. 2.4 – Comportement plastique de différents types de grains en fonction de l'orientation cristallographique et comparaison avec le monocristal ($\Delta\varepsilon/2 = 2\%$). Sont tracés la courbe moyenne lissée et l'écart type autour de la moyenne.

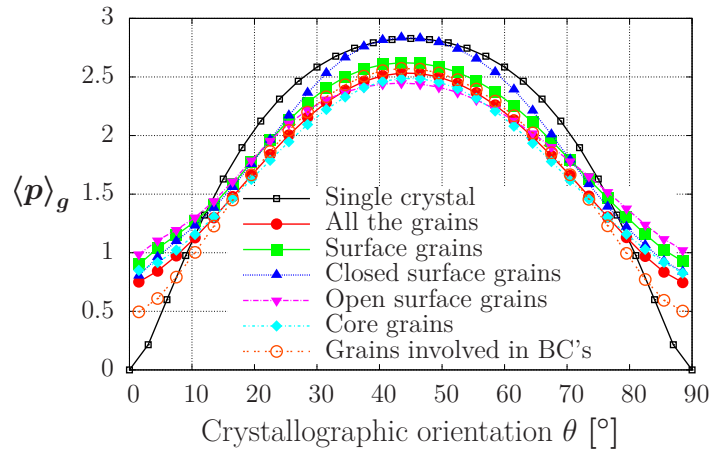


Fig. 2.5 – Déformation plastique cumulée en fonction de l’orientation cristallographique pour différents types de grains.

obtenue pour $\theta = 45^\circ$. À l’inverse, les grains mous (θ proche de 45°) se plastifient moins que dans le cas du monocristal.

Cette observation est nuancée suivant les types de grains considérés. Par exemple, on constate que cet effet est encore plus marqué dans le cas des grains à cœur (cf. figure 2.4e). De plus, l’écart type est plus faible à cœur que pour l’ensemble de l’agrégat, synonyme d’une dispersion moindre.

Au contraire, les grains en surface subissent plus de déformation plastique que la moyenne quelle que soit l’orientation (cf. figure 2.4b). S’ajoute à cela une dispersion plus prononcée comme l’avaient montré Barbe *et al.* [96]. L’agrégat comportant 11 grains en surface (6 ouverts et 5 fermés), sur la base de 800 calculs, on obtient 8 800 valeurs en surface (4 800 pour les grains ouverts et 4 000 pour les grains fermés), ce qui donne un échantillon statistique acceptable pour chaque type de grain.

Plus particulièrement, une différence nette se dégage des figures 2.4c et 2.4d. Les grains ouverts présentent une courbe bien plus aplatie, leur comportement s’éloigne énormément du monocristal, ils subissent donc un très fort effet de voisinage. De leur côté, les grains fermés sont les plus critiques, car ce sont les grains qui se plastifient le plus, quelle que soit l’orientation, avec aussi un fort écart type.

Enfin, la réponse des grains directement en contact avec les conditions aux limites est très proche du monocristal avec une forte dispersion (cf. figure 2.4f). Dans ces zones, les contraintes locales sont beaucoup plus proches du chargement global et les déformations sont fortement contraintes le long des conditions aux limites. Ceci est responsable de la forte dispersion de p pour ces grains.

2.2.2 Grain dur/mou, ouvert/fermé

Pour une vision plus qualitative, les tableaux 2.2 et 2.3 présentent les données statistiques de la déformation plastique cumulée p , évaluées sur les résultats de calcul à $\Delta\varepsilon/2 = 2\%$ et $\Delta\varepsilon/2 = 0,5\%$. Seuls les grains durs ($\theta < 1^\circ$ et $\theta > 89^\circ$) et mous ($44^\circ < \theta < 46^\circ$) sont considérés. Les statistiques sont réalisées à deux échelles : sur les valeurs aux points de Gauss et sur les moyennes par grain. On remarque, qu’aux deux échelles, on obtient en moyenne 10

Type de grain	p			
	Min	Moyenne	Max	Écart type
Tous	0.00e+00	7.81e-01	2.71e+01	1.10e+00
Surface	0.00e+00	9.50e-01	2.71e+01	1.51e+00
Fermés	0.00e+00	8.78e-01	9.83e+00	1.20e+00
Ouverts	0.00e+00	1.07e+00	2.71e+01	1.91e+00
Cœur	0.00e+00	8.35e-01	1.28e+01	1.04e+00
BC	0.00e+00	5.32e-01	1.36e+01	9.38e-01

(a) Grains durs ($\theta < 1^\circ$ et $\theta > 89^\circ$) aux points de Gauss.

Type de grain	p			
	Min	Moyenne	Max	Écart type
Tous	5.04e-03	2.63e+00	2.97e+01	2.26e+00
Surface	7.03e-03	2.92e+00	2.97e+01	2.64e+00
Fermés	1.50e-02	3.15e+00	2.97e+01	2.75e+00
Ouverts	7.03e-03	2.60e+00	2.11e+01	2.46e+00
Cœur	5.04e-03	2.54e+00	2.26e+01	2.11e+00
BC	7.31e-03	2.70e+00	2.51e+01	2.39e+00

(b) Grains mous ($44^\circ < \theta < 46^\circ$) aux points de Gauss.

Type de grain	$\langle p \rangle_g$			
	Min	Moyenne	Max	Écart type
Tous	2.34e-04	7.48e-01	4.63e+00	6.52e-01
Surface	2.34e-04	9.75e-01	4.52e+00	8.39e-01
Fermés	3.04e-02	8.71e-01	3.03e+00	7.03e-01
Ouverts	2.34e-04	1.07e+00	4.52e+00	9.37e-01
Cœur	6.11e-03	8.25e-01	4.27e+00	5.94e-01
BC	6.89e-03	4.98e-01	4.63e+00	5.70e-01

(c) Grains durs ($\theta < 1^\circ$ et $\theta > 89^\circ$) en moyenne par grain.

Type de grain	$\langle p \rangle_g$			
	Min	Moyenne	Max	Écart type
Tous	1.90e-01	2.64e+00	8.43e+00	1.38e+00
Surface	1.90e-01	2.82e+00	7.76e+00	1.55e+00
Fermés	6.15e-01	3.15e+00	7.49e+00	1.55e+00
Ouverts	1.90e-01	2.57e+00	7.76e+00	1.51e+00
Cœur	2.83e-01	2.53e+00	7.25e+00	1.17e+00
BC	2.48e-01	2.75e+00	8.43e+00	1.59e+00

(d) Grains mous ($44^\circ < \theta < 46^\circ$) en moyenne par grain.**Tab. 2.2** – Données statistiques aux points de Gauss et en moyenne par grain sur la déformation plastique cumulée dans les grains mous et durs pour $\Delta\varepsilon/2 = 2\%$.

Type de grain	p			
	Min	Moyenne	Max	Écart type
Tous	0.00e+00	2.88e-02	1.85e+00	6.47e-02
Surface	0.00e+00	2.54e-02	1.45e+00	7.72e-02
Fermés	0.00e+00	1.91e-02	1.15e+00	4.70e-02
Ouverts	0.00e+00	3.59e-02	1.45e+00	1.10e-01
Cœur	0.00e+00	3.22e-02	1.30e+00	6.41e-02
BC	0.00e+00	2.08e-02	1.85e+00	5.75e-02

(a) Grains durs ($\theta < 1^\circ$ et $\theta > 89^\circ$) aux points de Gauss.

Type de grain	p			
	Min	Moyenne	Max	Écart type
Tous	4.38e-02	5.16e-01	3.56e+00	3.36e-01
Surface	4.38e-02	5.83e-01	3.56e+00	4.05e-01
Fermés	6.57e-02	6.06e-01	3.56e+00	4.00e-01
Ouverts	4.38e-02	5.53e-01	3.27e+00	4.10e-01
Cœur	5.97e-02	5.05e-01	3.34e+00	3.17e-01
BC	5.42e-02	5.06e-01	3.49e+00	3.38e-01

(b) Grains mous ($44^\circ < \theta < 46^\circ$) aux points de Gauss.

Type de grain	$\langle p \rangle_g$			
	Min	Moyenne	Max	Écart type
Tous	0.00e+00	2.72e-02	4.03e-01	3.49e-02
Surface	0.00e+00	2.78e-02	2.96e-01	3.80e-02
Fermés	2.68e-04	1.89e-02	1.07e-01	1.95e-02
Ouverts	0.00e+00	3.60e-02	2.96e-01	4.77e-02
Cœur	1.17e-04	3.18e-02	4.03e-01	3.52e-02
BC	0.00e+00	1.86e-02	2.50e-01	3.09e-02

(c) Grains durs ($\theta < 1^\circ$ et $\theta > 89^\circ$) en moyenne par grain.

Type de grain	p			
	Min	Moyenne	Max	Écart type
Tous	1.43e-01	5.19e-01	1.45e+00	2.01e-01
Surface	1.58e-01	5.74e-01	1.29e+00	2.27e-01
Fermés	2.24e-01	6.07e-01	1.21e+00	2.11e-01
Ouverts	1.58e-01	5.49e-01	1.29e+00	2.35e-01
Cœur	1.71e-01	5.05e-01	1.45e+00	1.74e-01
BC	1.43e-01	5.16e-01	1.28e+00	2.26e-01

(d) Grains mous ($44^\circ < \theta < 46^\circ$) en moyenne par grain.

Tab. 2.3 – Données statistiques aux points de Gauss et en moyenne par grain sur la déformation plastique cumulée dans les grains mous et durs pour $\Delta\varepsilon/2 = 0,5\%$.

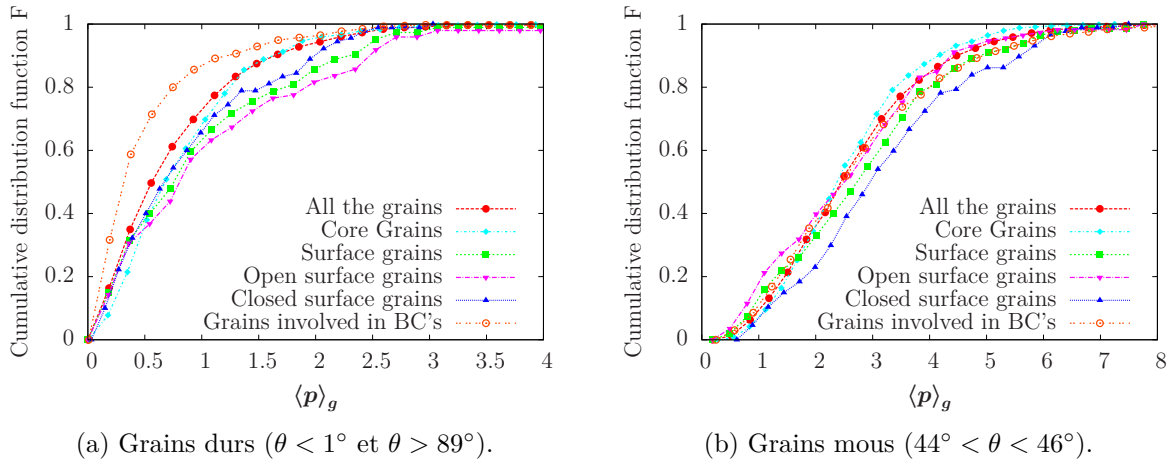


Fig. 2.6 – Fonction de distribution cumulée de la déformation plastique cumulée pour différents types de grains.

à 15 % de déformation plastique cumulée en plus en surface qu'à cœur, quel que soit le niveau de chargement. Sauzay et Gilormini avaient effectué des études similaires en élasticité isotrope, plasticité parfaite et glissement simple. La même tendance avait été constatée : 35 % en cas de faibles déformations plastiques et 100 % en cas de fortes déformations plastiques [151]. En terme d'écart type, on observe une différence accrue : il est 25 à 50 % supérieur en surface.

Par ailleurs, d'après le tableau 2.4, on constate que dans le cas des grains durs, les grains ouverts subissent plus de déformation plastique que tous les autres types de grain, avec aussi un écart type plus conséquent. C'est d'autant plus marquant à faible amplitude ($\Delta\varepsilon/2 = 0,5\%$), où les valeurs moyennes de la déformation plastique sont 90 % plus élevées, contre 22 % à forte amplitude ($\Delta\varepsilon/2 = 2\%$). Pour les grains mous, c'est la géométrie de type fermée qui est la plus critique, mais avec une différence moins marquée et une dispersion moindre pour une géométrie de type ouverte.

2.2.3 Application de critères de fatigue

Les critères de fatigue décrits précédemment sont maintenant appliqués sur les résultats des simulations EF pour les quatre niveaux de chargement. Chaque critère est calculé sur le 10^e cycle de la simulation. On reporte les valeurs moyennes de chaque critère par intervalle d'orientation cristalline en figure 2.7.

Globalement, pour tous les critères, on remarque que l'orientation cristalline, et donc le rôle de la microstructure, est plus important à faible chargement. C'est en accord avec la littérature. La forte dispersion des résultats à faible amplitude est due à la microstructure.

D'un point de vue localisation de l'amorçage, les critères inspirés de Dang Van et Socie–Fatemi le prédisent préférentiellement à cœur surtout dans les fortes amplitudes. Cela n'est pas en accord avec la littérature, qui montre que ce sont dans les grains en surface que s'initient les fissures de fatigue [3, 8, 35, 36]. Seule la déformation plastique cumulée tend à prédire l'amorçage en surface, et préférentiellement dans des grains de type fermé.

Ces premières observations permettent de mettre en évidence un fort effet de voisinage dû à la redistribution des contraintes locales dans les polycristaux. De plus, en combinant l'analyse des valeurs moyennes de déformation plastique cumulée p avec la dispersion de ces valeurs,

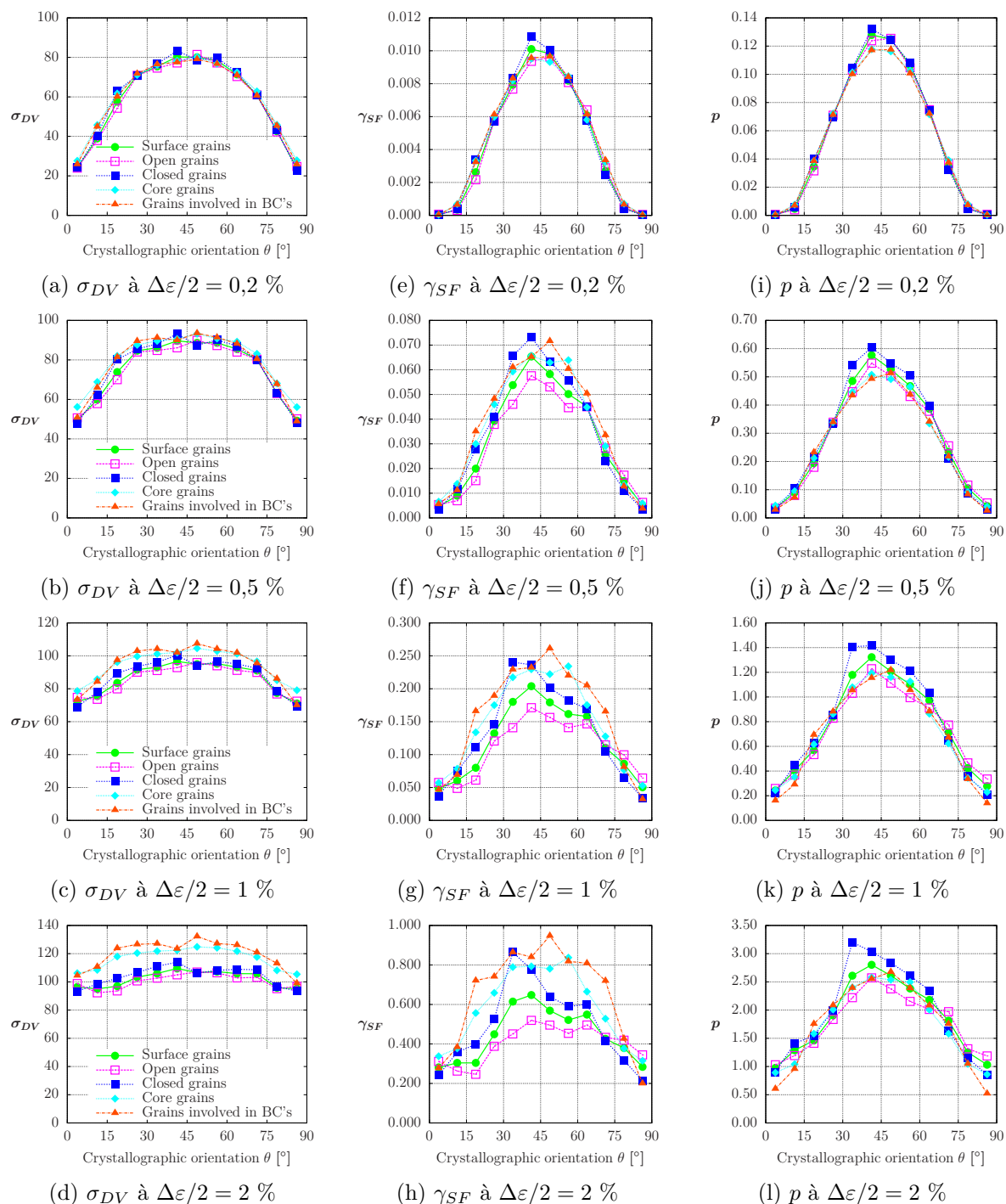


Fig. 2.7 – Valeurs (moyennes par grain) des différents critères de fatigue calculés à l'échelle locale en fonction de l'orientation cristallographique. Plusieurs amplitudes de sollicitations sont présentées.

$\Delta\varepsilon/2$	Échelle	Moyenne			Écart type/Moyenne		
		Ouvert	Fermé	Ratio O/F	Ouvert	Fermé	Ratio O/F
0,5 %	Point de Gauss	0.036	0.019	1.882	3.054	2.463	1.240
	Moyenne par grain	0.036	0.019	1.906	1.325	1.031	1.285
2 %	Point de Gauss	1.069	0.878	1.218	1.785	1.371	1.302
	Moyenne par grain	1.071	0.871	1.230	0.875	0.807	1.083

(a) Grains durs

$\Delta\varepsilon/2$	Échelle	Moyenne			Écart type/Moyenne		
		Ouvert	Fermé	Ratio O/F	Ouvert	Fermé	Ratio O/F
0,5 %	Point de Gauss	0.553	0.606	0.913	0.742	0.661	1.123
	Moyenne par grain	0.549	0.607	0.905	0.428	0.348	1.231
2 %	Point de Gauss	2.596	3.146	0.825	0.947	0.873	1.084
	Moyenne par grain	2.572	3.151	0.816	0.587	0.492	1.194

(b) Grains mous

Tab. 2.4 – Comparaison des valeurs moyennes et des écarts type de la déformation plastique dans les grains ouverts et fermés. Les résultats sont présentés à différentes échelles pour les grains durs et mous.

les grains fermés en surface représentent les sites de maxima locaux potentiels. En se basant sur la déformation plastique cumulée p , représentative de l'activité de glissement et donc de la formation de PSB, l'amorçage prend place préférentiellement en surface dans les grains mous. De plus, la géométrie du grain joue aussi un rôle : les grains fermés mous sont les plus critiques. Par ailleurs, l'analyse conduite ici ne permet pas d'isoler l'effet de la taille du grain et de la forme du grain. Ceci sera discuté ultérieurement dans la section 2.4.2.

L'origine de la variabilité des résultats pour une même orientation provient de l'influence des grains adjacents. Nous tentons de prendre en compte cet aspect dans la section suivante.

2.3 Étude de l'effet de voisinage dans les clusters

2.3.1 Étude des champs locaux

Les figures 2.8, 2.9, 2.10 et 2.11 présentent les résultats locaux pour différents clusters. Les cartes d'isovaleurs aux points de Gauss de déformation plastique cumulée p au 10^e cycle peuvent être comparées aux cartes de facteurs de Schmid correspondantes pour trois réalisations différentes. Les cartes locales ne montrent les résultats qu'à l'intérieur des clusters pour 20 réalisations différentes. De manière générale, on observe une forte localisation. Alors qu'en moyenne on s'attend à obtenir des valeurs voisines de 2 à 3, on approche 15 dans les maxima locaux à l'échelle des points d'intégration. La structure de localisation change suivant les configurations d'orientation à l'extérieur des clusters. Ces zones de localisation ne se situent pas forcément dans les grains mous. Une importante variabilité des profils de localisation de la déformation plastique est aussi constatée globalement dans tout l'agrégat, mais aussi dans les clusters de même nature. La réponse locale d'un grain dépend donc à la fois du voisinage direct (première couronne de grains), mais aussi du voisinage indirect (grains espacés d'une couronne ou plus).

Deux types de localisations sont identifiées :

1. Une bande de localisation qui suit une succession de grains mous (ou assimilés) alignés plus ou moins à 45° de la direction de sollicitation (cf. figure 2.10, réalisation 3). Dans ce cas, c'est à l'intérieur du grain, là où le comportement est plus proche du monocristal, que la déformation plastique se localise.
2. Le contraste entre un grain mou et un grain dur, tous deux en contact, induit des incompatibilités de déformation élastique et de glissement plastique (cf. figure 2.8, réalisation 3). Ceci conduit à une localisation aux joints de grains.

Les figures 2.8 et 2.9 correspondent respectivement aux clusters C-45-0 et O-45-0. Il s'agit donc dans les deux cas d'un grain mou dans une matrice dure, l'un étant fermé, l'autre étant ouvert. Les cartes locales (figures 2.8c et 2.9c) montrent bien que la réponse d'un type de cluster n'est pas uniforme lorsque la texture cristalline du reste de l'agrégat varie. On observe essentiellement de la localisation aux joints du grain central (cas 1, 4 et 14 de la figure 2.8c, cas 12 et 14 de la figure 2.9c). Parfois, les grains adjacents durs empêchent le grain central de plastifier (cas 6, 13 et 16 de la figure 2.8c, cas 1, 3 et 17 de la figure 2.9c). Dans le cas du grain ouvert (cf. figure 2.9c), très peu de plasticité est observée dans le cluster. Toutefois, il arrive que des bandes de localisation traversent le grain central (cas 5, 12 et 14 de la figure 2.9c). La réponse du grain central est variable mais moins que celle de la première couronne de grains qui subit plus les variations du reste de l'agrégat.

Les figures 2.10 et 2.11 présentent les résultats des clusters C-0-45 et O-0-45. Ici, un grain dur est entouré d'une matrice molle. D'un point de vue global, les cartes d'isovaleurs suivent le même schéma que les figures précédentes. Au sein des clusters, le grain central ne subit des déformations plastiques que dans de rares situations (cas 1 et 12 en figure 2.10c; cas 3, 9 et 18 en figure 2.11c). La plasticité est plutôt présente dans les grains mous de la première couronne sous forme de bandes de localisation orientées à 45° . Ces bandes, qui peuvent se situer au-dessus et/ou en dessous du grain central du cluster, contournent ce dernier pour se propager dans le reste de l'agrégat (cas 3 de la figure 2.10b) ou non (cas 1 et 2 de la figure 2.11b). Cette observation est identique pour les clusters centrés sur un grain ouvert ou fermé.

2.3.2 Analyse statistique

Un point de vue plus statistique est donné en figure 2.12 où sont répertoriées, pour chaque cluster, les distributions de la déformation plastique cumulée p aux points de Gauss et en moyenne par grains. Pour chaque cluster, 100 calculs ont été réalisés et les valeurs de p dans le grain central du cluster ont été relevées. Les distributions sont réalisées à deux échelles : aux points de Gauss et moyenne par grains. Ces graphes montrent que les niveaux de plasticité dans les grains durs restent généralement limités (cf. figure 2.12e). Dans le cas des grains ouverts, on peut voir apparaître plus de plasticité (cf. figure 2.12f).

Les grains les plus critiques (*i.e.* à plus haut niveau de plasticité) sont les grains fermés mous entourés de durs (cf. figure 2.12a). La même configuration centrée sur un grain ouvert conduit à une déformation plastique moindre (cf. figure 2.12b), on note un facteur 2 entre les deux valeurs moyennes : 3,6 contre 1,8.

En attribuant des orientations aléatoires aux grains de la première couronne (clusters C-45-R, O-45-R, C-0-R et O-0-R), les tendances observées deviennent moins marquées. De manière générale, les valeurs pour les différents clusters se rapprochent d'une moyenne globale. Pour les clusters de type *-45-R, la déformation plastique devient plus faible (cf. figures 2.12c et 2.12d), et inversement pour les clusters de type *-0-R (cf. figures 2.12g et 2.12h). Cela montre

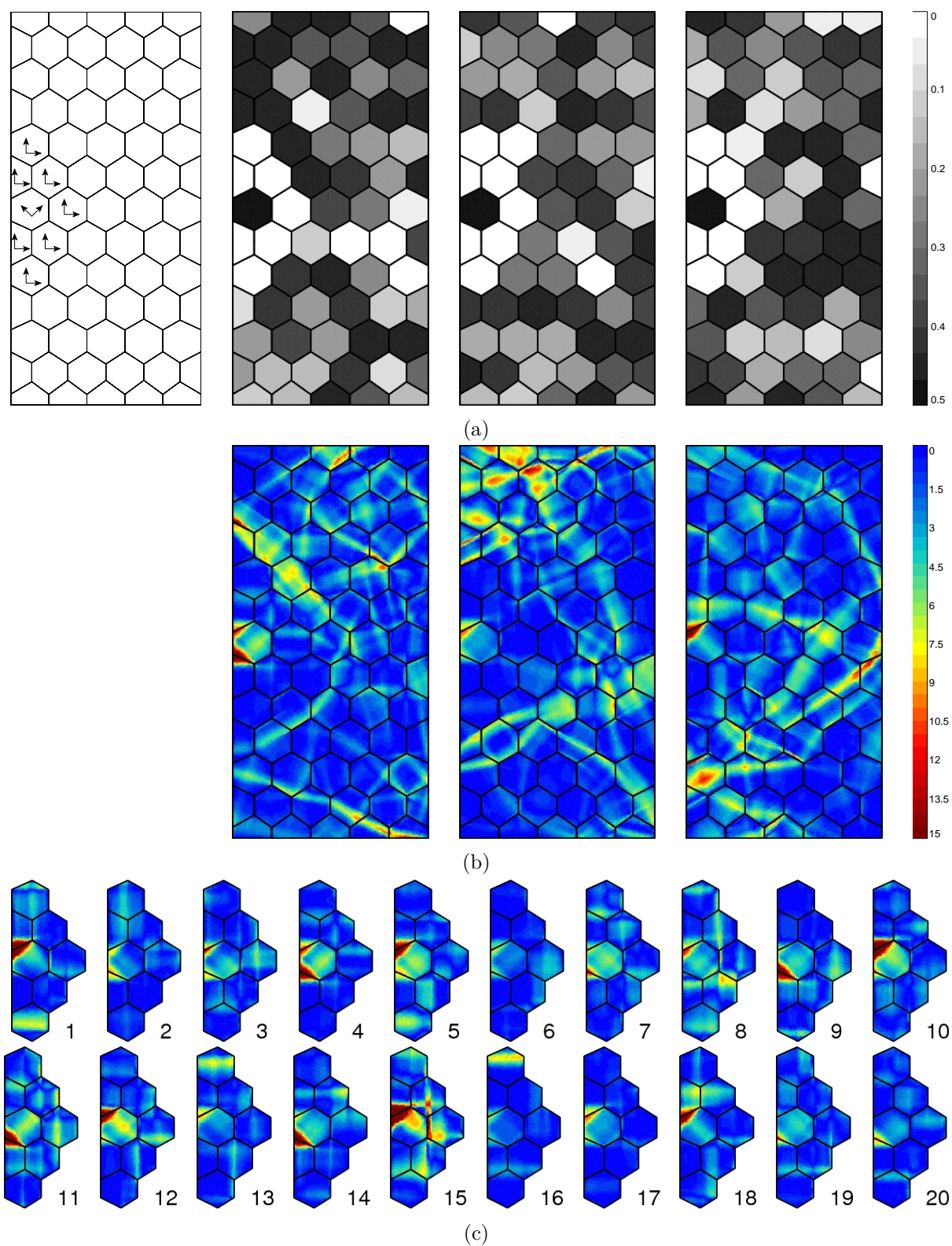


Fig. 2.8 – Cluster C-45-0 : Cartes d'isovaleurs correspondant à différentes réalisations. Cartes entières (a) du facteur de Schmid et (b) de la déformation plastique cumulée. (c) Cartes locales de la déformation plastique cumulée dans le cluster.

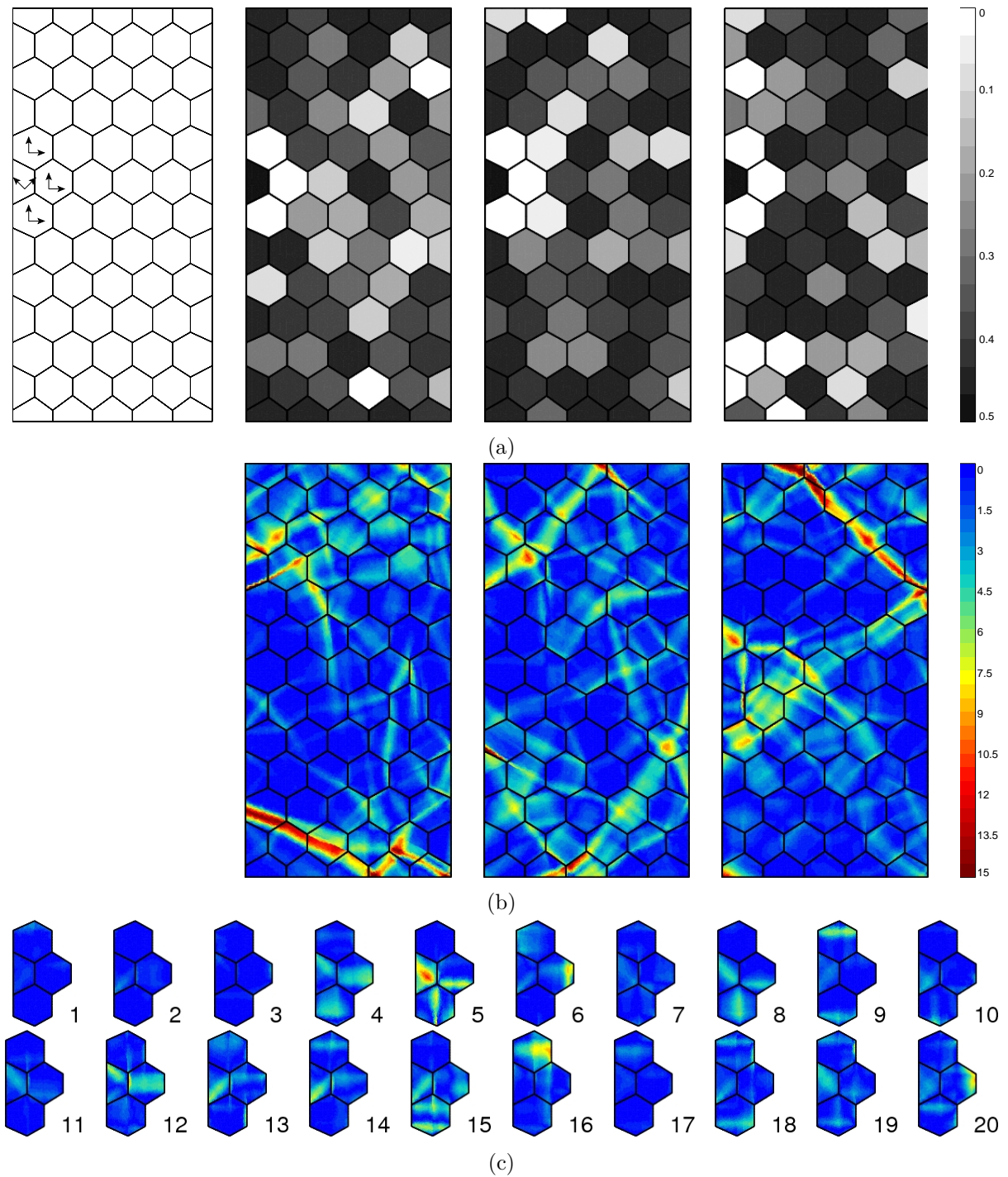


Fig. 2.9 – Cluster O-45-0 : Cartes d'isovaleurs correspondant à différentes réalisations. Cartes entières (a) du facteur de Schmid et (b) de la déformation plastique cumulée. (c) Cartes locales de la déformation plastique cumulée dans le cluster.

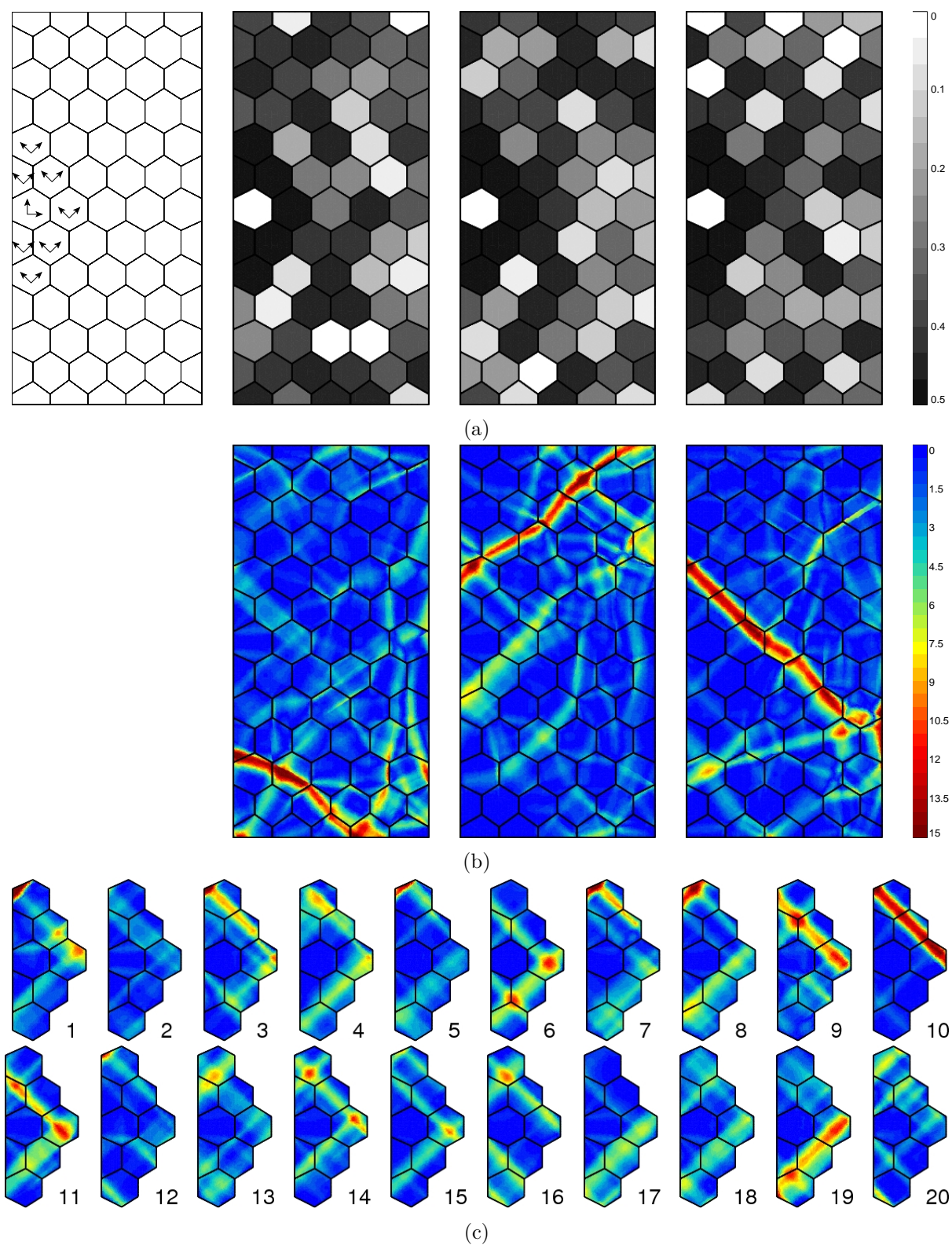


Fig. 2.10 – Cluster C-0-45 : Cartes d'isovaleurs correspondant à différentes réalisations. Cartes entières (a) du facteur de Schmid et (b) de la déformation plastique cumulée. (c) Cartes locales de la déformation plastique cumulée dans le cluster.

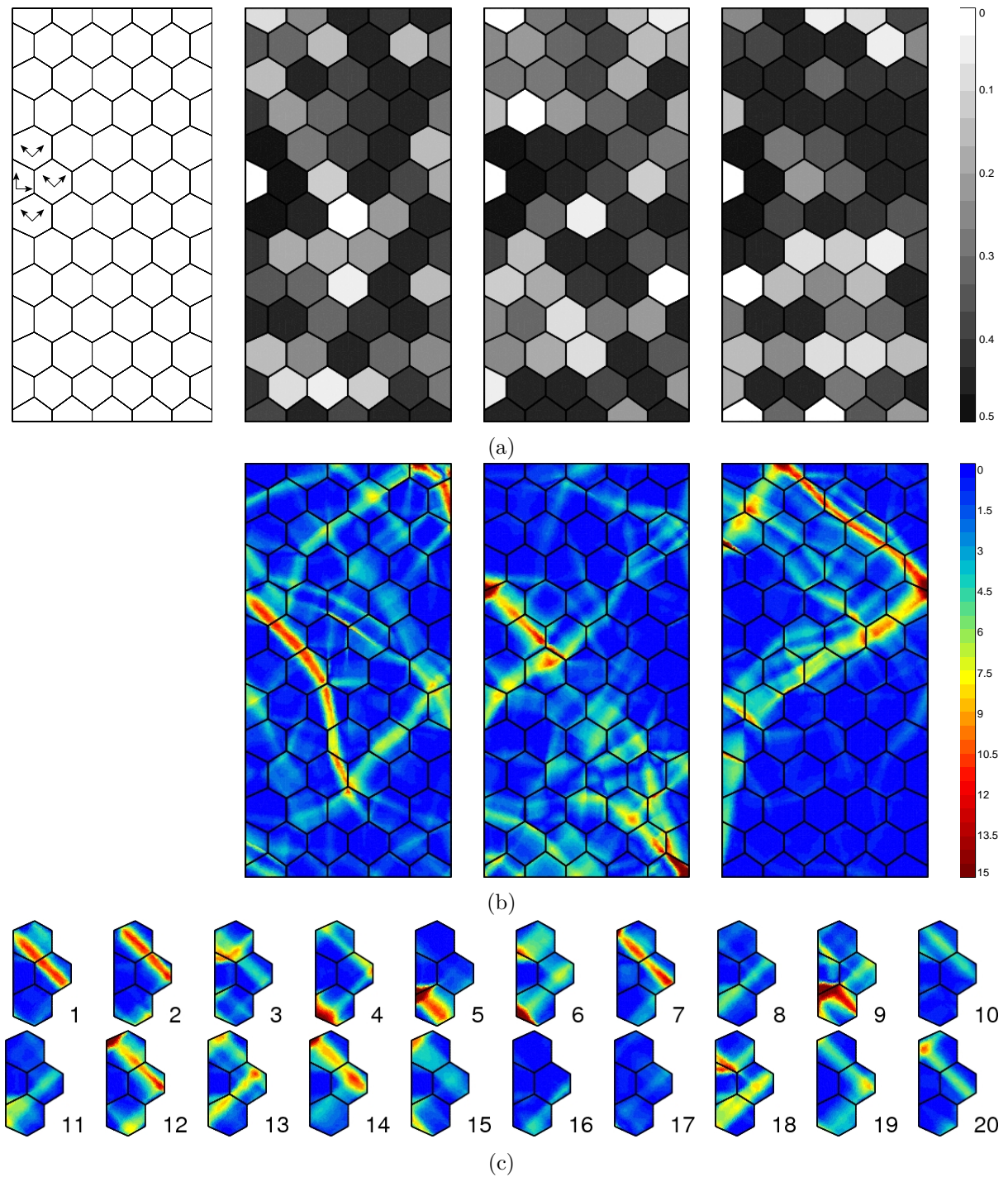


Fig. 2.11 – Cluster O-0-45 : Cartes d'isovaleurs correspondant à différentes réalisations. Cartes entières (a) du facteur de Schmid et (b) de la déformation plastique cumulée. (c) Cartes locales de la déformation plastique cumulée dans le cluster.

Cluster	Min	Moyenne	Max	Écart type
C-45-0	4.37e-02	3.68e+00	2.91e+01	2.71e+00
C-45-R	6.37e-03	3.19e+00	3.17e+01	2.82e+00
O-45-R	1.63e-02	2.43e+00	2.22e+01	2.52e+00
O-45-0	2.58e-02	1.85e+00	1.03e+01	1.43e+00
O-0-R	0.00e+00	1.01e+00	2.20e+01	1.94e+00
C-0-R	0.00e+00	8.95e-01	1.32e+01	1.24e+00
O-0-45	0.00e+00	7.51e-01	2.70e+01	1.69e+00
C-0-45	0.00e+00	2.79e-01	6.24e+00	5.18e-01

Tab. 2.5 – Données statistiques sur les valeurs de déformation plastique cumulée p aux points Gauss du grain central des différents clusters avec un chargement de $\Delta\varepsilon/2 = 2\%$.

encore l'effet de voisinage, le comportement d'un grain ne dépend donc pas uniquement de son orientation propre, mais aussi de celle de son voisinage.

Les figures 2.13b et 2.13a résument les données précédentes sous forme de distributions cumulées pour une comparaison directe. Le tableau 2.5 répertorie les données statistiques de la déformation plastique cumulée p pour tous les clusters étudiés. Ces données sont basées sur les valeurs aux points de Gauss du grain central. La désorientation forte dans les clusters de type *-45-0 amplifie la déformation plastique dans le grain central. Lorsque θ_2 est aléatoire, on obtient des valeurs plus dispersées comme en témoigne l'écart type calculé en tableau 2.5. Un classement par ordre de vulnérabilité peut donc être effectué :

$$C-0-45 < O-0-45 < C-0-R < O-0-R < O-45-0 < O-45-R < C-45-R < C-45-0$$

Concernant les phénomènes de localisation de la plasticité dans les clusters, on peut tirer les conclusions suivantes :

- la plasticité à l'échelle locale, *i.e.* au niveau des grains, est régie principalement par l'orientation cristalline du grain central des clusters, θ_1 ;
- la géométrie des grains (ouvert ou fermé) définit ensuite si le grain va imposer ou non son comportement. C'est le cas des grains fermés qui ont un comportement plus proche du monocristal. Au contraire, les grains ouverts subissent plus l'effet de voisinage ;
- fixer l'orientation de la première couronne des grains adjacents ne suffit pas à uniformiser la réponse mécanique d'un cluster lorsque la texture du reste de l'agrégat varie. Néanmoins, cela met en exergue l'effet de cluster.

Le premier paramètre influent est l'orientation cristalline du grain central θ_1 . Vient ensuite la géométrie du grain (ouvert ou fermé) et l'orientation de la première couronne θ_2 .

2.3.3 Multiaxialité locale

Nous nous sommes intéressés à l'état de contraintes des grains au sein des clusters. Les calculs réalisés ont révélé une forte multiaxialité des contraintes à l'échelle locale. Le tenseur moyen de contraintes dans le grain central des clusters a été calculé. L'évolution, au cours des 10 cycles, de la composante σ_{22} en fonction de σ_{11} est reportée en figure 2.14 pour les différents types de clusters (20 réalisations par type de cluster). La forme générale des graphes se rapproche d'un parallélogramme. Le premier constat est que pour un même cluster, l'état multiaxial de contraintes varie beaucoup dans le grain central. Dans la majorité des cas, la composante σ_{11} n'est pas négligeable devant σ_{22} . σ_{11} augmente rapidement sous l'effet des incompatibilités grain à grain. Il arrive même que les valeurs extrêmes de ces deux composantes soient équivalentes.

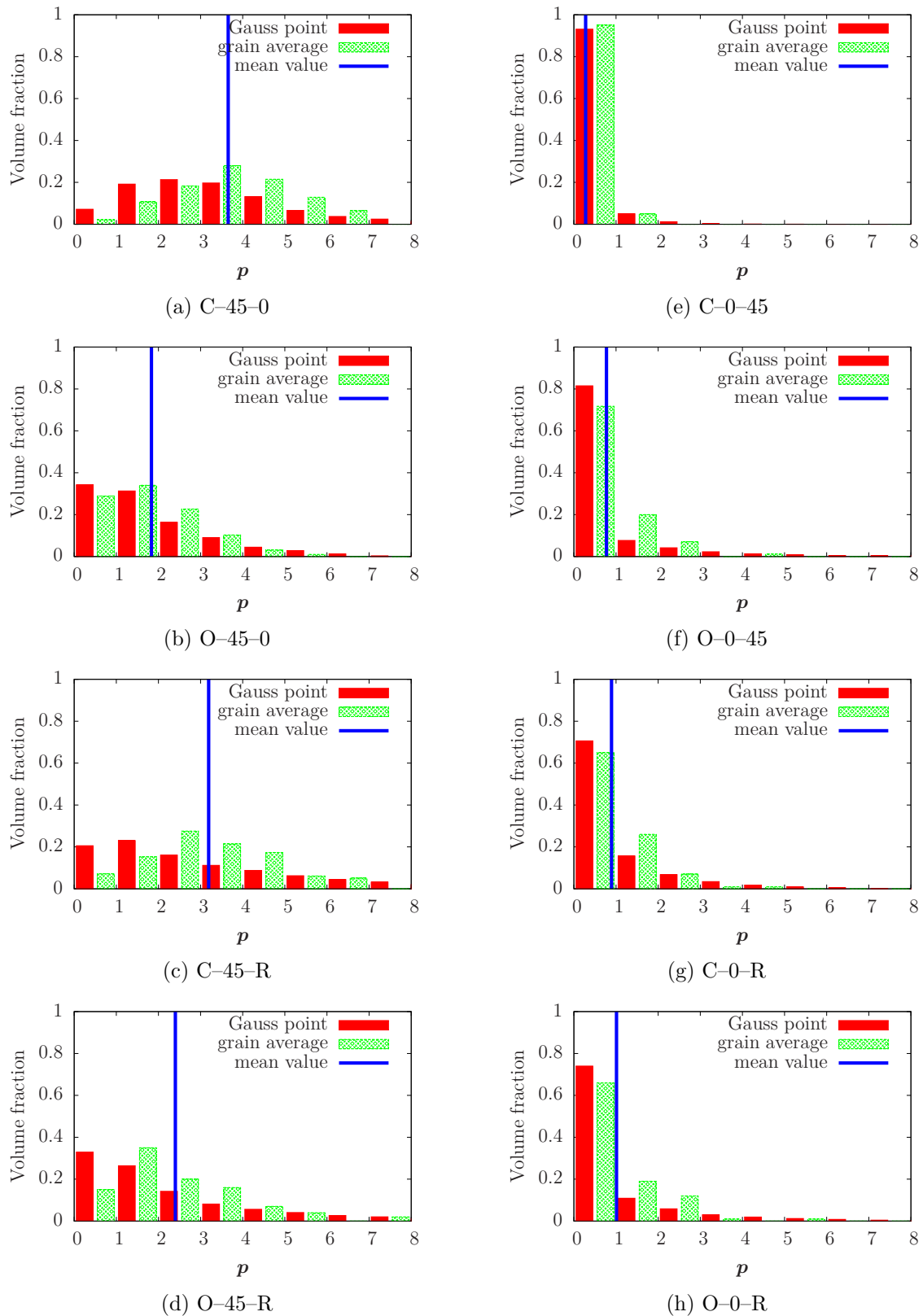


Fig. 2.12 – Distributions de la déformation plastique cumulée dans le grain central de différents clusters sous chargement de $\Delta\varepsilon/2 = 2\%$. Les données proviennent (a) des valeurs aux points de Gauss et (b) des moyennes par grains.

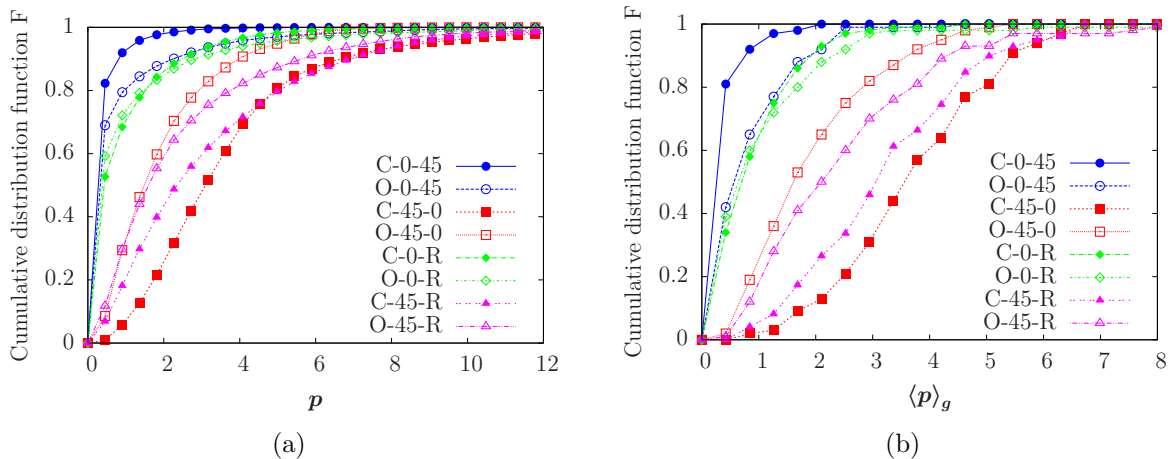


Fig. 2.13 – Fonctions de distribution cumulées de la déformation plastique cumulée pour différents clusters, basée sur les valeurs dans le grain central, (a) aux points de Gauss et (b) moyennées par grain.

L'organisation des figures est faite de façon à révéler les différences entre les clusters de type « grain mou entouré de grains durs » et inversement. On remarque que le rapport σ_{22}/σ_{11} est de signe opposé pour les grains mous et durs.

Résultats

Pour les grains mous (clusters *-45-* en figures 2.14a, 2.14b, 2.14c et 2.14d), le ratio σ_{22}/σ_{11} est positif et très proche de 1. Lorsque le chargement global est en phase de traction, le grain central subit des efforts de type traction dans la direction perpendiculaire à la direction de sollicitation. Peu de différences sont observées entre les clusters de type ouvert ou fermé, mise à part une plus forte dispersion dans la forme des parallélogrammes. On note aussi une bonne linéarité entre σ_{11} et σ_{22} dans les configurations de type *-45-0 qui s'estompe un peu pour les clusters de type *-45-R. Dans l'ensemble, l'état de contrainte est principalement régi par l'orientation propre du grain central.

Dans le cas d'un grain dur (clusters *-0-* en figures 2.14e, 2.14f, 2.14g et 2.14h), la forme des parallélogrammes varie beaucoup plus. Les pentes sont beaucoup plus dispersées mais restent proches de -1. En effet, ici lors de la phase de traction du chargement global, le grain central entre en compression suivant la direction 1. À la différence du paragraphe précédent, ici les résultats diffèrent largement si le grain central est ouvert ou fermé. Pour les grains ouverts, la composante σ_{11} reste très faible devant σ_{22} , alors qu'elles sont du même ordre de grandeur pour les grains fermés. Dans le cas des grains ouverts, l'effet de surface libre, *i.e.* de contrainte normale nulle à la surface, se ressent dans tout le grain. Alors que pour les grains fermés, la contrainte σ_{11} augmente rapidement dans la profondeur.

Modélisation schématique

Un modèle schématique est proposé en figure 2.15 pour expliquer la forme des graphes obtenus et la différence entre les cas *-45-* et *-0-*. On raisonne sur le même type de problème avec six éléments en déformations planes généralisées représentant le cluster. L'élément 0 est le grain central du cluster, entouré par cinq autres schématisant la première couronne de grain.

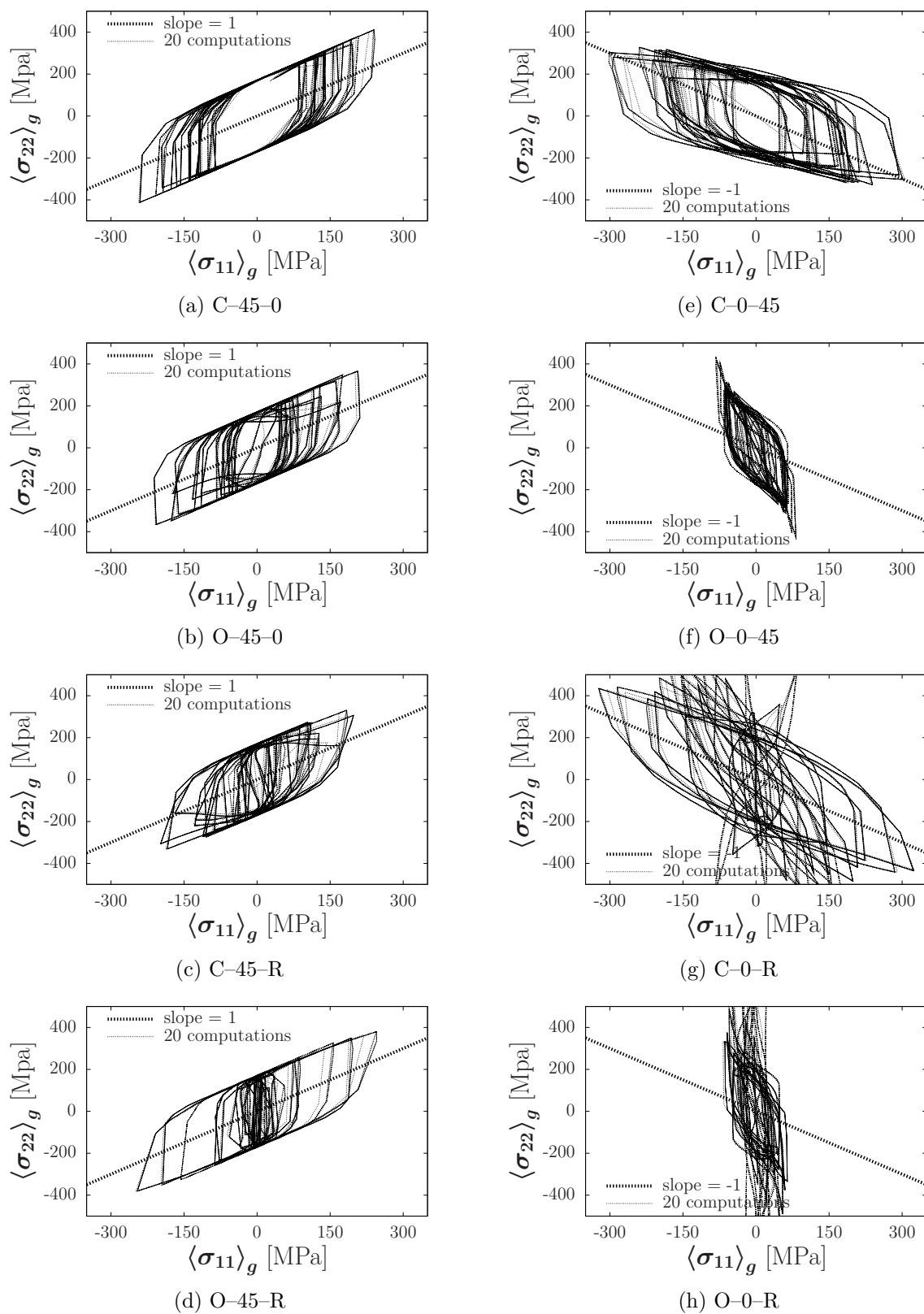


Fig. 2.14 – Multiaxialité σ_{22}/σ_{11} dans le grain central du cluster. À gauche les figures se rapportent aux grains mous, à droite aux grains durs.

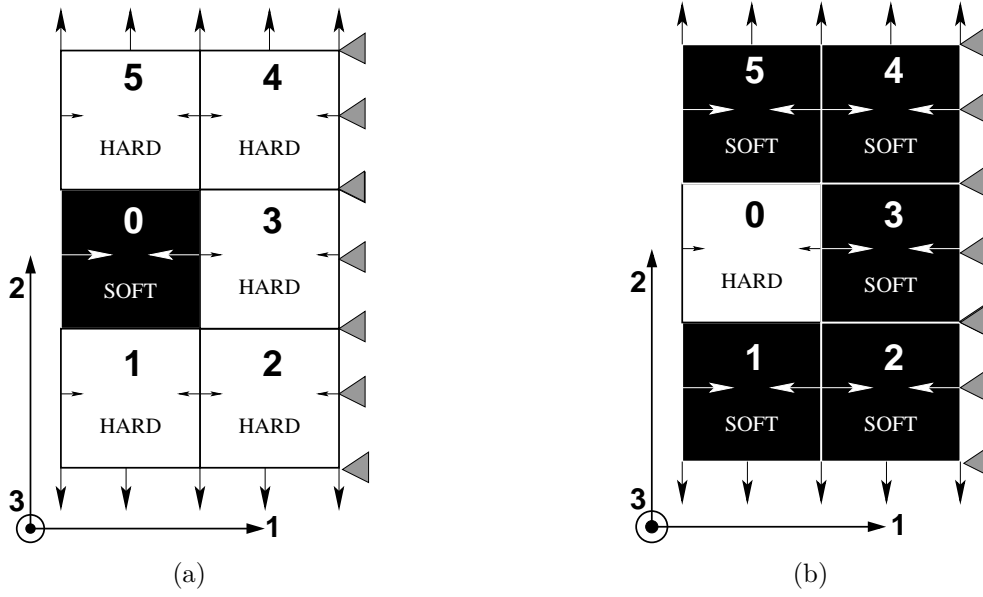


Fig. 2.15 – Modèle simplifié décrivant les différents états de contraintes sous chargement de traction en direction x_2 . σ_{11} en (a) traction dans les éléments mous et en (b) compression dans les éléments durs. Les flèches indiquent la déformation transverse dictée par la loi de comportement, la longueur des flèches est proportionnelle à l'intensité de la déformation.

Le grain central subit les déformations engendrées par son voisinage. Le champ de contrainte est considéré uniforme dans chaque élément, les limites de tous les éléments restent parallèles à leur position initiale. On applique un chargement de type pression sur les bords éléments du haut et du bas. Un comportement élastique, respectivement élastoplastique, est attribué aux grains durs, respectivement aux grains mous.

Dans le cas $*-45-0$, les grains 1 et 5 sont durs, *i.e.* élastiques, et ont une composante ε_{11} négligeable devant ε_{22} . L'état de contrainte-déformation dans le grain central s'approche de :

$$\underline{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \approx 0 & 0 & 0 \\ & \varepsilon & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ & \sigma_2 & 0 \\ & & \sim \sigma_1 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Le grain 0 est mou, *i.e.* élastoplastique, et « cherche » donc à se déformer préférentiellement dans la direction transverse (direction 1), mais les grains adjacents vont à l'encontre de cette tendance (cf. figure 2.15a). Le grain central se retrouve donc en traction dans la direction transverse. La surface de charge s'approche de $\sigma_1 - \sigma_2 = \sigma_y$, ce qui est cohérent avec la pente voisine de 1 obtenue dans la partie plastique de l'écoulement.

Pour le cas $*-0-45$, le même raisonnement est utilisé. Les grains adjacents suivent un comportement élastoplastique et se déforment plus dans la direction 1. Le grain central suit un comportement élastique et devrait, par effet Poisson, légèrement se déformer transversalement. Étant donné qu'il suit les déformations dictées par le voisinage, l'état de contrainte-déformation dans le grain central est :

$$\underline{\varepsilon} = \begin{pmatrix} -\varepsilon & 0 & 0 \\ & \varepsilon & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \underline{\sigma} = \begin{pmatrix} -\sigma & 0 & 0 \\ & \sigma & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

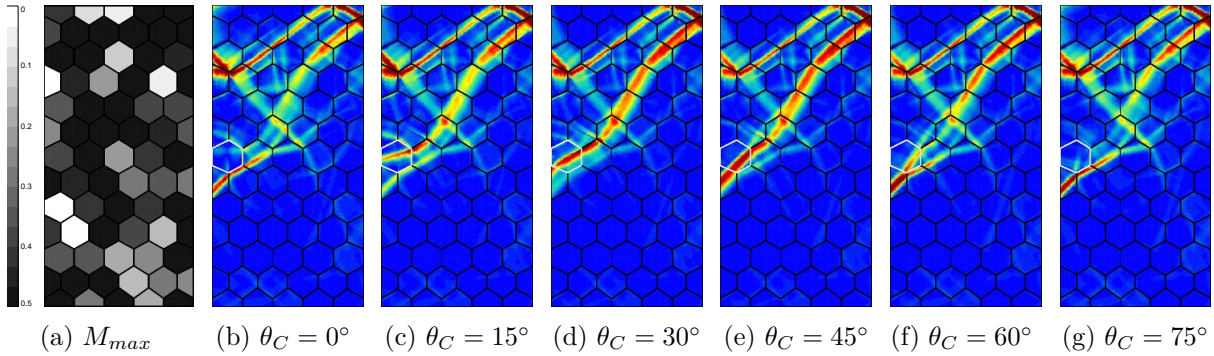


Fig. 2.16 – Cartes (a) du facteur de Schmid et (b-g) de déformation plastique cumulée pour différentes orientations du grain fermé (entouré en blanc).

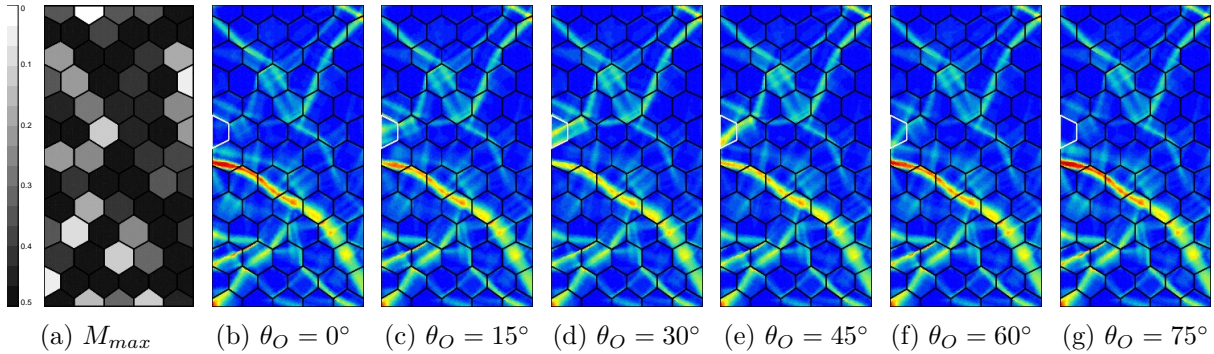


Fig. 2.17 – Cartes (a) du facteur de Schmid et (b-g) de déformation plastique cumulée pour différentes orientations du grain ouvert (entouré en blanc).

Contre nature, le grain central se retrouve comprimé par les grains voisins, d'où la pente négative.

2.4 Compléments sur l'étude 2D

2.4.1 Influence de l'orientation d'un grain sur le reste de l'agrégat

Jusqu'à maintenant, nous avons essentiellement étudié l'effet sur un grain, de la variation de la texture du reste de l'agrégat. L'intérêt de cette section est de traiter le problème inverse. Nous faisons donc varier uniquement l'orientation d'un grain en surface pour observer les répercussions sur les premières couronnes de grains adjacents et sur le reste de l'agrégat.

Les figures 2.16 et 2.17 montrent, chacune pour une texture donnée, les cartes d'isovaleurs de déformation plastique cumulée avec différentes orientations pour le grain fermé et ouvert en surface. On constate dans un premier temps que cette variation a un impact dans des zones localisées jusqu'à quelques rangées de grains. Dans le premier cas, la bande de localisation de déformation plastique qui traverse l'agrégat s'intensifie lorsque l'orientation du grain s'approche de 45° (cf. figure 2.16e). Dans le second, lorsque θ s'approche de 45°, une nouvelle zone de localisation se crée au niveau du grain ouvert, ce qui diminue la localisation dans la bande de localisation traversant l'agrégat.

Trois textures différentes ont été testées. Comme précédemment, on procède à la fois sur un grain ouvert et sur un grain fermé. L'impact de l'orientation du grain est étudié sur deux couronnes de grains. La nomenclature des grains concernés est expliquée en figures 2.18a et 2.18b. La variation de déformation plastique moyenne dans les grains des deux premières couronnes sont reportées en fonction de l'orientation du grain (cf. figure 2.18). Premièrement, c'est le grain lui-même qui est le plus affecté par sa variation d'orientation. Ensuite, ce n'est pas forcément l'orientation à 45° qui entraîne le plus de plasticité dans ce grain.

Une redistribution de la plasticité est donc constatée : si le grain devient plus mou, il subit plus de déformation plastique et soulage une partie des grains voisins. D'autres grains plastifient plus par la création de chemins (ou d'assemblages) de grains mous faiblement désorientés dans lesquels la plasticité se localise. L'ampleur de la variation de déformation plastique est assez variable. Elle ne dépend pas, à première vue, de la forme du grain, *i.e.* qu'il soit ouvert ou fermé.

Un assemblage de grains plutôt mous, alignés en diagonale et avec une faible désorientation créant un chemin de propagation, peut donc être critique. Cependant, un phénomène d'écrantage peut apparaître si un grain mou, situé à quelques rangées, vient subir une partie de la déformation plastique et limiter la localisation dans le « chemin » des grains mous.

2.4.2 Calculs sur agrégats 2D bruités

L'influence de la géométrie du grain en surface, ouvert ou fermé, a été étudié dans ce chapitre. Cependant, les grains fermés sont deux fois plus volumineux que les grains ouverts. Afin de s'assurer que c'est bien un effet géométrique et non un effet de taille, les calculs sur agrégats aléatoires ont été réalisés à nouveau sur des maillages « bruités ».

Pour chacun des 800 calculs, un nouveau maillage a été construit à partir d'une décomposition de Voronoï. On se base sur les positions initiales des germes identiques à celles du maillage classique à grains hexagonaux réguliers, auxquelles on ajoute un bruit. Cette fois, au lieu de conserver une forme et une taille de grain homogène dans l'agrégat, on obtient des formes moins régulières et des tailles de grains plus variables (cf. figure 2.19).

La déformation plastique cumulée moyenne et son écart type par intervalle d'orientation sont reportés en fonction de l'orientation en figure 2.20. La comparaison avec les résultats sur l'agrégat formé de grains hexagonaux réguliers (figure 2.4, page 53) ne montre pas de différences notables. Les mêmes tendances sont observées :

- valeurs plus élevées en surface, avec aussi plus de dispersion ;
- effet de voisinage plus prononcé à cœur.

En revanche, les différences entre grains ouverts et fermés s'estompent, étant donnée la perturbation de leur forme par le bruit.

Perturber la forme des grains nous permet de disposer de résultats pour différentes tailles de grains. Les distributions de taille des grains de surface et à cœur sont présentées en figure 2.21a. Une plage importante de taille de grain est donc traitée. Les tailles des grains en surface suivent deux modes dus aux grains ouverts et fermés. Bien que leur forme soit modifiée par rapport au maillage « en nid d'abeilles », ils restent proches de cette forme initiale.

À partir de ces données, nous pouvons étudier l'influence de la taille de grain couplée à l'orientation cristallographique. La figure 2.21b montre la valeur moyenne de déformation plastique en fonction de l'orientation et du volume du grain. On observe une certaine linéarité de la courbe $p = f(\theta)$ lorsque le volume du grain V_g varie. L'influence de la taille de grain n'est donc pas caractérisée en moyenne. Il n'est cependant pas exclu qu'il y ait une influence sur la dispersion des valeurs à l'échelle locale. Nous concluons donc que la différence entre les grains ouverts et fermés est essentiellement due à leur forme et non à leur taille.

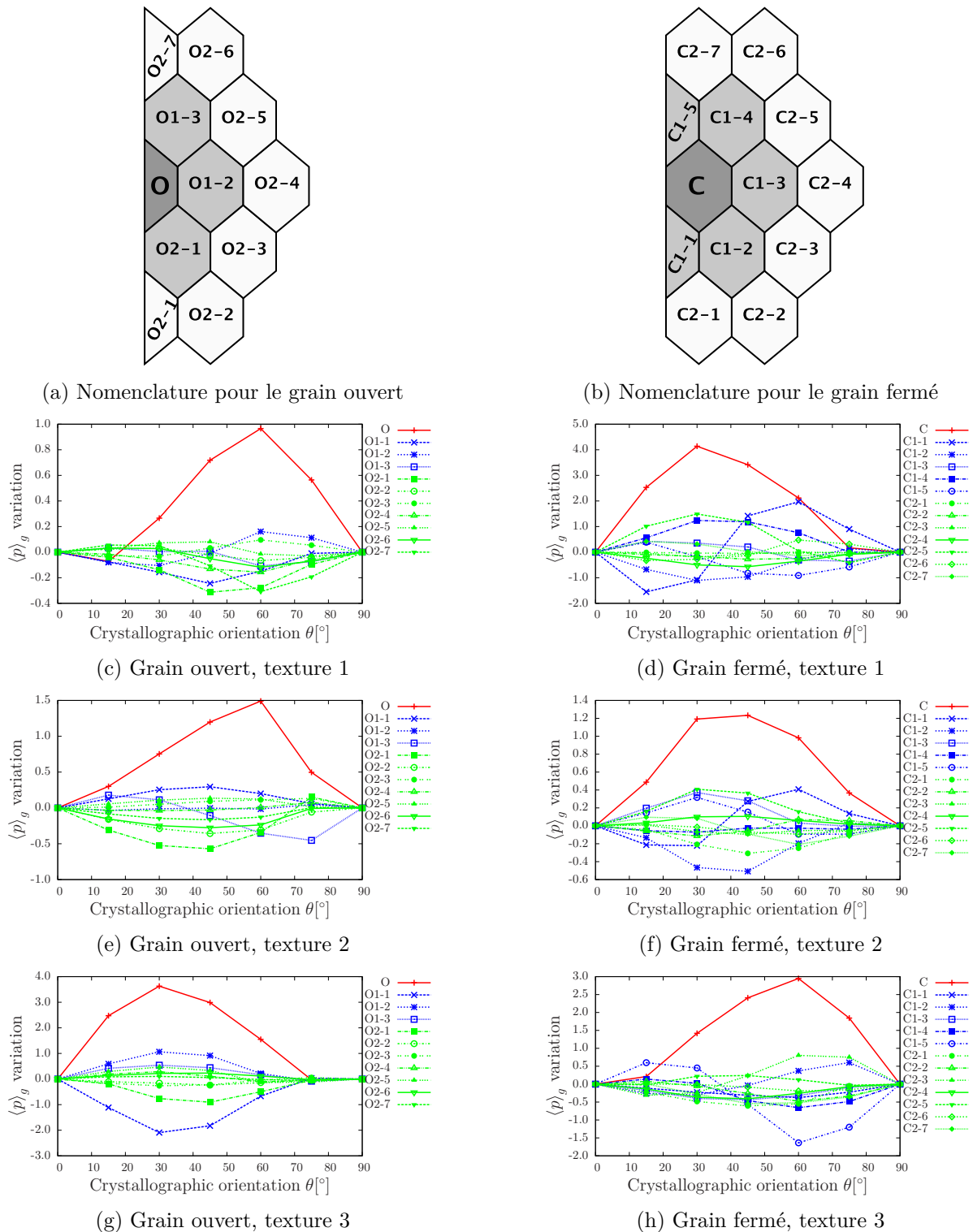


Fig. 2.18 – Variation de la déformation plastique cumulée moyenne $\langle p \rangle_g$ dans les grains adjacents en fonction de l'orientation du grain C (fermé) ou O (ouvert). Les couronnes de grains sont réunies par couleur. La variation est calculée en se basant sur le résultat obtenu pour une orientation à $\theta = 0$.

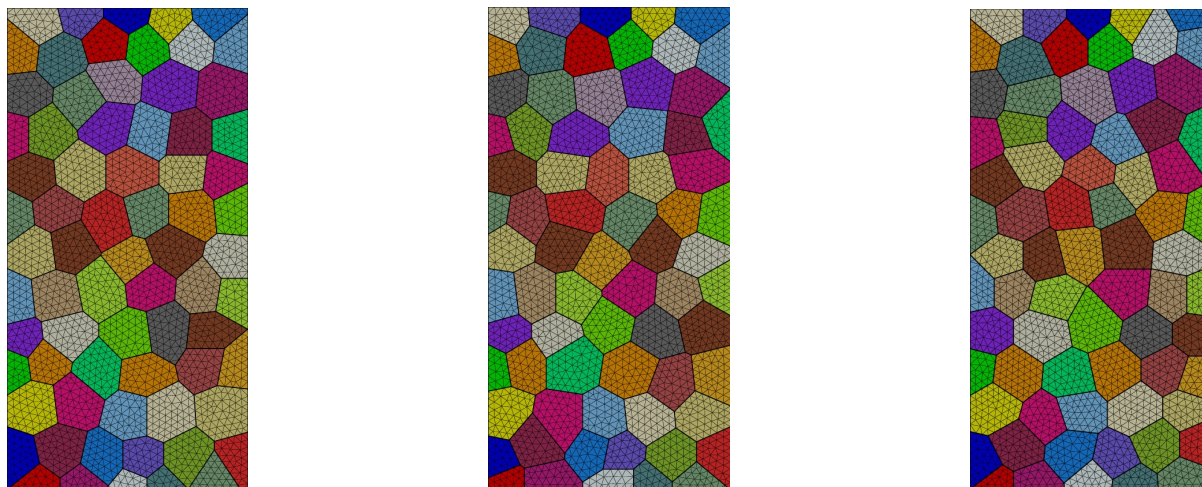


Fig. 2.19 – Exemples de maillages d'agrégat 2D bruités.

2.5 Résumé

Par l'utilisation d'un modèle de plasticité cristalline simplifié appliqué à un problème 2D, nous avons pu étudier un grand nombre de configurations d'orientation à différents niveaux de chargements cycliques. L'analyse statistique menée sur la base des résultats obtenus sur des agrégats aléatoires et sur les clusters ont permis de mettre en évidence l'effet de voisinage ou l'effet de cluster. La réponse mécanique d'un grain et la vulnérabilité à la fatigue qui en découle ne sont pas uniquement liées à son orientation cristalline propre. En effet, l'orientation des grains adjacents peut être source de déviation des sollicitations au niveau local ou source d'incompatibilités de déformation élastique et/ou plastique au niveau des joints de grains. Pour prédire l'amorçage de fissure à l'échelle des grains, il ne faut donc pas uniquement considérer les paramètres intrinsèques d'un grain mais aussi ceux de son voisinage.

Il a également été montré que les grains en surface plastifient plus que les grains à cœur. Cet effet est d'autant plus marqué à faible amplitude de chargement.

Une importante multiaxialité locale a également été révélée à l'échelle des grains, notamment en présence de fortes désorientations dans les clusters.

La forme des grains en surface semble jouer un rôle dans leur comportement. D'une certaine manière elle conditionne leur tendance à se comporter comme un monocristal ou comme un grain baignant dans la matrice.

Compte tenu de toutes ces observations, il faut garder à l'esprit que la simplicité du modèle utilisé dans ce chapitre, en regard de la complexité géométrique et physique du problème réel, implique que nos conclusions mettent en lumière des pistes qu'il convient d'explorer par une étude plus fine. Il est nécessaire de passer à une modélisation tridimensionnelle pour prendre en compte le voisinage dans toutes les directions de l'espace, pouvoir calculer les projections du glissement sur la surface et obtenir la hauteur et l'orientation des intrusions/extrusions en surface.

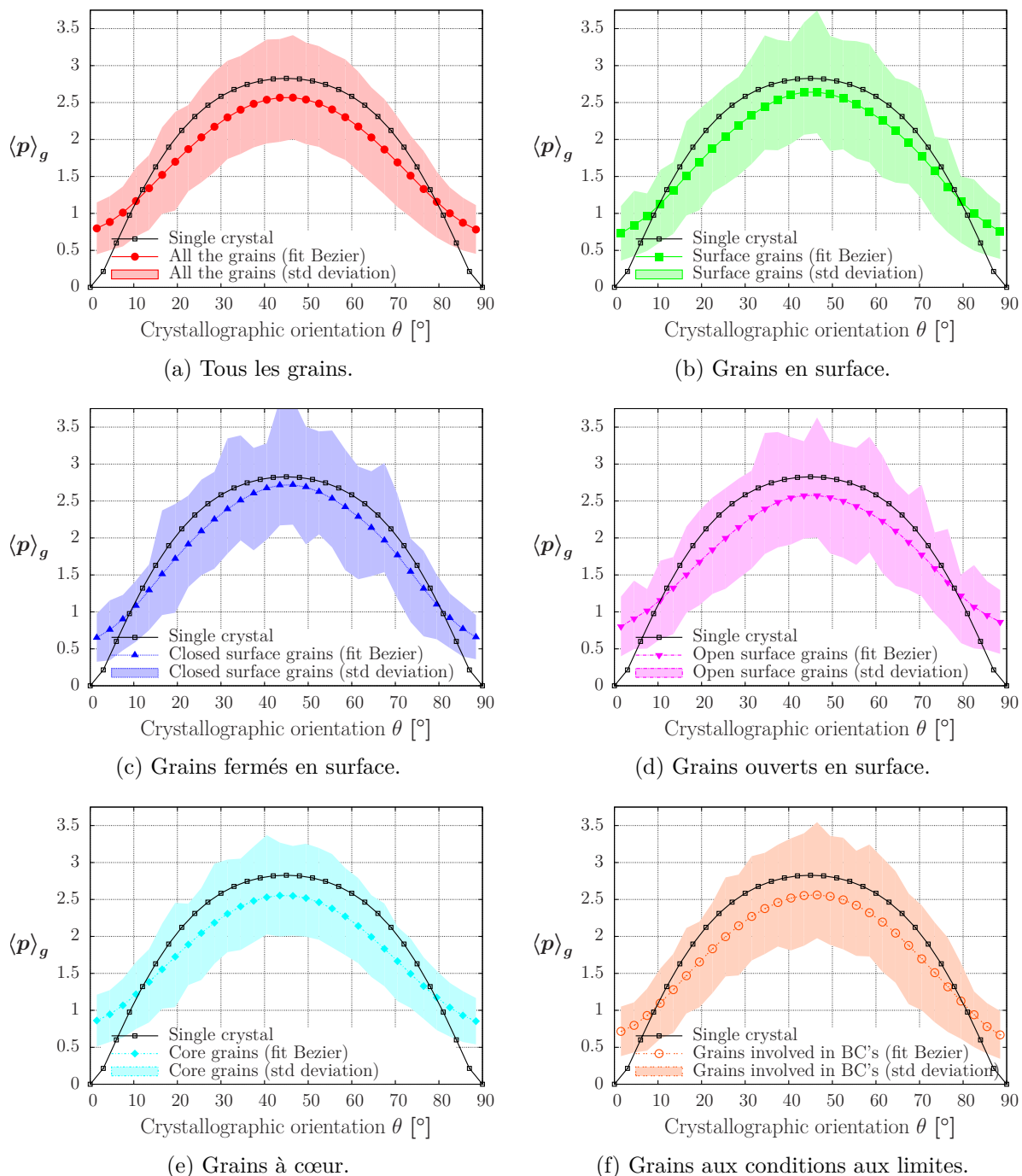


Fig. 2.20 – Comportement plastique de différents types de grains en fonction de l'orientation cristallographique sur la base de calculs avec maillages bruités.

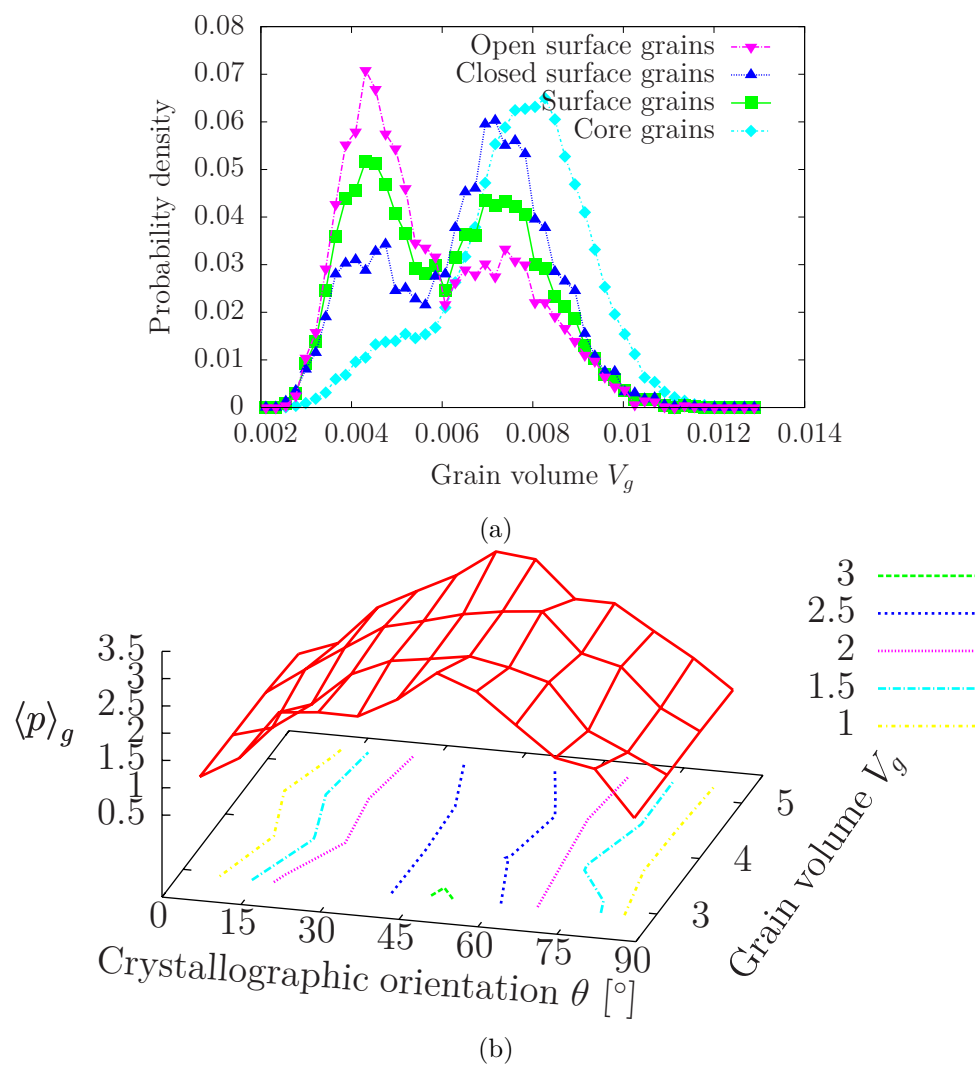


Fig. 2.21 – (a) Distribution des tailles de grain dans l'ensemble des 800 agrégats bruités. (b) Plasticité cumulée en fonction de l'orientation et du volume du grain.

Chapitre 3

Étude d'un agrégat polycristallin tridimensionnel

Sommaire

3.1	Identification des paramètres du modèle sur l'acier 316L	78
3.1.1	Matrice d'élasticité	78
3.1.2	Modèle de comportement monocristallin	78
3.1.3	Modèle de transition d'échelle	81
3.1.4	Méthodologie	82
3.1.5	Résultats	82
3.2	Mise en place des calculs	84
3.2.1	Maillage	84
3.2.2	Conditions aux limites	84
3.2.3	Parallélisation du calcul	85
3.2.4	Paramètres et variables étudiés	86
3.3	Résultats et discussion	88
3.3.1	Effet de la densité du maillage	88
3.3.2	Effet du type de chargement	93
3.3.3	Analyse statistique	102
3.3.4	Analyse dans le triangle standard	106
3.4	Résumé	109

Nous présentons dans ce chapitre la mise en place et les résultats de la modélisation 3D du problème. La problématique de l'amorçage et micropropagation des fissures courtes est intrinsèquement tridimensionnelle, car elle dépend de l'orientation cristalline et de l'agencement des grains dans le polycristal.

Le but est ici d'obtenir une information volumique sur la localisation de la déformation plastique dans l'agrégat en utilisant des conditions aux limites « classiques ». L'aspect tridimensionnel apportera plus de détails sur l'orientation et la hauteur des PSM en surface du polycristal suivant les types de chargement. Cela apporte aussi des informations locales plus riches à dépouiller, ce qui nous amènera à utiliser et développer différents post-traitements spécifiques. Les grains ne se définissent plus uniquement comme « mous » ou « durs », comme dans l'étude en deux dimensions, mais plutôt par le facteur de Schmid, leur position dans le triangle standard et leur désorientation cristalline avec leurs voisins.

Nous débuterons par l'identification des paramètres de notre loi de comportement sur des données d'essais de fatigue. Ensuite, nous présenterons en détail la mise en place des calculs

Coefficient	C_{1111}	C_{1122}	C_{1212}
Valeur [MPa]	197 000	125 000	122 000

Tab. 3.1 – Valeurs des coefficients de la matrice d'élasticité cubique pour l'acier 316L, d'après Huntington [25].

avec leur parallélisation. Enfin, nous étudierons les résultats des calculs suivant différents axes :

- effet de la densité du maillage
- influence du chargement
- influence de l'orientation d'un point de vue statistique sur un chargement uniaxial

3.1 Identification des paramètres du modèle sur l'acier 316L

3.1.1 Matrice d'élasticité

L'acier 316L est principalement constitué de grains austénitiques. Cela correspond à la phase $Fe\gamma$ qui comporte un réseau cristallin de type CFC (Cubique à Faces Centrées). Le comportement élastique local est donc caractérisé par une matrice d'élasticité de type cubique. Cette matrice d'élasticité, utilisée dans les calculs EF d'agrégats polycristallins, est définie dans la base cristalline ($[100]$, $[010]$, $[001]$) par trois coefficients C_{1111} , C_{1122} et C_{1212} .

$$\underset{\approx}{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1111} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1122} & C_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Ces coefficients sont donnés par Huntington [25] et répertoriés dans le tableau 3.1, il n'est donc pas nécessaire de les identifier.

3.1.2 Modèle de comportement monocristallin

Le comportement plastique de chaque grain est régi par le modèle de monocristal de Méric–Cailletaud [86] présenté en détail dans la section 1.3.1. Nous nous contentons de rappeler les équations de comportement du modèle. La surface de charge, basée sur la cission résolue τ^s est calculée pour chaque système s à partir du tenseur de contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ et du tenseur d'orientation \boldsymbol{m}^s . L'expression du taux de glissement plastique de chaque système fait intervenir une loi d'écoulement viscoplastique de type Norton et comporte un terme d'écrouissage isotrope r^s et

un terme d'écroissage cinématique x^s .

$$\dot{\underline{\xi}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{m}^s \quad (3.2)$$

$$\tau^s = \underline{\sigma} : \underline{m}^s \quad (3.3)$$

$$\underline{m}^s = \frac{1}{2}((\underline{l}^s \otimes \underline{n}^s) + (\underline{n}^s \otimes \underline{l}^s)) \quad (3.4)$$

$$\dot{\gamma}^s = v^s \text{sign}(\tau^s - x^s) \dot{v}^s \quad (3.5)$$

$$\dot{v}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - \tau_0 - r^s}{K} \right\rangle^n \quad \text{avec} \quad \langle x \rangle = \begin{cases} x & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

$$\dot{\gamma}^s = \text{sign}(\tau^s - x^s) \dot{v}^s \quad (3.7)$$

Les lois d'évolutions des écroissages sont non linéaires à saturation et font intervenir la matrice d'interaction \underline{h} :

$$x^s = c\alpha^s \quad (3.8)$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\alpha^s \dot{v}^s \quad (3.9)$$

$$r^s = bQ \sum_r h_{sr} \rho^r \quad (3.10)$$

$$\dot{\rho}^s = (1 - b\rho^s) \dot{v}^s \quad (3.11)$$

Les équations (3.10) et (3.11) peuvent se rassembler en une seule :

$$r^s = Q \sum_r h_{sr} (1 - e^{-bv^r}) \quad (3.12)$$

Comme mentionné précédemment, l'acier 316L est constitué de grains austénitiques dont le réseau cristallin est de type CFC. Les systèmes de glissement associés correspondent aux plans et directions atomiques les plus denses. Ici, il s'agit des systèmes de glissement octaédriques, caractérisés par les plans de type $\{111\}$ et les directions de type $\langle 110 \rangle$. Ces systèmes, illustrés par la figure 1.12b (cf. section 1.2.2), sont listés selon la numérotation dans le code Zebulon et la notation de Boas dans le tableau 1.1.

La matrice d'interaction \underline{h} , proposée par Franciosi [26, 152], pour le réseau CFC fait intervenir 6 coefficients, qui sont décrits plus précisément dans [153]. Une brève description de chaque type d'interaction est donnée en se basant sur le système n°1 (B4 en notation de Boas, cf. tableau 1.1), le nombre entre parenthèses correspond au nombre d'interactions de ce type pour un seul système :

h_1 : Auto-écroissage (1 système : B4)

Ce coefficient représente l'auto-écroissage des systèmes de glissement sur eux-mêmes. On parle aussi d'interaction dipolaire.

h_2 : Interaction coplanaire (2 systèmes : B2 et B5)

Il s'agit des interactions entre systèmes de même plan.

h_3 : Jonction de Hirth (2 systèmes : C3 et B3)

Cela représente l'interaction entre les systèmes dont les vecteurs de Burgers (*i.e.* les directions de glissement) sont orthogonaux.

h_4 : Interaction colinéaire (un système : D4)

Interaction entre un système de glissement et son système dévié, *i.e.* de même direction mais de plan différent.

Identification par Dynamique Discrète des Dislocations

Auteur	Année	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	Matériau
Madec [107]	2003			0,051	1,265	0,075	0,084	
Devincre [156]	2006			0,045	0,625	0,137	0,122	Cuivre
Monnet [154]	2009	0,124	0,124	0,07	0,625	0,137	0,122	Acier 316L

Identification par méthode inverse sur le modèle physique de Tabourot [80]

Auteur	Année	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	Données
Gérard [20]	2008	0,025	0,01	0,04	14,3	0,6	0,5	Polycristaux de cuivre

Identification par méthode inverse sur le modèle phénoménologique de Méric–Cailletaud [86]

Auteur	Année	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	Données
Méric [157]	1994	1	4,4	4,75	4,75	4,75	5	Monocristaux de cuivre
Gérard [20]	2008	1	1	0,2	90	3	2,5	Polycristaux de cuivre

Tab. 3.2 – Récapitulatif des résultats de plusieurs études numériques visant à déterminer les coefficients de la matrice d'interaction \underline{a} ou \underline{h} pour le réseau CFC.

h_5 : Jonction glissile (4 systèmes : A2, C5, D1 et D6)

Il s'agit des systèmes partagent le même plan de glissement que le système dévié du système en question et des systèmes déviés des systèmes coplanaires.

h_6 : Verrous de Lomer (2 systèmes : A6 et C1)

Les systèmes faisant intervenir ce type d'interaction ont leur système dévié dans le même plan de glissement.

La forme de la matrice d'interaction des réseaux cristallins de type CFC est décrite dans le tableau 3.3. L'identification des coefficients h_i a fait l'objet de récents travaux numériques. D'une part avec une approche physique, en passant par la Dynamique Discrète des Dislocations [109, 154], d'autre part avec une approche plus phénoménologique, alliant calculs d'agrégats et modèles d'homogénéisation [20, 155]. Les résultats de ces études sont répertoriés dans le tableau 3.2. Étant donné que les modèles utilisés diffèrent pour chacune de ces études, il n'y a pas d'analogie directe entre les coefficients h_i et a_i . Les modèles physiques font appel à une loi d'écroutissage de forme quadratique proposée par Franciosi *et al.* [152]. L'évolution de la cission critique est définie comme suit :

$$\tau_c^{sr} = \alpha \mu b \sqrt{\sum_p a^{sr} \rho^r} \quad (3.13)$$

où μ est le module de cisaillement, b la norme du vecteur de Burgers et α un paramètre adimensionnel. On déduit de cette équation que h_i est proportionnel à a_i^2 .

On peut souligner les difficultés rencontrées pour identifier ces coefficients tant par les méthodes expérimentales que numériques. Les valeurs identifiées restent donc critiquables. Les conclusions principales de ces travaux permettent plus particulièrement de classer l'importance de chaque type d'interaction dans le phénomène d'écroutissage du matériau. Notamment, le rôle des interactions de type colinéaire a été caractérisé comme prépondérant [20, 154].

Étudier l'influence de cette matrice ne fait pas partie de nos objectifs. La plupart des études numériques réalisées sur les polycristaux l'ont considérée soit diagonale soit pleine [80]. Nous

Système	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6	n_s/l_s
A2	h_1	h_2	h_2	h_4	h_5	h_5	h_3	h_5	h_6	h_3	h_6	h_5	$(\bar{1}11)[0\bar{1}1]$
A3		h_1	h_2	h_5	h_3	h_6	h_5	h_4	h_5	h_6	h_3	h_5	$(\bar{1}11)[101]$
A6			h_1	h_5	h_6	h_3	h_6	h_5	h_3	h_5	h_5	h_4	$(\bar{1}11)[110]$
B2				h_1	h_2	h_2	h_3	h_6	h_5	h_3	h_5	h_6	$(111)[0\bar{1}1]$
B4					h_1	h_2	h_6	h_3	h_5	h_5	h_4	h_5	$(111)[\bar{1}01]$
B5						h_1	h_5	h_5	h_4	h_6	h_5	h_3	$(111)[\bar{1}10]$
C1							h_1	h_2	h_2	h_4	h_5	h_5	$(11\bar{1})[011]$
C3								h_1	h_2	h_5	h_3	h_6	$(11\bar{1})[101]$
C5			<i>sym</i>						h_1	h_5	h_6	h_3	$(11\bar{1})[\bar{1}10]$
D1										h_1	h_2	h_2	$(1\bar{1}1)[011]$
D4											h_1	h_2	$(1\bar{1}1)[\bar{1}01]$
D6												h_1	$(1\bar{1}1)[110]$

Tab. 3.3 – Matrice d'interaction pour les réseaux cristallins de type CFC [26].

Coefficient	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6
Valeur	1	1	0,6	12,3	1,6	1,3

Tab. 3.4 – Valeurs choisies pour les coefficients de la matrice d'interaction.

nous contentons de travailler avec un jeu de coefficients « consensuel ». Il a donc été choisi de définir les coefficients h_i comme un « compromis » entre les résultats découlant des études citées précédemment. Ces valeurs sont répertoriées dans le tableau 3.4.

La loi explicitée dans cette section décrit le comportement local d'un monocristal, qui est fortement anisotrope. Pour l'identifier directement, il faudrait disposer de résultats d'essais sur des monocristaux. Les données expérimentales proviennent d'essais réalisés à l'échelle macroscopique sur le matériau polycristallin lors de campagnes d'essais effectués par EDF sur le 316L [158]. Le comportement macroscopique du 316L est très proche d'un matériau isotrope. Il faut donc identifier les paramètres de la loi de comportement sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER). Pour cela, il faut réaliser une transition d'échelle entre le comportement d'un grain isolé (monocristal anisotrope) et le VER (polycristal isotrope).

3.1.3 Modèle de transition d'échelle

La transition d'échelle entre le monocristal et le polycristal peut être assurée par des modèles à champs moyens, basés sur le problème d'inclusion formulé par Eshelby [93]. Notre identification s'appuie sur les modèles de Berveiller–Zaoui (BZ) [95] et Cailletaud–Pilvin (règle en β) [97, 99, 101] déjà présentés en section 1.3.2. Nous rappelons donc les équations du modèle BZ :

$$\boldsymbol{\sigma}^i = \boldsymbol{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)\alpha(\boldsymbol{E}^p - \boldsymbol{\xi}^{p,i}) \quad (3.14)$$

$$\beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \quad (3.15)$$

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + \mu \frac{3E_{mises}^p}{2\Sigma_{mises}} \quad (3.16)$$

où E_{mises}^p et Σ_{mises} sont les valeurs équivalentes au sens de von Mises des tenseurs macroscopiques de déformation plastique \boldsymbol{E}^p et de contraintes $\boldsymbol{\Sigma}$.

Module	E	ν	μ
Valeur	190 000	0,3	70 000
Unité	MPa		MPa

Tab. 3.5 – Valeurs des modules d'élasticité isotrope de l'acier.

Nous rappelons également les équations de la règle en β :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}^i) \quad (3.17)$$

$$\beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \quad (3.18)$$

$$\underline{\underline{B}} = \sum_i f_i \underline{\underline{\beta}}^i \quad (3.19)$$

$$\underline{\underline{\dot{\beta}}}^i = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{p,i} - D \underline{\underline{\beta}}^i \underline{\underline{\varepsilon}}_{eq}^{p,i} \quad (3.20)$$

où $\underline{\underline{\beta}}^i$ est la variable tensorielle d'accommodation, ν est le coefficient de Poisson, μ le module de cisaillement du matériau et D un paramètre matériau dépendant de la microstructure.

Les propriétés élastiques du milieu infini sont définies à partir des modules d'élasticité isotrope de l'acier, répertoriées dans le tableau 3.5. Le seul paramètre à identifier pour la transition d'échelle est D .

3.1.4 Méthodologie

Une première approximation des paramètres est obtenue à l'aide du modèle de Berveiller–Zaoui [95]. Ce dernier ne nécessite aucune identification de paramètre de transition d'échelle et donne de bons résultats sur des chargements monotones radiaux. On réalise donc un premier recalage avec le modèle BZ sur la courbe de traction monotone jusqu'à $\varepsilon = 1$ %.

L'identification est ensuite réalisée par méthode inverse en se basant sur la traction monotone jusqu'à 1 % de déformation et sur les cycles stabilisés des essais de fatigue. Nous faisons l'hypothèse que le 10^e cycle simulé correspond au cycle stabilisé expérimental. Les structures de localisation de déformation plastique se mettant en place très rapidement dans les calculs d'agrégats polycristallins, il suffit de simuler quelques cycles pour obtenir des résultats qualitatifs pertinents quant aux configurations critiques. De plus, il reste très difficile, au niveau numérique, de réaliser 10 cycles dans un calcul EF d'agrégats avoisinant le million de DDL¹.

3.1.5 Résultats

Les paramètres identifiés et les courbes résultantes sont présentés respectivement dans le tableau 3.6 et en figure 3.1. On observe une très bonne concordance pour la traction et les faibles amplitudes.

1. DDL : Degré De Liberté.

Loi	Élasticité cubique			Plasticité cristalline						
Paramètre	C_{1111}	C_{1122}	C_{1212}	τ_0	K	n	Q	b	c	d
Valeur	197 000	125 000	122 000	40	12	11	10	3	40 000	1 500
Unité	MPa	MPa	MPa	MPa	MPa.s ⁻ⁿ		MPa		MPa	

Loi	Matrice d'interaction						Transition d'échelle			
Paramètre	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	E	ν	μ	D
Valeur	1	1	0,6	12,3	1,6	1,3	190 000	0,3	70 000	192
Unité							MPa		MPa	

Tab. 3.6 – Valeurs des paramètres issus de l'identification.

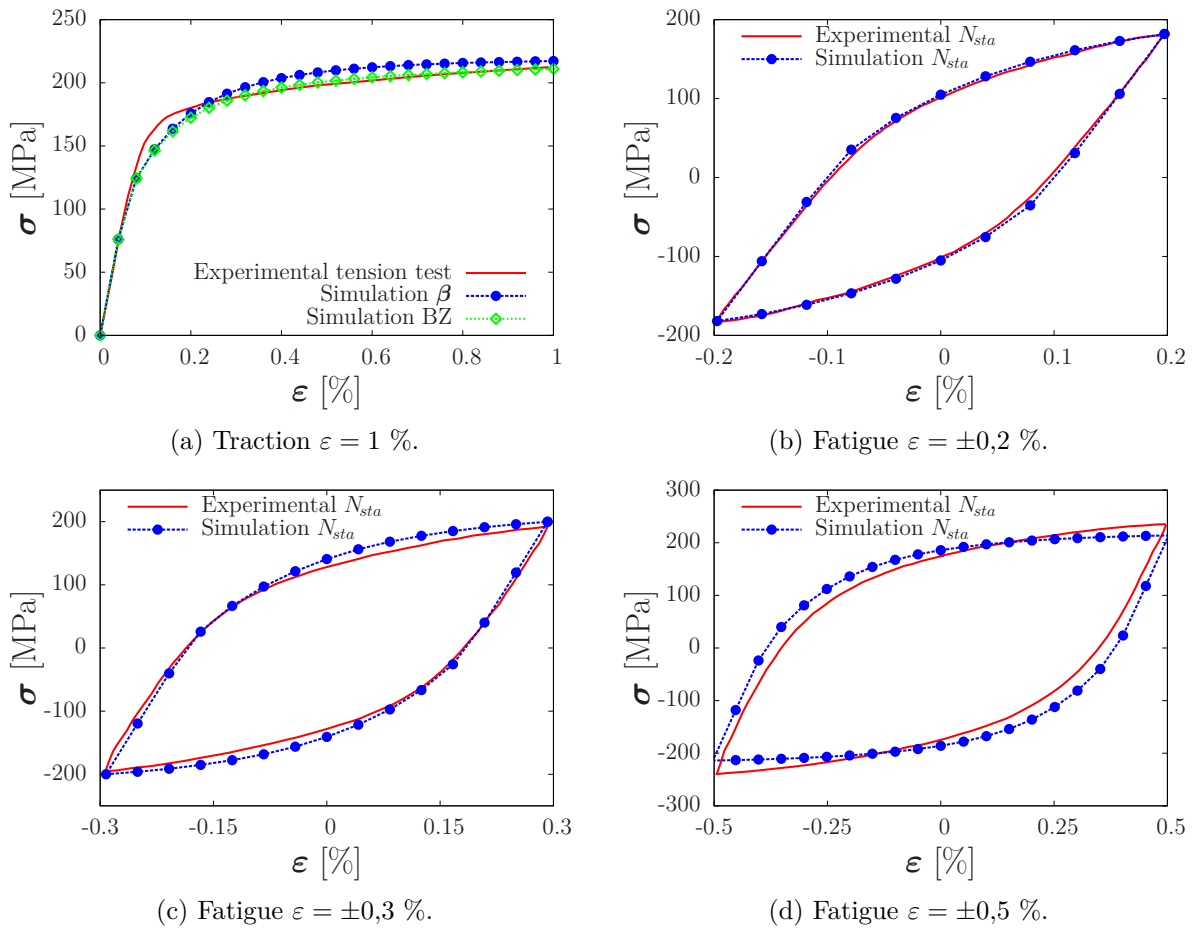


Fig. 3.1 – Comparaison entre les courbes numériques issues de l'identification et les courbes expérimentales issues des essais sur le 316L.

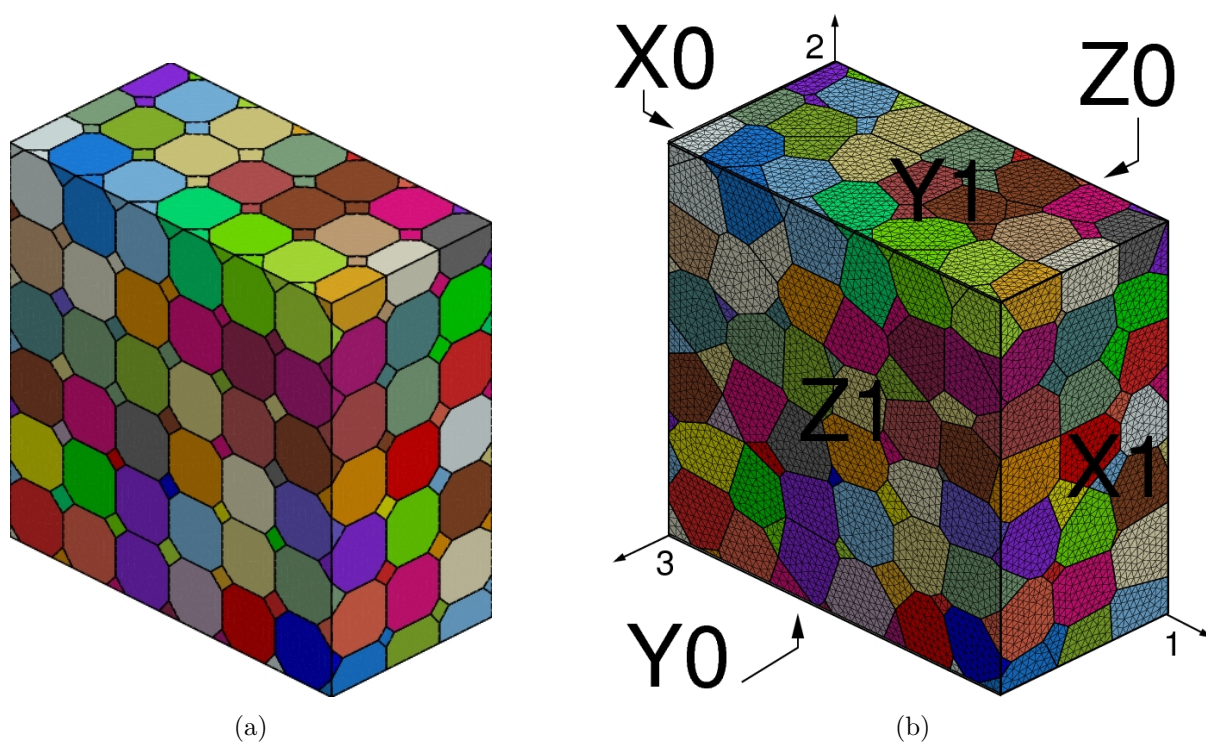


Fig. 3.2 – Maillage d'agrégat polycristallin de 291 grains : (a) Topologie obtenue à partir d'une répartition de germes réglée. (b) Maillage fin obtenu après bruitage.

3.2 Mise en place des calculs

3.2.1 Maillage

Le maillage est composé d'un agrégat de 291 grains formés à partir d'une décomposition de Voronoï sur un domaine de $250\ \mu\text{m} \times 250\ \mu\text{m} \times 125\ \mu\text{m}$. Une répartition régulière des germes est utilisée, un bruit brownien est ensuite appliqué sur la position des germes. La répartition initiale des germes donnerait lieu, suite à la décomposition, à la formation d'octaèdres tronqués comme illustré en figure 3.2a. Dans cette configuration, les grains ont une taille et une forme fixe, tant qu'ils ne sont pas coupés par les limites de l'agrégat. Les joints de grains sont orientés soit parallèlement, soit perpendiculairement, soit à 45° par rapport aux directions de chargement (x et y). Après bruitage, on obtient des grains de formes plus variables, avec une taille très proche de $50\text{--}55\ \mu\text{m}$ (cf. figure 3.3).

3.2.2 Conditions aux limites

La présence d'une surface libre doit se limiter à une face. En effet, cette particularité affecte de manière non négligeable les résultats dans les grains en fonction de leur proximité de la surface libre. Nous avons choisi de conserver la planéité des faces correspondant aux limites entre l'agrégat et « le reste de la matière ». Pour cela, dans le cas d'un chargement uniaxial lorsque la déformation transversale est inconnue, une condition de type mpc^2 est appliquée pour fixer le déplacement normal uniforme sur toute la face. Nous verrons que ce type de condition

2. MPC : contrainte multipoint, de l'anglais « Multi-Point Constraint ».

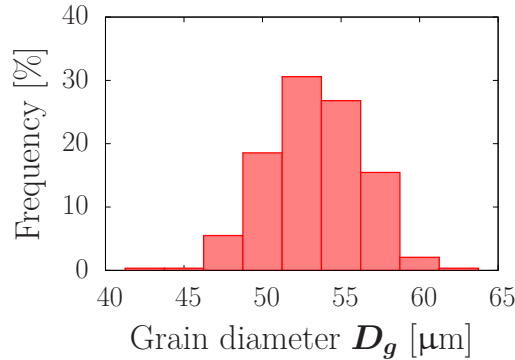


Fig. 3.3 – Distribution des diamètres de grain dans le maillage bruité.

aux limites affecte significativement les résultats dans la première rangée de grains liés à la face en question.

Dans l'ensemble des calculs réalisés dans ce chapitre, des conditions de symétrie sont appliquées sur les faces cachées X^0 , Y^0 et Z^0 et la surface Z^1 est libre de contrainte (cf. figure 3.2b). 4 types de chargement sont considérés, deux uniaxiaux et deux biaxiaux (chacun en phase) :

- (a) uniaxial-x
 - Face X^1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{11} = \pm 0,2$ %
 - Face Y^1 : déplacement normal homogène réglé par `mpc`
- (b) uniaxial-y
 - Face X^1 : déplacement normal homogène réglé par `mpc`
 - Face Y^1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{22} = \pm 0,2$ %
- (c) biaxial-eq
 - Face X^1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{11} = \pm 0,14$ %
 - Face Y^1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{22} = \pm 0,14$ %
- (d) biaxial
 - Face X^1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{11} = \pm 0,2$ %
 - Face Y^1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{22} = \pm 0,2$ %

Le niveau de sollicitation du chargement biaxial-eq est fixé pour donner une déformation équivalente au sens de von Mises égale à celle des cas uniaxiaux, *i.e.* $\varepsilon_{mises} = \pm \frac{2}{3}(1 + \nu) \times 0,2$ %. Cette déformation équivalente est calculée sous l'hypothèse d'un matériau à comportement élastique isotrope.

3.2.3 Parallélisation du calcul

Dans le cas de calculs EF sur des maillages comportant un nombre conséquent de DDL, la résolution du système linéaire devient trop coûteuse par rapport aux capacités de calcul des ordinateurs, à la fois en termes de mémoire et de vitesse de calculs. Pour passer outre cette limitation, la parallélisation du calcul devient indispensable. La partie solveur du code EF Zebulon comporte la particularité d'être entièrement parallélisée [159]. Ceci apporte la possibilité de décomposer le calcul en plusieurs sous-domaines et de résoudre le problème par la méthode FETI³ [160]. Cette méthode de calcul EF par décomposition de domaines est présentée en annexe C. Le lecteur y trouvera aussi des éléments concernant les solveurs, la gestion des modes rigides et les méthodes de découpage, dans le cas particulier de nos calculs d'agrégats.

3. FETI : de l'anglais « Finite Element Tearing and Interconnecting method ».

Remarque

Concernant les calculs réalisés dans tout ce chapitre, seule la résolution via le solveur `sparse_direct` a permis au calcul d'aboutir de manière systématique. En effet, la convergence du problème global devient difficile lors de la première phase de compression, au moment de la reprise de l'écoulement plastique. Les obstacles pouvant venir à la fois des hétérogénéités, de la nature du problème, de l'implémentation du traitement des conditions de type `mpc` et de la méthode de découpage en sous-domaines, il est difficile de déterminer la cause et d'apporter les modifications nécessaires à la mise en données ou directement au code EF. L'optimisation de ces calculs d'agrégats parallèles sous chargement cyclique nécessite d'identifier les points bloquants par la réalisation de tests avec diverses configurations, démarche qui a été menée en partie dans le cadre de cette thèse, sans qu'une solution définitive ne soit apportée. Une fois les points bloquants identifiés, des développements pointus d'ordre purement algorithmique peuvent être nécessaires, ce qui n'est pas l'objet de notre travail.

3.2.4 Paramètres et variables étudiés

L'objectif de ce travail de thèse est d'étudier l'influence des paramètres microstructuraux sur la formation des fissures de fatigue, notamment sur la localisation de la déformation plastique. Cette influence sera caractérisée à travers différentes variables et à différentes échelles (valeurs aux points de Gauss et valeurs moyennées par grain). Nous présentons dans cette section les paramètres, qui sont connus avant les calculs EF, et les variables issues des résultats de calcul.

Paramètres

À l'échelle du point de Gauss, on retrouve en plus des paramètres d'orientation cristalline comme le facteur de Schmid, des paramètres plutôt géométriques qui renseignent sur la situation du point vis-à-vis des particularités microstructurales de l'agrégat étudié :

- d_{surf} : distance entre le point de Gauss et la surface libre.
- d_{GB} : distance entre le point de Gauss et le joint de grains le plus proche.

Les paramètres à l'échelle du grain ou du joint de grains, renseignent à la fois sur la géométrie du grain, son orientation cristalline par rapport à la direction de chargement ou à l'orientation cristalline des autres grains :

- A_{free} : aire de la surface libre du grain.
- V_g : volume du grain.
- $\langle d_{\text{surf}} \rangle_g$: distance du grain par rapport à la surface libre.
- M_{max} : facteur de Schmid maximal.
- $\Delta\theta_w^i$: désorientation pondérée d'un grain vis-à-vis de ses voisins directs. La désorientation $\Delta\theta^{i,j}$ entre deux grains i et j , est calculée selon les bases énoncées par Randle [22]. Elle prend en compte les symétries du cristal cubique (cf. annexe B). Une routine C++ a été développée sous forme de greffon Z-set pour détecter, sur un maillage quelconque, les grains adjacents ainsi que la surface de contact entre les grains i et j , notée $S^{i,j}$. La désorientation $\Delta\theta_w^i$, d'un grain i est calculée en pondérant chaque désorientation $\Delta\theta^{i,j}$ par la surface de contact avec le grain adjacent j .

$$\Delta\theta_w^i = \frac{1}{\sum_j S^{i,j}} \sum_j S^{i,j} \Delta\theta^{i,j} \quad (3.21)$$

- $\theta_{\text{GB/load}}$: orientation géométrique du joint de grains par rapport à la direction de chargement.
- orientation dans le triangle standard (SST⁴), *i.e.* par figure de pôle inverse obtenue par projection stéréographique. Plus de détails sont donnés en annexe, section B.3.
- localisation du grain dans l'agrégat (en surface, à cœur, aux conditions aux limites).

Variables

Les variables étudiées dans ce chapitre sont :

- $\sum \gamma_{cum}$: la somme des glissements cumulés, représentative de l'énergie dépensée dans le mouvement des dislocations. Elle est plus ou moins liée à la densité de dislocations.
- ε_{mises}^p : la déformation plastique équivalente au sens de von Mises.

$$\varepsilon_{mises}^p = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\varepsilon}^p : \underline{\varepsilon}^p} \quad (3.22)$$

- σ_{mises} : la contrainte équivalente au sens de von Mises.

$$\sigma_{mises} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\mathfrak{s}} : \underline{\mathfrak{s}}} \quad \text{avec} \quad \underline{\mathfrak{s}} = \text{dev } \underline{\mathfrak{\sigma}} \quad (3.23)$$

- σ_{triax} : le taux de triaxialité, témoin de la multiaxialité locale et moteur de la rupture ductile à une échelle macroscopique.

$$\sigma_{triax} = \frac{\text{Tr } \underline{\mathfrak{\sigma}}}{3\sigma_{mises}} \quad (3.24)$$

- N_γ : le nombre de systèmes de glissements actifs *i.e.* pour lesquels

$$\dot{v}^s > \frac{1}{100} \max_s \dot{v}^s \quad \text{et} \quad \dot{v}^s > 1 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1} \quad (3.25)$$

Il faut noter qu'en présence de forte localisation de la déformation plastique, le calcul du tenseur des contraintes peut être perturbé. En effet, lorsque la déformation plastique devient prédominante, la compressibilité de l'élément diminue. Il se peut donc que des perturbations apparaissent dans les composantes sphériques du tenseur sous l'effet des oscillations de pression dans les éléments. Une mauvaise estimation des composantes diagonales du tenseur des contraintes peut donc survenir. Cela n'a aucun effet si l'on s'intéresse à des variables moyennées par élément ou à des variables s'appuyant sur le tenseur déviatorique des contraintes comme σ_{mises} .

Plusieurs solutions sont proposées dans la littérature (répertoriées, entre autres, par Mathieu [161]), avec leurs avantages et inconvénients :

- Utiliser des éléments à intégration réduite à un point de Gauss. Le problème d'oscillation est directement réglé, étant donné qu'il n'y a qu'un seul point d'intégration par élément. Cependant, avec cette méthode, le nombre de nœuds, donc de DDL devient bien plus important que le nombre de points de Gauss. La résolution du système linéaire devient trop gourmande comparée à l'information locale récupérée, le rapport quantité d'information locale/coût du calcul est faible.
- Ajouter un DDL supplémentaire représentant au choix la pression ou la variation de volume.

4. SST : triangle standard, de l'anglais « Standard Stereographic Triangle ».

- Appliquer une correction par post-traitement sur le tenseur des contraintes de manière à répartir la pression hydrostatique P dans l'élément. On calcule, pour chaque élément, la moyenne de la trace de $\underline{\sigma}$, que l'on redistribue, à chaque point de Gauss de l'élément en question, sur les termes diagonaux de $\underline{\sigma}$.

$$\underline{\sigma}_{correc} = \underline{\sigma} + \underline{\mathcal{I}}(\langle P \rangle_e - P) = \underline{\sigma} + \underline{\mathcal{I}}\left(\left\langle \frac{\text{Tr } \underline{\sigma}}{3} \right\rangle_e - \frac{\text{Tr } \underline{\sigma}}{3}\right) \quad (3.26)$$

Cette méthode est peu coûteuse et efficace. Elle a pour seul défaut de réduire légèrement la discrétisation des contraintes. C'est cette solution qui a été adoptée dans le cadre de notre étude.

3.3 Résultats et discussion

Les résultats des calculs, au terme du second cycle, à déformation imposée nulle, sont détaillés et analysés dans cette section.

3.3.1 Effet de la densité du maillage

La reproduction numérique de la localisation des déformations plastiques développée en fatigue à l'échelle mésoscopique par calculs d'agrégats se limite encore à des résultats d'ordre qualitatif. Les phénomènes de mouvement de dislocations ont lieu à une échelle beaucoup trop fine par rapport à une modélisation mésoscopique. Les calculs d'agrégats renseignent de manière qualitative sur les effets de localisation de la plasticité dans les polycristaux. La tendance actuelle, par l'amélioration continue de la puissance de calcul (performance des processeurs, clusters regroupant plusieurs centaines de machines) et des méthodes de calculs (calcul parallèle, multithreading), permet de s'approcher de plus en plus de l'échelle discrète.

Dans les problèmes où la localisation des contraintes et/ou des déformations plastiques intervient, il est fréquent d'adapter le maillage en conséquence afin de mieux traiter les zones de localisation. La densité du maillage a été choisie homogène dans l'agrégat de manière à ne favoriser aucune zone (joints de grains ou cœur des grains). Lors de la génération d'un maillage d'agrégat par décomposition de Voronoï, des singularités géométriques peuvent apparaître lorsque des points triples sont proches, ce qui entraîne l'apparition d'éléments aplatis lors de la phase de maillage. Pour éviter ou du moins limiter cet effet, deux points triples sont fusionnés dès lors que leur distance est inférieure à une distance critique.

Trois densités de maille ont été testées pour donner un point de vue critique sur les effets de localisation suivant la finesse du maillage. La figure 3.4 présente une visualisation des trois maillages ainsi que le nombre de nœuds et d'éléments.

Dans cette section, un seul calcul à chargement uniaxial- y est considéré, avec un jeu d'orientation fixe. Les distributions des variables aux points de Gauss sont représentées en figure 3.5. De manière générale, les distributions paraissent équivalentes quelle que soit la finesse de maillage vu que la plupart des courbes sont superposées. On peut noter, sur la distribution de la contrainte de von Mises, la présence, bien que faiblement marquée, des deux « modes », l'un vers 100 MPa et l'autre vers 125 MPa. Ceci avait déjà été observé dans ce type de problème, d'une manière plus prononcée [130]. D'après Osipov *et al.*, le premier pic correspond au cœur des grains alors que le second proviendrait des zones proches des joints de grains où apparaissent davantage d'incompatibilités de déformation.

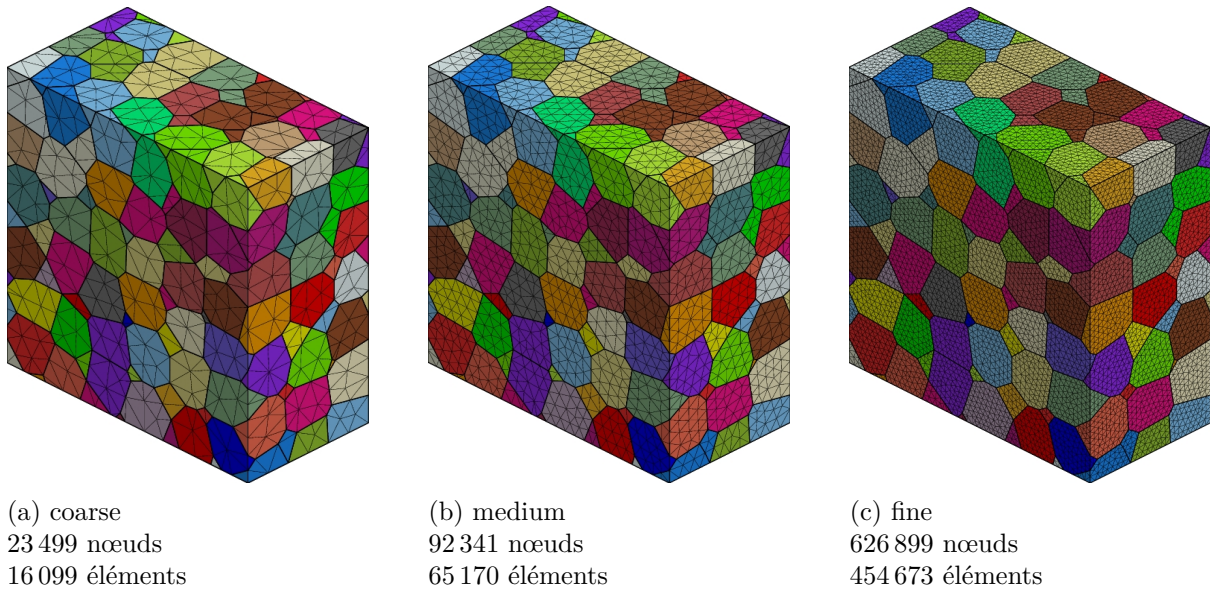


Fig. 3.4 – Maillages de l'agrégat polycristallin 3D de 291 grains avec différentes densités de maillage.

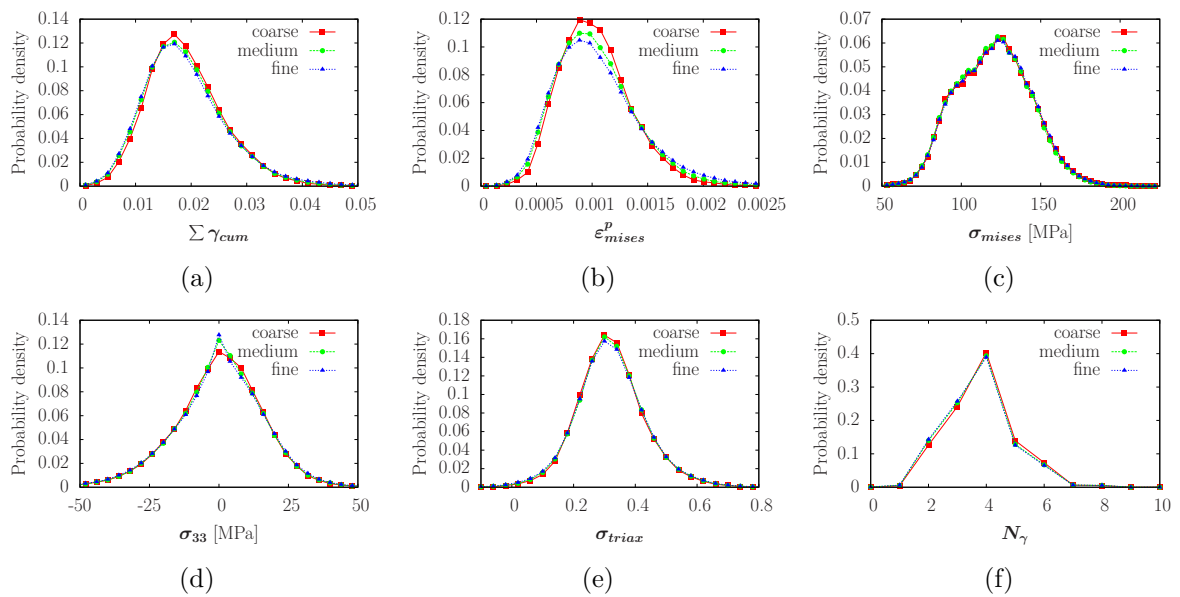


Fig. 3.5 – Distributions des variables étudiées avec différentes densités de maillage.

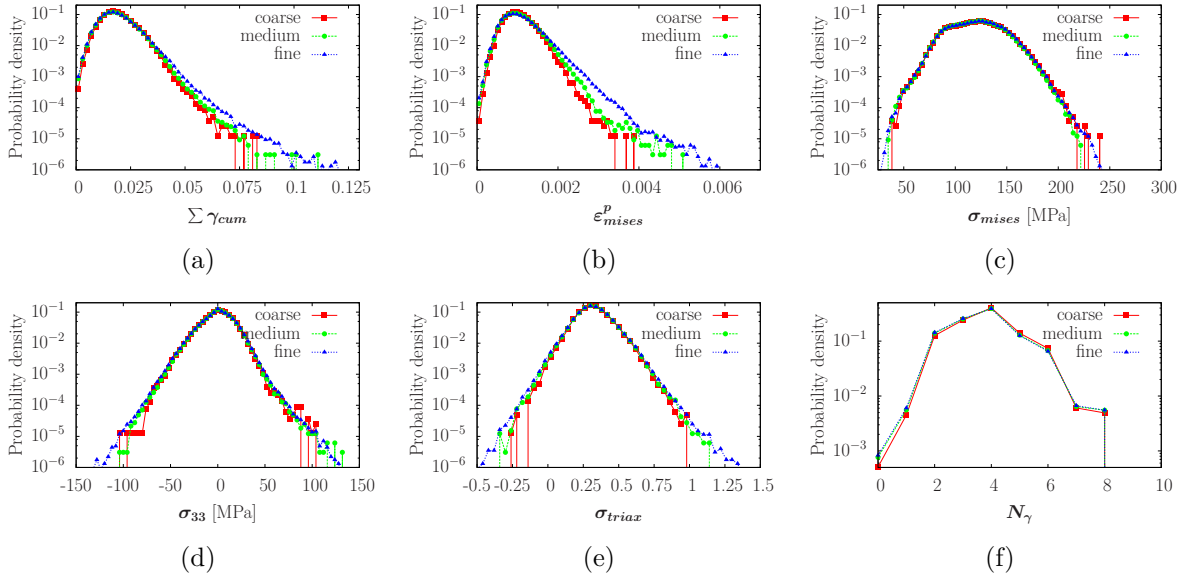


Fig. 3.6 – Distributions des variables étudiées (échelle log) avec différentes densités de maillage.

Cependant, en passant les ordonnées en échelle logarithmique (cf. figure 3.6), l'analyse des queues de distributions devient plus précise et nous montre qu'un maillage plus fin donne lieu à une plus forte localisation de la déformation plastique (figures 3.6a et 3.6b). Les queues de distributions des contraintes et du nombre de systèmes de glissement actifs ne sont pas trop influencées par cet effet de finesse de maillage. Le tableau 3.7 résume les données statistiques de ces distributions. On constate donc un écartement des bornes, une stagnation des moyennes et une augmentation significative de l'écart type pour chacune des variables dès lors que la densité de maillage augmente. De même, un accroissement significatif de l'écart type est obtenu uniquement pour les variables décrivant les déformations plastiques.

Un autre regard est maintenant donné du point de vue des moyennes par grain. Les moyennes par grain, entourées des valeurs $\langle \bullet \rangle_g - \langle \bullet \rangle_g^*/2$ et $\langle \bullet \rangle_g + \langle \bullet \rangle_g^*/2$, reflétant l'écart type au sein du grain, sont reportées en figure 3.7. La courbe référence est celle correspondant au maillage fin. On remarque que, plus le maillage devient fin, plus les valeurs des moyennes par grain convergent vers la courbe de référence. Les oscillations de la courbe du maillage medium autour de la courbe référence restent assez faibles (5 % au maximum), cela nous amène à penser qu'en termes de moyennes par grain, le maillage medium est suffisant. Cependant, l'augmentation de l'écart type au sein des grains avec la finesse du maillage montre bien qu'il est préférable de mener les études locales sur le maillage le plus fin possible. Dans le cas de la déformation plastique ($\Sigma \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p), l'écart type augmente avec la finesse de maillage, preuve d'une localisation plus prononcée. La figure 3.7f montre que le nombre de systèmes actifs N_γ est aussi influencé par la taille de maille, dans le même ordre que la déformation plastique.

Avec un maillage plus fin, les points d'intégration se rapprochent de plus en plus des singularités du problème, ici il s'agit des conditions aux limites et des joints de grains. Nous avons donc reporté les valeurs aux points de Gauss des variables étudiées en fonction de la distance aux joints de grains d_{GB} en figure 3.8 et en fonction de la distance à la surface libre en figure 3.9.

Les courbes moyennes présentent une pente quasi nulle, la distance aux joints de grains ne semble donc pas influencer sur la moyenne des variables et ce pour chaque niveau de discrétisation (figure 3.8). Néanmoins, c'est très près des joints de grains que l'on obtient des valeurs à la fois très élevées et très faibles pour les valeurs aux points de Gauss. La dispersion de ces valeurs

Maillage	Min	Moyenne	Max	Écart type
coarse	6.89e-07	1.91e-02	8.37e-02	6.95e-03
medium	0.00e+00	1.89e-02	1.11e-01	7.28e-03
fine	0.00e+00	1.90e-02	1.47e-01	7.72e-03

(a) $\sum \gamma_{cum}$

Maillage	Min	Moyenne	Max	Écart type
coarse	4.91e-07	1.03e-03	3.87e-03	3.23e-04
medium	0.00e+00	1.04e-03	5.05e-03	3.62e-04
fine	0.00e+00	1.05e-03	6.44e-03	4.10e-04

(b) ε_{mises}^p

Maillage	Min	Moyenne	Max	Écart type
coarse	3.79e+01	1.21e+02	2.39e+02	2.32e+01
medium	3.50e+01	1.20e+02	2.22e+02	2.29e+01
fine	2.68e+01	1.21e+02	2.54e+02	2.32e+01

(c) σ_{mises}

Maillage	Min	Moyenne	Max	Écart type
coarse	-1.04e+02	2.36e-03	1.05e+02	1.61e+01
medium	-1.03e+02	4.34e-02	1.30e+02	1.61e+01
fine	-1.32e+02	1.67e-02	1.45e+02	1.67e+01

(d) σ_{33}

Maillage	Min	Moyenne	Max	Écart type
coarse	-2.44e-01	3.21e-01	9.75e-01	1.10e-01
medium	-3.53e-01	3.21e-01	1.14e+00	1.13e-01
fine	-5.32e-01	3.21e-01	1.87e+00	1.16e-01

(e) σ_{triax}

Maillage	Min	Moyenne	Max	Écart type
coarse	0.00e+00	3.81e+00	8.00e+00	1.15e+00
medium	0.00e+00	3.75e+00	8.00e+00	1.16e+00
fine	0.00e+00	3.73e+00	8.00e+00	1.17e+00

(f) N_γ

Tab. 3.7 – Données statistiques sur les valeurs aux points de Gauss des variables étudiées dans l'ensemble de l'agrégat avec différentes densités de maille.

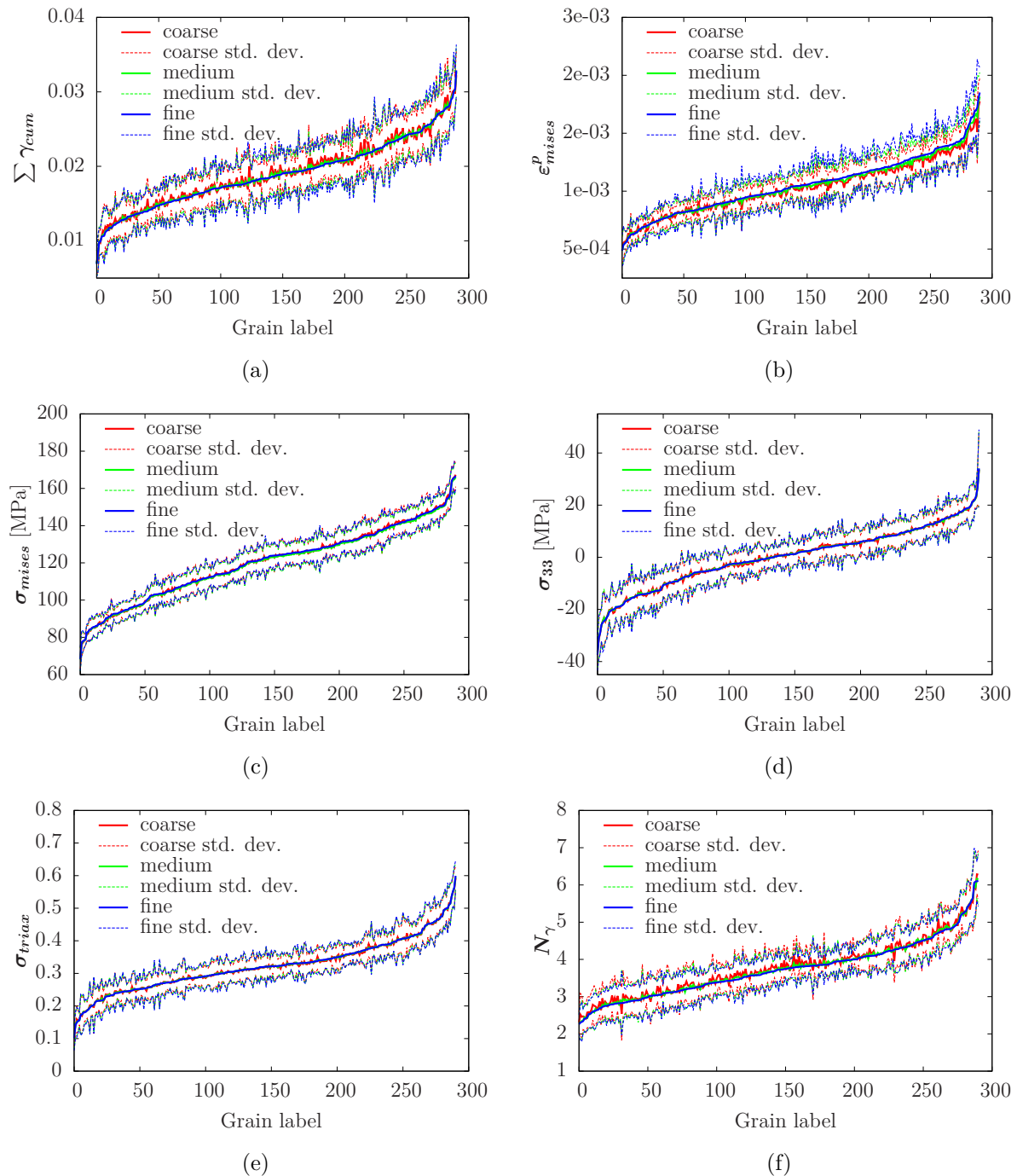


Fig. 3.7 – Influence de la densité de maille sur la distribution des variables étudiées. Sont présentées les valeurs moyennes des variables par grain ainsi que l'écart type à l'intérieur du grain. Les labels des grains sont en ordre croissant suivant les valeurs obtenues avec le maillage fin.

diminue progressivement au fur et à mesure que l'on rejoint le cœur du grain. Il faut aussi tenir compte du fait qu'il y a davantage de points de Gauss près des joints de grains, ce qui facilite la dispersion pour des d_{GB} faibles. Cette localisation obtenue aux joints de grains n'est peut-être pas aussi proche de la réalité. En effet, comme nous l'avons vu en section 1.2.2, les joints de grains représentent un point particulier des polycristaux dont le comportement est difficilement identifiable ou exploitable. Les maillages grossier et moyen ne font pas ressortir aussi nettement cette localisation aux joints de grains, d'où l'intérêt de travailler avec un maillage fin. À partir de maintenant, tous les calculs seront effectués sur le maillage fin.

La surface joue aussi un rôle dans les phénomènes de localisation dans les polycristaux, les mêmes graphiques sont tracés en fonction de la distance à la surface d_{surf} en figure 3.9. Comme dans le cas précédent, toutes les valeurs moyennes n'évoluent pas (ou très peu) en fonction de d_{surf} . De même la finesse de maillage conduit à une dispersion plus élevée et ce quelle que soit la valeur de d_{surf} . Malgré la dispersion plus faible constatée avec les maillages les moins denses, les mêmes tendances sont reproduites. La dispersion de la déformation plastique en surface libre (face Z^1) et en face Z^0 est beaucoup plus élevée que dans le reste de l'agrégat. En terme de contrainte équivalente, on arrive au même constat. Laisser libre ou fixer le déplacement normal d'une face de l'agrégat conduit à une forte localisation sur cette zone. De légers pics se dessinent à intervalles plus ou moins réguliers, signe de localisation aux barrières microstructurales. Les valeurs discrètes de la contrainte σ_{33} ainsi que du taux de triaxialité se dispersent au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la surface libre.

Qu'il s'agisse de la surface libre ou de la face Z^0 bloquée, la dispersion des valeurs n'est perturbée que sur une zone d'environ 10–15 μm . On peut donc conclure que l'effet de surface libre et l'effet de bords est atténué dès la seconde rangée de grains. L'effet de surface libre ne se confond donc pas avec l'éloignement vis-à-vis de la condition aux limites opposée à la surface libre : ces deux effets sont donc indépendants.

3.3.2 Effet du type de chargement

Nous étudions ici les différences de résultats entre les quatre chargements, tous appliqués à la même microstructure, *i.e.* même maillage et même jeu d'orientation.

Étude des champs locaux en surface

Tout d'abord, l'analyse porte sur les isovaleurs en surface libre de l'agrégat, *i.e.* la face Z^1 . Afin de donner plus d'informations sur la microstructure de surface, la figure 3.10 représente une carte EBSD « améliorée ». En plus de l'orientation cristalline des grains, l'épaisseur des traits décrivant les joints de grains est proportionnelle à la désorientation entre les deux grains adjacents. Bien que la couleur de deux grains adjacents soit très proche, la désorientation peut, elle, être élevée. En effet, la désorientation se base sur l'orientation des deux repères locaux dans leur intégralité alors que la carte EBSD ne renseigne que sur l'orientation du chargement dans le repère local du grain, *i.e.* la direction de chargement par rapport à la normale au plan de glissement, peu importe la direction de glissement.

Les cartes de la somme des glissements $\sum \gamma_{cum}$ et de la déformation plastique équivalente ε_{mises}^p sont présentées respectivement en figures 3.11 et 3.12. D'un point de vue global, on remarque que les zones de localisation diffèrent suivant les chargements. Dans le cas des chargements uniaxiaux (figures 3.11a, 3.12a, 3.11b et 3.12b), la déformation plastique semble créer des bandes de localisations orientées à $\pm 45^\circ$ de la direction de chargement. Cette observation

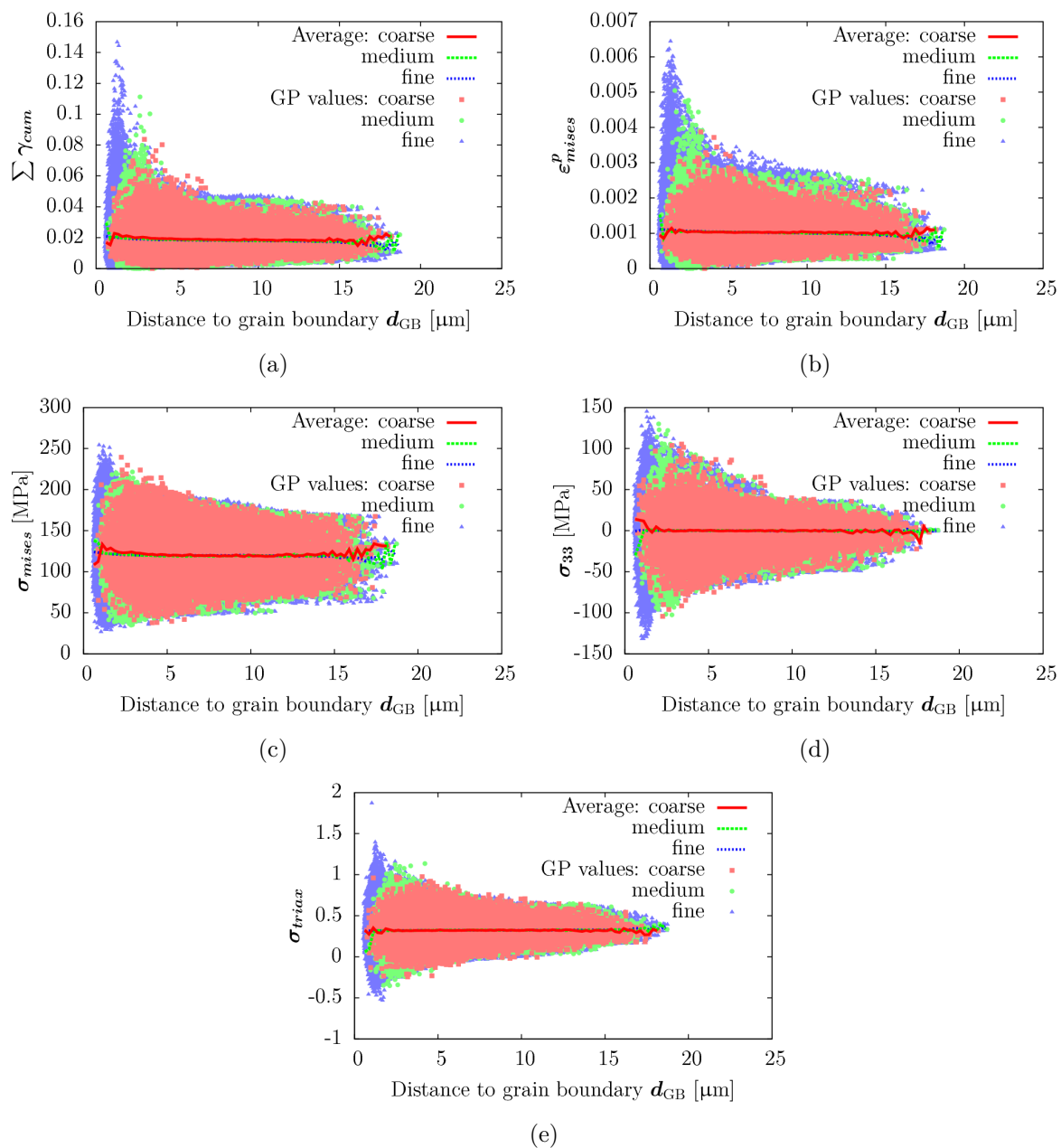


Fig. 3.8 – Valeurs aux points de Gauss des variables étudiées en fonction de la distance au joint de grains d_{GB} . Sont présentées à la fois les valeurs discrètes (en clair) et les moyennes par intervalle (en foncé).

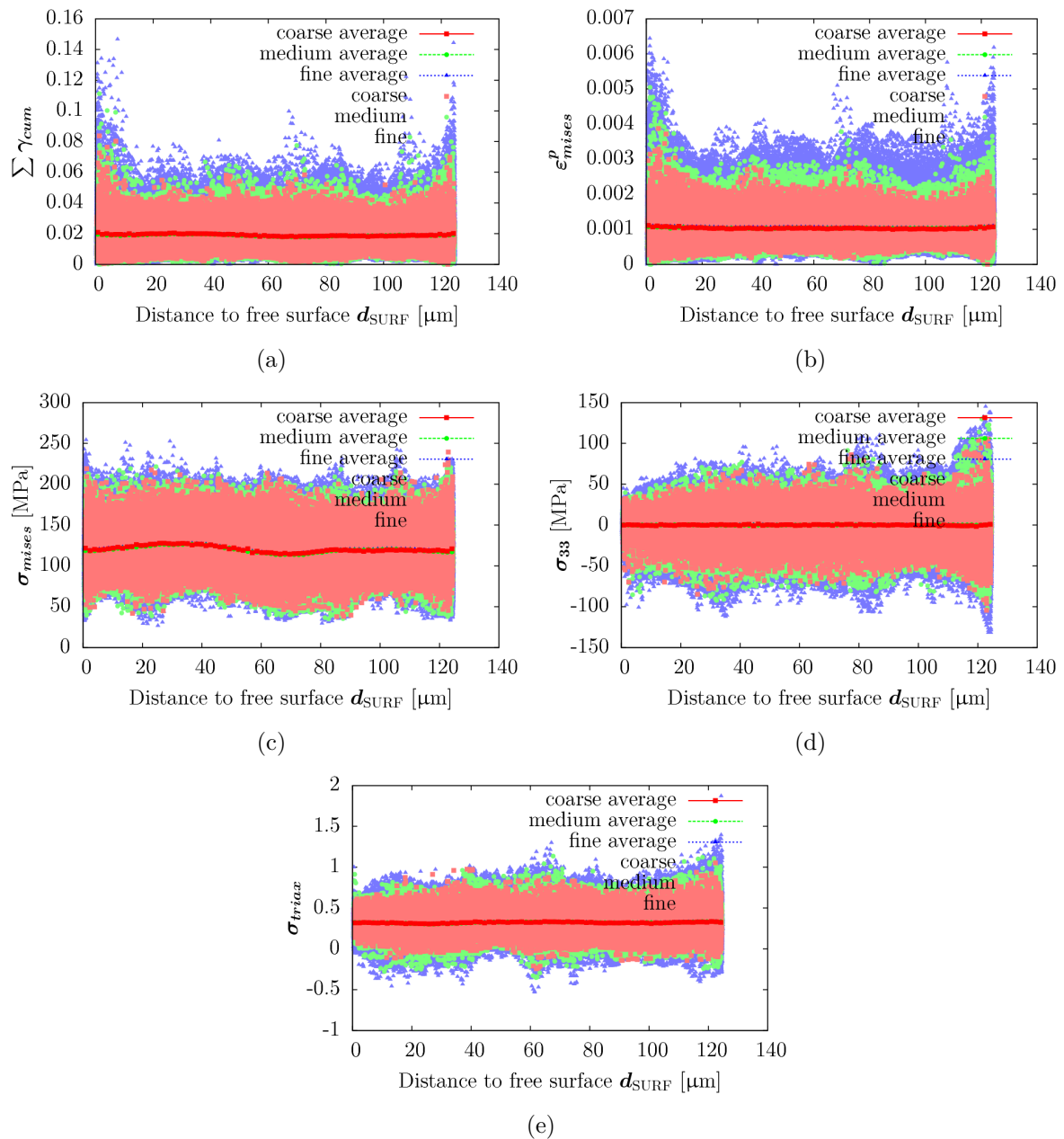


Fig. 3.9 – Valeurs aux points de Gauss des variables étudiées en fonction de la distance à la surface libre d_{surf} . Sont présentées à la fois les valeurs discrètes (en clair) et les moyennes par intervalle (en foncé).

ne se réitère pas en biaxial (cf. figures 3.11c et 3.11d). Les résultats en chargements biaxiaux ne correspondent pas à une simple combinaison des chargements uniaxial-x et uniaxial-y. Par exemple, le grain 223 plastifie très peu en uniaxial et à l'inverse en biaxial est très fortement plastifié. On peut aussi remarquer que sous chargement biaxial, la déformation plastique devient un peu plus présente au cœur des grains. La déformation plastique est globalement plus importante en biaxial qu'en uniaxial, y compris à même déformation équivalente au sens de von Mises. Il est à noter que sous une hypothèse élastoplastique, le chargement « équivalent » devient encore inférieur au chargement biaxial-eq, et que sous ces conditions la déformation plastique doit être globalement équivalente aux cas uniaxiaux.

Plus précisément, la localisation de la plasticité est essentiellement marquée aux joints de grains (*e.g.* entre les grains 287 et 244 en figure 3.11b) et près des points triples (*e.g.* entre les grains 270, 271, 264 et 265 en figure 3.11a). Elle peut être le fruit d'une forte désorientation (entre les grains 239 et 284 en figure 3.11a), mais cette forte désorientation n'entraîne pas forcément une localisation (*e.g.* entre les grains 275 et 276 en figure 3.11a). Cependant, il est rare qu'une faible désorientation entraîne une localisation. L'orientation géométrique du joint de grains par rapport à la direction de chargement, notée $\theta_{GB/load}$, aussi n'est pas complètement déterminante. La tableau 3.8 répertorie les observations faites aux joints de grains.

Les cartes du nombre de systèmes de glissement actifs N_γ (présentées en figure 3.14) montrent des valeurs relativement homogènes au sein des grains, avec des variations à la fois fortes et nettes d'un grain à son voisin. Peu de grains présentent des variations de N_γ en leur sein. On remarque une bonne complémentarité entre les cartes de σ_{mises} et N_γ . Les grains activant le plus de systèmes sont les grains de types $\{001\}$ en uniaxial. En comparant ces cartes à celles de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p , on constate qu'il n'y a pas de corrélation évidente entre N_γ et la déformation plastique. Dans certains cas, le lien est direct. Par exemple, au niveau du joint des grains 289 et 290, sous chargement uniaxial-y ou biaxial, il y a une parfaite concordance entre la localisations des variables $\sum \gamma_{cum}$, ε_{mises}^p , et N_γ .

D'après ces observations en surface, on constate qu'une forte déformation plastique peut être soit le fruit d'une activité plastique intense sur peu de systèmes, soit d'une activité moyenne sur plusieurs systèmes. Dans le cas de la fatigue des aciers austénitiques, les observations en surface montrent que dans un grain, le nombre de plans activés est souvent inférieur ou égal à 2, correspondant aux systèmes primaire et secondaire [84]. Ceci laisse supposer que nos simulations surestiment le nombre de systèmes activés. Afin de pouvoir exploiter pleinement les résultats des calculs EF d'agrégats polycristallins, il est primordial de se rapprocher de ces résultats expérimentaux. Une représentation fidèle de l'activation des systèmes de glissement nécessite bel et bien une identification basée sur ce type de données expérimentales à l'échelle du grain. Une autre piste, exploitée par Sauzay *et al.*, est de modifier la formulation de la loi de comportement afin de dissocier les grains à glissement simple des grains à glissement multiple [162].

Étude des champs locaux en volume

Les précédentes observations ne sont réalisées qu'en surface libre du composant. Bien que ce soit la zone d'amorçage préférentielle, une analyse visuelle en volume est nécessaire pour décrire les structures de localisation dans l'agrégat. Par l'intermédiaire du logiciel Salomé⁵, des visualisations en volume ont été effectuées en appliquant un filtre de transparence sur les cartes d'isosurfaces. Il a fallu pour cela développer un outil de transfert de données de maillage et de

5. Salomé : logiciel de pré et post-traitement développé par EDF R&D et le CEA [163].

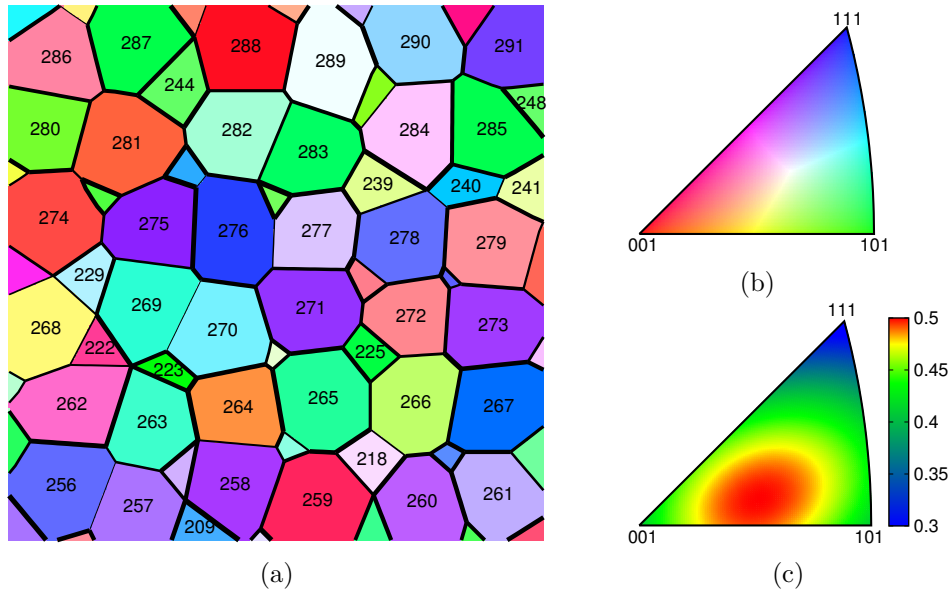


Fig. 3.10 – Description de l’orientation cristalline en surface libre de l’agrégat. (a) Carte EBSD avec l’épaisseur des joints de grains fonction de la désorientation. (b) Code couleur dans le triangle standard CFC. (c) Facteur de Schmid maximal dans le triangle standard CFC.

Grains	$\Delta\theta$	Chargement	$\theta_{GB/load}$	Observations
275/276	forte	uniaxial-x	87°	Pas de localisation de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p , contraste de σ_{mises}
		uniaxial-y	3°	Pas de localisation de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p
		biaxial-eq	$3^\circ / 87^\circ$	Localisation très faible de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p , contraste de σ_{mises} et N_γ
		biaxial	$3^\circ / 87^\circ$	Localisation faible de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p , très fort contraste de σ_{mises} et N_γ
244/287	forte	uniaxial-x	46°	Pas de localisation de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p , légère localisation de σ_{mises} , léger contraste de N_γ
		uniaxial-y	44°	Localisation très forte de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p , valeurs élevées de σ_{mises} , léger contraste de N_γ
		biaxial(-eq)	$46^\circ / 44^\circ$	Localisation et contraste de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p
289/290	forte	uniaxial-x	72°	Pas de localisation de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p
		uniaxial-y	18°	Forte localisation de $\sum \gamma_{cum}$, ε_{mises}^p et σ_{mises}
		biaxial(-eq)	$72^\circ / 18^\circ$	Forte localisation de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p
218/266	faible	uniaxial-x	36°	Localisation de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p , léger contraste de σ_{mises} et N_γ
		uniaxial-y	54°	Faible localisation de ε_{mises}^p
		biaxial(-eq)	$36^\circ / 54^\circ$	Forte localisation de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p , léger contraste de σ_{mises} , fort contraste de N_γ
269/270	faible	tous	$26^\circ / 64^\circ$	Pas de localisation de $\sum \gamma_{cum}$ et ε_{mises}^p

Tab. 3.8 – Observations sur la localisation des variables aux joints de grains en tenant compte des paramètres d’orientation et de désorientation.

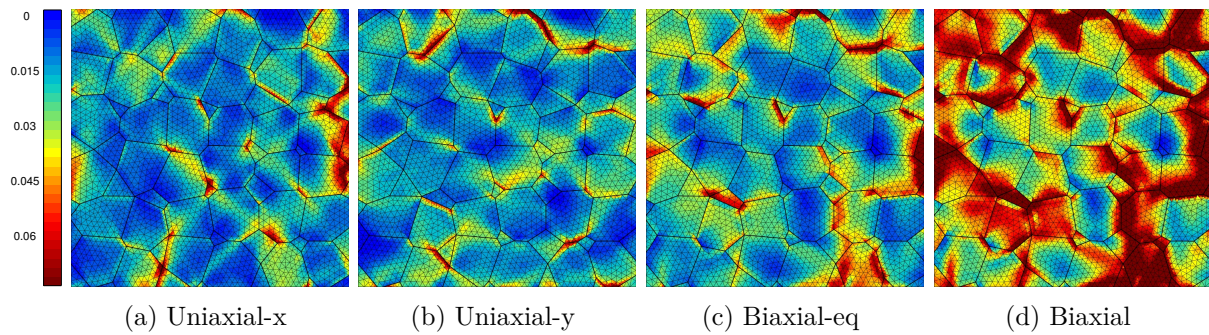


Fig. 3.11 – Isovaleurs de $\sum \gamma_{cum}$ sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.

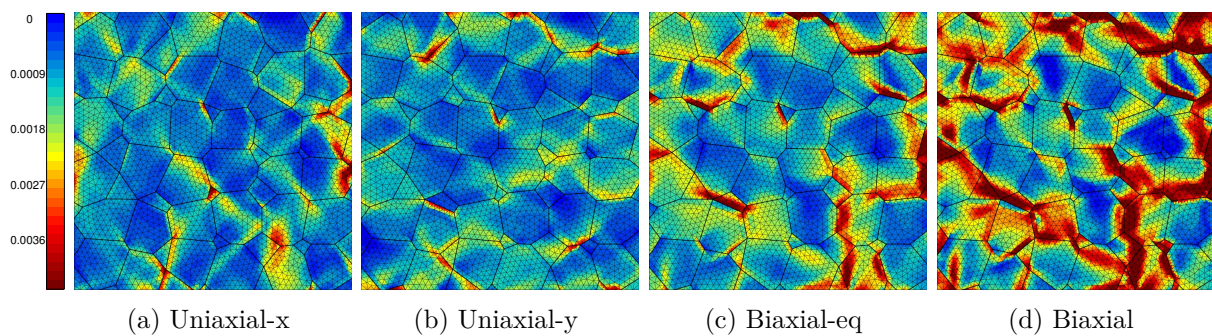


Fig. 3.12 – Isovaleurs de ε_{mises}^p sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.

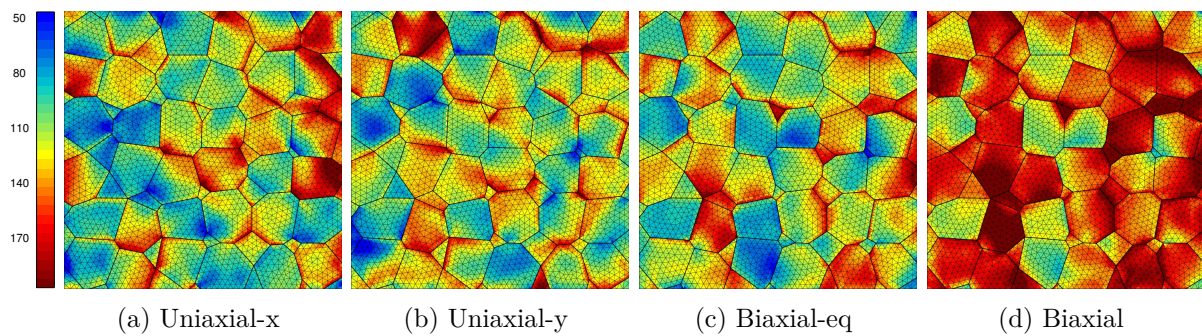


Fig. 3.13 – Isovaleurs de σ_{mises} sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.

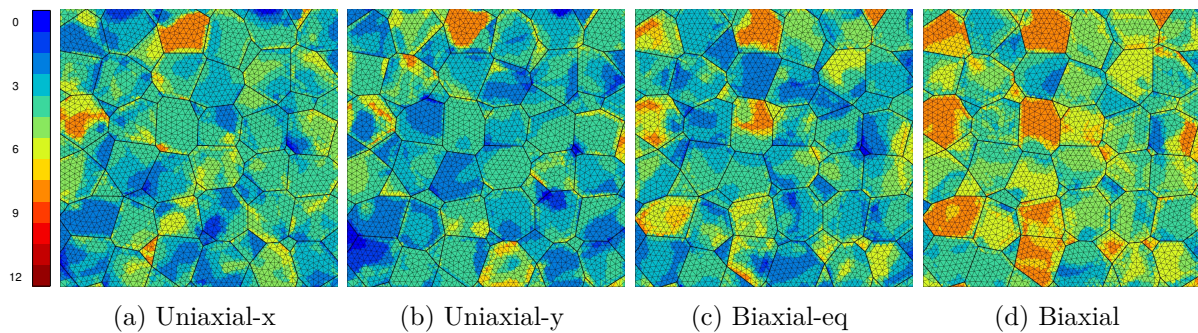


Fig. 3.14 – Isovaleurs du nombre de systèmes de glissement actifs N_γ sur la surface libre Z^1 pour chaque chargement.

Chargement	Bandes à 45° dans les directions			Facettes de Miller
	x	y	z	
Uniaxial-x		*	*	A + B
Uniaxial-y	*		*	A + B
Biaxial-eq	*	*		B
Biaxial	*	*		B

Tab. 3.9 – Structures de localisations identifiées dans les différents chargements. Orientation et type de facettes.

résultats, du format Z-set au format MED⁶ lisible par Salomé. Ce développement est intégré à Z-set sous forme de greffon (cf. annexe D).

Les cartes de la somme des glissements cumulés, effectuées par transparence dans les trois directions de l'espace et pour chaque chargement, sont présentées en figure 3.15. Elles reflètent une organisation caractéristique des structures de localisation sous chargements uniaxial et biaxial. Il faut pour cela examiner l'orientation des bandes de localisations de la déformation plastique par rapport au chargement et à la surface libre. D'après les travaux de Miller, déjà rapportés en section 1.1.2 (voir aussi figure 1.4), on rencontre des facettes de localisation de type A et B en uniaxial et de type B uniquement sous chargement biaxial. Les mécanismes de déformation étant pilotés par la contrainte de cisaillement, les zones de localisations se regroupent en bandes orientées à 45° par rapport au chargement. Lorsque ces bandes sont visibles en regardant dans la direction de la surface libre (z dans notre contexte), il s'agit de facettes A. Lorsque ces facettes sont visibles en regardant dans la direction de chargement, il s'agit de facettes B. Dans le cas uniaxial-x (cf. figure 3.15a), ces bandes de localisation sont visibles sur les vues de face et de haut (direction z et x), ce qui correspond à des facettes de type A et B. La vue de haut ne révèle pas de telles bandes. En biaxial (figures 3.15c et 3.15d), on retrouve ces bandes dans les vues de haut et de droite (les deux directions de chargement), mais pas en vue de face, nous sommes donc en présence de facettes B. L'identification des bandes de localisation, leur orientation et le type de facettes correspondant sont listés dans le tableau 3.9. Ces résultats sont en bon accord avec les observations expérimentales de Miller [4].

Dans le cas des facettes A, le vecteur direction de glissement \underline{l} n'a pas de composante dans la direction de la normale à la surface $\underline{n}_{\text{surf}}$. À l'inverse, les facettes B sont liées aux mécanismes de déformation favorisant l'émergence des bandes de localisation vers la surface car le vecteur \underline{l} possède une composante dans la direction de $\underline{n}_{\text{surf}}$. C'est par ces mécanismes de bandes de glissement émergentes que se forment les extrusions en surface qui sont associées à l'amorçage des microfissures. La plus grande proportion de facettes B en chargement biaxial contribue à la nocivité de ce type de chargement.

Étude des intrusions/extrusions

Connaissant l'organisation spatiale et le taux d'activité plastique local aux abords de la surface, il est possible de donner un indicateur sur la hauteur et l'orientation des intrusions et extrusions en surface. Les PSM, traces de glissement observées en surface des monocristaux et polycristaux sous chargement de fatigue, se regroupent généralement par plan. Si, pour un grain, on observe des traces d'orientations différentes, il s'agit de directions de glissement différentes,

6. MED : Modélisation et Échanges de Données, format de données neutre développé par EDF R&D et le CEA pour les échanges de données entre codes de calcul multiphysiques [164].

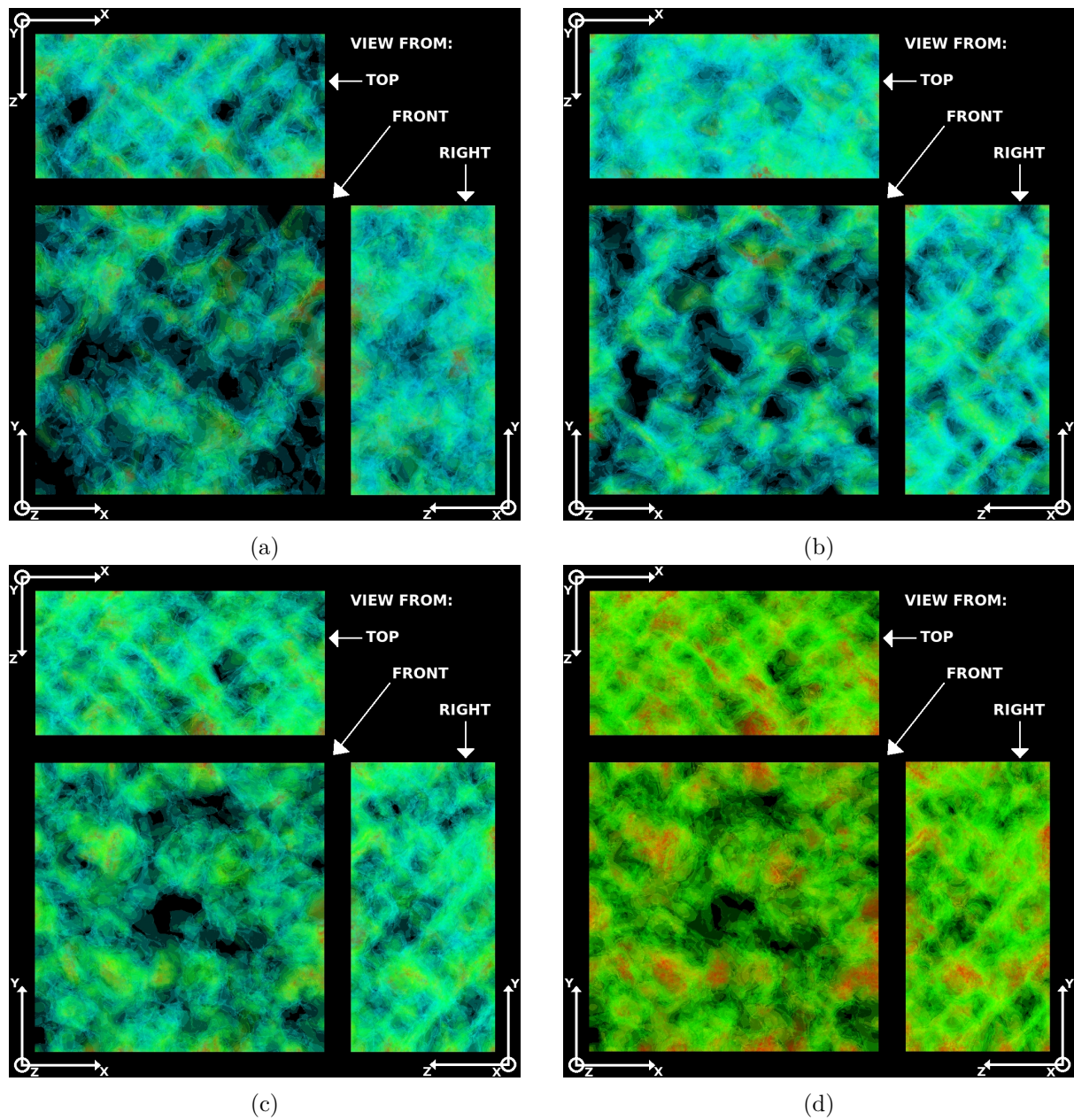


Fig. 3.15 – Vues volumiques par transparence des isovaleurs de $\sum \gamma_{cum}$ pour les chargements (a) uniaxial-x, (b) uniaxial-y, (c) biaxial-eq et (d) biaxial.

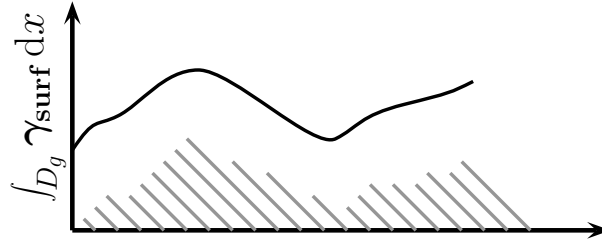


Fig. 3.16 – Schéma illustrant la corrélation entre γ_{surf} (en noir) et la hauteur des marches d'intrusion/extrusion (en gris).

généralement en présence de glissement dévié. On peut calculer la projection de la contribution plastique de chaque plan de glissement sur la normale surface libre $\underline{n}_{\text{surf}}$: pour chaque plan de glissement p et système de glissement s :

$$\gamma_{\text{surf}}^p = \left(\sum_{s \in p} \gamma^s \underline{l}^s \right) \cdot \underline{n}_{\text{surf}} \quad (3.27)$$

La valeur maximale de chacune de ces contributions γ_{surf} est stockée ainsi que le vecteur normal au plan associé $\underline{n}(\gamma_{\text{surf}})$, qui donne le vecteur unitaire de la trace sur la surface libre $\underline{l}_{\text{surf}}$.

$$\gamma_{\text{surf}} = \max_p (|\gamma_{\text{surf}}^p|) \times \text{sign}(\gamma_{\text{surf}}^p) \quad (3.28)$$

$$\underline{l}_{\text{surf}} = \frac{\underline{n}_{\text{surf}} \times \underline{n}(\gamma_{\text{surf}})}{|\underline{n}_{\text{surf}} \times \underline{n}(\gamma_{\text{surf}})|} \quad (3.29)$$

On peut donc caractériser la hauteur de marche avec γ_{surf} et l'orientation de la trace avec $\underline{l}_{\text{surf}}$.

Cette variable indique de manière qualitative, l'orientation des PSM en surface ainsi que les zones critiques. Elle représente une déformation de l'ordre 0,1 % d'après les calculs effectués. Man *et al.* sur le 316L [73], dans leurs observations sur le 316L, relèvent des vitesses de croissance de marches de 81 pm/cycle en début d'essai et de 25 pm/cycle une fois l'essai stabilisé. Cette mesure illustre en fait une hétérogénéité spatiale de la déformation plastique, en mettant en regard les glissements plastiques en deux points voisins. On n'atteint pas ce niveau d'hétérogénéité avec notre approche classique de milieux continus. La valeur de 0,1 % de déformation évoquée plus haut, introduit dans une intégration sur la taille de grain (en supposant que le système de glissement traverse celui-ci) donne une « marche » de 50 nm pour un grain de diamètre $D_g = 50 \mu\text{m}$, qui correspond en fait à un déplacement moyen. Afin d'estimer plus finement une hauteur de marche, il conviendrait de dériver le profil obtenu suivant une ligne de la surface (cf. figure 3.16). On notera cependant que, même un tel profil ne fait qu'approcher l'hétérogénéité expérimentale, liée aux localisations intragranulaires.

La figure 3.17 montre à la fois l'intensité et l'orientation des PSM pour les quatre chargements étudiés. On rappelle que le post-traitement est effectué à la fin du second cycle, lors de la phase de traction, à déformation nulle. Comme observé précédemment, le chargement biaxial induit une plus forte intensité de déformation plastique en surface que les chargements uniaxiaux. Déprés avait obtenu des résultats similaires à partir de simulations de DDD sur un seul grain [10]. Si on s'intéresse au nombre de traces d'orientations différentes, *i.e.* le nombre de plans différents activés dans un grain, on remarque qu'il est en général plus élevé (entre 2 et 3) en biaxial qu'en uniaxial (entre 1 et 2). C'est aussi près des conditions aux limites que le nombre de traces par grain est plus élevé que la moyenne. En comparant les figures 3.17c et 3.17d, on constate que l'intensité du chargement, ne modifie en rien l'orientation des PSM, mais modifie uniquement leur hauteur. Les zones critiques se situent généralement près des joints de

grains, concentrées sur de fines bandes. Il apparaît parfois de larges zones qui se répandent dans l'intérieur d'un ou plusieurs grains (zone verte en figure 3.17a et zone jaune en figure 3.17b).

Ce type de post-traitement et de visualisation peut constituer un outil supplémentaire pour identifier ou améliorer les lois de comportement à partir d'essais expérimentaux. Cela implique d'accéder à la microstructure (topologie et orientation des grains), d'effectuer le calcul EF sur cette microstructure réelle, puis de comparer l'allure des PSM expérimentales et numériques. Une meilleure prédiction des systèmes actifs pourrait être mise en œuvre.

L'orientation des PSM est caractérisée par $\theta_{\text{PSM}/x}$, angle entre la trace formée et l'axe x . Les distributions de l'orientation de ces traces sont données en figure 3.18a pour chaque chargement. En uniaxial, les traces sont majoritairement orientées à 45° et 90° par rapport à la direction de chargement. En biaxial, on obtient cette fois une moyenne des cas uniaxial- x et uniaxial- y . L'intensité du glissement γ_{surf} est reporté en fonction de l'orientation $\theta_{\text{PSM}/x}$ en figure 3.18b. Les courbes ne font pas ressortir de tendance nette. Il faut se baser sur plusieurs calculs pour donner un point de vue statistique plus fiable.

3.3.3 Analyse statistique

Les analyses conduites jusqu'à présent dans ce chapitre se limitent à une seule configuration d'orientation des 291 grains dans l'agrégat. Afin de ne pas baser nos conclusions sur un cas particulier, une étude statistique est menée sur le même maillage en faisant varier uniquement l'orientation des grains. 15 jeux de 291 orientations aléatoires ont été générés pour être utilisés dans 15 calculs sur le maillage fin sous chargement uniaxial- y . L'ensemble des données de résultats a été traité de manière à faire ressortir l'influence des paramètres étudiés.

Distributions globales

Les distributions en échelle logarithmique des variables étudiées sont présentées en figure 3.19 pour chaque type de grain. L'effet de bord est très nettement mis en évidence ici, les grains aux CL présentent des maxima plus élevés en termes de déformation plastique et de contraintes. L'exemple le plus flagrant est celui du taux de triaxialité (cf. figure 3.19e) pour lequel les maxima aux CL sont jusqu'à deux fois plus élevés qu'en surface ou à cœur. Si on compare uniquement les grains à cœur aux grains en surface, on constate que la dispersion de la déformation plastique est plus élevée en surface, comme observé en 2D (cf. section 2.2).

Les conditions aux limites, consistant à maintenir constant le déplacement normal d'une face, englobent presque l'intégralité de l'agrégat, de ce fait 192 grains sur 291, soit 66 % sont considérés aux CL. Ces singularités perturbent les résultats sur une zone d'environ 10–15 μm (cf. section 3.3.1). Sur les 125 grains en contact avec la surface libre, il ne reste que 51 grains non perturbés par les CL. Les grains à cœur, au nombre de 58, ne sont ni en contact avec la surface libre, ni avec les CL.

Le nombre de grains exploitables est assez faible par rapport au nombre de grains calculés. Parmi les solutions possibles, on peut utiliser des conditions aux limites périodiques. Cependant, la particularité de nos calculs réside dans la présence d'une surface libre, ce qui empêche la prise en compte de la périodicité dans la direction de la surface libre. La périodicité ne pourra donc être présente que dans deux directions : on parle alors de semi-périodicité. Nous traiterons ce type de modélisation dans le chapitre 5.

D'un calcul à l'autre, on peut aussi voir les distributions globales varier comme le montre la figure 3.20 présentant, pour chaque variable étudiée, sa distribution sur les calculs individuels et

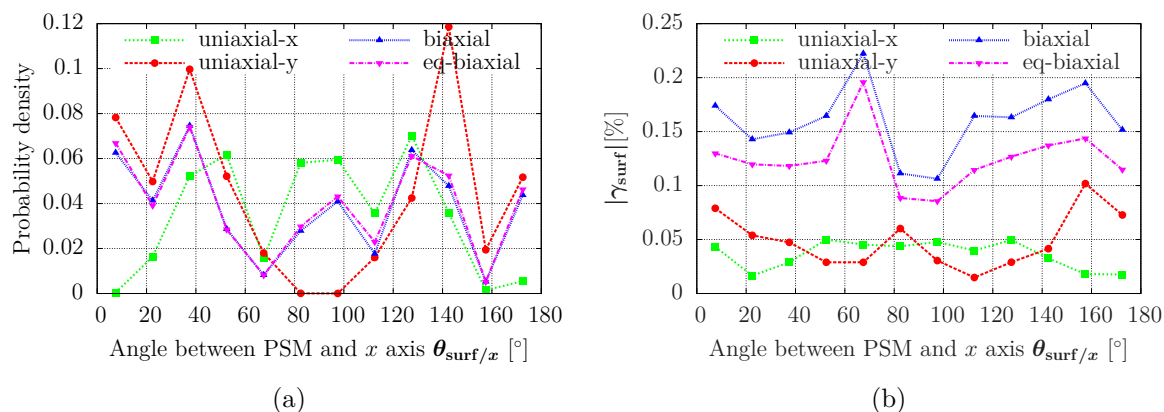


Fig. 3.18 – (a) Distribution de l'orientation des PSM $\theta_{\text{PSM}/x}$ et (b) valeur moyenne de γ_{surf} en fonction de l'orientation des PSM $\theta_{\text{PSM}/x}$.

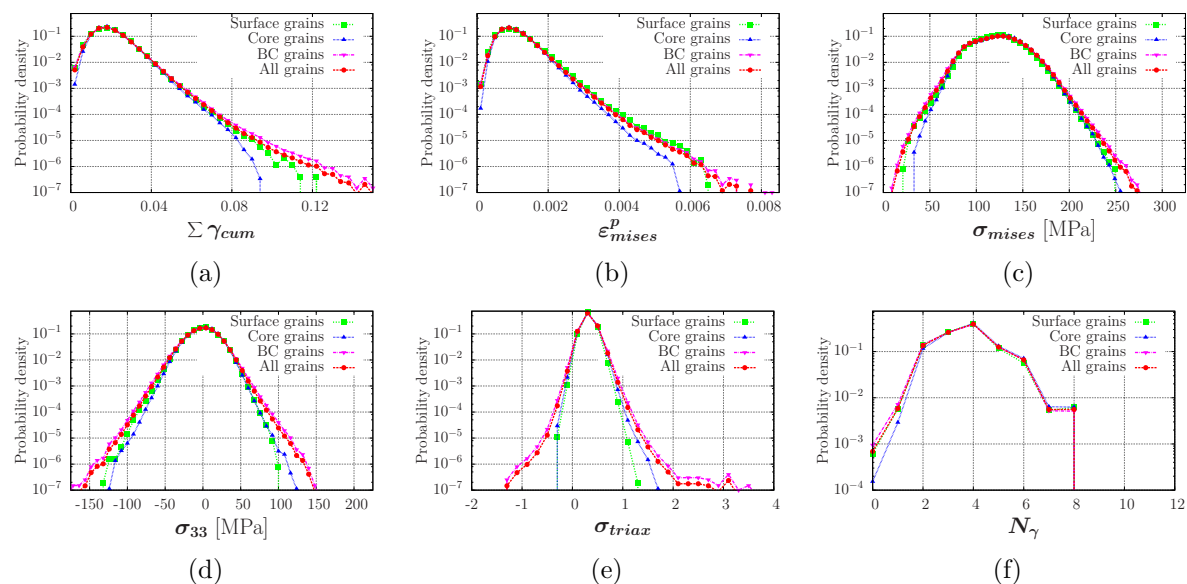


Fig. 3.19 – Distributions des variables étudiées sur l'ensemble des 15 calculs pour différents types de grains.

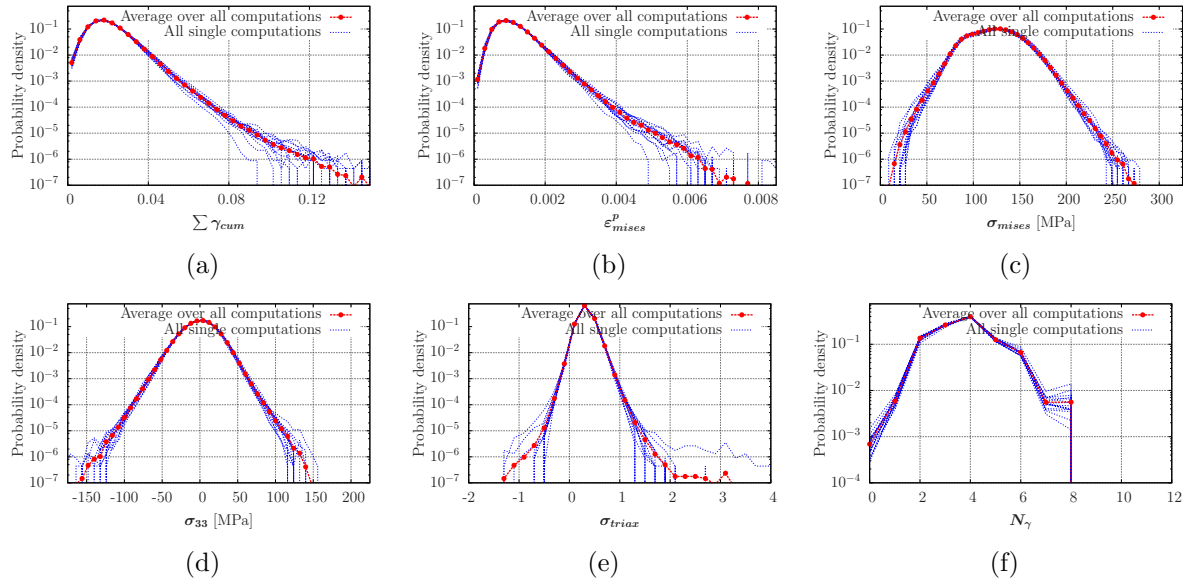


Fig. 3.20 – Distributions des variables étudiées pour chacun des 15 calculs pour différents types de grains.

la distribution globale sur l'ensemble des calculs effectués. Ici tous les grains de l'agrégat sont pris en compte. La dispersion au niveau des queues de distributions est assez importante, notamment pour le taux de triaxialité en figure 3.20e. Cela marque l'importance des configurations locales d'orientation et désorientation entre les grains. Pour permettre de prendre en considération ces aspects, il est nécessaire de réaliser des simulations EF d'agrégats de quelques centaines de grains avec une discrétisation très fine.

Influence des paramètres

L'influence du facteur de Schmid et de la désorientation pondérée $\Delta\theta_w$ est caractérisée en figures 3.21 et 3.22 en traçant la valeur moyenne des variables étudiées par intervalle.

Les tendances illustrées par la figure 3.21 révèlent une influence assez nette du facteur de Schmid sur l'ensemble des variables étudiées. Plus le facteur de Schmid est élevé :

- plus la somme des glissements cumulés $\sum \gamma_{cum}$ est élevée dans les grains en surface ;
- plus la déformation plastique équivalente ε_{mises}^p est élevée (cela est d'autant plus marqué en surface) ;
- plus la contrainte équivalente σ_{mises} est faible ;
- plus la contrainte normale à la surface σ_{33} se rapproche de zéro ;
- plus le taux de triaxialité est élevé ;
- moins le nombre de systèmes actifs est élevé.

En se basant sur le facteur de Schmid, les grains en surface semblent suivre davantage le comportement des monocristaux, du fait de la partie de leur surface qui est libre de contrainte. Ce résultat est en accord avec les observations expérimentales de la littérature.

L'influence de la désorientation moyenne d'un grain par rapport à ses voisins est beaucoup moins évidente. Aucune tendance n'est mise en exergue, mis à part sur σ_{mises} , et dans une faible mesure. Une augmentation de 20° sur la désorientation augmente la contrainte de 5 MPa pour l'ensemble des grains. Cette variation est doublée dans le cas des grains à cœur, l'effet de voisinage est donc plus important à cœur. On peut noter que la désorientation des grains

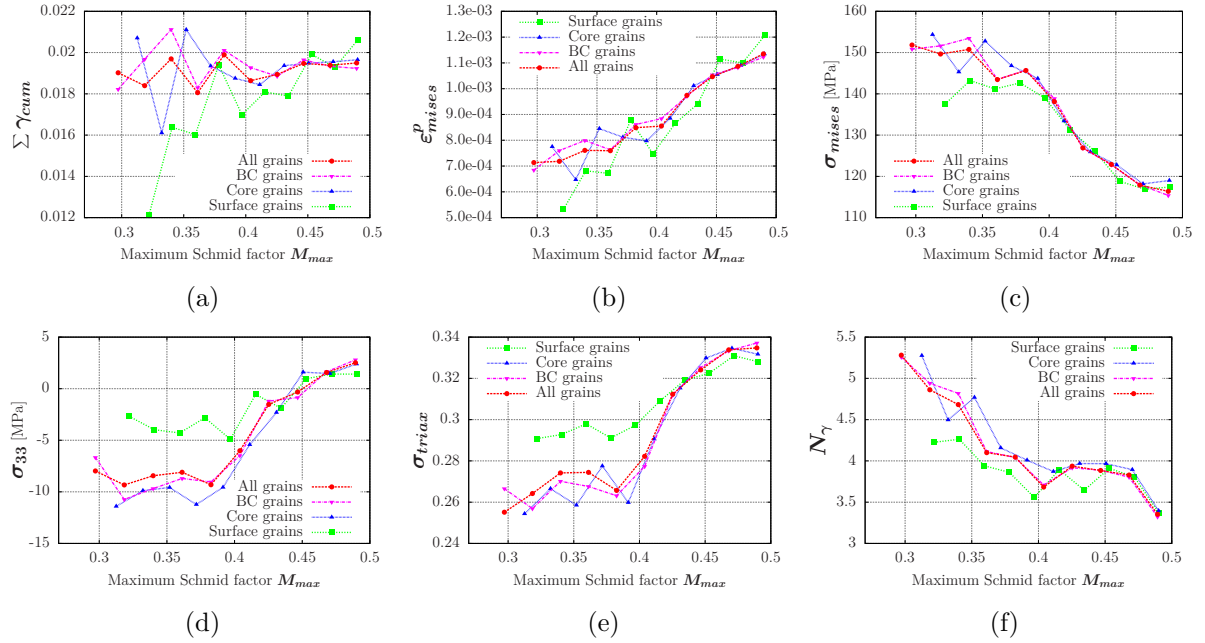


Fig. 3.21 – Influence du facteur de Schmid sur les variables étudiées pour différents types de grains.

aux conditions aux limites est mal évaluée, étant donné qu'il sont tronqués et que la planéité imposée agit plus ou moins comme un joint de grains rigide et désorienté. Une modélisation périodique permettrait de s'astreindre de ce nouvel effet de bord.

L'orientation des extrusions simulées numériquement est caractérisée par l'angle $\theta_{PSM/x}$. La distribution de $\theta_{PSM/x}$ sur les 15 calculs est présentée en figure 3.23a. On constate que la majeure partie des PSM forment un angle inférieur à 45° avec la direction de chargement, sans faire apparaître de préférences pour les facettes B (90°). Néanmoins, si on prend en compte l'intensité γ_{surf} , on remarque qu'elle est plus élevée lorsque les traces de glissement sont perpendiculaires à la direction de chargement (cf. figure 3.23b).

3.3.4 Analyse dans le triangle standard

Bien que le facteur de Schmid donne une bonne indication sur le comportement des grains, il occulte d'autres indications comme le nombre de systèmes susceptibles d'être activés, l'orientation du plan de glissement et sa direction. Une analyse des résultats en fonction de l'orientation du chargement dans le repère de chaque cristal est conduite en reportant les valeurs moyennes par grain dans le SST. Ces valeurs sont à nouveau moyennées par zones dans l'abaque de Wulff (pour plus de détails consulter l'ouvrage de Randle [22]) et affichées sous forme d'isovaleurs sur les figures 3.24 à 3.29 pour chaque variable et chaque type de grain.

Des études expérimentales ont permis d'identifier les structures de dislocations présentes dans les grains des polycristaux en fonction de leur orientation dans le SST. Huang *et al.* ont étudié des polycristaux de cuivre sous chargement monotone [19]. Ils montrent que trois zones se démarquent dans le SST (cf. figure 3.30d), correspondant à différentes structures de dislocations et à différentes valeurs de densités de dislocations, résumées en tableau 3.10. Selon la zone du SST, les frontières des cellules dislocations peuvent s'aligner avec les plans de glissement \underline{n}^s , l'axe de chargement \underline{t} ou bien suivre une orientation sans lien apparent. La délimitation des différentes

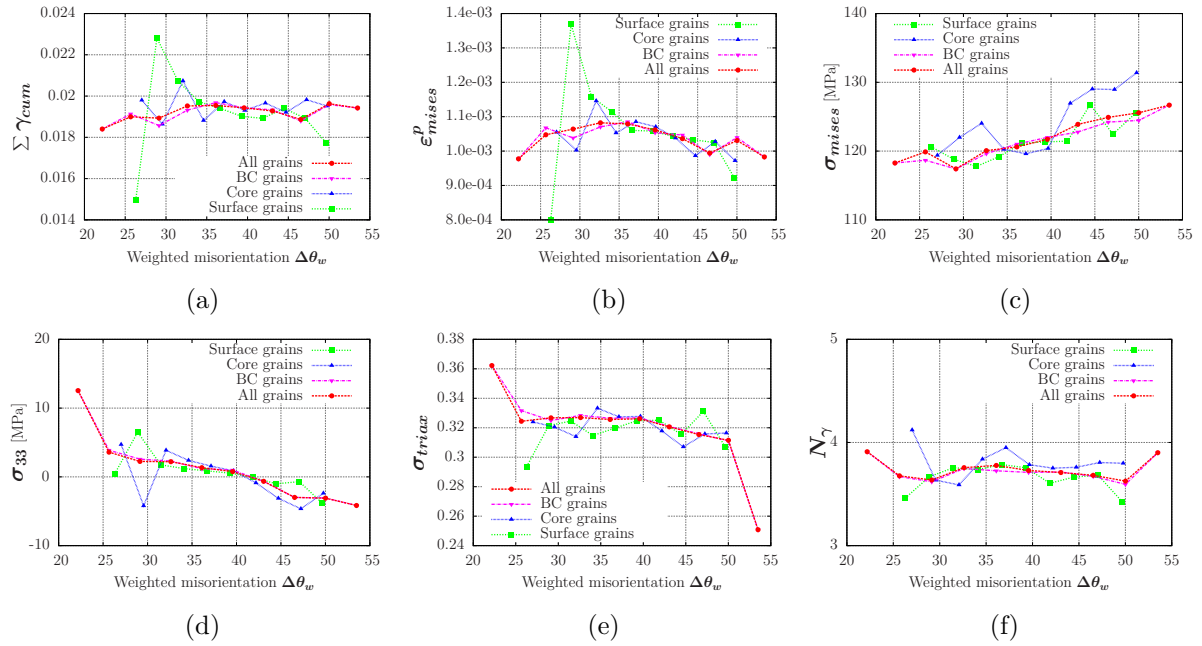


Fig. 3.22 – Influence de la désorientation pondérée $\Delta\theta_w$ sur les variables étudiées pour différents types de grains.

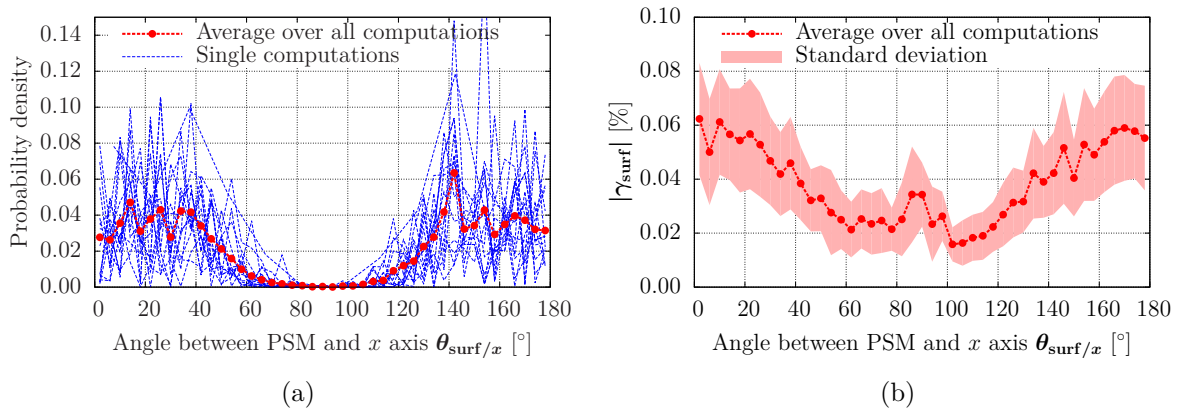


Fig. 3.23 – Orientation et intensité des PSM sur l'ensemble des 15 calculs. (a) Distribution de l'orientation des PSM, notée $\theta_{PSM/x}$. (b) Moyenne et écart type de l'intensité de γ_{surf} en fonction de $\theta_{PSM/x}$.

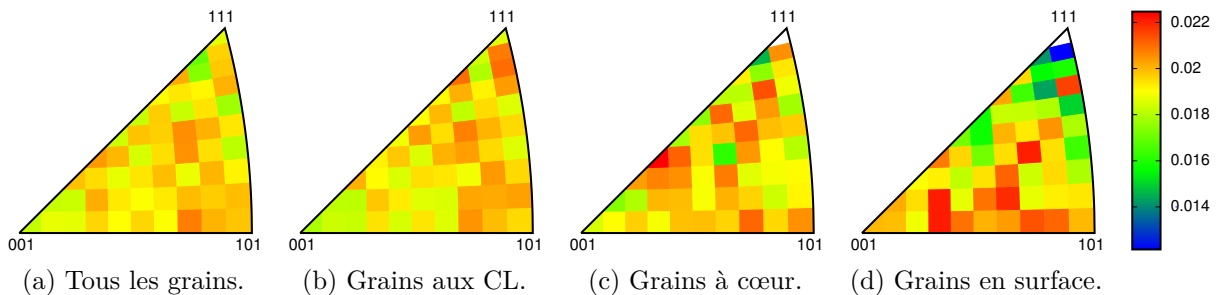


Fig. 3.24 – Valeurs moyennées de $\Sigma \gamma_{cum}$ dans le triangle standard.

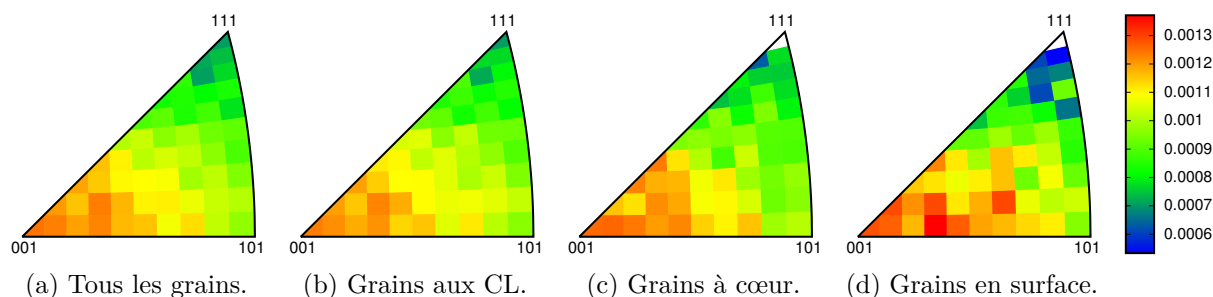


Fig. 3.25 – Valeurs moyennées de ε_{mises}^p dans le triangle standard.

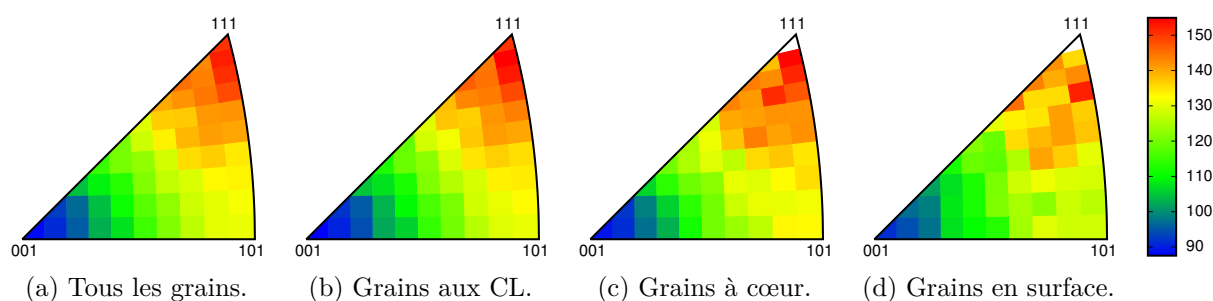


Fig. 3.26 – Valeurs moyennées de σ_{mises} dans le triangle standard [MPa].

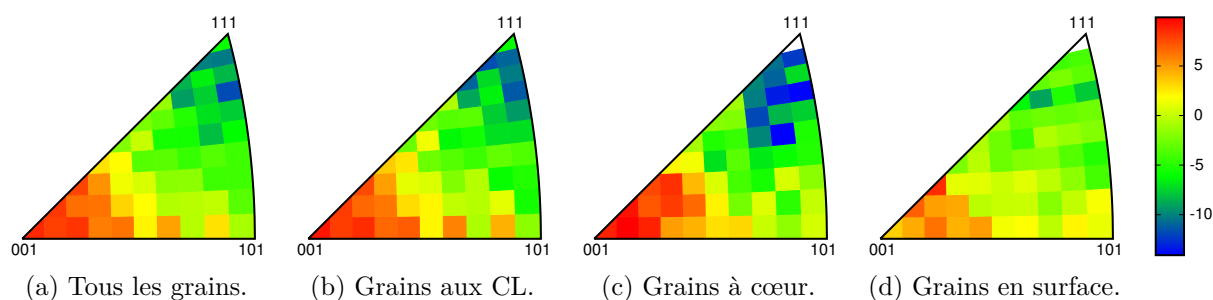


Fig. 3.27 – Valeurs moyennées de σ_{33} dans le triangle standard [MPa].

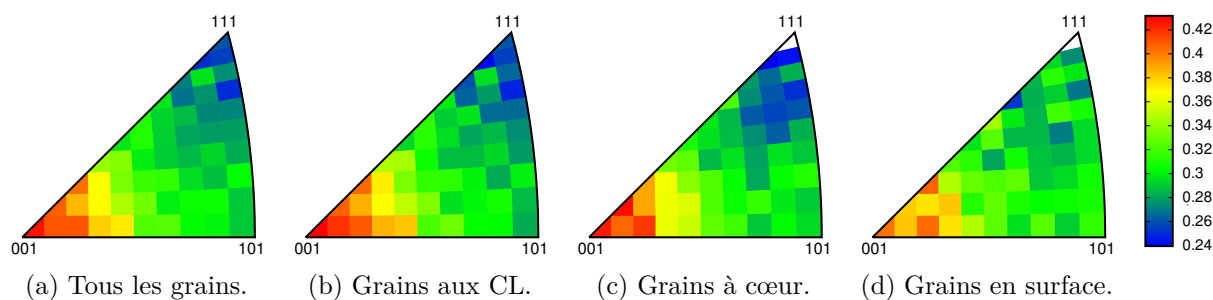


Fig. 3.28 – Valeurs moyennées du taux de triaxialité σ_{triax} dans le triangle standard.

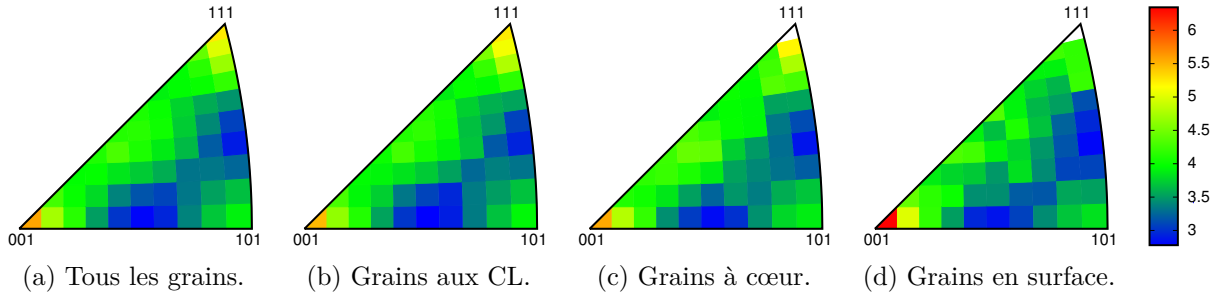


Fig. 3.29 – Valeurs moyennées du nombre de systèmes actifs N_γ dans le triangle standard.

Type	Cellules de dislocations	Densité de dislocations (référence 111)	ε_{mises}^p calculé
1 (autres)	// \underline{n}^s	0,66	1,5
2 (001)	// \underline{t}	0,5	2
3 (111)	pas de lien	1	1

Tab. 3.10 – Comparaison des structures de dislocations, densité de dislocations et ε_{mises}^p calculé dans les différentes zones du SST.

zones correspond assez bien les isovaleurs de déformation plastique équivalente obtenues en figure 3.25. Cependant, dans les zones où la densité de dislocations devrait être la plus faible, nos résultats donnent une forte déformation plastique et inversement. La déformation plastique étant directement reliée à la densité de dislocations, d’après les études de Huang *et al.*, nous devrions obtenir l’inverse de cette tendance. Néanmoins, bien que ces études expérimentales portent sur des matériaux CFC, il n’est pas certain que la même tendance soit également observée sur de l’acier 316L. En effet, la matrice d’interaction du cuivre diffère de celle de notre matériau, les résultats expérimentaux sur le cuivre ne sont pas totalement transposable à notre matériau. Une analyse similaire, menée cette fois sur l’acier 316L, serait nécessaire afin de pouvoir procéder à une comparaison directe.

Buque *et al.* ont eux travaillé sur des polycristaux de nickel sous chargement cyclique ($0,05\% < \Delta\varepsilon^p/2 < 0,5\%$) [165]. Ils ont conclu qu’il n’y avait pas de différences entre les structures de dislocations observées sur les grains à cœur et en surface. De notre côté, il semble qu’en surface les différences entre les zones du SST soient accrues (figures 3.24 et 3.25). Les résultats de nos simulations sont donc capables de faire ressortir les différentes zones du SST sans pour autant retranscrire complètement les tendances observées expérimentalement. Cela représente à la fois un nouvel axe de travail pour améliorer le modèle au niveau du grain et un nouveau moyen de comparaison afin de choisir et identifier des lois de comportement monocristallines.

3.4 Résumé

Nous avons procédé dans ce chapitre à des calculs EF d’agrégats polycristallins en 3D sous plusieurs chargements de fatigue et avec différentes configurations d’orientations. Les analyses locales et statistiques ont révélé plusieurs effets :

- les effets de bords entraînés par les conditions aux limites ont pu être mis en évidence. Ils augmentent la dispersion de la déformation plastique et des contraintes. Ces effets s’estompent à une distance de 10–15 μm , *i.e.* une rangée de grains suffit à rétablir l’état de contraintes local.

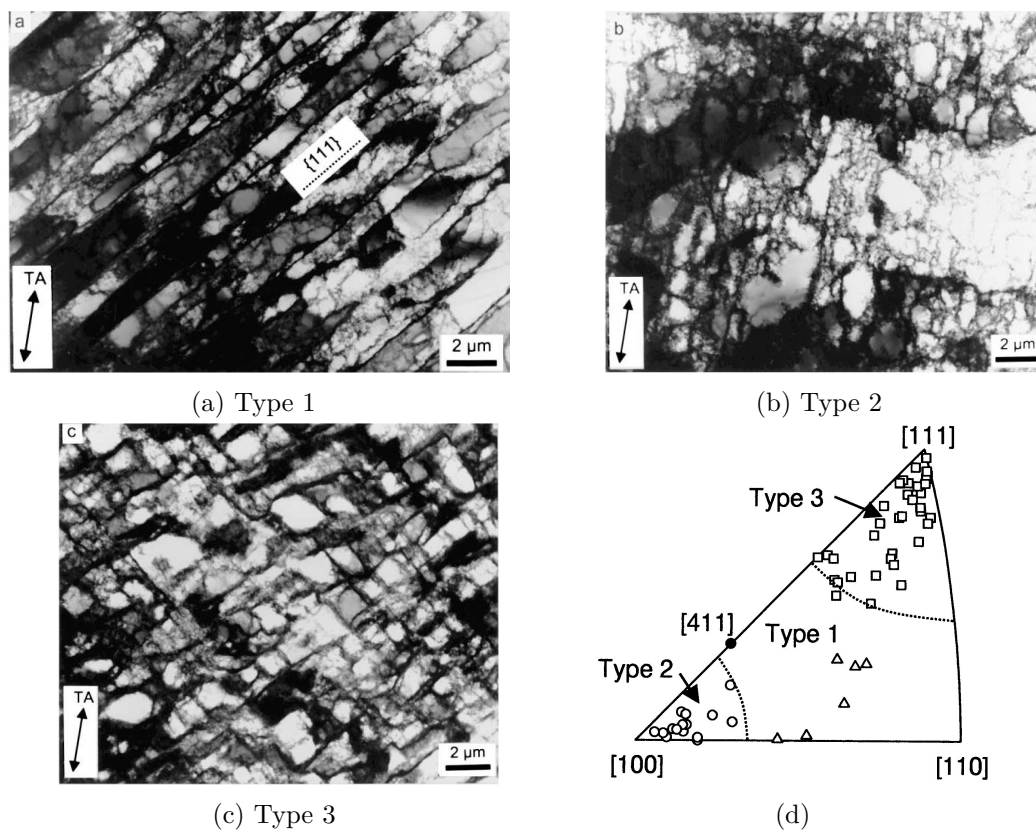


Fig. 3.30 – Configurations des cellules de dislocations correspondant à différentes régions du triangle standard identifiées par Huang *et al.* [19]. (a) Cellules alignées avec les plans de glissement. (b) Cellules alignées avec l'axe de chargement. (c) Organisation des cellules aléatoire. (d) Limites entre les zones dans le triangle standard.

-
- on note un effet de surface notable qui, de même que les effets de bords, favorise la dispersion des résultats sur les grains en contact avec la surface libre. Cette observation justifie le fait que la surface constitue une zone naturelle pour l'amorçage.
 - sous chargement biaxial, à même déformation équivalente, la déformation plastique est plus élevée qu'en uniaxial : un chargement de nature biaxiale est donc plus nocif. De plus, les structures de localisation à l'intérieur de l'agrégat s'organisent uniquement sous formes de facettes B, favorisant l'émergence des PSM en surface.
 - par effet de voisinage, la déviation des champs de contraintes et de déformations aux abords des joints de grains provoque une concentration de la plasticité en ces zones. Cela cause la formation d'intrusions/extrusions plus prononcées près des joints de grains, ce qui laisse supposer que l'amorçage des fissures courtes a lieu préférentiellement en surface près des joints de grains.
 - afin de pouvoir rendre compte de tous ces effets, il est primordial d'utiliser des maillages fins avec une taille de maille homogène.

Chapitre 4

Prise en compte de la rugosité de surface

Sommaire

4.1	Génération des surface rugueuses et des maillages rugueux	114
4.1.1	Données	114
4.1.2	Caractérisation de la rugosité	114
4.1.3	Application sur les maillages	116
4.2	Résultats et discussion	117
4.2.1	Analyse des champs en surface	117
4.2.2	Analyse dans le volume de l'agrégat	118
4.2.3	Distributions en surface et à cœur	123
4.3	Résumé	126

Les procédés de mise en forme et traitements de surface appliqués sur les pièces mécaniques permettent de façonner la matière et de modifier ses propriétés mécaniques de surface (pré-écrouissage). Ils ont parfois des effets néfastes qui sont difficiles à quantifier lorsque des singularités géométriques ou de comportement apparaissent à l'échelle mésoscopique. La microstructure, le relief de surface, le taux d'écrouissage et l'état de contraintes locales sont modifiés et jouent tous un rôle dans le processus d'amorçage et de micropropagation des fissures courtes de fatigue.

La modélisation fidèle, à l'échelle polycristalline, d'un état de surface pose plusieurs problèmes. En effet, comme nous l'avons vu en section 1.4.3, influent sur le comportement et sur l'amorçage des fissures de fatigue :

La microstructure du matériau. Reproduire la microstructure exacte (topologie des grains et orientation) d'un agrégat 3D d'acier 316L reste possible, mais pas par une méthode non destructrice. Ceci est lié à la composition chimique du matériau et à la taille de grain. Cette étape reste encore difficile à franchir sans détériorer le matériau.

Le relief de surface. Il est maintenant possible d'obtenir les surfaces de rugosité, d'une précision de l'ordre de l'ångström (1×10^{-10} m) directement à partir de mesures, via l'AFM par exemple. La correspondance exacte entre le relief et la microstructure (EBSD) est aussi importante vu que dans le cas d'arrachement de matière, le relief devient intimement lié à la morphologie des grains.

L'écrouissage de surface. Utilisé pour ralentir l'amorçage des fissures, il n'est efficace que si un polissage est réalisé ensuite (cf. section 1.4.2). Il peut être caractérisé en surface par

des tests de microdureté. En volume, il faut procéder à une coupe pour réaliser un profil de microdureté en fonction de la profondeur, et donc, détériorer le matériau.

Les contraintes résiduelles. Relaxées au cours des cycles, elles ont un effet limité vis-à-vis d'un chargement de fatigue.

Pour pouvoir valider les calculs et examiner plusieurs étapes des phases d'amorçage et de micropropagation, l'idéal est de pouvoir accéder à toutes ces informations locales sans détériorer ou affecté le spécimen durant l'essai de fatigue. Cela reste encore hors de portée. Il est pourtant possible d'acquérir certaines de ces mesures après essai en détériorant le spécimen. C'est le cas dans le cadre du projet ANR AFGRAP, où on utilise des mesures de tomographie, puis d'EBSD par polissages successifs sur un agrégat ayant déjà fissuré. L'objectif est de simuler la microstructure tridimensionnelle reproduite afin d'étudier les mécanismes ayant conduit à l'amorçage. Cela apporte certaines complications. Par exemple, après déformation, lorsque la plasticité a pris place dans les grains, les champs de diffraction sont perturbés, ce qui nuit à la reproduction de la microstructure.

Compte tenu du nombre de facteurs influents, nous proposons ici d'étudier de manière isolée l'effet de la rugosité, *i.e.* des singularités géométriques, sur la localisation de la déformation plastique à l'échelle mésoscopique. Suivant les finitions, de l'état brut industriel au poli fin, l'échelle des singularités va de la taille de grain (arrachement de matière) à des stries de quelques micromètres. Il va de soi que cela ne reflète qu'un aspect de l'état de surface, l'étudier à part permet une meilleure compréhension de son influence.

4.1 Génération des surface rugueuses et des maillages rugueux

La première étape dans cette étude consiste à générer des maillages d'agrégats comportant une rugosité contrôlée en surface. Les maillages vierges ont déjà été créés précédemment, il ne reste qu'à appliquer une rugosité sur la surface libre de ces maillages.

4.1.1 Données

Nous disposons de données sur deux états de surface différents issus de la thèse de Le Pécheur [18]. Les deux états de surface sont brut et brossé (cf. figure 4.1). Ils présentent chacun des stries dans une direction principale. Ils peuvent donc être principalement caractérisés par un profil unidirectionnel.

4.1.2 Caractérisation de la rugosité

Une méthodologie de génération de surface à partir de ces profils a été mise en place, les grandes étapes sont illustrées en figure 4.2. Le profil est caractérisé par une fonction discrète $f(l)$, où l représente l'abscisse du profil de rugosité. Ce dernier est extrudé dans la direction des stries pour donner une surface $g(x,y)$. Puis la surface $g(x,y)$ est légèrement bruitée par une surface fractale de $R_a = 0,5 \mu\text{m}$ et de dimension fractale D_f égale à celle du profil. Par ce procédé, les stries restent présentes, on obtient de légères irrégularités dans toutes les directions et la surface conserve la même dimension fractale que le profil. La procédure consiste en la création d'une surface auto-affine, *i.e.* une somme de transformées de Fourier discrètes, paramétrée par le facteur R_a et la dimension fractale D_f . Ceci est réalisé à l'aide des outils développés dans la thèse de Vallet, que le lecteur est invité à consulter pour plus de détails sur les fractales [166]. La surface de rugosité finale $h(x,y)$ présente donc toujours des stries suivant l'allure du profil dans une direction et des variations plus légères dans l'autre direction.

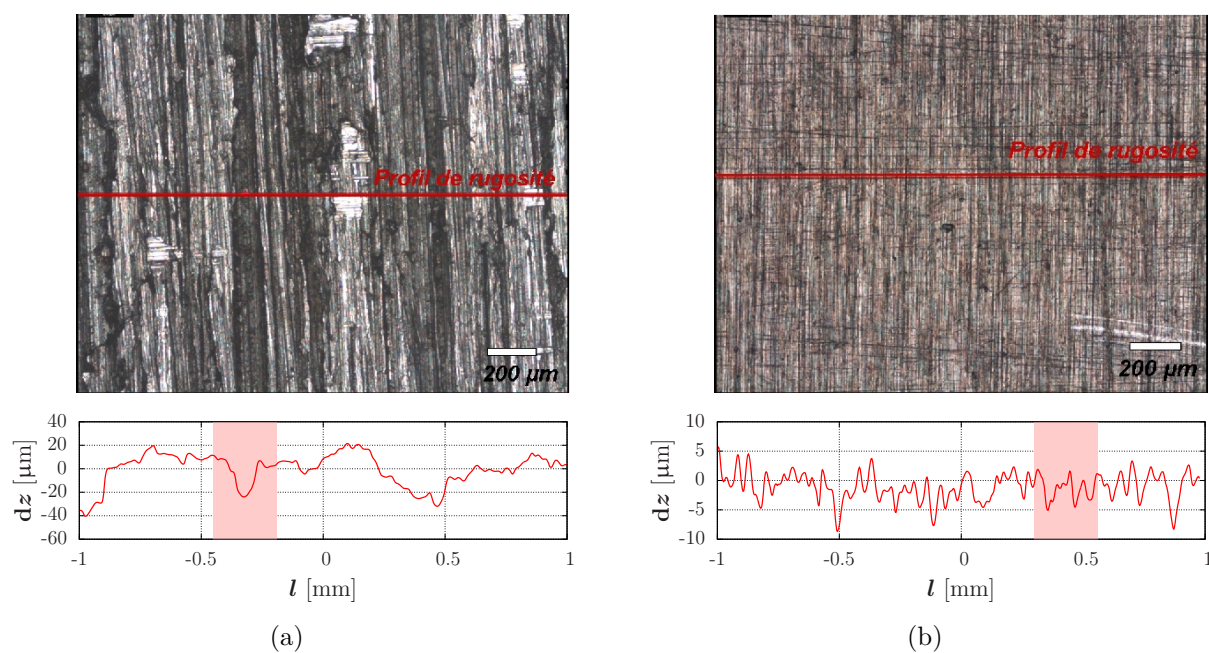


Fig. 4.1 – Images et profils de rugosité des états (a) brut et (b) brossé [18]. Les parties encadrées en rouge correspondent aux secteurs utilisés pour générer les surfaces de rugosité appliquées sur les maillages.

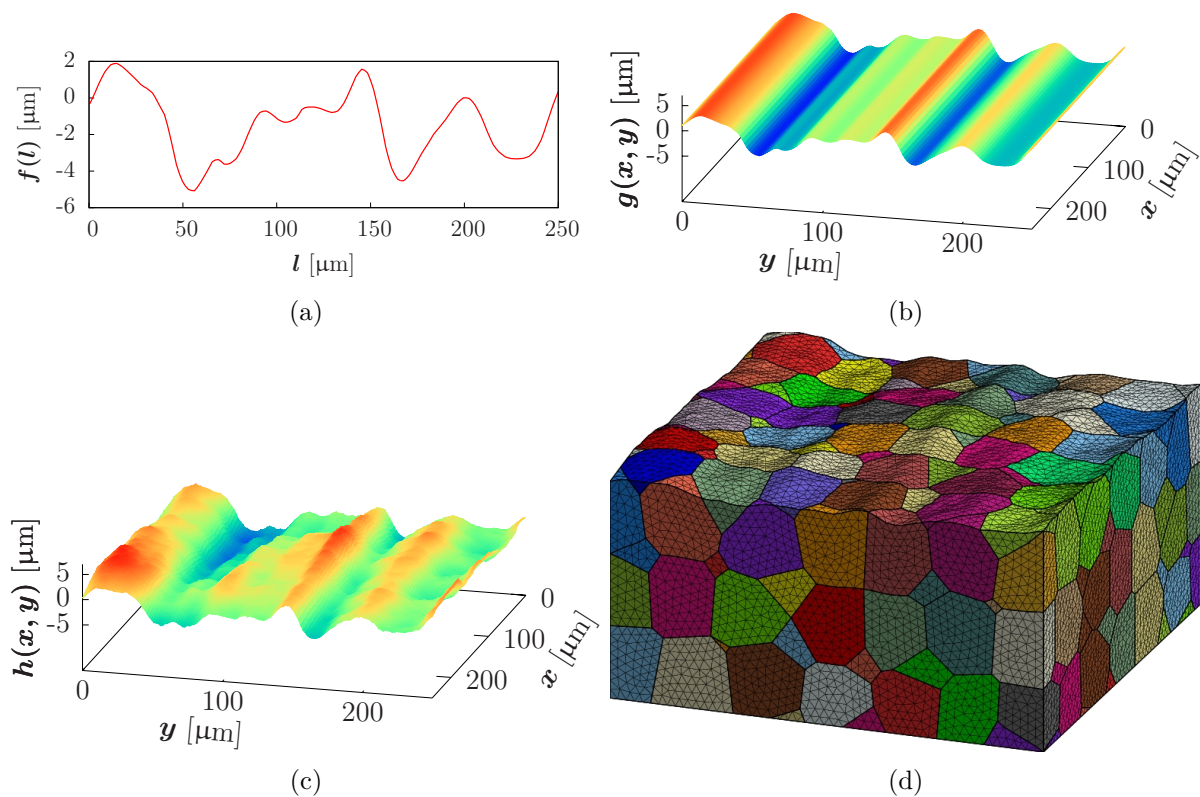


Fig. 4.2 – Étapes de génération des surfaces de rugosité et des maillages à partir d'un profil (surface brossée ici). (a) Profil de rugosité. (b) Surface extrudée. (c) Surface bruitée. (d) Maillage résultant.

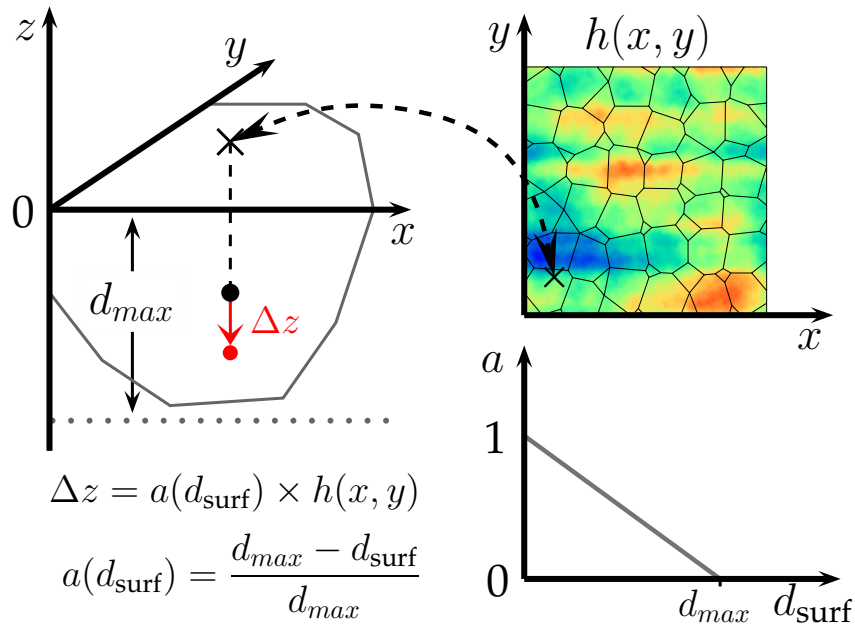


Fig. 4.3 – Schéma d'application d'une surface de rugosité sur un maillage par méthode de déplacement de nœuds.

4.1.3 Application sur les maillages

Une fois la géométrie de la rugosité générée, son application sur les maillages d'agrégats se fait par la méthode déplacement de nœuds, illustrée en figure 4.3. Compte tenu de l'ordre de grandeur de la rugosité des profils devant la taille de maille, limiter le déplacement aux nœuds de la surface conduirait à la dégénérescence de certains éléments en surface. Afin de préserver les éléments, le déplacement des nœuds s'effectue aussi dans le volume.

La modification de la position des nœuds Δz se fait uniquement dans la direction de la normale à la surface libre $\underline{n}_{\text{surf}}$ et dans une certaine épaisseur fixée $d_{\text{surf}} < d_{\text{max}}$. Pour chaque nœud compris dans la zone affectée, on calcule la projection sur la surface libre pour déterminer la hauteur de rugosité correspondante $h(x, y)$. Le coefficient appliqué au déplacement des nœuds $a(d_{\text{surf}})$ diminue linéairement jusqu'à atteindre la profondeur maximum d_{max} , ici égale à la moitié de l'épaisseur de l'agrégat soit $62,5 \mu\text{m}$.

Une certaine finesse de maillage est nécessaire pour décrire complètement les singularités géométriques propres à la rugosité de surface et éviter de créer des discontinuités fortes sur l'orientation des faces de la surface libre. De telles discontinuités peuvent être amplifiées ou « oubliées » dans les vallées avec de très petits rayons de courbure r_c , si la taille des éléments n'est pas petite devant r_c (cf. figure 4.4). Dans ce cas, des singularités géométriques, comparables à des entailles (zone encadrée en figure 4.4a), sont ajoutées et risquent d'amplifier les phénomènes de localisation. Cela peut donc nuire à la validité de la modélisation. Pour ces raisons, en plus de celles énoncées en section 3.3.1, nous définirons la rugosité sur le maillage fin créé pour l'étude en trois dimensions.

L'application des rugosités de surface (brossée et brute) est effectuée directement d'une part et en diminuant de moitié la hauteur du profil initial d'autre part. L'objectif de cette démarche est de séparer l'effet du type de relief (morphologie) et l'effet de la profondeur de celui-ci. La dénomination des maillages différents rugueux étudiés est résumée en tableau 4.1. Pour plus

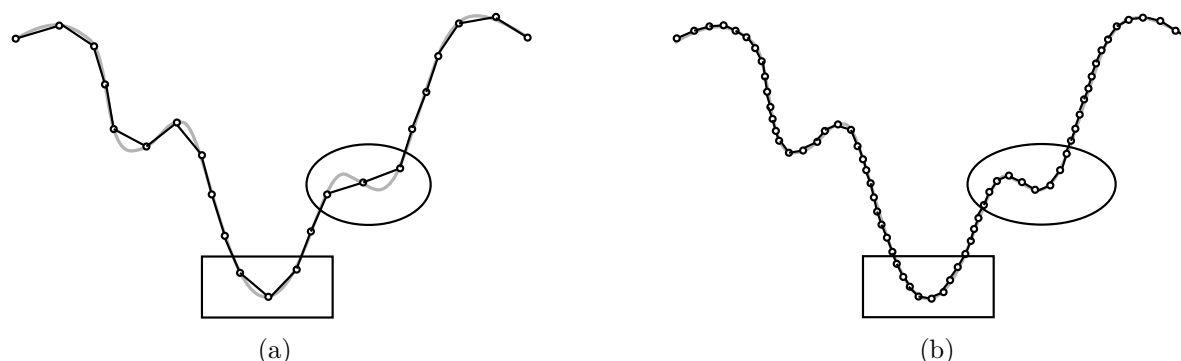


Fig. 4.4 – Maillage (a) grossier et (b) fin d'un profil de rugosité. Dans le cas du maillage grossier, les singularités géométriques sont amplifiées dans la zone encadrée mais diminuées dans la zone entourée.

Dénomination	État de surface	R_t	R_a	R_q	D_f
flat	lisse (vierge)	0 μm	0 μm	0 μm	0
raw_1.0 / raw	brut	61,3 μm	11,1 μm	14,09 μm	0,466
raw_0.5	brut	30,65 μm	5,65 μm		0,466
brushed_1.0 / brushed	brossé	14,3 μm	1,88 μm	2,38 μm	0,265
brushed_0.5	brossé	7,15 μm	9,94 μm		0,265

Tab. 4.1 – Dénomination et caractéristiques des maillages rugueux générés.

de lisibilité, lorsqu'aucun coefficient n'est spécifié après le type de rugosité, on considère le coefficient égal à un, *i.e.* la dénomination « raw » équivaut à « raw_1.0 ».

4.2 Résultats et discussion

Les maillages rugueux ont été utilisés dans des calculs EF similaires à ceux de la section 3.3.2, *i.e.* modèle de plasticité cristalline, paramètres matériaux et conditions aux limites identiques. Un seul jeu d'orientation est considéré, il s'agit du même que celui utilisé sur les maillages vierges. Les agrégats rugueux sont soumis à trois chargements : uniaxial-x, uniaxial-y et biaxial-eq.

4.2.1 Analyse des champs en surface

Une première analyse des résultats est pratiquée sur l'évolution des champs mécaniques en surface suivant la rugosité de surface, en partant de l'agrégat vierge jusqu'à la surface brute. La figure 4.5 illustre, en surface libre, sous un chargement uniaxial-y, les champs de la somme des glissements cumulés $\sum \gamma_{cum}$, de la déformation plastique équivalente ε_{mises}^p , la contrainte équivalente de von Mises σ_{mises} et le nombre de systèmes actifs N_γ pour chaque type de rugosité. La carte EBSD ainsi que les cartes de relief des surfaces rugueuses sont aussi représentées. Dans cette configuration, les stries sont orientées perpendiculairement à la direction de chargement, ce qui correspond à la situation la plus critique.

De manière générale, on remarque que plus la profondeur de rugosité augmente et moins l'influence de l'orientation sur les champs locaux se fait sentir au profit du relief de surface. Dans le cas de la surface brossée (figures 4.5l à 4.5o), l'aspect cristallographique de la localisation

persiste encore tandis qu'avec une surface brute (figures 4.5v à 4.5y), c'est uniquement le relief de surface qui pilote les phénomènes de localisation. La position des valeurs maximales est donc bien différente du calcul témoin sans rugosité. Certains grains, très peu chargés sans rugosité, peuvent être critiques avec un état de surface brossé ou brut.

On observe également une nette tendance à concentrer la déformation plastique dans les creux des vallées. Néanmoins, dans les creux de la surface brossée, on retrouve encore de fortes discontinuités entre les grains (cf. figure 4.5l). L'orientation garde tout de même une certaine influence tant que le relief ne dépasse pas une certaine limite qu'il convient de caractériser. D'après les résultats obtenus, pour le cas de l'état de surface brossé, cette limite doit correspondre à une réduction d'un facteur 4, soit un $R_a \sim 0,5 \mu\text{m}$

Concernant les contraintes, on constate une localisation encore plus marquée dans les vallées. Les écarts entre les zones de minima et de maxima sont aussi très élevés. Certains joints de grains conservent une forte localisation des contraintes (cf. figure 4.5x), même s'ils ne sont pas situés dans un creux. Ceci est sans doute dû aux fortes désorientations et à la proximité des conditions aux limites.

Le nombre de systèmes actifs devient globalement moindre lorsque la rugosité augmente, bien qu'il se corrèle assez bien avec le relief. Dans les zones de forte localisation, la plasticité se concentre sur certains systèmes de glissement « plus efficaces ».

En figure 4.6 et 4.7 sont présentés les isovaleurs des variables étudiées, pour les états de surface vierge, brossé et brut, toujours en surface libre, mais sous les chargements uniaxial-x et biaxial-eq respectivement.

Dans le cas uniaxial-x, les stries sont parallèles à la direction de chargement. On remarque que les profils de localisation changent beaucoup moins que dans le cas uniaxial-y, étudié précédemment. Cela laisse plus d'importance à l'aspect cristallographique. De manière analogue, la localisation de la déformation plastique et des contraintes s'intensifie. Les bandes de localisation de déformation plastique orientées à 45° visibles sur la surface vierge (figure 4.6b) semblent s'effacer avec les surfaces brossées (figure 4.6g) et brutes (figure 4.6l). À l'inverse, les bandes perpendiculaires au chargement s'intensifient. Le nombre de systèmes de glissement actifs devient également moins important (figures 4.6e, 4.6j et 4.6o).

L'orientation des stries émanant du procédé d'usinage, ou de finition de surface, par rapport à la direction de chargement, a un impact sur la localisation des zones critiques. C'est du moins le cas sous chargement uniaxial. Il y a une compétition entre l'orientation des grains et le relief de surface dans les mécanismes de localisation de la déformation en surface des polycristaux. Sous chargement biaxial-eq, la localisation apparaît aussi dans tous les creux, quelle que soit l'orientation de la strie. On remarque également quelques bandes de localisation perpendiculaires aux stries (cf. figure 4.7b), que l'on n'observait pas dans le cas d'un agrégat vierge. Comme constaté en section 3.3.2, l'équibiaxialité du chargement provoque davantage de localisation de la déformation plastique et des contraintes en surface libre, même en présence de rugosité.

4.2.2 Analyse dans le volume de l'agrégat

Les isovaleurs de $\sum \gamma_{cum}$ en volume, pour une surface lisse et brossée, sont illustrées en figure 4.8, sous formes de coupes dans trois plans orthogonaux à l'axe x . Avec l'ajout de la rugosité de surface, la répartition de la déformation plastique se trouve modifiée uniquement dans la première rangée de grains en surface. La concentration a lieu dans les creux des vallées et s'éloigne légèrement des joints de grains.

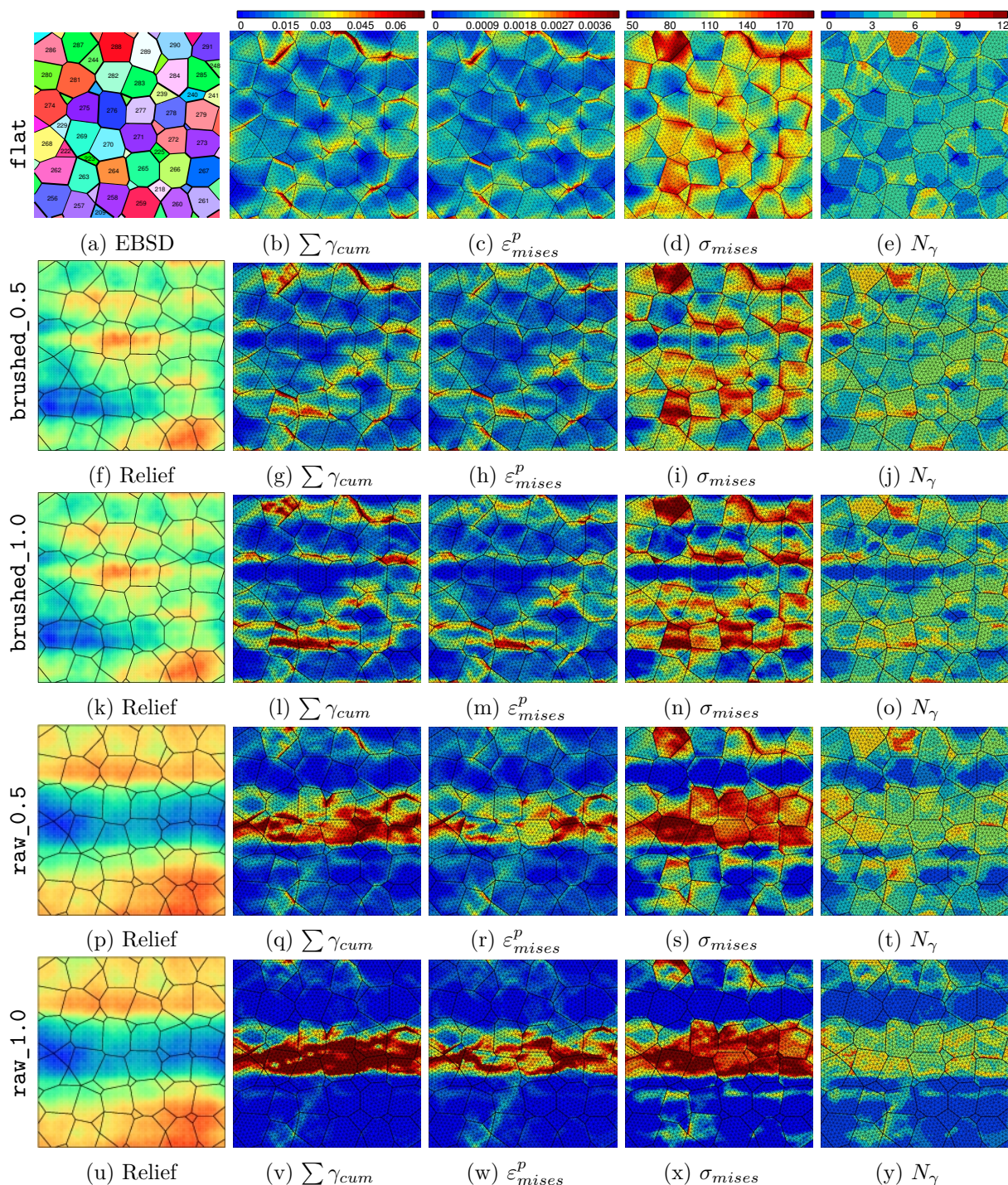


Fig. 4.5 – Influence du type de rugosité et de l’amplitude moyenne de rugosité : isovalues en surface libre des variables étudiées, sous chargement uniaxial-y, *i.e.* perpendiculairement aux stries, pour différentes rugosités de surface. (a) Carte EBSD des grains en surface. (b-e) Résultats sur l’agrégat témoin avec surface libre lisse (**flat**). (f,k,p,u) Cartes de relief de surface de chaque état de surface. (g-j) État de surface brossé $\times 0,5$ (**brushed_0.5**). (l-o) État de surface brossé $\times 1$ (**brushed_1.0**). (q-t) État de surface brut $\times 0,5$ (**raw_0.5**). (u-y) État de surface brut $\times 1$ (**raw_1.0**).

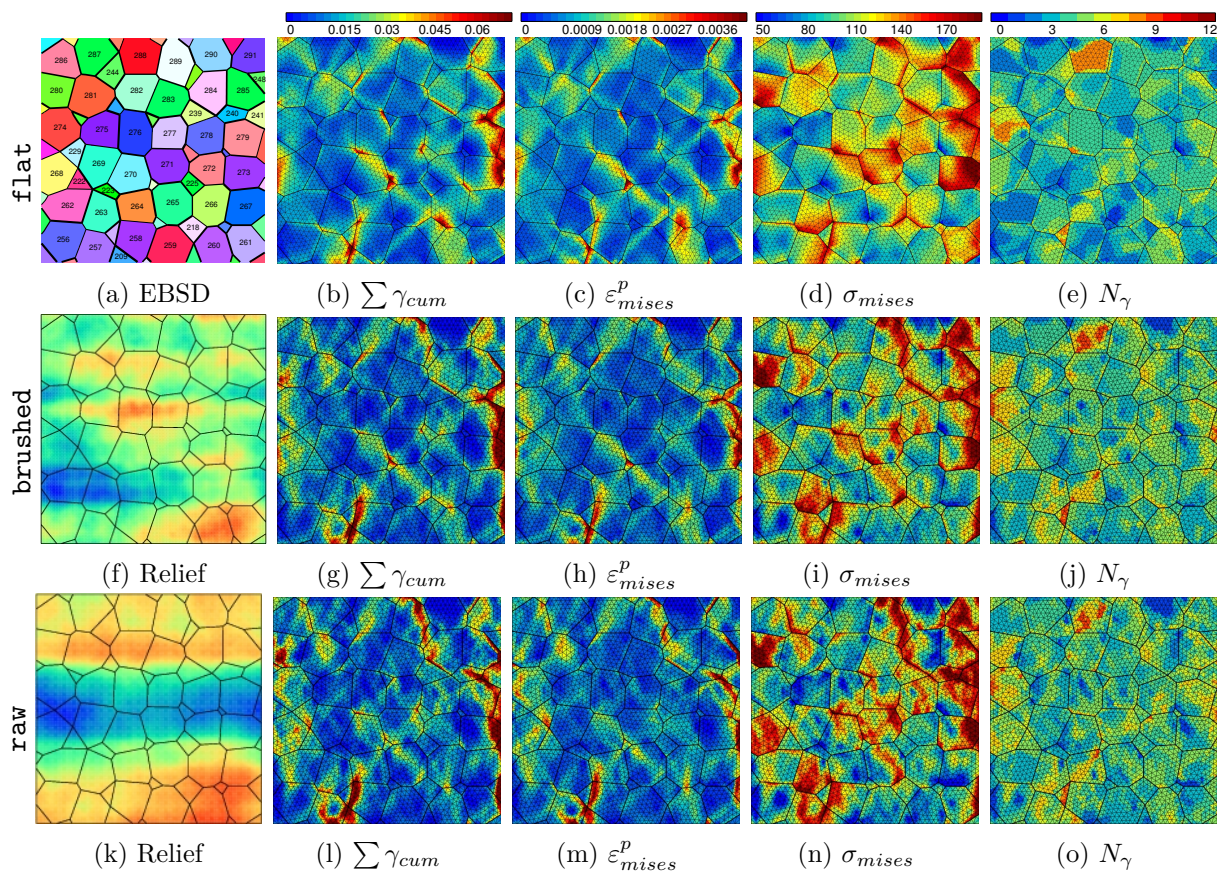


Fig. 4.6 – Influence du type de rugosité sous chargement uniaxial-x, *i.e.* dans le sens des stries.

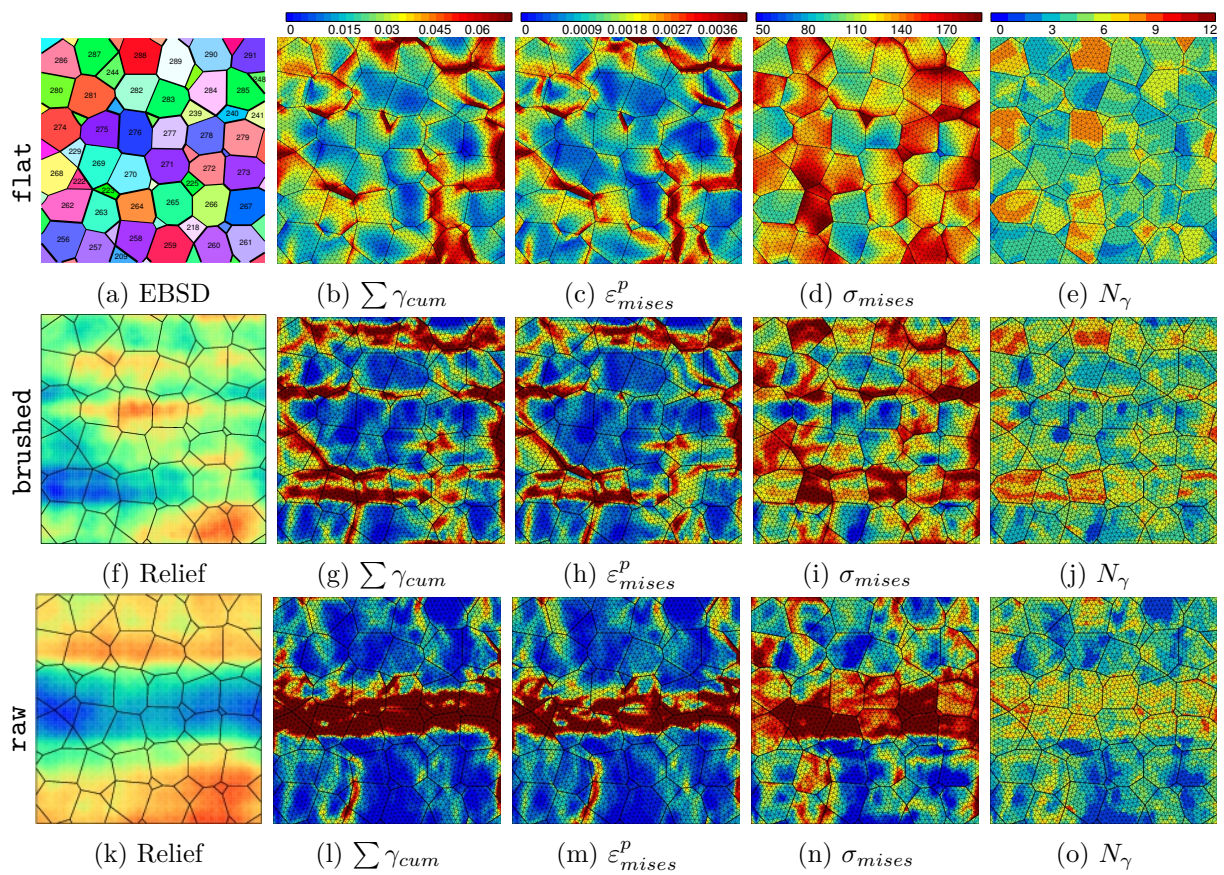


Fig. 4.7 – Influence du type de rugosité sous chargement biaxial-eq.

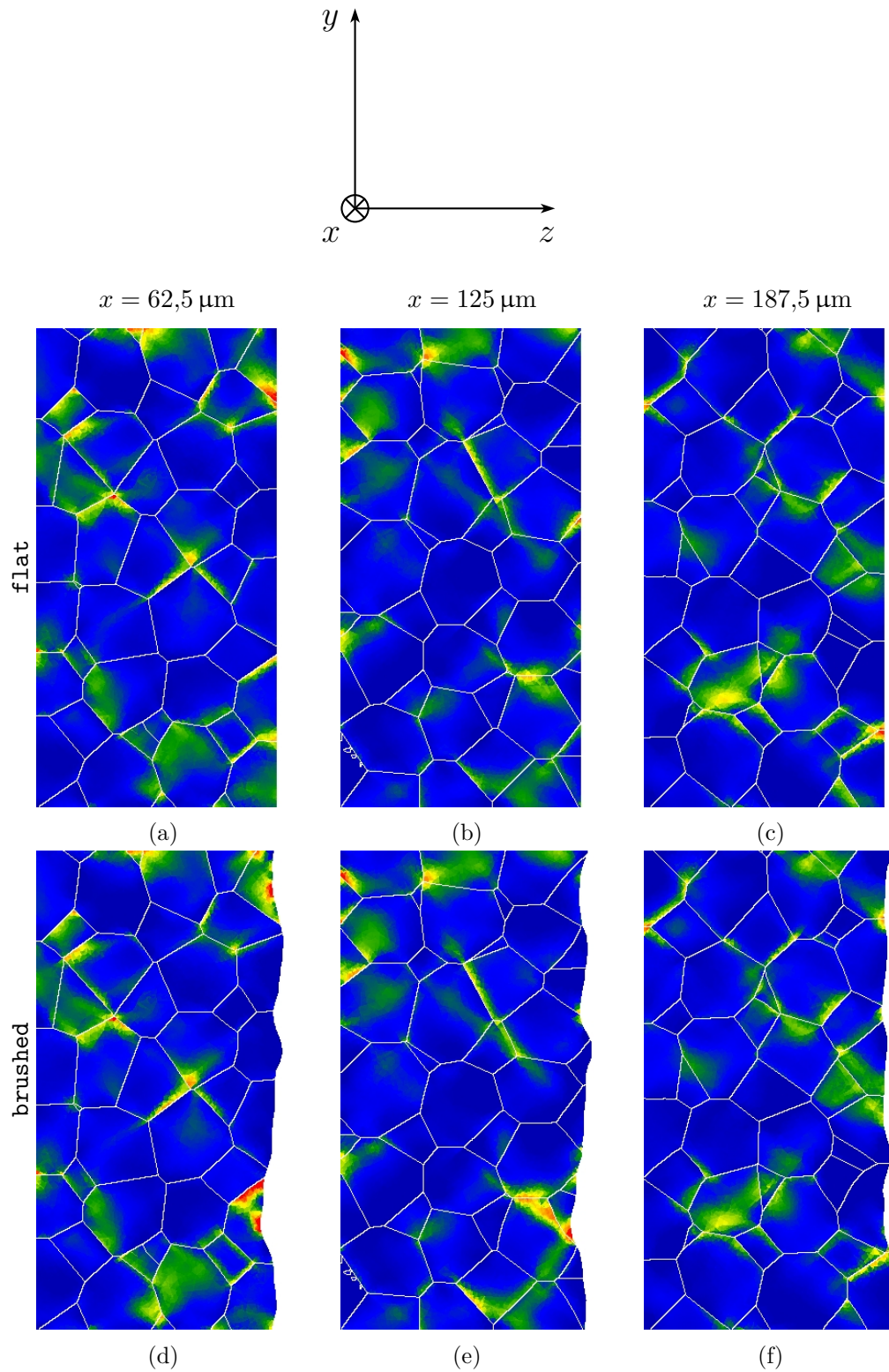


Fig. 4.8 – Vues en coupe des isovaleurs de $\sum \gamma_{cum}$ pour une surface lisse et brossée, dans 3 plans orthogonaux à la direction des stries $x = \{62,5 \mu\text{m}; 125 \mu\text{m}; 187,5 \mu\text{m}\}$.

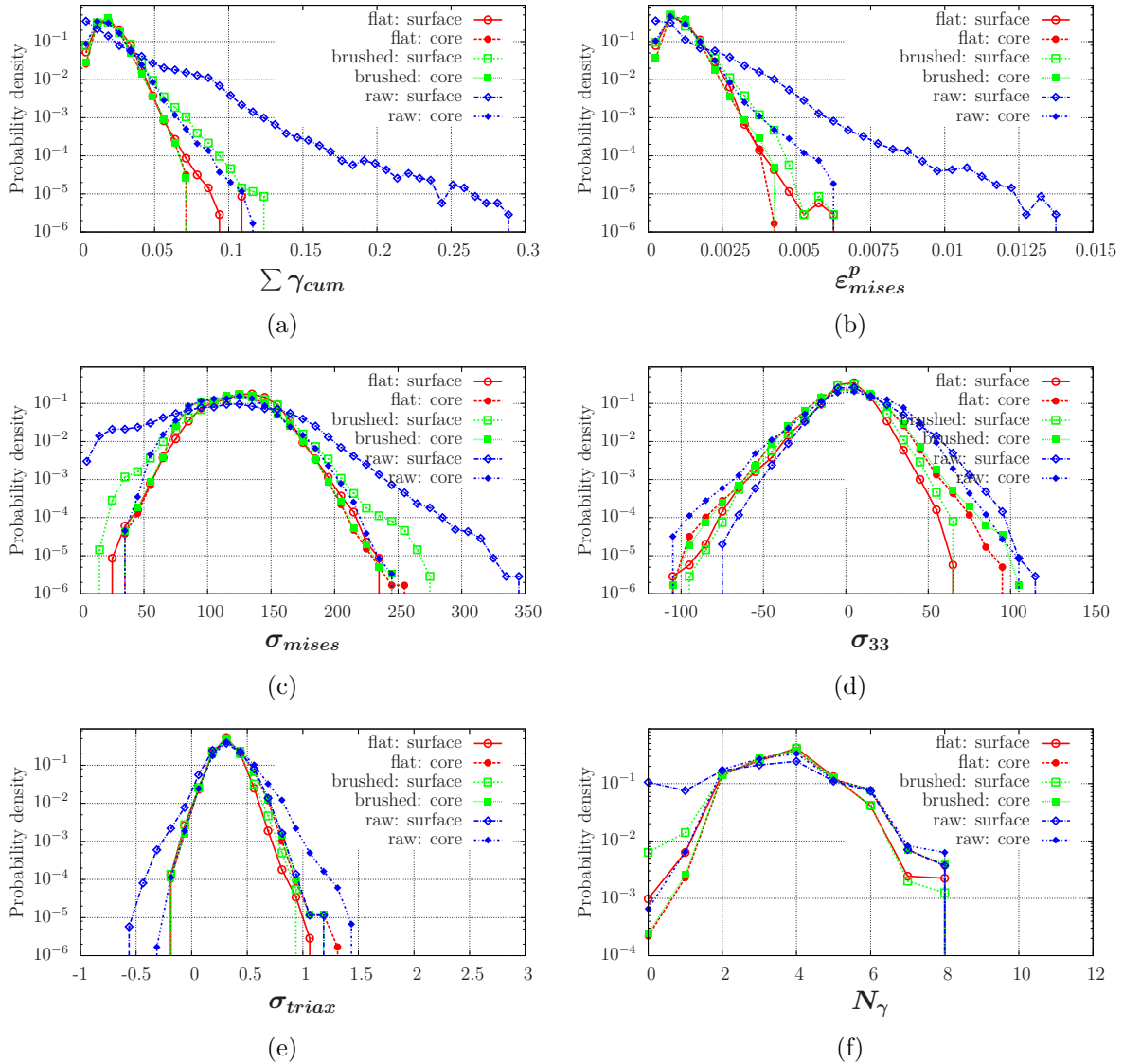


Fig. 4.9 – Distributions des variables étudiées avec différents types de rugosité de surface.

4.2.3 Distributions en surface et à cœur

La figure 4.9 présente les distributions, en échelle logarithmique, des variables étudiées suivant les types de rugosité appliqués sur le maillage. On peut donc visualiser plus quantitativement l'impact des différents états de surface dans les grains en surface d'une part (symboles vides) et dans les grains à cœur d'autre part (symboles pleins). Les distributions dans les grains à cœur ne semblent pas touchées par l'ajout d'une surface brossée. C'est uniquement dans les grains de surface que la dispersion augmente significativement. Dans le cas de l'état de surface brut, l'effet de la rugosité se ressent même en dessous de la première rangée de grains en surface.

La figure 4.10 présente de manière analogue les distributions en faisant varier la profondeur de la surface de rugosité appliquée. On y trouve les cas lisse (**flat**), brossé réduit de moitié (**brushed_0.5**) et brossé normal (**brushed_1.0**). Lorsqu'on réduit de moitié la profondeur de la rugosité, *i.e.* que les rayons de courbure sont doublés, on retrouve des distributions, en surface, beaucoup plus proches de l'état lisse que de l'état brossé.

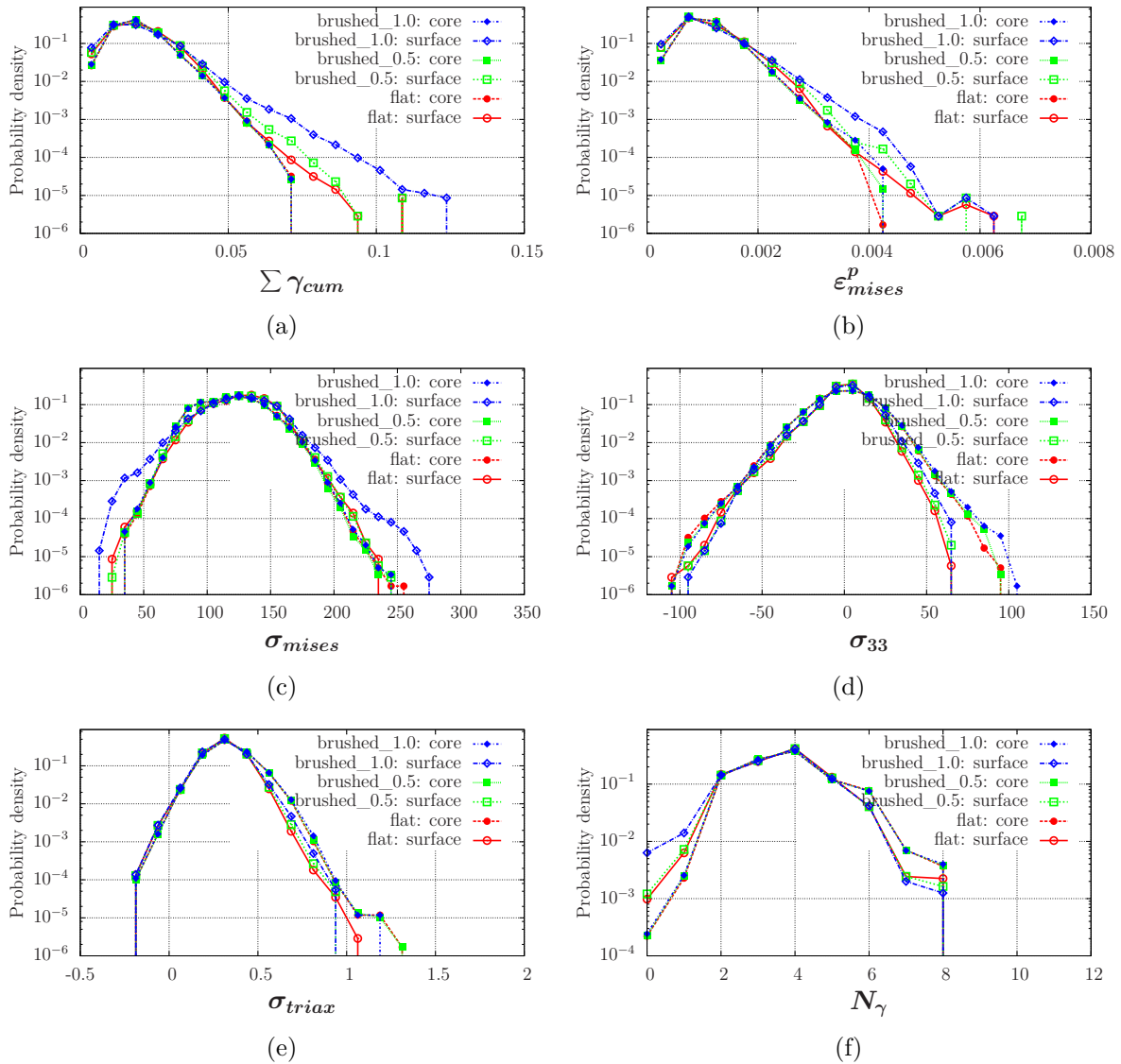


Fig. 4.10 – Distributions des variables étudiées avec différents profondeurs de rugosité de surface (état de surface brossé).

Cela laisse penser que la morphologie de la surface de rugosité joue un rôle moins important que la profondeur, caractérisée généralement par le facteur R_a . La réduction de moitié du relief de surface en augmentant sur les rayons de courbure, peut donc donner des résultats efficaces en termes de nombres de cycles à l'amorçage et de durée de vie en fatigue. Ces conclusions font cependant abstraction des paramètres caractérisant l'état de surface du matériau cités en début de chapitre, tels que l'écroutissage local et les contraintes résiduelles.

La figure 4.11 montre les distributions obtenues avec une surface brossée sous les trois chargements étudiés dans ce chapitre. Dans l'ensemble des résultats avec une surface brossée, on peut classer les chargements par nocivité croissante : uniaxial-x, uniaxial-y et biaxial-eq.

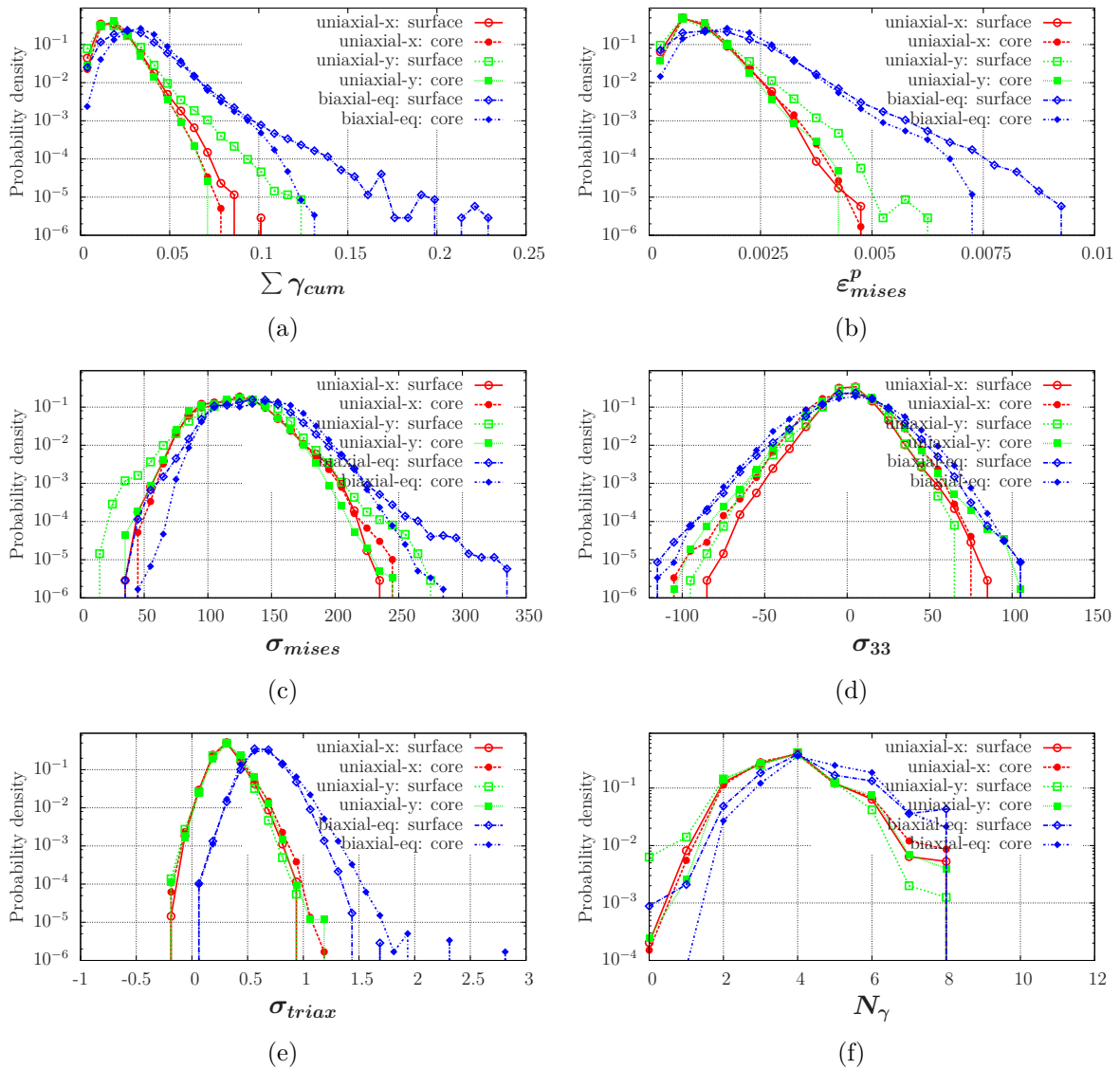


Fig. 4.11 – Distributions des variables étudiées sous différents chargements (état de surface brossé).

4.3 Résumé

Ce chapitre visait à décrire l'effet d'une surface rugueuse sur les champs locaux en surface libre et dans le volume des agrégats polycristallins. Pour cela deux types de rugosité ont été appliqués sur le maillage utilisé précédemment. Plusieurs enseignements ont été tirés de cette étude :

- l'ajout d'une rugosité de surface dans les calculs EF d'agrégats polycristallins entraîne une modification des profils de localisation. Les creux des vallées du relief de surface deviennent des sites de localisation systématiques.
- on assiste à une compétition entre les effets de la rugosité de surface et l'orientation cristalline des grains. La localisation est influencée par ces deux paramètres de manière plus ou moins équilibrée selon le degré de relief de surface.
- l'influence de la rugosité de surface s'observe essentiellement dans la première couche de grains en surface, les grains à cœur ne subissant que très peu les effets du relief de surface.
- en uniaxial, on note une importance capitale de l'orientation des stries par rapport à la direction de chargement. Ce n'est pas le cas en biaxial. Une étude faisant varier l'orientation de ces stries par pas de 15° ou 30° pourrait compléter cette première analyse.
- l'augmentation des rayons de courbures est très bénéfique en termes de localisation de la déformation plastique et des contraintes.

Chapitre 5

Étude d'un agrégat 3D semi-périodique

Sommaire

5.1	Génération d'agrégats semi-périodiques	128
5.1.1	Topologie	128
5.1.2	Maillage	133
5.2	Chargement et conditions aux limites semi-périodiques	134
5.2.1	Formulation du problème périodique	134
5.2.2	Chargement dans le cas semi-périodique	134
5.2.3	Conditions aux limites conservant la périodicité	138
5.3	Mise en place des calculs	140
5.3.1	Maillage	140
5.3.2	Conditions aux limites	140
5.3.3	Parallélisation	140
5.4	Résultats et discussion	141
5.4.1	Champs locaux en surface	141
5.4.2	Distributions globales	141
5.4.3	Influence des paramètres	143
5.4.4	Analyse dans le triangle standard	147
5.5	Résumé	147

Les effets de bords rencontrés dans les calculs d'agrégats polycristallins nuisent de manière considérable au rendement des calculs en termes de données exploitables. En effet, imposer l'uniformité du déplacement normal sur une face de l'agrégat ajoute des contraintes cinématiques qui introduisent des artefacts sur le résultat du calcul. On a évalué à 10–15 μm , soit environ 5 % de la taille de l'agrégat étudié, la distance nécessaire pour atténuer ces effets de bords. La première couche de grains en contact avec ces limites n'est donc pas pleinement exploitable.

Les simulations d'agrégats périodiques permettent de s'affranchir de ces perturbations. Cependant, elles n'apportent pas la possibilité de traiter le cas d'une surface libre de contraintes. Ce chapitre est dédié à la modélisation semi-périodique d'un agrégat polycristallin, capable de gérer les deux aspects cités précédemment. Nous présenterons la méthode de génération du maillage semi-périodique, les conditions aux limites spécifiques à cette modélisation, la formulation du problème semi-périodique, la mise en place du calcul EF ainsi que les résultats obtenus.

5.1 Génération d'agrégats semi-périodiques

La génération synthétique de microstructures est une spécialité du Centre de Morphologie Mathématique. Les travaux menés sur les polycristaux ont donné naissance au programme de génération de structures polycristallines Vpoly3d [167]. Cet outil a été incorporé précédemment dans Z-set sous la forme d'un module Zvpoly3d. Il permet de générer des maillages d'agrégats répondant à différents critères (2D ou 3D, maillage réglé ou libre, périodique ou non, éléments linéaires ou quadratiques...) directement au format Z-set. Les travaux de Gérard [20] ont porté sur des maillages d'agrégats tridimensionnels périodiques, obtenus par décomposition de Voronoï, dont les éléments et les limites suivent la forme des grains. De ce fait, les limites ne sont pas planes (cf. figure 5.1b). Aucun polyèdre de Voronoï n'est tronqué, on évite donc de créer des arêtes très courtes, souvent responsables de la génération d'éléments aplatis lors de la procédure de maillage. Ceci permet également d'obtenir une taille de maille très homogène et un bon indice de qualité.

Dans le cadre de notre étude, on souhaite générer des maillages d'agrégats périodiques dans certaines directions seulement. Nous proposons ici une méthode de génération de maillages d'agrégats semi-périodiques synthétiques par décomposition de Voronoï qui a été intégrée dans le module Zvpoly3d. Elle se divise en plusieurs étapes, décrites ici pour un cas 3D :

1. génération des germes dans un domaine d'origine
2. réplification de ce domaine dans l'espace (directions périodiques et non périodiques)
3. décomposition de Voronoï pour générer la topologie de l'agrégat
4. maillage surfacique des grains et création automatique des entités nécessaires pour la formulation des conditions aux limites périodiques
5. maillage volumique de l'agrégat

Nous présentons la procédure de manière générique pour les cas 2D et 3D. En 2D, les paramètres indicés en z sont à ignorer, le maillage surface est remplacé par un maillage linéique et le maillage volumique par un maillage surfacique. La dimension du problème est caractérisée par le paramètre *dim*.

5.1.1 Topologie

Germes

La première étape réside dans la génération d'un nombre N_g de germes par processus de Poisson dans le domaine parallélépipédique (ou rectangulaire en 2D) Ω_0 dont les dimensions sont paramétrables (S_x, S_y, S_z) . Il est possible d'imposer un paramètre de répulsion R_{rep} entre les germes générés de manière aléatoire. Il s'agit du rayon de la sphère de répulsion produite à chaque tirage de germe. L'ensemble du volume occupé par cette sphère devient interdit, aucun germe ne peut y apparaître. L'algorithme de tirages de germe s'arrête dès lors que N_g germes ont été générés ou si l'ensemble des volumes interdits remplit le domaine Ω_0 .

On peut noter que la périodicité est prise en compte dans cet algorithme. En effet, si une sphère de répulsion déborde au-delà des limites de Ω_0 , la partie extérieure est reproduite dans les directions périodiques.

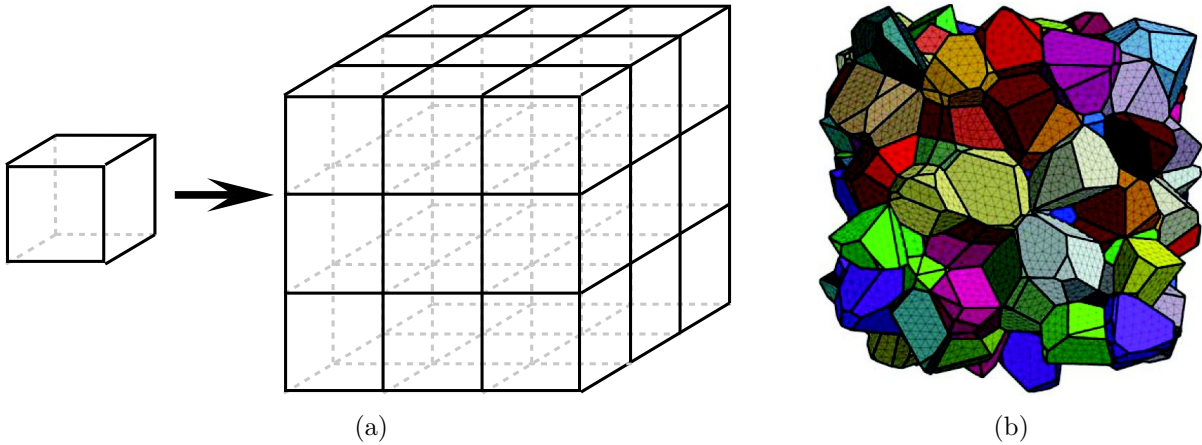


Fig. 5.1 – (a) Réplication du domaine dans toutes les directions. (b) Maillage d'agrégat périodique (d'après Gérard [20]).

Domaine	Ω_0	Ω_1	Ω_2	Ω_3	Ω_4	Ω_5	Ω_6	Ω_7	Ω_8
c_x	0	-1	-1	-1	0	0	+1	+1	+1
c_y	0	-1	0	+1	-1	+1	-1	0	+1

Tab. 5.1 – Numérotation des domaines répliqués et valeurs des coefficients déterminant leur position dans l'espace dans un cas 2D.

Réplication périodique

De manière générale, pour générer une topologie périodique dans le cadre d'une décomposition de Voronoï, la meilleure méthode consiste à répliquer par translation le domaine d'origine Ω_0 dans toutes les directions de l'espace. Cela amène à créer 26 (ou 8 en 2D) domaines Ω_i supplémentaires comme illustré en figure 5.1a. Chaque domaine Ω_i couvre l'espace d'origine $(c_x S_x, c_y S_y, c_z S_z)$ et de dimension (S_x, S_y, S_z) . Les positions de chaque domaine, respectivement en 2D et 3D, sont récapitulées dans les tableaux 5.1 et 5.2.

Deux choix s'offrent à nous pour réaliser un maillage de la microstructure périodique créée après décomposition de Voronoï :

- faire l'intersection de toutes les entités générées avec le domaine initial Ω_0 , ce qui donnera un maillage parallélépipédique aux faces plates. Fritzen *et al.* ont mis en place une

Domaine	Ω_0	Ω_1	Ω_2	Ω_3	Ω_4	Ω_5	Ω_6	Ω_7	Ω_8	Ω_9	Ω_{10}	Ω_{11}	Ω_{12}	Ω_{13}
c_x	0	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0	0	0	0
c_y	0	-1	-1	-1	0	0	0	+1	+1	+1	-1	-1	-1	0
c_z	0	-1	0	+1	-1	0	+1	-1	0	+1	-1	0	+1	-1

Domaine	Ω_{14}	Ω_{15}	Ω_{16}	Ω_{17}	Ω_{18}	Ω_{19}	Ω_{20}	Ω_{21}	Ω_{22}	Ω_{23}	Ω_{24}	Ω_{25}	Ω_{26}
c_x	0	0	0	0	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
c_y	0	+1	+1	+1	-1	-1	-1	0	0	0	+1	+1	+1
c_z	+1	-1	0	+1	-1	0	+1	-1	0	+1	-1	0	+1

Tab. 5.2 – Numérotation des domaines répliqués et valeurs des coefficients déterminant leur position dans l'espace dans un cas 3D.

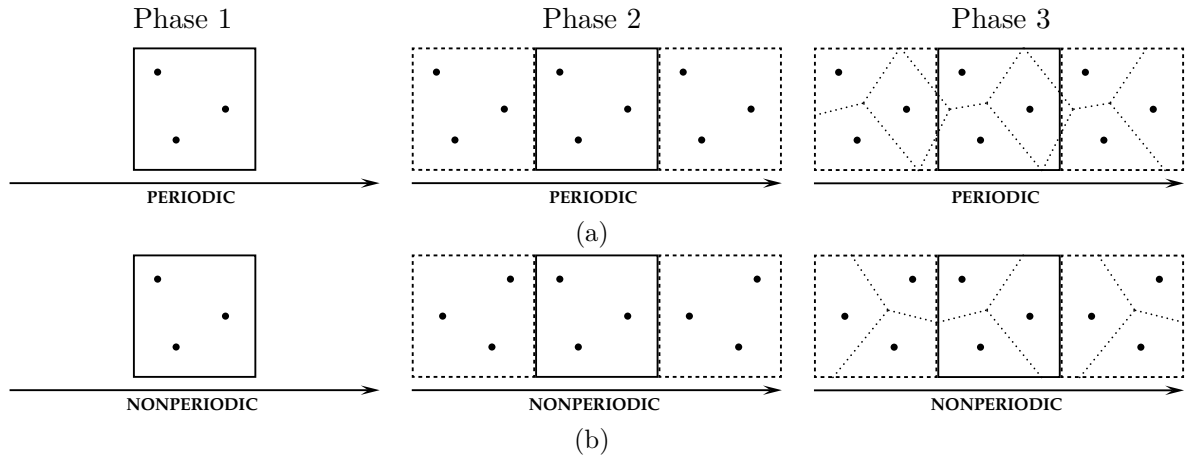


Fig. 5.2 – Schéma de propagation en trois phases du domaine (a) par translation (périodique) et (b) par symétrie (non périodique).

procédure automatique dédiée [168] en faisant appel à l’outil Qhalf, inclus dans le logiciel Qhull [169]. L’avantage est de simplifier l’application des conditions aux limites et d’obtenir une visualisation plus nette de la structure. Deux inconvénients sont néanmoins notables. D’une part, le découpage des entités topologiques peut conduire à la formation d’arêtes très courtes qui, lors de la procédure de maillage, entraînent la création d’éléments aplatis, qui sont nocifs pour la convergence des calculs EF. D’autre part, la mise en place numérique de la méthode est à la fois complexe et peu robuste. En effet, les opérations booléennes de données topologiques, opérées par voie numérique, peuvent entraîner, dans certains cas, des erreurs dues à la précision des valeurs numériques.

- ne conserver que les grains issus des germes du domaine initial S_0 . De ce fait les limites de la structure périodique suivent la forme des polyèdres comme le montre la figure 5.1b. À l’inverse, les conditions aux limites sont plus complexes à mettre en place, mais les entités n’étant pas altérées, un maillage de bonne qualité est assuré à la sortie.

Notre choix s’est porté sur la seconde option, de manière à simplifier la mise en place de la procédure et garantir une bonne qualité de maillage.

Cependant dans le cas des agrégats semi-périodiques, la périodicité est limitée à certaines directions. Il faut procéder différemment suivant le caractère périodique ou non de chacune des directions. On répliquera le domaine :

- par translation dans les directions périodiques ;
- par symétrie dans les directions non périodiques.

Ces procédés sont décrits par la figure 5.2 dans le cas simplifié d’un domaine bidimensionnel. L’utilité de propager les germes par symétrie dans les directions non périodiques réside dans la génération automatique des limites du domaine par la décomposition de Voronoï (cf. figure 5.2b). La figure 5.3 présente les étapes de construction de la topologie d’un agrégat 2D semi-périodique. Les polyèdres ainsi générés près des limites non périodiques du domaine ont la particularité d’avoir une taille un peu plus importante que dans un schéma classique.

Au cours de cette phase de propagation les relations de maîtres/esclaves sont définies entre chaque germe. Dans le cas d’une structure complètement périodique (dans toutes les directions), tout grain répliqué est esclave, son maître est le germe initial du domaine Ω_0 . Cela devient plus complexe dans le cas d’une structure semi-périodique.

Les germes maîtres sont définis comme suit :

- En 2D :

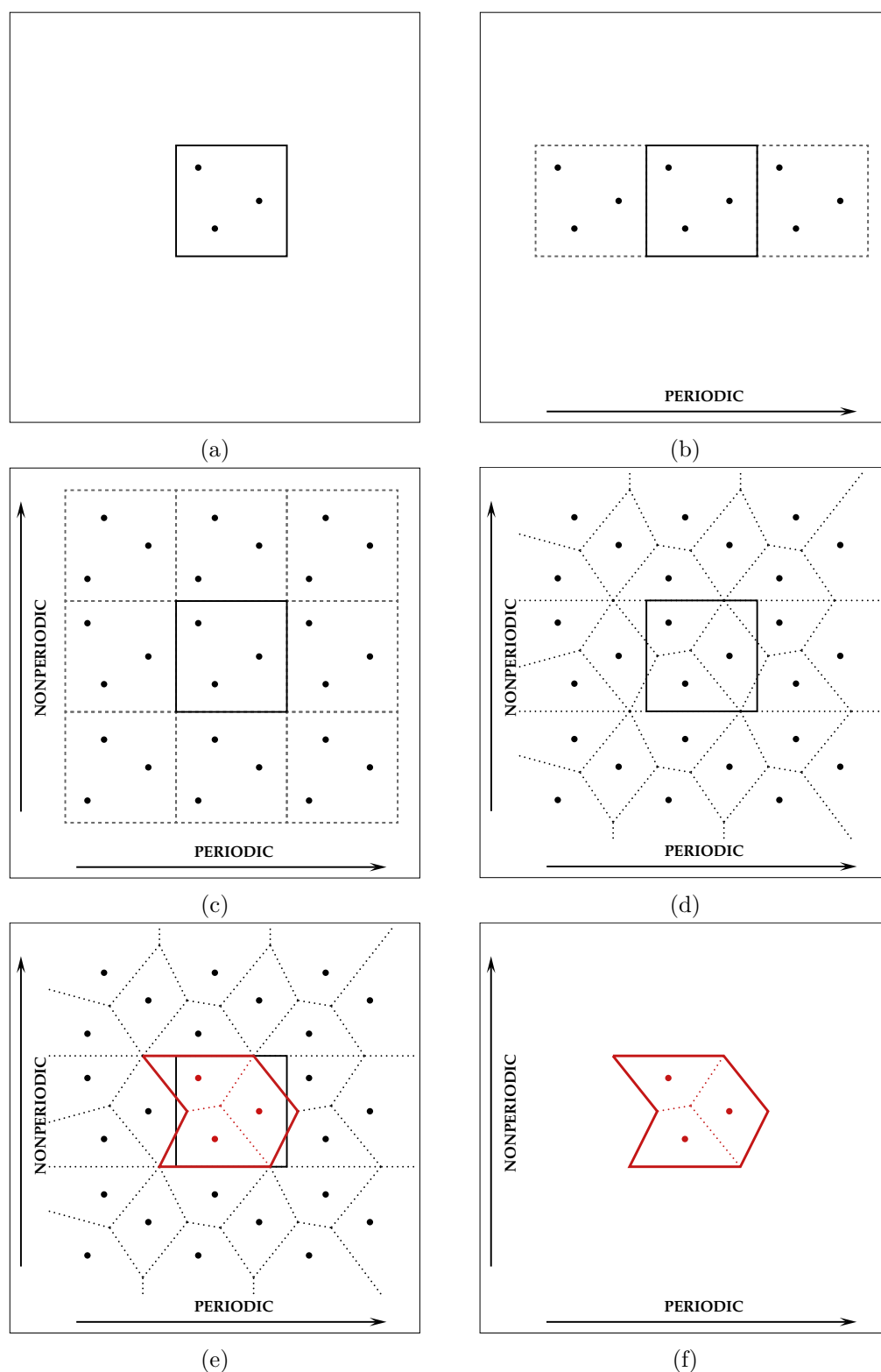


Fig. 5.3 – Schéma décrivant la construction, décomposée en 6 étapes, de la topologie d'un agrégat 2D semi-périodique constitué de 3 grains. (a) Tirage des germes dans le domaine initial Ω_0 . (b) Réplication par translation dans la direction périodique. (c) Réplication par symétrie dans la direction non périodique. (d) Décomposition de Voronoï. (e) Récupération des grains issus des germes du domaine initial. (f) Topologie finale.

- si x est non périodique, les germes des domaines pour lesquels
 - $c_x = -1$ trouvent leur maître dans Ω_2
 - $c_x = 0$ trouvent leur maître dans Ω_0
 - $c_x = 1$ trouvent leur maître dans Ω_7
- si y est non périodique, les germes des domaines pour lesquels
 - $c_y = -1$ trouvent leur maître dans Ω_4
 - $c_y = 0$ trouvent leur maître dans Ω_0
 - $c_y = 1$ trouvent leur maître dans Ω_5
- En 3D :
 - si x est non périodique, les germes des domaines pour lesquels
 - $c_x = -1$ trouvent leur maître dans Ω_5
 - $c_x = 0$ trouvent leur maître dans Ω_0
 - $c_x = 1$ trouvent leur maître dans Ω_{23}
 - si y est non périodique, les germes des domaines pour lesquels
 - $c_y = -1$ trouvent leur maître dans Ω_{11}
 - $c_y = 0$ trouvent leur maître dans Ω_0
 - $c_y = 1$ trouvent leur maître dans Ω_{17}
 - si z est non périodique, les germes des domaines pour lesquels
 - $c_z = -1$ trouvent leur maître dans Ω_{13}
 - $c_z = 0$ trouvent leur maître dans Ω_0
 - $c_z = 1$ trouvent leur maître dans Ω_{14}

Les propriétés maître/esclave sont propagées de manière à ce que chaque germe ne puisse être que maître ou que esclave. Si un germe i est esclave d'un germe j , lui-même esclave d'un germe k , alors :

- i est esclave de k
- j est esclave de k
- k est maître de i et j

Un germe peut être maître de plusieurs autres germes. À la fin de cette phase, nous obtenons donc $3^{dim} \times N_g$ germes avec leur position et leur configuration maître/esclave.

Décomposition de Voronoï

Une fois l'ensemble des germes répliqués et paramétrés, ces données sont envoyées vers le logiciel Qhull [169] qui donne en sortie le résultat de la décomposition de Voronoï (les polyèdres et les sommets associés). Ces données sont traitées pour reconstituer tous les grains, faces, arêtes et sommets. Les relations maître/esclave sont aussi attribuées à chaque entité topologique afin de préserver la périodicité dans les directions souhaitées. Par exemple en 3D, pour une face F_i :

- on relève les deux grains (ou germes) G_j et G_k de part et d'autre de la face F_i ;
- on recherche les maîtres G_l et G_m de chacun de ces deux grains ;
- on recherche la face F_n entre les grains G_l et G_m ;
- F_n devient maître de F_i et F_i esclave de F_n ;
- les listes des sommets définissant les faces F_i et F_n sont triées pour que chaque sommet maître soit relié à son homologue esclave par ordre d'apparition dans la liste.

Enfin, seuls les grains issus des germes du domaine Ω_0 sont conservés. On définit donc un nouveau domaine Ω dont les limites ne coïncident pas toutes avec celles de Ω_0 . On appelle *face frontière* une face aux limites de l'agrégat, *i.e.* sur $\partial\Omega$. On appelle *face frontière périodique*, une face frontière entre deux domaines périodiques, *i.e.* sur $\partial\Omega_{per}$. Chacune des faces frontières périodiques est associée à son homologue, maître ou esclave.

5.1.2 Maillage

Maillage surfacique

À partir de la topologie établie précédemment, on réalise dans un premier temps le maillage surfacique de chacun des grains par l'intermédiaire de l'outil BLSurf [170]. Les éléments générés sont des triangles quadratiques (il est aussi possible de générer des éléments linéaires). Une fois le maillage retranscrit dans Z-set, les relations maître/esclave des faces sont conservées. On les réutilise pour recopier les faces maîtres en place des faces esclaves, puis établir les relations maître/esclave des nœuds :

- le premier nœud de chaque face correspond au premier sommet définissant la face, la périodicité est conservée pour ces deux nœuds ;
- pour chacun des autres nœuds N_i de la face maître, on boucle sur les nœuds N_j de la face esclave pour retrouver le nœud esclave N'_j et vérifier la périodicité.

On propage ces relations de la même manière que pour les germes, de façon à ce qu'un nœud ne puisse être que maître ou esclave d'un autre. En revanche, un nœud peut être maître de plusieurs esclaves, dans ce cas, la relation de périodicité s'applique à trois nœuds ou plus.

Chacun des nœuds des faces frontières est alors associé à son(es) homologue(s) maître/esclave(s), ce qui permettra de définir les groupes de nœuds nécessaires pour l'application des conditions aux limites périodiques. Le nombre de nœuds répertoriés dans chacune de ces associations conditionne le nombre de domaines Ω_i communs à la frontière dont fait partie le nœud maître. Il conditionne également le type de condition aux limites périodique appliquée.

2 nœuds :

- Type de condition aux limites : `mpc2`.
- Type de frontière : entre deux domaines périodiques, *i.e.* partie d'une face frontière périodique.
- Groupes de nœuds créés : les nœuds maîtres sont listés dans le groupe `mpc2_A`, les nœuds esclaves dans le groupe `mpc2_B`.
- Remarque : l'ordre des nœuds doit être conservé afin de préserver les associations maître/esclave.

3 nœuds ou plus :

- Type de condition aux limites : `mpc1`.
- Type de frontière : entre trois domaines périodiques ou plus, *i.e.* intersection d'au moins deux faces frontières périodiques de domaines différents.
- Groupes de nœuds créés : un groupe de nœuds nommé `mpc1_k` est créé pour chaque association de trois nœuds ou plus, reliés par une relation maître/esclave.
- Remarque : l'union de tous les groupes `mpc1_k` donne les lignes triples entre les domaines périodiques.

Deux types de groupes de nœuds sont alors créés. Un exemple de mise en donnée de ces groupes est présenté plus loin en tableau 5.3a, page 139. L'intersection entre les tous les groupes `mpc1` et `mpc2` est nulle.

Maillage volumique

Enfin, le maillage volumique est assuré par l'outil de maillage GHS3D [171]. Les éléments obtenus sont des tétraèdres linéaires. Il sont ensuite convertis en éléments quadratiques (de même que pour le maillage surfacique, il est aussi possible de conserver des éléments linéaires).

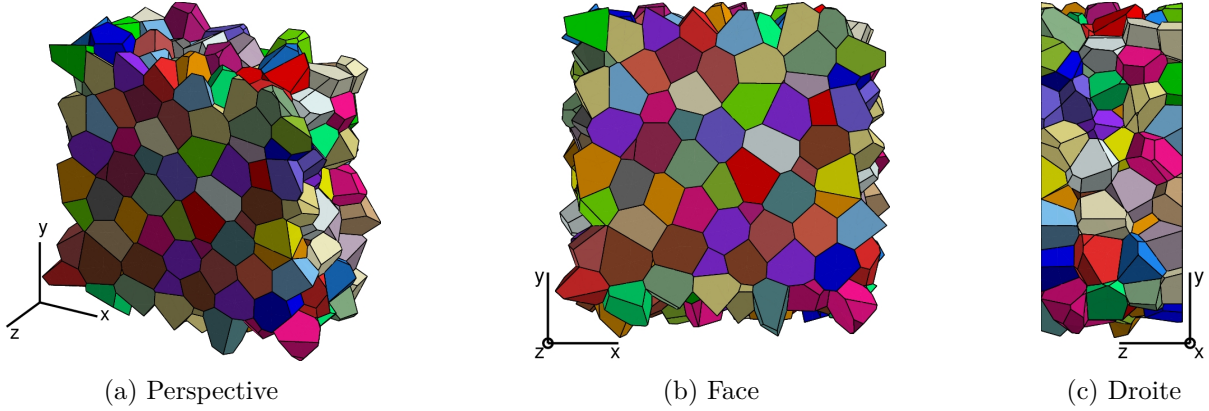


Fig. 5.4 – Différentes vues de la topologie semi-périodique générée pour un agrégat de 250 grains.

5.2 Chargement et conditions aux limites semi-périodiques

La mise en place des conditions aux limites est décrite pour un cas 3D, périodique dans les directions 1 et 2, et non périodique dans la direction 3. En 2D, les termes de faces, respectivement lignes, se rapportent aux lignes, respectivement points.

5.2.1 Formulation du problème périodique

En appliquant des conditions aux limites de type périodique, on définit le chargement par un tenseur de déformation moyen piloté $\bar{\underline{E}}$ auquel s'ajoute un champ de déplacement $\underline{v}(x)$. On cherche le champ de déplacement total $\underline{u}(x)$ tel que :

$$\underline{u}(x) = \bar{\underline{E}} \cdot x + \underline{v}(x) \quad (5.1)$$

$$u_{ij} = \bar{E}_{ij} + v_{ij} \quad (5.2)$$

Le tenseur correspond généralement à la déformation macroscopique. Le champ de déplacement $\underline{v}(x)$ correspond aux « perturbations » locales entraînées par l'hétérogénéité du milieu.

5.2.2 Chargement dans le cas semi-périodique

Étant donné que le problème n'est périodique que dans deux directions (x_1 et x_2), le tenseur de déformation moyen piloté $\bar{\underline{E}}$ peut différer du tenseur de déformation moyen réel \underline{E} .

$$\underline{E} = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \underline{\varepsilon} dV \quad (5.3)$$

Vérifions quelles composantes de $\underline{\mathbf{E}}$ sont réellement pilotées à travers $\overline{\mathbf{E}}$. On se place dans le domaine des petites perturbations, donc $\underline{\mathbf{E}}_{ij} = \overline{\mathbf{E}}_{ji}$.

$$\underline{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \underline{\mathbf{u}} + \nabla \underline{\mathbf{u}}^T) \quad (5.4)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (5.5)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\overline{\mathbf{E}}_{ij} + v_{i,j} + \overline{\mathbf{E}}_{ji} + v_{j,i}) \quad (5.6)$$

$$\mathbf{E}_{ij} = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \left(\overline{\mathbf{E}}_{ij} + \frac{1}{2} (v_{i,j} + v_{j,i}) \right) dV \quad (5.7)$$

$$\mathbf{E}_{ij} = \overline{\mathbf{E}}_{ij} + \frac{1}{2V} \int_{\Omega} (v_{i,j} + v_{j,i}) dV \quad (5.8)$$

Donc

$$\mathbf{E}_{ij} \equiv \overline{\mathbf{E}}_{ij} \Leftrightarrow \int_{\Omega} (v_{i,j} + v_{j,i}) dV = 0$$

Le champ de déplacement $\underline{\mathbf{v}}(x)$ est piloté comme suit :

- $\underline{\mathbf{v}}(\partial\Omega_{per})$ imposé périodique
- $v_3(\partial\Omega_{x_3=0}) = 0$
- $\underline{\mathbf{v}}(\partial\Omega_{free})$ libre

Par le théorème de la divergence, en considérant $\underline{\mathbf{n}}$ le vecteur normal à $\partial\Omega$, frontière de Ω :

$$\int_{\Omega} v_{i,j} dV = \int_{\partial\Omega} v_i n_j dS \quad (5.9)$$

$$\int_{\Omega} v_{i,j} dV = \int_{\partial\Omega_{per}} v_i n_j dS + \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_i n_j dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_i n_j dS \quad (5.10)$$

Or $\underline{\mathbf{v}}$ et $\underline{\mathbf{n}}$ sont périodiques sur $\partial\Omega_{per}$ donc :

$$\int_{\partial\Omega_{per}} v_i n_j dS = 0$$

Donc

$$\int_{\Omega} v_{i,j} dV = \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_i n_j dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_i n_j dS$$

Analysons chaque composante :

1. Composante \mathbf{E}_{11}

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v_{1,1} dV &= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_1 n_1 dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_1 n_1 dS \\ &= 0 + 0 \quad \text{car } \begin{cases} n_1(\partial\Omega_{x_3=0}) = 0 \\ n_1(\partial\Omega_{free}) = 0 \end{cases} \\ \int_{\Omega} v_{1,1} dV &= 0 \end{aligned}$$

Donc $\boxed{\mathbf{E}_{11} \equiv \overline{\mathbf{E}}_{11}}$

2. Composante \mathbf{E}_{22}

$$\text{De même } \begin{cases} n_2(\partial\Omega_{x_3=0}) = 0 \\ n_2(\partial\Omega_{free}) = 0 \end{cases}$$

$$\text{Donc } \boxed{\mathbf{E}_{22} \equiv \overline{\mathbf{E}}_{22}}$$

3. Composante \mathbf{E}_{33}

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v_{3,3} dV &= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_3 n_3 dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_3 n_3 dS \\ &= 0 + \int_{\partial\Omega_{free}} v_3 n_3 dS & \text{car } \begin{cases} v_3(\partial\Omega_{x_3=0}) = 0 \\ n_3(\partial\Omega_{free}) = 1 \end{cases} \\ &= \int_{\partial\Omega_{free}} v_3 dS \\ \int_{\Omega} v_{3,3} dV &\neq 0 \end{aligned}$$

$$\text{Donc } \boxed{\mathbf{E}_{33} \not\equiv \overline{\mathbf{E}}_{33}}$$

4. Composante \mathbf{E}_{12}

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v_{1,2} dV &= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_1 n_2 dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_1 n_2 dS \\ &= 0 + 0 & \text{car } \begin{cases} n_2(\partial\Omega_{x_3=0}) = 0 \\ n_2(\partial\Omega_{free}) = 0 \end{cases} \\ \int_{\Omega} v_{1,2} dV &= 0 \end{aligned}$$

$$\text{De même } \begin{cases} n_1(\partial\Omega_{x_3=0}) = 0 \\ n_1(\partial\Omega_{free}) = 0 \end{cases} \Rightarrow \int_{\Omega} v_{2,1} dV = 0$$

Or

$$\mathbf{E}_{12} = \overline{\mathbf{E}}_{12} + \frac{1}{2V} \int_{\Omega} v_{1,2} + v_{2,1} dV$$

$$\text{D'où } \boxed{\mathbf{E}_{12} \equiv \overline{\mathbf{E}}_{12}}$$

5. Composante \mathbf{E}_{23}

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v_{2,3} dV &= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_2 n_3 dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_2 n_3 dS \\ &= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} -v_2 dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_2 dS & \text{car } \begin{cases} n_3(\partial\Omega_{x_3=0}) = -1 \\ n_3(\partial\Omega_{free}) = 1 \end{cases} \\ \int_{\Omega} v_{2,3} dV &= \int_{\partial\Omega_{free}} v_2 dS - \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_2 dS \\ \int_{\Omega} v_{2,3} dV &\neq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} v_{3,2} \, dV &= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_3 n_2 \, dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_3 n_2 \, dS \\
&= 0 + 0 \quad \text{car } \begin{cases} n_2(\partial\Omega_{x_3=0}) = 0 \\ n_2(\partial\Omega_{free}) = 0 \end{cases} \\
\int_{\Omega} v_{3,2} \, dV &= 0
\end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{23} &= \overline{\mathbf{E}}_{23} + \frac{1}{2V} \int_{\Omega} v_{2,3} + v_{3,2} \, dV \\
\mathbf{E}_{23} &= \overline{\mathbf{E}}_{23} + \frac{1}{2V} \int_{\Omega} v_{2,3} \, dV
\end{aligned}$$

D'où $\mathbf{E}_{23} \neq \overline{\mathbf{E}}_{23}$

6. Composante \mathbf{E}_{31}

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} v_{1,3} \, dV &= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_1 n_3 \, dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_1 n_3 \, dS \\
&= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} -v_1 \, dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_1 \, dS \\
\int_{\Omega} v_{1,3} \, dV &= \int_{\partial\Omega_{free}} v_1 \, dS - \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_1 \, dS \\
\int_{\Omega} v_{1,3} \, dV &\neq 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} v_{3,1} \, dV &= \int_{\partial\Omega_{x_3=0}} v_3 n_1 \, dS + \int_{\partial\Omega_{free}} v_3 n_1 \, dS \\
&= 0 + 0 \quad \text{car } \begin{cases} n_1(\partial\Omega_{x_3=0}) = 0 \\ n_1(\partial\Omega_{free}) = 0 \end{cases} \\
\int_{\Omega} v_{3,1} \, dV &= 0
\end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{31} &= \overline{\mathbf{E}}_{31} + \frac{1}{2V} \int_{\Omega} v_{1,3} + v_{3,1} \, dV \\
\mathbf{E}_{31} &= \overline{\mathbf{E}}_{31} + \frac{1}{2V} \int_{\Omega} v_{1,3} \, dV
\end{aligned}$$

D'où $\mathbf{E}_{31} \neq \overline{\mathbf{E}}_{31}$

En résumé :

$$\mathbf{E}_{11} \equiv \overline{\mathbf{E}}_{11} \quad (5.11)$$

$$\mathbf{E}_{22} \equiv \overline{\mathbf{E}}_{22} \quad (5.12)$$

$$\mathbf{E}_{33} \neq \overline{\mathbf{E}}_{33} \quad (5.13)$$

$$\mathbf{E}_{12} \equiv \overline{\mathbf{E}}_{12} \quad (5.14)$$

$$\mathbf{E}_{23} \neq \overline{\mathbf{E}}_{23} \quad (5.15)$$

$$\mathbf{E}_{31} \neq \overline{\mathbf{E}}_{31} \quad (5.16)$$

Les seules composantes réellement pilotées à travers $\overline{\mathbf{E}}$ sont $\mathbf{E}_{11}, \mathbf{E}_{22}, \mathbf{E}_{12}$. Afin de fixer les modes rigides, nous devons fixer les composantes $\overline{\mathbf{E}}_{33} = \overline{\mathbf{E}}_{23} = \overline{\mathbf{E}}_{31} = 0$. Cela n'a pas d'impact sur les composantes $\mathbf{E}_{33}, \mathbf{E}_{23}$ et \mathbf{E}_{31} .

5.2.3 Conditions aux limites conservant la périodicité

Deux types de conditions aux limites sont appliquées aux groupes de nœuds des faces frontières périodiques.

- **mpc1** : cette condition aux limites s'applique pour un groupe de nœuds et un degré de liberté v_i . Pour l'ensemble des nœuds du groupe, le degré de liberté v_i est uniforme. On applique ce type de condition pour les nœuds faisant partie des lignes triples entre les domaines périodiques. Plusieurs conditions de ce type sont créées : une par association de nœuds (comportant trois nœuds ou plus) et par degré de liberté. Il est important de noter que le DDL v_i , bien qu'uniforme au sein d'une association de nœuds, prend une valeur différente pour chacune d'elles.
- **mpc2** : cette condition s'applique pour deux groupes de nœuds correspondant aux listes ordonnées des associations de deux nœuds maîtres/esclaves et à un degré de liberté v_i . Le degré de liberté v_i est uniforme pour chaque nœud d'un couple. Ce type de condition s'applique aux nœuds faisant partie des faces frontières périodiques (en excluant ceux appartenant aux lignes triples qui sont déjà affectés par des conditions de type **mpc1**).

Prenons l'exemple de deux nœuds A et B périodiques, *i.e.* qui sont liés par une relation maître/esclave. A est le nœud maître. Le domaine périodique étudié est de dimensions $S_x \times S_y \times S_z$. Les vecteurs des positions initiales des nœuds A et B , $\underline{\mathbf{x}}(A)$ et $\underline{\mathbf{x}}(B)$, sont liés par :

$$\underline{\mathbf{AB}} = \underline{\mathbf{x}}(B) - \underline{\mathbf{x}}(A) = \begin{pmatrix} c_x S_x \\ c_y S_y \\ c_z S_z \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} c_i = \{0; 1\}, & i = x, y, z \\ \underline{\mathbf{AB}} \neq \mathbf{0} \end{cases} \quad (5.17)$$

Les deux nœuds sont maître et esclave, donc :

- soit ils font partie du même groupe **mpc1** (avec au moins un autre nœud),
- soit ils sont chacun classés au même rang respectivement dans les groupes **mpc2_A** et **mpc2_B**.

De ce fait, on a :

$$\underline{\mathbf{v}}(A) = \underline{\mathbf{v}}(B)$$

D'où, la différence de déplacement total entre les deux nœuds :

$$\underline{\mathbf{u}}(B) - \underline{\mathbf{u}}(A) = \overline{\mathbf{E}} \cdot \underline{\mathbf{x}}(B) + \underline{\mathbf{v}}(B) - \overline{\mathbf{E}} \cdot \underline{\mathbf{x}}(A) - \underline{\mathbf{v}}(A) \quad (5.18)$$

$$= \overline{\mathbf{E}} \cdot (\underline{\mathbf{x}}(B) - \underline{\mathbf{x}}(A)) \quad (5.19)$$

$$= \overline{\mathbf{E}} \cdot \underline{\mathbf{AB}} \quad (5.20)$$

$$= \overline{\mathbf{E}} \cdot \begin{pmatrix} c_x S_x \\ c_y S_y \\ c_z S_z \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad c_i = \{0; 1\}, \quad i = x, y, z \quad (5.21)$$

La différence de déplacement entre les deux nœuds est donc uniquement liée au tenseur $\overline{\mathbf{E}}$ et aux dimensions du domaine périodique. C'est donc aussi le cas pour toutes les autres associations de maître/esclave. La différence de déplacement entre les limites des domaines périodiques, *i.e.* la déformation globale, est donc directement reliée à $\overline{\mathbf{E}}$.

<p>▲</p> <p>■</p> <p>△</p> <p>□</p> <p>...</p> <p>■</p> <p>■</p>	<pre> ***group **nset mpc1_1 48 63 89 **nset mpc1_2 42 55 68 **nset mpc1_3 33 39 74 **nset mpc1_4 52 64 98 ... **nset mpc1_12 24 57 96 **nset mpc2_A 1 2 3 4 5 6 7 8 **nset mpc2_B 11 12 13 14 15 16 17 18 </pre>	<pre> ***equation **mpc1 mpc1_1 U1 **mpc1 mpc1_1 U2 **mpc1 mpc1_1 U3 **mpc1 mpc1_2 U1 **mpc1 mpc1_2 U2 **mpc1 mpc1_2 U3 **mpc1 mpc1_3 U1 **mpc1 mpc1_3 U2 **mpc1 mpc1_3 U3 **mpc1 mpc1_4 U1 **mpc1 mpc1_4 U2 **mpc1 mpc1_4 U3 ... **mpc2 mpc2_A U1 mpc2_B U1 **mpc2 mpc2_A U2 mpc2_B U2 **mpc2 mpc2_A U3 mpc2_B U3 </pre>
	(a)	(b)

Tab. 5.3 – Mise en données Z-set (a) des groupes de nœuds et (b) des conditions aux limites propres à la formulation périodique. Les symboles et couleurs à gauche des groupes de nœuds font référence à la figure 5.5.

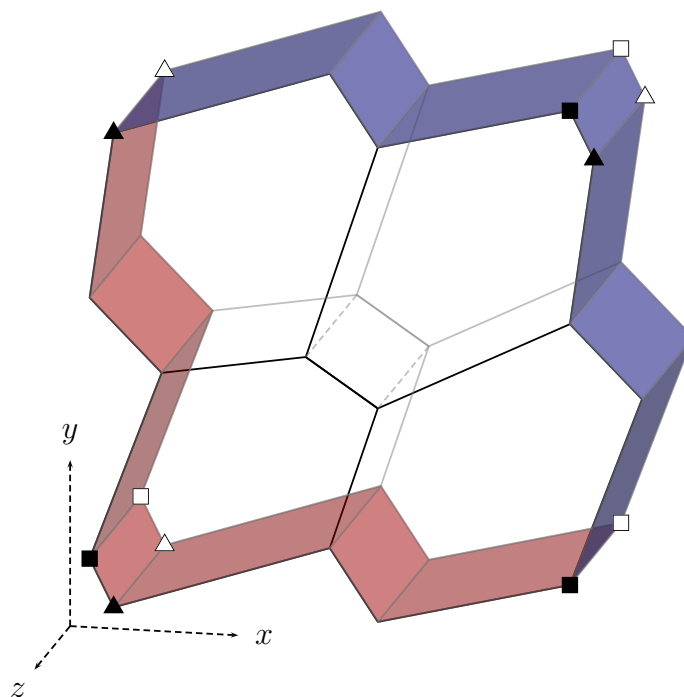


Fig. 5.5 – Schéma simplifié d'un agrégat semi-périodique constitué de 4 grains extrudés. Les symboles ▲, △, □ et ■ représentent les nœuds des lignes triples à la jonction de 3 domaines périodiques (ou plus), *i.e.* les groupes de nœuds de type mpc1. Les faces de couleur rouge et bleue représentent les faces frontalières périodiques, *i.e.* les groupes de nœuds de type mpc2.

Calcul	Nœuds	Éléments	Sous-domaines	Temps CPU [H]
3D classique	626 899	454 673	40	48
3D semi-périodique	495 056	355 426	16	8,5

Tab. 5.4 – Comparatif entre les calculs classiques et semi-périodiques.

Un exemple de mise en donnée de l'application de ces conditions aux limites dans Z-set est présenté en tableau 5.3b, accompagné d'un dessin explicatif en figure 5.5.

L'ensemble de la procédure a été implémenté dans Z-set de manière à permettre la création générique d'agrégats semi-périodiques synthétiques répondant à certains critères (nombre de grains, distance de répulsion). Bien que les calculs de ce chapitre ne portent que sur un unique maillage, l'outil de génération de maillages semi-périodique est donc entièrement dédié à des études statistiques sur de multiples microstructures comprenant à la fois des orientations et des topologies variées. On peut noter que pour introduire une rugosité sur ce type de maillage, il faudra s'assurer que la carte de rugosité respecte la périodicité dans les directions appropriées.

5.3 Mise en place des calculs

5.3.1 Maillage

Le maillage utilisé dans ce chapitre a été généré suivant la méthode décrite en section 5.1. Il est constitué de 250 grains, 495 056 nœuds et 355 426 éléments. La position des germes est déterminée aléatoirement par un processus de Poisson avec une distance de répulsion de 15 μm .

5.3.2 Conditions aux limites

Nous appliquons des conditions aux limites semi-périodiques, telles que nous les avons décrites en section 5.2. Les directions périodiques sont x et y . La direction z reste celle de la surface libre, comme dans les chapitres 3 et 4.

Dans ce chapitre, l'étude se restreint au chargement uniaxial- y , avec comme précédemment, un rapport de charge $R = -1$ et une amplitude de déformation totale $\Delta\varepsilon/2 = 0,2\%$.

5.3.3 Parallélisation

Le maillage est décomposé en 16 sous-domaines par l'outil Metis-split pour un calcul parallèle de type FETI. Contrairement aux calculs des chapitres 3 et 4, ces calculs ont pu converger en utilisant le solveur linéaire `dscpack` (cf. annexe C). Nous rappelons que ce dernier ne détecte pas automatiquement les modes rigides. Nous avons donc procédé à un pas de calcul avec le solveur `sparse_direct` afin de les obtenir. Ils sont alors réinjectés dans le calcul réalisé avec le solveur `dscpack`. Le gain en termes de temps CPU est conséquent comparé aux calculs tridimensionnels classiques, comme le montre le tableau 5.4. Ceci présente un avantage significatif pour ce type de modélisation dans le cadre d'études statistiques de résultats de calculs EF réalisés sur des microstructures synthétiques.

5.4 Résultats et discussion

L'analyse porte sur les résultats de 15 calculs effectués sur le même maillage, avec 15 jeux comportant 250 grains d'orientation aléatoire. Nous nous plaçons à la fin du second cycle, lors de la phase de traction, à niveau de déformation totale nulle. La comparaison avec les résultats du chapitre 3 est faite de manière répétée au cours de cette section afin de déterminer si les résultats en 3D semi-périodique valident les résultats en 3D classique.

Concernant les classes de grains, seuls les grains en contact avec la face $\Omega_{x_3=0}$ sont considérés comme étant aux conditions aux limites. Les conditions aux limites périodiques, *i.e.* de type `mpc`, sont considérées comme la continuité du matériau et ne sont plus censées perturber les résultats. Nous vérifierons si c'est bien le cas au travers des résultats. Un grain en contact avec la surface libre et des conditions aux limites périodiques sera donc considéré comme un grain en surface. Nous avons donc dans notre agrégat semi-périodique :

- 126 grains à cœur (dont 69 aux conditions aux limites périodiques) ;
- 67 grains en surface (dont 33 aux conditions aux limites périodiques) ;
- 57 grains aux conditions aux limites (dont 33 aux conditions aux limites périodiques).

5.4.1 Champs locaux en surface

Les isovaleurs en surface des variables étudiées sont présentées pour un calcul, en figure 5.6, accompagnées de l'image EBSD de surface avec les désorientations. On observe à nouveau une concentration de la déformation plastique au niveau des joints de grains, sous forme d'une bande dont l'orientation est proche de 45° (cf. figures 5.6b et 5.6c). En comparant avec l'EBSD en figure 5.6a, il s'agit des joints entre les grains 45 et 162, 63 et 241, 163 et 241, 73 et 146. On remarque que chacun de ces joints correspond à une désorientation assez forte et que leur arrangement géométrique dessine un « chemin » orienté à plus ou moins 45° par rapport à la direction de chargement. De manière analogue, on observe le même phénomène sur les joints des grains 86 et 228, 105 et 208. Par périodicité, ces deux localisations sont jointes et forment aussi un chemin orienté à 45° .

Concernant les contraintes (figure 5.6d), on retrouve des contrastes équivalents aux résultats obtenus en 3D classique. La corrélation entre désorientation, contraintes et déformation plastique n'est pas systématique. Le nombre de systèmes de glissement actifs est globalement moins élevé que dans le cas 3D classique. Néanmoins, on peut voir sur l'EBSD que, si on compare aux résultats du 3D classique (cf. figures 3.10a en page 97 et 3.14 en page 98), peu de grains sont proches de l'orientation $\{001\}$, orientation pour laquelle on obtient le maximum de systèmes actifs. En outre, les modélisations semi-périodiques sont connues pour fournir des résultats plus « souples », ceci est illustré en figure 5.7. Ceci peut expliquer en partie les valeurs plus faibles obtenues dans ce calcul semi-périodique.

5.4.2 Distributions globales

Dans un premier temps, l'effet bénéfique de la modélisation périodique est validé par l'intermédiaire de la figure 5.8. Celle-ci présente les distributions des variables étudiées en échelle logarithmique, obtenues pour les grains en surface, à cœur et aux conditions aux limites, ceci en incluant ou non les grains en contact avec les conditions aux limites périodiques, *i.e.* les conditions de type `mpc`. On peut donc visualiser l'impact, ou plutôt l'absence d'impact des conditions aux limites périodiques sur les distributions. Pour l'ensemble des variables, on constate une très

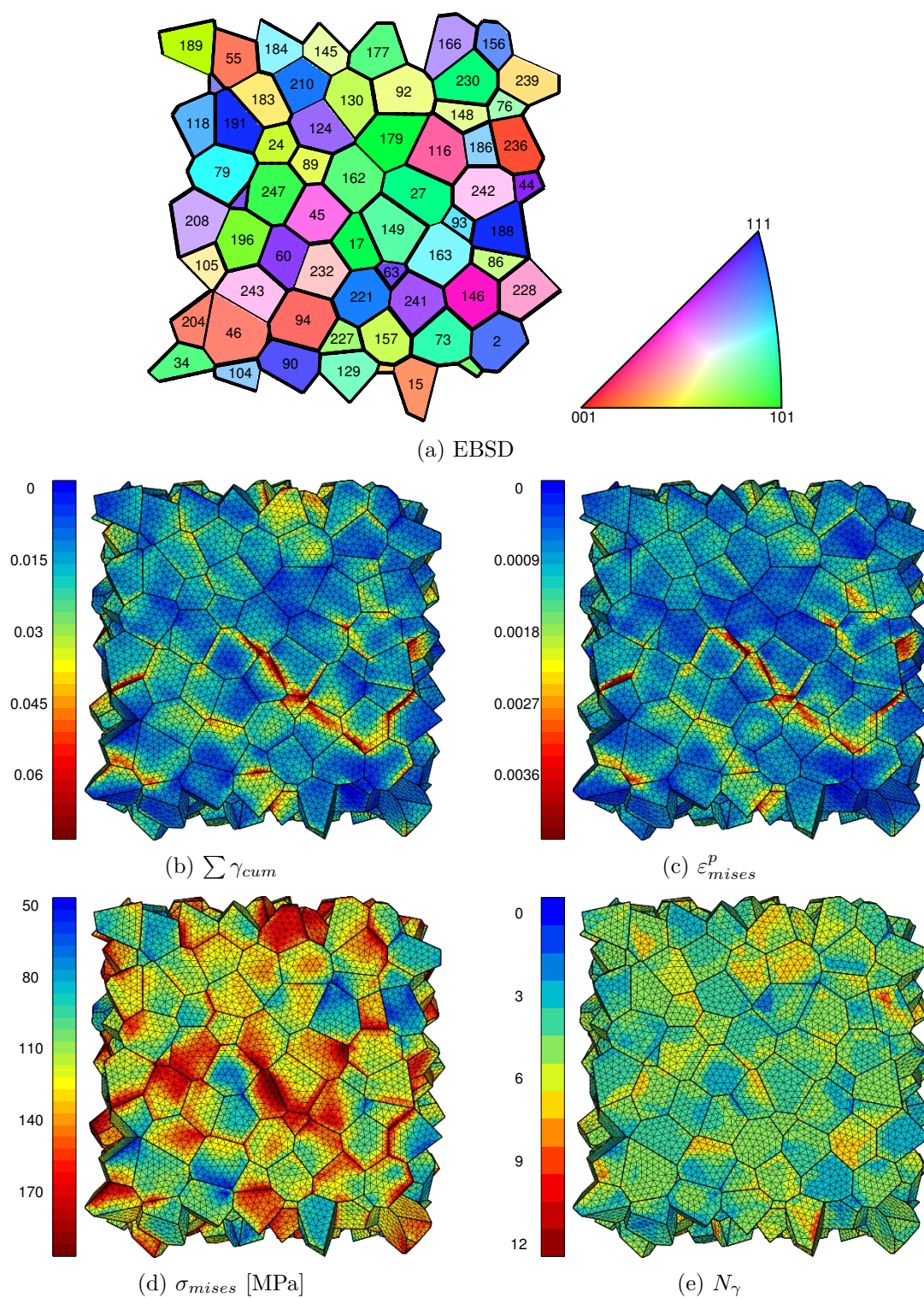


Fig. 5.6 – Isovaleurs des variables étudiées en surface libre de l'agrégat sous chargement uniaxial-y semi-périodique.

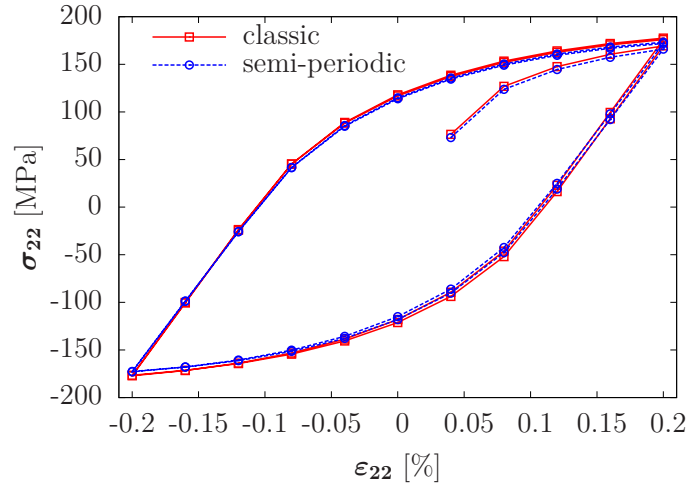


Fig. 5.7 – Courbes contraintes–déformations macroscopiques obtenues à partir de calculs en 3D classique et semi-périodique.

bonne concordance des distributions avec ou sans les grains en contact avec les mpc. Les effets de bords sont donc bien absents au niveau des limites périodiques du domaine. L'élimination des effets des bords, sur les limites de l'agrégat dans les directions périodiques x et y , est donc confirmée.

Les tracés sont à nouveau présentés plus clairement en figure 5.9. La comparaison directe avec les résultats en 3D (cf. figure 3.19 en page 104), montre qu'en semi-périodique, les distributions de l'ensemble des grains deviennent plus proche de celles grains à cœur ou en surface. On retrouve également en surface, la forte dispersion de la déformation plastique, caractéristique des grains en surface. Ici, la distribution de la déformation plastique en surface se démarque davantage de celle l'ensemble des grains. La dispersion du taux de triaxialité, essentiellement due aux effets de bords, est nettement diminuée.

5.4.3 Influence des paramètres

Nous reprenons l'analyse de l'influence des paramètres tels que le facteur de Schmid M_{max} et de la désorientation sur les valeurs des variables étudiées. Pour cela on moyenne par intervalle (*e.g.* de M_{max}) les variables dans tous les grains des 15 calculs effectués. Les points sont reportés en fonction de l'intervalle de facteur de Schmid maximal M_{max} en figure 5.10. On retrouve l'influence du facteur de Schmid sur la déformation plastique équivalente, mais plus faible qu'en 3D classique.

La procédure de post-traitement qui repère les grains adjacents et calcule les désorientations entre ces derniers a été améliorée afin de pouvoir prendre en compte la périodicité. Aux limites périodiques de l'agrégat, pour chaque face maître, on repère la face esclave. Les deux grains rattachés à ces faces sont considérés comme adjacents. Sans les conditions aux limites périodiques, le calcul des désorientations pondérées était quelque peu faussé par les conditions aux limites. Aucune désorientation n'étaient attribuée à ces limites, bien qu'elles induisent de fortes perturbations.

Les mêmes graphes sont réalisés en fonction de la désorientation pondérée $\Delta\theta_w$ en figure 5.11. On constate que les tendances observées sont similaires à celles du chapitre 3, quoique légèrement

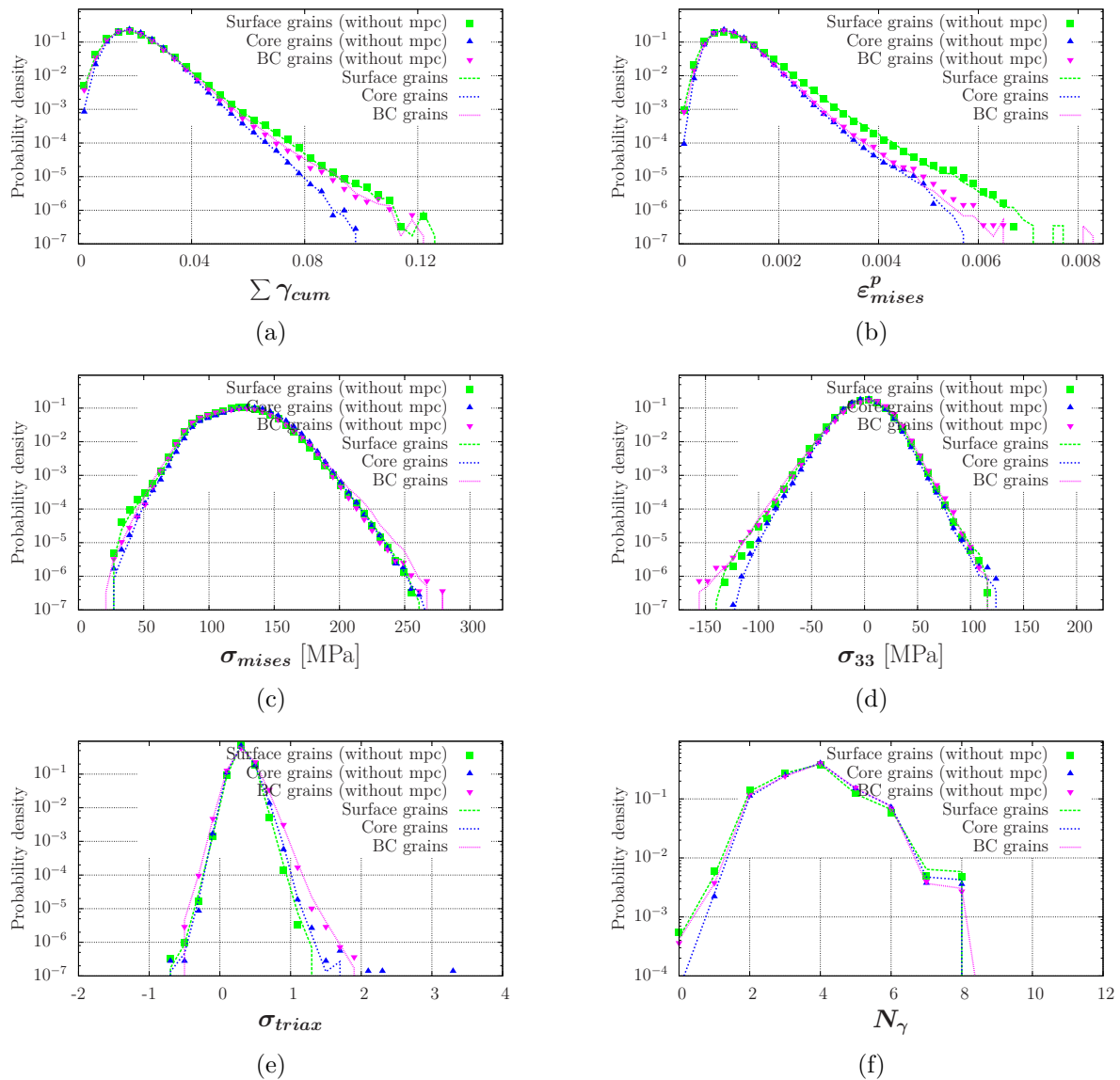


Fig. 5.8 – Distributions en échelle logarithmique des variables étudiées pour différents types de grains, en prenant compte ou non les grains en contact avec les conditions aux limites de type mpc.

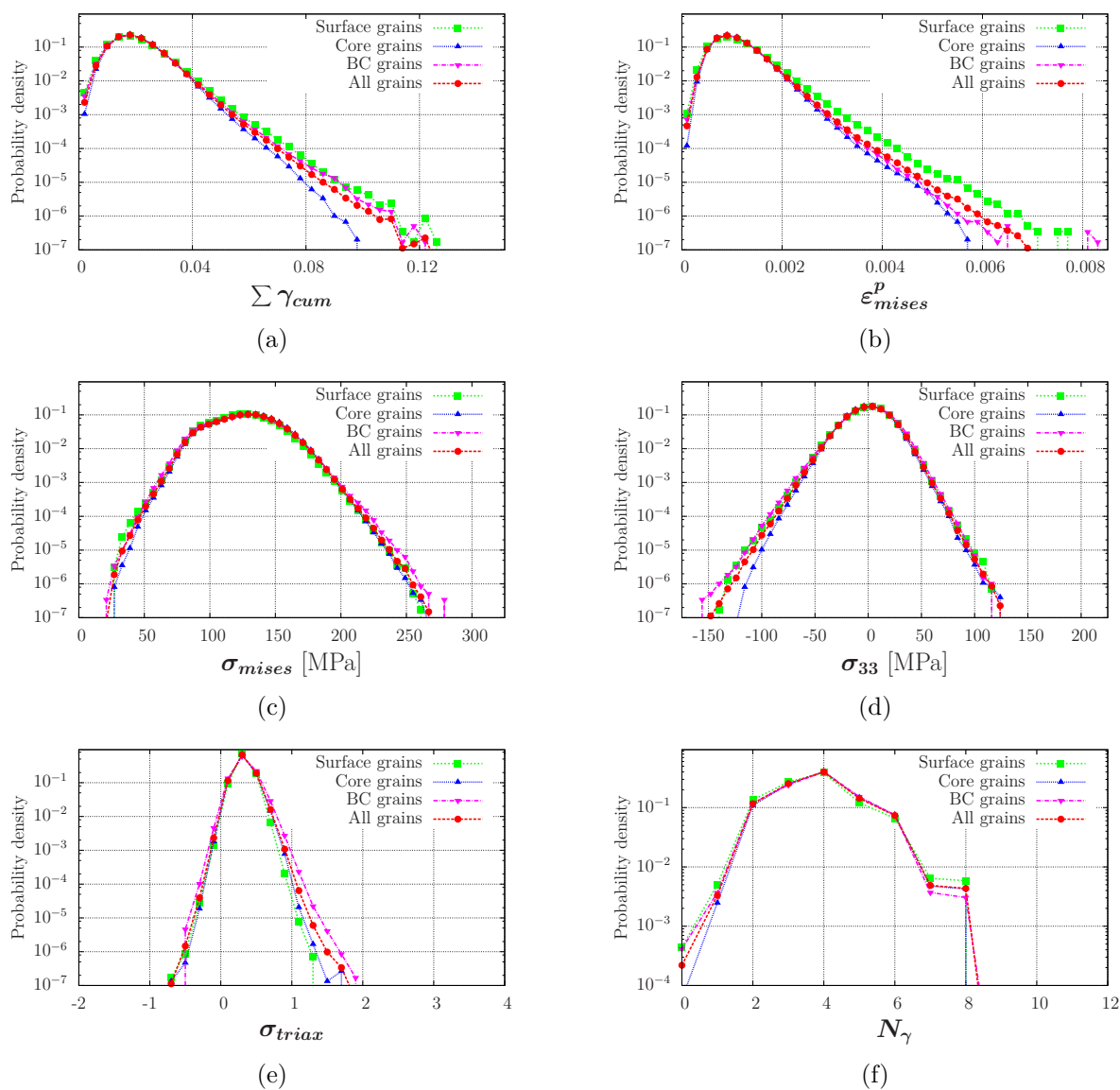


Fig. 5.9 – Distributions en échelle logarithmique des variables étudiées sur l'ensemble des 15 calculs pour différents types de grains.

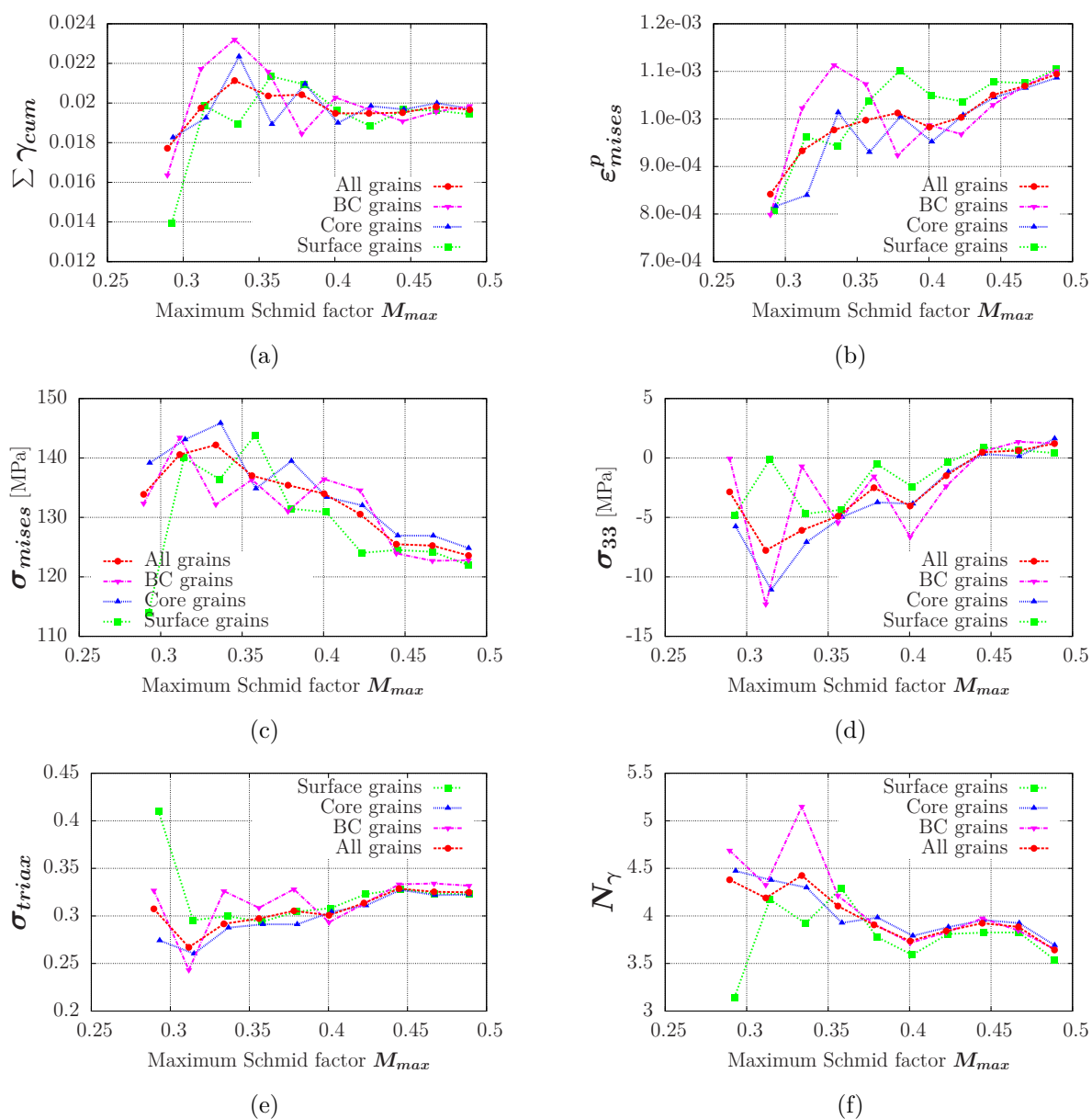


Fig. 5.10 – Influence du facteur de Schmid sur les variables étudiées pour différents types de grains.

Modélisation	ε_{mises}^p [$\times 10^{-4}$]		σ_{mises} [MPa]	
	3D classique	3D semi-périodique	3D classique	3D semi-périodique
$M_{max} = 0,4$	8,5	9,5	140	135
$M_{max} = 0,5$	11,5	11	115	120
Variation	+35 %	+17 %	-18 %	-11 %
$\Delta\theta_w = 30^\circ$	11	11	120	120
$\Delta\theta_w = 50^\circ$	10	10	125	130
Variation	-9 %	-9 %	+4 %	+8 %

Tab. 5.5 – Évolution de ε_{mises}^p et σ_{mises} en fonction de M_{max} et $\Delta\theta_w$ dans tous les grains des 15 calculs, en modélisation 3D classique et 3D semi-périodique.

moins marquées. De plus, on remarque également que les différences entre les types de grains deviennent elles aussi encore moins évidentes.

L'impact du facteur de Schmid maximal M_{max} et de la désorientation pondérée $\Delta\theta_w$ sur ε_{mises}^p et σ_{mises} est résumé en tableau 5.5, dans les modélisations 3D classiques et 3D semi-périodique. Ce tableau est construit en reportant les variations des variables obtenues par une simple interpolation des courbes présentes sur les figures 3.21, 3.22, 5.10 et 5.11. Les pourcentages de variation sont indiqués en gras. Par exemple, en passant d'un facteur de Schmid de 0,4 à 0,5, en 3D classique, la déformation plastique équivalente ε_{mises}^p augmente de $8,5 \times 10^{-4}$ à $1,15 \times 10^{-3}$, soit 35 % d'augmentation. En semi-périodique, cette augmentation se réduit à 17 %. On observe la même effet sur la contrainte équivalente σ_{mises} . On en déduit que l'influence du facteur de Schmid est revue à la baisse en semi-périodique : 1,5 à 2 fois moins importante. Concernant la désorientation pondérée, l'influence reste faible et plutôt stable d'un modèle à l'autre.

5.4.4 Analyse dans le triangle standard

Les résultats sont ici aussi comparables à ceux issus du modèle 3D classique (cf. figures 3.24 à 3.29 en pages 107 et 109). La position dans le SST joue plus sur la déformation plastique et le nombre de système de glissement dans les grains en surface. À cœur, c'est sur les contraintes (σ_{mises} , σ_{33} et σ_{triax}) que la position dans le SST a le plus d'influence.

5.5 Résumé

Une méthode de calcul d'agrégat périodique prenant en compte une surface libre, appelée modélisation semi-périodique, a été mise en place. Elle comprend la génération de la topologie de l'agrégat semi-périodique, le maillage de cette microstructure, l'application des conditions aux limites particulières et le chargement semi-périodique.

L'application de ce type de modélisation, basée sur des microstructures synthétiques, se restreint à des études statistiques. Elle est cependant d'un grand intérêt, en premier lieu en raison de sa compatibilité avec des solveurs linéaires efficaces, qui entraîne un coût de calcul moindre en comparaison avec le modèle 3D classique. De plus, elle permet la suppression des effets de bords sur les limites périodiques. L'exploitation des résultats peut donc s'étendre aux grains en contact avec ce type de limites et peut donc reposer sur un échantillon de données plus important.

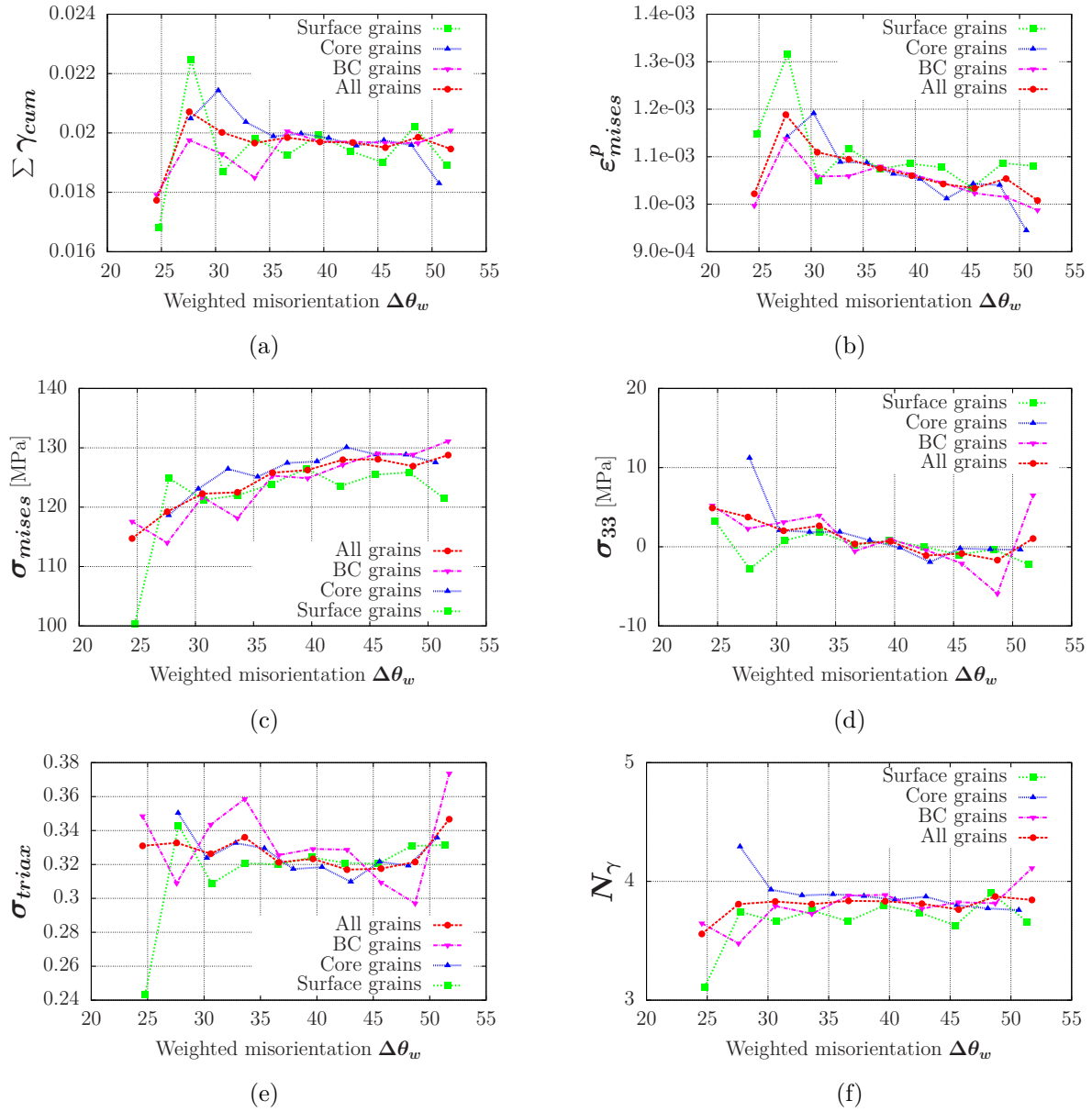


Fig. 5.11 – Influence de la désorientation pondérée $\Delta \theta_w$ sur les variables étudiées pour différents types de grains.

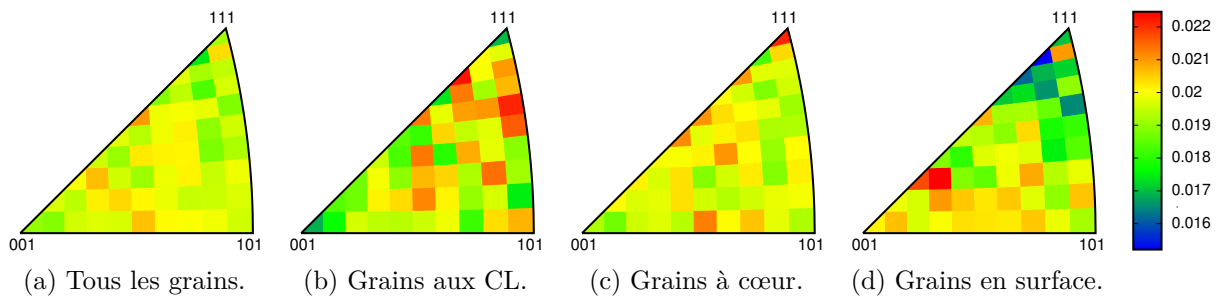


Fig. 5.12 – Valeurs moyennées de $\Sigma \gamma_{cum}$ dans le triangle standard.

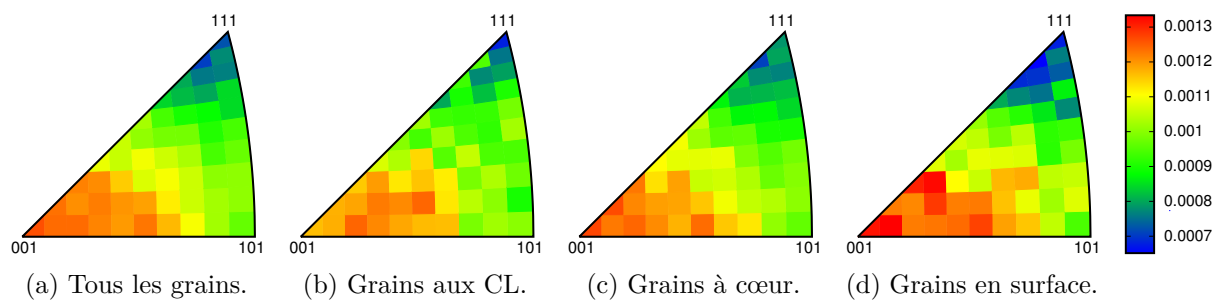


Fig. 5.13 – Valeurs moyennées de ε_{mises}^p dans le triangle standard.

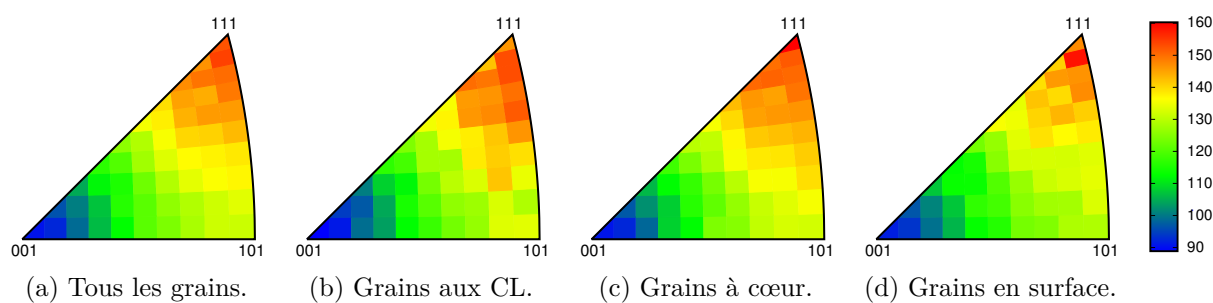


Fig. 5.14 – Valeurs moyennées de σ_{mises} dans le triangle standard.

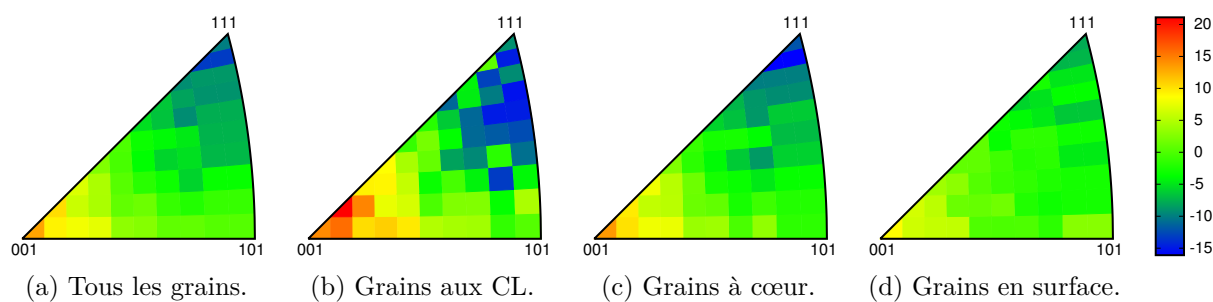


Fig. 5.15 – Valeurs moyennées de σ_{33} dans le triangle standard.

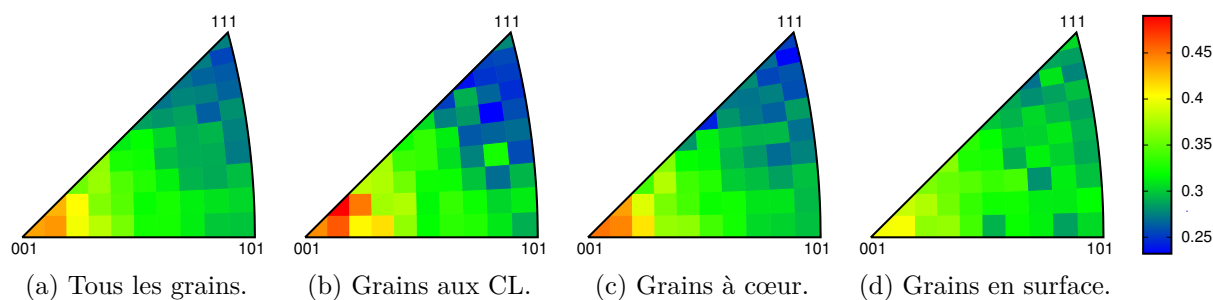


Fig. 5.16 – Valeurs moyennées de σ_{triax} dans le triangle standard.

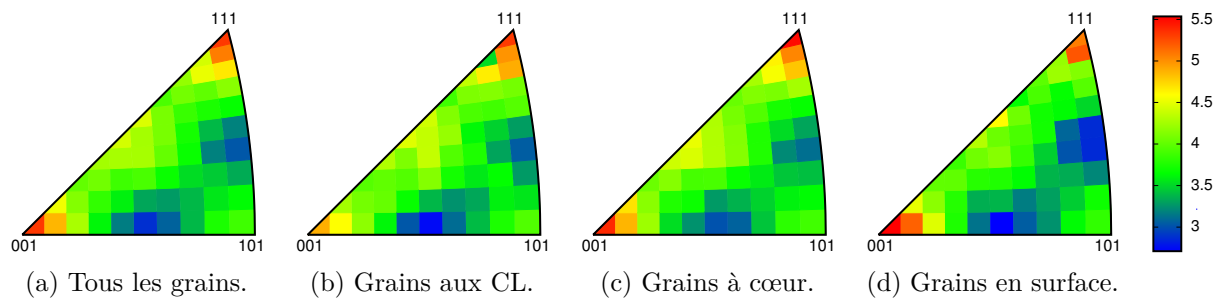


Fig. 5.17 – Valeurs moyennées de N_γ dans le triangle standard.

L'analyse des résultats amène aux mêmes conclusions que le chapitre 3, notamment en ce qui concerne la concentration de la déformation plastique aux joints de grains en cas de fortes désorientations et la forte dispersion en surface libre de l'agrégat.

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

6.1 Conclusions

Ces travaux de thèse visaient à utiliser les calculs d'agrégats par éléments finis pour étudier l'influence des paramètres microstructuraux sur les champs mécaniques locaux en vue d'une meilleure compréhension des mécanismes menant à l'amorçage des fissures courtes en fatigue dans les polycristaux. Il a déjà été montré dans la littérature que les premiers stades d'évolution de ces fissures, de l'ordre de quelques grains, étaient intimement liés à la microstructure du matériau.

Les résultats des simulations ont été analysés aussi bien individuellement que regroupés dans le cadre de traitements statistiques. Dans ce contexte, plusieurs séries de calculs ont été menées avec des modèles de plasticité cristalline allant du plus simple (deux dimensions avec un seul système de glissement) au plus évolué (tridimensionnel semi-périodique avec les douze systèmes de glissement octaédriques). Un axe important de ce travail a consisté à analyser l'influence du voisinage d'un grain sur lui-même. Cela impliquait, par exemple pour un grain doté d'une certaine orientation, de traiter différents arrangements de grains voisins. Le nombre de configurations testées dans chaque partie est étroitement lié à la complexité et à la finesse du modèle. Ainsi un large échantillon de microstructures a-t-il pu être étudié avec différentes modélisations et conduire à des conclusions, pour la plupart communes au niveau de complexité du modèle. Des dépouillements graphiques originaux ont été réalisés pour fournir un nouveau regard sur les résultats et permettre d'approfondir les analyses.

L'approche statistique a permis de caractériser finement les distributions des différentes variables critiques, de type contrainte ou déformation. Ainsi, il a été montré que la dispersion des valeurs des déformations plastiques est bien plus importante dans les grains en surface que dans les grains à cœur. Ceci consolide l'idée que, dans le cas d'un matériau sans inclusions ni pores, l'amorçage de microfissures se produit naturellement en surface des agrégats, là où le glissement est le plus facile, et où il sera le plus probable de retrouver des valeurs extrêmes. Nous avons également mis en évidence un effet de voisinage qui modifie le comportement effectif d'un grain par rapport à son comportement intrinsèque, *i.e.* de monocristal. Il résulte de la redistribution des contraintes à l'échelle locale sous l'influence des grains voisins. De ce fait, il est plus important à cœur, alors que les grains de surface ont un comportement plus proche du monocristal. Pour caractériser les grains critiques d'un agrégat polycristallin vis-à-vis de l'amorçage, il faut donc prendre en compte les caractéristiques du grain, notamment son orientation cristalline, mais également celles des grains voisins. La notion de comportement individuel (local) est à remplacer

par celle de comportement d'un assemblage (cluster). Cela consiste, par exemple, à ajouter la notion de désorientation vis-à-vis des grains voisins au « traditionnel » facteur de Schmid.

Les effets de bords qui proviennent des conditions aux limites et qui rigidifient les limites de l'agrégat ont été caractérisés. Ils perturbent les résultats sur une rangée de grains, et, de ce fait, ils réduisent considérablement l'échantillon de grains réellement exploitables à l'analyse. C'est ce qui motive l'utilisation d'une modélisation semi-périodique. La procédure de génération de microstructure correspondante a été mise en place, accompagnée des conditions aux limites adaptées. Les calculs qui ont été effectués avec ces microstructures ont permis de reproduire les tendances du modèle tridimensionnel classique, avec toutefois un échantillon exploitable plus vaste pour une taille de maillage limitée. Ceci permet un gain important en temps de calcul et permet donc de simuler davantage de microstructures avec un meilleur rendement de données exploitables.

D'un point de vue plus spécifique à chaque partie de l'étude, on a pu soulever différents effets liés à la microstructure. L'effet de forme des grains de surface a été mis en évidence dans l'étude des maillages bidimensionnels : les grains « ouverts », dont l'intersection avec la surface libre se fait au niveau de méridiens, sont plus sensibles à l'environnement que les grains « fermés » qui ne possèdent qu'une petite « fenêtre » sur la surface extérieure. L'orientation cristalline du grain peut donc dans ce cas passer au second plan lorsqu'il s'agit de définir l'activation des mécanismes de déformation plastique.

La modélisation tridimensionnelle a permis d'étudier des chargements de types uniaxial et équibiaxial. À même déformation équivalente au sens de von Mises, le chargement biaxial produit plus de déformation plastique que le chargement uniaxial. De plus, les structures de localisation de la déformation plastique observées dans le volume révèlent une organisation plus propice à l'amorçage de microfissures. Plus précisément, cela se traduit par la formation d'une plus grande proportion de facettes de type B, qui conduisent à l'émergence de marches d'intrusion/extrusion en surface. Le caractère biaxial du chargement, tel que rencontré dans les circuits de refroidissement, constitue donc un facteur aggravant, comparé au cas uniaxial.

Disposant d'une information tridimensionnelle sur les mécanismes de glissement, un indicateur reflétant la formation des marches d'intrusion/extrusion a été calculé en surface libre. Il présente des valeurs généralement plus élevées aux abords des joints de grains. Ceci montre que les zones situées à proximité des joints de grains sont propices à l'amorçage, sous l'effet des incompatibilités intergranulaires. Bien que les zones critiques soient proches des joints de grains, il s'agit bien d'un amorçage intragranulaire, conduisant à une micropropagation intragranulaire. Les images illustrant à la fois l'intensité et l'orientation des marches peuvent être confrontées aux traces observées expérimentalement à la surface des polycristaux.

L'introduction de la rugosité de surface a mis en évidence une compétition entre l'orientation cristalline et le relief de surface dans les mécanismes menant à la localisation de la déformation plastique en surface de l'agrégat. En effet, les calculs effectués avec différentes rugosités sont très différents de ceux qui sont réalisés sur agrégats vierges. Les zones de fortes localisations sont en quelque sorte « déplacées » des grains et joints de grains critiques vers le fond des vallées. Plus les rayons de courbures du relief de surface sont petits, plus ce phénomène s'intensifie. On relève toutefois des hétérogénéités d'un grain à un autre, l'effet de l'orientation n'est donc pas réduit à néant en surface. Les différences entre agrégats rugueux et vierges s'estompent progressivement dans la profondeur de l'agrégat, jusqu'à devenir négligeables après la première rangée de grains, on peut conclure que la rugosité influera essentiellement sur la période d'amorçage, mais peu ou pas sur la micropropagation qui suit. L'orientation géométrique des stries du relief de surface joue aussi un rôle important : ainsi, dans le cas d'un chargement uniaxial, la plus nocive est orthogonale à la direction de chargement.

6.2 Perspectives

Ces conclusions mettent en avant le besoin d'identifier au mieux les lois de comportement, voire de les modifier, afin de produire des résultats en meilleure adéquation avec les observations expérimentales par l'intermédiaire des mesures de champs, tomographie et EBSD tridimensionnel. En raison des particularités des mécanismes de déformation rencontrés aux joints de grains, identifiés comme zones critiques en termes de formation de marches d'intrusion/extrusion, il faudra certainement construire pour ces zones un comportement spécifique différent du comportement observé au centre des grains.

Le couplage entre Éléments Finis (EF) et Dynamique Discrète des Dislocations (DDD), objet de plusieurs études actuellement, constitue un outil indispensable pour combler le fossé entre les simulations à l'échelle du grain et les calculs d'agrégats. Simuler plusieurs grains de surface par DDD, dans le cadre d'un système de calcul couplé à un code EF est une solution raisonnable pour traiter avec plus de précision le développement des marches d'intrusion/extrusion. La DDD permet en effet de retrouver de façon naturelle l'hétérogénéité de la déformation à l'échelle de la microstructure, le développement de bandes de glissement, ainsi que les reliefs issus de la déformation plastique.

Concernant l'effet de la rugosité de surface, de nombreuses perspectives s'ouvrent. Dans un premier temps, il faut faire la part entre l'aspect cristallographique et l'aspect géométrique dans la localisation de la déformation plastique. Cette analyse doit être effectuée en surface et à différentes profondeurs, car la portée de l'influence de la rugosité varie suivant le relief de surface. Ensuite, il reste encore des paramètres caractérisant la rugosité dont il serait intéressant d'étudier précisément l'influence, notamment l'orientation des stries et le resserrement de celles-ci. Enfin, la prise en compte de l'écrouissage de surface et des contraintes résiduelles représente un enrichissement indispensable pour valider l'analyse de l'effet de la rugosité.

La modélisation semi-périodique mise en place au cours de cette thèse peut également servir d'outil pour le développement d'un modèle à champs moyens capable de reproduire le comportement des grains d'un polycristal en surface libre d'un composant. En effet, les modèles d'homogénéisation dédiés aux polycristaux ne permettent pas de prendre en compte l'effet de surface libre. Pilvin a proposé pour cela une modification du modèle en β en incorporant le paramètre de distance à la surface libre d_{surf} pour faire varier progressivement le tenseur des contraintes [104]. Herbland propose quant à lui de modifier les paramètres scalaires (μ, D) du modèle en paramètres tensoriels $(\underline{\underline{C}}, \underline{\underline{D}})$, afin d'offrir la possibilité d'annuler les composantes du tenseur de contraintes qui doivent rester nulles en surface libre malgré l'opération de correction [106].

Sur la base de ces deux modèles, nous proposons de développer un modèle prenant en compte l'effet de surface libre de manière progressive en fonction de la profondeur du grain dans le volume. Pour ceci, nous définissons les paramètres tensoriels $(\underline{\underline{C}}, \underline{\underline{D}})$, variables en fonction de la distance à la surface libre d_{surf} .

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{C}}(d_{\text{surf}}) \left(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}^i \right) \quad (6.1)$$

$$\underline{\underline{\dot{\beta}}}^i = \underline{\underline{\dot{\xi}}}^{p,i} - \underline{\underline{D}}(d_{\text{surf}}) \underline{\underline{\beta}}^i \underline{\underline{e}}_{eq}^{p,i} \quad (6.2)$$

Le modèle, noté β_{surf} , est en cours de développement et de validation par recalage sur les calculs semi-périodiques. Ces calculs doivent être réalisés sur différentes microstructures afin de disposer d'une quantité suffisante de données à diverses profondeurs. Le recalage des paramètres du modèle se fait par méthode inverse, la procédure est décrite en figure 6.1. D'une part, le

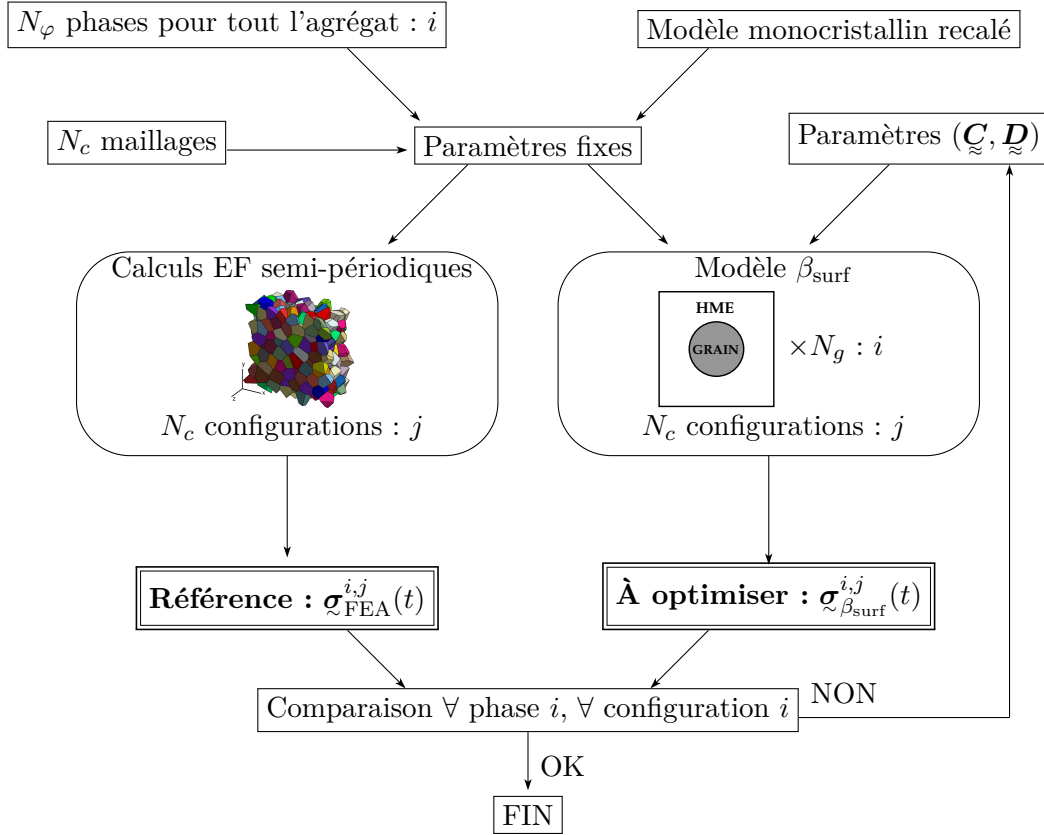


Fig. 6.1 – Procédure de recalage du modèle β_{surf} avec prise en compte de la profondeur d_{surf} .

processus d'optimisation se base sur les résultats des calculs EF semi-périodiques, effectués sur plusieurs maillages distincts. Plus précisément, pour chaque grain i d'un agrégat j , on conserve l'évolution du tenseur moyen des contraintes, noté $\sigma_{\text{FEA}}^{i,j}$. D'autre part, on calcule, par l'intermédiaire de modèle β_{surf} , l'évolution du tenseur des contraintes dans le grain i , pour la configuration j , noté $\sigma_{\beta_{\text{surf}}}^{i,j}$. La comparaison est effectuée entre les évolutions temporelles de ces deux tenseurs, pour chaque grain i , dans chaque configuration j . Les paramètres \mathbf{C} et \mathbf{D} sont réajustés afin de minimiser l'écart entre les résultats du modèle EF (référence) et du modèle β_{surf} .

Il existe d'autres paramètres importants, relatifs aux grains, qui peuvent à terme être incorporés dans ce modèle. D'une part, en plus de la distance à la surface libre, la forme des grains en surface influe sur leur comportement (contour ouvert ou fermé), ceci peut être retranscrit par l'aire du grain appartenant à la surface libre. D'autre part, l'effet voisinage peut en partie être reproduit en introduisant un paramètre de désorientation du grain vis-à-vis de son voisinage.

Annexes

Annexe A

Notations utilisées dans le manuscrit

Sommaire

A.1	Abréviations	157
A.2	Variables et paramètres	158
A.3	Vecteurs, tenseurs, matrices...	159
A.4	Opérateurs	159
A.5	Fonctions	159

A.1 Abréviations

AFM	: Microscope à force atomique (Atomic force Microscope)
CL (ou BC)	: Condition aux Limites (Boundary Condition)
CFC (ou FCC)	: Cubique à Faces Centrées (Face-Centered Cubic)
DDD	: Dynamique Discrète des Dislocations
DDL (ou DOF)	: Degré De Liberté (Degree Of Freedom)
EBSA	: Diffraction d'électrons rétrodiffusés (Electron Back Scattering Diffraction)
EF	: Éléments Finis
GND	: Dislocations géométriquement nécessaire (Geometrically Necessary Dislocation)
HCF	: Fatigue à grand nombre de cycles (High Cycle Fatigue)
LCF	: Fatigue à petit nombre de cycles (Low Cycle Fatigue)
MEB	: Microscope Électronique à Balayage
MET	: Microscope Électronique à Transmission
MEPR	: Mécanique ÉlastoPlastique de la Rupture
MLR	: Mécanique Linéaire de la Rupture
MPC	: Contrainte multipoint (Multi-Point Constraint)
MSC	: Fissure microstructuralement courte (Microstructurally Short Crack)
PSB	: Bande de glissement persistante (Persistent Slip Band)
PSM	: Trace de glissement persistante en surface (Persistent Slip Marking)
RRA	: Refroidissement du Réacteur à l'Arrêt
SFE	: Énergie de faute d'empilement (Stacking Fault Energy)
SST	: Triangle standard (Standard Stereographic Triangle)

A.2 Variables et paramètres

N : Nombre de cycles
 N_i : Nombre de cycles à l'amorçage
 N_p : Nombre de cycles de la phase de propagation
 N_f : Nombre de cycles à rupture
 σ_{FL} : Limite de fatigue
 a : Longueur de la fissure
 K_{max} : Valeur maximale du facteur d'intensité de contrainte
 K_{min} : Valeur minimale du facteur d'intensité de contrainte
 $\Delta K/2$: Amplitude du facteur d'intensité de contrainte

τ^s : Cission résolue sur le système s
 γ^s : Glissement sur le système s
 γ_{cum}^s : Glissement cumulé sur le système s
 r^s : Terme d'écroissage isotrope sur le système s
 x^s : Terme d'écroissage cinématique sur le système s
 \underline{l}^s : Vecteur de direction de glissement du système s
 \underline{n}^s : Vecteur normal au plan de glissement du système s
 \underline{m}^s : Tenseur d'orientation du système s
 M^s : Facteur de Schmid macroscopique sur le système s
 M_{max} : Facteur de Schmid macroscopique maximal
 m^s : Facteur de Schmid local sur le système s
 γ_{SFE} : Énergie de faute d'empilement

$[110]$: Direction 110 selon la notation des indices de Miller
 $\langle 110 \rangle$: Famille des directions de type 110 : $[110]$, $[101]$, $[011]$, $[\bar{1}10]$, $[10\bar{1}]$ et $[0\bar{1}1]$
 (111) : Plan de normale 111 selon la notation des indices de Miller
 $\{111\}$: Famille des plans de normale de type 111 : (111) , $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}1)$ et $(11\bar{1})$
 $\Delta\theta^{i,j}$: Désorientation cristalline entre les grains i et j
 $\Delta\theta_w$: Désorientation pondérée entre un grain son voisinage
 $\theta_{GB/load}$: Angle entre le joint de grains et la direction de chargement
 d_{GB} : Distance au joint de grains
 \underline{n}_{GB} : Vecteur normal au joint de grains
 d_{surf} : Distance à la surface libre
 \underline{n}_{surf} : Vecteur normal à la surface
 γ_{surf} : Indicateur de hauteur d'intrusion/extrusion
 $\theta_{PSM/x}$: Angle entre la trace de glissement et l'axe x
 $\theta_{PSM/y}$: Angle entre la trace de glissement et l'axe y
 $\theta_{PSM/z}$: Angle entre la trace de glissement et l'axe z

A.3 Vecteurs, tenseurs, matrices...

$\underline{\mathbf{a}}$	Vecteur
$\underline{\underline{\mathbf{a}}}$	Tenseur d'ordre 2
dev $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$	Déviateur du tenseur $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$
Tr $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$	Trace du tenseur $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$
$\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}$	Tenseur d'ordre 4
$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}}$	Matrice
Tr $\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}}$	Trace de la matrice $\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}}$
$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}}^\top$	Transposée de la matrice $\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}}$
$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}}^{-1}$	Inverse de la matrice $\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}}$

A.4 Opérateurs

$x = \underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\mathbf{b}}$	Produit scalaire des vecteurs $\underline{\mathbf{a}}$ et $\underline{\mathbf{b}}$	$x = a_i b_i$
$x = \underline{\underline{\mathbf{a}}} : \underline{\underline{\mathbf{b}}}$	Produit contracté des tenseurs $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$ et $\underline{\underline{\mathbf{b}}}$	$x = a_{ij} b_{ij}$
$\underline{\mathbf{x}} = \underline{\underline{\mathbf{a}}} \cdot \underline{\mathbf{b}}$	Produit contracté du tenseur $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$ et du vecteur $\underline{\mathbf{b}}$	$x = a_{ij} b_{ij}$
$\underline{\mathbf{x}} = \underline{\mathbf{a}} \wedge \underline{\mathbf{b}}$	Produit vectoriel des vecteurs $\underline{\mathbf{a}}$ et $\underline{\mathbf{b}}$ (notation française)	
$\underline{\mathbf{x}} = \underline{\mathbf{a}} \times \underline{\mathbf{b}}$	Produit vectoriel des vecteurs $\underline{\mathbf{a}}$ et $\underline{\mathbf{b}}$ (notation anglo-saxonne)	
$\underline{\underline{\mathbf{x}}} = \underline{\underline{\mathbf{a}}} \otimes \underline{\underline{\mathbf{b}}}$	Produit dyadique (ou tensoriel) des vecteurs $\underline{\mathbf{a}}$ et $\underline{\mathbf{b}}$	$x_{ij} = a_i b_j$
$\underline{\underline{\underline{\mathbf{x}}}} = \underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}} \cdot \underline{\underline{\underline{\mathbf{b}}}}$	Produit matriciel des matrices $\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}$ et $\underline{\underline{\underline{\mathbf{b}}}}$	$x_{ij} = a_{ik} b_{kj}$

A.5 Fonctions

Fonction signe : $\text{sign}(\bullet) = \begin{cases} 1 & \text{si } \bullet > 0 \\ 0 & \text{si } \bullet = 0 \\ -1 & \text{si } \bullet < 0 \end{cases}$

Fonction partie positive : $\langle \bullet \rangle = \begin{cases} \bullet & \text{si } \bullet \geq 0 \\ 0 & \text{si } \bullet < 0 \end{cases}$

Moyenne dans l'agrégat : $\langle \bullet \rangle_a = \frac{1}{V} \int_V \bullet \, dV$

Moyenne par grain : $\langle \bullet \rangle_g = \frac{1}{V_g} \int_{V_g} \bullet \, dV$

Moyenne par élément : $\langle \bullet \rangle_e = \frac{1}{V_e} \int_{ele} \bullet \, dV$

Écart type dans le grain : $\langle \bullet \rangle_g^* = \frac{1}{V_g} \int_{V_g} (\bullet - \langle \bullet \rangle_g)^2 \, dV$

Annexe B

Orientations et désorientations

Sommaire

B.1	Matrice d'orientation d'un cristal	161
B.2	Désorientation	164
B.3	Représentation graphique des orientations	167
B.4	Génération aléatoire d'orientations	169

Cette section est consacrée aux calculs des orientations et désorientations des grains. Le détail du calcul de la désorientation entre deux cristaux est présenté en se basant sur le travail de Randle [22], repris entre autres par Quey [172]. Quelques éléments sont également rappelés sur la représentation graphique des orientations. Enfin, nous aborderons le processus de génération aléatoire d'orientations. Dans cette section, on emploiera le terme de cristal au lieu du terme de grain.

B.1 Matrice d'orientation d'un cristal

Définition et propriétés de la matrice d'orientation

L'orientation d'un cristal est définie par la rotation du repère de référence vers le repère du cristal. Le repère de référence (ou repère du spécimen, repère du laboratoire ou encore repère absolu) est défini par une base orthonormée directe β_R . Les vecteurs ($\underline{\mathbf{R}}_1, \underline{\mathbf{R}}_2, \underline{\mathbf{R}}_3$) de cette base sont généralement définis par les directions de laminage, de travers long et de direction normale du spécimen. Le repère local du cristal, ou repère matériau, est donné par une base orthonormée directe β_C , définie par les vecteurs ($\underline{\mathbf{C}}_1, \underline{\mathbf{C}}_2, \underline{\mathbf{C}}_3$) qui, dans le cas des réseaux cristallins cubiques, sont équivalents à ($[100], [010], [001]$).

La matrice d'orientation $\underline{\mathbf{g}}$ est l'opérateur direct qui donne les vecteurs exprimés dans la base β_C à partir des vecteurs exprimés dans la base β_R .

$$\beta_C = \underline{\mathbf{g}} \cdot \beta_R \tag{B.1}$$

La matrice d'orientation $\underline{\mathbf{g}}$ équivaut à la matrice de passage inverse du repère de référence (base β_R) au repère du cristal (base β_C), soit la matrice de passage du repère du cristal (base β_C) au repère de référence (base β_R). Ses lignes correspondent aux coordonnées des vecteurs de

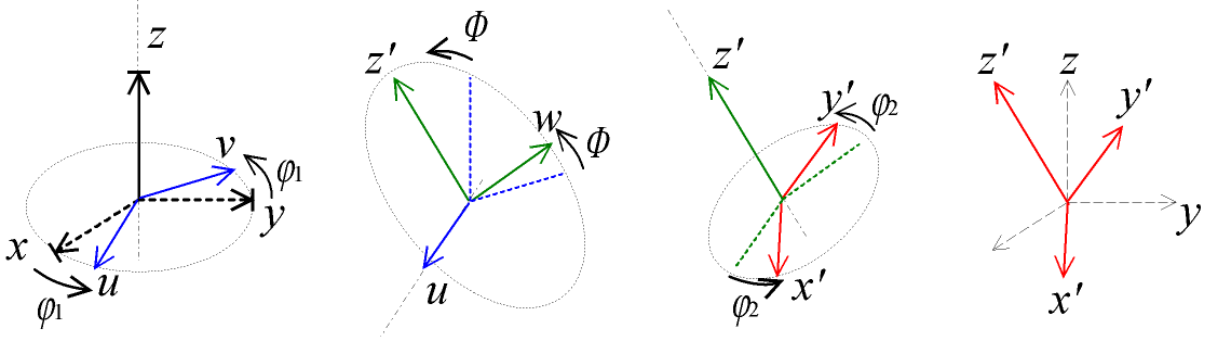


Fig. B.1 – Décomposition de la rotation par angles d'Euler.

la base du cristal β_C , exprimés dans la base de référence β_R . Ses colonnes correspondent aux coordonnées des vecteurs de la base de référence β_R , exprimés dans la base du cristal β_C .

La matrice $\underline{\underline{g}}$ est orthonormale donc :

$$\underline{\underline{g}}^{-1} = \underline{\underline{g}}^T \quad (\text{B.2})$$

Soient $\underline{\underline{v}}_R$ un vecteur exprimé dans le repère de référence et $\underline{\underline{v}}_C$ le même vecteur exprimé dans le repère du cristal. On a :

$$\underline{\underline{v}}_C = \underline{\underline{g}} \cdot \underline{\underline{v}}_R \quad (\text{B.3})$$

$$\underline{\underline{v}}_R = \underline{\underline{g}}^{-1} \cdot \underline{\underline{v}}_C = \underline{\underline{g}}^T \cdot \underline{\underline{v}}_C \quad (\text{B.4})$$

Soient $\underline{\underline{m}}_R$ une matrice exprimée dans le repère de référence et $\underline{\underline{m}}_C$ la même matrice exprimée dans le repère du cristal. On a :

$$\underline{\underline{m}}_R = \underline{\underline{g}}^{-1} \cdot \underline{\underline{m}}_C \cdot \underline{\underline{g}} = \underline{\underline{g}}^T \cdot \underline{\underline{m}}_C \cdot \underline{\underline{g}} \quad (\text{B.5})$$

$$\underline{\underline{m}}_C = \underline{\underline{g}} \cdot \underline{\underline{m}}_R \cdot \underline{\underline{g}}^{-1} = \underline{\underline{g}} \cdot \underline{\underline{m}}_R \cdot \underline{\underline{g}}^T \quad (\text{B.6})$$

Angles d'Euler

L'orientation cristalline des grains est généralement définie par trois angles d'Euler ($\varphi_1, \phi, \varphi_2$), selon la notation de Bunge. Ces angles peuvent être obtenus expérimentalement par EBSD. Chaque angle est associé à un axe de rotation. Suivant les domaines, différentes combinaisons d'axes de rotation sont utilisées (mécanique, matériaux, aviation, robotique...). Dans notre cas, il s'agit d'une combinaison ZXZ, comme illustré en figure B.1. Au départ, les axes du repère du cristal sont confondus avec les axes du repère de référence, puis on procède à trois rotations successives :

- une première rotation d'angle φ_1 autour de l'axe z : $Oxyz \rightarrow Ouvw$;
- une seconde rotation d'angle ϕ autour du nouvel axe u : $Ouvw \rightarrow Owvz'$;
- une troisième rotation d'angle φ_2 autour du nouvel axe z' : $Owvz' \rightarrow Ox'y'z'$,

sachant que $Oxyz$ correspond au repère de référence et $Ox'y'z'$ correspond au repère du cristal ($[100], [010], [001]$). À noter qu'il n'y a pas unicité du triplets d'angles d'Euler pour une même rotation.

Dans le cas d'une rotation définie par les angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$, la matrice d'orientation $\underline{\mathbf{g}}$ est composée comme suit :

$$\underline{\mathbf{g}} = \begin{pmatrix} c_1 c_2 - s_1 c_g s_2 & s_1 c_2 + c_1 c_g s_2 & s_g s_2 \\ -c_1 s_2 - s_1 c_g c_2 & c_1 c_g c_2 - s_1 s_2 & s_g c_2 \\ s_1 s_g & -c_1 s_g & c_g \end{pmatrix} \quad (\text{B.7})$$

$$\text{avec } \begin{cases} c_1 = \cos \varphi_1 & s_1 = \sin \varphi_1 \\ c_g = \cos \phi & s_g = \sin \phi \\ c_2 = \cos \varphi_2 & s_2 = \sin \varphi_2 \end{cases} \quad (\text{B.8})$$

Quaternions

Un quaternion est un type de nombre hypercomplexe, constitué d'un quadruplet de nombres réels. Cette notion fut introduite au XIX^e siècle par Hamilton. Les quaternions unitaires représentent un outil mathématique idéal pour caractériser l'orientation et la rotation d'objets en trois dimensions. Ils sont employés, entre autres, en robotique, dynamique moléculaire et la mécanique spatiale des satellites.

Dans un quaternion, le premier nombre est un scalaire, les trois suivants représentent un vecteur.

$$q = (q_0, \underline{\mathbf{q}}) = (q_0, q_1, q_2, q_3) \quad (\text{B.9})$$

Un quaternion est unitaire si sa norme est égale à un : $\sum_i q_i = 1$. Si tel est le cas, il peut décrire une rotation d'axe $\underline{\mathbf{n}}$ et d'angle θ .

$$\begin{cases} q_0 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_1 = n_1 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_2 = n_2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_3 = n_3 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

L'algèbre des quaternions n'est pas décrite en détail ici, mais le lecteur peut se référer à l'ouvrage écrit par de Casteljaou [173].

Conversions entre angles d'Euler et quaternions

On peut passer des angles d'Euler (ϕ_1, Φ, ϕ_2) au quaternion q par les équations suivantes :

$$\begin{cases} q_0 = \cos\left(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\Phi}{2}\right) \\ q_1 = \cos\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\Phi}{2}\right) \\ q_2 = \sin\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\Phi}{2}\right) \\ q_3 = \sin\left(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\Phi}{2}\right) \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

On peut passer des quaternions aux angles d'Euler par le procédé suivant :

- on fixe ε un nombre décimal infiniment petit
- si $|q_1| < \varepsilon$ et $|q_2| < \varepsilon$, alors $a = \frac{\pi}{4}$
 sinon $a = \arctan\left(\frac{q_2}{q_1}\right)$
- si $|q_0| < \varepsilon$ et $|q_3| < \varepsilon$, alors $b = \frac{\pi}{4}$
 sinon $b = \arctan\left(\frac{q_3}{q_0}\right)$
- on calcule les angles d'Euler à partir de a et b :

$$\begin{cases} \phi_1 = a + b \\ \Phi = 2 \arccos \sqrt{q_0^2 + q_3^2} \\ \phi_2 = b - a \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

B.2 Désorientation

Il est important de discerner la désorientation entre deux repères et la désorientation entre deux réseaux cristallins (désorientation cristalline). En effet, les symétries propres au type de réseau cristallin induisent que différentes rotations amènent à la même orientation cristalline. C'est-à-dire que l'arrangement des atomes est équivalent, même si le repère local du cristal est différent.

Matrice de désorientation

Soient deux cristaux A et B dont les matrices d'orientation sont notées $(\underline{g}_A, \underline{g}_B)$ et dont les bases locales sont notées (β_A, β_B) . La matrice de désorientation entre A et B se note $\underline{g}_{A/B}$ en prenant comme référence le cristal A.

$$\beta_B = \underline{g}_{A/B} \cdot \beta_A \quad (\text{B.13})$$

Elle est calculée comme suit :

$$\underline{g}_{A/B} = \underline{g}_B \cdot \underline{g}_A^{-1} = \underline{g}_B \cdot \underline{g}_A^T \quad (\text{B.14})$$

Démonstration : Soient β la base de référence, β_A et β_B deux bases correspondant à deux cristaux, \underline{g}_A et \underline{g}_B leur matrice d'orientation. Soient \underline{m} , une matrice exprimée dans β , \underline{m}_A et \underline{m}_B représentent la même matrice exprimée dans β_A et β_B .

On sait que :

$$\underline{m}_A = \underline{g}_A \cdot \underline{m} \cdot \underline{g}_A^{-1} \quad (\text{B.15})$$

$$\underline{m} = \underline{g}_A^{-1} \cdot \underline{m}_A \cdot \underline{g}_A \quad (\text{B.16})$$

$$\underline{m} = \underline{g}_A^T \cdot \underline{m}_A \cdot \underline{g}_A \quad (\text{B.17})$$

Or :

$$\underline{m}_B = \underline{g}_B \cdot \underline{m} \cdot \underline{g}_B^{-1} \quad (\text{B.18})$$

$$\underline{m}_B = \underline{g}_B \cdot \underline{m} \cdot \underline{g}_B^T \quad (\text{B.19})$$

On réinjecte l'équation (B.17) dans l'équation (B.19) :

$$\underline{\mathbf{m}}_B = \underline{\mathbf{g}}_B \cdot \left(\underline{\mathbf{g}}_A^\top \cdot \underline{\mathbf{m}}_A \cdot \underline{\mathbf{g}}_A \right) \cdot \underline{\mathbf{g}}_B^\top \quad (\text{B.20})$$

$$\underline{\mathbf{m}}_B = \left(\underline{\mathbf{g}}_B \cdot \underline{\mathbf{g}}_A^\top \right) \cdot \underline{\mathbf{m}}_A \cdot \left(\underline{\mathbf{g}}_A \cdot \underline{\mathbf{g}}_B^\top \right) \quad (\text{B.21})$$

$$\underline{\mathbf{m}}_B = \left(\underline{\mathbf{g}}_B \cdot \underline{\mathbf{g}}_A^\top \right) \cdot \underline{\mathbf{m}}_A \cdot \left(\underline{\mathbf{g}}_B \cdot \underline{\mathbf{g}}_A^\top \right)^\top \quad (\text{B.22})$$

Donc la matrice d'orientation entre β_B et β_A s'exprime, en prenant comme référence β_A :

$$\underline{\mathbf{g}}_{A/B} = \underline{\mathbf{g}}_B \cdot \underline{\mathbf{g}}_A^\top = \underline{\mathbf{g}}_B \cdot \underline{\mathbf{g}}_A^{-1} \quad (\text{B.23})$$

Désorientation absolue

Pour obtenir l'angle de désorientation à partir de cette matrice, on utilise la propriété impliquant que la trace d'une matrice est constante quelle que soit la base orthonormée directe dans laquelle elle est exprimée. Or on peut exprimer la matrice $\underline{\mathbf{g}}_{A/B}$ comme une rotation d'angle θ et d'axe $\underline{\mathbf{r}}$ en choisissant la base appropriée β_Δ . On peut donc écrire :

$$\underline{\mathbf{g}}_{A/B} = \begin{pmatrix} \Delta g_{11} & \Delta g_{12} & \Delta g_{13} \\ \Delta g_{21} & \Delta g_{22} & \Delta g_{23} \\ \Delta g_{31} & \Delta g_{32} & \Delta g_{33} \end{pmatrix}_{\beta_R} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{\beta_\Delta} \quad (\text{B.24})$$

$$\text{Tr} \left(\underline{\mathbf{g}}_{A/B} \right) = 2 \cos \theta + 1 \quad (\text{B.25})$$

$$\theta = \arccos \left(\frac{\text{Tr} \left(\underline{\mathbf{g}}_{A/B} \right) - 1}{2} \right) \quad (\text{B.26})$$

$$\begin{cases} r_1 = \Delta g_{23} - \Delta g_{32} \\ r_2 = \Delta g_{31} - \Delta g_{13} \\ r_3 = \Delta g_{12} - \Delta g_{21} \end{cases} \quad (\text{B.27})$$

Désorientation cristalline

Les réseaux cristallins de type cubique (Cubique Centré et Cubique à Faces Centrées) comportent 24 symétries auxquelles 24 opérateurs de symétries $\underline{\mathbf{Q}}_i$ sont associés. Ces opérations de symétrie correspondent à :

- l'identité,
- aux 9 rotations de 90° autour des axes de famille $\langle 100 \rangle$, *i.e.* $[100]$, $[010]$ et $[001]$,
- aux 6 rotations de 180° autour des axes de famille $\langle 110 \rangle$, *i.e.* $[110]$, $[101]$, $[011]$, $[\bar{1}10]$, $[10\bar{1}]$ et $[0\bar{1}1]$,
- aux 8 rotations de 120° autour des axes de famille $\langle 111 \rangle$, *i.e.* $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ et $[11\bar{1}]$,

$$\begin{array}{cccc}
\underline{\mathbf{Q}}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_4 = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\underline{\mathbf{Q}}_5 = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_6 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_8 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \\
\underline{\mathbf{Q}}_9 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{10} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{11} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{12} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
\underline{\mathbf{Q}}_{13} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{14} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{15} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{16} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\underline{\mathbf{Q}}_{17} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{18} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{19} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{20} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \\
\underline{\mathbf{Q}}_{21} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{22} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{23} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix} & \underline{\mathbf{Q}}_{24} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix}
\end{array}$$

Pour prendre en compte ces symétries dans le calcul de la désorientation cristalline, on applique un opérateur de symétrie $\underline{\mathbf{Q}}_i$, respectivement $\underline{\mathbf{Q}}_j$, au premier membre, respectivement au second membre.

$$\underline{\mathbf{g}}_{A,i} = \underline{\mathbf{Q}}_i \cdot \underline{\mathbf{g}}_A \quad \text{et} \quad \underline{\mathbf{g}}_{B,j} = \underline{\mathbf{Q}}_j \cdot \underline{\mathbf{g}}_B \quad (\text{B.28})$$

$$\underline{\mathbf{g}}_{A,i/B,j} = \underline{\mathbf{g}}_{B,i} \cdot \underline{\mathbf{g}}_{A,j}^{-1} \quad (\text{B.29})$$

$$= \underline{\mathbf{g}}_{B,i} \cdot \underline{\mathbf{g}}_{A,j}^T \quad (\text{B.30})$$

$$= \left(\underline{\mathbf{Q}}_j \cdot \underline{\mathbf{g}}_B \right) \cdot \left(\underline{\mathbf{Q}}_i \cdot \underline{\mathbf{g}}_A \right)^T \quad (\text{B.31})$$

$$= \underline{\mathbf{Q}}_j \cdot \underline{\mathbf{g}}_B \cdot \left(\underline{\mathbf{g}}_A^T \cdot \underline{\mathbf{Q}}_i^T \right) \quad (\text{B.32})$$

$$\underline{\mathbf{g}}_{A,i/B,j} = \underline{\mathbf{Q}}_j \cdot \underline{\mathbf{g}}_B \cdot \underline{\mathbf{g}}_A^T \cdot \underline{\mathbf{Q}}_i^T \quad (\text{B.33})$$

Il faut ensuite rechercher la combinaison donnant l'angle de désorientation minimal. L'angle de désorientation entre les cristaux A et B, noté $\Delta\theta_{A/B}$ correspond à la valeur minimale de θ parmi toutes les combinaisons (i,j) possibles.

$$\Delta\theta^{A,B} = \min_{i,j} \left[\arccos \left(\frac{\text{Tr} \left(\underline{\mathbf{g}}_{A,i/B,j} \right) - 1}{2} \right) \right] \quad (\text{B.34})$$

Avec cette procédure, la plage de désorientation possible se trouve réduite. La désorientation maximale est alors d'environ 62,8°.

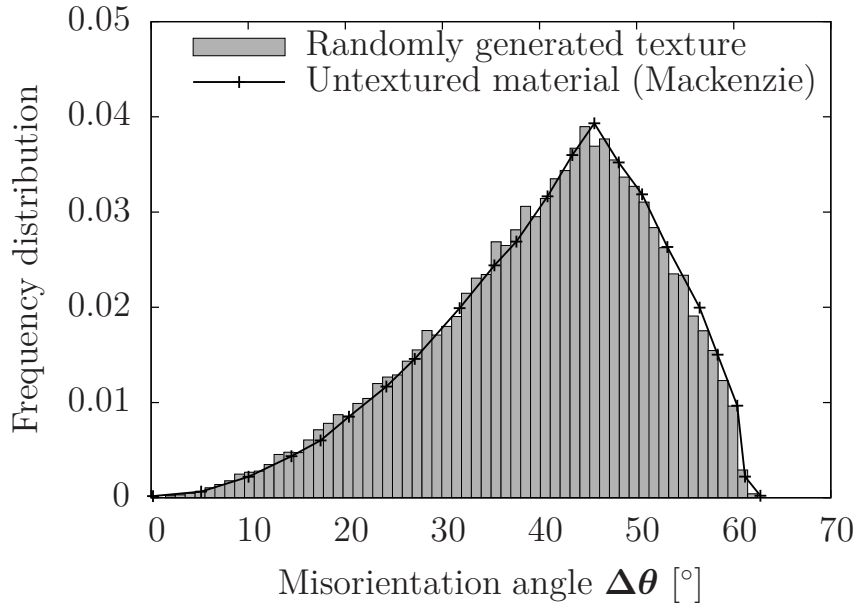


Fig. B.2 – Distribution des désorientations calculée par Mackenzie [21] et issue de notre générateur aléatoire d’angles.

Mackenzie a calculé la distribution des désorientations pour ce type de réseau [21]. Nous l’avons comparé aux résultats de notre programme de calcul de désorientation appliqué sur un jeu de 291 grains orientés aléatoirement (cf. annexe B.4). La figure B.2 montre que le générateur d’angles produit une texture de désorientation isotrope.

B.3 Représentation graphique des orientations

Pour illustrer de manière visuelle les orientations et les textures cristallographiques, il existe différents outils tels que la projection stéréographique. Cette méthode permet de construire une représentation plane d’une orientation dans un espace tridimensionnel. En sciences des matériaux, on utilise de manière récurrente les figures de pôles directe et inverse.

Projection stéréographique

La projection stéréographique permet de représenter sur un plan, la position d’un point M situé sur une sphère de centre O (cf. figure B.3). Le plan en question est le plan équatorial Q , on note le pôle nord N et le pôle sud S . Pour déterminer la projection stéréographique de M sur Q , notée P , il faut calculer l’intersection du segment $[MS]$ avec le plan Q .

Si on considère sur une sphère de rayon unitaire et centre O , le point M de coordonnées (x,y,z) dans le repère $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ et le point P de coordonnées (X,Y) dans le repère $(\underline{e}_1, \underline{e}_2)$:

$$\begin{cases} X = \frac{x}{1+z} \\ Y = \frac{y}{1+z} \end{cases} \quad (\text{B.35})$$

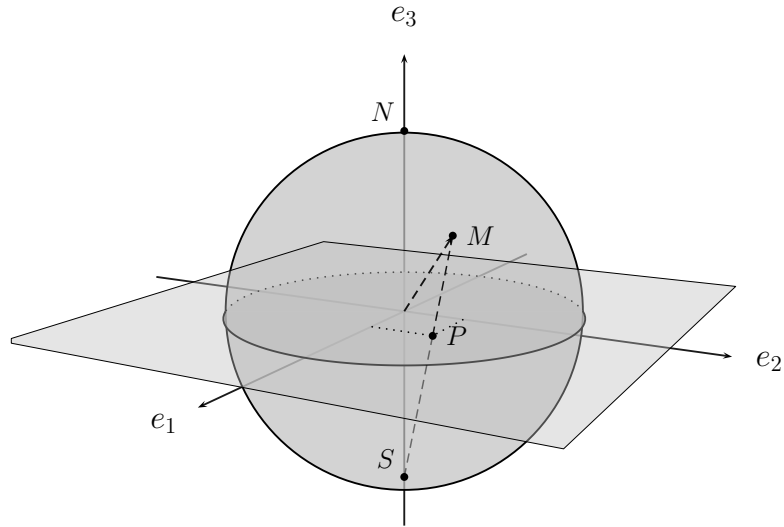


Fig. B.3 – Schéma décrivant le processus de projection stéréographique.

Et réciproquement :

$$\begin{cases} x = \frac{2X}{1 + X^2 + Y^2} \\ y = \frac{Y}{1 + X^2 + Y^2} \\ z = \frac{1 - X^2 - Y^2}{1 + X^2 + Y^2} \end{cases} \quad (\text{B.36})$$

Dans le domaine de la cristallographie, le point M est généralement lié à un des axes du réseau cristallin, exprimé dans le repère du spécimen (figure de pôles directe), ou inversement pour la figure de pôles inverse. Les figures de pôles varient suivant le choix du plan équatorial, défini par les 2 axes de son repère.

Figure de pôles directe

Les figures de pôle directes consistent donc à effectuer, pour une famille de plans cristallographiques $\{hkl\}$, la projection stéréographique des points correspondant aux intersections entre la sphère unitaire et les vecteurs normaux des plans en question. Cette projection se fait généralement sur le plan équateur défini par les directions de l'échantillon : L, TL et TC. Pour un matériau polycristallin, en réalisant cette opération sur tous les grains, on obtient un nuage de points. On peut soit représenter chaque point de ce nuage ou bien représenter les isovaleurs de densité de ces points. L'abaque de Wulff, constitué de la projection stéréographique des parallèles et méridiens de la sphère unitaire, permet de découper le plan et de faire certaines interprétations graphiques. La figure B.4 présente chaque exemple mentionné.

Figure de pôles inverse

Comme son nom l'indique, la figure de pôle inverse consiste à réaliser l'opération inverse. On réalise donc la projection stéréographique d'une certaine direction propre à l'échantillon,

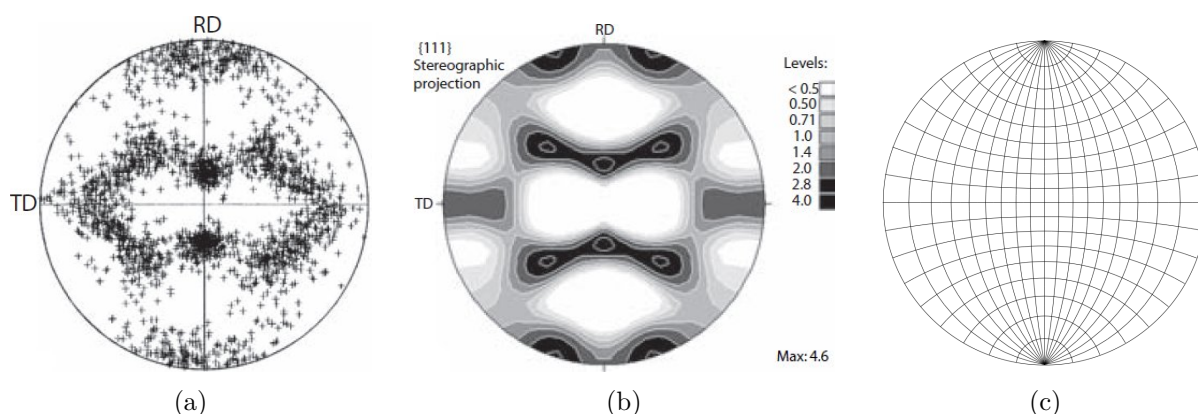


Fig. B.4 – Exemples de figures de pôles directes, d'après Randle [22]. (a) Nuage de points de la figure de pôles des plans $\{111\}$ d'un aluminium. (b) Isovaleurs de densité de points de la figure de pôles des plans $\{111\}$ d'un alliage d'aluminium. (c) Abaque de Wulff.

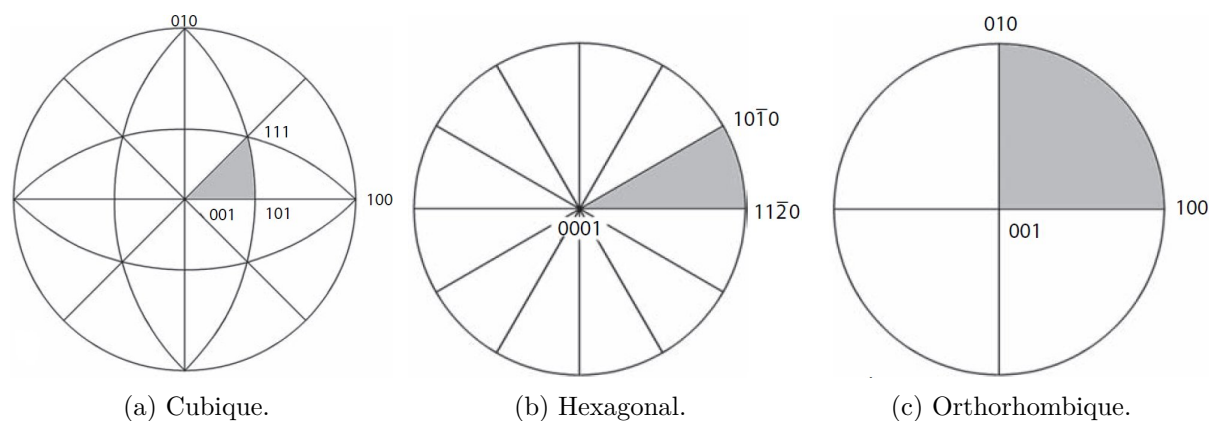


Fig. B.5 – Découpage du plan équatorial en triangles stéréographiques standards pour les différents réseaux, d'après Randle [22].

généralement la direction de chargement, sur le plan équatorial défini par les axes $[100]$ et $[010]$ du cristal. Les réseaux cristallins comportant des symétries, il est possible de réduire le plan de projection équatorial à une zone se rapprochant d'un triangle, appelé triangle standard (SST). Chaque type de réseaux ne possède pas les mêmes symétries, donc on trouve un triangle standard par type de réseau. La figure B.5 donne un aperçu, pour le cas des différents types de réseau, des zones symétriques et du triangle standard.

L'ensemble des points du nuage obtenu par projection stéréographique est reporté par symétrie dans ce triangle. Une unique orientation peut être en partie caractérisée par sa figure de pôle inverse, on parle également de position dans le triangle standard.

B.4 Génération aléatoire d'orientations

Générer des orientations aléatoires est un processus simple au niveau numérique. Les fonctions de type `rand()` permettent aisément de générer des nombres aléatoires. Après quelques manipulations, on peut définir une orientation aléatoire décrite par, entre autres, un jeu d'angles d'Euler ou un quaternion. Il faut cependant rester prudent sur cette méthode car la texture glo-

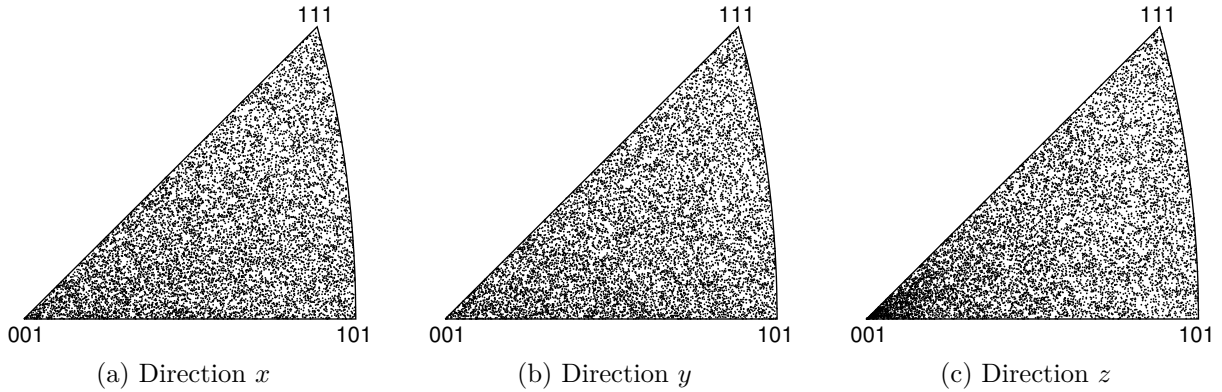


Fig. B.6 – Figures de pôles inverses dans le triangle standard CFC de 10 000 orientations générées par la méthode `euler1` ($\Phi = \pi X_1$).

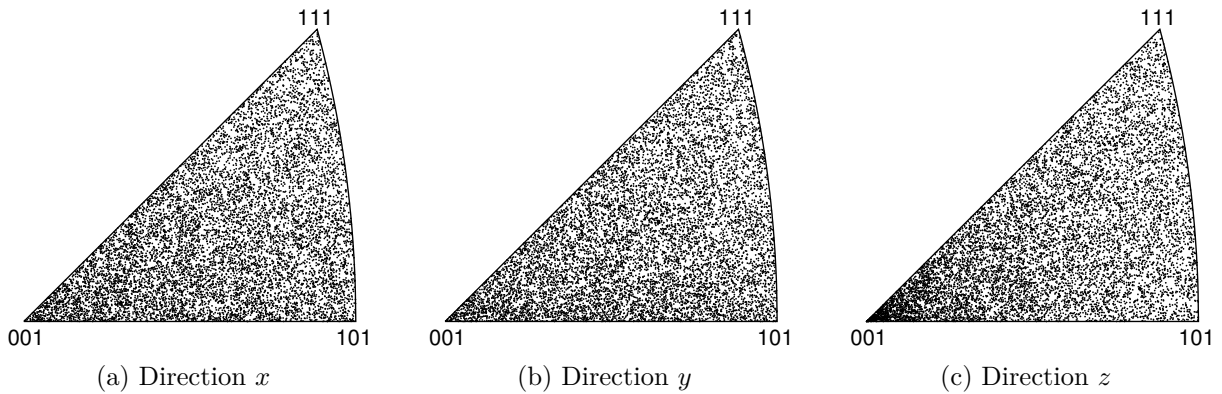


Fig. B.7 – Figures de pôles inverses dans le triangle standard CFC de 10 000 orientations générées par la méthode `euler2` ($\Phi = \arcsin X_1$).

bale des orientations générées, bien qu'aléatoire, n'est pas forcément uniforme. C'est ce que nous montrons ici.

Génération par les angles d'Euler

On peut obtenir un résultat texturé lorsque l'on génère trois angles d'Euler avec : $\phi_1 \in [0; 2\pi]$, $\Phi \in [0; \pi]$, $\phi_2 \in [0; 2\pi]$. L'algorithme de génération de ces angles est simple (méthode `euler1`) :

- tirage aléatoire de trois nombres $(X_0, X_1, X_2) \in [0; 1]$
- passage dans l'espace angulaire :

$$\begin{cases} \phi_1 = 2\pi X_0 \\ \Phi = \pi X_1 \\ \phi_2 = 2\pi X_2 \end{cases} \quad (\text{B.37})$$

Une autre méthode (méthode `euler2`) préconise de prendre $\Phi = \arcsin X_1$.

Bien que chaque angle soit uniformément réparti dans son intervalle, la distribution des orientations obtenues n'est pas uniforme. Cela peut se vérifier en observant les figures de pôles, directe ou inverse en figures B.6 et B.7. On constate une forte concentration de plans de type $\{100\}$ étant proches de l'alignement avec l'axe z .

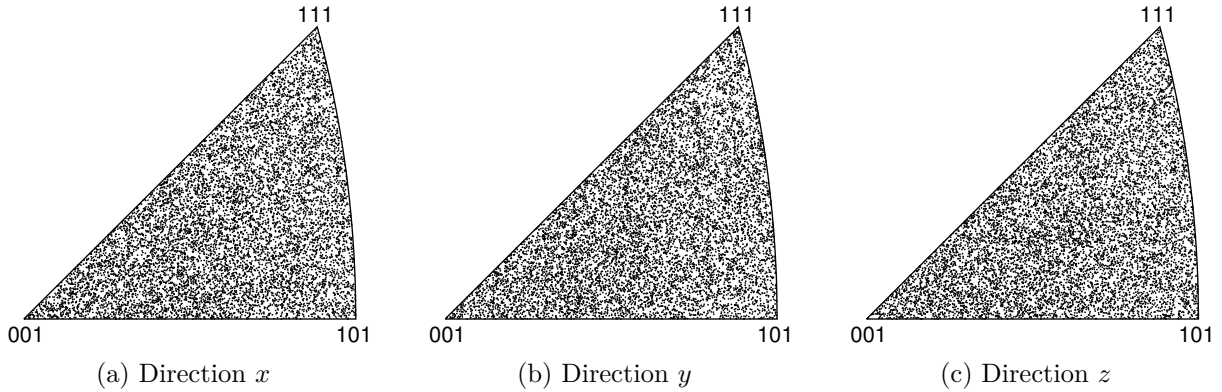


Fig. B.8 – Figures de pôles inverses dans le triangle standard CFC de 10 000 orientations générées par la méthode quaternion.

Par conséquent, les orientations générées par ces méthodes présentent une certaine texture. Cela peut être recherché, mais dans notre cas, le matériau est peu texturé, donc nous cherchons à éviter toute texture.

Génération par les quaternions

Shoemaker a élaboré un algorithme pour générer des orientations aléatoires avec une répartition uniforme [174]. Cette méthode est basée sur la génération aléatoire d'un quaternion. L'algorithme se décompose comme suit (méthode quaternion) :

- tirage aléatoire de trois nombres $(X_0, X_1, X_2) \in [0; 1]$
- calcul de deux angles γ_1 et γ_2

$$\begin{cases} \gamma_1 = 2\pi X_1 \\ \gamma_2 = 2\pi X_2 \end{cases} \quad (\text{B.38})$$

- calcul des composantes du quaternion :

$$\begin{cases} q_0 = \sqrt{X_0} \cos(\gamma_2) \\ q_1 = \sqrt{1 - X_0} \sin(\gamma_1) \\ q_2 = \sqrt{1 - X_0} \cos(\gamma_1) \\ q_3 = \sqrt{X_0} \sin(\gamma_2) \end{cases} \quad (\text{B.39})$$

Les figures de pôles inverse dans le triangle standard cubique obtenues sont présentées en figure B.8. Cette fois, aucune texture n'est observée quelle que soit la direction. Pour simuler des matériaux non texturés, il faut donc utiliser cette méthode de génération d'orientations.

Annexe C

La méthode FETI

Sommaire

C.1 Formulation	173
C.2 Modes rigides	174
C.3 Décomposition en sous-domaines	174

C.1 Formulation

Le principe de cet algorithme est de résoudre le problème local de chaque sous-domaine de manière indépendante et simultanée, puis de résoudre le problème global aux interfaces Γ . La résolution locale se fait de manière identique à un calcul EF classique pour lequel on cherche à résoudre :

$$\underline{\mathbf{K}} \cdot \underline{\mathbf{u}} = \underline{\mathbf{f}} \tag{C.1}$$

$$\underline{\mathbf{u}} = \underline{\mathbf{u}}^* \quad \text{sur } \partial\Omega_u \tag{C.2}$$

$$\underline{\mathbf{f}} = \underline{\mathbf{f}}^* \quad \text{sur } \partial\Omega_f \tag{C.3}$$

où $\underline{\mathbf{K}}$ est la matrice de raideur du domaine Ω , $\underline{\mathbf{u}}$ le champ de déplacement, $\underline{\mathbf{f}}$ le champ des forces imposées, $\underline{\mathbf{u}}^*$ le déplacement imposé sur la limite $\partial\Omega_u$ et $\underline{\mathbf{f}}^*$ les forces imposées sur la limite $\partial\Omega_f$ (cf. figure C.1a).

La résolution aux interfaces Γ fait intervenir des multiplicateurs de Lagrange $\underline{\boldsymbol{\lambda}}$ qui assurent la continuité de la solution aux interfaces. Elle est effectuée par l'intermédiaire d'un algorithme de type gradient conjugué. L'équation (C.1) est remplacée par :

$$\underline{\mathbf{K}}^{(i)} \cdot \underline{\mathbf{u}}^{(i)} = \underline{\mathbf{f}}^{(i)} + \underline{\mathbf{B}}^{(i)\top} \cdot \underline{\boldsymbol{\lambda}} \forall \Omega_i \tag{C.4}$$

$$\sum_i \underline{\mathbf{B}}^{(i)\top} \cdot \underline{\mathbf{u}}^{(i)} = \underline{\mathbf{0}} \quad \text{sur } \Gamma \tag{C.5}$$

où $\underline{\mathbf{K}}^{(i)}$ est la matrice de raideur du sous-domaine Ω_i et où les $\underline{\mathbf{B}}^{(i)}$ sont des matrices décrivant les interconnectivités entre les sous-domaines Ω_i (cf. figure C.1b).

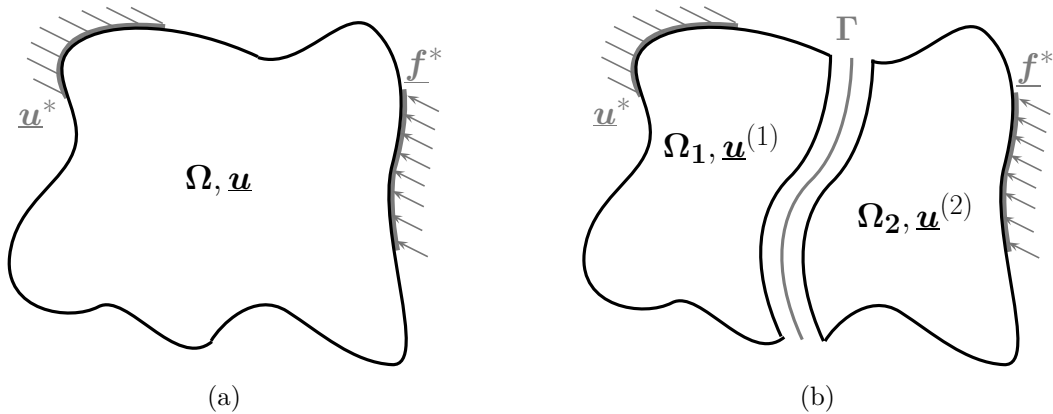


Fig. C.1 – Schémas d'un problème éléments finis (a) classique et (b) avec décomposition de domaines FETI.

Solveur	sparse_direct	mumps [176]	dissection [177]	dscpack [178]
Détection modes rigides	oui	oui	oui	non
Rapidité	très lent	rapide	rapide	très rapide
Robustesse	très bonne	moyenne	bonne	moyenne
Gestion des mpc	oui	non	non	oui

Tab. C.1 – Propriétés des solveurs linéaires disponibles en calcul parallèle FETI sous Zebulon.

C.2 Modes rigides

Lors de la résolution de problèmes par décomposition de domaines, des modes rigides peuvent intervenir dans les calculs des sous-domaines. Suivant le solveur utilisé pour la résolution des systèmes locaux, des modes rigides peuvent être détectés automatiquement ou non. Lorsque ces modes rigides ne sont pas détectés automatiquement par le solveur, il est parfois possible de les déterminer par un incrément de calcul avec un solveur capable de le faire, puis de les fixer dans le calcul avec le solveur initial. En outre, chacun de ces solveurs n'a ni la même efficacité, ni la même robustesse face aux problèmes complexes hétérogènes, comportant des conditions aux limites de type mpc ou des problèmes de contact.

Le tableau C.1 donne un aperçu global des qualités et défauts des différents solveurs disponibles pour la résolution des systèmes linéaires dans le code Zebulon. Des tests plus détaillés, effectués avec une loi de comportement élastique linéaire sur des maillages cubiques, sont répertoriés par Gueye *et al.* [175].

C.3 Décomposition en sous-domaines

Plusieurs méthodes de découpage en sous-domaines existent. Les méthodes Splitmesh et Metis-Split exécutent un découpage qui optimise le problème aux interfaces tout en générant des sous-domaines équilibrés en nombre de DDL. Avoir des sous-domaines de tailles (en nombre de DDL) homogènes est très important pour un calcul parallèle car la vitesse du calcul parallèle dépend de la taille du plus gros sous-domaine.

La résolution du problème aux interfaces devient plus difficile lorsque les interfaces entre sous-domaines franchissent des joints de grains, frontière entre deux parties hétérogènes. Osi-

Méthode	Temps CPU [H]
Metis-Split	48
Découpage par grain	127

Tab. C.2 – Temps de calcul pour un problème de 2×10^6 DDL avec différentes méthodes de décomposition en 30 sous-domaines.

pov [129] propose un découpage par grains qui consiste à créer des sous-domaines respectant le contour des joints de grains afin de limiter les hétérogénéités au sein des sous-domaines. Cette méthode apporte un gain en temps CPU lors de la résolution du problème aux interfaces, mais apporte moins de souplesse quant à la taille des sous-domaines. De ce fait, des écarts importants en nombre de DDL peuvent apparaître, ce qui peut ralentir fortement la phase de résolution des sous-domaines, si cet écart est concentré sur un seul sous-domaine. Il est primordial de déterminer correctement les assemblages de grains conduisant à des sous-domaines de taille homogène. Globalement, le gain de temps lors de la résolution aux interfaces peut être perdu à cause du temps de calcul consacré aux sous-domaines. Le gain en temps CPU n'est donc pas systématique.

Nous avons choisi d'utiliser le découpage Metis-Split pour nos calculs parallèles. À titre d'exemple, les temps de calcul pour un même problème décomposé en 32 sous-domaines avec deux méthodes différentes sont donnés par le tableau C.2.

Annexe D

Outil de transfert de données entre Z-set et MED

Sommaire

D.1	Présentation	177
D.2	Transcription du maillage	177
D.3	Documentation	178

D.1 Présentation

Dans le cadre des projet menés en partenariat entre EDF et ARMINES, notamment le Centre des Matériaux, l'échange de données maillage/résultat peut être un atout important. Z-set possède déjà des outils d'import et export de données avec d'autres codes (Abaqus, Ansys...). Le format MED est spécialement destiné à permettre l'échange de données entre différents codes de calculs.

Une plateforme de transfert de données maillage/résultat vers le format MED (utilisable dans Code_Aster [179] et Salome [163]) avait déjà été mise en place précédemment. Cependant cette dernière fonctionnait avec d'anciennes versions de Z-set (Z8.4.0) et de MED (2.2.3). Les fonctionnalités à ce stade restaient limitées (*e.g.* ni conservation des groupes nœuds ou d'éléments, ni résultats aux points de Gauss). Actuellement Z-set est distribué en version Z8.4.4 et MED en version 2.3.6.

Le greffon permet de convertir de manière isolée un maillage du format Z-set au format MED et inversement par l'intermédiaire d'une procédure Z-set de type `mesher`. Il est aussi possible d'y associer des données de type résultats via une procédure Z-set de type `post_processing`. La syntaxe sera décrite en section D.3 avec quelques exemples de mise en données.

D.2 Transcription du maillage

La conception des groupes de nœuds et d'éléments est différente sous Z-set et MED. Dans le format Z-set, un groupe est défini par la liste des numéros identifiants des entités (nœuds ou éléments). Lorsqu'il s'agit de groupes d'éléments de dimension inférieure à celle du maillage, *e.g.* un groupe de faces pour un maillage 3D, le groupe est défini par une liste de faces. Une face

<pre> ****mesher ***mesh Zset_mesh.geof **import med MED_mesh.med ****return </pre>	<pre> ****mesher ***mesh **open Zset_mesh.geof **export med MED_mesh.med ****return </pre>
(a)	(b)

Tab. D.1 – Mises en données Z-set pour (a) l’import et (b) l’export de maillages au format MED (nécessite le greffon dédié).

étant définie par une liste de nœuds ordonnée, l’ordre des nœuds conditionnant l’orientation de la face.

Dans le format MED, lors de la création du maillage, on crée des sous-ensembles appelés « familles » qui sont caractérisées par :

- un type d’élément (les nœuds sont considérés comme un type d’élément spécial) ;
- l’appartenance à une liste de groupes.

Une famille représente donc la plus grande entité regroupant des nœuds, ou des éléments de même type, étant présents dans exactement les mêmes groupes (de nœuds ou d’éléments selon le cas). Chaque élément ou nœud possède un numéro de famille. Un groupe est défini par l’assemblage de plusieurs familles, *i.e.* la liste des numéros de familles incluses dans ce groupe. À noter que dans un fichier MED, la famille ayant pour numéro 0 est obligatoire. Elle correspond à tous les nœuds et éléments n’appartenant à aucun groupe.

D.3 Documentation

Maillages

Les exemples de fichiers d’entrées en tableau D.1 permettent la transcription d’un maillage entre les deux formats. En tableau D.1a, l’opération transcrit le maillage du format MED au format Z-set, *i.e.* du fichier `MED_mesh.med` au `Zset_mesh.geof` (tableau D.1a). L’opération inverse, *i.e.* le passage du fichier `Zset_mesh.geof` au fichier `MED_mesh.med`, est décrite en tableau D.1b.

Résultats

L’exemple de fichier d’entrée en tableau D.2 permettent la transcription de résultats de calculs, accompagnés du maillage, du format MED au format Z-set. Les champs de déplacement (`NODE_DEPL`), les champs des autres variables au nœuds (`CTNOD_ETO` et `CTNOD_SIG`), aux points de Gauss (`INTEG_ETO` et `INTEG_SIG`) et aux nœuds par éléments (`CTELE_ETO` et `CTELE_SIG`) sont transcrits dans cet exemple en champs `U`, `eto` et `sig`. La procédure inverse est présentée en tableau D.3.

```
****post_processing
***data_source med
  **open MED_results.med
  **write_geof
***local_post_processing
  **output_number 1-2
  **file node
  **nset ALL_NODE
  **process copy
    *list_var NODE_DEPL.1 NODE_DEPL.2
    *out_var U1 U2
  **file ctnod
  **nset ALL_NODE
  **process copy
    *list_var CTNOD_EPCUM.1
      CTNOD_ETO.11 CTNOD_ETO.22 CTNOD_ETO.33 CTNOD_ETO.12
      CTNOD_SIG.11 CTNOD_SIG.22 CTNOD_SIG.33 CTNOD_SIG.12
    *out_var evpcum
      eto11 eto22 eto33 eto12
      sig11 sig22 sig33 sig12
  **file integ
  **elset ALL_ELEMENT
  **process copy
    *list_var INTEG_EPCUM.1
      INTEG_ETO.11 INTEG_ETO.22 INTEG_ETO.33 INTEG_ETO.12
      INTEG_SIG.11 INTEG_SIG.22 INTEG_SIG.33 INTEG_SIG.12
    *out_var epcum
      eto11 eto22 eto33 eto12
      sig11 sig22 sig33 sig12
  **file ctele
  **elset ALL_ELEMENT
  **process copy
    *list_var CTELE_EPCUM.1
      CTELE_ETO.11 CTELE_ETO.22 CTELE_ETO.33 CTELE_ETO.12
      CTELE_SIG.11 CTELE_SIG.22 CTELE_SIG.33 CTELE_SIG.12
    *out_var epcum
      eto11 eto22 eto33 eto12
      sig11 sig22 sig33 sig12
****return
```

Tab. D.2 – Fichier d’entrée Z-set pour transcrire un maillage et les résultats de calcul du format MED au format Z-set (nécessite le greffon dédié).

```

****post_processing
***data_source Z7
  **open Zset_results.ut
***data_output med
  *problem_name MED_results.med
  *displacement_prefix DEPL % to specify node displacement field
***local_post_processing
  **output_number 2-4
  **file node
  **nset ALL_NODE
  **process copy
    *list_var U1      U2
    *out_var  DEPL.1 DEPL.2
  **file ctnod
  **nset ALL_NODE
  **process copy
    *list_var epcum  eto11  eto22  eto33  eto12  sig11  sig22  sig33  sig12
    *out_var  EPCUM.1 ETO.11 ETO.22 ETO.33 ETO.12 SIG.11 SIG.22 SIG.33 SIG.12
  **file integ
  **elset ALL_ELEMENT
  **process copy
    *list_var epcum  eto11  eto22  eto33  eto12  sig11  sig22  sig33  sig12
    *out_var  EPCUM.1 ETO.11 ETO.22 ETO.33 ETO.12 SIG.11 SIG.22 SIG.33 SIG.12
  **file ctele
  **elset ALL_ELEMENT
  **process copy
    *list_var epcum  eto11  eto22  eto33  eto12  sig11  sig22  sig33  sig12
    *out_var  EPCUM.1 ETO.11 ETO.22 ETO.33 ETO.12 SIG.11 SIG.22 SIG.33 SIG.12
****return

```

Tab. D.3 – Fichier d’entrée Z-set pour transcrire un maillage et les résultats de calcul du format Z-set au format MED (nécessite le greffon dédié).

Bibliographie

- [1] P. Bompard : Analyse et études à la fatigue thermique des circuits REP. Rapport technique, EDF, École Centrale de Paris, 2003.
- [2] U. Krupp : *Fatigue Crack Propagation in Metals and Alloys : Microstructural Aspects and Modelling concepts*. Wiley-VCH, 2007.
- [3] P.J.E. Forsyth : Fatigue damage and crack growth in aluminium alloys. *Acta Metall.*, 11 (7):703–715, 1963.
- [4] K.J. Miller : The behaviour of short fatigue cracks and their initiation. Part II–A General summary. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 10:93–113, 1987.
- [5] H. Kitagawa et S. Takahashi : Applicability of fracture mechanics to very small cracks or the cracks in the early stage. In *ICM-2*, ASM, pages 627–631, 1976.
- [6] M.W. Brown : Interfaces between short, long, and non-propagating cracks. In K.J. Miller et E.R. de los Rios, éditeurs : *The Behaviour of Short Fatigue Cracks*, pages 423–439, 1986.
- [7] T. Zhai, A.J. Wilkinson et J.W. Martin : A crystallographic mechanism for fatigue crack propagation through grain boundaries. *Acta Mat.*, 48:4917–4927, 2000.
- [8] B.-T. Ma et C. Laird : Overview of fatigue behavior in copper single crystals : I. Surface morphology and stage I crack initiation sites for tests at constant strain amplitude. *Acta Mat.*, 37:325–336, 1989.
- [9] M.F. Ashby : The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Phil. Mag.*, 21 (170):399–424, 1970.
- [10] C. Déprés : *Modélisation physique des stades précurseurs de l'endommagement en fatigue dans l'acier inoxydable 316L*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2004.
- [11] C. Déprés, C.F. Robertson et M.C. Fivel : Crack initiation in fatigue : experiments and three-dimensional dislocations simulations. *Mater. Sci. Eng.*, A387–389:288–291, 2004.
- [12] E. Héripré, M. Dexet, J. Crépin, L. Gélébart, A. Roos, M. Bornert et D. Caldemaison : Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials. *Int. J. of Plasticity*, 23:1512–1539, 2007.
- [13] M. Mineur : *Conditions locales d'amorçage des fissures de fatigue dans un acier inoxydable de type 316L : aspects cristallographiques (EBSD)*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 2000.

- [14] P. Lukas et M. Klesnil : Cyclic stress–strain response and fatigue life of metals in low amplitude region. *Mater. Sci. Eng.*, 11:345–356, 1973.
- [15] C.E. Feltner et C. Laird : Cyclic stress–strain response of FCC metals and alloys. 1. Phenomenological experiments. *Acta Metall.*, 15:1621–1632, 1967.
- [16] C.E. Feltner et C. Laird : Cyclic stress–strain response of FCC metals and alloys. 2. Dislocations structures and mechanisms. *Acta Metall.*, 15:1633–1653, 1967.
- [17] D. Nouailhas, G. Cailletaud, H. Policella, D. Marquis, J. Dufailly, H.P. Lieurade, A. Ribes et E. Bollinger : On the description of cyclic hardening and initial cold working. *Engng Fracture Mechanics*, 21:887–895, 1985.
- [18] A. Le Pécheur : *Fatigue thermique d’un acier inoxydable austénitique : influence de l’état de surface par une approche multi-échelles*. Thèse de doctorat, École Centrale de Paris, 2008.
- [19] X. Huang, A. Borrego et W. Pantleon : Polycrystal deformation and single crystal deformation : dislocation structure and flow stress in copper. *Mater. Sci. Eng.*, A319–321:237–241, 2001.
- [20] C. Gérard : *Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline*. Thèse de doctorat, Université Paris XIII, 2008.
- [21] J.K. Mackenzie : Second paper on statistics associated with the random disorientation of cubes. *Biometrika*, 45:229–240, 1958.
- [22] V. Randle : *Microtexture Determination and its Applications*. The Institute of Materials, 1992.
- [23] E. Schmid et W. Boas : *Kristalplastizität*. Springer Verlag, 1935.
- [24] C. Blochwitz et R. Richter : Plastic strain amplitude dependent surface path of microstructurally short fatigue cracks in face-centred cubic metals. *Mater. Sci. Eng.*, A267:120–129, 1999.
- [25] H.B. Huntington : The elastic constants of crystals. *Solid State Physics*, 7:213–351, 1958.
- [26] P. Franciosi : The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metall.*, 33:1601–1612, 1985.
- [27] A. Fissolo, A. Forestier, S. Chapuliot, C. Gourdin, J-P. Magnaud et F. Ducros : Advances in thermal fatigue investigations performed in CEA for french PWR piping. In *Proceedings of third international conference on fatigue of reactor compounds*, Seville, Spain, 2004.
- [28] F. Curtit : Synthèse des essais INTHERPOL 01 à 04. Rapport technique HT-26-05-008-A, EDF R&D, 2005.
- [29] F. Curtit et J.-M. Stéphan : INTHERPOL Thermal fatigue test. In *Pressure Vessels & Piping Conference*, volume 3, pages 331–337, Denver, CO, juillet 2005. ASME.
- [30] J.-M. Stéphan et F. Curtit : Mechanical aspects concerning thermal fatigue initiation in the mixing zones of piping. In *18th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT 18)*, Beijing, China, août 2005. SMiRT18-F03-6.

- [31] C. Bathias et A. Pineau : *Fatigue of Materials and Structures : Fundamentals*. Wiley, 2010.
- [32] F. Braithwaite : On the fatigue and consequent fracture of metals. In *Minutes of Proc. ICE*, pages 463–467, 1854.
- [33] A. Wöhler : Über die Festigkeits-Versuche mit Eisen und Stahl. *Zeitschrift für Bauwesen*, 20:73–106, 1870.
- [34] J.A. Ewing et J.C.W. Humfrey : The fracture of metals under repeated alterations of stress. *Phil. Trans. Royal Soc.*, A200:241–250, 1903.
- [35] P. Lukas : Fatigue crack nucleation and microstructure. In *ASM Handbook : Fatigue and Fracture*, volume 19, pages 96–109. ASM International, 1996.
- [36] P.J.E. Forsyth et C.A. Stubbington : The structure of slip band extrusion revealed by transmission electron microscopy. *Acta Metall.*, 8:811–814, 1960.
- [37] P.G. Forrest et A.E.L. Tate : The influence of grain size on the fatigue behaviour of 70/30 brass. *J. Inst. Metals.*, 93:438–444, 1964.
- [38] H. Mughrabi : On “multi-stage” fatigue life diagrams and the relevant life-controlling mechanisms in ultrahigh-cycle fatigue. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 25:755–764, 2002.
- [39] S. Stanzl-Tschegg, H. Mughrabi et B. Schoenbauer : Life time and cyclic slip of copper in the VHCF regime. *Int. J. Fatigue*, 29:2050–2059, 2007.
- [40] C. Bathias, L. Drouillac et P. Le François : How and why the fatigue S–N curve does not approach a horizontal asymptote. *Int. J. Fatigue*, 23(1):143–151, 2001.
- [41] O.H. Basquin : The exponential law of endurance tests. In *Proc. ASTM*, volume 10, pages 625–630, 1910.
- [42] S.S. Manson : Behaviour of materials under conditions of thermal stress. In *Heat Transfer Symposium*, pages 9–76, University of Michigan, 1953.
- [43] L.F. Coffin : A study of the effects of cyclic thermal stresses on a ductile metal. *Transactions of the ASME*, 76:931–950, 1954.
- [44] G.R. Irwin : Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate. *J. of Applied Mechanics*, 24:361–364, 1957.
- [45] P.C. Paris et F. Erdogan : A critical analysis of crack propagation laws. *Journal of Basic Engineering*, 85:528–534, 1963.
- [46] J.R. Rice : A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notched and cracks. *J. of Applied Mechanics*, 35:379–386, 1968.
- [47] C. Blochwitz, W. Tirschler et A. Weidner : Crack opening displacement and propagation rate of microstructurally shorts cracks. *Mater. Sci. Eng.*, A357:264–269, 2003.
- [48] W.L. Morris : The noncontinuum crack tip deformation behavior of surface microcracks. *Metallurgical Transactions*, 11A:1117–1123, 1980.

- [49] S. Pearson : Initiation of fatigue cracks in commercial aluminium alloys and the subsequent propagation of very short cracks. *Engng Fracture Mechanics*, 7:235–247, 1975.
- [50] J. Lankford : The growth of small fatigue cracks in 7075–T6 aluminium. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 5:233–248, 1982.
- [51] J. Lankford : The influence of microstructure on the growth of small fatigue cracks. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 8:161–175, 1985.
- [52] N.J. Petch : The cleavage strength of polycrystals. *Journal of the Iron and Steel Institute*, 5:25–28, 1953.
- [53] X. Feaugas : Mécanismes de déformation et d’amorçage en fatigue des métaux c.f.c. polycristallins. In *Colloque National sur la Fatigue des Matériaux et des Structures*, Aussois, France, janvier 2007. MECAMAT.
- [54] Z.S. Basinski, A.S. Korbel et S.J. Basinski : Temperature–dependence of the saturation stress and dislocation substructure in fatigued copper single–crystals. *Acta Metall.*, 28: 191–207, 1980.
- [55] H. Mughrabi, F. Ackermann et K. Herz : Persistent slip bands in fatigued face-centred and body-centred cubic metals. In *Fatigue Mechanisms. Proceedings of an ASTM-NBS-NSF symposium*, ASTM STP 675, pages 69–105, Kansas City, 1979.
- [56] Z. Wang, B. Gong et Z. Wang : Cyclic deformation behavior and dislocation structures of [001] copper single crystals–II. Characteristics of dislocation structures. *Acta Metall.*, 45(4):1379–1391, 1997.
- [57] H. Mughrabi : The cyclic hardening and saturation behaviour of copper single crystals. *Mater. Sci. Eng.*, 33(2):207–223, 1978.
- [58] M. Herbig, A. King, P. Reischig, H. Proudhon, E.M. Lauridsen, J. Marrow, J.-Y. Buffière et W. Ludwig : 3-D growth of a short fatigue crack within a polycrystalline microstructure studied using combined diffraction and phase-contrast X-ray tomography. *Acta Mat.*, 59:590–601, 2011.
- [59] W.H. Kim et C. Laird : Crack nucleation and stage I propagation in high strain fatigue–I. Microscopic and interferometric observations. *Acta Metall.*, 26:777–787, 1978.
- [60] W.H. Kim et C. Laird : Crack nucleation and stage I propagation in high strain fatigue–II. Mechanism. *Acta Metall.*, 26:789–799, 1978.
- [61] J.C. Figueroa et C. Laird : Crack initiation mechanisms in copper polycrystals cycled under constant strain amplitudes and in step tests. *Mater. Sci. Eng.*, 60:45–58, 1983.
- [62] A. Heinz et P. Neumann : Crack initiation during high cycle fatigue of an austenitic steel. *Acta Metall. Mater.*, 38:1933–1940, 1990.
- [63] P. Neumann et A. Tönnessen : Crack initiation at grain boundaries in FCC materials. In *Proc. Int. Conf. Strength of Metals and Alloys*, pages 743–748, Tampere, Finland, août 1987.
- [64] C. Blochwitz, J. Brechbühl et W. Tirschler : Analysis of activated slip systems in fatigue nickel polycrystals using the EBSD–technique in the scanning electron microscope. *Mater. Sci. Eng.*, A210:42–47, 1996.

- [65] C. Blochwitz, R. Richter, W. Tirschler et K. Obrtlík : The effect of local textures on microcrack propagation in fatigued F.C.C. metals. *Mater. Sci. Eng.*, A234–236:563–566, 1997.
- [66] H. Proudhon : *Identification des mécanismes de fissuration dans un alliage d'aluminium sollicité en fretting et en fatigue*. Thèse de doctorat, École Centrale de Lyon, 2005.
- [67] N. Thompson, N. Wadsworth et N. Louat : The origin of fatigue fracture in copper. *Phil. Mag.*, 1:113–126, 1956.
- [68] Z.S. Basinski, R. Pascual et S.J. Basinski : Low amplitude fatigue of copper single crystals–I. The role of the surface in fatigue failure. *Acta Metall.*, 31:591–602, 1983.
- [69] U. Essmann, U. Gösele et H. Mughrabi : A model of extrusions and intrusions in fatigued metals : I. Point-defect production and the growth of extrusions. *Phil. Mag.*, 44:405–426, 1981.
- [70] A. Vasek, J. Polák et K. Obrtlík : Fatigue damaged in two step loading of 316L steel II. Short crack growth. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 19:157–163, 1996.
- [71] J. Polák, A. Vasek et K. Obrtlík : Fatigue damaged in two step loading of 316L steel I. Evolution of persistent slip bands. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 19:147–155, 1996.
- [72] J. Man, K. Obrtlík, C. Blochwitz et J. Polák : Atomic force microscopy of surface relief in individual grains of fatigued 316L austenitic stainless steel. *Acta Mat.*, 50:3767–3780, 2002.
- [73] J. Man, K. Ortblík et J. Polák : Study of surface relief evolution in fatigued 316L austenitic stainless steel by AFM. *Mater. Sci. Eng.*, A351:123–132, 2003.
- [74] J. Mendez, P. Violan, M. Quintard et C. Gasc : Characterization of fatigue damage in fine-grained copper tested in air and in vacuum. In L. Faria, éditeur : *5th Proc. of Europ. Conf. on Fracture*, pages 515–522, Lisbon, Portugal, 1984.
- [75] R. Alain : *Comportement en fatigue plastique d'un acier inoxydable austénitique type 316L entre 20°C et 600°C. Étude des facteurs gouvernant la durée de vie*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 1993.
- [76] J.-M. Boursier : Influence du milieu primaire REP sur le comportement en fatigue des aciers inoxydables austénitiques. Rapport technique HT-29/05/056/A, EDF R&D, 2005.
- [77] H. Cho, B.K. Kim, I.S. Kim et C. Jang : Low cycle fatigue behaviors of type 316LN austenitic stainless steel in 310°C deaerated water–fatigue life and dislocation structure development. *Mater. Sci. Eng. A*, 476:248–256, 2008.
- [78] R.J. Asaro et J.R. Rice : Strain localization in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 25:309–338, 1977.
- [79] C. Teodosiu, J.-L. Raphanel et L. Tabourot : Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals. In *5th MECAMAT Int. Seminar on Large Plastic Deformations : Fundamental Aspects and Applications to Metal Forming*, pages 153–168, Fontainebleau, France, 1993. MECAMAT.

- [80] L. Tabourot, M. Fivel et E. Rauch : Generalised constitutive laws for f.c.c. single crystals. *Mater. Sci. Eng.*, A234–236:639–642, 1997.
- [81] E. Orowan : Problems of plastic gliding. *Proc. Phys. Soc.*, 52:8–22, 1940.
- [82] Y. Estrin et H. Mecking : A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one parameter models. *Acta Metall.*, 32:57–70, 1984.
- [83] C. Déprés, M.C. Fivel et L. Tabourot : A dislocation-based model for low-amplitude fatigue behaviour of face-centred cubic single crystals. *Scripta Materiala*, 58:1086–1089, 2008.
- [84] J. Schwartz, O. Fandeur et C. Rey : Fatigue crack initiation modeling of 316LN steel based on non local plasticity theory. *Procedia Engineering*, 2:1353–1362, 2010.
- [85] D. Peirce, R.J. Asaro et A. Needleman : Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metall.*, 31:1951–1976, 1983.
- [86] L. Méric et G. Cailletaud : Single crystal modeling for structural calculations. Part 2 : Finite element implementation. *J. of Engng. Mat. Technol.*, 113:171–182, 1991.
- [87] G.I. Taylor : Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals.*, 62:307–324, 1938.
- [88] G.I. Taylor : Analysis of plastic strain in a cubic crystal. In *Stephen Timoshenko 60th Anniversary Volume*, pages 218–224. Mc Millan, 1938.
- [89] T.H. Lin : Analysis of elastic and plastic strains of a face-centred cubic crystal. *J. Mech. Phys. Sol.*, 5:143–149, 1957.
- [90] N. Zouhal, A. Molinari et L.S. Tóth : Elastic-plastic effects during cyclic loading as predicted by the Taylor-Lin model of polycrystal elasto-viscoplasticity. *Int. J. of Plasticity*, 12(3):343–360, 1996.
- [91] L.S. Tóth, A. Molinari et N. Zouhal : Cyclic plasticity phenomena as predicted by polycrystal plasticity. *Mech. of Materials*, 32:99–113, 2000.
- [92] E. Kröner : Zur plastischen Verformung des Vielkristalls. *Acta Metall.*, 9:155–161, 1961.
- [93] J.D. Eshelby : The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Royal Soc. London*, 241:376–396, 1957.
- [94] R. Hill : Continuum micro-mechanisms of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 13:89–101, 1965.
- [95] M. Berveiller et A. Zaoui : An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystal. *J. Mech. Phys. Sol.*, 26:325–344, 1979.
- [96] F. Barbe, S. Forest et G. Cailletaud : Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part II : Results. *Int. J. of Plasticity*, 17(4):537–563, 2001.
- [97] G. Cailletaud : *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*, 1987. Thèse d'état, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6.
- [98] P. Pilvin : *Approches multiéchelles pour la prévision du comportement inélastique des métaux*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, 1990.

- [99] P. Pilvin : The contribution of micromechanical approaches to the modelling of inelastic behaviour. In A. Pineau, G. Cailletaud et T. Lindley, éditeurs : *4th Int. Conf. on Biaxial/multiaxial Fatigue, Saint-Germain, France*, volume 1, pages 31–46. ESIS, may 31–june 3 1994.
- [100] P. Pilvin et G. Cailletaud : Intergranular and transgranular hardening in viscoplasticity. In M. Zyczkowski, éditeur : *Creep in Structures*, volume 4, pages 171–178, 1990.
- [101] G. Cailletaud et P. Pilvin : Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 3(4):515–541, 1994.
- [102] S. Calloch : *Essais triaxiaux non-proportionnels et ingénierie des modèles de plasticité cyclique*. Thèse de doctorat, École Normale Supérieure de Cachan, 1997.
- [103] F. Feyel, S. Calloch, D. Marquis et G. Cailletaud : FE computation of a triaxial specimen using a polycrystalline model. *Computational Materials Science*, 9:141–157, 1997.
- [104] P. Pilvin : Une approche simplifiée pour schématiser l'effet de surface sur le comportement mécanique d'un polycristal. *J. de Physique IV*, 8:33–38, 1998.
- [105] K. Sai, G. Cailletaud et S. Forest : Micro-mechanical modeling of the inelastic behavior of directionally solidified materials. *Mech. of Materials*, 38:203–217, 2006.
- [106] T. Herbland : *Une méthode de correction élastoplastique pour le calcul en fatigue des zones de concentration de contraintes sous chargement cyclique multiaxial non proportionnel*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009.
- [107] R. Madec, B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc et D. Rodney : The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening. *Science*, 301:1879–1882, 2003.
- [108] L. Kubin, B. Devincre et T. Hoc : Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. *Acta Mat.*, 54:6040–6049, 2008.
- [109] S. Queyreau, G. Monnet et B. Devincre : Slip systems interactions in α -iron determined by dislocation dynamics simulations. *Int. J. of Plasticity*, 25:361–377, 2009.
- [110] R. Madec : *Des intersections entre dislocations à la plasticité du monocristal CFC ; étude par dynamique des dislocations*. Thèse de doctorat, Université d'Orsay, 2001.
- [111] C. Déprés, C.F. Robertson et M.C. Fivel : Low-strain fatigue in 316L steel surface grains : a three dimension discrete dislocation dynamics modelling of the early cycles. Part 2 : Persistent slip markings and micro-crack nucleation. *Phil. Mag.*, 86(1):79–97, 2006.
- [112] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin et G. Cailletaud : Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part I : FE model. *Int. J. of Plasticity*, 17(4):513–536, 2001.
- [113] Y. Dafalias : Planar double-slip micromechanical model for polycrystal plasticity. *J. of Engng Mechanics*, 119(6):1260–1284, 1993.
- [114] T.H. Lin, K.K.F. Wong, N.J. Teng et S.R. Lin : Micromechanic analysis of fatigue band crossing grain boundary. *Mater. Sci. Eng.*, A246:169–179, 1998.
- [115] T.K. Tung et T.H. Lin : Slip strains and stresses in polycrystalline aggregates under cyclic load. *J. of Applied Mechanics*, 29:363–370, 1966.

- [116] G.P. Potirniche et S.R. Daniewicz : Analysis of crack tip plasticity for microstructurally small cracks using crystal plasticity theory. *Engng Fracture Mechanics*, 70:1623–1643, 2003.
- [117] G.P. Potirniche et S.R. Daniewicz : Finite element modeling of microstructurally small cracks using single crystal plasticity. *Int. J. Fatigue*, 25:877–884, 2003.
- [118] V.P. Bennett et D.L. McDowell : Polycrystal orientation distribution effects on microslip in high cycle fatigue. *Int. J. Fatigue*, 25:27–39, 2003.
- [119] R. Lillbacka, E. Johnson et M. Ekh : A model for short crack propagation in polycrystalline materials. *Engng Fracture Mechanics*, 73:223–232, 2006.
- [120] K. Dang Van : Sur la résistance à la fatigue des métaux. *Sciences et techniques de l'armement*, 47:647–722, 1973.
- [121] A. Fatemi et D.F. Socie : A critical plane approach to multiaxial fatigue damage including out-of-phase loading. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 11:149–165, 1988.
- [122] V.P. Bennett et D.L. McDowell : Crack tip displacements of microstructurally small surface cracks in single phase ductile polycrystals. *Engng Fracture Mechanics*, 70:185–207, 2003.
- [123] I. Simonovski et L. Cizelj : The influence of grain's crystallographic orientations on advancing short crack. *Int. J. Fatigue*, 29:2005–2014, 2007.
- [124] I. Simonovski, K.F. Nilsson et L. Cizelj : The influence of crystallographic orientation on crack tip displacements of microstructurally small, kinked crack crossing grain boundary. *Computational Materials Science*, 39:817–828, 2007.
- [125] I. Simonovski, K.F. Nilsson et L. Cizelj : Crack tip displacements of microstructurally small cracks in 316L steel and their dependence on crystallographic orientations of grains. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 30:463–478, 2007.
- [126] F.P.E. Dunne, A.J. Wilkinson et R. Allen : Experimental and computational studies of low cycle fatigue crack nucleation in a polycrystal. *Int. J. of Plasticity*, 23:273–295, 2007.
- [127] G. Venkatramani, S. Ghosh et M. Mills : A size-dependent crystal plasticity finite-element model for creep and load shedding in polycrystalline titanium alloys. *Acta Mat.*, 55:3971–3986, 2007.
- [128] F.P.E. Dunne, D. Rugg et A. Walker : Lengthscale-dependent, elastically anisotropic, physically-based HCP crystal plasticity : Application to cold-dwell fatigue in Ti alloys. *Int. J. of Plasticity*, 23:1061–1083, 2007.
- [129] N. Osipov : *Génération et calcul de microstructures bainitiques, approche locale intragranulaire de la rupture*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2007.
- [130] N. Osipov, A.-F. Gourgues-Lorenzon, B. Marini, V. Mounoury, F. N'Guyen et G. Cailleaud : FE modelling of bainitic steels using crystal plasticity. *Phil. Mag.*, 88:3757–3777, 2008.
- [131] J.-M. Stéphan, G. Fréville, D. Chollet, P. Le Bec, D. Touzeau et F. Delabrouille : Caractérisation de l'acier AISI 316LN (Tôle T252) fourni par AREVA pour le projet ANR AFGRAP. Rapport technique H-T24-2010-01328-FR, EDF R&D, 2010.

- [132] M. Mineur, P. Villechaise et J. Mendez : Influence of the crystalline texture on the fatigue behavior of a 316L austenitic stainless steel. *Mater. Sci. Eng.*, A286:257–268, 2000.
- [133] J.L. Chaboche, G. Cailletaud, H. Policella, H. Kaczmarek, H.P. Lieurade, A. Ribes, D. Marquis, J. Dufailly et E. Bollinger : Interaction de l'écrouissage et de l'endommagement sous sollicitations complexes dans un acier inoxydable austénitique. Rapport technique 80.7.0538/0539/0540/0541, ONERA, IRSID, ENSET, CREUSOT-LOIRE, 1983.
- [134] A. Benallal et D. Marquis : Constitutive equations for nonproportional cyclic elasto-visco-plasticity. *J. of Engng. Mat. Technol.*, 109:326–336, 1987.
- [135] G. Cailletaud, H. Kaczmarek et H. Policella : Some elements on multiaxial behaviour of 316L stainless steel at room temperature. *Mech. of Materials*, 3:333–347, 1984.
- [136] V. Doquet : Effet d'un précrouissage sur le comportement cyclique et l'endurance de l'acier inoxydable 304L. Rapport technique, Laboratoire de Mécanique des Solides, octobre 1999.
- [137] J.M. Lee et S.W. Nam : Effect of crack initiation mode on low cycle fatigue life of type 304 stainless steel with surface roughness. *Material Letters*, 10(6):223–230, 1990.
- [138] S. Petitjean : *Influence de l'état de surface sur le comportement en fatigue à grand nombre de cycles de l'acier inoxydable austénitique 304L*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 2003.
- [139] T. Herbland, G. Cailletaud et S. Quilici : An adaptative technique for a fast estimation of local stress and strain states at notch root under multiaxial random loadings. *submitted to Int. J. Fatigue*, in press.
- [140] M. Blétry et G. Cailletaud : Multiaxial fatigue. In C. Bathias et A. Pineau, éditeurs : *Fatigue of Materials : Application to Design and Damage*, pages 1–46. Wiley, 2010.
- [141] B. Crossland : Effect of large hydrostatic pressure on the torsional fatigue strength of an alloy steel. In *Int. Conf. on Fatigue of Metals*, pages 138–149, 1956.
- [142] I.V. Papadopoulos : A high-cycle fatigue criterion applied in biaxial and triaxial out-of-phase stress conditions. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 18(1):79–91, 1995.
- [143] M.W. Brown et K.J. Miller : A theory for fatigue failure under multiaxial stress-strain conditions. In *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, volume 187, pages 745–755, 1973.
- [144] J. Park et D. Nelson : Evaluation of an energy based approach and a critical plane approach for predicting constant amplitude multiaxial fatigue life. *Int. J. Fatigue*, 22:23–29, 2000.
- [145] S. Amiable : *Prédiction de durée de vie de structures sous chargement de fatigue thermique*. Thèse de doctorat, Université de Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines, janvier 2006.
- [146] S. Osterstock : *Vers la prédiction de l'apparition de réseaux de fissures : influence des paramètres microstructuraux sur la dispersion à l'amorçage*. Thèse de doctorat, École Centrale de Lille, 2008.

- [147] F. Curtit, J.-M. Stéphan et A. Le Pécheur : Comparison of fatigue damage criteria applied to multiaxial fatigue. In *Pressure Vessels & Piping Conference*, pages 403–410, Chicago, Illinois, juillet 2008. ASME. PVP2008-61735.
- [148] Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J.-M. Stéphan et G. Cailletaud : Investigation of the effect of grain clusters on fatigue crack initiation in polycrystals. *Int. J. Fatigue*, 32:1748–1763, 2010.
- [149] M. Sauzay : Effet de l’anisotropie élastique cristalline sur la distribution des facteurs de Schmid à la surface des polycristaux. *C.R. Mécanique*, 334:353–361, 2006.
- [150] A.S. Argon : Effect of surfaces on fatigue crack initiation. In O.F. Devereux et A.J. McEvily, éditeurs : *Proc. Corrosion Fatigue*, pages 176–182. NACE, 1972.
- [151] M. Sauzay : Large plastic strains in surface grains. *J. de Physique IV*, 11:309–315, 2001.
- [152] P. Franciosi, M. Berveiller et A. Zaoui : Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metall.*, 28:273–283, 1980.
- [153] J.P. Hirth : On the dislocation interactions in the FCC lattice. *J. of Applied Physics*, 32:700–706, 1960.
- [154] G. Monnet : A crystalline plasticity law for austenitic stainless steels. Rapport technique H-B60-2008-04690-EN, EDF R&D, 2009.
- [155] C. Gérard, B. Bacroix, M. Bornert, G. Cailletaud, J. Crépin et S. Leclercq : Hardening description for FCC materials under complex loading paths. *Computational Materials Science*, 45:751–755, 2009.
- [156] B. Devincere, L. Kubin et T. Hoc : Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations. *Scripta Materiala*, 54:741–746, 2006.
- [157] L. Méric, G. Cailletaud et M. Gaspérini : FE calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension–compression tests. *Acta Metall. Mater.*, 42(3):921–935, 1994.
- [158] D. Barreau : Essais de fatigue dans l’air de deux nuances d’aciers inoxydables. Rapport technique S-99/5319000, Centre d’essais aéronautique de Toulouse, 2000. Contrat EDF.
- [159] F. Feyel : *Application du calcul parallèle aux modèles à grand nombre de variables internes*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1998.
- [160] C. Farhat et F.-X. Roux : Implicit parallel processing in structural mechanics. *Computational Mechanics Advances*, 2(1):1–124, 1994.
- [161] J.P. Mathieu : *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l’acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure d’Arts et Métiers de Metz, 2006.
- [162] M. Sauzay, P. Evrard, A. Steckmeyer et E. Ferrié : Physically-based modeling of the cyclic macroscopic behaviour of metals. *Procedia Engineering*, 2:531–540, 2010.
- [163] Salome. <http://www.salome-platform.org/>, 2008. Version 5.1.
- [164] E. Fayolle, V. Lefebvre et S. Kortas : MED. <http://www.code-aster.org/outils/med/>, 2008. Version 2.3.6.

- [165] C. Buque, J. Bretschneider, A. Schwab et C. Holste : Dislocation structures in cyclically deformed nickel polycrystal. *Mater. Sci. Eng.*, A300:254–262, 2001.
- [166] C. Vallet : *Fuite liquide au travers d'un contact rugueux : application à l'étanchéité interne d'appareils de robinetterie*. Thèse de doctorat, Art et Métiers ParisTech, 2008.
- [167] L. Decker et D. Jeulin : Simulation 3D de matériaux aléatoires polycristallins. *Revue de Métallurgie*, 14:271–275, 2000.
- [168] F. Fritzen, T. Böhlke et E. Schnack : Periodic three-dimensional mesh generation for crystalline aggregates based on Voronoi tessellation. *Computational Mechanics*, 43:701–713, 2009.
- [169] C.B. Barber, D.P. Dobkin et H.T. Huhdanpaa : The quickhull algorithm for convex hulls. *ACM Trans. on Mathematical Software*, 22(4):469–483, 1996. <http://www.qhull.org>.
- [170] P. Laug et H. Borouchaki : BLSURF – mailleur de surface composées de carreaux paramétrés. Manuel d'utilisation RT-0232, I.N.R.I.A, 1999. Thème 4 - Simulation et optimisation de systèmes complexes - Projet Gamma.
- [171] P.J. Frey et P.L. George : *Maillages. Application aux éléments finis*. Hermès Science Publications, Paris, 1999.
- [172] R. Quey : *Suivi de microtextures dans l'aluminium en grande déformation à chaud*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne, 2009.
- [173] P. De Casteljou : *Les Quaternions*. Hermès Science Publications, 1987.
- [174] K. Shoemake : Uniform random rotations. In D. Kirk, éditeur : *Graphics Gems III*, pages 124–132. Academic Press, London, 1992.
- [175] I. Gueye, S. El Arem, F. Feyel, F.-X. Roux et G. Cailletaud : A new parallel sparse direct solver : presentation and numerical experiments in large-scale structural mechanics parallel computing. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 88:370–384, 2011.
- [176] P. R. Amestoy, I. S. Duff, J. Koster et J.-Y. L'Excellent : A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23(1):15–41, 2001.
- [177] I. Gueye : *Résolution de grands systèmes linéaires issus de la méthode des éléments finis sur des calculateurs massivement parallèles*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009.
- [178] P. Raghavan : Dscpack home page. <http://www.cse.psu.edu/~raghavan/Dscpack>, 2001.
- [179] Code_Aster. <http://www.code-aster.org/>, 2011.

Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue

Résumé : Les chargements thermomécaniques cycliques conduisent à l'apparition de fissures courtes de fatigue dont la phase d'amorçage est prépondérante par rapport à la durée de vie totale du composant. Les mécanismes liés à l'évolution de ces fissures présentent une forte dépendance vis-à-vis de la microstructure du matériau, notamment à faible amplitude de chargement. Afin d'étudier cette dépendance, une étude statistique basée sur des résultats de calculs éléments finis d'agrégats polycristallins a été conduite.

Le problème a d'abord été traité en deux dimensions, avec un modèle de plasticité cristalline simplifié. L'analyse des résultats a permis de mettre en évidence un effet de voisinage dans les polycristaux et de retranscrire la dispersion des résultats de fatigue observés en surface. En passant à un modèle en trois dimensions et étudiant différents chargements, il a été possible de corréler les structures de localisation de la déformation plastique dans le volume de l'agrégat avec les observations expérimentales. Également, les marches d'intrusion/extrusion induites en surface par les chargements de fatigue, sites préférentiels d'amorçage, ont été reproduites. Elles mettent en exergue la nocivité des chargements de type équi-biaxial. Le problème des effets de bords a été soulevé, car il réduit l'échantillon des résultats exploitables par un traitement statistique.

Ensuite, l'introduction de la rugosité de surface dans les agrégats simulés a mis en lumière la compétition entre les paramètres microstructuraux du matériau et les singularités géométriques de sa surface libre. Cette analyse a permis de montrer qu'il doit exister un état de surface limite, à partir duquel l'effet de la rugosité prend le dessus sur l'aspect cristallographique concernant la localisation de la déformation plastique en surface des polycristaux. Néanmoins, cet effet s'estompe très rapidement dans la profondeur et devient presque nul après la première rangée de grains surfaciques.

Enfin, une modélisation à la fois périodique et rendant compte de l'effet de surface libre, appelée modélisation semi-périodique, a été mise en place pour éliminer les effets de bords et exploiter pleinement les résultats de calculs. Cette méthode apporte aussi de nouvelles perspectives pour l'élaboration d'un modèle à champs moyens pour les polycristaux en surface.

Mots clés : agrégat polycristallin, plasticité cristalline, éléments finis, fatigue, localisation, acier

Numerical investigation of the local mechanical fields in 316L steel polycrystalline aggregates under fatigue loading

Abstract: Cyclic thermomechanical loadings lead to the formation of short fatigue cracks, the initiation phase of which is prominent over the total life of the component. Mechanisms related to the evolution of these cracks have a high dependence on the microstructure of the material, especially under low-amplitude loading. To study this dependence, a statistical study based on the results of finite element calculations of polycrystalline aggregates was conducted.

First, the problem was treated in two dimensions, with a simplified crystal plasticity model. Analysis of the results allowed to highlight the neighboring effect in polycrystals and to reproduce the dispersion of fatigue results observed at the surface. Using a three-dimensional model and investigating different loadings, it was possible to correlate the localization structures of plastic deformation in the volume of the aggregate with the experimental observations. Also, the steps of surface intrusions and extrusions induced by fatigue loadings, preferential sites of initiation, have been reproduced and highlight the harmful effects of biaxial loadings. The problem of effects was raised, reducing the results sample that can be used by a statistical treatment.

Second, the introduction of surface roughness in the simulated aggregates highlighted the competition between the microstructural parameters and geometric singularities of the free surface. This analysis has shown that there must exist a limiting surface state, from which the effect of the roughness takes over the crystallographic aspect concerning the plastic deformation localization at the surface of polycrystals. However, this effect fades quickly when depth increases and becomes almost nil under the first layer of surface grains.

Finally, another three-dimensional model, both periodic and accounting for the free surface effect, called semi-periodic model has been implemented to eliminate boundary condition effects and to fully exploit the results of calculations. This method also brings new perspectives for the development of a new mean fields model dedicated to the behavior of surface of polycrystals.

Keywords: polycrystalline aggregates, crystal plasticity, finite element analysis, fatigue, localization, steel

